



HAL
open science

Modélisation des mécanismes de fragmentation du combustible UO₂ en situation de Perte de Réfrigérant Primaire (APRP)

Julien Bonnet

► **To cite this version:**

Julien Bonnet. Modélisation des mécanismes de fragmentation du combustible UO₂ en situation de Perte de Réfrigérant Primaire (APRP). Mécanique des matériaux [physics.class-ph]. Université Montpellier, 2021. Français. NNT: 2021MONT063 . tel-03953919

HAL Id: tel-03953919

<https://theses.hal.science/tel-03953919>

Submitted on 24 Jan 2023

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.

THÈSE POUR OBTENIR LE GRADE DE DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE MONTPELLIER

En Mécanique et Génie Civil

École doctorale Information, Structures, Systèmes

Unité de recherche UMR5508 (LMGC)

Modélisation des mécanismes de fragmentation du combustible UO_2 en situation de Perte de Réfrigérant Primaire (APRP)

Présentée par Julien BONNET
Décembre 2021

Sous la direction de Yann Monerie

Devant le jury composé de

Vincent LEGAT, Professeur, Université Catholique de Louvain

Olivier POULIQUEN, Directeur de recherche, Aix-Marseille Université-CNRS

Frédéric PERALES, Ingénieur-Chercheur, IRSN

Frédéric DUBOIS, Ingénieur de recherche, CNRS-LMGC

Riccardo ARTONI, Directeur de recherche, IFSTTAR

Yann MONERIE, Professeur, Université de Montpellier

Renaud MASSON, Ingénieur-Chercheur, CEA

Emmanuelle MULLER, Ingénieur-Chercheur, CEA

Rodrigue LARGENTON, Ingénieur-Chercheur, EDF R&D

Xavier HALLER, Ingénieur-Chercheur, FRAMATOME

Rapporteur

Rapporteur

Examineur

Examineur

Examineur

Directeur

Encadrant

Encadrant

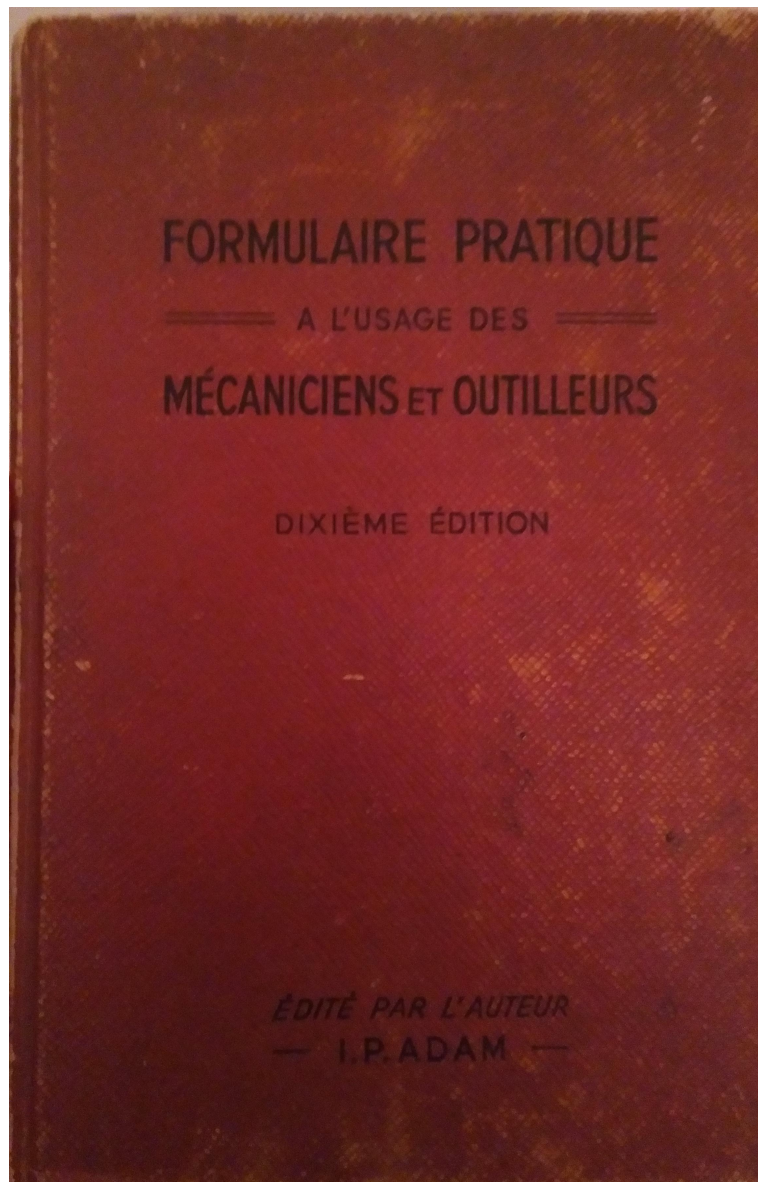
Membre invité

Membre invité



UNIVERSITÉ
DE MONTPELLIER

A mon grand père, qui adorait répondre à cette question : "Mais, comment ça marche?"



Remerciements

"Si tu veux construire un bateau, ne rassemble pas tes hommes et femmes pour leur donner des ordres, pour expliquer chaque détail, pour leur dire où trouver chaque chose... Si tu veux construire un bateau, fais naître dans le cœur de tes hommes et femmes le désir de la mer." - Saint-Exupéry

Je remercie l'ensemble des membres du jury pour le temps qu'ils ont consacré à l'étude de ce manuscrit et l'échange enrichissant durant la soutenance. Un grand merci à mon directeur de thèse Yann Monerie. J'ai été l'étudiant de Yann pendant près de sept ans, et je me doit de le remercier pour sa capacité à partager sa passion de la mécanique. Les échanges que nous avons eus durant la thèse m'ont énormément apporté et son soutien durant les études était plus que bienvenue. Je remercie Renaud Masson pour son encadrement durant cette thèse. Ces conseils ont toujours été justes et bienveillants malgré la grande exigence requise pour ces études. Je remercie Emmanuelle Muller pour la rigueur qu'elle m'a inculquée. Son encadrement a été une expérience fort enrichissante.

Un grand merci aux personnes ayant contribué à l'élaboration des outils et des mesures indispensables pour ces travaux de thèse. A Antoine Boulorré et Laurence Noirot avec qui j'ai pu échanger sur la modélisation des gaz de fission avec CARACAS et MARGARET. A Jean Noirot pour les mesures post-irradiatoires présentés dans le manuscrit. A Vincent Legat, Jonathan Lambrecht et Matthieu Constant pour leur aide sur l'utilisation de MIGFLOW. Et enfin à Frédéric Dubois et Rémy Mozul pour leurs aides précieuses, les développements réalisés dans LMGC90 et leurs soutiens. Merci à tous pour votre temps et vos contributions. Cette thèse a été une expérience exceptionnelle et c'est en grande partie, car j'ai eu la chance de pouvoir de collaborer avec des chercheurs et chercheuses de différents horizons.

Je remercie l'ensemble des membres du SESC et du LMGC avec qui ce fut un plaisir de travailler au jour le jour. Merci à Jérôme Julien qui m'a beaucoup aidé à m'intégrer à mon arrivée au CEA, à Fabienne Delage et Arnaud Monier qui m'ont soutenu malgré les difficultés dues à la crise sanitaire. Un grand merci à Bertrand Watrisse, pour sa gentillesse naturellement, mais également pour ses covoiturages qui m'ont bien dépanné.

Et surtout, je remercie mes proches dont la présence a été, et sera toujours, essentielle. Merci aux doctorants du LMGC, Jonaz, Vincent, Jeffrey, Adrien (notamment pour ses explications sur l'utilisation de NEPER), Samuel, Félix, Trung, Manuel, Luiza, David et Noé Brice. Merci aux doctorants et collègues du CEA, Johanes, Daria, Jules, Akram, Vincent, Didier, Cyril, Paul, Plamen, Allan, Lilia, Veronica et Martin. Merci à mes amis, le temps

passé avec vous a été un grand bol d'air frais durant cette période qui n'a pas toujours été facile, Benjamin, Raphael, Marie, Alban, Lalou, (mon ami) Pascal, Lucas, Mathilde, Pierre, Yann (Thibault), Jean-mi. Merci à ma famille qui a toujours été là pour me soutenir. Merci à Julie pour m'avoir supporté pendant tout ce temps (et merci d'exister).

Table des matières

Nomenclature et notations	xii
Glossaire	xiv
Introduction générale	1
1 Étude de l'influence des gaz de fission sur la décohésion intergranulaire	5
1.1 Comportement du combustible UO ₂ en irradiation de base	7
1.1.1 Évolution géométrique et microstructurale du combustible en irradiation de base	7
1.1.2 Comportement des gaz de fission	11
1.1.3 Conclusion	16
1.2 Comportement du combustible en situation d'Accident de Perte de Réfrigérant Primaire	16
1.2.1 Enseignement des campagnes expérimentales visant à étudier le comportement du combustible en APRP	16
1.2.2 Modélisation du comportement du combustible en irradiation de base et en situation accidentelle	18
1.3 Positionnement des équations d'état par rapport aux données existantes dans la littérature	26
1.3.1 Contexte	26
1.3.2 Définition des équations d'état retenues	26
1.3.3 Présentation des mesures sur combustibles irradiés	33
1.3.4 Quantification des bornes de la pression	39
1.3.5 Conclusions	45
1.4 Estimation de la pression dans les bulles de gaz de fission sur la base des données de simulation et des résultats des examens post-irradiatoires	47
1.4.1 Mesures expérimentales	47
1.4.2 Comparaison calcul-mesure de l'état du crayon combustible fort taux à l'issue de l'irradiation de base	63
1.4.3 Conclusions	78
1.5 Estimation de la contrainte de sur-traction des différentes populations de bulles	85

1.5.1	Estimation du coefficient de Biot avec prise en compte de la forme non-sphérique des bulles	86
1.5.2	Estimation des sur-contraintes de traction des bulles	91
1.5.3	Conclusions et perspectives	94
1.6	Conclusion du chapitre	97
2	Modélisation de la fragmentation du combustible par une approche couplant la méthode des éléments discrets et les modèles de zones cohésives	103
2.1	Modélisation de la fissuration fragile d'un milieu (zones cohésives)	104
2.1.1	Description d'un milieu élastique linéaire en présence d'un défaut	105
2.1.2	Les zones cohésives comme modèle d'endommagement surfacique	106
2.1.3	Description du comportement des milieux granulaires	112
2.1.4	Description de la fragmentation d'un milieu continu par une approche discrète	113
2.2	Étude paramétrique de la modélisation du comportement à rupture du combustible par la méthode DEM-CZM	120
2.2.1	Définition du modèle DEM-CZM retenu pour modéliser le comportement à rupture du combustible	121
2.2.2	Définition du domaine paramétrique de l'étude	123
2.2.3	Étude paramétrique du modèle DEM-CZM à partir des simulations de recuit thermique	128
2.3	Proposition d'un critère à rupture du combustible sur la base des résultats de l'analyse paramétrique	138
2.3.1	Définition du critère	138
2.3.2	Illustration du critère dans le cadre de l'identification de la pression de confinement à rupture	141
2.4	Conclusion et perspectives	145
3	Étude de la fragmentation et de la relocalisation du combustible lors de la dépressurisation du crayon	149
3.1	État de l'art de l'étude du comportement du combustible en situation d'APRP par la méthode DEM	151
3.1.1	Étude de la relocalisation du combustible en l'absence de fluide par la DEM	151
3.1.2	Étude du comportement du combustible comme un milieu granulaire immergé	154
3.2	Modélisation de la fragmentation du combustible sous l'effet de la dépressurisation du crayon	160
3.3	Modélisation de l'écoulement par une approche de type fluide non-résolu	166
3.3.1	Présentation de la modélisation de type fluide non-résolu	167
3.3.2	Présentation de la méthode de couplage existante sur des corps sphériques	168
3.3.3	Implémentation d'une interface numérique permettant d'adapter le couplage fluide-granulats au cas de corps polyédriques	171
3.4	Étude de l'influence de la taille de la brèche sur l'éjection du combustible	176
3.4.1	Prise en compte de la turbulence par un modèle de viscosité de turbulence	176

3.4.2	Modélisation de la relocalisation et de l'éjection des fragments par le biais du couplage fluide-granulats adapté aux corps polyédriques . . .	178
3.5	Conclusions et perspectives	187
Conclusion générale		189
Annexes		195
A	Annexes relatives au chapitre 1	197
B	Annexes relatives au modèle de zones cohésives	205
C	Annexes relatives au milieu granulaire	209
Bibliographie		219

Table des figures

1.1	Image de la pastille de combustible et de la gaine [136].	7
1.2	Schéma d'un crayon combustible UO_2 utilisé dans les REPs [34].	7
1.3	Exemple de profil radial de température dans la pastille en irradiation de base.	8
1.4	Schématisation de la pastille et de la gaine (à gauche), de la mise en diablo (au milieu) et de la fermeture du jeu pastille-gaine (à droite). Figure tirée de [31].	9
1.5	Évolution du relâchement des gaz de fission en % de la création en fonction du taux de combustion en MW_j/t_u , d'après [16].	10
1.6	Microscopie de la périphérie d'un combustible irradié ($73 GW_j/t_u$) mettant en évidence la zone de rim (à gauche) [100].	11
1.7	Microscopie révélant les bulles du combustible dans le grain et au joint de grains [34].	12
1.8	Macrographie d'une coupe axiale d'un crayon combustible irradié après attaque chimique révélant la zone de précipitation au centre [8].	13
1.9	Illustration schématique d'un grain et des bulles formées sur la surface du joint de grains (a) et au joint triple (b), d'après [131].	14
1.10	Évolution de la porosité (en %) en fonction du rayon pastille (rayon adimensionné par le rayon de la pastille) pour différents taux de combustion d'après [129].	15
1.11	Vue 3D d'une bulle de forme non-sphérique provenant des observations MEB-FIB de la zone centrale d'un combustible irradié à $73 GW_j/t_u$ [103].	15
1.12	Etat de fragmentation du combustible à l'issue des différents essais mettant en évidence l'influence du taux de combustion [128].	18
1.13	Observation au MEB de la zone centrale d'un combustible irradié à $72 GW_j/t_u$ après un recuit permettant de visualiser une décohésion intergranulaire [112].	19
1.14	Seuil de fragmentation (courbe rouge) défini par la température et le taux de combustion local d'après [133]. Les points expérimentaux représentent les cas où le combustible s'est complètement pulvérisé (ronds rouges), partiellement fragmenté (triangle bleu) ou est resté intègre (croix noires). Tirée de [70].	20
1.15	Représentation schématique des bulles lenticulaires au joint de grains. Tirée de [69].	22

1.16	Pression (en <i>MPa</i>) en fonction du volume molaire (en $cm^3.mol^{-1}$) à 323 <i>K</i> (graduation logarithmique de base 10 en ordonnée et linéaire en abscisse). . .	30
1.17	Pression (en <i>MPa</i>) en fonction du volume molaire (en $cm^3.mol^{-1}$) à 423 <i>K</i> (graduation logarithmique de base 10 en ordonnée et linéaire en abscisse). . .	30
1.18	Pression calculée (en <i>MPa</i>) en fonction du volume molaire (en $cm^3.mol^{-1}$) à 1473 <i>K</i> (graduation logarithmique de base 10 en ordonnée et linéaire en abscisse).	31
1.19	Évolution log-log de la pression (en <i>MPa</i>) mesurée dans les cavités en fonction de leur rayon (en <i>nm</i>) à 303 <i>K</i>	38
1.20	Évolution log-log de la pression (en <i>MPa</i>) mesurée dans les cavités en fonction de leur rayon (en <i>nm</i>) à 1473 <i>K</i>	38
1.21	Présentation des domaines de température et de volumes molaires pour lesquels la pression est évaluée.	39
1.22	Pression (en <i>MPa</i>) en fonction de la température (en <i>K</i>) à 53.9 $cm^3.mol^{-1}$	44
1.23	Pression (en <i>MPa</i>) en fonction de la température (en <i>K</i>) à 25 $cm^3.mol^{-1}$	44
1.24	Macrographie de la coupe radiale du combustible irradié.	50
1.25	Évolution de la porosité (en %) en fonction du rayon pastille (en <i>mm</i>) pour différentes classes de tailles.	52
1.26	Image 2D MEB réalisées à 0 <i>mm</i>	53
1.27	Distribution en taille de la porosité de moins de 3 μm (en DCE) à différentes positions dans la pastille.	54
1.28	Évolution du signal de mesure SIMS du xénon 132 (en nombre coups <i>cps</i>) au cours du temps (en <i>s</i>) sur un échantillon UO_2 irradié à fort taux de combustion, d'après [22].	55
1.29	Densité de bulles (en <i>bulles.mm⁻³</i>) d'après les mesures MEB-FIB et SIMS en fonction du rayon pastille (<i>mm</i>).	56
1.30	Évolution des quantités de xénon mesurées au SIMS et à la microsonde (en % massique) en fonction du rayon pastille (en <i>mm</i>).	57
1.31	Volume molaire (en $m^3.mol^{-1}$) en fonction du rayon pastille (en <i>mm</i>).	58
1.32	Volume molaire (en $m^3.mol^{-1}$) en fonction du rayon pastille (en <i>mm</i>) (encadré figure 1.31).	58
1.33	Image 3D des bulles intragranulaires de forme sphéroïdale aplatie d'après les observations MEB-FIB réalisées à 0 <i>mm</i>	59
1.34	Image 3D des bulles intragranulaires de forme complexe d'après les observations MEB-FIB réalisées à 1.2 <i>mm</i>	59
1.35	Image 3D des bulles intragranulaires aplaties d'après les observations MEB-FIB réalisées à 3 <i>mm</i>	60
1.36	Image 3D des bulles intergranulaires aplaties d'après les observations MEB-FIB réalisées à 3 <i>mm</i>	61
1.37	Image 3D des bulles intergranulaires de rim d'après les observations MEB-FIB réalisées à 4.14 <i>mm</i>	61
1.38	Image 3D d'un volume d'après les observations MEB-FIB réalisées à 1.2 <i>mm</i>	62
1.39	Comparaison calcul-mesure de la profilométrie à l'issue de l'irradiation de base donnant le diamètre externe de la gaine (en <i>mm</i>) en fonction de la position axiale par rapport au bas de la colonne fissile du crayon (en <i>mm</i>).	65
1.40	Répartition de la porosité fine (en %) calculée et mesurée en fonction du rayon pastille (en <i>mm</i>).	66

1.41	Distribution en taille de la porosité de moins de $3 \mu m$ mesurée (en DCE) et calculée au centre de la pastille ($0 mm$).	67
1.42	Diamètre des bulles calculé (en mm) en fonction du rayon pastille (en mm).	68
1.43	Répartition de la porosité (en %) calculée et mesurée des bulles intragranulaires en fonction du rayon pastille (en mm).	69
1.44	Répartition de la porosité (en %) calculée et mesurée des bulles intergranulaires en fonction du rayon pastille (en mm).	69
1.45	Inventaire gaz (en $\mu mol.mm^{-3}$) en fonction du rayon (en mm) pour la tranche 11 du crayon ($1288 - 1417 mm/bcf$).	71
1.46	Quantité de xénon retenu et créé (en % massique) en fonction du rayon (en mm).	72
1.47	Quantité de xénon mesuré et calculé à la microsonde (en % massique) en fonction du rayon (en mm).	74
1.48	Quantité de xénon mesuré dans le ligne de base et de l'inventaire gaz calcul (en % massique) en fonction du rayon (en mm).	75
1.49	Quantité de xénon (en % massique) calculée et mesurée en fonction du rayon (en mm) dans les bulles submicrométriques.	75
1.50	Volume molaire (en $cm^3.mol^{-1}$) évalué à partir de la mesure et du calcul en fonction du rayon dans la pastille (en mm) (Zoom de la figure 1.51).	77
1.51	Estimations et calculs du volume molaire inter-intra (en $cm^3.mol^{-1}$) en fonction du rayon pastille (en mm).	80
1.52	Estimations et calculs de la pression inter-intra (en MPa) en fonction du rayon pastille (en mm) en zone centrale.	81
1.53	Estimations et calculs de la pression inter intra (en MPa) en fonction du rayon pastille (en mm) en périphérie.	81
1.54	Évolution du coefficient de Biot en fonction du facteur de forme pour une porosité fixée de 1.5 %.	87
1.55	Evolution du coefficient de Biot dans la pastille en considérant des bulles intragranulaires sphériques.	88
1.56	Evolution du coefficient de Biot dans la pastille en considérant des bulles intragranulaires sphéroïdales.	88
1.57	Evolution du coefficient de Biot dans la pastille en considérant des bulles intergranulaires sphériques.	89
1.58	Evolution du coefficient de Biot dans la pastille en considérant des bulles intergranulaires sphéroïdales.	89
1.59	Intensité de la sur-contrainte de traction des bulles (en MPa) à $1473 K$ en fonction du rayon pastille (en mm).	92
2.1	Schéma d'une fissure et des différentes zones associées (en 2D).	107
2.2	Courbe de l'évolution de la contrainte cohésive normale en fonction du saut de déplacement normal.	108
2.3	Représentation de la droite obtenue par l'équation (2.50) avec les graphes des relations de contact (à gauche) et de frottement (à droite) [84].	117
2.4	Représentation de la pastille définie par une collection de granulats polyédriques.	122
2.5	Représentation des chargements et des conditions limites appliquées à la pastille.	123
2.6	Évolution de la fraction surfacique réduite de bulles (sans unité) en fonction du rayon pastille (en mm).	126

2.7	Évolution de la sur-pression des bulles intergranulaires (en MPa) à $1473 K$ en fonction du rayon pastille (en mm).	126
2.8	Illustration des différentes zones en fonction de la taille des granulats (vue du dessus de la pastille).	127
2.9	Représentation de l'échantillon de combustible non-endommagée de face (à gauche) et de dessus (au centre) et de l'échantillon fragmenté (à droite) dans le modèle DEM-CZM.	129
2.10	Représentation des résultats des simulations des recuits à $P_{conf} = 10 MPa$ réalisées avec les bornes des paramètres.	130
2.11	Graphes représentant les résultats de simulation des recuits thermiques à $P_{conf} = 0.1 MPa$ (a) et $P_{conf} = 10 MPa$ (b) avec une sur-pression des bulles intergranulaires de $52 MPa$ représentative de la zone centrale à $1073 K$. 132	
2.12	Graphes représentant les résultats de simulation des recuits thermiques à $P_{conf} = 0.1 MPa$ (a) et $P_{conf} = 10 MPa$ (b) avec une sur-pression des bulles intergranulaires de $77 MPa$ représentative de la zone centrale à $1473 K$. 133	
2.13	Graphes représentant les résultats de simulation des recuits thermiques à $P_{conf} = 10 MPa$ avec une sur-pression des bulles intergranulaires de $164 MPa$ (à gauche) $242 MPa$ (à droite) représentative de la zone intermédiaire à $1073 K$ (à gauche) $1473 K$ (à droite).	134
2.14	Graphes représentant les résultats de simulation des recuits thermiques réalisés à $P_{conf} = 10 MPa$ avec une sur-pression des bulles intergranulaires de $1330 MPa$ représentative de la périphérie de la zone intermédiaire à $1473 K$. 136	
2.15	Représentation d'une cavité intergranulaire dans un milieu infini soumise à une contrainte de traction.	139
2.16	Graphes des résultats des différentes simulations de recuits en fonction du facteur de concentration de contrainte.	140
2.17	Évolution de l'état de fragmentation de la pastille (intacte ou fragmentée) en fonction du pseudo-facteur de concentration de contrainte et de la pression de confinement.	142
2.18	Évolution du pseudo-facteur de concentration de contrainte en fonction de la pression de confinement.	143
3.1	Illustration du crayon durant la dépressurisation du crayon.	150
3.2	Schéma de l'empilement de sphères 2D représentant le combustible fragmenté (disques gris), les sphères noires représentent la gaine (parois latérales) ou les fragments ancrés à la gaine (parois basses) [84].	152
3.3	Courbes d'évolution du taux de relocalisation α_{rel} en fonction du rapport entre le diamètre moyen des granulats et le rayon interne de la gaine d'après l'équation (3.4) [84].	153
3.4	Schéma d'un milieu granulaire subissant un cisaillement plan, tiré de [4]. . .	155
3.5	Schéma de la situation d'éjection pour laquelle la pression dans le crayon évolue librement [2].	159
3.6	Schéma de la situation d'éjection pour laquelle la pression en haut et bas de la colonne de combustible est fixée [2].	159
3.7	Évolution des profils axiaux de pression de confinement à différents instants (en noir à t_i et en rouge vif à t_f) pour différentes valeurs de n	161

3.8	Représentation des efforts appliqués par la pression de confinement à différents instants de la dépressurisation (à t_i (a), à $t_f/2$ (b) et à t_f (c), voir figure 3.7 au centre) pour $n = 1$	161
3.9	Évolution de la fraction surfacique de zones cohésives rompues suite au chargement en fonction du temps (en s).	163
3.10	Évolution axiale de la pression de confinement critique (à $t = t_{crit}$) correspondant (en MPa) pour $n = 0.5$	163
3.11	Profil de pression de confinement à rupture pour les différentes simulations.	165
3.12	Schéma du maillage éléments finis et des granulats.	166
3.13	Illustration du maillage éléments finis en 3D dont certaines mailles sont supprimées afin de visualiser les granulats.	167
3.14	Illustration d'un empilement de sphères superposé aux fragments élémentaires.	172
3.15	Algorithme de couplage fluide-granulats adapté aux corps polyédriques	175
3.16	Illustration de la pastille avant et après réduction de la taille des fragments.	178
3.17	Illustration de la modélisation de l'éjection du combustible fragmenté.	179
3.18	Évolution du champ de pression dans le domaine fluide.	180
3.19	Vue en coupe du crayon illustrant les lignes de courant du fluide.	181
3.20	Vue en coupe du crayon illustrant les efforts de traînée engendrés sur trois granulats (en rouge) à différentes positions.	181
3.21	Illustration du blocage des fragments au niveau du ballon (a et b) et de la brèche (c et d).	182
3.22	Illustration des chaînes de contact dans le cas de la relocalisation (à gauche) et de l'éjection (à droite).	183
3.23	Volume de combustible relocalisé adimensionné par le volume pastille en fonction de la taille de brèche adimensionnée.	184
3.24	Volume de combustible éjecté adimensionné par le volume relocalisé en fonction de la taille de brèche adimensionnée.	185
3.25	Volume de combustible éjecté adimensionné le volume de la pastille en fonction de la taille de brèche adimensionnée.	186
A.1	Pression calculée et mesurée (en MPa) en fonction de la température (en K) à $121 \text{ cm}^3.\text{mol}^{-1}$	197
A.2	Pression calculée et mesurée (en MPa) en fonction de la température (en K) à $143 \text{ cm}^3.\text{mol}^{-1}$	198
A.3	Évolution de la pression et des écarts entre les bornes (en MPa) en fonction du volume molaire (en $\text{cm}^3.\text{mol}^{-1}$) à 303 K , aux volumes molaires représentatifs des bulles submicrométriques. Zoom de la figure 1.16.	199
A.4	Évolution de la pression et des écarts entre les bornes (en MPa) en fonction du volume molaire (en $\text{cm}^3.\text{mol}^{-1}$) à 303 K , aux volumes molaires représentatifs des bulles nanométriques. Zoom de la figure 1.16.	200
A.5	Évolution de la pression et des écarts entre les bornes (en MPa) en fonction du volume molaire (en $\text{cm}^3.\text{mol}^{-1}$) à 1473 K , aux volumes molaires représentatifs des bulles submicrométriques. Zoom de la figure 1.18.	200
A.6	Évolution de la pression et des écarts entre les bornes (en MPa) en fonction du volume molaire (en $\text{cm}^3.\text{mol}^{-1}$) à 1473 K , aux volumes molaires représentatifs des bulles submicrométriques. Zoom de la figure 1.18.	201

C.1	Cercle de Mohr avec représentation du critère de Coulomb (3.10) (sans cohésion) dans le cas bidimensionnel.	212
C.2	Illustration des germes du pavage de Voronoï définissant les fragments élémentaires de la pastille.	216
C.3	Image d'un polyèdre présentant une petite arête (encerclée en rouge), empêchant la résolution de la dynamique de contact.	216
C.4	Evolution de la longueur de la plus petite des arêtes en fonction du nombre d'itération de l'algorithme de régularisation de géométrie.	217

Liste des tableaux

1.1	Résumé des intervalles sur lesquelles les mesures $P-V-T$ et les extrapolations sont réalisées.	29
1.2	Résumé des mesures des volumes molaires et des pressions dans les bulles de gaz de fission.	36
1.3	Résumé des mesures des volumes molaires et des pressions calculées à température ambiante en utilisant les équations d'état retenues par Cagna.	37
1.4	Résumé des pressions (évaluations et encadrements) à 303 K sur le domaine d'intérêt et aux volumes molaires mesurés expérimentalement.	42
1.5	Résumé des pressions (évaluations et encadrements) à 1473 K sur le domaine d'intérêt et aux volumes molaires mesurés expérimentalement.	43
1.6	Résultats des examens non-destructifs	49
1.7	Résultats des mesures de perçage.	49
1.8	Résultats des examens métallographiques et des microanalyses.	50
1.9	Facteurs de forme retenus pour les bulles intragranulaires et intergranulaires d'après les observations MEB-FIB.	62
1.10	Résumé des éléments de la simulation ALCYONE	64
1.11	Comparaison calcul-mesure des résultats intégraux du crayon fort taux.	65
1.12	Résumé des porosités calculées et mesurées et de leurs écarts.	70
1.13	Pourcentage de relâchement calculé des différentes zones du combustible dans la tranche 11 (située aux côtes axiales 1288 – 1417 mm/bcf du crayon).	73
1.14	Résumé de la comparaison calcul-mesure des quantités de gaz (en % massique).	76
1.15	Résumé des volumes molaires d'après la mesure et la simulation (en $cm^3.mol^{-1}$).	78
1.16	Résumé du calcul et des estimations du volume molaire (en $cm^3.mol^{-1}$).	80
1.17	Résumé des estimations et du calcul des pressions à 1473 K (en MPa).	82
1.18	Résumé des quantités relatives au chargement appliqué par les bulles intergranulaires à 1473 K	84
1.19	Encadrement des valeurs du coefficient de Biot en fonction des zones de la pastille pour différents cas.	91
1.20	Résumé des limites et perspectives liées au calcul et à l'estimation mixte de la sur-pression des bulles et au calcul du taux de recouvrement des bulles au joint de grains.	100

1.21	Résumé des limites et perspectives liées au calcul et à l'estimation mixte de la sur-contrainte de traction de l'ensemble des population de bulles.	101
2.1	Résumé des mesures du taux de restitution critique du combustible UO_2 . . .	125
2.2	Résumé des valeurs des paramètres retenues pour l'étude paramétrique du modèle DEM-CZM.	128
2.3	Résumé des paramètres d'entrées et des résultats des simulations des traitements thermique sur pastille entière à 1073 K	137
2.4	Résumé des calculs réalisés et à réaliser en zone intermédiaire.	146
3.1	Résumé des paramètres d'entrée des différents calculs.	164
3.2	Largeurs de brèche obtenues en fonction de la déformation du ballon.	184
A.1	Résumé des écarts des encadrements de la sur-contrainte de traction des bulles.	203

Nomenclature et notations

Nomenclature

- ALCYONE : Outil de Calcul Scientifique (OCS) intégré à la plateforme PLEIADES qui simule le comportement thermomécanique du crayon REP en situations normales, incidentelles et accidentelles.
- APRP : Accident de Perte de Réfrigérant Primaire.
- bcf : Bas colonne fissile.
- CARACAS : modèle dédié à la description du comportement des gaz de fission des combustibles REP.
- CEA : Commissariat à l’Energie Atomique et aux Energies Alternatives.
- CZM : Modèle de zones cohésives (Cohesive Zone Model en anglais).
- DCE : Diamètre circulaire équivalent.
- Décohésion : Fissuration localisée au joint de grains.
- DEM : Méthode des éléments discrets (Discrete Element Method en anglais).
- DSE : Diamètre sphérique équivalent.
- EBSD : Electron Back Scatter Diffraction en anglais.
- EDX : Energy Dispersive X-ray analysis.
- Fragmentation : Fissuration généralisée du combustible induite par la sur-pressurisation des gaz de fission et qui aboutit à la division du matériau en un ensemble de petit fragments (mili- voire micrométriques).
- Grain : monocristal d’UO₂
- Granulat : Grain élémentaire composant un milieu granulaire.
- IFA : Assemblage combustible instrumenté (Instrumented Fuel Assembly en anglais) utilisé dans le cadre des essais à Halden.
- Kr : Krypton.
- LMGC90 : Code de calcul de dynamique de contact.
- MEB : Microscope électronique à balayage.

- MEB-FIB : Microscope électronique à balayage avec faisceau d'ions focalisé.
- MERARG : Installation de traitement thermique visant à étudier le relâchement des produits de fission gazeux et la fragmentation du combustible en situation de transitoire thermique.
- MET : Microscope électronique à transmission.
- MEXIICO : Moyen Expérimental d'insertion d'Importantes Contraintes
- Microsonde : ou microsonde Castaing (EPMA electron probe microanalyser en anglais).
- MIGFLOW : Code de calcul de modélisation d'écoulement fluide-grains de type "non-résolu".
- MOX : Mélange d'OXyde, combustible nucléaire UPuO₂.
- NSCD : Non-Smooth Contact Dynamic
- Plenum : Volume aménagé aux extrémités du crayon pour accommoder le relâchement des gaz de fission.
- $P - V - T$ (mesure) : Mesure de pression d'un gaz réalisée à une température et un volume donnés.
- REP : Réacteur à eau pressurisée.
- RCCM : Modèle de zone cohésive frottante (Raous, Cangémi, Cocu et Monerie).
- RIA : Accident de réactivité (Ractivity Insertion Accident en anglais).
- Rim : Zone restructurée de la périphérie du combustible (High Burnup Structure HBS en anglais).
- SAX : Spectrométrie d'absorption des rayons X.
- SCIP : Programme international conduit à Stusvik visant à étudier le comportement du combustible en situation d'APRP.
- SIMS : Sonde ionique (Secondary Ion Mass Spectrometer en anglais).
- UO₂ : Dioxyde d'uranium.
- Xe : Xénon.
- XRF : Mesure par fluorescence au rayon X (X-Ray Fluorescence en anglais).

Notations

- \vec{A} : Vecteur A .
- $\vec{A}^{(n)}$: Tenseur A d'ordre n .
- $\bar{\bar{A}}$: Tenseur A d'ordre 2.
- $\langle A \rangle$: Moyenne de A .
- $\bar{\bar{A}} : \bar{\bar{B}}$: Produit contracté des tenseurs $\bar{\bar{A}}$ et $\bar{\bar{B}}$.
- $\vec{A} \otimes \vec{B}$: Produit tensoriel de \vec{A} et \vec{B} .
- $\vec{A} \cdot \vec{B}$: Produit scalaire de \vec{A} et \vec{B} .
- $\vec{A} \wedge \vec{B}$: Produit vectoriel de \vec{A} et \vec{B} .

Glossaire

Symbole(s)	Signification(s)
α	Ratio cisaillement / effort de traction de la contrainte cohésive effective
$\alpha^{Xe, Kr}$	Facteur correctif permettant de prendre en compte le fait que seul le xénon est détecté par la mesure alors que le calcul prend en compte la présence du krypton
α_c	Paramètre intervenant dans le modèle de Castañeda et Willis [29] pour déterminer le coefficient de compressibilité d'un milieu composé de fissures
α_v	Constante de pondération qui traduit le poids des effets visqueux et inertiels
α_{DP}	Coefficient de pondération entre la contrainte hydrostatique et la contrainte équivalente intervenant dans le critère de Salvo [124]
α_{fs}	Constante positive caractérisant la vitesse de décohésion dans ALCYONE
$\alpha_{rel}^+, \alpha_{rel}^-$	Taux de relocalisation : générique, borne haute, borne basse
β	Intensité de l'adhésion
$\beta_{\mu_{sonde}}^i$	Coefficient d'atténuation de la mesure micro-sonde associé à la $i^{\text{ème}}$ population de gaz
Γ	Contour fermé
γ	Énergie de surface
γ_v, γ_z	Constante intervenant dans la loi : d'Amarsid [2] de Martin [84] donnant le nombre moyen de grains s'écoulant entre deux blocages lors de la relocalisation

Symbole(s)	Signification(s)
γ_{mesh}	Paramètre lié au maillage
δ	Saut de déplacement effectif
δv^α	Fluctuation de la vitesse du corps α
$\delta^{Dirac} _{\vec{x}}$	Fonction de Dirac évaluée à la position \vec{x}
$\delta_c, \delta_N^c, \delta_t^c$	Saut de déplacement cohésif : effectif critique, de création d'une surface (mode normal), tangent critique
$\delta_e, \delta_e^N, \delta_e^T$	Saut de déplacement d'amorçage de l'endommagement : Générique, normale, tangent
$\bar{\epsilon}$	Tenseur des déformations
$\epsilon_t, \dot{\epsilon}_t$	Cisaillement (en 2D) : déformation, vitesse
$\vec{\zeta}$	Vecteur quelconque de \mathbb{R}^n
ζ	Constante de pondération des solutions (entre 0 et 1)
$\eta, \eta_f, \eta'_f, \eta_t, \eta_{feq}$	Viscosités : effective du milieu granulaire, du fluide, superposition de la viscosité fluide et de turbulence, de turbulence, du fluide équivalent
$\theta, \theta_b, \theta_{Coul}$	Position angulaire, angle dihédral des bulles lenticulaires, angle de frottement interne
κ	Perméabilité
$\bar{\mu}, \mu_2, \mu_f, \mu_s, \mu_{eff}, \mu_{eff}^{min}, \mu_v$	Coefficients de frottement : post-rupture, effectif collisionnel, sec, effectif statique, effectif interne, effectif minimal (lorsque $I_g \rightarrow 0$), effectif lorsque $I_v \gg I_{v0}$

Symbole(s)	Signification(s)
μ_e	Module de cisaillement de la matrice du matériau
ν	Coefficient de Poisson
$\langle \rho \rangle, \rho_f, \rho_p, \rho_{UO_2}$	Densités : moyenne du milieu, du fluide, des grains, géométrique initiale de l'UO ₂
$\bar{\sigma}, \bar{\sigma}^d, \langle \bar{\sigma} \rangle, \bar{\sigma}_t$	Tenseurs des contraintes : générique, déviatoriques, moyennes, régnant au niveau des bulles intergranulaires
σ	Fonction à la dimension d'une contrainte dépendant linéairement du chargement au loin d'une fissure
$\Delta\sigma_B$	Incertitude liée au calcul de la sur-contrainte engendrée par la pressurisation des bulles
$\sigma_B, \sigma_B^{intra}, \sigma_B^{inter}, \sigma_B^{tot}$	Sur-contraintes de traction engendrées par la pressurisation : des bulles, des bulles intra, des bulles inter, de l'ensemble des populations de bulles
σ_b	Contrainte de traction au joint de grains représentant le chargement appliqué par les bulles intergranulaires dans le critère de décohésion d'ALCYONE
σ_c	Contrainte à rupture du joint de grains du combustible irradié
$\sigma_H, \sigma_M, \sigma_{AL}, \sigma_{eq}, \sigma_t$	Contraintes : hydrostatique, de chargement dans le critère de Salvo, de chargement total dans le critère de décohésion d'ALCYONE, équivalente de von Mises, de traction nominale
$\sigma_I, \sigma_{II}, \sigma_{III}$	Contraintes principales $\sigma_I > \sigma_{II} > \sigma_{III}$
σ_{HS}	Paramètre intervenant dans l'expression du diamètre de sphères dures (homogène à une distance)
$\phi_f, \phi_f^{n_i}$	Fraction volumique du fluide (porosité dans le cas complètement immergé) : en tout point de l'espace, au nœud n_i du maillage
χ, \mathcal{X}	Quantité scalaire : quelconque, moyenne
χ_t	Facteur de correction relatif au gradient de pression dans un milieu poreux pour un écoulement turbulent
$\bar{\chi}'$	Collection de variables internes de cohésion
Ψ_H, Ψ_H^{sep}	Densité d'énergie libre de cohésion : valeur, seuil à la séparation des surfaces
$\psi, \psi', \psi_c, \psi_{max}, \psi_{pr}, \psi_{sp}$	Compacité : du milieu granulaire, de référence dans le modèle de Amarsid [2], critique, au repos (lorsque $I_g \rightarrow 0$), des polyèdres, des sphères

Symbole(s)	Signification(s)
ψ_{fiss}	Paramètre relatif à la géométrie du problème (cas d'une fissure)
$\Omega, \Omega_f, \Omega_s, \Omega_V, \Omega_{n_i}$	Domaine : sur lequel la fonction g^m et g^{mf} sont évaluées, de fluide, définissant le pavage de Voronoï (i.e. le cylindre définissant la pastille de combustible), représentatif du milieu granulaire, attaché au nœud n_i du maillage
$\vec{\omega}, \vec{\omega}_\alpha, \vec{\omega}_{free}$	Concaténation des vecteurs de vitesse de rotation : vitesse de rotation, vitesse de rotation évaluée au grain α , vitesse de rotation libre
A_k	Constante dépendant des coefficients du viriel
$A \mathcal{R}_\Omega \rightarrow \mathcal{R}_\alpha$	Matrice de passage du référentiel absolu \mathcal{R}_Ω au référentiel attaché au corps α \mathcal{R}_α
a	Diamètre des cavités sphéroïdales (longueur du grand axe de l'ellipse en 2D)
a_a, a_{dc}	Constante intervenant dans l'expression de la compacité dans le modèle : de Amarsid [2], de da Cruz et al. [36]
$\vec{a}_j, \vec{b}_j, \vec{c}_j$	Sommets du $i^{\text{ème}}$ triangle discrétisant une des faces du polyèdre
a_{RK}, a_S, a_{vW}	Constante caractérisant les forces attractives pour l'équation d'état : de Redlich et Kwong, de Soave, de van der Waals
$B, \Delta B, \Delta B^{calc-measure}, B_{max}, B_{min}, B^{inter}, B^{intra}$	Coefficient de Biot : générique, écart entre les bornes (encadrement de la forme des cavités), écart calcul-mesure, valeur maximale, valeur minimale, des bulles intergranulaires, des bulles intragranulaires
B'_k	$k^{\text{ième}}$ Coefficient du viriel
Bu	Taux de combustion
b	Épaisseur des cavités sphéroïdales (longueur du petit axe de l'ellipse en 2D)
b_b	Intensité du vecteur de Burgers
b_p	Exposant de loi de pression post-rupture
b_{dc}	Constante dépendante du coefficient de frottement entre grains (modèle de da Cruz)
b_{RK}, b_{vW}	Covolume molaire : de Redlich et Kwong, de van der Waals
$\bar{C}^{(4)}$	Tenseur des modules d'élasticité du matériau
$C_{massique}^{Xe}, C_{mol}^{Xe}, C_{sonde-calc}^{Xe}, C_{inter}^{Xe}, C_{prec}^{Xe}$	Concentration en xénon : massique par unité de masse de combustible, molaire par unité de volume de combustible, massique calculée en considérant l'atténuation de la mesure microsonde, molaire dans les bulles intergranulaire, molaire dans les bulles de précipitation

Symbole(s)	Signification(s)
C_α	Domaine définissant le polyèdre α
C_σ	Pseudo-facteur de concentration de contrainte
C_B	Constante déterminée expérimentalement dans le modèle de Beverloo
C_N, C_T	Raideur de la zone cohésive : normale, tangente
C_n	Nombre de particules par unité de volume normalisée
C_s	Coefficient de compression
C_v	Constante homogène à la racine carrée d'une longueur par unité de temps
$\vec{c}_\alpha^{bary}, \vec{c}_f$	Position : du barycentre du polyèdre α , du centre de la $f^{\text{ième}}$ surface du polyèdre
$D_b, D_b^{inter}, \langle D_b \rangle$	Diamètre des bulles : quelconques, intergranulaires, moyen des bulles
$d, \langle d \rangle, \langle \bar{d} \rangle, \langle d_{pr} \rangle, \langle \bar{d}_{pr} \rangle$	Diamètre des grains : valeur, valeur moyenne, valeur moyenne adimensionnée par le rayon de la gaine, valeur moyenne pour les sphères, valeur moyenne pour les polyèdres
d_o, d_s	Diamètre : d'orifice du silo, du silo contenant le milieu granulaire (diamètre gaine)
d_{HS}	Diamètre de sphères dures
dl	Variation infinitésimale de la longueur de la fissure
dS	Élément de surface
$dt, dt', d\vec{v}$	Mesure : de Lebesgue, réelle positive pour laquelle $d\vec{v}$ possède une densité, différentielle de \vec{v}
dV_y	Élément de volume avoisinant la position \vec{y}
E	Module d'Young
\vec{e}_i	$i^{\text{ème}}$ Vecteur de base avec $i \in \{1, 2, 3\}$
$\vec{e}_I, \vec{e}_{II}, \vec{e}_{III}$	Vecteurs propres du tenseur des contraintes $\bar{\sigma}$
$\vec{F}^{i_c}, \vec{F}^{i_c}$	Concaténation des vecteurs de forces et de moments exprimés dans le repère du contact i_c : dus au contact, dus au contact et translatée de la force et des moments de cohésion
$\vec{F}_{conf}, \vec{F}_{vol}$	Vecteur de force : de confinement, volumique

Symbole(s)	Signification(s)
F_{ec}	Facteur de compressibilité lorsque le principe des états correspondant est respecté
$\vec{F}_{ext}, \vec{F}_{ext,\alpha}$	Vecteur des efforts extérieurs : concaténé sur l'ensemble des grains, appliqué au grain α
$\vec{F}_{f,\gamma}, \vec{f}_{drag,\gamma}$	Vecteur de force traînée appliqué au grain γ : totale, traînée de vitesse
$\vec{f}, \vec{f}_\alpha, \vec{f}^{i_c}, \vec{f}^{\alpha\beta}$	Vecteur de la résultante de contact : concaténé sur l'ensemble des grains, appliqué au grain α , représentant la contribution du contact i_c à la résultante des efforts de contact \vec{f} , au contact entre le corps α et β
$\vec{f}_\gamma, \vec{f}_\gamma$	Force de contact appliquée à la sphère γ : générique, pseudo-force
$f(\beta), f_{ij}^B, f_{AL}, f_{CTP}, f_{fiss}, f_{ij}^{\alpha}$	Fonction : décroissante de l'adhésion et décrivant l'évolution du coefficient de frottement de la zone cohésive, intervenant dans la relation de Bagnold, de pondération des pressions dans l'équation d'état d'ALCYONE, sans dimension qui dépend du taux de recouvrement (critère de Chakraborty et al. [30]), dépendant de la longueur de la fissure et de la géométrie du problème, dépendant de la géométrie de la fissure et du chargement appliqué
f_p	Seuil de plasticité du critère de Mohr-Coulomb
$\Delta f, \Delta f^{rel}, \langle \Delta f^{rel} \rangle$	Écart calcul-mesure : absolu, valeur relative, valeur relative moyenne radiale
$f_s, \Delta f_s^*, f_s^*, f_s'$	Fraction surfacique : de bulles au joint de grains, de zone cohésive rompue par le chargement, de zones cohésives initialement rompues et pressurisées / de bulles fermées aux joints de grains, de porosité (dans la matrice du combustible)
$f_v, f_v^{inter}, f_v^{prec}, f_v^{tot}$	Fraction volumique (porosité) : totale, des bulles intergranulaires, des bulles intragranulaires de précipitation de la zone centrale, fine totale
f_{calc}, f_{mes}	Variable dont la valeur est : calculée, mesurée
G_α	Germe du polyèdre α
G, G_c, G_c^N, G_c^T	Taux de restitution de l'énergie élastique : valeur, valeur critique, valeur critique en mode normale pur, valeur critique en mode tangent pur
$\vec{GM}_\gamma _{\mathcal{R}_\Omega}, \vec{GM}_\gamma^{ini} _{\mathcal{R}_\Omega}$	Vecteur bras de levier entre le barycentre de la sphère γ et du fragment associé exprimé dans le référentiel \mathcal{R}_Ω : au temps courant, au temps initial du calcul

Symbole(s)	Signification(s)
g, \vec{g}	Gravité : intensité, vecteur
g^m, g^{mf}	Fonction de pondération permettant de calculer la valeur moyenne des variables relatives au milieu granulaire : sec, immergé
g_β	Fonction d'adoucissement de la zone cohésive
$H(x)$	Fonction de Heaviside (vaut 1 pour $x > 0$ et 0 pour $x < 0$)
$\mathbb{H}^{i_c}, \mathbb{H}^{i_c, T}$	Matrice de passage permettant d'exprimer les vitesses et rotation du repère local du contact i_c au repère global : matrice, transposée
h, h_{ballon}	Hauteur : de la pastille, du ballon
\bar{I}	Tenseur identité d'ordre deux
I_0, I_{v0}	Constante intervenant dans l'expression du coefficient de frottement interne dans le modèle : de Jop et al. [71], de Amarsid [2]
I_d	Matrice unité
I_g, I_v	Nombre : inertiel, visco-inertiel
I_K	Fonction indicatrice sur l'ensemble K
\mathbb{J}, J_α	Matrice d'inertie : concaténation sur l'ensemble des grains, évaluée au grain α
J	Nombre visqueux
J_R	Intégrale de Rice
\bar{K}^s	Tenseur de rigidité surfacique endommageable
K^{drag}	Facteur de paramétrisation intervenant dans l'expression de la traînée de vitesse
$K_\alpha, K_{\alpha c}$	Facteur d'intensité de contrainte en mode α : valeur, valeur critique (ténacité)
K_{res}	Fonction intervenant dans l'expression du gradient de pression dans le modèle d'écoulement turbulent en milieu poreux de Masuoka et Takatsu [86]
k', k^{hom}	Module de compressibilité : de la matrice du milieu poreux, du milieu effectif (matrice+pores)
k_d, k_n	Constantes intervenant dans l'expression du module de compressibilité homogène de Ponte Castañeda et Willis
k_t	Énergie cinétique de turbulence
l, l_{czm}	Longueur : de la fissure, de la zone cohésive
i	Vitesse de propagation de la fissure (dérivée temporelle de la longueur de fissure)

Symbole(s)	Signification(s)
$L_{breche}, l_{min}^{max}, l_{min}^{tol}$	Taille : de la brèche (largeur) adimensionnée par la taille moyenne des grains, de la plus petite des arêtes de la meilleure collection de polyèdres, de la plus petite des arêtes à converger de l'algorithme de régularisation
L_f, L_{mesh}, l_f	Taille caractéristique : de l'écoulement de fluide, du maillage, de l'élément de volume sur lequel les champs relatifs à l'écoulement sont moyennés
\vec{l}_c	Vecteur de branche reliant les centres d'inertie des deux corps au contact i_c
$l_{m,xe}$	Paramètre de maille d'une cellule unitaire
l_{zf}	Rapport d'aspect de la zone fluidisée
$\mathbb{M}, \bar{\mathbb{M}}$	(pseudo-)Matrice de masse : concaténation des masses des grains, Concaténation des masses et des inerties des grains
$\vec{M}, \vec{M}_\alpha, \vec{M}^{i_c}, \vec{M}_{ext}, \vec{M}_{ext,\alpha}$	Vecteur des moments : dûs aux efforts de contact (concaténation sur l'ensemble des grains), dûs aux efforts de contact appliqués au grain α , représentant la contribution de la résultante des forces de contact en i_c , dûs aux efforts extérieurs (concaténation sur l'ensemble des grains), dûs aux efforts extérieurs appliqués au grains α
M_{at}^{Xe}	Masse atomique du xénon en prenant en compte l'effet de l'irradiation
\vec{M}_{rot}	$= \vec{\omega} \wedge (\mathbb{J}\vec{\omega})$ pseudo-moment
m, m_α, m_γ	Masse : d'un grain (grains de même masse), du fragment α , du grain sphérique γ
m_S	Constante intervenant dans l'expression de l'équation d'état de Soave
N_Δ	Nombre de sous pas de temps (algorithme de couplage fluide-grains)
$\langle N \rangle$	Nombre moyen de grains s'écoulant entre deux blocages (avalanches-blocages)
N_A	Nombre d'Avogadro
N_b^{jg}	Nombre de bulles au joint de grains
N_c	Nombre de grains
$N_{contact}$	Nombre de contacts
N_f^α	Nombre de surfaces du $\alpha^{i\text{ème}}$ fragment
N_{iter}, N_{iter}^{tol}	Nombre d'itérations : à convergence de la boucle de calcul de l'algorithme de NSCD, maximal avant arrêt de l'algorithme

Symbole(s)	Signification(s)
N_m	Nombre de nœuds de maillage
N_{mes}	Nombre de points de mesure radiaux
N_{tri}	Nombre de triangles permettant de discréditer les faces des polyèdres
$\vec{n}, \vec{n}', \vec{n}^\Gamma, \vec{n}^{tri}, \vec{n}_f, \vec{n}_s$	Vecteur normal : à la surface de la zone cohésive, au plan de glissement du milieu granulaire, au contour Γ_T , sortante au $j^{\text{ème}}$ triangle, à la $f^{\text{ème}}$ face du polyèdre, à la $s^{\text{ème}}$ surface libre du fragment
n	Exposant de la loi pression
n_i	Indice du $i^{\text{ème}}$ nœud de maillage
$n_g, n_g^{i_c}$	Nombre de moles : dans une volume V , affecté au $i_c^{\text{ème}}$ point de contact (zone cohésive)
n_p	Nombre de particules
$\vec{\nabla}, \vec{\nabla}_s$	Vecteur : gradient, gradient symétrique
$\vec{OG}_\alpha, \vec{OM}_\gamma$	Position du barycentre : du polyèdre α , de la sphère γ
$\Delta P, \Delta P^{inter}, \Delta P^{intra}, \Delta P^{inter}_{eff}$	Écart entre les bornes de la pression calculée par l'équation d'ALCYONE : générique, dans les bulles intergranulaires, dans les bulles intragranulaires, écart de sur-pression dans les bulles intergranulaires
$\Delta P^+, \Delta P^-$	Écart entre la pression calculée par ALCYONE et sa borne : supérieure, inférieure
\tilde{P}	Énergie potentiel stockée dans la structure
P, P_c	Pression : valeur, valeur critique
$P^{inf}, P^{inter,inf}, P^{inter,sup}, P^{intra,inf}, P^{intra,sup}, P^{sup}$	Borne de la pression calculée par l'équation d'ALCYONE : inférieure, inférieure dans les bulles intergranulaires, supérieure dans les bulles intergranulaires, inférieure dans les bulles intragranulaires, supérieure dans les bulles intragranulaires, supérieure
$P_\gamma, P^{inter}_\gamma$	Tension de surface (ou pression capillaire) des bulles : quelconques, intergranulaires
$P_{AL}, P_{CS}, P_R, P_S, P_{vdW}$	Pression calculée par l'équation d'état : d'ALCYONE, de Carnahan-Starling, de Ronchi, de Soave, de van der Waals
$\Delta P_R, P_{att}, P_{rep}$	Terme intervenant dans l'équation d'état de Ronchi : d'ajustement aux données expérimentales, part attractive des interactions interatomiques, part répulsive des interactions interatomiques

Symbole(s)	Signification(s)
$P_b, P^{inter}, P^{intra}$	Pression calculée dans les bulles : quelconques, intergranulaires, intragranulaires
$P_{conf}, P^{crit}_{conf}, (P^{crit}_{conf})$	Pression hydrostatique (ou de confinement) : valeur, valeur critique à partir de laquelle la fissuration est amorcée, valeur critique à partir de laquelle la fissuration est amorcée (moyenne axiale)
P_{ec}	Pression externe du crayon
$P_{eff}, P^{inter}_{eff}, P^{inter,calc}_{eff}, P^{inter,em}_{eff}, P_{eff}$	Sur-pression des bulles : quelconques, intergranulaires, calculée dans les bulles inter, dans les bulles inter d'après les estimations mixtes
$P^{czm}_{eff}, P^{max}, P^{czm}_{min}$	Pression post-rupture appliquée dans la zone cohésive : valeur, borne maximale, borne minimale
$P_f, \Delta P_f$	Pression du fluide : valeur, écart régnant dans le fluide
P_{inf}, P_{sup}	Pression de confinement appliquée à la pastille sur la face : inférieure, supérieure
P_{mes}	Pression mesurée (mesures $P - V - T$) sur du xénon
P_{plena}	Pression uniforme du crayon au temps initial
Q	Débit granulaire
q_{mesh}	Perte de raideur apparente tolérée par l'utilisateur
\mathbb{R}	Ensemble des réels
R	Constante des gaz parfaits
\vec{R}, R_N, \vec{R}_T	Vecteur de contrainte porté par la normale \vec{n} ou \vec{n}' : générique, partie normale, partie tangente
R_I, R_{II}	Projetée de \vec{R} sur \vec{e}_I et \vec{e}_{II} respectivement
R'_N	Contrainte normale de référence dans le modèle de Amarsid [2]
R_{N0}, R_{T0}	Coordonnée du centre du cercle de Mohr-Coulomb : Abscisse, ordonnée
$\mathcal{R}^\alpha, \mathcal{R}^\Omega$	Repère : local du fragment α , global
$\vec{R}^{coh}, \vec{R}^{coh,i_c}, R_N^{coh}, \vec{R}_T^{coh}, R'$	Contrainte de cohésion : vecteur, vecteur évalué au contact i_c , partie normale, partie tangente, effective, seuil à l'endommagement de la zone cohésive

Symbole(s)	Signification(s)
$R_{max}, R_{max}^N, R_{max}^T$	Contrainte de cohésion maximale : Générique, normale, tangente
R_o, R_B, R_f	Diamètre d'orifice adimensionné par la taille moyenne des grains : générique, minimal à partir duquel l'écoulement granulaire est possible, à partir duquel la vidange des fragments est totale
R_e	Nombre de Reynolds
R_s	Diamètre d'un silo adimensionné par la taille moyenne des grains
R_V	Rayon du volume sur lequel la moyenne d'une variable dans le milieu granulaire est évaluée
r	Distance entre deux points dans l'espace
$r_b, r_b^i, r_b^{inter}, r_b^{intra}$	Rayon des bulles : générique, valeur de la $i^{\text{ème}}$ population, intergranulaires, intragranulaires
$r_{p,\gamma}$	Rayon du $\gamma^{\text{ème}}$ grain
r_p	Rayon pastille
r_p^f, r_p^{ini}	Première, dernière position considérée dans la prise de moyenne radiale
r_{fe}	Diamètre moyen des fragments élémentaires
r_{mc}	Rayon du cercle de Mohr-Coulomb
$\mathcal{S}, \mathcal{S}_V, \mathcal{S}^\alpha, \mathcal{S}^k(C), \mathcal{S}_i^\alpha$	Collection : des grains appartenant au domaine, des germes du pavage de Voronoï du domaine, des sphères appartenant au polyèdre α , de polyèdres générés ($k^{\text{ème}}$ génération), des surfaces libres du fragment α
S^{i_c}, S_s, S_{tot}	Aire de la surface : de contact au point i_c , de la $s^{\text{ème}}$ surface libre, des joints de grains
$S_{\beta=0}, S_{\beta=0}^{ini}, S_{press}, S_{saine}, S_{tot}^{ini}$	Aire des zones cohésives : rompues (instant t), rompues (instant initial), rompues et pressurisées (instant initial), saines (instant initial), totalité des zones (instant initial)
s	Distance par rapport à la pointe de la fissure
T, T_c, T_r	Température : valeur, valeur critique, valeur réduite
T_ϵ	Paramètre intervenant dans l'expression du diamètre de sphères dures (homogène à une température)
$T_F, t, t_i, t_f, t_m, t_{crit}, t_{parcours}$	Temps : final de calcul, générique, initial, final, médian, à l'amorce de fissure, de parcours des fragments dans le ballon

Symbole(s)	Signification(s)
Δt	Longueur de l'intervalle de temps d'intégration
$\Delta t'$	Sous pas de temps (algorithme de couplage fluide-grains)
\vec{t}, \vec{t}'	Vecteur tangent par rapport à la normale : \vec{n}, \vec{n}'
tr	Opérateur trace
$\vec{U}^{i_c}, \vec{U}_{free}^{i_c}, \vec{U}_{free,loc}^{i_c}, \vec{U}_{free,loc}^{i_c}$	Concaténation des vitesses et des rotations relatives des corps dans le repère du contact i_c : valeur, valeur libre, valeur libre locale, valeur libre locale translatée de la vitesse et de la rotation due aux efforts de cohésion
$[\vec{u}], \ \vec{u}\ _{max}, u_N, \vec{u}_T$	Saut de déplacement : vecteur, intensité maximale, partie normale, partie tangente
$\vec{u}, \vec{u}^+, \vec{u}^-$	Déplacement : générique, de la lèvres supérieure de la fissure, de la lèvres inférieure de la fissure
$u_N^{i_c}$	Saut de déplacement normale du contact i_c
V	Volume
$\Delta V_m, \langle \Delta V_m \rangle, \langle \frac{\Delta V_m}{V_m} \rangle$	Écart calcul-mesure du volume molaire : absolu, absolu (moyenne radiale dans la pastille), relatif (moyenne radiale dans la pastille)
$V_m, V_{mc}, V_{mr}, V_{mes}, V_m^{x_e, s}$	Volume molaire : valeur, valeur critique, valeur réduite, mesuré dans les bulles, du xénon solide
$V_m^I, V_m^{inter}, V_m^{intra}$	Volume molaire calculé dans les bulles : en considérant que l'ensemble des cavités ne représentent qu'une seule population de bulles, intergranulaires, intragranulaires
$V_m^{i_c}$	Volume molaire affecté au $i_c^{\text{ème}}$ point de contact (zone cohésive)
V_m^{max}, V_m^{min}	Volume molaire de transition dans l'équation d'ALCYONE : au dessus duquel l'équation d'état de van der Waals est utilisée, en dessous duquel l'équation d'état des sphères dures est utilisée
$V_\gamma, V_{ej}, V_{pastille}, V_{poly}, V_{rel}$	Volume : de la sphère γ , des fragments éjectés, de la pastille, du polyèdre, des fragments relocalisés
\vec{v}, \vec{v}_{free}	Concaténation des vitesses des grains : vitesses, vitesses libres
$\langle \vec{v} \rangle, \vec{v}_\alpha, \vec{v}_\gamma, \vec{v}_\gamma^*$	Vitesse : moyenne des grains, du grain α , de la sphère γ , prédite de la sphère γ

Symbole(s)	Signification(s)
\vec{v}_f, \vec{v}_f	Vecteur de vitesse du fluide : vecteur, moyenne
v_{f0}, v_{fz}	Vitesse du fluide : caractéristique, dans la direction de l'écoulement (selon z)
v_{out}, v_{out}^f	Vitesse normalisée des grains passant à travers l'orifice : générique, lorsque R_o tend vers R_f
$W^{i_c j_c}$	Opérateur de Delassus évalué au couple de contact (i_c, j_c)
w, w^{intra}, w^{inter}	Rapport de forme des cavités sphéroïdales : générique, des bulles intra et intergranulaires
$\vec{x}, \vec{x}_\alpha, \vec{x}_\gamma, \vec{x}_{g,\gamma}$	Vecteur de position : générique, du fragment α , du centre de gravité de la sphère γ , du germe du polyèdre α
\vec{x}_0	Vecteur quelconque
y	Densité réduite du gaz
Z	Facteur de compressibilité
z	Position axiale

Introduction générale

En 2019, la part du nucléaire dans la production d'électricité en France était de plus de 70 %, contre 10 % au niveau mondial [63]. Alors que la réduction des rejets de gaz à effet de serre dans l'atmosphère est nécessaire afin de limiter le réchauffement climatique¹, cette spécificité est un atout. Cette prépondérance du nucléaire dans la production électrique permet de répondre à un besoin énergétique important (la France étant le 10^e plus grand consommateur d'électricité [41]) en maintenant les émissions de CO₂ à un niveau relativement faible. Plus particulièrement, la France possède un des meilleurs² ratio entre la quantité de CO₂ émise par la production électrique et la quantité d'énergie électrique produite (0.05 kg CO₂/kWh pour une moyenne mondiale à 0.5 kg CO₂/kWh) [5]. Néanmoins, l'exploitation des réacteurs nucléaires comporte des risques radiologiques qui doivent être maîtrisés. La compréhension du comportement des composants du réacteur (et en particulier du combustible) en situation accidentelle est donc essentielle.

Le combustible utilisé dans les réacteurs à eau pressurisée (REP) se présente sous forme de pastilles cylindriques empilées dans une gaine tubulaire en alliage de zirconium, gaine qui forme la première barrière de confinement des produits radioactifs. Durant l'irradiation du crayon (ensemble pastilles-gaine), la microstructure du combustible est modifiée et des produits de fission gazeux se forment en son sein. Ces modifications ont un fort impact sur le comportement du combustible et sont exacerbées lors d'une montée en température.

Une telle augmentation de la température intervient en situation accidentelle et notamment durant un Accident de Perte de Réfrigérant Primaire (APRP). L'APRP résulte d'une brèche dans le circuit primaire, brèche qui induit une perte du caloporteur. Dans ces conditions, la température de la gaine augmente alors que la pression du caloporteur diminue, ce qui engendre une sollicitation thermomécanique intense au niveau de crayon [132]. Ces sollicitations, associées aux modifications microstructurales du combustible et à la présence des gaz de fission, peuvent avoir un impact sur l'intégrité du combustible.

1. D'après le rapport du GIEC [120], il est estimé que les émissions de CO₂ liées à l'activité humaine doivent diminuer de 45 % entre 2010 et 2030 afin d'éviter un réchauffement global de plus de 1.5° C.

2. Le 4^e meilleur ratio des 124 pays plus grand consommateur d'électricité au monde [5].

Récemment, des campagnes expérimentales menées à l'international et au CEA ont permis d'identifier un risque de fragmentation du combustible en situation de transitoire thermique de type APRP [128, 42]. Pour un état de fragmentation fin et si une brèche s'est formée dans la gaine, il existe un risque de dispersion du combustible hors du crayon. La non-éjection de produits radioactifs étant un enjeu de sûreté majeur, les conditions aboutissant à la fragmentation du combustible doivent être étudiées et prédites.

Pour ce faire, l'outil de calcul scientifique (OCS) ALCYONE [50] de la plateforme PLEI-ADES permet de modéliser le comportement thermomécanique et physico-chimique du combustible en irradiation, en situation incidentelle et accidentelle. En soutien aux expériences susmentionnées, un schéma dédié à l'APRP a été implémenté dans ALCYONE [18]. Si la comparaison calcul-mesure met en évidence une bonne capacité à représenter le comportement de la gaine et l'état du combustible avant transitoire, la modélisation de la fragmentation du combustible reste à améliorer.

Ces travaux de thèse visent à approfondir la compréhension des mécanismes de fragmentation du combustible UO_2 , pour améliorer sa modélisation. Pour ce faire, deux moteurs de la fragmentation identifiés par les expériences sont étudiés :

- L'influence des bulles de gaz de fission. Ces gaz forment des bulles qui, lorsqu'elles sont pressurisées, peuvent avoir un impact sur la décohésion intergranulaire (fissuration localisée au joint de grains).
- L'impact de la dépressurisation des gaz de remplissage lors de la rupture d'étanchéité du crayon. Cette dépressurisation engendre des sollicitations au niveau du combustible qui contribuent à sa fragmentation.

Dans le cadre de cette thèse, nous viserons en particulier à répondre aux questions suivantes :

- Au chapitre 1, quelle est l'intensité du chargement appliqué par les bulles de gaz de fission au combustible durant l'APRP ?
- Au chapitre 2, quelles sont les propriétés à rupture du combustible irradié ?
- Au chapitre 3, pour quel chargement externe appliqué à la pastille durant l'APRP, le combustible est-il susceptible de se fragmenter ?

Les éléments de réponse apportés à ces questions nous amèneront à proposer des améliorations de la modélisation de la fragmentation du combustible dans ALCYONE.

Dans le cadre du chapitre 1, le chargement appliqué par les gaz de fission sur les joints de grains du combustible en transitoire sera estimé. Ce chargement dépend de paramètres (porosité, quantité de gaz de fission précipité sous forme de bulles, pression dans les cavités) liés à l'historique d'irradiation du crayon. Afin d'estimer ce chargement et les incertitudes de calcul associées, cette étude s'appuie sur :

- Une comparaison des pressions calculées par l'équation d'état utilisée dans la modélisation par rapport aux données existantes dans la littérature (mesures, extrapolations et calculs). Cette comparaison permet de quantifier les incertitudes relatives au calcul de la pression.
- Une simulation de l'irradiation d'un combustible à fort taux de combustion et ayant fait l'objet d'examen post-irradiatoires. La comparaison des résultats de simulation et

d'examen permet de quantifier les écarts calcul-mesure relatifs aux quantités d'intérêt (porosité, quantité de gaz, pression).

- Une estimation de la contrainte engendrée par la pressurisation des bulles de gaz de fission. Pour ces estimations, la forme non-sphérique des bulles observées en 3D au MEB-FIB est prise en compte.

Au chapitre 2, connaissant les sollicitations appliquées par les gaz de fission, le seuil d'amorçage de la fragmentation du combustible sera déterminé. Ce seuil dépend des propriétés matériau du combustible, propriétés dont l'évolution au cours de l'irradiation n'est pas connue avec précision. Nous proposons donc d'étudier ces propriétés à partir d'un modèle couplant la méthode des éléments discrets (DEM) et un modèle de zones cohésives (CZM), grâce au code de calcul LMGC90 [39]. Pour ce faire, le comportement à rupture du combustible en situation de recuit thermique à pression de confinement contrôlée est modélisé. Une analyse paramétrique du modèle est ensuite réalisée afin de déterminer les propriétés matériau permettant de modéliser le comportement à rupture du combustible en situation de transitoire thermique.

Au chapitre 3, connaissant le chargement appliqué par les gaz de fission et les propriétés matériau à retenir dans le modèle, le comportement du combustible dans la situation accidentelle visée (dépressurisation du crayon) sera modélisé. Pour ce faire, le modèle DEM-CZM est retenu et le chargement appliqué par le gaz de remplissage est défini de manière à représenter l'écart de pression attendu entre l'intérieur et l'extérieur du crayon. Le modèle est ensuite couplé au code de calcul MIGFLOW [32] afin de modéliser l'écoulement du gaz de remplissage par une approche de type "fluide non-résolu" (couplage fluide-grains). Une attention particulière est apportée à la prise en compte de fragments de forme polyédrique dans le modèle. Ces simulations n'ayant pas permis de conclure quant à la fragmentation du combustible, le couplage fluide-grains est appliqué à la modélisation de l'éjection des fragments de combustible hors du crayon. L'influence de la taille de la brèche formée dans la gaine sur le volume de fragments éjectés est étudiée.

Étude de l'influence des gaz de fission sur la décohésion intergranulaire

Sommaire

1.1	Comportement du combustible UO_2 en irradiation de base . .	7
1.1.1	Évolution géométrique et microstructurale du combustible en irradiation de base	7
1.1.2	Comportement des gaz de fission	11
1.1.3	Conclusion	16
1.2	Comportement du combustible en situation d'Accident de Perte de Réfrigérant Primaire	16
1.2.1	Enseignement des campagnes expérimentales visant à étudier le comportement du combustible en APRP	16
1.2.2	Modélisation du comportement du combustible en irradiation de base et en situation accidentelle	18
1.3	Positionnement des équations d'état par rapport aux données existantes dans la littérature	26
1.3.1	Contexte	26
1.3.2	Définition des équations d'état retenues	26
1.3.3	Présentation des mesures sur combustibles irradiés	33
1.3.4	Quantification des bornes de la pression	39
1.3.5	Conclusions	45
1.4	Estimation de la pression dans les bulles de gaz de fission sur la base des données de simulation et des résultats des examens post-irradiatoires	47
1.4.1	Mesures expérimentales	47
1.4.2	Comparaison calcul-mesure de l'état du crayon combustible fort taux à l'issue de l'irradiation de base	63
1.4.3	Conclusions	78
1.5	Estimation de la contrainte de sur-traction des différentes populations de bulles	85
1.5.1	Estimation du coefficient de Biot avec prise en compte de la forme non-sphérique des bulles	86

1.5.2	Estimation des sur-contraintes de traction des bulles	91
1.5.3	Conclusions et perspectives	94
1.6	Conclusion du chapitre	97

1.1 Comportement du combustible UO_2 en irradiation de base

1.1.1 Évolution géométrique et microstructurale du combustible en irradiation de base

Le combustible dans les Réacteurs à Eau Pressurisée (REP) se présente sous forme de pastilles d' UO_2 ou de MOX empilées dans une gaine (tube cylindrique) en alliage de zirconium, gaine qui est la première barrière de confinement des éléments radioactifs produits pendant le fonctionnement en réacteur. Les dimensions de la pastille (voir figure 1.1) sont d'environ 8 mm de diamètre pour 13 mm de hauteur et la gaine a un diamètre externe de 9.5 mm pour une longueur de 4 m.

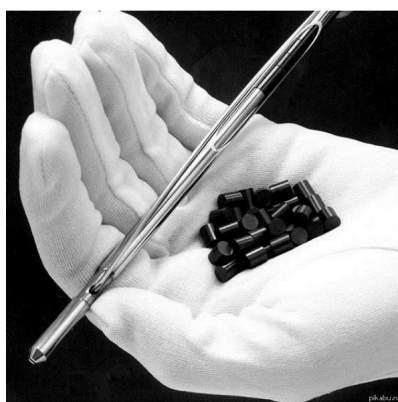


FIGURE 1.1 – Image de la pastille de combustible et de la gaine [136].

Le crayon combustible, formé par la gaine et l'empilement de pastilles combustible, est pressurisé par un gaz de remplissage (hélium) et son étanchéité est assurée par des bouchons soudés aux extrémités. Un volume d'expansion, appelé plenum, est aménagé en partie haute du crayon, comme illustré figure 1.2, pour accommoder le relâchement des gaz de fission.

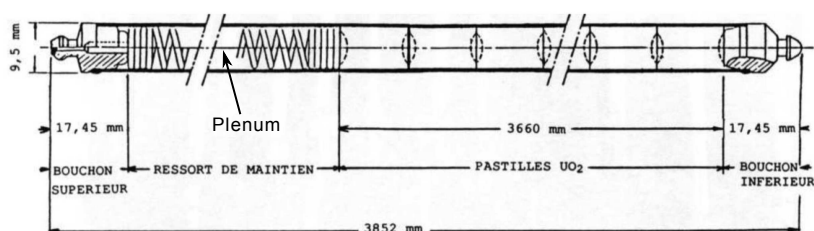


FIGURE 1.2 – Schéma d'un crayon combustible UO_2 utilisé dans les REPs [34].

Le cœur des REP est constitué d'assemblages de crayons combustibles disposés dans la cuve du circuit primaire contenant de l'eau légère pressurisée à 155 bar. Cette eau a un rôle de caloporteur car elle transporte la chaleur produite par le combustible sous irradiation et maintient la température de la surface de la gaine à environ 600 K. L'eau joue également le

rôle de modérateur car elle abaisse le niveau d'énergie des neutrons produits par la fission. Durant l'exploitation, le combustible irradié est notamment caractérisé par son taux de combustion, i.e., la quantité d'énergie thermique extraite par unité de masse de matière fissile exprimée en GWj/t_u .

Lors de son exploitation en réacteur, le combustible est le siège de la fission nucléaire. Cette réaction de fission génère de la chaleur au sein du matériau, chaleur qui est évacuée en périphérie de la pastille par le biais de la gaine. À cause de la faible conductivité thermique¹ de l' UO_2 , la température au centre du combustible est bien plus élevée qu'en périphérie comme illustré figure 1.3.

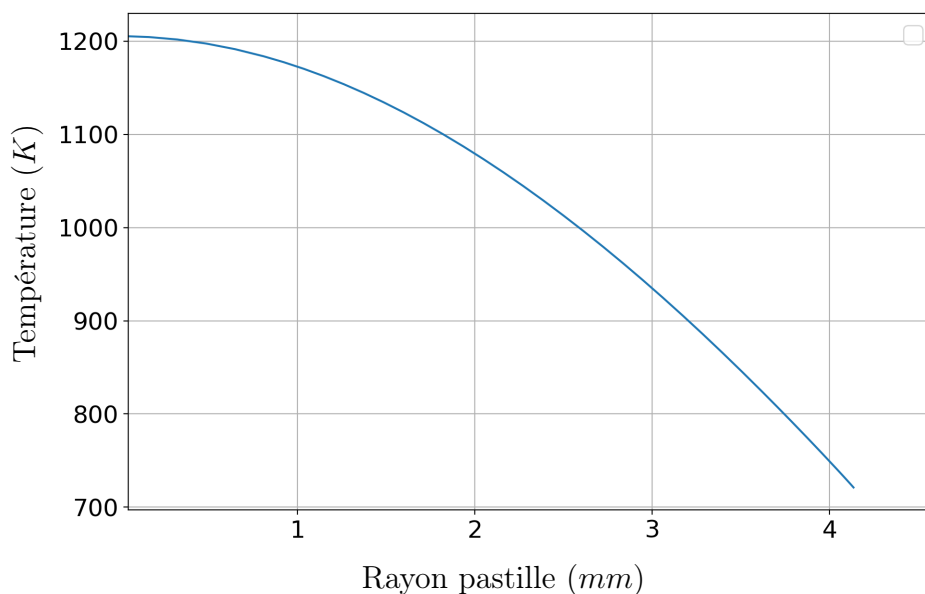


FIGURE 1.3 – Exemple de profil radial de température dans la pastille en irradiation de base.

Dès la première montée en puissance, le champ de température non-uniforme induit un important gradient thermique. Ce différentiel de température génère des dilatations différentielles à l'origine d'un champ de contrainte dans le combustible, le centre de la pastille étant sollicité en compression et la périphérie en traction. Comme le combustible est un matériau fragile, il va alors se fissurer (dès lors que la contrainte de traction excède la contrainte à rupture) en 8 fragments (fragments de la taille du mm) qui vont bouger les uns par rapport aux autres et combler partiellement le jeu entre la pastille et la gaine. Par la suite, le gradient thermique entre le centre de la pastille et sa périphérie induit une dilatation différentielle et conduit les fragments à prendre une forme spécifique dite de "diabolo" (sur-déplacement des points situés au plan inter-pastille par rapport aux points situés au plan médian pastille) comme illustré figure 1.4.

1. la conductivité thermique de l' UO_2 vierge est de $5.1 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$ à 673 K et diminue jusqu'à $2.2 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$ à 1800 K [82]

Le jeu pastille-gaine, de $160 \mu\text{m}$ à froid en début de vie du crayon, va diminuer jusqu'à s'annuler sous l'effet :

- des dilatations thermiques,
- du fluage de la gaine sous l'effet de la pression exercée,
- du gonflement du combustible en raison de la présence des produits de fission.

Lorsque le jeu est complètement rattrapé (à $15 \text{ GWj}/t_u$), il apparait une interaction entre la pastille et la gaine (IPG). La mise en diabolos des fragments conduit à la formation de plis primaires (voir figure 1.4) au niveau des plans inter-pastilles. Sous l'effet d'un transitoire de puissance, ces plis constituent alors un lieu de concentration de contrainte, ce qui peut conduire à la rupture de la gaine.

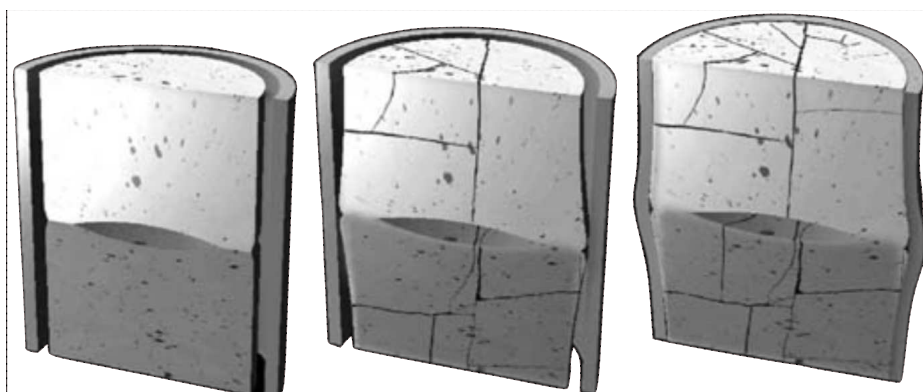


FIGURE 1.4 – Schématisation de la pastille et de la gaine (à gauche), de la mise en diabolos (au milieu) et de la fermeture du jeu pastille-gaine (à droite). Figure tirée de [31].

Initialement, la pastille contient des porosités suite à sa fabrication. En début d'irradiation, l'interaction de cette porosité avec les pointes de fission² a pour effet de faire disparaître les plus petits pores, ce qui induit une densification du combustible.

Dans le même temps, de nouveaux éléments apparaissent : les produits de fission (création de deux produits de fission pour un atome fissionné). L'augmentation du nombre d'atomes, l'évolution du paramètre du réseau cristallin induit par les produits de fission solubles et la présence de phases secondaire (condensées ou gazeuses) due aux produits de fission insolubles, entraînent une augmentation du volume du combustible. Les produits de fission vont avoir une contribution différente au gonflement selon leur état. Ainsi, dans le cas d'un crayon faiblement irradié, le gonflement solide est prépondérant en irradiation de base, les bulles de gaz (de très petite tailles) n'induisant pas alors de gonflement substantiel de la matrice du combustible. Inversement, à fort taux de combustion, le gonflement gazeux est prépondérant suite à la précipitation des gaz qui forme alors des porosités au sein de la matrice de combustible. Ainsi, à partir de $15 \text{ GWj}/t_u$, l'effet de la densification est contrebalancé par le gonflement du combustible et le diamètre de la pastille croît. Le gonflement gazeux est donc plus important dans la partie centrale du crayon, zone où le combustible est le plus chaud.

2. Les pointes de fission sont les zones désorganisées issues de l'interaction des atomes fissionnés avec le réseau d'atomes voisins.

1.1. Comportement du combustible UO_2 en irradiation de base

La présence des gaz de fission a un fort impact sur le comportement du combustible et du crayon. Pendant l'irradiation, les produits de fission créés migrent au sein de la pastille. Lorsque les produits de fission gazeux atteignent les surfaces libres du combustible, ils sont alors relâchés dans le plenum ce qui a pour effet d'augmenter la pression interne du crayon. Le relâchement des gaz de fission en nominal augmente avec le taux de combustion (ou épuisement) et s'accélère à fort taux de combustion. Néanmoins, la quantité de gaz relâchés est faible en REP (quelques % de la quantité produite) comme illustré figure 1.5. Les paramètres qui régissent le relâchement (qui est thermique et athermique) sont :

- Le taux de combustion, qui détermine la quantité de gaz dans la matrice.
- L'historique de puissance qui détermine le niveau de température, car le relâchement est d'autant plus élevé que la température est haute.
- Le rapport S/V , i.e. le ratio entre les surfaces libres du combustible et son volume.

Ainsi, à l'issue de l'irradiation de base, la grande majorité du gaz créé est retenu au sein du combustible.

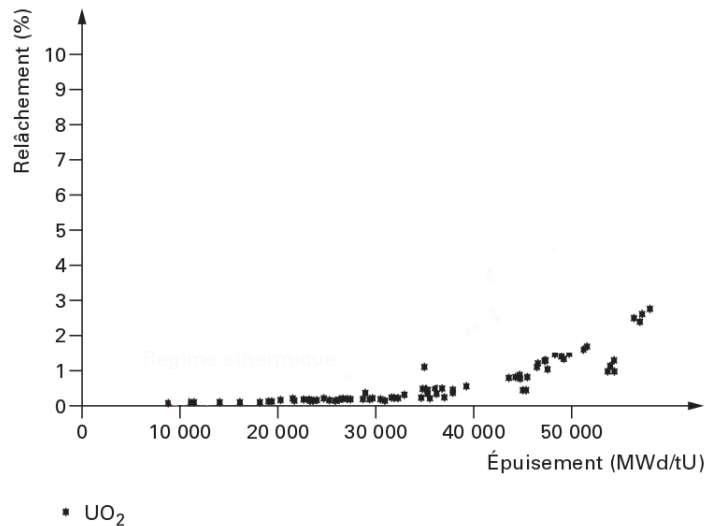


FIGURE 1.5 – Évolution du relâchement des gaz de fission en % de la création en fonction du taux de combustion en MWj/t_u , d'après [16].

Une des spécificités des crayons combustibles irradiés à fort taux de combustion (environ $50 GWj/t_u$) est la présence d'une microstructure particulière en périphérie du combustible, comme illustré figure 1.6. En effet, cette zone de la pastille, dite de rim (effet de "peau" en anglais, ou HBS pour High Burnup Structure), est alors caractérisée par :

- Une subdivision granulaire en des grains dont la taille ($0.1 - 0.3 \mu m$) est environ dix fois plus faible que les grains originels ($10 \mu m$).
- Un taux de combustion local plus élevé que dans le reste de la pastille, dans les zones dites saines.
- Une croissance exponentielle de la porosité en fonction du rayon pastille.

Il est généralement accepté que le relâchement des gaz de fission dans cette zone est faible en irradiation de base [123], ainsi, une part importante du gaz présent dans le rim est retenu dans ces cavités.

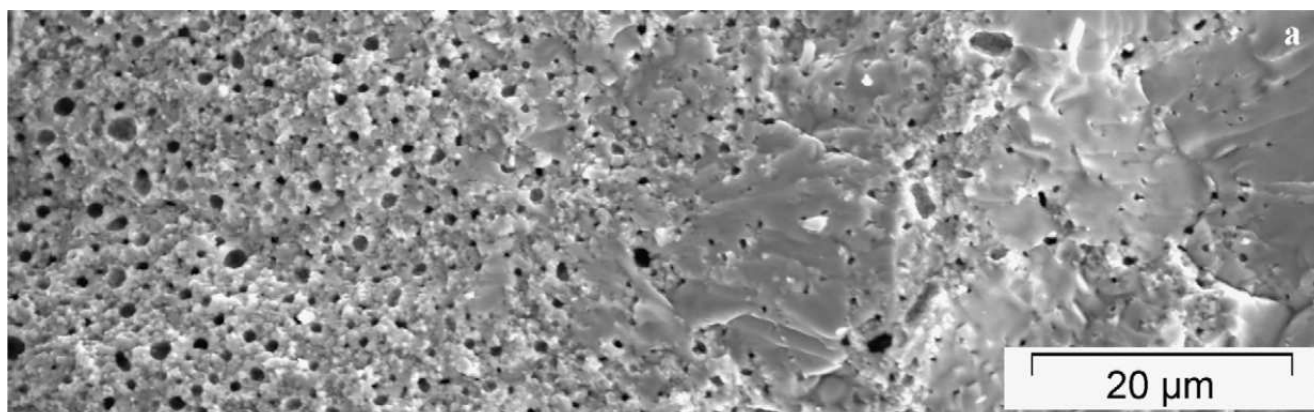


FIGURE 1.6 – Microscopie de la périphérie d'un combustible irradié ($73 \text{ GWj}/t_u$) mettant en évidence la zone de rim (à gauche) [100].

Les gaz de fission, lorsqu'ils sont retenus au sein de la pastille ont un impact sur le comportement thermo-mécanique du matériau. La capacité de ces gaz à être retenus dans la matrice ou relâchés dans le plenum dépend de leur position dans le réseau cristallin, c'est pourquoi le comportement des gaz dans le grain et au joint de grains est exposé par la suite.

1.1.2 Comportement des gaz de fission

Comme nous venons de le voir, la microstructure du combustible est caractérisée par une porosité qui évolue au cours de l'irradiation. Cette porosité est composée d'une part de pores de fabrication du combustible résultant de l'incomplète densification du combustible et d'autre part, de bulles formées par les gaz de fission. Ces cavités peuvent être distinguées en différentes populations, i.e. un ensemble de bulles caractérisé par un rayon, une porosité et une densité en gaz similaires. Comme illustré figure 1.7, ces populations de bulles sont :

- soit intragranulaires (situées à l'intérieur du grain),
- soit intergranulaires (situées au joint de grains).

Ces différentes populations de bulles seront distinguées selon les classes de taille suivantes :

- Les bulles nanométriques (dont la taille est inférieure à 100 nm).
- Les bulles submicrométriques (dont la taille est comprise entre 100 nm et $3 \mu\text{m}$).
- Les cavités micrométriques (de plus de $3 \mu\text{m}$).

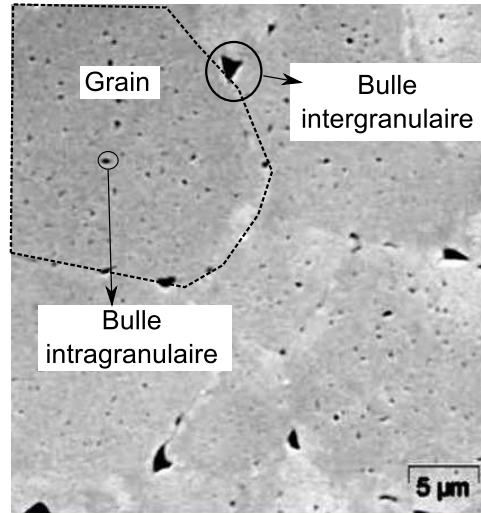


FIGURE 1.7 – Microscopie révélant les bulles du combustible dans le grain et au joint de grains [34].

Par la suite les phénomènes régissant la formation et l'évolution de ces bulles de gaz de fission sont présentés

1.1.2.1 Comportement des gaz de fission intragranulaires

Les gaz (le xénon et le krypton) constituent un tiers des produits générés par la fission. L'atome de gaz créé est initialement dissous dans la matrice et se situe préférentiellement au niveau d'un défaut de Schottky dans le réseau d' UO_2 , à savoir un défaut neutre composé par une lacune d'uranium et deux lacunes d'oxygène (trilacune d' UO_2) [81]. Ces gaz sont thermodynamiquement insolubles dans le combustible (3×10^{-10} atomes de xénon/atome d' UO_2 [83])³, ils ont donc tendance à précipiter sous forme de bulles. La germination des bulles est rendue possible par la capacité des atomes de gaz à se rassembler pour former des agrégats stables⁴. Par conséquent, le processus de germination dépend :

- du taux de combustion, au travers de la quantité de gaz créé,
- de la température, qui contrôle la diffusion du gaz.

La mobilité du gaz dans le combustible induit :

- une coalescence des bulles,
- une accumulation de gaz (sous forme dissoute ou de bulle) au joint de grains.

La croissance des bulles (en terme de taille) va alors dépendre de la compétition de deux effets antagonistes. D'une part, le niveau de température qui régit la précipitation du gaz dissous dans les bulles ainsi que leur coalescence comme nous venons de le voir et d'autre part, l'irradiation qui permet, par interaction avec les fragments de fission, la remise en solution des atomes de gaz dans ces bulles [134].

3. À titre de comparaison, la solubilité de l'oxygène dans l'Uranium (le mononitride d'uranium, UN) est d'environ 3.5×10^{-2} atome de d'O/atome de UN [65].

4. Les agrégats sont vraisemblablement stables dès lors qu'ils sont composés de 2 à 4 atomes de xénon [106]

Au cours de l'irradiation, il y a donc un équilibre dynamique entre la croissance des bulles et la remise en solution. La taille des cavités évolue avec le taux de combustion : en début d'irradiation seule une population de bulles de taille nanométrique est présente en position intragranulaire [31] et à fort taux de combustion dans les zones les plus chaudes du combustible (au centre), l'équilibre dynamique sus-mentionné est rompu et une seconde population de bulles submicrométriques, appelées bulles de précipitation, apparaît [73]. L'augmentation de la porosité est à l'origine d'un gonflement plus élevé au centre de la pastille. Cette zone de forte porosité, dite de précipitation, est visible au microscope après une attaque chimique du combustible comme illustré figure 1.8.

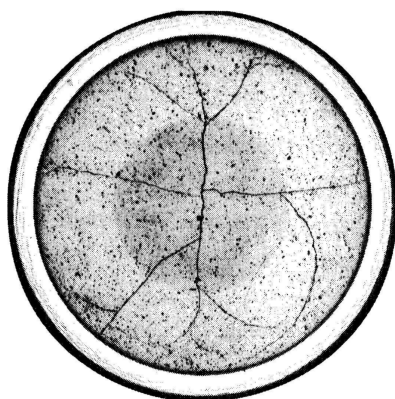


FIGURE 1.8 – Macrographie d'une coupe axiale d'un crayon combustible irradié après attaque chimique révélant la zone de précipitation au centre [8].

1.1.2.2 Comportement des gaz de fission intergranulaires

Lorsque les gaz de fission atteignent le joint de grain, ils forment des bulles intergranulaires. Le développement de ces bulles joue un rôle essentiel dans le comportement du combustible et du crayon car il aboutit au relâchement d'une partie du gaz créé. Les processus de développement de ces cavités sont présentés par la suite, en zone saine (en se basant sur les mécanismes identifiés par White [142]) puis en zone restructurée.

Initialement, les gaz présents au joint de grains germinent en des bulles intergranulaires nanométriques. Sous l'effet de la précipitation des gaz et de la capture de lacunes, ces cavités grossissent et la surface du joint de grain qu'elles occupent est de plus en plus importante de sorte que l'espacement entre ces cavités diminue. Ainsi, ces cavités finissent par entrer en contact et coalescer, comme illustré figure 1.9.a. Les bulles résultantes de la coalescence continuent de grossir jusqu'à ce que le taux de recouvrement du joint de grains (i.e. la fraction surfacique occupée par les bulles au joint) atteigne une valeur seuil. À cette étape, les bulles se connectent au joint triple⁵, comme illustré figure 1.9.b et forment des tunnels jusqu'au surface libre du combustible. Le gaz contenu dans les cavités connectées à ces tunnels peut alors être relâché dans le plenum.

5. Bord du grain situé à la jonction entre trois grains ou plus.

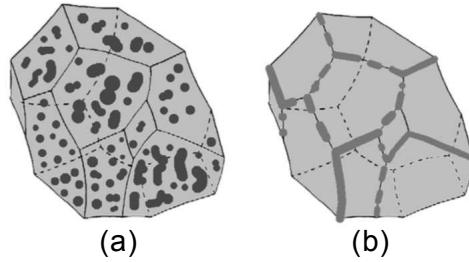


FIGURE 1.9 – Illustration schématique d'un grain et des bulles formées sur la surface du joint de grains (a) et au joint triple (b), d'après [131].

Dans les zones restructurées de la périphérie de la pastille (zone de rim), à cause de l'augmentation de la densité de fission, la quantité de gaz créé est plus élevée qu'en zone saine. Cette forte concentration en gaz a pour effet de former de grosses bulles (dont la taille atteint parfois quelques μm , voir figure 1.6). Comme les grains sont subdivisés dans cette zone (taille de grains comprise entre 0.1 et 0.3 μm), ces bulles se situent naturellement en position intergranulaire.

1.1.2.3 Etat de la porosité à l'issue de l'irradiation de base

Afin de déterminer l'impact des gaz de fission sur le comportement du combustible, il est nécessaire de caractériser la porosité, la morphologie et la pression des cavités formées par les gaz de fission.

Concernant la porosité, les phénomènes responsables de la formation des cavités (en particulier la diffusion et la restructuration) dépendent de la température. Or, comme le champ de température n'est pas uniforme dans le combustible (voir figure 1.3), la porosité évolue en fonction du rayon pastille. Cette évolution de la porosité permet de distinguer trois zones dans le combustible :

- La zone centrale (zone de précipitation sur la figure 1.8) qui présente une répartition bimodale de bulles intragranulaires et un grand nombre de bulles intergranulaires de taille submicrométrique. Ces bulles intergranulaires peuvent être fermées ou ouvertes si elles sont connectées à des surfaces libres.
- La zone intermédiaire (zone saine située en périphérie de la zone de précipitation) qui est caractérisée par une taille de bulles plus faible. Dans cette zone, l'ouverture des bulles au joint de grains n'est pas observée à l'issue de l'irradiation de base.
- La zone de rim, dans laquelle la restructuration du combustible a conduit à la formation de bulles intergranulaires dont la taille moyenne est plus élevée qu'en zone saine.

Spino et al. [129] ont observé l'évolution de la porosité dans la pastille, sur des combustibles UO_2 irradiés en REP entre 40 et 67 GWj/t_u . D'après ces observations, la porosité (taille et forme) évolue le long du rayon et en fonction du taux de combustion, comme l'illustre la figure 1.10.

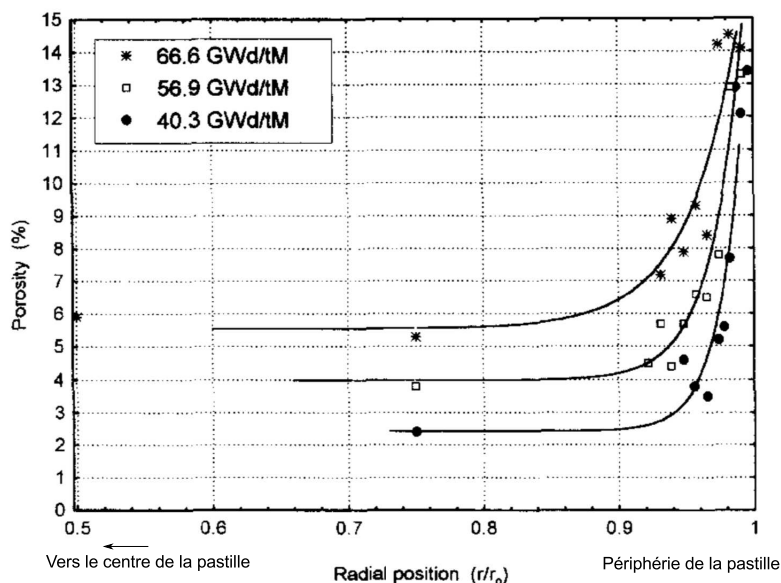


FIGURE 1.10 – Évolution de la porosité (en %) en fonction du rayon pastille (rayon adimensionné par le rayon de la pastille) pour différents taux de combustion d'après [129].

La morphologie de ces cavités est généralement supposée être :

- de forme sphérique dans le grain,
- de forme lenticulaire au joint de grains.

Néanmoins, les apports récents des observations 3D des cavités au MEB-FIB ont permis de préciser leur forme. Ces observations MEB-FIB consistent à abraser successivement la surface du combustible et à récupérer une images 2D à chaque étape. La série d'images est ensuite traitée afin de reconstruire une image 3D des cavités observées. D'après les observations de Noirot et al. [103], ces bulles sont parfois non-sphériques voire de forme complexe comme l'illustre la figure 1.11.

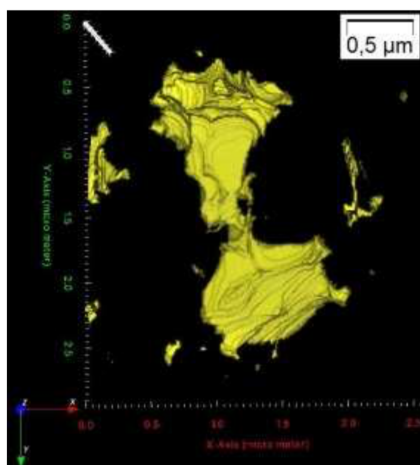


FIGURE 1.11 – Vue 3D d'une bulle de forme non-sphérique provenant des observations MEB-FIB de la zone centrale d'un combustible irradié à $73 \text{ GWj}/t_u$ [103].

1.2. Comportement du combustible en situation d'Accident de Perte de Réfrigérant Primaire

La pression dans ces bulles peut être considérable comme nous le verrons en partie 1.3 (au delà du GPa pour les bulles de très petite taille). Les gaz de fission jouent donc un rôle décisif dans le déroulement d'un accident, notamment à cause de la pressurisation des cavités lors de l'élévation de température du combustible. La pressurisation des bulles engendre un gonflement du combustible lorsque ces bulles sont intragranulaires et peut avoir pour effet de rompre les joints de grains du combustible lorsque ces bulles sont intergranulaires.

1.1.3 Conclusion

Comme nous venons de le voir dans cette partie, le combustible subit des modifications microstructurales lors de son irradiation en réacteur, évolutions notamment dues aux gaz de fission. Ces modifications impactent les propriétés du combustible et la présence des gaz de fission engendre des sollicitations thermomécaniques au niveau du combustible (lorsque ces gaz forment des porosités sur-pressurisées) et du crayon (lorsque ces gaz sont relâchés dans le plenum). Or, les phénomènes régissant le comportement des gaz de fission sont exacerbés par la température. Par conséquent, l'irradiation peut avoir, dans certaines conditions, un effet délétère sur l'intégrité de la pastille et du crayon pendant un transitoire thermique, i.e. lorsque la température du combustible augmente de manière soudaine. Ce type de transitoire intervient en situation accidentelle et notamment pendant un Accident de Perte de Réfrigérant Primaire (APRP).

1.2 Comportement du combustible en situation d'Accident de Perte de Réfrigérant Primaire

1.2.1 Enseignement des campagnes expérimentales visant à étudier le comportement du combustible en APRP

L'APRP résulte d'une brèche dans le circuit primaire du réacteur aboutissant à la perte du caloporteur et par conséquent à la diminution de sa pression [132]. Malgré l'arrêt de la réaction neutronique grâce à la chute des barres de contrôle, la température de la gaine s'accroît sous l'effet de la puissance résiduelle des crayons. Cette montée en température induit une augmentation de la pression interne du crayon et une diminution des propriétés mécaniques de la gaine. Sous l'action conjuguée de l'échauffement de la gaine et du différentiel de pression entre l'intérieur et l'extérieur du crayon, la gaine peut subir une forte déformation viscoplastique appelée ballonnement. Cette déformation peut conduire à la formation d'une brèche dans le gainage ayant pour conséquence de dépressuriser le crayon.

Ces sollicitations thermomécaniques imposées au crayon peuvent aboutir à la fragmentation du combustible [128, 42]. La taille de ces fragments (de l'ordre du μm) est bien plus faible que les fragments générés par le gradient thermique en irradiation de base (de l'ordre du millimètre). Pour un état de fragmentation avancé après perte d'étanchéité, il existe un risque de dispersion des fragments dans le circuit primaire. Si l'impact de la dispersion sur l'intégrité des composants du circuit primaire reste une question ouverte, l'éjection de produits radioactifs hors de la première barrière de confinement est une problématique de sûreté majeure. De plus, la refroidissabilité d'un potentiel lit de fragments éjectés hors du crayon doit être assurée [79]. La connaissance des conditions pour lesquelles le combustible

est susceptible de se fragmenter est donc essentielle. C'est pourquoi, la fragmentation du combustible irradié à fort taux de combustion et soumis à de forte température (1473 K) est étudiée sur le plan expérimental et théorique.

Différents programmes expérimentaux ont été menés afin d'évaluer le comportement d'un crayon combustible dans de telles conditions :

- Les essais EDGAR [43], qui ont permis de déterminer une loi de comportement de la gaine lors d'une élévation du niveau de température.
- Le programme en réacteur expérimental à Halden (IFA 650) [128], constitué d'essais APRP en réacteur de puissance sur des crayons pré-irradiés.
- Le programme SCIP 3 [72], comportant des recuits thermiques et des essais semi-intégraux (hors pile) réalisés sur des tronçons pressurisés.
- Les traitements thermiques réalisés dans les installations CEA, MERARG et MEXIICO [59], à l'issue desquels le comportement du combustible durant un transitoire thermique a été caractérisé d'une part, par le suivi du relâchement des gaz de fission pendant l'essai et d'autre part, par le biais de mesures post-essais. Ces mesures comportent des microanalyses (MEB, MEB-FIB, microsonde, SIMS, ...) et un tamisage après essais en cas de fragmentation.

Durant certains des essais réalisés lors de ces campagnes expérimentales le ballonnement et la rupture de la gaine ont pu être observés ainsi que la fragmentation et la relocalisation du combustible. Suite à ces essais, la fragmentation a été identifiée comme un événement nécessaire à l'expulsion du combustible hors de la gaine. C'est pourquoi les paramètres influents sur ce phénomène ont récemment été étudiés dans le détail. D'après les résultats expérimentaux [128], la fragmentation dépend :

- de la température du combustible (il existe un seuil à partir duquel la fragmentation est possible) et de la vitesse de chauffe (plus la vitesse est importante et plus les fragments sont petits),
- du degré de restructuration de la pastille, le rim se fragmentant systématiquement lorsque le seuil en température est atteint,
- du taux de combustion, effet à mettre en lien avec l'historique d'irradiation et notamment la puissance du crayon au dernier cycle,
- des effets systèmes [11] (solicitations imposées à l'ensemble du crayon) i.e la déformation de la gaine, la pression des plena et l'apparition d'une brèche dans la gaine (la fragmentation étant de plus grande ampleur si la gaine a rompu).

Les expériences ont également misent en évidence un effet bénéfique de la pression de confinement appliquée à la pastille [133] (qu'elle soit exercée par la gaine ou par une pression externe). Cette pression a un effet majeur sur le maintien de l'intégrité du combustible et sur la quantité de gaz relâché durant la séquence accidentelle.

Connaissant les paramètres influents, les mécanismes moteurs de la fragmentation ont alors pu être identifiés. Les moteurs qui sont étudiés dans le cadre de ce travail sont les suivants :

1.2. Comportement du combustible en situation d'Accident de Perte de Réfrigérant Primaire

- L'effet intrinsèque de l'irradiation (qui dépend de la nature du combustible à l'issue de l'irradiation). Cet effet est mis en évidence par l'influence de l'épuisement sur l'état de fragmentation, comme l'illustre la figure 1.12, influence qui suggère un effet des produits de fission gazeux.

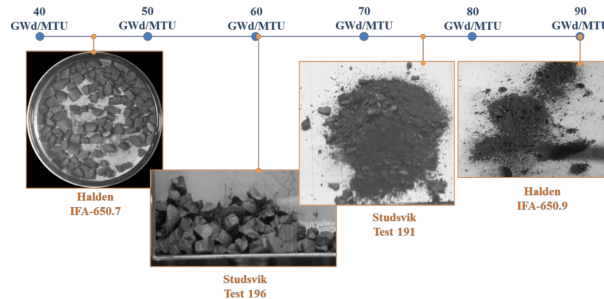


FIGURE 1.12 – Etat de fragmentation du combustible à l'issue des différents essais mettant en évidence l'influence du taux de combustion [128].

- L'effet de la formation d'une brèche dans la gaine (effet système). Lorsqu'une brèche se forme dans la gaine, le confinement exercé par la gaine sur la pastille disparaît, tandis que le gaz de remplissage subit une dépressurisation avec une forte cinétique pouvant être à l'origine d'une fragmentation du combustible. L'influence de ces deux effets système sera traitée dans les chapitres 2 et 3 respectivement.

Dans le sous-chapitre suivant nous allons nous intéresser plus particulièrement à l'effet des gaz de fission sur la fragmentation du combustible (effet intrinsèque).

1.2.2 Modélisation du comportement du combustible en irradiation de base et en situation accidentelle

Au vu de l'impact que peuvent avoir les sollicitations induites par l'APRP, il est nécessaire d'être prédictif quant à l'évolution du crayon et du combustible pendant l'accident. Ceci nécessite de connaître les phénomènes régissant le comportement du combustible lors de la montée en température et de décrire avec précision son état initial, au premier instant du transitoire. Pour ce faire, l'outil de calcul scientifique (OCS) ALCYONE [50] de la plateforme PLEIADES permet de représenter les phénomènes thermomécaniques et physico-chimiques intervenants dans le combustible en irradiation de base et en situation accidentelle.

En soutien aux expériences mentionnées précédemment, un schéma de calcul dédié à l'APRP a été implémenté dans ALCYONE. La comparaison calcul-mesure montre une bonne capacité du code à reproduire les résultats du point de vue du comportement de la gaine (notamment l'ampleur du ballon et l'instant de rupture de la gaine) et de l'état du combustible avant transitoire (localisation inter ou intragranulaire des bulles, relâchement, étendue de la zone de restructuration, etc.). Néanmoins, la simulation de la fragmentation du combustible en terme de cinétique et de localisation n'est pas comparable à l'expérience. Il est donc apparu nécessaire d'améliorer la modélisation du mécanisme sous-jacent à cette fragmentation.

Dans le cadre de la modélisation, la fragmentation est supposée être le résultat d'une décohésion intergranulaire (fissuration localisée au joint de grains) engendrée par la surpressurisation des bulles de gaz de fission au joint de grains. Cette hypothèse se base sur les observations post-essais réalisés sur combustibles irradiés. Plus particulièrement, la décohésion est observée au niveau des bulles intergranulaires de combustibles ayant subi une séquence de traitement thermique de type APRP [112], comme illustré figure 1.13. De plus, ce phénomène n'est visible que dans les zones du combustible présentant une précipitation en gaz de fission importante (au centre et en périphérie).

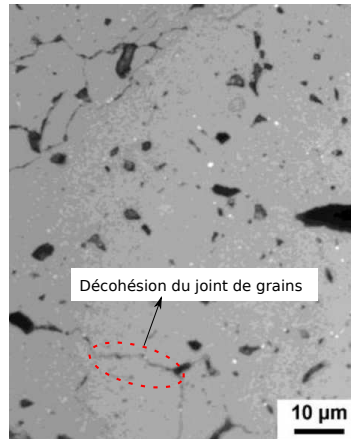


FIGURE 1.13 – Observation au MEB de la zone centrale d'un combustible irradié à $72 \text{ GWj}/t_u$ après un recuit permettant de visualiser une décohésion intergranulaire [112].

D'après ces résultats, la fragmentation peut en effet être le résultat d'une décohésion massive des joints de grains induite par la surpressurisation des bulles intergranulaires. C'est pourquoi ce mécanisme est pris en compte dans la modélisation. Par la suite, des modèles de décohésion intergranulaire existant dans la littérature, ainsi qu'une proposition d'amélioration du modèle existant dans ALCYONE, sont présentés.

1.2.2.1 Modélisation de la décohésion intergranulaire du combustible en situation d'APRP

Afin de prédire les conditions dans lesquelles le combustible est susceptible de se fragmenter, différents critères ont été proposés dans la littérature. Notamment, Turnbull et al. [133] proposent un critère empirique basé sur les résultats d'expériences réalisées sur des échantillons de combustibles irradiés à différents taux de combustion ($36 - 200 \text{ GWj}/t_u$)⁶. D'après ce critère, la fragmentation intervient lorsque la température et le taux de combustion local

6. Le critère se base sur :

- Les expériences de chauffage laser réalisées par les auteurs [133] sur des échantillons de combustibles présentant un taux de combustion local de 76 et 96 GWj/t_u pour des vitesses de chauffe d'environ $0.3 \text{ K}\cdot\text{s}^{-1}$.
- Les recuits thermiques réalisés par Une et al. [135] sur des échantillons de combustibles irradiés entre 36 et 86 GWj/t_u localement, pour des vitesses de chauffe comprises entre 1.7 et 4600 $\text{K}\cdot\text{s}^{-1}$.
- Les essais de rampes de Hiernaut et al. [61] sur un échantillon de combustible présentant un taux de combustion local de 200 GWj/t_u pour une vitesse de chauffe d'environ $0.2 \text{ K}\cdot\text{s}^{-1}$.

1.2. Comportement du combustible en situation d'Accident de Perte de Réfrigérant Primaire

du combustible dépasse un seuil représenté par la courbe rouge sur la figure 1.14. À noter que des expériences de recuits thermiques ont également été réalisées à une pression de confinement contrôlée et une vitesse de chauffe élevée (entre 6050 et 9350 $K.s^{-1}$) sur des échantillons de combustibles irradiés. Ces expériences suggèrent qu'une pression de confinement comprise entre 40 et 60 MPa permet d'inhiber la fragmentation dans ces conditions.

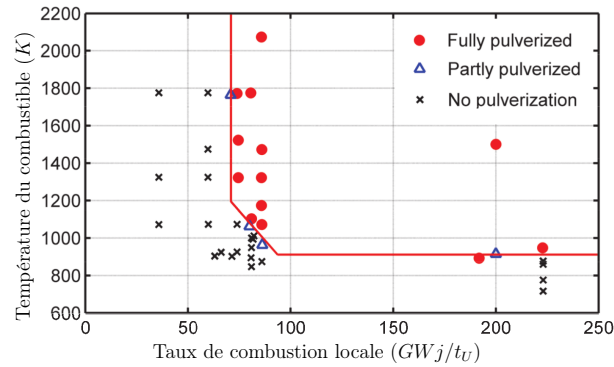


FIGURE 1.14 – Seuil de fragmentation (courbe rouge) défini par la température et le taux de combustion local d'après [133]. Les points expérimentaux représentent les cas où le combustible s'est complètement pulvérisé (ronds rouges), partiellement fragmenté (triangle bleu) ou est resté intègre (croix noires). Tirée de [70].

Notons pour la suite que certaines des expériences citées plus hauts ne sont pas représentatives des transitoires de type APRP (les cinétiques de montée en température élevées, de plusieurs milliers de $K.s^{-1}$, étant alors plutôt représentatives de situations accidentelles de type RIA : "Reactivity Insertion Accident").

Par ailleurs, d'après les résultats expérimentaux mentionnés en section 1.2.1, le taux de combustion n'est pas un paramètre suffisant pour déterminer les conditions dans lesquels le combustible est susceptible de se fragmenter (l'état microstructural lié à l'historique de température est également un paramètre essentiel à prendre en compte). Ainsi, un critère empirique, comme celui illustré figure 1.14, s'avère utile tant que l'effet des évolutions de la microstructure du combustible suite à son irradiation peuvent être négligées. En revanche, dans le cadre d'une modélisation prédictive de la fragmentation du combustible en situation d'APRP, il est nécessaire d'utiliser un critère qui prend en compte les mécanismes à l'origine de la décohésion intergranulaire.

Les résultats expérimentaux ont permis d'identifier ces mécanismes. Comme nous l'avons vu, l'état de sur-pressurisation des cavités est un moteur de la décohésion. Cette sur-pression s'exprime comme :

$$P_{eff} = P_b - P_\gamma \quad (1.1)$$

avec P_b la pression du gaz et P_γ la tension de surface de la bulle (ou pression capillaire). D'après les résultats des recuits réalisés en enceinte pressurisée [133], l'effet de la sur-pression est à mettre en lien avec l'influence du confinement appliqué au combustible. En particulier,

le confinement à l'échelle macroscopique induit une contrainte de compression hydrostatique⁷ au niveau local, contrainte qui s'exprime comme :

$$\sigma_H = \frac{1}{3}tr(\bar{\sigma}) = -P_{conf} \quad (1.2)$$

avec $\bar{\sigma}$ le tenseur des contraintes, tr l'opérateur trace et P_{conf} la pression hydrostatique (ou pression de confinement lorsque $P_{conf} > 0$). Cette contrainte hydrostatique intervient dans le bilan d'équilibre mécanique des bulles et a pour effet de comprimer ces dernières et donc de diminuer la sollicitation due à la sur-pressurisation de ces cavités.

La modélisation mécaniste de la décohésion intergranulaire consiste à déterminer l'écart entre la traction du joint de grains induite par la sur-pression des bulles et la compression engendrée par la contrainte hydrostatique, et à comparer cet écart à un seuil à partir duquel le joint de grains est susceptible de rompre. Afin de déterminer ce seuil, deux approches peuvent être retenues :

- L'une consistant à comparer la contrainte générée par la sur-pression des bulles à la contrainte à rupture du joint de grains (critère en contrainte).
- L'autre consistant à assimiler les bulles à des fissures et à comparer l'énergie apportée par le chargement au seuil à partir duquel la fissure se propage. Dans ce cas, le seuil dépend de la ténacité⁸ du matériau (critère en ténacité).

Gruber et al. [57] proposent un critère en contrainte en considérant une bulle isolée au joint de grains. Pour ce critère, la décohésion est amorcée lorsque la contrainte de traction tangente à la bulle atteint la contrainte à rupture du joint de grains. Pour une bulle sphérique, ce critère s'exprime comme⁹ :

$$\frac{1}{2}P_{eff} - \frac{3}{2}P_{conf} < \sigma_c \quad (1.3)$$

avec σ_c la contrainte à rupture des joints de grains du combustible. La tension de surface intervenant dans l'expression de la sur-pression (voir équation (1.1)) s'exprime, pour une bulle sphérique, comme :

$$P_\gamma = \frac{2\gamma}{r_b} \quad (1.4)$$

avec γ l'énergie de surface de la matrice et r_b le rayon de la bulle.

Le critère (1.3) permet de prendre en compte les mécanismes identifiés par les expériences (poussée de la pression des bulles induites par l'élévation de température et effet du confinement). Néanmoins, l'expression est obtenue pour une bulle sphérique, or, comme mentionné en partie 1.1.2.3, cette forme est assez éloignée de la morphologie des bulles d'après les observations. De plus, l'effet des bulles voisines est négligé dans ce cas, or, à fort taux de combustion, la densité en bulles au joint de grains est élevée [142], cet effet doit donc être pris en compte.

7. Le terme d'hydrostatique désigne ici un chargement dont l'intensité est constante quelle que soit la direction.

8. La notion de ténacité (ou facteur d'intensité de contrainte) est introduite dans le détail dans la partie 2.1.1 (voir (2.1)).

9. Les valeurs de $\frac{1}{2}$ et $\frac{3}{2}$ devant le terme en P_{eff} et P_{conf} respectivement sont des facteurs de concentration de contrainte qui sont obtenus par [69] car les facteurs reportés dans [57] sont erronés.

1.2. Comportement du combustible en situation d'Accident de Perte de Réfrigérant Primaire

Lemoine [77] propose un critère en contrainte qui prend en compte l'effet des bulles voisines et en considérant des bulles lenticulaires comme illustré figure 1.15. Ce critère se base sur un bilan des efforts s'appliquant autour d'une bulle intergranulaire sur la surface du joint de grains, à savoir :

- La force exercée par la sur-pression des bulles d'après :

$$P_{eff} \pi r_b^2 N_b^{jg} \quad (1.5)$$

avec N_b^{jg} le nombre de bulles au joint de grains. Dans ce cas, comme les bulles sont considérées comme étant lenticulaires, la tension de surface s'exprime comme :

$$P_\gamma = \frac{2\gamma \sin(\theta_b)}{r_b} \quad (1.6)$$

où θ_b est l'angle diédrale de la bulle lenticulaire (voir figure 1.15) et r_b définit ici le rayon de courbure de la bulle.

- L'effort induit par la pression hydrostatique :

$$P_{conf} S_{tot} \quad (1.7)$$

avec S_{tot} la surface totale du joint de grains.

- La force résultante s'exerçant au joint de grains (où σ_b est la contrainte de traction moyenne sur le joint de grains induite par les bulles) :

$$\sigma_b (S_{tot} - \pi r_b^2 N_b^{jg}) \quad (1.8)$$

L'équilibre de ces efforts s'exprime alors comme :

$$\sigma_b (S_{tot} - \pi r_b^2 N_b^{jg}) = P_{eff} \pi r_b^2 N_b^{jg} - P_{conf} S_{tot} \quad (1.9)$$

ce qui permet d'exprimer σ_b . L'expression du critère est obtenue en divisant l'équation (1.9) par S_{tot} , d'après :

$$\sigma_b = \frac{f_s P_{eff} - P_{conf}}{1 - f_s} < \sigma_c \quad (1.10)$$

avec $f_s = \frac{\pi r_b^2 N_b^{jg}}{S_{tot}}$ la fraction surfacique des bulles au joint de grains.

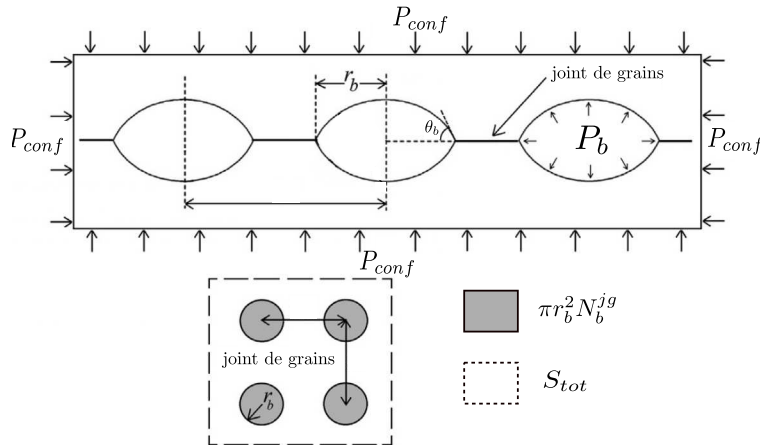


FIGURE 1.15 – Représentation schématique des bulles lenticulaires au joint de grains. Tirée de [69].

Chakraborty et al. [30] proposent un critère en ténacité qui prend également en compte l'effet du voisinage des bulles. Les auteurs considèrent qu'une fissure est située au sommet d'une bulle lenticulaire, fissure qui est orientée selon le plan défini par le joint de grains. Dans ce cas, la fissure se propage dès que le critère suivant n'est plus respecté :

$$(P_{eff} - P_{conf}) \sqrt{\pi r_b} f_{CTP}(f_s) < K_{Ic} \quad (1.11)$$

avec K_{Ic} la ténacité du joint de grains et $f_{CTP}(f_s)$ une fonction sans dimension qui dépend du taux de recouvrement des bulles au joint de grains selon :

$$f_{CTP}(f_s) = 0.568 f_s^2 + 0.059 f_s + 0.5587 \quad (1.12)$$

Cette fonction est obtenue en évaluant la contrainte qui se développe au niveau de la fissure en fonction du chargement appliqué par la pression dans la cavité. Pour ce faire des calculs éléments finis sont réalisés sur un volume élémentaire contenant une bulle lenticulaire pressurisée, des conditions de déplacements nuls sont imposées aux bords afin de représenter l'effet des bulles voisines. L'expression (1.12) a été obtenue en faisant varier la taille de la bulle dans le volume élémentaire pour les différents calculs (ce qui revient à faire varier la fraction surfacique des bulles). Pour $f_s \simeq 0$, on obtient le facteur d'intensité de contrainte associé à une bulle lenticulaire isolée possédant un angle diédral de 50°

Une revue exhaustive des différents critères proposés dans la littérature a été réalisée par Jernkvist [69]. D'après l'auteur, la comparaison qualitative des critères permet d'exclure certains de ces critères de la modélisation de la décohésion en APRP. Par exemple, la pression nécessaire pour rompre le joint de grains doit nécessairement diminuer lorsque le taux de recouvrement des bulles intergranulaires augmente. Or, cet effet n'est pas représenté par le critère de Gruber et al. car l'équation (1.3) ne dépend pas de f_s , ce critère peut donc être exclu.

La comparaison amène notamment à retenir le critère en contrainte de Lemoine et le critère en ténacité de Chakraborty et al.. En l'état, une comparaison quantitative des critères ne peut être réalisée car les seuils de ces critères dépendent des propriétés à rupture du joint de grains, propriétés qui sont encore mal connues. En effet, des mesures de contrainte à rupture et de ténacité ont été obtenues macroscopiquement [75, 49] mais l'évaluation locale de ces quantités restent difficile. Récemment, les mesures sur micro-poutre usinée au MEB-FIB réalisée au CEA par Henry [60] ont permis de mesurer les propriétés à l'intérieur du grain mais le protocole expérimental doit encore être amélioré afin de pouvoir mesurer la ténacité des joints de grains du matériau.

Par conséquent, il n'est pas possible de déterminer quel type de critère (en ténacité ou en contrainte) est le plus à même de représenter la décohésion intergranulaire du combustible.

Dans ALCYONE [17], le critère de Lemoine (1.10) est utilisé afin de représenter la décohésion induite par les bulles de gaz de fission. Afin de représenter le fait que la décohésion peut également intervenir en l'absence de gaz de fission le critère de Salvo [124] est également utilisé. Ce critère s'exprime comme :

$$\sigma_M = \sigma_{eq} - \alpha_{DP} \sigma_H < \sigma_c \quad (1.13)$$

1.2. Comportement du combustible en situation d'Accident de Perte de Réfrigérant Primaire

avec $\sigma_{eq} = \sqrt{\frac{3}{2}\bar{\sigma}^d} : \bar{\sigma}^d$ la contrainte équivalente de von Mises avec $\bar{\sigma}^d = \bar{\sigma} - \sigma_H \bar{\bar{I}}$ le déviateur des contraintes, $\bar{\bar{I}}$ étant le tenseur identité d'ordre 2 et $\alpha_{DP} = 0.15$ est un coefficient déterminé empiriquement.

Afin de représenter la différence de comportement en fonction de la température observée lors des recuits thermiques, trois régimes sont définis :

- À $T < 773 K$, la décohéation ne peut avoir lieu.
- À $773 K < T < 1473 K$ et/ou $\sigma_M < \sigma_M^{max} = 245 MPa$, la décohéation intervient lorsque le critère suivant est respecté :

$$\sigma_{AL} = \sigma_b + \sigma_M < \sigma_c \quad (1.14)$$

avec σ_b et σ_M exprimés par les équations (1.10) et (1.13) respectivement. Pour ce régime, σ_c varie en fonction du taux de combustion d'après une corrélation empirique.

- À $T > 1473 K$ et/ou $\sigma_M > \sigma_M^{max} = 245 MPa$, le critère est similaire à (1.14) mais cette fois la contrainte à rupture est fixe et vaut $\sigma_M^{max} = 245 MPa$.

Une fois le critère atteint, la décohéation intervient ce qui se traduit par une évolution de la fraction surfacique de bulles au joint de grains selon :

$$\frac{df_s}{dt} = \alpha_{f_s} \sigma_{AL} \quad (1.15)$$

avec α_{f_s} une constante positive.

Dans le cadre de l'APRP, la température atteinte par le combustible devrait être inférieure à $1473 K$, ainsi nous nous intéresserons dans le cadre de ce travail au critère exprimé par l'équation (1.14). Pour ce critère, la contrainte à rupture diminue en fonction du taux de combustion. Cette diminution a permis d'obtenir des résultats en accord avec les observations expérimentales lors de la validation du schéma de calcul APRP [18]. En revanche, cette diminution est définie par une corrélation empirique, afin de modéliser la décohéation de manière prédictive, une approche plus mécaniste est nécessaire. Pour ce faire, le mécanisme sous-jacent à cette dépendance au taux de combustion doit être pris en compte dans le critère de décohéation. Ainsi, Masson [85] propose d'affiner le bilan du chargement au joint de grains en prenant en compte la contrainte induite par la pressurisation de l'ensemble des populations de bulles de gaz de fission (intra et intergranulaires). La méthode permettant de déterminer cette contrainte est présentée par la suite.

1.2.2.2 Proposition d'amélioration du critère de décohéation d'ALCYONE

Dans un milieu contenant des cavités sur-pressurisées (milieu poreux saturé), il peut être montré que la contrainte générée par les bulles induit, au niveau macroscopique, une contrainte de traction hydrostatique [12]. Dans ce cas, la contrainte qui règne dans le matériau s'exprime comme :

$$\bar{\sigma} = \bar{C}^{(4)} : \bar{\bar{\epsilon}} - \sigma_B \bar{\bar{I}} \quad (1.16)$$

avec $\bar{C}^{(4)}$ le tenseur des modules d'élasticité du matériau (d'ordre 4), $\bar{\bar{\epsilon}}$ le tenseur de déformation et σ_B la contrainte de traction de Biot. Pour un matériau affecté par une seule population de bulles, la contrainte de Biot s'exprime comme :

$$\sigma_B = P_{eff} B \quad (1.17)$$

avec P_{eff} la pression transmise à la matrice par la population de bulles exprimée par l'équation (1.1) et B le coefficient de Biot, qui dépend des propriétés élastiques et de la porosité du matériau.

Si d'autres populations de bulles sont présentes et que la porosité liée à chacune de ces populations est faible, alors il peut être démontré [138, 85] (voir annexe A.5) que la contrainte s'exprime comme :

$$\sigma_B^{tot} = \sum_j P_{eff,j} B_j \quad (1.18)$$

avec B_j et $P_{eff,j}$ respectivement le coefficient de Biot et la pression de la $j^{\text{ème}}$ population de bulles. Ce terme peut alors être introduit dans l'expression du critère de décohésion (1.10) selon :

$$\sigma_b = \frac{f_s (P_b - P_\gamma) - \sigma_H + \sigma_B^{tot}}{1 - f_s} < \sigma_c \quad (1.19)$$

Avec ce nouveau critère, l'effet du taux de combustion est représenté par le fait que l'intensité de la sur-contrainte de traction devrait augmenter en fonction de la production de gaz de fission durant l'irradiation. Par conséquent, cette contrainte pourrait expliquer, au moins en partie, pourquoi il est nécessaire d'abaisser la contrainte à rupture du joint de grains en fonction du taux de combustion. Ainsi, l'apport de cette sur-contrainte pourrait permettre de diminuer le degré d'empirisme du critère existant.

Dans la suite, nous nous appliquerons donc à quantifier l'impact de cette contrainte sur la modélisation de la décohésion. Pour ce faire, il est nécessaire de déterminer la pression et la porosité des cavités (porosité qui intervient dans l'expression du coefficient de Biot). Dans un premier temps, nous proposons d'étudier l'influence de la pression en encadrant cette valeur par des bornes. Par la suite, la porosité et la pression des cavités sont déterminées à partir de la simulation de l'irradiation de base d'un crayon fort taux de combustion. Puis, ces calculs sont comparés aux résultats de microanalyses réalisés récemment sur ce crayon. Enfin, la contrainte de sur-traction des bulles est estimée en prenant notamment en compte la forme des bulles observées (voir figure 1.11).

1.3 Positionnement des équations d'état par rapport aux données existantes dans la littérature

1.3.1 Contexte

À l'issue de l'irradiation de base, les bulles de gaz de fission peuvent être très denses, voire proches de l'état solide [98] (théoriquement, le volume molaire du xénon solide est de $V_m^{xe,s} = 32.5 \text{ cm}^3.\text{mol}^{-1}$)¹⁰. Par conséquent, en situation de transitoire thermique, la pression dans ces cavités est potentiellement très élevée (de l'ordre de la centaine de *MPa* voire du *GPa* dans les bulles nanométriques [98]). Le gaz ne pouvant plus être considéré comme parfait, il est donc nécessaire d'utiliser une équation d'état des gaz réels. Un grand nombre d'équations d'état ont été proposées dans la littérature, mais comme nous le verrons, les écarts entre les pressions calculées par ces différentes équations peuvent être significatifs pour un volume molaire et une température donnés. De plus, les mesures sont trop peu nombreuses, aux températures d'intérêt de notre étude, pour pouvoir systématiquement déterminer si les pressions calculées par ces équations sont représentatives de l'état de pressurisation des bulles.

Comme la pression des bulles est proportionnelle à l'intensité de la sur-contrainte de traction qu'elle engendre (voir équation (1.18)), nous proposons d'encadrer cette pression, ce qui permettra par la suite d'évaluer les intensités minimales et maximales de la sur-contrainte engendrée. Afin de déterminer ces bornes, nous nous appuyerons sur les mesures de pression existantes dans la littérature et des valeurs extrapolées au moyen de modèles théoriques ou calculées par des équations d'état.

Tout d'abord, les équations d'état retenues dans l'analyse sont présentées ainsi que les mesures $P-V-T$ réalisées sur du xénon. Par la suite, le domaine d'intérêt de notre étude est défini à partir des volumes molaires mesurés dans les bulles de gaz de fission de combustibles irradiés. Enfin, les bornes de la pression calculées sont déterminées sur ce domaine d'intérêt.

1.3.2 Définition des équations d'état retenues

1.3.2.1 Présentation des équations d'état

L'équation d'état de van der Waals est généralement utilisée afin de déterminer la pression des gaz réels et notamment celle du xénon dans les bulles du combustible [106]. D'après cette équation la pression est déterminée par :

$$P = \frac{RT}{V_m - b_{vW}} - \frac{a_{vW}}{V_m^2} \quad (1.20)$$

avec V_m le volume molaire, $R = 8.314 \text{ J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$ la constante des gaz parfaits, a_{vW} et b_{vW} sont des constantes qui, pour le xénon pur, valent :

$$a_{vW} = \frac{27 R^2 T_c^2}{64 P_c} = 0.419 \text{ MPa}.\text{K}^{\frac{1}{2}}.\text{cm}^6.\text{mol}^{-2} \quad \text{et} \quad b_{vW} = \frac{RT_c}{8P_c} = 51.79 \text{ cm}^3.\text{mol}^{-1}$$

10. Le volume molaire théorique du xénon solide dans une structure face centrée est de $V_m^{xe,s} = \frac{l_{m,xe}^3 N_A}{n_a} = 32.5 \text{ cm}^3.\text{mol}^{-1}$ avec $N_A = 6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ le nombre d'Avogadro, n_a le nombre d'atome dans une cellule unitaire ($n_a = 4$ pour une cellule cubique face centrée) et $l_{m,xe}$ le paramètre de maille de la cellule unitaire qui est d'environ 0.6 nm à 200 K d'après [54].

1.3. Positionnement des équations d'état par rapport aux données existantes dans la littérature

avec $T_c = 289.73 \text{ K}$ et $P_c = 5.842 \text{ MPa}$ respectivement la température et la pression au point critique¹¹ du xénon. Le terme en a_{vW}/V_m^2 prend en compte les forces attractives qui s'exercent entre les atomes de gaz. La constante b_{vW} , appelée covolume molaire, représente le volume pris par l'atome de gaz. Plus précisément, cette constante traduit le fait qu'il existe une force de répulsion très importante lorsque les atomes sont proches. Cette équation est définie pour un volume molaire compris sur l'intervalle $]b_{vW}, +\infty[$.

Redlich et Kwong [117] proposent une équation d'état dont la forme, obtenue de manière empirique, est similaire à celle de van der Waals. Dans ce cas, la pression s'exprime comme :

$$P = \frac{RT}{V_m - b_{RK}} - \frac{a_{RK}/T^{0.5}}{V_m(V_m + b_{RK})} \quad (1.21)$$

avec

$$a_{RK} = 0.42748 \frac{R^2 T_c^2}{P_c} = 0.42458 \text{ MPa} \cdot \text{K}^{\frac{1}{2}} \cdot \text{cm}^6 \cdot \text{mol}^{-2} \quad \text{et}$$

$$b_{RK} = 0.08664 \frac{RT_c}{P_c} = 35.72 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$$

le covolume molaire, cette équation est définie pour un volume molaire appartenant à $]b_{RK}, +\infty[$.

En notant que la variation de la pression en fonction de la température n'est pas systématiquement représentée de manière satisfaisante pour l'ensemble des gaz par la relation (1.21), Soave [126] propose de généraliser cette équation en remplaçant le terme en $a_{RK}/T^{0.5}$ par un coefficient $a_S(T)$ qui s'exprime comme :

$$a_S(T) = a_{RK} \left[1 + m_S \left(1 - \sqrt{\frac{T}{T_c}} \right) \right]^2 \quad (1.22)$$

où $m_S = 0.49258$ pour le xénon.

Ces équations d'état permettent de représenter le comportement des gaz tant que leur densité est modérément faible, comme nous le verrons par la suite. Néanmoins, les pressions calculées par ces équations à des volumes molaires inférieurs au covolume (b_{vW} et b_{RK}) ne sont pas définies. Ainsi, pour des densités plus élevées, les équations d'état basées sur la théorie des sphères dures sont plus adaptées. L'expression de ces équations d'état se base sur le théorème d'expansion du viriel qui permet d'exprimer la pression sous la forme suivante [107] :

$$\frac{PV_m}{RT} = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{B'_k}{V_m^k} \quad (1.23)$$

avec B'_k le $k^{\text{ième}}$ coefficient du viriel. Théoriquement, ces coefficients peuvent être déterminés si l'expression du potentiel interatomique¹² est connue [62]. Dans la théorie des sphères dures, le potentiel interatomique est défini en associant les atomes de gaz à des sphères

11. Le point critique étant défini par la température et la pression maximales pour lesquelles l'état gazeux et liquide d'un fluide peuvent coexister.

12. Le potentiel interatomique exprime l'énergie potentiel de l'interaction entre atomes en fonction de leur distance. Ce potentiel est généralement exprimé par une fonction analytique simplifiée qui permet de représenter les efforts qui proviennent de l'interaction entre les particules chargées des atomes [20].

1.3. Positionnement des équations d'état par rapport aux données existantes dans la littérature

dures (impénétrables) de diamètre d_{HS} . Dans ce cas, la force de répulsion interatomique est infinie lorsque la distance entre atomes est inférieure à d_{HS} . Afin de relier la pression à ce diamètre, l'équation (1.23) peut être ré-exprimée en introduisant la densité réduite du gaz, notée y . Cette densité réduite représente le rapport entre le volume occupé par les sphères dures et le volume V de la cavité contenant le gaz selon :

$$y = \frac{\frac{4}{3}\pi \left(\frac{d_{HS}}{2}\right)^3 n_g N_A}{V} = \frac{\pi d_{HS}^3 N_A}{6V_m} \quad (1.24)$$

avec n_g le nombre de mole de gaz et N_A le nombre d'Avogadro. À partir de la définition de la densité réduite, le théorème d'expansion du viriel peut être ré-exprimé comme :

$$\frac{PV_m}{RT} = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} A_k y^k \quad (1.25)$$

avec $A_k = B'_k \left(\frac{6}{\pi d_{HS}^3 N_A}\right)^k$.

En se basant sur l'équation (1.25) d'une part et sur le calcul des coefficients du viriel (B'_k) de Ree et Hoover [118] d'autre part, Carnahan et Starling [27] émettent deux hypothèses :

- Les coefficients A_k peuvent être arrondis à leurs valeurs entières. Ces coefficients peuvent alors s'exprimer selon :

$$A_k = k^2 + 3k. \quad (1.26)$$

- L'équation (1.26) est valide quelle que soit la valeur de k (avec $k \in \mathbb{N}$).

D'après ces hypothèses, l'équation (1.25) peut être réécrite comme :

$$\frac{PV_m}{RT} = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} (k^2 + 3k) y^k \quad (1.27)$$

Cette série converge et permet d'exprimer la pression comme :

$$P = \frac{RT}{V_m} \frac{1 + y + y^2 - y^3}{(1 - y)^3} \quad (1.28)$$

Afin d'utiliser cette équation il est nécessaire de connaître le diamètre des sphères dures d_{HS} qui intervient dans le calcul de la densité réduite (voir (1.24)). Dans la théorie des sphères dures, ce diamètre est fixe, mais cette théorie n'est plus valable lorsque le nombre d'interactions entre atomes devient important, i.e. lorsque le volume molaire est faible. Dans ce cas, d'après la théorie des perturbations, l'interpénétration des sphères devient possible, ce qui se traduit par une évolution de leur diamètre en fonction de la température. Cette évolution est déterminée à partir de l'expression du potentiel interatomique. Dans [28], le potentiel interatomique de Buckingham modifié [21] est utilisé afin d'établir l'expression de la pression des bulles de gaz de fission nanométriques. À partir de ce potentiel, le diamètre des sphères dures peut être déterminé par la relation suivante :

$$d_{HS} = \sigma_{HS} \left(0.8542 - 0.03996 \ln \left(\frac{T}{T_\epsilon} \right) \right) \quad (1.29)$$

avec $\sigma_{HS} = 4.45 \times 10^{-10} m$ et $T_\epsilon = 231.2 K$ des paramètres représentatifs du xénon.

1.3.2.2 Présentation des mesures disponibles

Afin de déterminer les domaines sur lesquels ces différentes équations sont applicables dans le cadre de l'évaluation des bornes de la pression, il est nécessaire de comparer les valeurs calculées aux mesures $P - V - T$ réalisées sur du xénon. Ces mesures et leurs extrapolations sont reportées dans le tableau 1.1.

Auteur(s)	Température (K)	Volume molaire ($cm^3.mol^{-1}$)	Pression (MPa)
Ramsay et Travers [115]	284 et 510	400 – 1000	2.6 – 10.4
Beattie et al. [9]	289 – 573	1000 – 10000	2.2 – 41.4
Whalley et al. [141]	273 – 973	300 – 10000	0.45 – 5.06
Michels et al. [89]	273 – 423	43 – 1200	1.67 – 283
Waibel [139]	323 – 873	54 – 10000	0.4 – 60
Rabinovich et al. [114]	300 – 727	143 – 473	2 – 40.5
Zisman et al. [144]	298	14 – 32	800 – 53200
Ronchi [121] (extrapolation)	300 – 2300	18.9 – 377.4	0.07 – 58348

TABLE 1.1 – Résumé des intervalles sur lesquelles les mesures $P - V - T$ et les extrapolations sont réalisées.

Il est à noter que les mesures de Ziman et al., compte tenu des volumes molaires, sont réalisées sur du xénon à l'état solide, explorant ainsi le domaine des "bas" volumes molaires, domaine qui nous intéresse également par la suite (cf. section 1.3.4.1).

Les mesures $P - V - T$ reportées dans le tableau 1.1 sont manquantes pour les volumes molaires représentatifs des bulles de gaz de fission et pour les températures atteintes par le combustible en situation accidentelle, comme nous le verrons en section 1.3.4.1. Ainsi, Ronchi [121] propose d'extrapoler les pressions mesurées sur le xénon gazeux en utilisant les mesures obtenues sur l'argon (réalisées sur un domaine plus large que le xénon) et en utilisant le principe des états correspondant. D'après ce principe [62], le facteur de compressibilité défini, par :

$$Z = \frac{PV_m}{RT} \quad (1.30)$$

peut s'écrire comme une fonction universelle (unique pour tous les gaz), notée F_{ec} , qui dépend des valeurs réduites du volume molaire $V_{mr} = V_m/V_{mc}$ et de la température $T_r = T/T_c$ selon :

$$Z = F_{ec}(V_{mr}, T_r). \quad (1.31)$$

Ainsi, connaissant l'évolution de Z pour un gaz, le facteur de compressibilité d'un autre gaz peut être déterminé si les valeurs de T_c et V_{mc} sont connues pour les deux gaz.

L'équation d'état dérivée par Ronchi permet d'exprimer la pression de la façon suivante :

$$P = P_{rep} + P_{att} + \Delta P_R, \quad (1.32)$$

P_{rep} et P_{att} sont des termes qui permettent de prendre en compte la partie des interactions entre atomes respectivement répulsive et attractive et ΔP_R est un terme déterminé de manière à réduire l'écart entre la pression calculée par le terme en $P_{rep} + P_{att}$ et la pression

1.3. Positionnement des équations d'état par rapport aux données existantes dans la littérature

mesurée expérimentalement sur le xénon et l'argon. La forme de cette équation est complexe, les valeurs de pression en fonction de la température et du volume molaire sont donc reportées sous forme tabulées dans [121].

1.3.2.3 Comparaison des prédictions des différentes équations d'état aux mesures

Les évolutions isothermes des pressions calculées par les équations d'état présentées (courbes), extrapolées par Ronchi (courbe et carré gris) et mesurées (triangles et croix) sont illustrées sur les figures 1.16, 1.17 et 1.18 à 323 K¹³, 423 K et 1473 K respectivement.

À 323 K et 423 K la dispersion entre les pressions mesurées par Waibel et Michels et al. (triangles verts et noirs respectivement) est faible (quelques MPa). Ces mesures peuvent donc raisonnablement être utilisées afin de déterminer le domaine d'application des équations d'état.

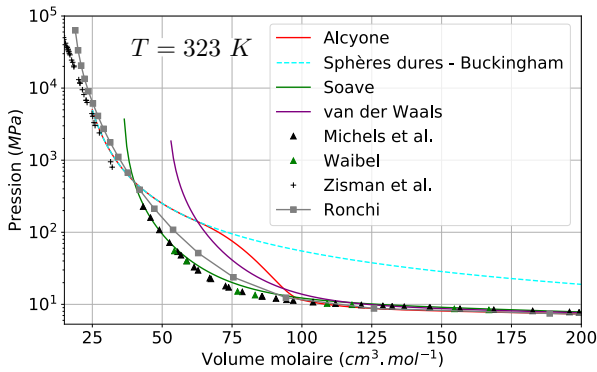


FIGURE 1.16 – Pression (en MPa) en fonction du volume molaire (en $\text{cm}^3.\text{mol}^{-1}$) à 323 K (graduation logarithmique de base 10 en ordonnée et linéaire en abscisse).

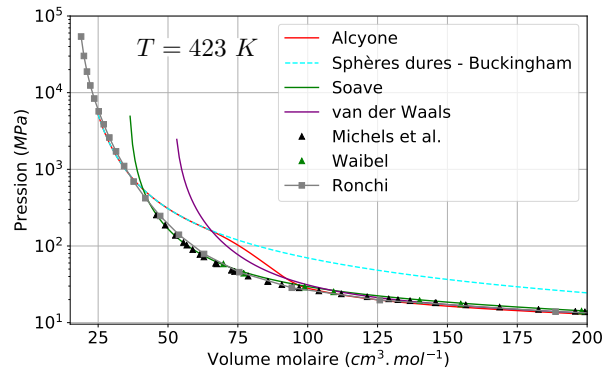


FIGURE 1.17 – Pression (en MPa) en fonction du volume molaire (en $\text{cm}^3.\text{mol}^{-1}$) à 423 K (graduation logarithmique de base 10 en ordonnée et linéaire en abscisse).

D'après la comparaison des pressions mesurées et calculées par les équations d'état (voir figures 1.16 et 1.17) :

- l'équation de van der Waals ((1.20), courbe violette) est en accord avec les données $P - V - T$ pour des volumes molaires de plus de $100 \text{ cm}^3.\text{mol}^{-1}$. Pour des volumes molaires inférieurs à $b_{vW} = 51.79 \text{ cm}^3.\text{mol}^{-1}$ cette équation n'est plus définie.
- Les pressions calculées par l'équation de Soave ((1.21) et (1.22), courbe verte) sont en accord avec les mesures pour des volumes molaires de plus de $42 \text{ cm}^3.\text{mol}^{-1}$, mais cette équation n'est pas définie pour des volumes molaires de moins de $b_{RK} = 35.72 \text{ cm}^3.\text{mol}^{-1}$.
- Les pressions calculées par l'équation des sphères dures avec le potentiel modifié de Buckingham ((1.28)-(1.29), courbe en pointillés cyans) surestiment la mesure pour un volume molaire supérieur à $42 \text{ cm}^3.\text{mol}^{-1}$, mais sont en bon accord avec les mesures, même avec celles réalisées sur le xénon solide (pour des volumes molaires de moins de $30 \text{ cm}^3.\text{mol}^{-1}$).

13. Les valeurs de Zisman (croix noires) sont réalisées à une température légèrement inférieure de 298 K.

Concernant les extrapolations, les valeurs tabulées par Ronchi (courbe grise) sont définies sur l'ensemble du domaine d'intérêt puisqu'elles s'appuient sur une base expérimentale très étendue. Si des écarts sont constatés entre ces pressions extrapolées et les mesures $P-V-T$ à température ambiante (écarts de l'ordre de plusieurs dizaines de MPa à quelques GPa , voir la figure 1.16, soit un écart relatif¹⁴ compris entre 30 et 60 % pour des volumes molaires de moins de $80 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$), ces écarts diminuent avec la température pour devenir négligeables à 423 K (quelques MPa , voir figure 1.17, soit moins de 15 % d'écart relatif). Cette diminution des écarts avec la température est due au fait que le terme ΔP_R dans l'équation (1.32) est ajusté de manière à réduire les écarts entre la pression extrapolée et mesurée, en priorité pour des températures de plus de 600 K [121]. C'est pourquoi les extrapolations de Ronchi sont utilisées comme valeurs de références aux températures élevées, pour lesquelles les mesures $P-V-T$ sont manquantes.

Notamment, au-delà de 750 K , il n'existe pas de données $P-V-T$ pour les volumes molaires d'intérêt (entre 22.5 et $300 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$, voir figure 1.21), les pressions calculées doivent donc être comparées aux extrapolations de Ronchi. À 1473 K (température maximale atteinte par le combustible en transitoire), l'évolution des écarts entre les pressions calculées et extrapolées (voir figure 1.18) est similaire à ce qui est observé entre les valeurs calculées et mesurées à plus basse température (voir figure 1.16 et 1.17).

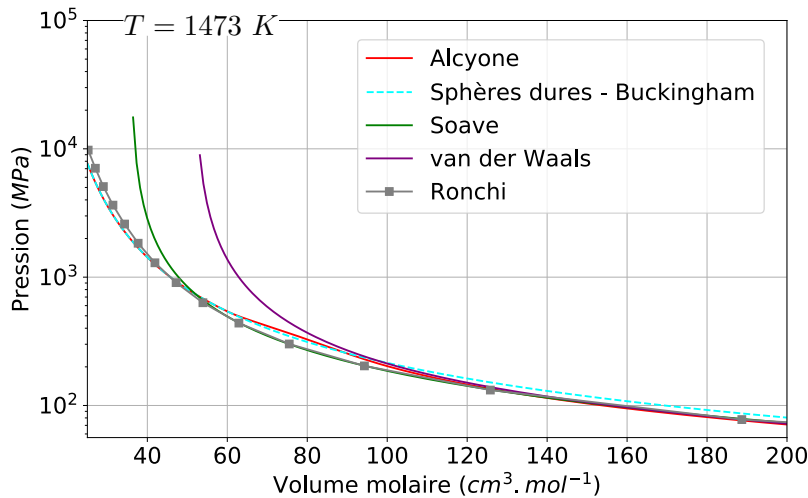


FIGURE 1.18 – Pression calculée (en MPa) en fonction du volume molaire (en $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$) à 1473 K (graduation logarithmique de base 10 en ordonnée et linéaire en abscisse).

Pour l'ensemble des températures, les écarts entre les pressions calculées par les différentes équations d'état sont significatifs en fonction du volume molaire. En particulier, à haut volume molaire ($V_m > 100 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$), les pressions calculées par l'équation des sphères dures surestiment les valeurs calculées par les équations de Soave et de van der Waals alors que les pressions calculées par ces deux dernières équations sont en accord avec les données $P-V-T$ sur cet intervalle. En revanche, pour des volumes molaires plus faibles, il est

14. L'écart relatif est défini par :

$$\frac{|P_R - P_{mes}|}{P_R}$$

avec P_R et P_{mes} les pressions extrapolées et mesurées respectivement.

1.3. Positionnement des équations d'état par rapport aux données existantes dans la littérature

nécessaire d'utiliser une équation d'état qui prend en compte les nombreuses interactions entre atomes. C'est pourquoi les pressions calculées par l'équation des sphères dures sont en accord avec les valeurs de référence (mesures et/ou extrapolations de Ronchi) pour des volumes molaires plus faibles (en dessous de $62 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$) alors que les équations de Soave et de van der Waals surestiment ces valeurs ou ne sont pas définies.

ALCYONE simulant le comportement des combustibles sur l'ensemble du domaine de volume molaire et de température considéré ici, les équations suivantes sont retenues [104] :

- pour $V_m > V_m^{max} = 103.6 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$, l'équation de van der Waals (1.20).
- Pour $V_m < V_m^{min} = 62.2 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$, l'équation des sphères dures (1.28) avec le potentiel modifié de Buckingham (1.29).
- Pour $V_m^{min} = 62.2 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} < V_m < V_m^{max} = 103.6 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$, une combinaison linéaire des deux équations d'état sus-mentionnées :

$$P(V_m, T) = P_{vdW} f_{AL}(V_m) + P_{CS} (1 - f_{AL}(V_m)) \quad (1.33)$$

avec P_{vdW} la pression calculée par (1.20), P_{CS} la pression calculée par (1.28) avec le diamètre des sphères dures calculé par (1.29) et :

$$f_{AL}(V_m) = \frac{1}{2} \left(1 + \cos \left[\pi \left(\frac{V_m - V_m^{min}}{V_m^{max} - V_m^{min}} + 1 \right) \right] \right) \quad (1.34)$$

une fonction de pondération variant entre 0 et 1.

La revue des équations d'état de Cagna [22] amène l'auteur à retenir les équations suivantes afin d'évaluer la pression dans les bulles :

- pour $V_m > 40 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$, l'équation de Soave (1.22).
- pour $V_m < 40 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$, l'équation des sphères dures (1.28) avec le potentiel modifié de Buckingham (1.29).

Ce choix est différent d'ALCYONE car le domaine de volumes molaires et de température considéré par l'auteur est différent (dans [22] l'intérêt est notamment porté sur les volumes molaires représentatifs des bulles intragranulaires submicrométriques à température ambiante). Ainsi, les pressions calculées par les équations d'ALCYONE et de Soave sont différentes à haut volume molaire (jusqu'à 175 MPa d'écart à 323 K et 80 MPa à 1473 K). Comme sus-mentionné, l'équation retenue par Cagna (Soave) est en revanche en bon accord avec les données expérimentales à 323 K et 423 K . Cette équation sera donc utilisée par la suite afin de déterminer les encadrements de la pression calculée dans les bulles de gaz de fission (cf. 1.3.4.1).

Ces encadrements vont être définis sur le domaine d'intérêt de notre étude (i.e. pour les pressions attendues dans les bulles de gaz de fission en situation de transitoire thermique). Les encadrements seront en particulier déterminés pour les pressions mesurées dans les bulles de combustibles irradiés afin de d'évaluer leur ordre de grandeur pour une population de bulles donnée. Ces mesures sont présentées par la suite.

1.3.3 Présentation des mesures sur combustibles irradiés

Plusieurs moyens expérimentaux permettent d'évaluer l'état de pressurisation des cavités. Ces évaluations peuvent être distinguées en plusieurs catégories :

- Les évaluations globales qui permettent de déterminer une valeur moyenne du volume molaire.
- Les mesures locales qui permettent d'évaluer le volume molaire d'une bulle en particulier.
- Les observations indirectes qui consistent à déduire la pression qui a été atteinte dans les bulles à partir des observations de la microstructure du combustible.

Les résultats obtenus à partir des différentes catégories de mesures sont présentés par la suite (pour une revue détaillée des dispositifs utilisés voir [22]).

1.3.3.1 Evaluation globale du volume molaire des bulles

Les évaluations globales se basent sur une mesure de la porosité (volume occupé par les bulles par volume de combustible) et de la concentration en gaz dans ces bulles (quantité de gaz contenue dans les bulles par volume de combustible). Le rapport de ces deux quantités permet d'obtenir le volume molaire (volume par quantité de gaz). Cette méthode de mesure, dite "moyenne", permet d'obtenir une pression représentative de l'ensemble de cavités quelle que soit leur taille.

Pour cette mesure, la porosité est directement obtenue par une analyse d'images MEB des cavités. La difficulté majeure liée à l'évaluation du volume molaire réside dans la mesure de la quantité de gaz contenus dans les bulles.

Afin de mesurer la quantité de gaz occlus dans le combustible, la mesure microsonde a été largement utilisée à partir des années 1970. Cette instrument permet de mesurer le gaz retenu dans le combustible sur une faible profondeur (moins de $1 \mu m$). Ainsi, les cavités les plus grosses lorsqu'elles sont suffisamment proches de la surface pour être accessibles à la mesure sont ouvertes et sont vidées de leur gaz par l'opération de polissage de l'échantillon réalisée avant l'examen. Par conséquent, le gaz contenu dans les cavités dont le diamètre est de l'ordre du micron ($2.5 - 4 \mu m$) n'est pas mesuré par la microsonde.

Afin de palier cela, la mesure microsonde a été combinée aux analyses par fluorescence au rayon X (XRF) car cette mesure permet de détecter le xénon sur une plus grande profondeur et permet donc de détecter le gaz omis par la microsonde (présent dans les cavités micrométriques). Mogensen et al. [90], ont utilisé cette mesure sur des combustibles irradiés entre 33 et 53 GWj/t_u afin d'évaluer le volume molaire des bulles intergranulaires de la zone intermédiaire, les pressions¹⁵ reportées par les auteurs sont comprises entre 75 et 473 MPa pour des températures allant de 1513 à 1683 K . Les mesures XRF ont été réalisées jusque dans les années 1990 mais cette instrumentation n'est plus disponible aujourd'hui.

15. Dans ce cas, les pressions sont calculées par l'équation des sphères dures (1.28) avec un diamètre fixe de $d_{HS} = 0.37 \text{ nm}$.

1.3. Positionnement des équations d'état par rapport aux données existantes dans la littérature

Les mesures quantitatives du gaz dans les bulles sont désormais réalisés grâce au SIMS (secondary ion mass spectrometry). Ces mesures consistent à abraser la surface du combustible et à mesurer la quantité de gaz relâchés lors de cette opération. Les quantités mesurées font l'objet d'un recalage aux mesures microsonde [38] afin d'obtenir une valeur quantitative de la quantité de gaz en rétention dans le combustible.

Walker et al. [140]¹⁶ ont utilisé cette mesure afin de déterminer la pression dans les bulles de rim sur un combustible irradié à $90 \text{ GWj}/t_u$. La pression¹⁷ calculée par les auteurs dans ces cavités est relativement élevée en irradiation de base (230 MPa à 673 K).

Au CEA, cette technique a été utilisée par :

- Noiroit et al. [99] et Noiroit et al. [101], sur un combustible irradié à $38.8 \text{ GWj}/t_u$ ayant subi une rampe de puissance et un combustible irradié à $83 \text{ GWj}/t_u$, respectivement. Seuls les volumes molaires sont reportés dans ce cas et les valeurs mesurées sont comprises dans le domaine des hauts volumes molaires ($V_m > 100 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$), les pressions attendues sont donc relativement faibles.
- Cagna [22] en zone centrale d'un combustible irradié à $72.7 \text{ GWj}/t_u$ présentant une zone de précipitation développée. Les mesures sont obtenues en utilisant deux méthodes, une méthode "moyenne" (comme présentée précédemment) et une méthode dite "histogramme" consistant à mesurer la porosité et la quantité de gaz en terme de classes de taille de cavités et à calculer le volume molaire de chacune des classes. Cette deuxième approche permet d'obtenir l'évolution de la pression mesurée en fonction de la taille des bulles. Les pressions calculées¹⁸ dans ces cavités sont relativement élevées à température ambiante (entre quelques MPa et 950 MPa à 300 K).

1.3.3.2 Evaluation locale du volume molaire des bulles

Les mesures locales se basent sur des mesures de la quantité et du volume d'une bulle. Les premières mesures locales ont été réalisées par Thomas [130] en utilisant le MET (microscope électronique à transmission) pour calculer le volume de cavités nanométriques et l'EDX (spectroscopie de rayon X à dispersion d'énergie) pour mesurer la quantité de gaz. Ces mesures ont été réalisées sur des combustibles irradiés entre 30 et $40 \text{ GWj}/t_u$ sur des bulles dont la taille était comprise entre 55 et 80 nm . Les mêmes mesures ont été réalisées par Nogita et Une [98] sur des bulles dont la taille était comprise entre 5 et 10 nm sur des combustibles irradiés entre 49 et $83 \text{ GWj}/t_u$. D'après ces mesures, la pression des plus petites bulles nanométriques en nominale sont comprises entre 1 et 15 GPa ¹⁹ (durant l'irradiation, i.e. à 700 K dans ce cas).

Les mesures de Garcia et al. [48] par SAX (spectrométrie d'absorption des rayons X) permettent de mesurer la pression dans les bulles nanométriques en mesurant la distance entre atomes et le nombre de coordination (i.e. le nombre moyen d'atomes voisins pour un

16. Pour les mesures globales, l'ensemble des auteurs présentés utilisent des images obtenues au microscope afin de calculer la porosité, à l'exception de Walker et al. qui se base sur une micrographie d'absorption des électrons obtenus à la microsonde et qui permet de révéler les cavités remplies de xénon.

17. Dans ce cas, les pressions sont calculées par l'équation des sphères dures (1.28) avec un diamètre fixe de $d_{HS} = 0.39 \text{ nm}$.

18. Dans ce cas la pression est calculée par l'équation des sphères dures ou l'équation de Soave comme mentionné en partie 1.3.2.1.

19. Les extrapolations de Ronchi sont utilisées dans ce cas.

atome donné). Cette mesure permet d'évaluer directement la pression dans les bulles sans besoin d'observation du volume des cavités. Les évaluations de Garcia et al. réalisées sur un combustible implanté confirment l'ordre de grandeur de la pression dans les cavités mesurées au MET-EDX par Nogita et Une et Thomas (entre 2.7 *GPa* à 5 *K* et 3.7 *GPa* à 870 *K* pour une bulle de 2 *nm*).

Des mesures locales ont également été obtenues par Cagna [22] sur une bulle intragranulaire de 420 *nm* provenant de la zone de précipitation d'un combustible irradié à 72.7 *GWj/t_u*. Pour ce faire, le SIMS a été utilisé afin de mesurer la quantité de gaz d'une bulle, puis le volume de cette bulle a été calculé à partir d'une imagerie 3D réalisée au MEB-FIB. D'après ces mesures, la pression calculée¹⁸ dans cette bulle submicrométrique à température ambiante est de 56 *MPa*.

1.3.3.3 Evaluations indirectes de la pression

L'état de pressurisation des cavités peut également être déduit des observations de la microstructure du combustible. En effet, la présence de certains défauts témoigne de l'intervention de modifications microstructurales engendrées par la pression des cavités. Notamment, une sur-pression suffisamment élevée dans une bulle peut induire un déplacement des dislocations situées à sa proximité. Ce processus, dit de "dislocation punching", a pour effet de faire grossir la bulle. Lors du grossissement, la quantité de gaz contenue dans la bulle reste constante alors que son volume augmente, ainsi la pression dans la cavité diminue. Par conséquent, dès lors que le mécanisme de "dislocation punching" peut être actif, la pression nécessaire au déplacement d'une dislocation ne peut être dépassée, cette pression définit donc une valeur seuil.

Les observations de Nogita et Une [97] réalisées sur un combustible irradié à 49 *GWj/t_u* mettent en évidence une forte densité de dislocations autour des bulles dans la zone de rim. Ces observations prouvent que la pression atteinte dans ces bulles a été suffisante pour induire un grossissement par dislocation punching. D'après Greenwood et al. [55], la pression d'activation de ce mécanisme par une bulle s'exprime comme (pour une bulle sphérique de rayon r_b et une dislocation dont la taille est similaire au diamètre de la bulle) :

$$P_b = \frac{\mu_e b_b}{r_b} + \frac{2\gamma}{r_b} \quad (1.35)$$

avec μ_e le module de cisaillement de la matrice et b_b le vecteur de Burgers (0.39 *nm* [106]) et γ l'énergie de surface.

D'après l'équation (1.35), la pression maximale qui peut régner dans une bulle peut être déduite de sa taille. Le rayon des bulles de rim observées par Nogita et Une est compris entre 250 *nm* et 1 μm , la pression dans ces cavités d'après l'équation (1.35) sont donc comprises entre 30 et 117 *MPa*.

1.3.3.4 Résumé des mesures

L'ensemble de ces mesures est résumé dans le tableau 1.2. Les pressions déterminées par les auteurs sont reportées ainsi que les équations d'état utilisées. Ces pressions ont été déterminées dans différentes conditions :

1.3. Positionnement des équations d'état par rapport aux données existantes dans la littérature

- à la température ambiante (pour les mesures de Cagna),
- à la température d'irradiation (pour les mesures de Waker et al. et Nogita et Une),
- à la température atteinte en transitoire (pour les mesures de Mogensen et al.).

Ainsi, pour chacune des pressions la température à laquelle cette valeur a été calculée est précisée entre parenthèses.

Auteur(s)	Taux de combustion (GW_j/t_u)	Position radiale (divisée par le rayon pastille)	Rayon des bulles (nm)	Volume molaire ($cm^3.mol^{-1}$)	Equation d'état (MPa)	Pression reportée (MPa)
Mesures globales						
Noirot et al. [99]	38.8	0	400-500 (intra) 700-2500 (inter)	180-280	-	- ²⁰
Mogensen et al. [90]	55	0.45 0.55 0.6 0.65 0.7	700-2800 (inter)	92.9 73.8 75.9 106.8 215.8	sphères dures (1.28) (avec $d_{HS} = 0.37$ nm)	316 (1683 K) 473 (1623 K) 411 (1593 K) 232 (1563 K) 75 (1513 K)
Walker et al. [140]	65	1	400-4300	- ²⁰	sphères dures (1.28) (avec $d_{HS} = 0.39$ nm)	230 (673 K)
Cagna [22] moyenne	72.7	0	300 – 3400	50	sphères dures (1.28) (avec d_{HS} calculé par (1.29)) et Soave (1.21) (1.22)	70 (300 K)
Cagna [22] histogramme	72.7	0	100 200 300 400 500 600 700	34.3 59 51 58 71 91 115	sphères dures (1.28) (avec d_{HS} calculé par (1.29)) et Soave (1.21) (1.22)	865 (300 K) 33 (300 K) 71 (300 K) 38 (300 K) 18 (300 K) 11 (300 K) 9 (300 K)
Noirot et al. [101]	83	0 0.24 1	- ²⁰	115 194 103	-	- ²⁰
Mesures locales						
Thomas [130]	27-48	- ²⁰	25 27 27 30 40	50 79 53 35 84	-	- ²⁰
Nogita et Une [98]	49 49 49 83 83	0.75 -0.95	2.5 4 2 3.5 5	33.5 22.5 25.5 35.5 25.5	Ronchi (1.32)	1750 (700 K) 13450 (700 K) 6590 (700 K) 1365 (700 K) 6590 (700 K)
Cagna [22]	72.7	0	420	52.6	sphères dures (1.28) (avec d_{HS} calculé par (1.29)) et Soave (1.21) (1.22)	56 (300 K)
Mesures indirectes						
Nogita et Une [97]	49	1	250-1000	- ²⁰	-	30 – 117 (673 K)

TABLE 1.2 – Résumé des mesures des volumes molaires et des pressions dans les bulles de gaz de fission.

²⁰. non précisée

1.3. Positionnement des équations d'état par rapport aux données existantes dans la littérature

Comme les pressions reportées précédemment ont été calculées à des températures différentes et en utilisant des équations d'état différentes (ou avec des diamètres de sphères dures différents), ces valeurs ne sont donc pas comparables entre elles. Ces pressions sont donc calculées à une même température (303 K) et en utilisant la même équation d'état, les valeurs sont reportées dans le tableau 1.3. Pour le calcul, les pressions sont déterminées aux volumes molaires évalués par les auteurs en utilisant les équations d'état retenues par Cagna, à savoir l'équation de Soave (1.21) (1.22) (pour $V_m > 40 \text{ cm}^3.\text{mol}^{-1}$) et des sphères dures (1.28) (1.29) (pour $V_m < 40 \text{ cm}^3.\text{mol}^{-1}$, voir partie 1.3.2.1) car elles sont en accord avec les données $P - V - T$ comme nous l'avons vu.

Auteur(s)	Taux de combustion (GW_j/t_u)	Position radiale (divisée par le rayon pastille)	Rayon des bulles (nm)	Volume molaire ($\text{cm}^3.\text{mol}^{-1}$)	Pression à 303 K d'après l'eq. de Soave (1.21) (1.22) et des sphères dures (1.28) (1.29) (MPa)
Mesures globales					
Noirot et al. [99]	38.8	0	400-500 (intra) 700-2500 (inter)	180-280	6-5
Mogensen et al. [90]	55	0.45 0.55 0.6 0.65 0.7	700-2800 (inter)	92.9 73.8 75.9 106.8 215.8	9 14 13 8 6
Walker et al. [140]	65	1	400-4300	75 ²¹	21
Cagna [22] moyenne	72.7	0	300 – 3400	50	70
Cagna [22] histogramme	72.7	0	100 200 300 400 500 600 700	34.3 59 51 58 71 91 115	869 33 72 37 18 10 9
Noirot et al. [101]	83	0 0.24 1	- ²²	115 194 103	7 6 8
Mesures locales					
Thomas [130]	27-48	- ²²	25 27 27 30 40	50 79 53 35 84	80 12 58 800 10
Nogita et Une [98]	49 49 49 83 83	0.75 -0.95	2.5 4 2 3.5 5	33.5 22.5 25.5 35.5 25.5	960 12115 4300 750 4300
Cagna [22]	72.7	0	420	52.6	60

TABLE 1.3 – Résumé des mesures des volumes molaires et des pressions calculées à température ambiante en utilisant les équations d'état retenues par Cagna.

1.3. Positionnement des équations d'état par rapport aux données existantes dans la littérature

D'après ces évaluations, les pressions sont très différentes en fonction des populations de bulles considérées. En effet, à température ambiante, les pressions mesurées dans les bulles intragranulaires de précipitation (mesure locale et moyenne de Cagna) dans les bulles intergranulaires de la zone intermédiaire (par Mogensen et al.) et dans le rim (par Walker et al.) sont de l'ordre la dizaine voire de la centaine de MPa alors que la pression calculée dans les cavités nanométriques peut atteindre plusieurs centaines de MPa voire la dizaine de GPa (d'après Nogita et Une et Thomas).

L'évolution des pressions reportées dans le tableau 1.3 (triangles) en fonction de la taille de cavités à $303 K$ et $1473 K$ est illustrée figure 1.19 et 1.20²³ respectivement. D'après ces figures, la pression des cavités diminue globalement avec l'augmentation de leur rayon. À température ambiante ($303 K$), la plupart des cavités sont sur-pressurisées, c'est à dire $P_b > \frac{2\gamma}{r_b}$ (la pression d'équilibre, $P_b = \frac{2\gamma}{r_b}$, étant représentée par la droite noire²⁴). À la température attendue en transitoire ($1473 K$), l'ensemble des cavités mesurées sont sur-pressurisées et les pressions attendues sont très élevées (de l'ordre de la centaine de MPa voire de la dizaine de GPa).

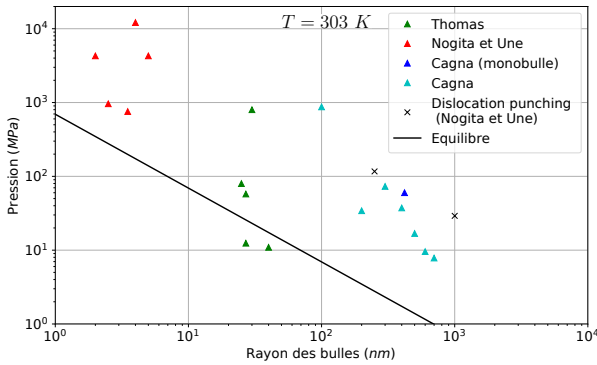


FIGURE 1.19 – Évolution log-log de la pression (en MPa) mesurée dans les cavités en fonction de leur rayon (en nm) à $303 K$.

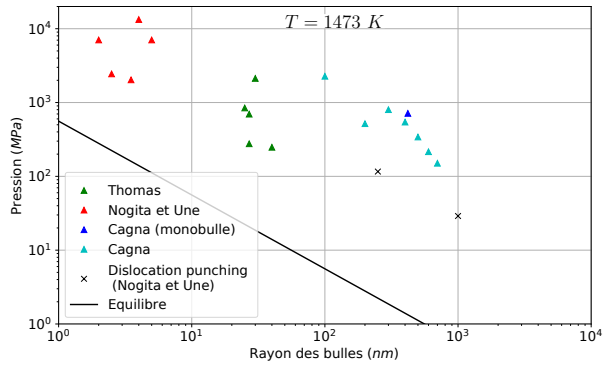


FIGURE 1.20 – Évolution log-log de la pression (en MPa) mesurée dans les cavités en fonction de leur rayon (en nm) à $1473 K$.

Par la suite, ces pressions sont bornées en fonction des volumes molaires représentatifs des différentes populations de bulles d'après la modélisation.

21. Cette valeur n'est pas indiquée explicitement dans [140] mais a été déduite des pressions, des températures et de l'expression de l'équation d'état.

22. non précisée

24. Seules les évaluations (triangles et croix) pour lesquels la pression des cavités peut être reliée à leur taille sont reportées.

24. avec γ qui est calculé par l'équation suivante [125] :

$$\gamma = 0.41 (0.85 - 1.40 \times 10^{-4} (T - 273)) \text{ J.m}^{-2}. \quad (1.36)$$

1.3.4 Quantification des bornes de la pression

1.3.4.1 Définition du domaine de mesures $P - V - T$

Dans un premier temps, les mesures $P - V - T$ réalisées sur du xénon (reportées dans le tableau 1.1) sont utilisées afin de définir les encadrements de la pression calculée par l'équation d'état d'ALCYONE. L'évolution de ces bornes en fonction du volume molaire est ensuite déterminée et mise en relation avec les mesures réalisées sur combustibles irradiés (voir tableau 1.2) de manière à évaluer l'encadrement des pressions pour une population de bulles donnée.

Les résultats de simulation, qui seront présentés plus loin (cf. partie 1.4.2.5), permettent d'établir le domaine d'intérêt sur lequel ces bornes doivent être déterminées, à savoir, l'intervalle de volume molaire représentatif des bulles intra et intergranulaires (compris entre 22.5 et 300 $\text{cm}^3.\text{mol}^{-1}$) et de température attendue lors du transitoire thermique (de 300 à 1473 K). Ce domaine est représenté par l'encadré jaune sur la figure 1.21 sur laquelle sont reportées les mesures $P - V - T$ disponibles (triangles). Les mesures n'appartenant pas à ce domaine (triangles situés en dehors de l'encadré jaune) ne sont pas retenues dans l'analyse, i.e. les mesures de Ramsay et Travers, Beattie et al. (réalisées à un volume molaire supérieur à 500 $\text{cm}^3.\text{mol}^{-1}$, voir tableau 1.1) et de Whalley et al. (triangles bleus). Comme l'illustre la figure 1.21, le domaine d'intérêt est bien plus large que le domaine exploré expérimentalement, c'est pourquoi les extrapolations de Ronchi, qui sont définies sur domaine très étendu (encadré gris), sont également retenues pour déterminer un encadrement de la pression.

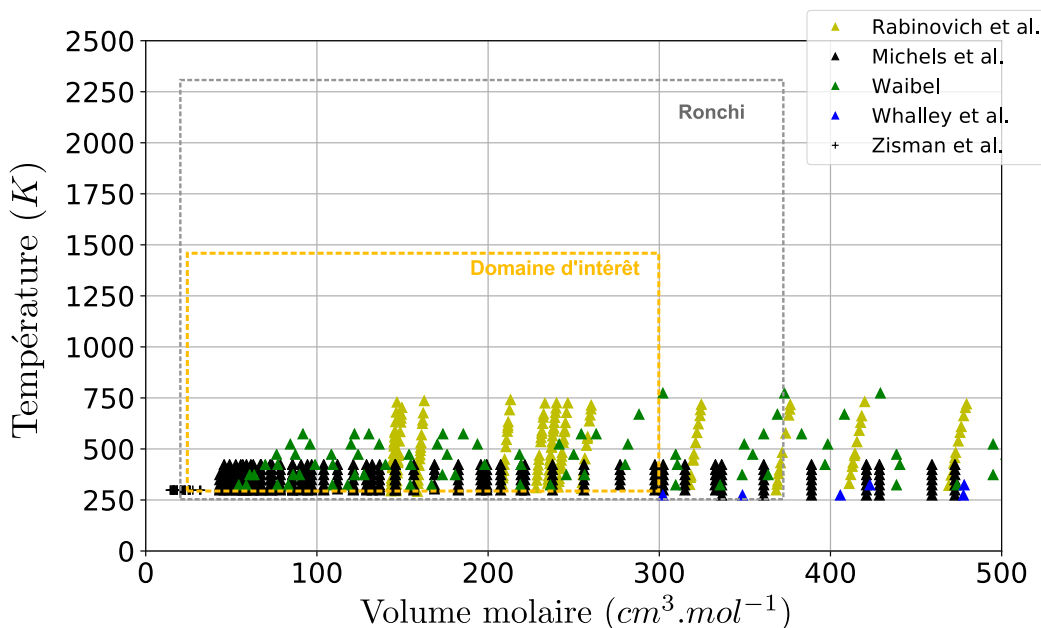


FIGURE 1.21 – Présentation des domaines de température et de volumes molaires pour lesquels la pression est évaluée.

Par la suite, cet encadrement est défini sur le domaine d'intérêt, en particulier :

- Pour l'ensemble des volumes molaires (de 22.5 à 300 $\text{cm}^3.\text{mol}^{-1}$), à des températures constantes :

1.3. Positionnement des équations d'état par rapport aux données existantes dans la littérature

- À 303 K , car les évaluations expérimentales sont réalisées à température ambiante²⁵. À cette température, il existe suffisamment de données pour que cet encadrement soient déterminé à partir des mesures $P - V - T$ et des extrapolations.
 - À 1473 K , afin d'estimer l'encadrement à la température maximale du transitoire thermique et d'utiliser ces valeurs dans le cadre de l'estimation de la sur-contrainte engendrée par les cavités (cf. partie 1.5) lors du transitoire. À cette température, les données sont manquantes. Ces bornes sont donc déterminées à partir des extrapolations de Ronchi d'une part, et des pressions calculées par l'équation de Soave (1.22) pour un volume molaire de plus de $45 \text{ cm}^3.\text{mol}^{-1}$, d'autre part, car cette équation est en accord avec les valeurs de référence (mesures et/ou extrapolations) sur cet intervalle (voir partie 1.3.2.1).
- Pour l'ensemble des températures rencontrées en transitoire (entre 300 et 1473 K), aux volumes molaires représentatifs des bulles intra et intergranulaires les plus denses d'après la modélisation (soit. 53.9 et $25 \text{ cm}^3.\text{mol}^{-1}$).

1.3.4.2 Détermination de l'évolution des bornes de la pression

Dans cette partie, nous cherchons à déterminer l'évolution de l'écart entre les bornes de la pression, écart défini par :

$$\Delta P = P^{sup} - P^{inf} \quad (1.37)$$

avec P^{sup} et P^{inf} les bornes supérieures et inférieures de la pression respectivement. La méthodologie définie dans la section précédente est à présent appliquée. Ainsi à température ambiante (303 K), ces bornes sont définies par les équations suivantes :

$$P^{sup} = \max(P_{AL}, P_{mes}) \quad (1.38)$$

$$P^{inf} = \min(P_{AL}, P_{mes}) \quad (1.39)$$

avec P_{AL} la pression calculée par l'équation d'ALCYONE et P_{mes} la pression des mesures $P - V - T$.

Au delà de 423 K , ces bornes sont définies par les équations suivantes :

$$P^{sup} = \max(P_{AL}, P_S, P_R) \quad (1.40)$$

$$P^{inf} = \min(P_{AL}, P_S, P_R) \quad (1.41)$$

où P_S est la pression calculée par l'équation d'état de Soave et P_R la pression extrapolée par Ronchi.

Pour des volumes molaires de plus de $100 \text{ cm}^3.\text{mol}^{-1}$ et pour l'ensemble des températures atteintes par le combustible en transitoire, la pression calculée par l'équation d'ALCYONE est en accord avec les pressions qu'elles soient mesurées, calculées par l'équation de Soave ou extrapolées par Ronchi (quelques MPa d'écart pour des pressions calculées inférieures à 200 MPa), comme démontré dans l'annexe A.1. Ainsi, les bornes supérieures et inférieures de la pression calculée par l'équation d'ALCYONE sont quasiment confondues sur ce domaine de température et de volume molaire. L'encadrement de la pression n'a donc un intérêt qu'à bas volume molaire (moins de $100 \text{ cm}^3.\text{mol}^{-1}$).

²⁵. Les évaluations de la pression dans les cavités de Cagna [22] sont réalisées à une température similaire de 300 K .

Les valeurs inférieures à $100 \text{ cm}^3.\text{mol}^{-1}$ définissent donc le domaine de volumes molaires d'intérêt dans le cadre de l'estimation d'un encadrement de la pression calculée par l'équation d'ALCYONE. Nous proposons de décomposer ce domaine en deux sous-domaines :

- l'intervalle des volumes molaires intermédiaires entre 40 et $100 \text{ cm}^3.\text{mol}^{-1}$, intervalle pour lequel les pressions attendues sont de l'ordre de la dizaine voire la centaine de MPa à température ambiante (voir figure 1.16). Ce sous-domaine de volume molaire est représentatif de la majorité des évaluations réalisées sur les bulles de gaz de fission (voir tableau 1.3).
- L'intervalle des très bas volumes molaires entre 22.5 et $40 \text{ cm}^3.\text{mol}^{-1}$, intervalle pour lequel les pressions sont de l'ordre de la centaine de MPa voire de la dizaine de GPa (voir figure 1.16). Ce sous-domaine de volume molaire est représentatif des bulles nanométriques les plus denses d'après les mesures (tableau 1.3).

Par la suite, l'encadrement de la pression est déterminé pour les bornes de ces deux sous-domaines de volume molaire. Afin d'associer les valeurs calculées à une population de bulles données, ces valeurs sont également évaluées aux volumes molaires mesurés dans les bulles de gaz de fission (voir tableau 1.3). Les valeurs retenues sont les suivantes²⁶ :

- Les mesures de Mogensen et al. [90] pour des bulles intergranulaires submicrométriques de la zone intermédiaire (la valeur de $93 \text{ cm}^3.\text{mol}^{-1}$ est retenue).
- Les mesures de Thomas [130] pour des bulles nanométriques ($84 \text{ cm}^3.\text{mol}^{-1}$).
- Les mesures de Walker et al. [140] pour des bulles de rim submicrométriques ($75 \text{ cm}^3.\text{mol}^{-1}$).
- Les mesures de Cagna [22], pour des bulles intragranulaires de précipitation de la zone centrale ($50 \text{ cm}^3.\text{mol}^{-1}$).
- Les mesures de Nogita et Une [98] pour des bulles nanométriques (la valeur de 22.5 et $35.5 \text{ cm}^3.\text{mol}^{-1}$ sont retenues).

Les pressions calculées par l'équation d'ALCYONE et leurs encadrements à 303 et 1473 K sont reportés dans les tableaux 1.4 et 1.5 respectivement (l'évolution de ces pressions sont détaillées dans l'annexe A.2). Dans ces tableaux, les écarts relatifs entre la pression calculée par l'équation d'ALCYONE et les bornes supérieures et inférieures de cette pression sont également reportées, ces écarts relatifs sont définis respectivement par les équations (1.42) et (1.43) :

$$\frac{\Delta P^+}{P_{AL}} = \frac{P_{AL} - P^{sup}}{P_{AL}} \quad (1.42)$$

$$\frac{\Delta P^-}{P_{AL}} = \frac{P^{inf} - P_{AL}}{P_{AL}} \quad (1.43)$$

26. Les valeurs reportées sont retenues de manière à exclure les volumes molaires supérieurs à $100 \text{ cm}^3.\text{mol}^{-1}$ et les valeurs redondantes (e.g. Mogensen et al. mesurent des volumes molaires proches des $75 \text{ cm}^3.\text{mol}^{-1}$ obtenus par Walker et al., ces valeurs sont donc exclues)

1.3. Positionnement des équations d'état par rapport aux données existantes dans la littérature

	V_m (en $cm^3.mol^{-1}$)	P_{AL} (en MPa)	$\frac{\Delta P^+}{P_{AL}}$ (en %) $\frac{\Delta P^-}{P_{AL}}$ (en %)	ΔP (en MPa)
Intervalle	Volumes molaires d'intérêt			
volumes molaires intermédiaires (borne haute)	100	8	+3 -43	3
Très bas volumes molaires (borne haute)	40	480	+7 -22	140
Très bas volumes molaires (borne basse)	22.5	12100	+3 -40	5260
Auteur(s) (population)	Volumes molaires mesurés			
Mogensen et al. (inter)	93	14	+0 -38	5
Thomas (nanométriques)	84	34	+0 -73	25
Walker et al. (rim)	75	70	+0 -84	59
Cagna (intra précipitation)	50	240	+0 -65	157
Nogita et Une (nanométriques)	35.5	800	+27 -19	375
	22.5	12110	+3 -40	5260

TABLE 1.4 – Résumé des pressions (évaluations et encadrements) à 303 K sur le domaine d'intérêt et aux volumes molaires mesurés expérimentalement.

1.3. Positionnement des équations d'état par rapport aux données existantes dans la littérature

	V_m (en $cm^3.mol^{-1}$)	P_{AL} (en MPa)	$\frac{\Delta P^+}{P_{AL}}$ / $\frac{\Delta P^-}{P_{AL}}$ (en %)	ΔP (en MPa)
Intervalle	Volumes molaires d'intérêt			
volumes molaires intermédiaires (borne haute)	100	202	+0 -8	16
Très bas volumes molaires (borne haute)	40	1426	+7 -0	113
Très bas volumes molaires (borne basse)	22.5	13300	+32 -0	4375
Auteur(s) (population)	Volumes molaires mesurés			
Mogensen et al. (inter)	93	236	+0 -11	27
Thomas (nanométriques)	84	300	+0 -16	47
Walker et al. (rim)	75	370	+0 -17	65
Cagna (intra précipitation)	50	807	+4 -1	50
Nogita et Une (nanométriques)	35.5	2120	+15 -0	320
	22.5	13330	+32 -0	4375

TABLE 1.5 – Résumé des pressions (évaluations et encadrements) à 1473 K sur le domaine d'intérêt et aux volumes molaires mesurés expérimentalement.

D'après ces tableaux, aux volumes molaires intermédiaires (entre 40 et 100 $cm^3.mol^{-1}$) représentatifs des bulles submicrométriques les plus denses d'après les mesures, l'évolution des encadrements aux différentes températures est la suivante :

- À température ambiante (voir tableau 1.4), les écarts relatifs sont maximales (entre -43 et -84 % pour des pressions de l'ordre de la dizaine à la centaine de MPa). Ces écarts sont dus à la surestimation des mesures $P - V - T$ par l'équation d'ALCYONE sur cet intervalle (voir annexe A.2).
- À 1473 K (voir tableau 1.4, température à laquelle les bornes sont calculées à partir des pressions calculées par l'équation de Soave et des extrapolations de Ronchi), les écarts relatifs sont faibles (moins de 20 % pour des pressions de plusieurs centaines de MPa) car les pressions calculées et extrapolées sont proches.

Aux très bas volumes molaires (de 22.5 à 40 $cm^3.mol^{-1}$), pour les différentes températures, les écarts relatifs sont modérément importants (entre 15 et 40 % pour des pressions de l'ordre du GPa voire de la dizaine de GPa).

Dans le cadre de notre étude, nous souhaitons en particulier estimer la sur-contrainte engendrée par les bulles intragranulaires. Dans la modélisation, le volume molaire de ces bulles est compris entre deux valeurs asymptotiques, à savoir, environ 25 $cm^3.mol^{-1}$ pour

1.3. Positionnement des équations d'état par rapport aux données existantes dans la littérature

les bulles nanométriques et $50 \text{ cm}^3.\text{mol}^{-1}$ pour les bulles submicrométriques de la zone de précipitation (valeur également représentative des bulles intergranulaires les plus denses). Ainsi, l'évolution des écarts entre les bornes de la pression en fonction de la température attendue en transitoire est reportée pour des volumes molaires similaires²⁷ ci-dessous.

À $53.9 \text{ cm}^3.\text{mol}^{-1}$, les évolutions en fonction de la température des pressions calculées par l'équation d'ALCYONE (courbe rouge), Soave (courbe verte) et extrapolées par Ronchi (losanges bleus) sont reportées figure 1.22. Pour ce volume molaire, les valeurs calculées par l'équation d'ALCYONE définissent les bornes supérieures de la pression (cette pression est systématiquement supérieure aux autres valeurs). D'après cette figure, l'écart entre les bornes (courbe violette sur la figure 1.22) diminue globalement en fonction de la température et varie de 50 à 130 MPa.

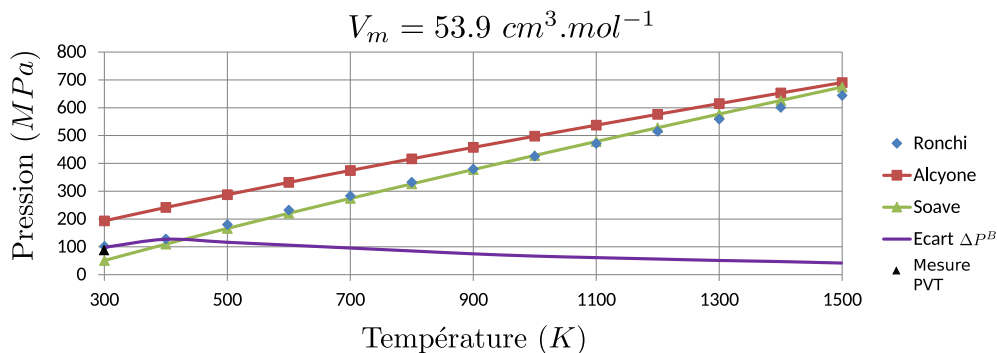


FIGURE 1.22 – Pression (en MPa) en fonction de la température (en K) à $53.9 \text{ cm}^3.\text{mol}^{-1}$.

L'écart relatif décroît avec la température de 54 % à 400 K à 7 % à 1473 K.

À $25 \text{ cm}^3.\text{mol}^{-1}$, l'évolution des pressions est représentée sur la figure 1.23. Dans ce cas, la valeur calculée par ALCYONE définit la borne basse de la pression (la pression calculée par l'équation d'ALCYONE est systématiquement inférieure aux valeurs de Ronchi et l'équation de Soave n'est pas définie pour ce volume molaire). L'écart entre les bornes (courbe violette) augmente en fonction de la température au-delà de 400 K et varie entre 700 MPa et 2.5 GPa (voir l'axe des ordonnées à droite).

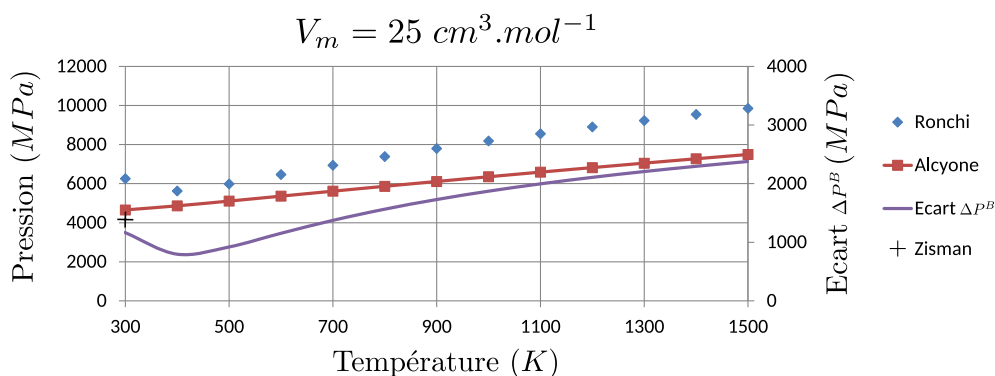


FIGURE 1.23 – Pression (en MPa) en fonction de la température (en K) à $25 \text{ cm}^3.\text{mol}^{-1}$.

27. Les volumes molaires retenus sont ceux pour lesquels les pressions extrapolées ont été reportées par Ronchi dans [121].

L'écart relatif augmente avec la température de 16 % à 400 K jusqu'à 32 % à 1473 K.

1.3.5 Conclusions

Dans cette section, la revue des mesures $P - V - T$ réalisées sur du xénon met en évidence un manque de données pour les températures attendues en transitoire, la pression calculée dans les bulles lors d'un transitoire thermique ne peut donc être validée systématiquement. Ainsi, nous proposons d'encadrer la pression calculée par l'équation d'ALCYONE par des bornes. Ces bornes sont définies à partir, des mesures $P - V - T$ à température ambiante et à partir des pressions extrapolées par Ronchi et/ou calculées par l'équation de Soave aux températures attendues en transitoire.

D'après l'analyse, les pressions (estimations et encadrements) ont été caractérisées en fonction du volume molaire :

- Pour les bulles les moins denses ($V_m > 100 \text{ cm}^3.\text{mol}^{-1}$), les bornes sont quasiment confondues quelle que soit la température atteinte pendant le transitoire thermique. La pression calculée dans ces bulles est donc estimée avec une bonne confiance. Elle reste relativement basse à 1473 K (valeur maximale de 200 MPa à cette température).
- Pour les volumes molaires intermédiaires (de 40 à 100 $\text{cm}^3.\text{mol}^{-1}$, représentatifs des bulles submicrométriques les plus denses d'après les mesures, à température ambiante), l'écart entre les bornes de la pression calculée par l'équation d'ALCYONE à température ambiante est relativement important (entre 38 et 84 % d'écart relatif pour des pressions de l'ordre de la dizaine, voire de la centaine de MPa). À cette température, ces écarts sont dus au fait que l'équation d'ALCYONE surestime les données $P - V - T$. En revanche, à la température maximale du transitoire (1473 K), ces écarts sont relativement faibles (4 – 17 % pour des pressions de l'ordre de plusieurs centaines de MPa voire du GPa). À cette température, ces écarts sont faibles car les pressions calculées et extrapolées sont proches.
- À très bas volume molaire (entre 22.5 et 40 $\text{cm}^3.\text{mol}^{-1}$, volume molaire représentatif des bulles nanométriques les plus denses), les écarts entre les bornes de la pression sont modérément importants (entre 15 et 40 % d'écart relatif pour des pressions de l'ordre du GPa voire de la dizaine de GPa) et ce quelle que soit la température.

En fonction de la température et pour des volumes molaires représentatifs des bulles intragranulaires d'après la modélisation (comme nous le verrons plus loin), nos conclusions sont les suivantes :

- Au volume molaire maximal de ces bulles (environ 50 $\text{cm}^3.\text{mol}^{-1}$), l'écart entre les bornes de la pression calculée par l'équation d'ALCYONE est relativement important à 303 K (54 % d'écart relatif pour 200 MPa) et diminue en fonction de la température, jusqu'à devenir faible à 1473 K (7 % d'écart relatif pour une pression de 700 MPa).
- Au volume molaire minimal de ces bulles (environ 25 $\text{cm}^3.\text{mol}^{-1}$), l'écart entre les bornes est modérément important et augmente en fonction de la température (l'écart relatif augmente de 16 % à 400 K jusqu'à 32 % à 1473 K pour des pressions comprises entre 4 et 8 GPa).

1.3. Positionnement des équations d'état par rapport aux données existantes dans la littérature

En perspectives, et compte tenu des fortes incertitudes identifiées dans ce cas, cette étude doit être étendue en prenant en compte d'autres équations applicables aux volumes molaires rencontrés dans les cavités les plus denses [95]. Notamment, d'après l'état de l'art des mesures de volume molaire dans les cavités, le xénon peut être sous forme solide dans les bulles nanométriques. D'après les simulations atomistiques de Jelea [68], le xénon dans les cavités de 2 nm est solide à 1000 K et en phase vitreuse à plus haute température (2000 K). Sur la base de ces calculs, Jelea [67] propose une équation d'état afin de déterminer la pression dans ces bulles. Dans le cadre de l'estimation des bornes de la pression, l'utilisation d'équations d'état adaptées à décrire l'état de pressurisation du xénon solide, comme celle de Jelea, pourrait donc permettre de préciser les valeurs de ces bornes.

D'après cette analyse, la pression des cavités est élevée, par conséquent, l'intensité de la traction des bulles est potentiellement importante. Afin d'estimer cette contrainte, par la suite, la pression qui règne dans les bulles est estimée à partir d'un calcul de l'irradiation de base d'un crayon combustible et des mesures post-irradiatoires réalisées sur ce même crayon.

1.4 Estimation de la pression dans les bulles de gaz de fission sur la base des données de simulation et des résultats des examens post-irradiatoires

Pour estimer la sur-contrainte de traction induite par la sur-pressurisation des bulles en situation de transitoire, il est nécessaire de déterminer la pression qui règne dans ces bulles aux températures atteintes par le combustible lors de ce transitoire d'une part (équation d'état), et la porosité associée à ces cavités d'autre part. Afin d'estimer ces quantités, la simulation de l'irradiation de base d'un crayon UO_2 présentant un fort taux de combustion a été réalisée avec l'OCS ALCYONE. Des examens fins (MEB, SIMS, microsondes, ...) réalisés récemment sur ce même crayon ont permis de mesurer les quantités d'intérêt. Dans le cadre de cette étude, il s'agit donc de valider le calcul de la pression et de la porosité par rapport à l'expérience afin de préciser l'intensité de la sur-contrainte de traction des bulles.

Tout d'abord, les résultats de mesures expérimentales réalisées sur le crayon étudié sont présentés. Par la suite, les modèles retenus pour la simulation de l'irradiation de base du crayon sont mentionnés et les spécificités de la modélisation des gaz de fission sont brièvement rappelées. Les résultats de la simulation sont ensuite confrontés aux différents examens intégraux (profilométrie, perçage, ...) et mesures fines de caractérisation du combustible (métallographie, MEB, SIMS, microsonde).

Cette confrontation permet de quantifier les écarts calcul-mesure concernant la porosité, la quantité de gaz et le volume molaire des bulles. Pour la comparaison, le volume molaire est calculé en considérant que l'ensemble des bulles submicrométriques (intra et intergranulaires) ne forme qu'une seule population (ce qui revient à considérer que le gaz précipité dans ces bulles est réparti dans une famille de cavités ayant une porosité homogène). Les bulles nanométriques sont exclues du calcul. Cette méthode est retenue car les examens réalisés permettent de mesurer la quantité de gaz précipité mais pas la répartition de ce gaz au sein des différentes populations. De plus, ces examens ne permettent pas de caractériser les cavités nanométriques.

Connaissant les écarts entre le volume molaire calculé et mesuré, l'évolution radiale de la pression (évaluation et encadrement) dans les bulles intra et intergranulaires est ensuite déterminée pour une côte axiale donnée. Pour ce faire, nous proposons d'estimer la pression des cavités à partir des quantités jugées les plus pertinentes d'après la comparaison calcul-mesure (porosité et quantité de gaz dans les cavités). Ces pressions seront utilisées dans la section 1.5 afin de déterminer la sur-contrainte de traction de l'ensemble des populations de bulles et au chapitre 2 afin de déterminer le chargement appliqué par les bulles intergranulaires.

1.4.1 Mesures expérimentales

L'objet de l'étude est un crayon UO_2 fort taux de combustion, crayon sur lequel les mesures suivantes ont été réalisées :

- Des examens post-irradiatoires non-destructifs qui permettent de mesurer les évolutions géométriques du crayon et les épaisseurs de zircone. Les mesures du diamètre et l'allongement du crayon sont comparées au calcul en section 1.4.2.2.

1.4. Estimation de la pression dans les bulles de gaz de fission sur la base des données de simulation et des résultats des examens post-irradiatoires

- Un perçage qui permet d'évaluer la quantité totale de gaz relâchés par le combustible. Ces examens permettent de valider le calcul de la fraction de gaz relâchés en section 1.4.2.2.
- Des examens métallographiques qui permettent d'estimer localement, l'état microstructural du combustible (en terme d'étendue de la zone de précipitation gazeuse et d'épaisseur de rim) et l'épaisseur des couches d'oxydes de la gaine.
- Une macrographie au microscope optique, réalisées à la côte axiale des mesures de microanalyses, qui permet de visualiser les fissures et la porosité de très grande taille du combustible (au delà de la dizaine de microns). Ces mesures permettent également d'évaluer l'épaisseur de rim "optique" qui est comparée au calcul en section 1.4.2.2.
- Des observations MEB qui donnent la porosité en terme de distribution de tailles. Ces mesures sont comparées aux porosités calculées en section 1.4.2.3.
- Un examen microsonde qui donne une évaluation du gaz en rétention dans le combustible et permet de mesurer l'étendue de la zone de précipitation des gaz de fission. Ces mesures sont comparées aux quantités de gaz calculées en section 1.4.2.4.
- Un examen SIMS qui permet de mesurer le gaz en rétention dans les bulles submicrométriques et le gaz dissous et/ou nano-précipité. Ces mesures donnent des éléments de validation du calcul du relâchement et de la répartition du gaz au sein des populations de bulles en section 1.4.2.4.
- Des observations MEB-FIB grâce auxquelles la forme des bulles a été caractérisée. L'impact de la forme des bulles sur l'intensité de la sur-contrainte de traction est étudié en section 1.5.
- Un examen EBSD qui permet de mesurer l'orientation locale du cristal. Cet examen n'est pas exploité par la suite dans la comparaison calcul-mesure car l'orientation des grains ne fait pas partie des valeurs calculées par le modèle.

Les résultats de ces examens sont présentés dans cette section.

1.4. Estimation de la pression dans les bulles de gaz de fission sur la base des données de simulation et des résultats des examens post-irradiatoires

1.4.1.1 Mesures post-irradiatoires non-destructives et perçage

Les mesures non-destructives du crayon suite à son irradiation sont présentées dans le tableau 1.6. Ces examens mettent en évidence une zone d'oxyde desquamée à la côte axiale 3086 *mm/bcf*²⁸, côte à laquelle l'épaisseur de zircone est maximale.

Epaisseur moyenne de zircone par courant de Foucault à la côte axiale 1786 – 3336 <i>mm/bcf</i> (μm)	90 (110 max)
Allongement global du crayon (% de déformation axiale)	1.09
Allongement colonne (% de déformation axiale)	0.96
Diamètre corrigé moyen sur l'ensemble du crayon (<i>mm</i>)	9.43
Hauteur de plis maximale (μm)	15
Epaisseur de zircone maximale (μm)	15

TABLE 1.6 – Résultats des examens non-destructifs

Un perçage du crayon a été réalisé afin de quantifier les niveaux de relâchement final et de pression interne du crayon. Les résultats de cet examen sont résumés dans le tableau 1.7. La fraction de gaz relâchés est déterminée en calculant la création par une formule simplifiée.

Production de gaz à 20° C (cm^3)	3280 ± 170.9
Pression finale à 20° C et 1 atm (<i>bar</i>)	41.5 ± 14.5
Volume libre final (cm^3)	12.6 ± 1.5
Volume de gaz recueillis à 20° C et 1 bar (cm^3)	524.8 ± 4.8
Volume d'He récupéré à 20° C et 1 bar (cm^3)	430.03 ± 4.8
Volume de Xe+Kr récupérés à 20° C et 1 bar (cm^3)	90.06 ± 0.85
Rapport Xe/Kr	9.86
Fraction de gaz relâchés (en % de la création)	2.75 ± 0.19

TABLE 1.7 – Résultats des mesures de perçage.

28. /*bcf* désignant la position du bas de la colonne fissile du crayon.

1.4. Estimation de la pression dans les bulles de gaz de fission sur la base des données de simulation et des résultats des examens post-irradiatoires

1.4.1.2 Mesures post-irradiatoires destructives

Les examens métallographiques réalisés aux côtes 3005 – 3040 mm/bcf ²⁸ (comportant des examens sur une coupe radiale et une coupe axiale) avaient pour objectif de caractériser l'état de corrosion de la gaine et la microstructure du combustible. Les résultats de la métallographie sont comparés aux résultats de macrographie au microscope optique et de microanalyses réalisées sur une section située à la côte 1304 mm/bcf (échantillon prélevé entre 1302 et 1306 mm/bcf) dans le tableau 1.8. Ces examens, réalisés à des côtes différentes, donnent des résultats similaires en termes d'épaisseur de rim, de rayon de la zone de précipitation et de taux de combustion.

	Examens métallographiques (3005 – 3040 mm/bcf)	Microanalyses (1304 mm/bcf)
Epaisseur de rim "optique" (μm)	90 – 120	60
Rayon de la zone de précipitation (% du rayon pastille)	54 %	52 %
Epaisseur moyenne de la couche de zircone (μm)	80	-
Epaisseur d'oxyde externe (μm)	70 – 80	-
Epaisseur d'oxyde interne (μm)	6 – 11	-

TABLE 1.8 – Résultats des examens métallographiques et des microanalyses.

L'ensemble des examens présentés par la suite concernent l'échantillon dont la section est située à la côte 1304 mm/bcf .

La macrographie au microscope optique réalisée sur cet échantillon est présentée en figure 1.24. L'échantillon présente des fissures radiales formant 4 fragments. Des fissures circonférentielles très fines sont également observables.

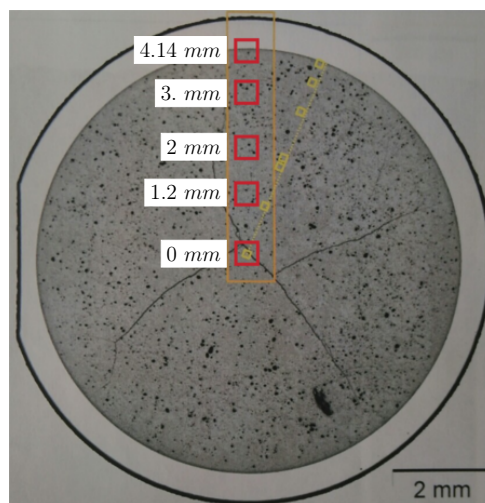


FIGURE 1.24 – Macrographie de la coupe radiale du combustible irradié.

1.4. Estimation de la pression dans les bulles de gaz de fission sur la base des données de simulation et des résultats des examens post-irradiatoires

Les examens EBSD réalisés sur cet échantillon permettent de caractériser l'orientation du cristal à différentes positions dans le combustible. D'après les résultats de ces examens :

- Dans le rim (4.08 – 414 mm), comme attendu, la restructuration a eu pour effet de former de nouveaux grains suite à la subdivision des grains originels. Ces nouveaux grains ont une orientation très différente entre eux.
- À un rayon pastille compris entre 3.1 et 4.08 mm , la restructuration est toujours visible ponctuellement, mais n'est pas généralisée à l'ensemble des grains comme dans le rim.
- En périphérie de la zone centrale (à 1.2 mm), une forte dispersion des orientations locales au sein des grains est observée et des sous-joints de grains sont visibles.
- Au centre (à 0 et 0.6 mm), la dispersion des orientations locales au sein des grains est plus faible qu'en périphérie de la zone centrale et la désorientation des sous-joints de grains est très faible.

Les mesures MEB et MEB-FIB réalisées permettent de caractériser la porosité. Les examens MEB sont réalisés sur une coupe et donnent une image 2D des pores. Les examens MEB-FIB consistent à abraser successivement la surface de l'échantillon et récupérer une image MEB 2D à chaque étape. La série d'images est ensuite traitée afin de reconstruire une image 3D des pores observés.

Afin de mesurer la porosité de manière quantitative, les mesures MEB-FIB ne peuvent pas être utilisées car elles sont réalisées sur un échantillon trop petit pour être représentatif²⁹. De manière à exploiter les images MEB 2D, les pores sont supposés être répartis de manière aléatoire, isotrope et homogène³⁰, auquel cas le principe de Delesse [6] s'applique et donne (quelle que soit la forme des porosités) :

$$f_v = f'_s \quad (1.44)$$

avec f'_s la fraction surfacique de la porosité issue des images 2D et f_v la fraction volumique réelle des pores³¹.

Par la suite, la porosité totale est définie comme la somme de la porosité des bulles dont le DCE (Diamètre Circulaire Equivalent)³² est inférieur à 3 μm , appelée porosité fine et celles dont le DCE est supérieur à 3 μm , appelée porosité de grande taille. De par la résolution minimale du MEB, qui est de 0.03 μm , **les bulles nanométriques sont exclues de l'analyse et la porosité fine mesurée est donc comprise entre 0.03³³ et 3 μm .**

29. Pour que l'échantillon soit considéré comme représentatif, il faut que le volume échantillonné respecte les conditions d'ergodicité et de stationnarité. L'ergodicité signifie que la moyenne de la propriété mesurée sur l'échantillon (en l'occurrence la porosité) est égale à la moyenne de cette propriété sur l'ensemble du domaine. La stationnarité signifie que la moyenne de la propriété est inchangée lorsque le volume est translaté dans l'espace.

30. Ces hypothèses sont remises en question par la discussion sur la répartition des porosités abordée par la suite, mais elles sont néanmoins considérées comme valides ici.

31. En dehors de la question de la représentativité des observations MEB et MEB-FIB, il est à noter que d'après l'équation (1.44) (sous réserve de validité des hypothèses mentionnées) une mesure 3D n'est pas nécessairement plus précise qu'une mesure 2D.

32. Le DCE est le diamètre d'un cercle dont la surface est la même que le pore observé au MEB.

33. La résolution du MEB est d'environ 12 nm , mais seuls les pores dont le DCE est supérieur à 30 nm sont considérés dans la mesure.

1.4. Estimation de la pression dans les bulles de gaz de fission sur la base des données de simulation et des résultats des examens post-irradiatoires

L'évolution radiale de la porosité totale (carrés violets) et de la porosité fine (carrés orange) est illustrée sur la figure 1.25. D'après cette figure :

- La variation radiale de porosité totale est cohérente avec les données de Spino et al. [129] (figure 1.10).
- La porosité fine est plus élevée en zone centrale (entre 2 et 3 % à un rayon pastille compris entre 0 et 2.16 mm) qu'en zone intermédiaire (entre 1 et 2 % à un rayon pastille compris entre 2.16 et 3.5 mm) ce qui est le signe d'une précipitation gazeuse plus importante au centre.
- Dans le rim (4.08 – 4.14 mm), la porosité totale est maximale et la quasi-totalité de cette porosité est sous forme de porosité fine.

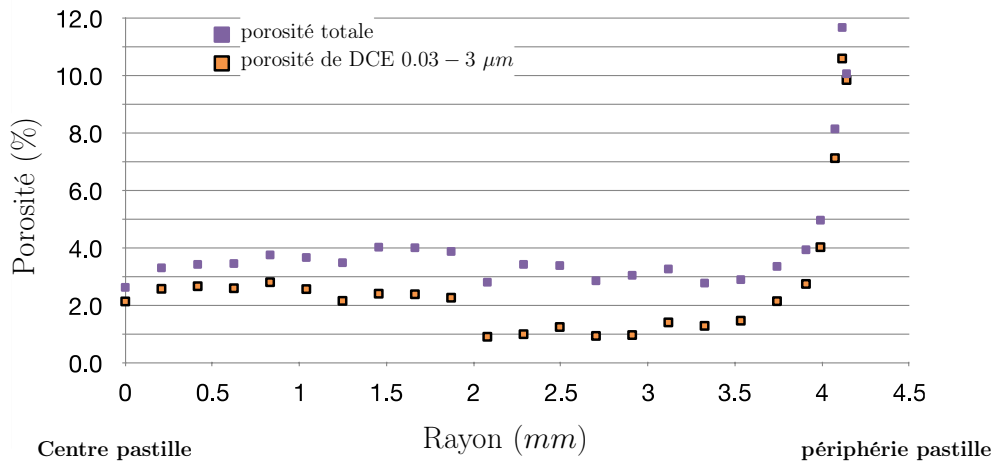


FIGURE 1.25 – Évolution de la porosité (en %) en fonction du rayon pastille (en mm) pour différentes classes de tailles.

Notons que la mesure de la porosité prend en compte les bulles de gaz de fission mais également les cavités issues de la fabrication de la pastille. En début d'irradiation, seule une partie de la porosité de fabrication (celles de moins de 1 μm) [46] disparaît (densification du combustible). La part de la porosité de fabrication restante en fin d'irradiation de base (donc de taille supérieure à 1 μm) ne peut pas être distinguée de la porosité apparaissant avec l'irradiation et d'une taille comparable.

Concernant la porosité fine, les mesures ont été réalisées sans distinguer la porosité intra-granulaire de la porosité intergranulaire. Néanmoins, l'observation des images MEB (comme illustré figure 1.26) permet de distinguer les populations en zone centrale (entre 0 et 2.16 mm) :

- Les bulles dont le DCE³² est compris entre 0.03 et 1 μm sont majoritairement des bulles intragranulaires et
- celles dont le DCE est compris entre 1 et 3 μm sont majoritairement des bulles intergranulaires.

Hors de la zone centrale, la taille des cavités permettant de discriminer les bulles intra et intergranulaires n'a pas été déterminée expérimentalement.

1.4. Estimation de la pression dans les bulles de gaz de fission sur la base des données de simulation et des résultats des examens post-irradiatoires

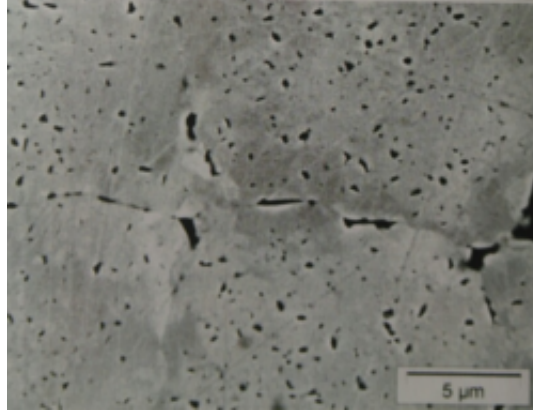


FIGURE 1.26 – Image 2D MEB réalisées à 0 mm.

D'après l'analyse de la distribution en taille de la porosité fine, illustrée figure 1.27 à différentes positions radiales (les histogrammes rouges, bleus et verts représentent la distribution en taille de la porosité au centre, en périphérie de la zone centrale et dans le rim respectivement) :

- La taille des bulles moyenne, pondérée par la porosité³⁴, au centre (de 0.85 μm à un rayon pastille de 0 mm, voir les tirets rouges sur la figure 1.27) est légèrement plus faible qu'en périphérie de la zone centrale (de 0.86 μm à un rayon pastille de 1.66 mm, voir les tirets bleus), alors que les valeurs de la porosité fine à ces deux positions sont proches (entre 2.13 % au centre et 2.38 en périphérie de la zone centrale).
- La taille moyenne des bulles est maximale dans le rim (à un rayon pastille de 4.1 mm), avec une valeur de plus de 0.9 μm (tirets noir).

Cette distribution en taille de la porosité au centre, en périphérie de la zone centrale et dans le rim est illustré sur la figure 1.27 par les histogrammes rouges, bleus et verts respectivement.

34. Cette est calculée comme : $\langle D_b \rangle = \frac{\sum_i D_b^i f_v^i}{f_v^{tot}}$ avec D_b^i et f_v^i respectivement le diamètre et la porosité de la $i^{\text{ème}}$ classe de porosité et f_v^{tot} est la porosité fine totale.

1.4. Estimation de la pression dans les bulles de gaz de fission sur la base des données de simulation et des résultats des examens post-irradiatoires

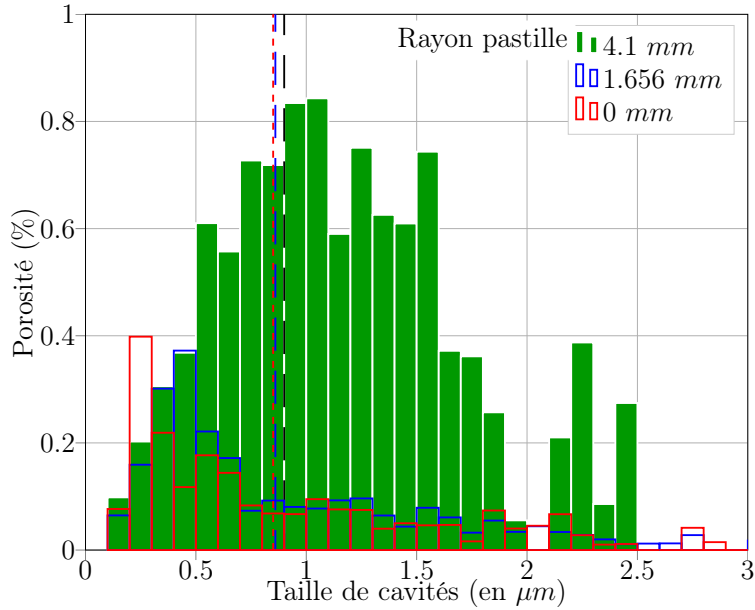


FIGURE 1.27 – Distribution en taille de la porosité de moins de $3 \mu m$ (en DCE) à différentes positions dans la pastille.

L'échantillon a également fait l'objet d'un examen microsonde (La position du rayon analysé est indiquée par la ligne en pointillés jaunes sur la figure 1.24). Ces mesures permettent de détecter uniquement le xénon présent sur une faible profondeur de combustible (moins de $1 \mu m$). Ainsi, les cavités les plus grosses lorsqu'elles sont suffisamment proches de la surface pour être accessibles à la mesure sont ouvertes et sont vidées de leur gaz par l'opération de polissage de l'échantillon. Par conséquent, le gaz contenu dans les cavités dont le diamètre est de plus de $2.5 \mu m$ n'est pas mesuré par la microsonde.

De plus, le gaz relâché hors du combustible ne peut évidemment pas être détecté par la mesure. L'écart entre la création de gaz et la mesure microsonde renseigne donc sur une précipitation de xénon sous forme de bulles et/ou sur l'existence d'un relâchement local.

Comme expliqué en section 1.3.3.1, un complément aux mesures microsonde sont les mesures SIMS (également réalisées le long du rayon indiqué par la ligne en pointillés jaunes sur la figure 1.24), mesures qui permettent de préciser la répartition entre le gaz dissous et/ou nano-précipité et le gaz présent dans les bulles submicrométriques. Ces mesures consistent à abraser la surface du combustible et à mesurer la quantité de gaz relâchée lors de cette opération. Les mesures acquises font l'objet d'un recalage aux mesures microsonde [38] afin d'obtenir une valeur quantitative de la quantité de gaz en rétention dans le combustible.

La répartition entre le gaz dissous (et/ou nano-précipité) et le gaz présent dans les bulles submicrométriques est obtenue à partir d'un traitement de la mesure SIMS. Afin d'illustrer succinctement le processus, un profil de la mesure SIMS au cours du temps (provenant d'une étude ultérieure [22]) est illustré figure 1.28, il y apparaît :

- une ligne de base uniforme (pointillés rouges). Après recalage, la quantité de xénon donnée par cette ligne de base correspond au gaz dissous et/ou nano-précipité.

- Plusieurs pics de forte intensité. Ces pics correspondent au relâchement de gaz lors de l'ouverture de bulles suffisamment grosses [76]. Après recalage, la différence entre la quantité totale de xénon mesurée (déduite de l'intégrale de la courbe bleue) et la quantité comprise dans la ligne de base, permet de déterminer la quantité de xénon dans les bulles submicrométriques.

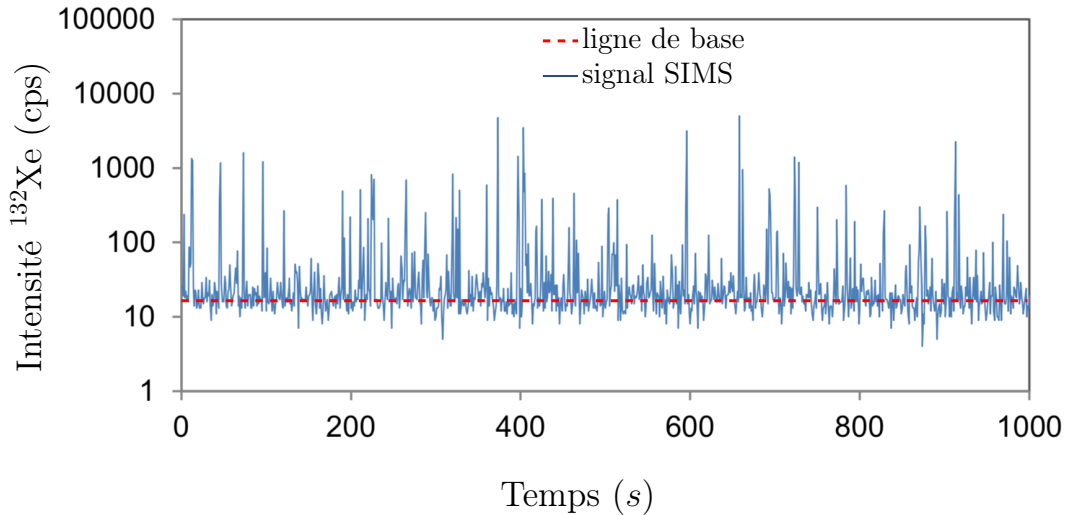


FIGURE 1.28 – Évolution du signal de mesure SIMS du xénon 132 (en nombre coups *cps*) au cours du temps (en *s*) sur un échantillon UO_2 irradié à fort taux de combustion, d'après [22].

Le nombre de pics de forte intensité du SIMS permet également d'estimer le nombre de bulles submicrométriques crevées lors de l'abrasion. Les densités en bulles submicrométriques (de moins de $3 \mu\text{m}$) obtenues par le SIMS (carrés rouges) sont comparées aux densités obtenues par les observations MEB-FIB (triangles verts) sur la figure 1.29. D'après cette figure, les densités détectées par le SIMS sont inférieures aux valeurs obtenues par le MEB-FIB en zone centrale. L'analyse réalisée durant les mesures, conduit à estimer que le gaz contenu dans les bulles de moins de 130 nm de DSE (Diamètre Sphérique Equivalent)³⁵ est pris en compte dans la ligne de base³⁶, ce qui explique la sous-estimation de la densité en bulles par le SIMS au centre du combustible.

De plus, le gaz présent dans les bulles n'est plus détecté par le SIMS au delà d'une certaine taille de cavités, cette taille est estimée à $3 \mu\text{m}$ d'après les mesures.

35. Le DSE est le diamètre d'une sphère dont le volume est le même que le pore observée au MEB-FIB.

36. Cela peut être dû au fait que ces petites bulles représentent une faible quantité de gaz et que leur densité (*bulles.mm⁻³*) est élevée. Ainsi un grand nombre de ces bulles sont ouvertes par l'abrasion, mais la quantité de gaz relâchée n'est pas suffisante pour former un pic de forte intensité sur le profil SIMS, cette quantité est donc prise en compte dans la ligne de base du signal.

1.4. Estimation de la pression dans les bulles de gaz de fission sur la base des données de simulation et des résultats des examens post-irradiatoires

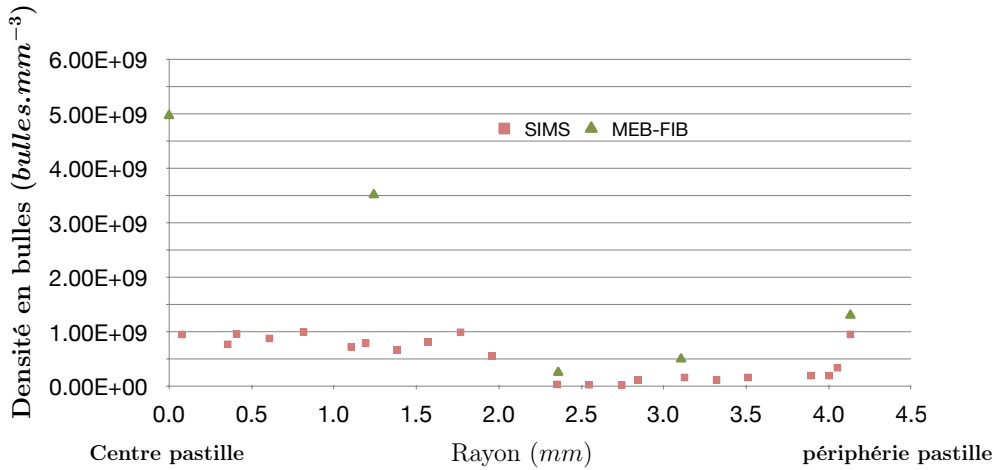


FIGURE 1.29 – Densité de bulles (en $bulles.mm^{-3}$) d’après les mesures MEB-FIB et SIMS en fonction du rayon pastille (mm).

Sur la figure 1.30, les quantités de gaz mesurées à la microsonde (courbe orange) et au SIMS (ronds bleus et croix rouges) en fonction de la position dans la pastille sont reportées. De la comparaison des mesures du xénon à la microsonde et de la création déduite de la mesure néodyme³⁷ (courbe cyan) il apparaît que la zone centrale ($0 - 2.16 mm$) et la périphérie du combustible ($3.8 - 4.14 mm$) sont le siège d’une précipitation gazeuse voire d’un relâchement des gaz de fission.

La quantité totale de gaz détectée au SIMS (ronds bleus) permet d’estimer la rétention du gaz dans le combustible (à l’exception du gaz retenu dans les cavités de plus de $3 \mu m$), la différence entre cette valeur et la création permet de déterminer le relâchement local. Cependant, les valeurs mesurées au SIMS sont dispersées et parfois supérieures à la création, le relâchement en zone centrale est donc difficilement quantifiable.

La quantité de gaz correspondant à la ligne de base du SIMS (gaz dissous et/ou précipités dans des bulles de moins de $130 nm$) est représentée par les croix rouges sur la figure 1.30. La différence entre la quantité totale (ronds bleus) et la ligne de base (croix rouges) révèle d’une part qu’une grande partie du gaz est précipité dans des bulles submicrométriques (de moins de $3 \mu m$) en zone centrale et en périphérie. D’autre part, cette figure montre que la majorité du gaz en rétention est présent sous forme dissoute et/ou nano-précipité en zone intermédiaire.

37. La concentration en néodyme dans le combustible est un indicateur de la répartition radiale du taux de combustion et sert par conséquent de référence de production locale pour les autres produits de fission plus mobiles comme le xénon.

1.4. Estimation de la pression dans les bulles de gaz de fission sur la base des données de simulation et des résultats des examens post-irradiatoires

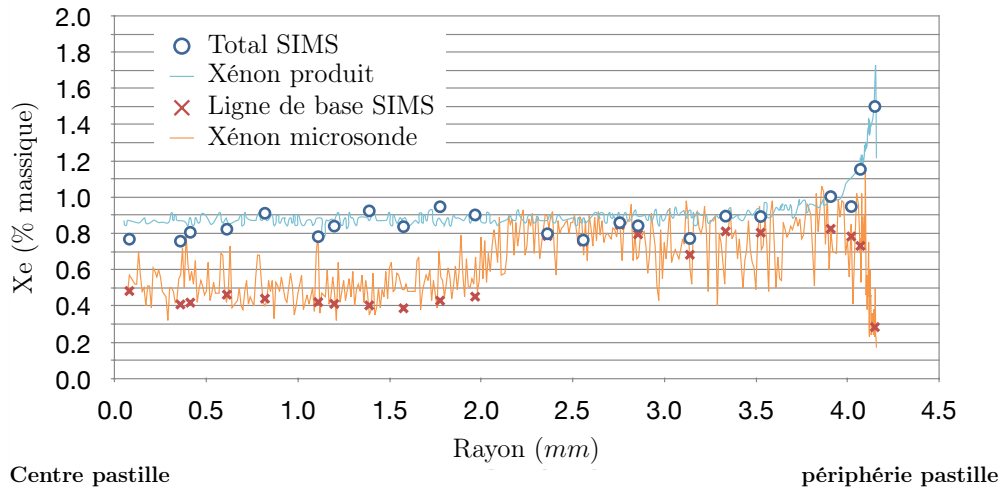


FIGURE 1.30 – Évolution des quantités de xénon mesurées au SIMS et à la microsonde (en % massique) en fonction du rayon pastille (en mm).

L'utilisation conjointe des mesures de quantité de gaz dans les bulles au SIMS et de la porosité au MEB permet d'évaluer le volume molaire du gaz dans les bulles. Pour cette évaluation, une difficulté réside dans le fait que la quantité mesurée au SIMS englobe l'ensemble du gaz contenu dans les bulles, sans que la répartition de ce gaz au sein des différentes classes de porosité observables au MEB ne soit déterminée. Compte tenu de ces limitations, l'évaluation du volume molaire est réalisée en considérant que :

- Par hypothèse, la totalité du gaz détecté dans les bulles submicrométriques au SIMS est considéré répartie dans une seule classe de porosité dont la taille est comprise entre 0.03 et $3 \mu m$ ³⁸.
- L'apport des bulles nanométriques est négligé puisque la quantité de gaz dans ces bulles est prise en compte dans la ligne de base et que la porosité associée à cette population ne peut pas être observée.

L'évolution radiale du volume molaire des bulles est illustrée sur la figure 1.31. Les volumes molaires évalués par l'expérimentateur sont représentés par les triangles orange et ceux calculés à partir des mesures radiales sont représentés par les losanges bleus.

En zone intermédiaire, certains points d'évaluation ne sont pas retenus dans l'analyse (points situés hors du cadre en pointillés rouges sur la figure 1.31) pour les raisons suivantes :

- en $2 - 2.8 mm$, le SIMS détecte une quantité de gaz quasi-nulle dans les bulles submicrométriques (ligne de base confondue avec la quantité totale sur la figure 1.30), or la porosité fine mesurée au MEB est non-négligeable et le relâchement est faible dans cette zone. Il se peut également que le gaz précipité soit contenu dans des bulles de moins de $130 nm$ (visibles au MEB), gaz précipité qui serait alors pris en compte dans la ligne de base du signal SIMS.

38. Par conséquent, bien que le gaz contenu dans les bulles de moins de $130 nm$ est comptabilisé dans la ligne de base, la porosité associée à ces bulles est prise en compte dans le calcul du volume molaire car l'apport de cette porosité devrait être faible (cf. figure 1.27).

1.4. Estimation de la pression dans les bulles de gaz de fission sur la base des données de simulation et des résultats des examens post-irradiatoires

Par manque d'information sur le contenu en gaz des cavités dans cette zone, ces points d'évaluations sont donc exclus de l'analyse.

- en 4.02 mm, le volume molaire est calculé à partir de mesures SIMS et MEB réalisées à des positions différentes et trop éloignées pour être cohérentes entre elles, dans cette zone où la porosité et la quantité de gaz évoluent fortement en fonction du rayon pastille. Ces points d'évaluations ne sont donc pas représentatifs.

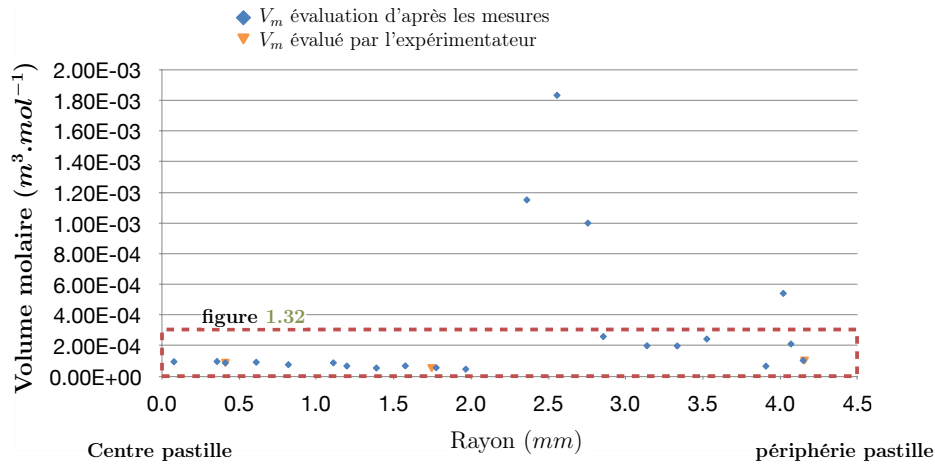


FIGURE 1.31 – Volume molaire (en $m^3.mol^{-1}$) en fonction du rayon pastille (en mm).

Une fois ces points éliminés, l'estimation radiale du volume molaire est reportée figure 1.32. Sur cette figure, nous constatons que les cavités les plus denses en gaz se situent en périphérie de la zone centrale (vers 2 mm).

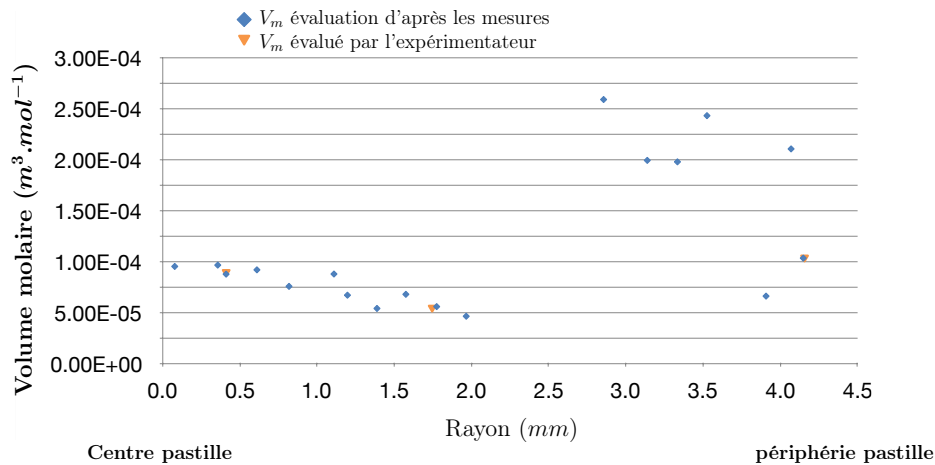


FIGURE 1.32 – Volume molaire (en $m^3.mol^{-1}$) en fonction du rayon pastille (en mm) (encadré figure 1.31).

La pression évaluée à partir de ces volumes molaires sera comparée à la pression calculée dans les bulles par le code ALCYONE en section 1.4.3.2.

1.4. Estimation de la pression dans les bulles de gaz de fission sur la base des données de simulation et des résultats des examens post-irradiatoires

Enfin, comme nous le verrons en section 1.5, la forme des bulles peut avoir un impact sur l'intensité de la sur-contrainte induite par la pressurisation des cavités. Ainsi, sur la base des observations MEB-FIB, une description de la forme, de l'orientation et de la distribution spatiale est à présent proposée en fonctions des différentes positions dans la pastille. Les positions auxquelles les observations MEB-FIB ont été réalisées dans la pastille sont indiquées sur la figure 1.24.

Concernant la forme des bulles intragranulaires, les observations (figure 1.33) en zone centrale ($0 - 2.16 \text{ mm}$) mettent en évidence des bulles qui peuvent être assimilées à des sphéroïdes caractérisés par leur diamètre et leur rapport de forme $w = \frac{b}{a}$ avec a et b respectivement le diamètre et l'épaisseur de ces cavités. Au centre, la mesure de l'épaisseur et du diamètre des bulles présentes sur la figure 1.33, donne un facteur de forme allant jusqu'à 0.3. En périphérie de la zone centrale, le diamètre de ces bulles a été mesuré à environ $0.5 \mu\text{m}$ pour $0.05 \mu\text{m}$ d'épaisseur, soit un rapport de forme d'environ 0.1. En plus des bulles en forme de sphéroïdes aplatis, des bulles de formes complexes sont également observées en périphérie de la zone centrale, comme l'illustre la figure 1.34.

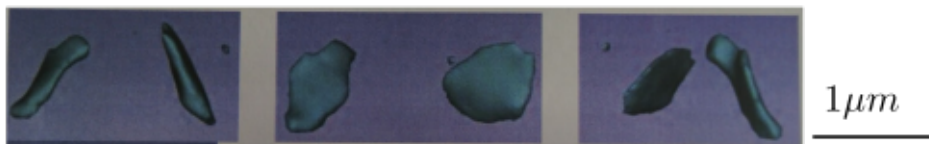


FIGURE 1.33 – Image 3D des bulles intragranulaires de forme sphéroïdale aplatie d'après les observations MEB-FIB réalisées à 0 mm .

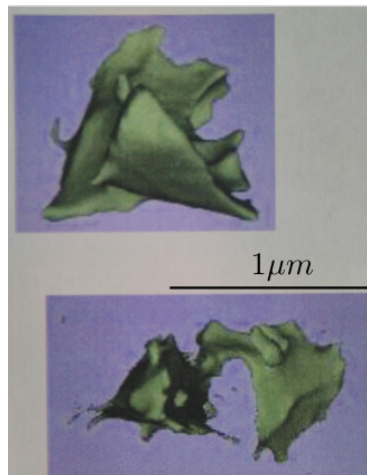


FIGURE 1.34 – Image 3D des bulles intragranulaires de forme complexe d'après les observations MEB-FIB réalisées à 1.2 mm .

Dans la zone intermédiaire ($2.16 - 4.08 \text{ mm}$), les bulles intragranulaires visibles sont très petites (inférieure au μm) et leur nombre est faible, il est donc difficile de décrire la forme des bulles de manière représentative. Néanmoins, les bulles observées ont clairement une forme très aplatie, comme l'illustre la figure 1.35.

1.4. Estimation de la pression dans les bulles de gaz de fission sur la base des données de simulation et des résultats des examens post-irradiatoires

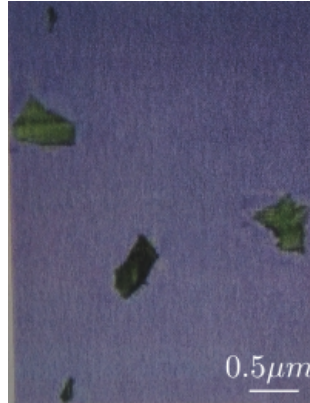


FIGURE 1.35 – Image 3D des bulles intragranulaires aplaties d’après les observations MEB-FIB réalisées à 3 *mm*.

Dans la zone de rim (4.08 – 4.14 *mm*), à cause du phénomène de restructuration, les bulles intragranulaires sont quasiment absentes au profit des bulles intergranulaires situées entre les grains subdivisés.

D’après ces observations, l’évolution proposée du facteur de forme w^{intra} des bulles intragranulaires dans la pastille est la suivante :

- **au centre (sur 0 *mm* – 1 *mm*)**, $w^{intra} \in [0.1 – 0.3]$, au vu des bulles présentes dans le volume observé, bulles qui sont présentées figure 1.33.
- **En périphérie de la zone centrale (sur 1 *mm* – 2.16 *mm*)**, $w^{intra} = 0.1$, afin de représenter le facteur de forme mesuré pour les bulles en forme de disque ($w^{intra} = 0.1$). L’effet mécanique des bulles de forme complexe ne sera pas représenté par la suite, faute de modélisation adaptée.
- **En zone intermédiaire (2.16 *mm* – 3.9 *mm*)**, $w^{intra} = 0.1$, car les quelques bulles observées sont plus aplaties que celles du centre.
- **Dans le rim (4.08 *mm* – 4.14 *mm*)**, pas de bulles intragranulaires.

Cette analyse permet de donner une description de la forme des bulles intragranulaires adaptée à la modélisation. Néanmoins, comme cela a été mentionné plus haut, les bulles nanométriques sont exclues de l’analyse. Par conséquent, la valeur du facteur de forme en zone intermédiaire ($w^{intra} = 0.1$) n’est représentative que des rares bulles observées. Par la suite, les bulles nanométriques seront considérées comme étant sphériques ($w^{intra} = 1$).

Concernant les bulles intergranulaires, dans les parties du combustible observées, hors rim (0 – 3 *mm*), elles sont élancées et parfois très aplaties comme l’illustre la figure 1.36.

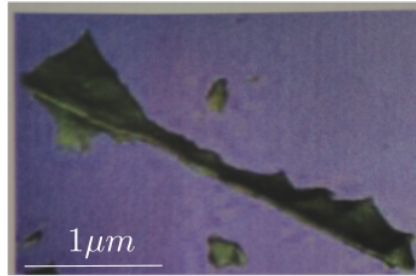


FIGURE 1.36 – Image 3D des bulles intergranulaires aplaties d’après les observations MEB-FIB réalisées à 3 mm.

Dans le rim, ces bulles ont une forme quasi-sphérique comme l’illustre la figure 1.37.

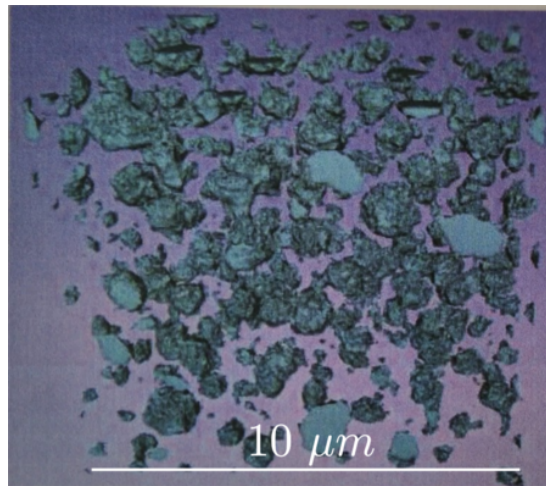


FIGURE 1.37 – Image 3D des bulles intergranulaires de rim d’après les observations MEB-FIB réalisées à 4.14 mm.

D’après ces observations, l’évolution proposée du facteur de forme w^{inter} des bulles intergranulaires est la suivante :

- dans la partie hors rim (0 mm – 4.08 mm), $w^{inter} = 0.05$, afin de représenter la forme très aplatie des bulles observées ($w \sim 0$)³⁹.
- Dans le rim (4.08 mm – 4.14 mm), $w^{inter} = 1$ (bulles sphériques), afin de représenter les bulles d’hs.

Les facteurs de formes retenues pour les différentes populations de bulles sont résumés dans le tableau 1.9

39. Il serait possible d’exprimer le coefficient de Biot pour le cas des fissures ($w = 0$) mais cette expression (voir (A.2)) fait intervenir le nombre de fissures par unité de volume. Or, cette quantité est difficilement mesurable de manière quantitative, contrairement à la fraction volumique. C’est pourquoi un facteur de forme proche de 0 est retenu.

1.4. Estimation de la pression dans les bulles de gaz de fission sur la base des données de simulation et des résultats des examens post-irradiatoires

Zone de la pastille	0 – 1 mm	1 – 2.16 mm	2.16 – 4.08 mm	4.08 – 4.14 mm
w^{intra}	0.1 – 0.3	0.1 (disques) indéfini (bulles non-convexes)	0.1 ⁴⁰	
w^{inter}	0.05	0.05	0.05	1

TABLE 1.9 – Facteurs de forme retenus pour les bulles intragranulaires et intergranulaires d’après les observations MEB-FIB.

Comme nous venons de le voir, excepté en zone de rim, les bulles sont non-sphériques. Ainsi, leur orientation doit être caractérisée. Cette orientation ne peut être définie que sur une image 3D des bulles. Or, les images provenant du MEB-FIB sont réalisées sur un volume de petite taille ($\sim 10 \mu m$, i.e. d’environ un grain en zone non restructurée), contenant une quantité de bulles peu représentative (du moins en ce qui concerne les bulles intergranulaires). Néanmoins, d’après ces mesures, l’orientation des bulles intra et intergranulaires ne semble pas privilégier de directions spécifiques.

Enfin, concernant la distribution spatiale des bulles, si le MEB-FIB permet de visualiser ces bulles en 3D (voir un exemple en figure 1.38), seule une analyse quantitative pourra permettre à l’avenir de déterminer la répartition spatiale des bulles à partir de ces observations.

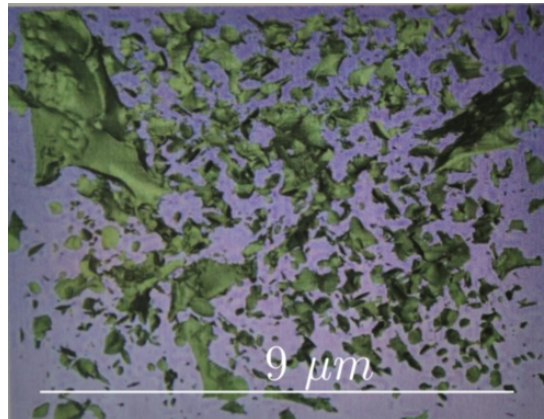


FIGURE 1.38 – Image 3D d’un volume d’après les observations MEB-FIB réalisées à 1.2 mm.

Suite aux examens, les conclusions qui peuvent être tirées sont les suivantes :

- concernant les bulles intragranulaires en zone centrale, l’observation de bulles en forme de disque est corrélée à la présence de sous-joints de grains visibles à l’EBSD (voir commentaire à ce sujet plus haut dans cette section). Il peut donc être supposé que ces bulles se développent sur les surfaces définies par les sous-joints, ce qui expliquerait la

40. Nous rappelons ici que la valeur de 0.1 a été retenue en excluant les bulles nanométriques de l’analyse (à cause de la résolution du MEB-FIB), cette valeur n’est donc représentative que d’une partie des bulles intragranulaires.

forme aplatie de ces cavités. Néanmoins, les mesures à disposition ne permettent pas de valider cette hypothèse car, sur les observations MEB-FIB, les bulles intragranulaires sont visibles mais pas les sous-joints de grains⁴¹ et à l'inverse, les images EBSD permettent de visualiser des sous-joints, mais pas les bulles.

À partir de ces éléments, la localisation des bulles intragranulaires dans cette zone ne peut être déterminée.

- Concernant les bulles intragranulaires en zone intermédiaire, d'après les observations, les bulles visibles (submicrométriques) sont liées à des défauts plans, sans plus de détails sur leur localisation spatiale et les bulles nanométriques sont exclues de l'analyse.
- Concernant les bulles intergranulaires dans l'ensemble de la pastille, ces cavités sont par définition localisées au joint de grains.

1.4.2 Comparaison calcul-mesure de l'état du crayon combustible fort taux à l'issue de l'irradiation de base

1.4.2.1 Simulation de l'irradiation de base d'un crayon à fort taux de combustion

Une simulation de l'irradiation de base du crayon UO_2 fort taux étudié a été réalisée avec ALCYONE de la plateforme PLEIADES. Cette simulation consiste à reproduire le comportement thermo-mécanique, neutronique du crayon et le comportement des gaz de fission dans le combustible afin de déterminer l'état du crayon à l'issue de l'irradiation.

Les données d'entrées du calcul sont les historiques de puissance en fonction de la côte axiale du crayon, ainsi que les informations relatives au fluide caloporteur (pression, température et débit d'entrée). La simulation a été réalisée avec ALCYONE V2 révision numéro 7591. Les modèles retenus pour le calcul sont reportés dans le tableau 1.10.

41. La désorientation des parties du grain situées de part et d'autre d'un sous joint de grains est visible au MEB-FIB grâce aux différents niveaux de gris observés sur les images. Mais les bulles en forme de disque ne sont pas observées à la frontière entre deux niveaux de gris. Il se peut que ces bulles soient tout de même présentes sur des sous-joints ayant une désorientation trop faible pour pouvoir induire une différence de niveau de gris sur l'image.

1.4. Estimation de la pression dans les bulles de gaz de fission sur la base des données de simulation et des résultats des examens post-irradiatoires

Version	svn_trunk_ALCYONE_7591
Dimension	1D
Neutronique	Prodhel
Loi de comportement de la gaine	Creep_Plasticity_Mistral_Alcylene2008
Loi de comportement combustible	Creep_Gatt_Cracking_Alcylene
Modèle de corrosion	Cochise
Densification	Matpro
Relocalisation	oui
Nœud central pastille	libre
Modèle de gaz de fission	Caracas
Nombre de tranches axiales	30 (Discrétisation définie par l'utilisateur)
Nombre de mailles radiales	46 (40 de combustible pour 6 de gaine, discrétisation définie par l'utilisateur)

TABLE 1.10 – Résumé des éléments de la simulation ALCYONE

Ces calculs ont été réalisés avec le modèle de gaz de fission CARACAS. Ce modèle prend en compte les données de thermo-mécanique et de neutronique afin de calculer en chaque nœud du maillage du combustible : la quantité de gaz créé, la répartition du gaz dans les différentes populations de bulles, le relâchement, le gonflement, l'état de restructuration et les grandeurs relatives aux bulles (tailles, taux de recouvrement du joint de grains, densité en bulles, ...). Dans le modèle, le gaz est présent sous différentes formes :

- Dissous dans le grain.
- Dans des bulles intragranulaires qui peuvent être nanométriques ou submicrométriques. Bien qu'une répartition bimodale de ces bulles soit observée dans la zone de précipitation du combustible au taux de combustion considéré ici, une seule population de bulles intragranulaires est représentée dans le modèle.
- Dans des bulles intergranulaires.

Le déplacement du nœud central du combustible est libre car le blocage de ce nœud conduit à un état de contraintes qui peut s'avérer irréaliste lors de la simulation du transitoire thermique.

1.4.2.2 Comparaison des résultats intégraux et des caractéristiques macroscopiques du tronçon de combustible prélevé

Les résultats intégraux (portant sur l'ensemble du crayon) de cette simulation sont comparés aux mesures dans le tableau 1.11. Cette comparaison met en évidence la surestimation du relâchement des gaz de fission calculé et les allongements du combustible et du crayon calculés sont sous-estimés.

1.4. Estimation de la pression dans les bulles de gaz de fission sur la base des données de simulation et des résultats des examens post-irradiatoires

	Simulation	Mesure
Relâchement (% de la création)	3.47	2.75
Allongement combustible (% de déformation axiale)	0.71	0.96
Allongement crayon (% de déformation axiale)	0.89	1.09

TABLE 1.11 – Comparaison calcul-mesure des résultats intégraux du crayon fort taux.

L'évolution diamétrale du crayon mesurée (corrigée de l'épaisseur de zircone) en fonction de la position axiale est comparée au calcul sur la figure 1.39. Le diamètre externe de la gaine calculée est sous-prédit en 0 – 2000 mm/bcf et 3250 – 3600 mm/bcf .

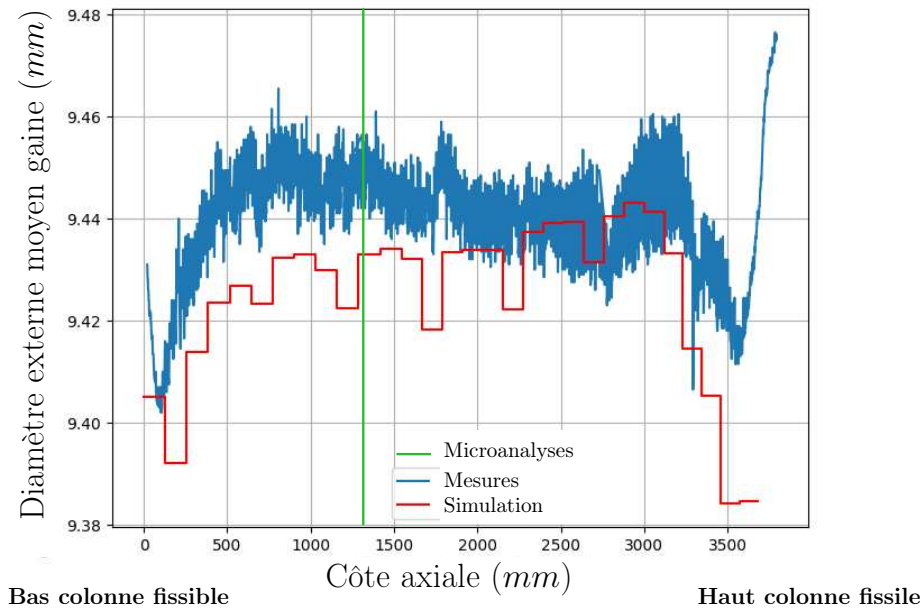


FIGURE 1.39 – Comparaison calcul-mesure de la profilométrie à l'issue de l'irradiation de base donnant le diamètre externe de la gaine (en mm) en fonction de la position axiale par rapport au bas de la colonne fissile du crayon (en mm).

Par la suite, les résultats d'examens de microanalyses (1304 mm/bcf indiquée figure 1.39) sont comparés aux résultats de calcul. Avec la discrétisation axiale retenue pour les calculs, la tranche 11 (1288–1417 mm/bcf) est retenue pour cette comparaison. Dans cette tranche :

- Le rayon de la zone de précipitation calculé est de 1.94 mm contre 2.16 mm mesuré.
- L'épaisseur de rim calculée est comprise entre 58 et 180 μm contre 60 μm mesurée.

Un bon accord calcul-mesure est obtenu pour le rayon de la zone de précipitation. La valeur haute de l'épaisseur de rim calculée (180 μm) est relative à la position des nœuds de la pastille dont le taux de restructuration est supérieur à 10 %. Cette épaisseur intègre donc la zone en cours de restructuration, c'est pourquoi elle est supérieure à l'épaisseur mesurée. En revanche, la valeur basse de l'épaisseur calculée (58 μm), qui intègre les zones dont le taux

1.4. Estimation de la pression dans les bulles de gaz de fission sur la base des données de simulation et des résultats des examens post-irradiatoires

de restructuration est supérieur à 97 %, est en bon accord avec la mesure. Notons également que la valeur basse de l'épaisseur mesurée à la métallographie (à une côte de mesure soit différente : 3005 – 3040 *mm/bcf*) est sous-estimée par le calcul (90 μm mesuré à comparer au 58 μm calculé, voir tableau 1.8) alors que la valeur haute mesurée est en deçà du calcul (120 μm mesuré à comparer au 180 μm calculé).

1.4.2.3 Comparaison de la porosité des populations de bulles

Dans cette sous-section, les porosités calculées et mesurées sont comparées. La porosité joue un rôle clé dans le calcul de la contrainte induite par les gaz de fission car elle intervient dans le calcul de la pression en section 1.4.2.5, mais également dans le calcul de la sur-contrainte de traction des bulles en section 1.5.

Par la suite, le rayon à partir duquel un taux de restructuration non-nul est calculé (3.8 *mm*) est indiqué sur les différentes figures représentant la répartition radiale d'une quantité dans le combustible (figure 1.40 à 1.53).

Tout d'abord, rappelons que la porosité fine mesurée correspond à la porosité dont le DCE (diamètre circulaire équivalent) est compris entre 0.03 et 3 μm (cf. section 1.4.1.2). Sur la figure 1.40, la mesure de porosité fine (carrés orange) est comparée à la porosité totale (somme de la porosité intra et intergranulaire) calculée (courbe orange) :

- En zone centrale (en 0 – 2.16 *mm*), la porosité calculée est supérieure à la mesure d'un facteur 2.
- En zone intermédiaire (en 2.16 – 3.8 *mm*), calcul et mesure sont proches pour un rayon supérieur à 3 *mm*. En revanche, l'écart est important pour des rayon inférieurs, tout particulièrement entre 2.16 et 2.5 *mm*.
- En périphérie (en 3.8 – 4.14 *mm*), si l'accord calcul-mesure est convenable entre 3.8 et 4.08 *mm* (zone en partie restructurée), la porosité calculée sous-estime fortement la mesure d'un facteur 2 dans la zone complètement restructurée (4.08 – 4.14 *mm*).

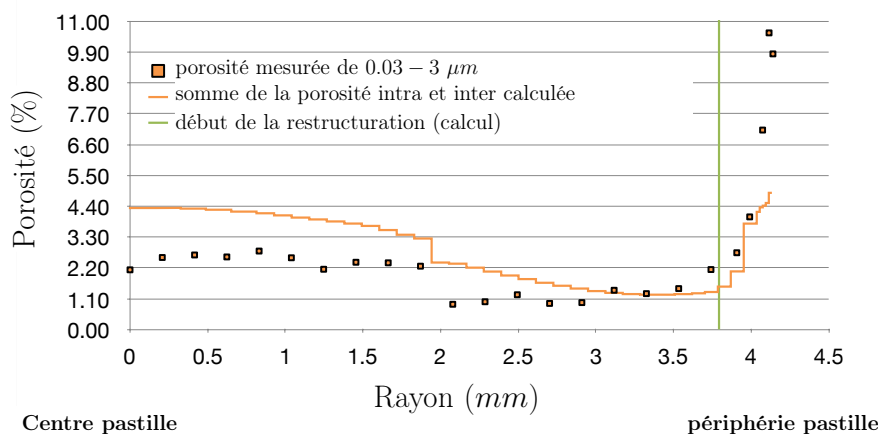


FIGURE 1.40 – Répartition de la porosité fine (en %) calculée et mesurée en fonction du rayon pastille (en *mm*).

1.4. Estimation de la pression dans les bulles de gaz de fission sur la base des données de simulation et des résultats des examens post-irradiatoires

Afin de comprendre et de consolider les écarts observés, les porosités calculées et mesurées sont comparées en séparant à présent les populations de bulles en fonction de leur taille.

Pour rappel, en zone centrale (entre 0 et 2.16 mm), les bulles dont le DCE est compris entre 0.03 et 1 μm sont des bulles intragranulaires et celles dont le DCE est compris entre 1 et 3 μm sont des bulles intergranulaires, d'après les examens.

En zone intermédiaire, la taille de cavité permettant de discriminer les bulles intra et intergranulaires n'est pas déterminée expérimentalement. Néanmoins, les observations MET sur des combustibles UO_2 irradiés entre 30 et 83 GWj/t_u mettent en évidence des bulles intragranulaires majoritairement nanométriques [98] et les mesures MEB réalisées sur un combustible irradié à 67.5 GWj/t_u permettent d'observer des bulles intergranulaires dont la taille est comprise entre 0.4 et 1 μm sur l'ensemble du rayon pastille [22]. Nous considérons donc que la totalité de la porosité fine mesurée (de 0.03 à 3 μm) est en position intergranulaire.

Dans le rim, à cause du phénomène de restructuration, les grains sont subdivisés en de nouveaux grains d'une taille inférieure au micron. De par leur taille, les bulles submicrométriques sont donc très vraisemblablement situées entre ces grains. C'est pourquoi dans cette zone, nous supposons, comme précédemment, que la totalité de la porosité fine mesurée est intergranulaire.

Dans la simulation, la distribution en taille des bulles est représentée par une population intragranulaire et une population intergranulaire, et ce quelle que soit la position radiale dans la pastille. Afin d'illustrer cette représentation, la distribution en taille de la porosité des cavités au centre du combustible (à un rayon pastille $r_p = 0 mm$) est reportée sur la figure 1.41. Un large spectre de taille de cavités est mesuré (en gris) alors que, dans la simulation, les bulles intragranulaires (en bleu) et les bulles intergranulaires (en rouge) ne sont représentées que par une seule classe de taille.

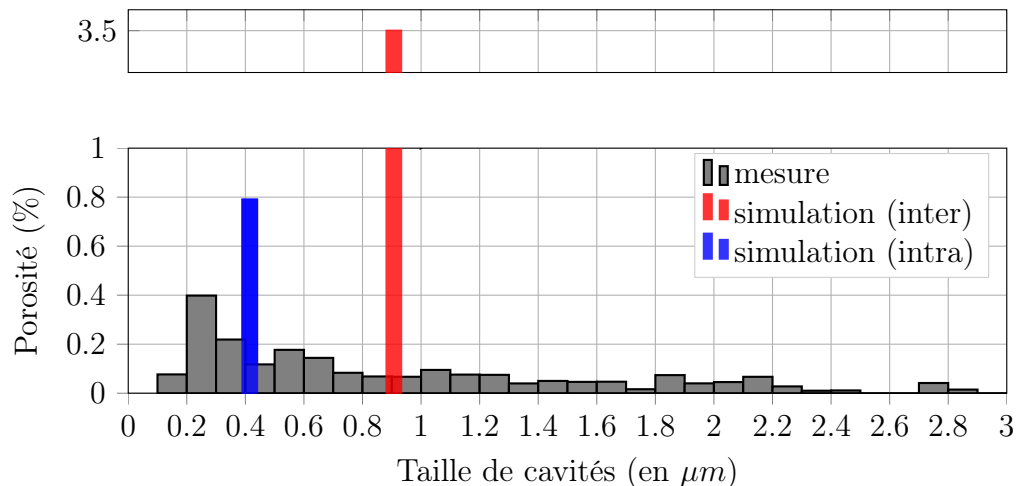


FIGURE 1.41 – Distribution en taille de la porosité de moins de 3 μm mesurée (en DCE) et calculée au centre de la pastille (0 mm).

1.4. Estimation de la pression dans les bulles de gaz de fission sur la base des données de simulation et des résultats des examens post-irradiatoires

D'après la figure 1.42, en zone centrale, le diamètre des bulles intragranulaires calculé (courbe bleue, pour $0 \leq r_p \leq 2.16 \text{ mm}$) est compris entre 350 et 400 nm ce qui est en accord avec la mesure (diamètre moyen⁴² des pores dont la taille est comprise entre 0.03 et 1 μm , illustré par les croix bleues). En revanche, le diamètre des bulles intergranulaires calculé (courbe rouge) sous-estime la mesure (diamètre moyen⁴² des pores dont la taille est comprise entre 1 et 3 μm , illustré par les croix rouges), avec un diamètre calculé compris entre 400 et 900 nm à comparer à une taille moyenne mesurée comprise entre 1400 et 1800 nm. En zone intermédiaire, le diamètre des bulles intergranulaires calculé, qui varie de 400 nm (en $r_p = 2.16 \text{ mm}$) à près de 100 nm (en $r_p = 3.6 \text{ mm}$), sous-estime la taille moyenne de la porosité fine mesurée, qui elle est comprise entre 800 et 1200 nm. Dans le rim, la taille des bulles calculée d'environ 500 nm (courbe verte) est sous-estimée par rapport à la mesure qui est comprise entre 800 et 1100 nm (rayon moyen⁴² de la porosité fine, illustré par les croix orange).

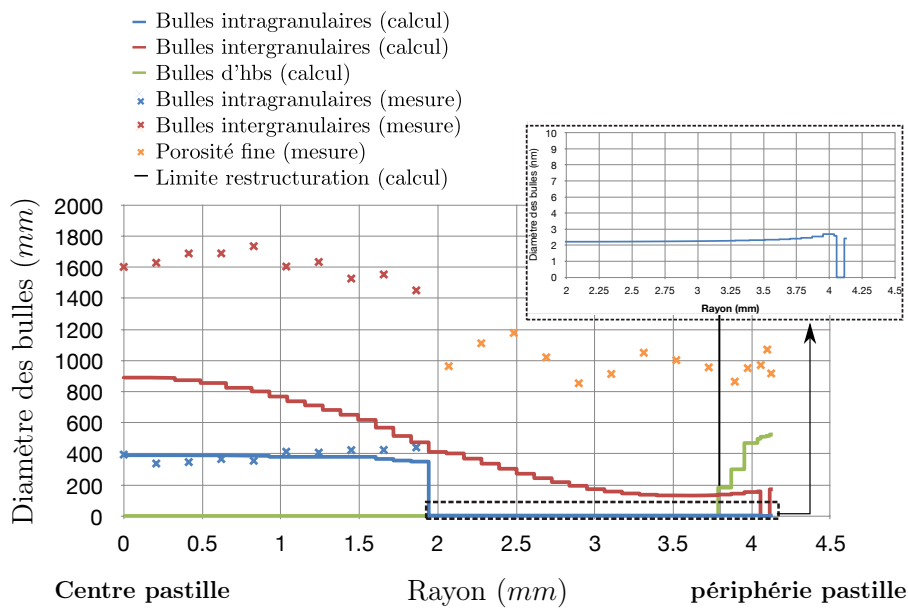


FIGURE 1.42 – Diamètre des bulles calculé (en mm) en fonction du rayon pastille (en mm).

Concernant la porosité des bulles intragranulaires (voir figure 1.43), d'après la comparaison entre la valeur calculée (courbe rouge) et mesurée (ronds bleus) :

- dans la zone centrale (entre 0 et 2.16 mm), la porosité mesurée fluctue autour de 1.5%, le calcul sous-estime cette valeur au centre (0.8 %) tandis qu'un bon accord calcul-mesure est observé en périphérie de la zone centrale (1.5 %).
- En zone intermédiaire (entre 2.16 et 4.08 mm), la porosité calculée est quasi-constante et vaut environ 1 %. La taille des bulles intragranulaires calculée est d'environ 2 nm de diamètre (voir insert sur la figure 1.42). Or, comme nous l'avons vu, cette taille n'est pas compatible avec la résolution du MEB. La porosité intragranulaire calculée ne peut donc pas être comparée à la mesure, des examens plus fins (MET) sont nécessaires.
- Dans le rim (4.08 – 4.14 mm), la porosité calculée est nulle et nous supposons que la totalité de la porosité fine mesurée est intergranulaire.

42. Au sens pondéré par la porosité

1.4. Estimation de la pression dans les bulles de gaz de fission sur la base des données de simulation et des résultats des examens post-irradiatoires

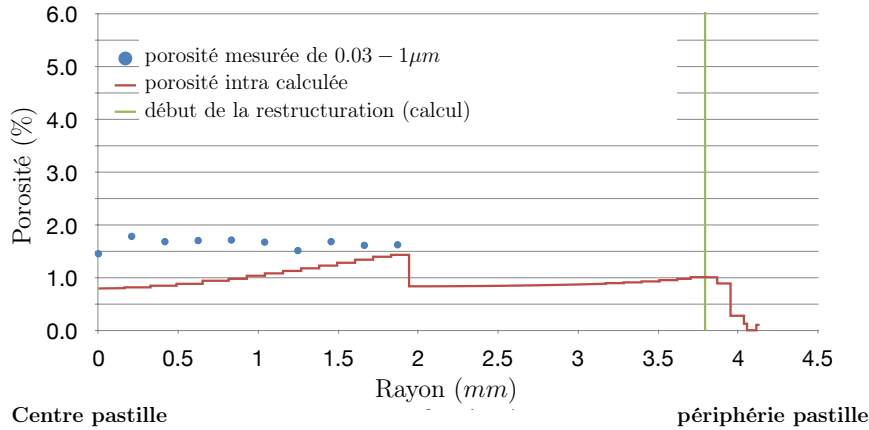


FIGURE 1.43 – Répartition de la porosité (en %) calculée et mesurée des bulles intragranulaires en fonction du rayon pastille (en mm).

Concernant la porosité des bulles intergranulaires (voir figure 1.44), d’après la comparaison entre la valeur calculée (courbe violette) et mesurée (triangles violets et carré orange) :

- en zone centrale ($0 - 2.16 \text{ mm}$), la porosité calculée varie de 3.5 % ($r_p = 0 \text{ mm}$) à 1.5 % ($r_p = 2.16 \text{ mm}$). Le calcul sur-prédit largement la valeur expérimentale (triangles violets) qui fluctue autour de 0.9 %.
- En zone intermédiaire ($2.16 - 4.08 \text{ mm}$), nous avons vu que la porosité intergranulaire calculée doit être comparée à l’ensemble de la porosité fine (carrés orange). La porosité calculée est alors en bon accord avec la mesure sur l’intervalle $[2.16, 3 \text{ mm}]$. Au delà d’un rayon de 3 mm , le calcul sous-prédit la mesure.
- Dans le rim ($4.08 - 4.14 \text{ mm}$), la porosité calculée (4.9 %) est très inférieure à la totalité de la porosité fine mesurée (10.6 %).

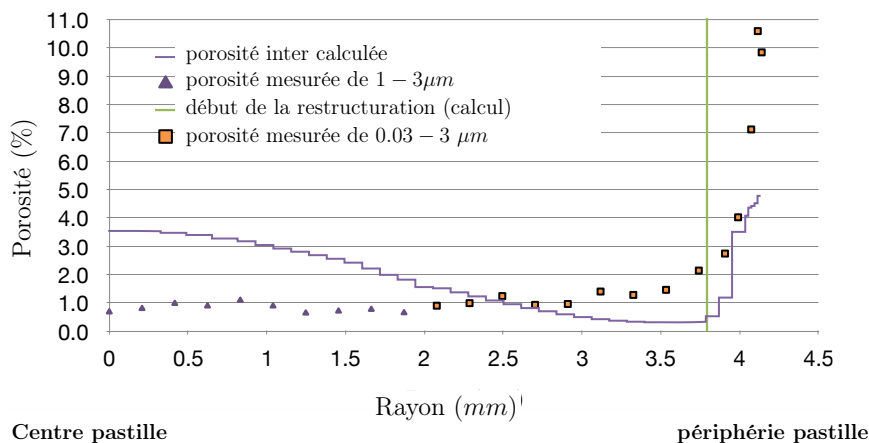


FIGURE 1.44 – Répartition de la porosité (en %) calculée et mesurée des bulles intergranulaires en fonction du rayon pastille (en mm).

Dans le tableau 1.12, les porosités mesurées, $f_{v,mes}$, et calculées, $f_{v,calc}$, sont reportées ainsi que les valeurs moyennes des écarts calcul-mesure absolus, $\langle \Delta f_v \rangle$, et relatifs, $\langle \Delta f_v^{rel} \rangle$,

1.4. Estimation de la pression dans les bulles de gaz de fission sur la base des données de simulation et des résultats des examens post-irradiatoires

ces moyennes sont prises au sens défini par les équations (1.45) et (1.46) respectivement :

$$\langle \Delta f \rangle = \frac{\sum_{i=1}^{N_{mes}} \Delta f^i [(r_p^{i+1})^2 - (r_p^i)^2]}{(r_p^f)^2 - (r_p^{ini})^2} \quad (1.45)$$

$$\langle \Delta f^{rel} \rangle = \frac{\sum_{i=1}^{N_{mes}} (\Delta f^i / f_{calc}^i) [(r_p^{i+1})^2 - (r_p^i)^2]}{(r_p^f)^2 - (r_p^{ini})^2} \quad (1.46)$$

où f désigne la variable dont l'écart est évalué, avec f_{mes} et f_{calc} la valeur mesurée et calculée de f respectivement, $\Delta f^i = |f_{calc}^i - f_{mes}^i|$ est l'écart calcul-mesure, l'indice i désigne la valeur de la variable à la $i^{\text{ème}}$ position radiale (position ordonnée dans l'ordre croissant des rayons), N_{mes} est le nombre de points de mesure, r_p^{ini} et r_p^f sont respectivement la première et la dernière position radiale considérée.

Zone de la pastille	type de porosité	0 – 1 mm	1 – 2 mm	2 – 3 mm	3 – 4.08 mm	Rim 4.08 – 4.14 mm
porosité mesurée (en %)	intra	1.7	1.6			
	inter	1	0.8	1	1.8	10.4
	porosité fine	2.6	2.4	1	2.3	// ⁴³
porosité calculée (en %)	intra	0.9	1.2	0.9	0.9	0
	inter	3.4	2.7	1.2	0.8	4.6
	porosité totale	4.3	3.8	2	1.7	// ⁴³
$\langle \Delta f_v \rangle$ (en %)	intra	0.8	0.4			
	inter	2.4	1.9	0.3	1.5	5.5
	porosité fine	1.7	1.5	1	0.6	// ⁴³
$\langle \Delta f_v^{rel} \rangle$ (en %)	intra	94	38			
	inter	72	72	23	295	90
	porosité fine	40	38	49	28	// ⁴³

TABLE 1.12 – Résumé des porosités calculées et mesurées et de leurs écarts.

Concernant les résultats de simulation et d'après le tableau précédent :

- En zone centrale (0 – 2.16 mm), la porosité intragranulaire est sous-prédite de façon importante sur l'intervalle [0, 1 mm] (0.8 % d'écart calcul-mesure absolu soit 94 % d'écart relatif). Toujours en zone centrale mais sur l'intervalle [1, 2.16 mm], cette porosité est modérément sous-prédite (0.4 % d'écart absolu soit 38 % d'écart relatif). La porosité intergranulaire dans l'ensemble de cette zone est fortement surestimée (écart calcul-mesure sur les intervalles [0, 1 mm] et [1, 2.16 mm] de 2.4 % et 1.9 % respectivement, soit 72 % d'écart relatif dans ces deux sous-zones). Au final, la porosité fine mesurée est donc surestimée par le calcul (écart calcul-mesure moyen d'environ 1.7 % dans toute la zone centrale, soit 40 % d'écart relatif).
- En zone intermédiaire (2.16 – 4.08 mm), la porosité intragranulaire calculée étant de taille nanométrique, elle ne peut donc être comparée à la valeur expérimentale (la mesure au MEB exclut les bulles de moins de 30 nm). De ce fait, la porosité fine mesurée doit être comparée à la porosité intergranulaire calculée. L'écart calcul-mesure

43. La totalité de la porosité fine est supposée être en position intergranulaire dans le rim.

1.4. Estimation de la pression dans les bulles de gaz de fission sur la base des données de simulation et des résultats des examens post-irradiatoires

est alors faible entre 2.16 et 3 mm (0.3 % d'écart absolu, soit 23 % d'écart relatif), puis grand au delà (1.5 % d'écart absolu, soit 295 % d'écart relatif).

- Dans le rim (4.08 – 4.14 mm), du fait de la restructuration, les bulles intragranulaires sont supposées être absentes. La porosité intergranulaire est fortement sous-estimée par le calcul (5.5 % d'écart calcul-mesure moyen, soit 90 % d'écart relatif). Cette porosité intergranulaire est égale à la porosité fine dans cette zone.

Concernant les mesures, des observations MET sont nécessaires sur le combustible étudié afin de quantifier la porosité des bulles nanométriques, en zone intermédiaire.

1.4.2.4 Comparaison calcul-mesure des quantités de gaz dans les différentes populations de bulles

La pression des bulles dépend directement de la quantité de gaz qu'elles contiennent. Nous cherchons donc ici à comparer les quantités présentes dans les différentes populations de gaz calculées et mesurées. D'après le calcul de l'inventaire des gaz de fission à l'issue de l'irradiation de base, illustré figure 1.45 :

- le relâchement du combustible (en gris) a lieu principalement en zone centrale et en périphérie.
- En zone centrale, le gaz intragranulaire est soit dissous (en bleu) soit sous forme de bulles de précipitation (en rouge) d'environ 400 nm (voir figure 1.42). Le reste du gaz retenu se situe dans des bulles intergranulaires (en orange).
- En zone intermédiaire, le gaz intragranulaire précipité (en vert) est présent dans des bulles de quelques nanomètres (voir figure 1.42) et la totalité du gaz précipité dans des bulles submicrométriques est en position intergranulaire.
- Dans les zones restructurées, la majorité du gaz est en position intergranulaire, le reste est dissous dans le grain.

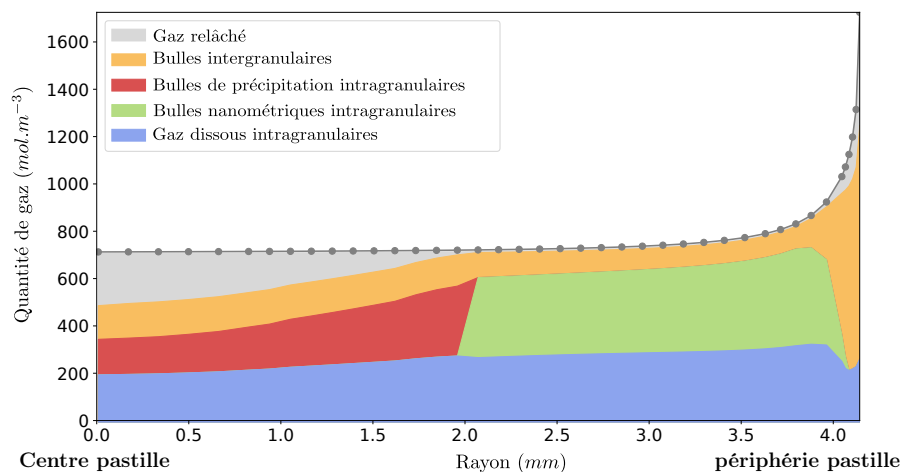


FIGURE 1.45 – Inventaire gaz (en $\mu mol.mm^{-3}$) en fonction du rayon (en mm) pour la tranche 11 du crayon (1288 – 1417 mm/bcf).

1.4. Estimation de la pression dans les bulles de gaz de fission sur la base des données de simulation et des résultats des examens post-irradiatoires

Ces quantités sont comparées aux mesures microsonde et SIMS par la suite. Dans cette sous-section, l'évolution radiale de la création de xénon calculée est reportée sur les figures par une courbe cyan.

Les quantités de gaz sont exprimées en pourcentage massique (rapport entre la masse de xénon et la masse du combustible) afin de pouvoir être comparées à la mesure. Les valeurs calculées sont exprimées en mole de xénon par unité de volume de combustible, ces quantités sont converties en % massique grâce à la relation suivante :

$$C_{massique}^{Xe} = 100 \frac{M_{at}^{Xe} N_A \alpha^{Xe,Kr}}{\rho_{UO_2}} C_{mol}^{Xe} \quad (1.47)$$

avec

- $C_{massique}^{Xe}$ la masse de xénon par unité de masse de combustible exprimée en % massique,
- $M_{at}^{Xe} = 134 \times 1.66 \times 10^{-27} \text{ kg}$ la masse atomique du xénon en prenant en compte les effets de l'irradiation,
- $N_A = 6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ le nombre d'Avogadro,
- $\alpha^{Xe,Kr} = 0.94$ un facteur correctif (sans unité) permettant de prendre en compte le fait que seul le xénon est détecté par la mesure alors que la simulation prend en compte la présence du krypton,
- $\rho_{UO_2} = 10483 \text{ kg.m}^{-3}$ la densité géométrique initiale du lot de pastilles d' UO_2 et
- C_{mol}^{Xe} la quantité de xénon par unité de volume de combustible exprimée en mol.m^{-3} .

Concernant la création et la rétention du gaz dans le combustible, les évolutions radiales du gaz créé mesuré (courbe noire) et calculé (courbe cyan), de la quantité de gaz retenu dans le combustible mesurée au SIMS (carrés rouges) et de la quantité de gaz retenue calculée (courbe rouge) sont reportées sur la figure 1.46. La création "mesurée" est déduite du profil néodyme (microsonde). D'après cette figure, la création de gaz calculé (en cyan) est en bon accord avec la mesure (en noire), sauf en périphérie pastille.

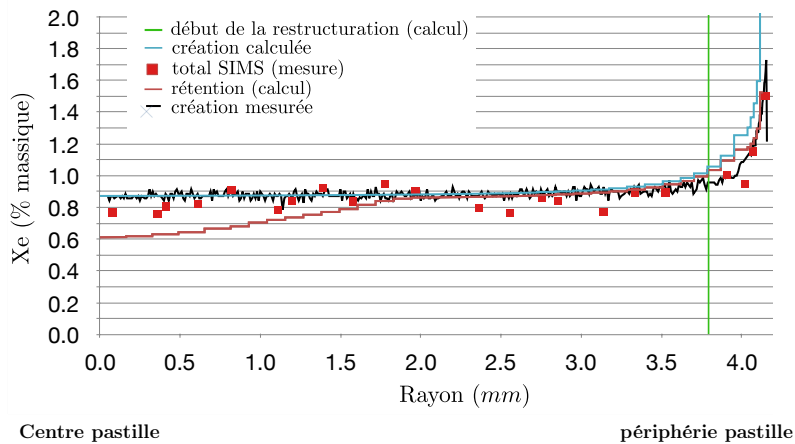


FIGURE 1.46 – Quantité de xénon retenu et créé (en % massique) en fonction du rayon (en mm).

1.4. Estimation de la pression dans les bulles de gaz de fission sur la base des données de simulation et des résultats des examens post-irradiatoires

La différence entre la création et la rétention permet de déterminer le relâchement local. Afin de comparer la quantité calculée de gaz relâchés par les différentes zones du combustible, la contribution de chacune de ces zones au relâchement de la tranche considérée (soit 4.28 % de la quantité produite) est reportée dans le tableau 1.13.

	zone centrale (0 – 2.16 mm)	zone intermédiaire (2.16 – 4.08 mm)	rim (4.08 – 4.14 mm)	tranche 11
relâchement calculé (en % de la production de la tranche)	2.94	0.58	0.76	4.28

TABLE 1.13 – Pourcentage de relâchement calculé des différentes zones du combustible dans la tranche 11 (située aux côtes axiales 1288 – 1417 mm/bcf du crayon).

D’après ce tableau, la majorité du gaz relâché calculé provient de la zone centrale. Comme expliqué en section 1.4.1.2, les mesures SIMS (carrés rouges sur la figure 1.46) sont néanmoins trop entachées d’incertitudes pour conclure sur ce point, les valeurs mesurées étant par endroit supérieures à la création. Nous verrons en revanche plus loin, comment les résultats SIMS peuvent être exploités (ligne de base) pour diminuer les incertitudes liées à la quantité de gaz retenue dans le combustible.

Concernant la mesure microsonde, afin de comparer quantitativement les résultats de calcul à la mesure, les quantités de xénon calculées sont sommées en prenant en compte l’atténuation de la mesure du gaz (pour rappel, la microsonde ne détecte pas la totalité du gaz précipité dans les bulles, la mesure de ces quantités doit donc être atténuée, voir section 1.4.1). Cette somme est définie par :

$$C_{\mu\text{sonde}-\text{calcul}}^{Xe} = \sum_i \beta_{\mu\text{sonde}}^i (r_b^i) C_{\text{massique}}^{Xe,i} \quad (1.48)$$

avec

- $C_{\mu\text{sonde}-\text{calcul}}^{Xe}$ la quantité de xénon totale calculée en considérant l’atténuation de la mesure microsonde (en % massique),
- i désignant la $i^{\text{ème}}$ population de gaz (dissous, bulles nanométriques, bulles intergranulaires, etc.),
- $C_{\text{massique}}^{Xe,i}$ la quantité de gaz présente dans la $i^{\text{ème}}$ population (en % massique) et
- $\beta_{\mu\text{sonde}}^i$ le coefficient d’atténuation associé à la $i^{\text{ème}}$ population (sans unité).

Le coefficient $\beta_{\mu\text{sonde}}^i$ est une fonction décroissante de r_b^i , le rayon des bulles de la $i^{\text{ème}}$ population. La valeur de $\beta_{\mu\text{sonde}}^i$ est comprise entre 0 et 1 ($\beta_{\mu\text{sonde}}^i = 1$ pour le gaz des bulles nanométriques et $\beta_{\mu\text{sonde}}^i \rightarrow 0$ pour les bulles de plus de quelques μm de diamètre). Ce coefficient a été ajusté aux valeurs calculées par le modèle de Verweft [137]⁴⁴, lors d’études antérieures menées au CEA.

44. Les valeurs retenues pour le calcul correspondent à une mesure microsonde réalisée à 15 kV alors que sur l’échantillon étudié la mesure est réalisée à 20 kV. Cette différence de tension d’acquisition est supposée négligeable par la suite.

1.4. Estimation de la pression dans les bulles de gaz de fission sur la base des données de simulation et des résultats des examens post-irradiatoires

Les évolutions radiales de la quantité de xénon mesurée par la microsonde (courbe en pointillés bleus) et calculée par l'équation (1.48) (courbe orange) sont reportées sur la figure 1.47.

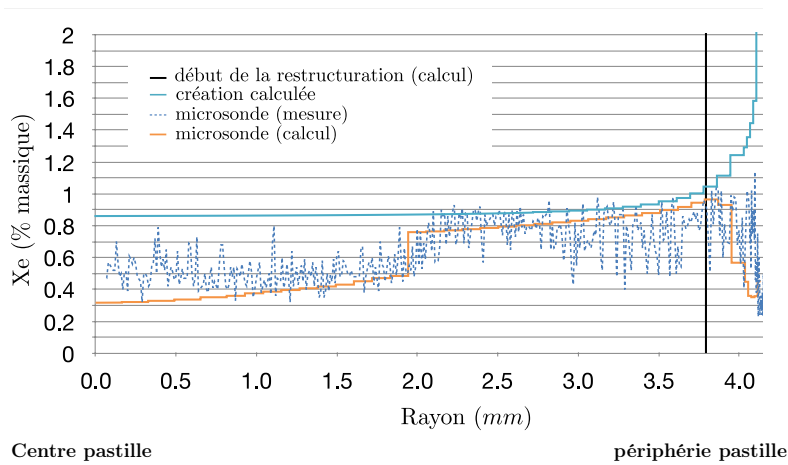


FIGURE 1.47 – Quantité de xénon mesuré et calculé à la microsonde (en % massique) en fonction du rayon (en mm).

Qualitativement la mesure microsonde met en évidence un écart significatif avec la création en zone centrale et dans le rim, ce qui est en accord avec le calcul⁴⁵. De façon moins marqué, la mesure semble indiquer un relâchement autour de 3.3 mm , ce qui est inhabituel et n'est pas pris en compte par le calcul. Quantitativement, un bon accord calcul-mesure est observé⁴⁶, avec une légère sous-estimation du calcul au centre (0.3 % calculé contre 0.5 % mesuré).

Nous allons à présent utiliser la ligne de base du signal SIMS, mesure qui permet de déterminer la quantité de gaz dissous et/ou nano-précipité. Compte tenu de l'inventaire calculé par ALCYONE, la quantité mesurée dans la ligne de base est comparable à la quantité de gaz dissous calculée en zone centrale et dans le rim (courbe rose sur la figure 1.48), d'une part, et à la totalité du gaz intragranulaire calculé en zone intermédiaire (courbe bleue sur la figure 1.48), d'autre part (le reste du gaz retenu dans ces zones étant présent dans des bulles submicrométriques intra et/ou intergranulaires, voir figure 1.45). L'évolution radiale de la quantité de xénon mesurée dans la ligne de base (triangles verts) est donc reportée sur la figure 1.48, ainsi que la quantité calculée de xénon retenu dans le combustible (courbe rouge), en position intragranulaire (courbe bleue) et dissous (courbe rose).

45. Pour rappel, l'écart entre la création et la mesure microsonde est notamment le résultat d'une précipitation de gaz voire un relâchement, ce qui correspond à ce qui a été calculé dans ces zones

46. Les positions radiales des mesures ne correspondent pas exactement aux calculs car la déformation radiale est différente entre le calcul et la mesure (la sous-prédiction du diamètre de la gaine à la position des microanalyses (droite verte sur la figure 1.39) suggère une sous-estimation de la déformation du combustible). Mais la quantité mesurée est bien en accord avec la quantité calculée en périphérie du combustible.

1.4. Estimation de la pression dans les bulles de gaz de fission sur la base des données de simulation et des résultats des examens post-irradiatoires

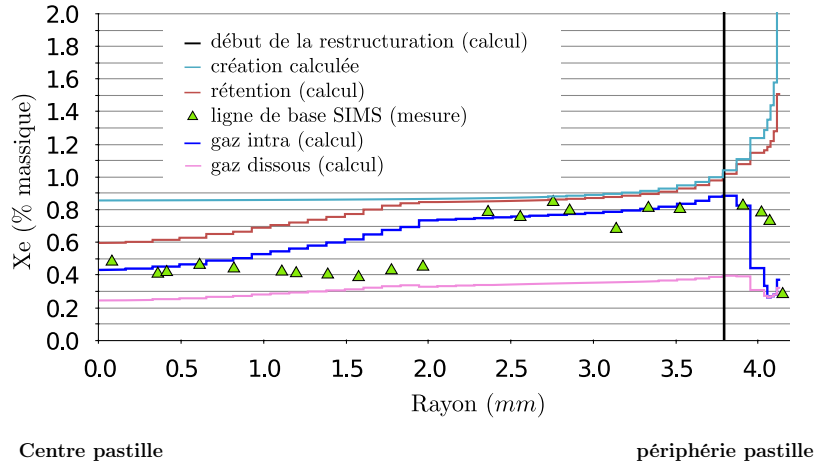


FIGURE 1.48 – Quantité de xénon mesuré dans le ligne de base et de l’inventaire gaz calcul (en % massique) en fonction du rayon (en mm).

D’après la comparaison, la quantité de gaz dissous calculée en zone centrale est sous-prédite (la quantité calculée est comprise entre 0.25 et 0.35 % (courbe rose) à comparer à une quantité mesurée d’environ 0.4 % (triangles verts)). En revanche, un bon accord calcul-mesure est observé en zone intermédiaire (triangles à comparer à la courbe bleue) et dans le rim⁴⁶ (triangles à comparer aux courbes rose et bleu qui sont confondues).

Les quantités calculées de gaz précipité dans les bulles sont désormais comparées à la mesure. Pour cela, les évolutions radiales de la quantité de gaz présente dans les bulles submicrométriques d’après la mesure du SIMS (différence entre la quantité totale et la ligne de base, représentée par les ronds violets) et de la quantité calculée dans les bulles intergranulaires et les bulles de précipitation intragranulaires (courbe grise) sont reportées sur la figure 1.49.

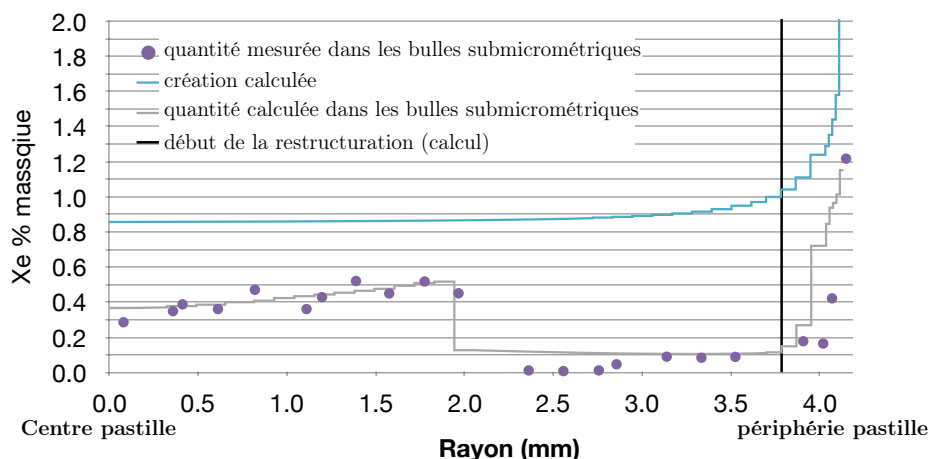


FIGURE 1.49 – Quantité de xénon (en % massique) calculée et mesurée en fonction du rayon (en mm) dans les bulles submicrométriques.

1.4. Estimation de la pression dans les bulles de gaz de fission sur la base des données de simulation et des résultats des examens post-irradiatoires

À un rayon pastille compris entre 2.16 et 3 mm, la confrontation des mesures MEB et SIMS en section 1.4.1 a démontré que la mesure de la quantité de gaz dans les cavités n'était pas suffisamment précise pour que la comparaison calcul-mesure puisse être réalisée dans cette zone. Dans le reste de la pastille, un bon accord calcul-mesure est constaté⁴⁶.

Les résultats de la comparaison des quantités de gaz calculées et mesurées sont résumés dans le tableau 1.14.

Zone de la pastille		zone centrale (0 – 2.16 mm)	zone intermédiaire (2.16 – 4.08 mm)	rim (4.08 – 4.14 mm)
Microsonde (en % massique)	mesure	0.32 – 0.9	0.4 – 1.06	0.17 – 0.54
	simulation	0.32 – 0.49	0.45 – 0.97	0.35 – 0.38
Ligne de base SIMS (en % massique)	mesure	0.39 – 0.48	0.68 – 0.85	0.28
	simulation	0.25 – 0.34	0.33 – 0.89	0.26 – 0.37
Bulles submicrométriques (en % massique)	mesure	0.28 – 0.52	0.01 – 0.17	1.2
	simulation	0.37 – 0.52	0.1 – 0.15	0.9 – 1.15

TABLE 1.14 – Résumé de la comparaison calcul-mesure des quantités de gaz (en % massique).

Dans cette sous-section, la confrontation des quantités de gaz mesurées et calculées a permis d'évaluer la pertinence de l'inventaire des gaz de fission calculé par ALCYONE. D'après cette confrontation, seul le gaz dissous en zone centrale est sous-prédict, ce qui est cohérent avec la sur-prédiction du relâchement dans cette zone. À part ce point sans incidence sur l'estimation des pressions utilisées par la suite, un bon accord calcul-mesure est observé.

1.4.2.5 Comparaison des volumes molaires des bulles de gaz de fission (pré-requis à l'obtention de la pression)

Pour estimer la pression dans les bulles du combustible, il est nécessaire de connaître le volume molaire des bulles, i.e. le rapport entre leur volume et la quantité de gaz qu'elles contiennent (voir section 1.3.3). Afin d'évaluer cette quantité expérimentalement, la totalité du gaz détecté dans les bulles submicrométriques par le SIMS est supposée être contenue dans des bulles dont la taille est comprise entre 30 nm et 3 μm (voir partie 1.4.1). Grâce à cette hypothèse, le volume molaire est défini comme étant le rapport entre la porosité fine (voir tableau 1.12) et la quantité de gaz détectée dans les bulles submicrométriques (voir tableau 1.14). Du point de vue de la simulation, ce rapport s'exprime comme :

$$V_m^I = \frac{f_v^{prec} + f_v^{inter}}{C_{prec,mol}^{Xe} + C_{inter,mol}^{Xe}} \quad (1.49)$$

avec

- f_v^{inter} la fraction volumique des bulles intergranulaires (sans unité),
- f_v^{prec} la fraction volumique des bulles intragranulaires de précipitation (sans unité, cette valeur est nulle en dehors de la zone de précipitation dans la simulation),
- C_{inter}^{Xe} la quantité de gaz dans les bulles intergranulaires (en $mol.cm^{-3}$ de combustible) et

1.4. Estimation de la pression dans les bulles de gaz de fission sur la base des données de simulation et des résultats des examens post-irradiatoires

- C_{prec}^{Xe} la quantité de gaz dans les bulles intragranulaires de précipitation (en $mol.cm^{-3}$ de combustible, cette valeur est nulle en dehors de la zone de précipitation dans la simulation).

Le calcul du volume molaire par cette équation suppose que l'ensemble des cavités submicrométriques ne représentent qu'une seule population de bulles. Ainsi, le volume molaire défini par l'équation (1.49) n'est pas représentatif d'une population de bulles en particulier mais doit être vu comme une évaluation globale qui peut être directement comparée à la mesure.

On s'attend lors des comparaisons qui suivent à des écarts calcul-mesure car, si l'inventaire gazeux dans les bulles est bien estimé par le calcul (cf. 1.4.2.4), des écarts significatifs ont été identifiés en section 1.4.2.3 concernant le calcul de la porosité. Les volumes molaires évalués à partir des mesures (losanges bleus) et calculés par l'équation (1.49) (courbe en pointillés rouges) en fonction du rayon pastille sont donc reportés figure 1.50. Sur cette figure, les volumes molaires déterminés par l'expérimentateur sont également reportés (triangles orange). Les évaluations supérieures à $300 cm^3.mol^{-1}$ ne sont pas retenues dans la comparaison calcul-mesure car elles ne sont a priori pas représentatives (voir la discussion à ce sujet en section 1.4.1.2).

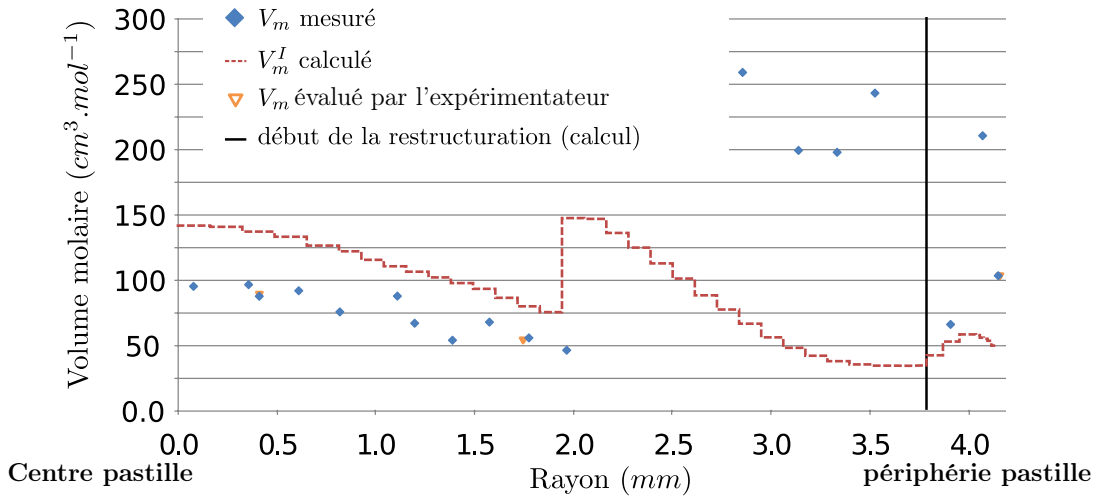


FIGURE 1.50 – Volume molaire (en $cm^3.mol^{-1}$) évalué à partir de la mesure et du calcul en fonction du rayon dans la pastille (en mm) (Zoom de la figure 1.51).

Cette figure met en évidence une forte variation des écarts calcul-mesure en fonction de la position radiale. Afin de quantifier ces écarts dans les différentes zones du combustible, les volumes molaires mesurés et calculés sont reportés dans le tableau 1.16, ainsi que la moyenne des écarts calcul-mesures absolu, $\langle \Delta V_m \rangle$ et relatif $\langle \Delta \frac{\Delta V_m}{V_m} \rangle$, moyennes prises au sens des équations (1.45) et (1.46) respectivement.

1.4. Estimation de la pression dans les bulles de gaz de fission sur la base des données de simulation et des résultats des examens post-irradiatoires

Zone de la pastille	zone centrale (0 – 2.16 mm)	zone intermédiaire (2.16 – 4.08 mm)	rim (4.08 – 4.14 mm)
Mesure (en $cm^3.mol^{-1}$)	66	205	103
Calcul (en $cm^3.mol^{-1}$)	107	68	55
$\langle \Delta V_m \rangle$ (en $cm^3.mol^{-1}$)	42	373	50
$\langle \frac{\Delta V_m}{V_m} \rangle$ (en %)	39	500	100

TABLE 1.15 – Résumé des volumes molaires d’après la mesure et la simulation (en $cm^3.mol^{-1}$).

D’après ce tableau, le volume molaire calculé est :

- Légèrement surestimé (écart calcul-mesure relatif moyen de 39 %), en zone centrale (0 – 2.16 mm).
- Très fortement sous-prédict (500 % d’écart relatif moyen), en zone intermédiaire (2.16 – 4.08 mm).
- Fortement sous-estimé (100 % d’écart relatif moyen), dans le rim (4.08 – 4.14 mm).

Pour l’ensemble de la pastille, ces écarts sont comme attendu principalement dus aux écarts entre la porosité calculée et mesurée.

Les évaluations expérimentales du volume molaire ont donc permis d’évaluer la pertinence du calcul. Néanmoins, cette mesure, puisqu’elle n’est pas représentative d’une population en particulier, ne permet pas de valider les volumes molaires calculés dans les bulles intra et intergranulaires. Pour ce faire des mesures locales du volume molaire, telles que les mesures "monobulles" abordées en section 1.3.3, seraient nécessaires.

1.4.3 Conclusions

1.4.3.1 Bilan

Dans le cadre de cette partie, afin de déterminer la pression qui règne dans les cavités durant le transitoire, une simulation de l’irradiation de base d’un crayon UO_2 à fort taux de combustion a été réalisée. La pression des cavités, à travers le volume molaire, dépend de paramètres microstructuraux (porosité, quantités de gaz précipité) dont l’évolution durant l’irradiation a été déterminée par le calcul. Des mesures post-irradiatoires réalisées sur le crayon fort taux ont notamment permis de mesurer ces quantités. L’objectif de cette étude a donc été de comparer les quantités calculées aux mesures post-irradiatoires.

Expérimentalement, le volume molaire est évalué en calculant le rapport entre la porosité fine (comprise entre 30 nm et 3 μm) et la quantité de gaz dans les bulles submicrométriques. Ces différentes quantités mesurées ont donc été comparées aux résultats de calcul. D’après ces comparaisons, un bon accord calcul-mesure est constaté concernant les quantités de gaz qui ont un effet sur la pression des bulles. En revanche, des écarts significatifs ont été identifiés sur la porosité :

1.4. Estimation de la pression dans les bulles de gaz de fission sur la base des données de simulation et des résultats des examens post-irradiatoires

- En zone centrale ($0 - 2.16 \text{ mm}$), la porosité intragranulaire calculée est modérément sous-prédite (55 % d'écart relatif), alors que la porosité intergranulaire calculée surestime fortement la mesure (71 % d'écart relatif). Du fait de ces écarts, la porosité totale calculée surestime la mesure de porosité fine (38 % d'écart relatif).
- En zone intermédiaire ($2.16 - 4.08 \text{ mm}$), la porosité intragranulaire (de taille nanométrique) n'est pas comparable à la mesure. Ainsi, la porosité fine (assimilée à la porosité intergranulaire dans ce cas) calculée est en bon accord avec la mesure sur l'intervalle $[2.16, 3] \text{ mm}$, mais est très fortement sous-prédite au delà (près de 300 % d'écart relatif).
- Dans le rim ($4.08 - 4.14 \text{ mm}$), la porosité fine (également assimilée à la porosité intergranulaire) est fortement sous-prédite par le calcul (90 % d'écart relatif).

Ces écarts sur la porosité expliquent pourquoi le volume molaire est légèrement surestimé en zone centrale (39 % d'écart relatif), très fortement sous-prédit en zone intermédiaire (500 % d'écart relatif) et fortement sous-estimé dans le rim (100 % d'écart relatif).

1.4.3.2 Estimation des pressions

Les écarts calcul-mesure ayant été identifiés, la pression des cavités est déterminée à partir des volumes molaires calculés dans les différentes populations de bulles. Les évolutions radiales des volumes molaires calculés dans les bulles intra (V_m^{intra} , courbe orange) et intergranulaires (V_m^{inter} , courbe verte) sont reportées sur la figure 1.51.

Comme nous venons de le voir, les écarts entre les porosités calculées et mesurées ont une influence significative sur le calcul du volume molaire. C'est pourquoi nous proposons une estimation mixte du volume molaire, d'une part à partir de la quantité de gaz calculée dans chacune des populations de bulles⁴⁷ et d'autre part à partir de la mesure de la porosité associée à ces populations (lorsque cette mesure est disponible). Les classes de tailles de porosité mesurées qui sont utilisées pour l'estimation sont donc les suivantes (cf. section 1.4.2.3) :

- Pour les bulles intergranulaires, la porosité comprise entre 1 et $3 \mu\text{m}$ en zone centrale, et l'ensemble de la porosité fine dans le reste de la pastille.
- Pour les bulles intragranulaires, la porosité comprise entre 0.03 et $1 \mu\text{m}$ en zone centrale.

Rappelons que la porosité attribuée aux bulles intragranulaires en zone intermédiaire n'est pas disponible à partir des mesures réalisées. Dans cette zone, c'est donc la porosité calculée qui est utilisée pour l'estimation⁴⁸.

Les estimations mixtes du volume molaire des bulles intra et intergranulaires sont illustrées figure 1.51 par les croix orange et vertes respectivement.

47. Sachant que la quantité totale calculée dans les bulles est en accord avec la mesure, pour rappel

48. Rappelons également que les bulles intragranulaires sont supposées être absentes de la zone de rim.

1.4. Estimation de la pression dans les bulles de gaz de fission sur la base des données de simulation et des résultats des examens post-irradiatoires

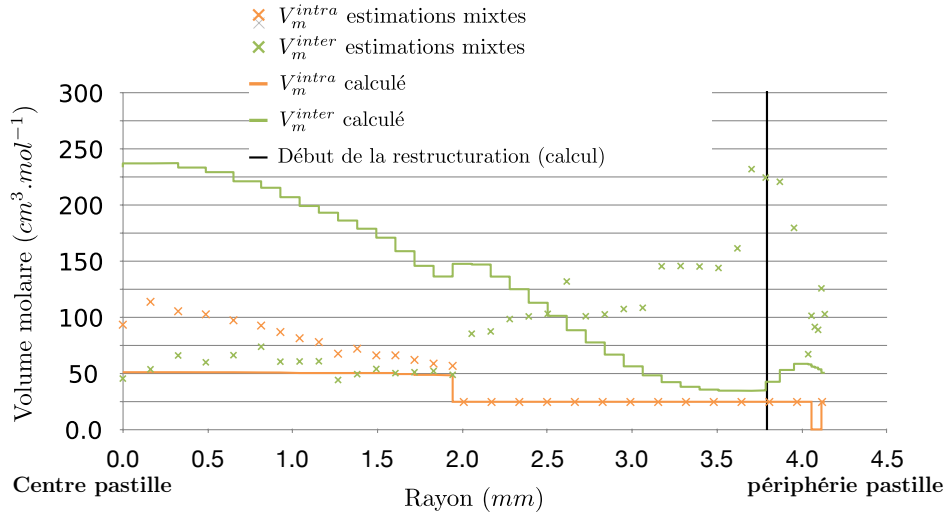


FIGURE 1.51 – Estimations et calculs du volume molaire inter-intra (en $cm^3.mol^{-1}$) en fonction du rayon pastille (en mm).

Les volumes molaires moyen calculés et les estimations mixtes sont également résumés en fonction des différentes zone de la pastille dans le tableau suivant :

Zone de la pastille	Type d'estimation	Zone centrale (0 – 2.16 mm)	Zone intermédiaire (2.16 – 4.08 mm)	Rim (4.08 – 4.14 mm)
V_m^{intra}	calcul	49	25	
	estimations mixtes	76	// ⁴⁹	
V_m^{inter}	calcul	182	68	55
	estimations mixtes	56	140	100

TABLE 1.16 – Résumé du calcul et des estimations du volume molaire (en $cm^3.mol^{-1}$).

À partir de ces volumes molaires, la pression (évaluation et encadrement) des cavités durant le transitoire est déterminée en suivant la méthodologie définie en section 1.3.4.2 (pressions calculées par l'équation d'état d'ALCYONE et encadrements déterminés à partir des pressions extrapolées et calculées par les équations d'état). Les évolutions radiales de la pression calculée dans les bulles intra (P^{intra} , courbe orange) et intergranulaires (P^{inter} , courbe verte) à 1473 K sont reportées figure 1.52, pour la zone centrale et figure 1.53, pour la périphérie du combustible. Les barres sur les courbes représentent les encadrements de la pression à cette température.

Sur ces figures, les pressions (évaluations et encadrements) déterminées à partir des estimations mixtes du volume molaire des bulles intra et intergranulaires, sont représentées par les croix en orange et vert respectivement.

49. Les volumes molaires calculées et estimées sont confondues en zone intermédiaire, pour rappel.

1.4. Estimation de la pression dans les bulles de gaz de fission sur la base des données de simulation et des résultats des examens post-irradiatoires

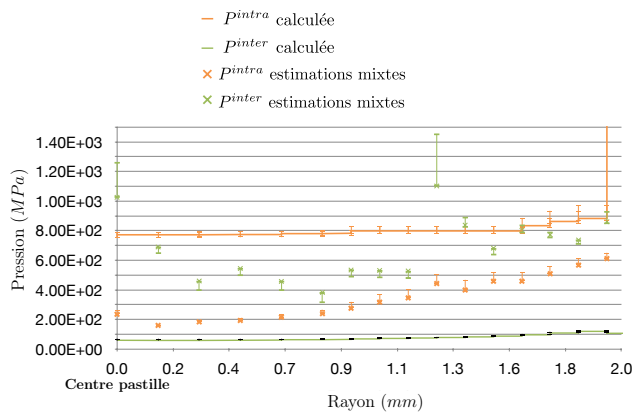


FIGURE 1.52 – Estimations et calculs de la pression inter-intra (en MPa) en fonction du rayon pastille (en mm) en zone centrale.

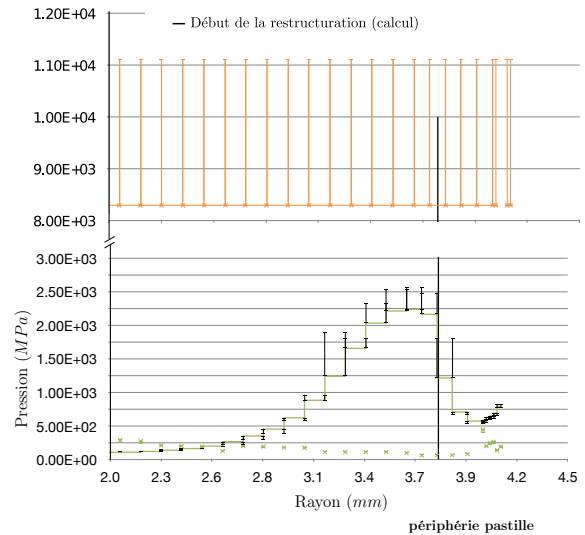


FIGURE 1.53 – Estimations et calculs de la pression inter intra (en MPa) en fonction du rayon pastille (en mm) en périphérie.

Les moyennes des pressions calculées, issues des estimations mixtes ainsi que de leurs encadrements (écarts entre les bornes, borne supérieure et inférieure) sont résumés, dans le tableau suivant :

1.4. Estimation de la pression dans les bulles de gaz de fission sur la base des données de simulation et des résultats des examens post-irradiatoires

Zone de la pastille	Type d'estimation	Zone centrale (0 – 2.16 mm)	Zone intermédiaire (2.16 – 4.08 mm)	Rim (4.08 – 4.14 mm)
P^{intra}	calcul	808	8290	
	estimations mixtes	384	// ⁵⁰	
ΔP^{intra}	calcul	52	2820	
	estimations mixtes	48	// ⁵⁰	
$P^{intra,sup}$	calcul	838	2820	
	estimations mixtes	48	// ⁵⁰	
$P^{intra,inf}$	calcul	786	0	
	estimations mixtes	0	// ⁵⁰	
P^{inter}	calcul	78	936	670
	estimations mixtes	684	147	214
ΔP^{inter}	calcul	6	400	43
	estimations mixtes	75	13	23
$P^{inter,sup}$	calcul	84	1310	670
	estimations mixtes	724	150	214
$P^{inter,inf}$	calcul	78	913	626
	estimations mixtes	650	138	191

TABLE 1.17 – Résumé des estimations et du calcul des pressions à 1473 K (en MPa).

Comme attendu compte-tenu des écarts calcul-mesure constatés en section 1.4.2.3, utiliser la porosité mesurée pour déterminer la pression a un effet significatif. En effet, avec les estimations mixtes :

- En zone centrale, c'est dans les bulles intergranulaires que la pression est la plus forte, à l'inverse de ce qui est calculé.
- En zone intermédiaire et pour un rayon supérieur à 2.8 mm, la pression des bulles intergranulaires est nettement plus faible que ce que prédit le calcul.

Ces pressions vont permettre de déterminer l'intensité de la sur-contrainte de traction des bulles en section 1.5 et le chargement appliqué par les bulles intergranulaires au chapitre 2.

1.4.3.3 Estimation des paramètres relatifs au chargement appliqué par les bulles intergranulaires

Pour le modèle de décohésion des joints de grains d'ALCYONE (voir 1.2.2.1) et le modèle qui sera décrit au chapitre 2, le chargement appliqué par les bulles intergranulaires dépend du taux de recouvrement de ces bulles au joint de grains f_s^* et de la sur-pression qui règne dans ces cavités P_{eff}^{inter} . La sur-pression des bulles intergranulaires s'écrit :

$$P_{eff}^{inter} = P^{inter} - P_{\gamma}^{inter} \quad (1.50)$$

50. Les pressions (estimations et encadrements) calculées et estimées sont confondues en zone intermédiaire, pour rappel.

1.4. Estimation de la pression dans les bulles de gaz de fission sur la base des données de simulation et des résultats des examens post-irradiatoires

où $P_\gamma = \frac{2\gamma \sin(\theta_b)}{r_b}$ est la tension de surface, avec $\gamma = 0.28 \text{ J.m}^{-2}$ à 1473 K d'après l'équation (1.36), $\theta_b = 50^\circ$ [104] est l'angle diédrale des bulles (cf. figure 1.15) et r_b le rayon des bulles (cf. figure 1.42).

Les moyennes des paramètres relatifs au chargement des bulles intergranulaires dans chacune des zones radiales du combustible sont reportées dans le tableau 1.18 :

- La fraction surfacique de bulles au joint de grains f_s^* n'a pas pu être mesurée expérimentalement, c'est donc sa valeur calculée qui est retenue. Cette valeur⁵¹ est maximale en zone centrale (50 % de la surface du joint de grains occupé par les bulles) et diminue en zone intermédiaire.
- Le diamètre des bulles intergranulaires D_b^{inter} calculé sous-estime la mesure (d'un facteur 2 en zone centrale et dans le rim et d'un facteur 5 en zone intermédiaire). Ainsi, la tension de surface calculée⁵² surestime la mesure dans l'ensemble des zones du combustible. Néanmoins, comme P_γ^{inter} est systématiquement faible devant la pression des bulles (il faudrait que la taille des bulles soit de l'ordre de 10 nm pour que la tension de surface soit non-négligeable, i.e. de l'ordre de 100 MPa), ces écarts calcul-mesure ont peu d'impact sur la valeur de la sur-pression.
- Les écarts entre le calcul et les estimations mixtes de la sur-pression des bulles intergranulaires⁵³ (liés aux écarts entre pressions calculées et estimées, cf. figure 1.52 et 1.52, et donc aux écarts entre la porosité calculée et mesurée) sont importants en zone centrale (90 % d'écart relatif) et très importants en zone intermédiaire et dans le rim (respectivement 537 % et 214 % d'écart relatif).
- Les encadrements de la pression des bulles (liés aux équations d'état) permettent de définir un encadrement de la sur-pression. Comme aucun encadrement n'est défini pour P_γ^{inter} , l'écart entre les bornes de la sur-pression s'exprime comme :

$$\Delta P_{eff}^{inter} = \Delta P^{inter}$$

Cet écart est négligeable (moins de 11 % d'écart relatif) quelle que soit la zone radiale considérée et le type d'estimation (estimations mixtes ou calcul), à l'exception de la sur-pression calculée en zone intermédiaire, zone dans laquelle l'écart est modéré (43 % d'écart relatif).

51. La fraction surfacique réduite est reportée, i.e., la valeur de cette fraction en prenant en compte l'ensemble des défauts présent au joint de grains (fissure, porosité de fabrication, etc.).

52. La tension de surface calculée et mesurée dans le tableau font ici référence aux valeurs déterminées par le rayon des bulles calculé et mesuré respectivement.

53. Les estimations mixtes de P_{eff}^{inter} sont déterminées à partir des estimations mixtes de P^{inter} et des tensions de surface mesurées.

1.4. Estimation de la pression dans les bulles de gaz de fission sur la base des données de simulation et des résultats des examens post-irradiatoires

Zone de la pastille	Type d'estimation	Zone centrale (0 – 2.16 mm)	Zone intermédiaire (2.16 – 4.08 mm)	Rim (4.08 – 4.14 mm)
f_s^* (-)	calcul	0.5	0.35	- ⁵⁴
D_b^{inter} (nm)	calcul	670	196	510
	mesure	1580	992	920
P_γ^{inter} (MPa)	calcul	2	6	2
	mesure	1	1	1
P_{eff}^{inter} (MPa)	calcul	76	930	668
	estimations mixtes	683	146	213
$\frac{ P_{eff}^{inter,calc} - P_{eff}^{inter,em} }{P_{eff}^{inter,em}}$ (%) ⁵⁵	Ecart calcul-estimation	89	537	214
$\frac{\Delta P_{eff}^{inter}}{P_{eff}^{inter}}$ (%)	calcul	8	43	6
	estimations mixtes	11	9	11

TABLE 1.18 – Résumé des quantités relatives au chargement appliqué par les bulles intergranulaires à 1473 K.

D'après cette comparaison, les tensions de surface (calculées ou estimées) sont faibles devant la pression. Ainsi, la sur-pression des bulles intergranulaires ne dépend que de leur pression. Même en prenant en compte les "incertitudes" liées à la loi d'état, le calcul de cette pression est en contradiction avec les estimations mixtes. Ce résultat suggère que la localisation des zones de décohésion prédite par le critère d'ALCYONE (critère défini en section 1.2.2.1) peut potentiellement être différente en fonction de l'estimation retenue (calcul ou estimation mixte)⁵⁶. Or, les écarts entre pression calculée et estimée sont dus à la porosité. Par conséquent, les écarts calcul-mesure liés à la porosité peuvent avoir un fort impact sur la modélisation de la décohésion des joints de grains.

1.4.3.4 Perspectives

En perspectives :

- Bilan de la porosité en zone intermédiaire.** Dans le cadre de cette étude, les bulles nanométriques ont été exclues de l'analyse car ces cavités n'ont pas pu être observées expérimentalement. Les mesures MET attendues sur le combustible UO₂ ayant

54. Dans le rim, comme les grains sont plus petit que les bulles, la notion de taux de recouvrement des joints n'a plus de sens. Cette quantité n'est donc pas calculée dans cette zone.

55. Où $P_{eff}^{inter,calc}$ et $P_{eff}^{inter,em}$ sont les sur-pressions calculée et issues des estimations mixtes respectivement.

56. Il est à noter que cette conclusion ne dépend pas uniquement de la sur-pression des bulles intergranulaires mais également de la contrainte à rupture dans les différentes zones du combustible.

fait l'objet de notre étude permettront d'évaluer la porosité de ces bulles, mesures qui pourront alors être comparée au calcul de la porosité intragranulaire en zone intermédiaire. Cette comparaison permettra notamment d'évaluer la pertinence de l'hypothèse retenue pour la comparaison calcul-mesure dans cette zone, hypothèse qui consiste à attribuer l'ensemble de la porosité fine aux bulles intergranulaires.

2. **Evaluations locales des volumes molaires.** Les mesures expérimentales réalisées pour déterminer le volume molaire des cavités, sont des évaluations globales qui ne sont pas représentatives d'une population de bulles en particulier. Afin de valider l'ordre de grandeur des volumes molaires calculés dans les bulles intra et intergranulaires, des évaluations locales, telles que les mesures dites "monobulle" (cf. section 1.3.3), seraient nécessaires.
3. **Mesures du taux de recouvrement des bulles.** La fraction surfacique des bulles au joint de grains calculée n'a pas pu être validée sur la base des mesures réalisées. Afin de mesurer l'évolution radiale de cette quantité, il serait nécessaire de réaliser des observations des joints de grains à partir de fractographies (comme celles réalisées dans [142]) et/ou d'analyser les images MEB-FIB des bulles intergranulaires.

1.5 Estimation de la contrainte de sur-traction des différentes populations de bulles

Connaissant la répartition de la porosité et la pression dans les différentes populations de bulles du combustible suite à son irradiation de base, la sur-contrainte de traction des bulles peut être déterminée. Pour rappel, en présence d'une seule population de bulles, cette contrainte est exprimée par l'équation (1.17) comme $\sigma_B = P_{eff}B$, équation qui fait donc intervenir la sur-pression des bulles (P_{eff} exprimée par l'équation (1.1)) et le coefficient de Biot (B). Si le matériau est isotrope, ce coefficient est calculé à partir des propriétés élastiques effectives, d'après la relation suivante :

$$B = 1 - \frac{k^{hom}}{k'} \quad (1.51)$$

avec $k' = 120 \text{ GPa}$ le module de compressibilité de la matrice du milieu poreux et k^{hom} le module de compressibilité effectif du milieu, ce module effectif dépend des propriétés de la matrice et de la porosité du matériau.

Une première estimation du coefficient de Biot des différentes populations de bulles a été réalisée antérieurement sur la base des résultats de simulation de l'irradiation de base. Dans cette approche, k^{hom} est évalué par le modèle d'homogénéisation de Mori-Tanaka [94] qui, pour des cavités sphériques réparties de manière isotrope, s'exprime comme :

$$k^{hom} = k' (1 - f_v) \frac{1}{1 + \frac{3}{4} f_v \frac{k'}{\mu_e}} \quad (1.52)$$

avec $\mu_e = 62.5 \text{ GPa}$ le module de cisaillement de la matrice du milieu et f_v la fraction volumique (ou porosité) de bulles. L'utilisation de cette méthode revient à considérer que

les bulles sont sphériques et que leur répartition spatiale est isotrope. Or, les observations 3D des bulles au MEB-FIB (présentées en section 1.4.1.2) remettent en cause l’hypothèse de bulles sphériques.

Nous cherchons donc à prendre en compte l’impact de la forme des bulles sur le coefficient de Biot afin d’apprécier la pertinence des estimations antérieures de ce coefficient, estimations pour lesquelles les bulles étaient considérées sphériques. Pour ce faire, un modèle d’homogénéisation adapté est utilisé.

1.5.1 Estimation du coefficient de Biot avec prise en compte de la forme non-sphérique des bulles

À partir des porosités mesurées et calculées (voir section 1.4.2.3), la valeur du coefficient de Biot est déterminée. Pour cela, les cavités sont considérées comme réparties de manière isotrope. Dans un premier temps, les valeurs de B sont estimées en considérant des bulles sphériques. Pour ce faire, le coefficient de compressibilité effectif k^{hom} intervenant dans (1.51) est calculé à partir du modèle de Mori-Tanaka [94] (équation (1.52)). Dans un second temps, B est estimé en considérant des cavités sphéroïdales dont les facteurs de forme ont été caractérisés en section 1.4.1.2. Pour ce faire, le coefficient de compressibilité effectif k^{hom} est déterminé à partir du modèle de Ponte Castañeda et Willis [29] (expression (A.1) donnée dans l’annexe A.3).

Les valeurs de B dans le cas sphérique, pour les bulles intragranulaires et intergranulaires, sont données par les figures 1.55 et 1.57 respectivement, à partir des porosités calculées et mesurées. Il est possible de montrer que pour les niveaux de porosité présents dans le combustible l’expression (1.52) peut raisonnablement être approchée par [85] :

$$k^{hom} = f_v \left(1 + \frac{3}{4} \frac{k'}{\mu_e} \right). \quad (1.53)$$

D’après cette équation, il y a une relation linéaire entre B et f_v . De ce fait, si les bulles sont considérées sphériques, l’écart entre les valeurs de B calculées et mesurées est proportionnel à l’écart calcul-mesure au niveau de la porosité. Cette comparaison permet donc de quantifier l’écart des valeurs de B mais les tendances seront les mêmes que celles observées pour la porosité en section 1.4.2.3.

Concernant les bulles intragranulaires dans le cas sphérique (voir figure 1.55), d’après la comparaison calcul-mesure :

- en zone centrale ($0 - 2.16 \text{ mm}$), le maximum de l’écart calcul-mesure du coefficient de Biot, noté $\Delta B^{calc-mesure}$, est d’environ 0.02 avec une valeur quasi-constante de 0.04 d’après la mesure (ronds oranges) et variant de 0.02 à 0.04 d’après le calcul (courbe rouge).
- En zone intermédiaire ($2.16 - 4.08 \text{ mm}$), le calcul donne un coefficient de Biot compris entre 0.02 à 0.025. Cette valeur est représentative des bulles nanométriques, or, comme mentionnées en section 1.4.2.3 les mesures excluent ces bulles. La porosité et donc le coefficient de Biot calculés ne peuvent donc pas être comparés à la mesure.

1.5. Estimation de la contrainte de sur-traction des différentes populations de bulles

- Dans le rim (4.08–4.14 *mm*), les bulles sont supposées être en position intergranulaire, le coefficient de Biot des bulles intragranulaires dans cette zone est donc nul.

Concernant les bulles intergranulaires dans le cas sphérique (voir figure 1.57), d’après la comparaison calcul-mesure :

- en zone centrale (entre 0 et 2.16 *mm*), le maximum de l’écart calcul-mesure est atteint au centre ($\Delta B^{calc-mesure} = 0.06$) avec une valeur calculée ($B \in [0.03-0.085]$) supérieure à la valeur expérimentale ($B \in [0.02 - 0.03]$).
- En zone intermédiaire (entre 2.16 et 4.08 *mm*), l’écart calcul-mesure est important en périphérie avec une valeur calculée ($B \in [0.01 - 0.03]$) inférieure à la valeur expérimentale ($B \in [0.02 - 0.17]$).
- Dans le rim (4.08–4.14 *mm*), l’écart calcul-mesure est important ($\Delta B^{calc-mesure} = 0.15$ maximum) avec un B donné par la mesure à 0.27 contre 0.12 d’après le calcul.

Les valeurs du coefficient de Biot obtenues avec la méthode d’homogénéisation de Ponte Castañeda et Willis dans le cas de la simulation et de la mesure, pour les formes données par le tableau 1.9⁵⁷ sont données par les figures 1.56 et 1.58. Sur ces deux figures, les facteurs de forme des cavités (encadrements ou valeurs) sont reportés dans les différentes zones radiales (zones délimitées par les droites en pointillés grises).

Physiquement, à porosité identique, la contrainte qui se développe dans la matrice sous l’effet de la pressurisation des bulles est plus importante dans le cas où les pores sont sphéroïdaux que dans le cas où ils sont sphériques. Comme illustré figure 1.54, cela se traduit par une augmentation de B (équation (1.51) avec k^{hom} donnée par (A.1)) lorsque le facteur de forme w diminue (illustré ici pour une porosité fixée à 1.5 %). Ainsi, la comparaison calcul-mesure permet notamment d’apprécier la sensibilité du coefficient de Biot au facteur de forme pour une porosité donnée.

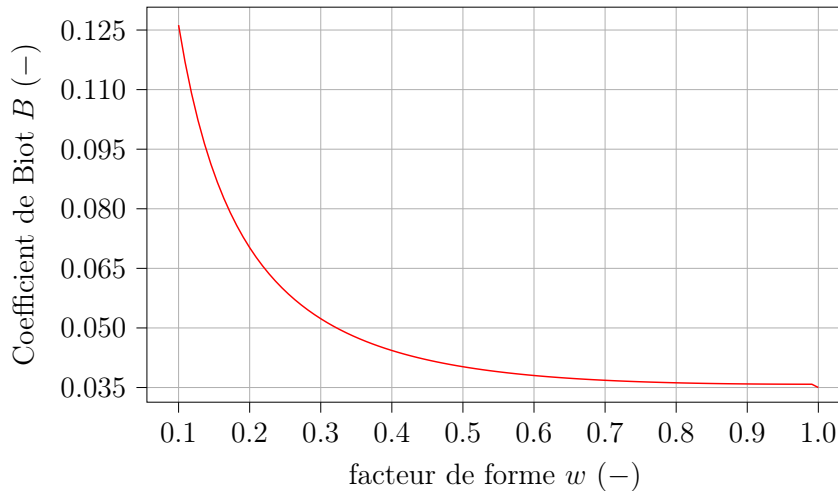


FIGURE 1.54 – Évolution du coefficient de Biot en fonction du facteur de forme pour une porosité fixée de 1.5 %.

57. En périphérie de la zone centrale (entre 1 et 2 *mm* d’après la mesure), les bulles de forme complexe semblent être le résultat de la coalescence des bulles en forme de disque. Si une bulle de forme complexe est composée d’un grand nombre de bulles en forme de disque, alors sa forme pourrait s’apparenter à une sphère. Ainsi, une valeur maximale du facteur de forme de 1 est retenue dans cette zone.

1.5. Estimation de la contrainte de sur-traction des différentes populations de bulles

Concernant les bulles intragranulaires dans le cas sphéroïdal (voir figure 1.56), d'après la comparaison calcul-mesure :

- Au centre (0 – 1 mm, zone dans laquelle le coefficient est compris entre une borne haute, pour $w = 0.1$ et une borne basse, pour $w = 0.3$), la valeur de B est sous-estimée par la simulation, avec la borne haute calculée qui est proche de la borne basse expérimentale. C'est dans cette zone que l'écart calcul-mesure entre les bornes supérieures est le plus grand (en 0.2 mm, $\Delta B^{calc-mesure} = 0.085$ avec $B = 0.15$ d'après la mesure contre $B = 0.065$ d'après la simulation).
- En périphérie de la zone centrale (1 – 2.16 mm, zone dans laquelle le coefficient est compris entre une borne haute pour $w = 0.1$ et une borne basse pour $w = 1$) un bon accord calcul-mesure est observé (e.g., pour la borne haute ($w = 0.1$) l'écart est d'environ $\Delta B^{calc-mesure} = 0.03$ à 1.25 mm, avec une valeur calculée de 0.1 contre 0.13 expérimentalement).
- En zone intermédiaire (2.16 – 4.08 mm, zone dans laquelle le facteur de forme est $w = 0.1$), le coefficient de Biot estimé par le calcul est représentatif des bulles nanométriques et ne peut être comparé à la valeur expérimentale comme mentionné précédemment. La valeur du coefficient de Biot calculée est relativement haute (équivalent à la zone centrale) car le facteur de forme est faible. Or, ce facteur correspond aux bulles observables et n'est donc pas forcément représentatif des bulles nanométriques.
- Dans le rim (4.08 – 4.14 mm), B est nul.

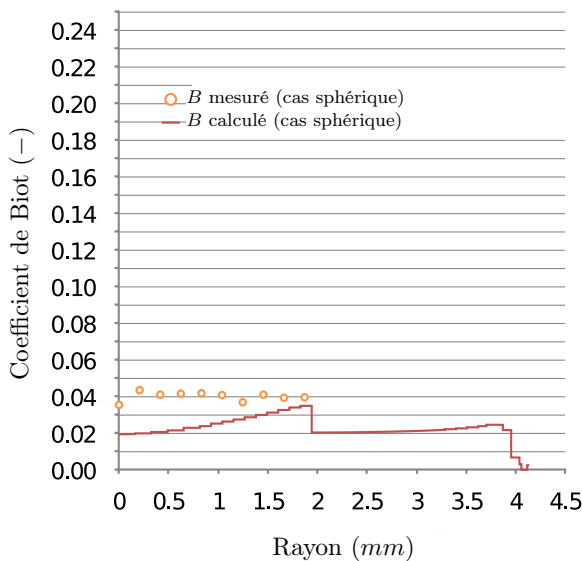


FIGURE 1.55 – Evolution du coefficient de Biot dans la pastille en considérant des bulles intragranulaires sphériques.

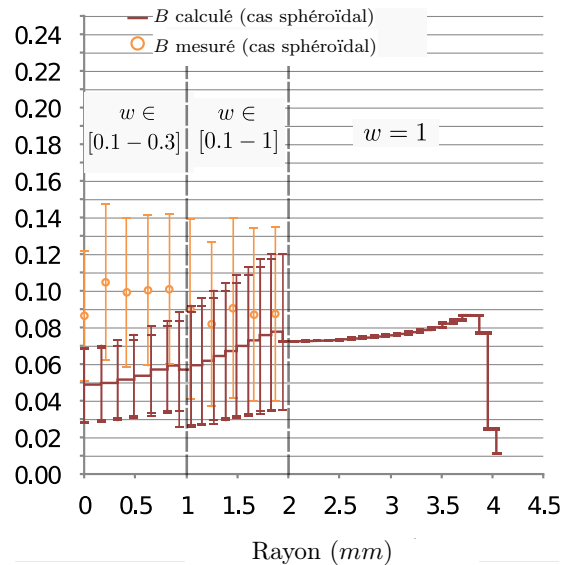


FIGURE 1.56 – Evolution du coefficient de Biot dans la pastille en considérant des bulles intragranulaires sphéroïdales.

Concernant les bulles intergranulaires dans le cas sphéroïdal (voir figure 1.58), d'après la comparaison calcul-mesure :

- En zone saine (0 – 4.08 mm, zone pour laquelle le facteur de forme est $w = 0.05$), Un écart calcul-mesure très important est constaté, l'écart maximal (à 0 mm) est de

1.5. Estimation de la contrainte de sur-traction des différentes populations de bulles

$\Delta B^{calc-mesure} = 0.35$ avec $B = 0.46$ d'après le calcul et $B = 0.11$ d'après la mesure. Ceci est dû à la forte sensibilité de B à la porosité (ici le maximum de l'écart calcul-mesure de porosité est près de 2.5 %) pour les valeurs basses du facteur de forme.

- Dans la zone de rim (4.08 – 4.14 mm), l'écart important au niveau de la porosité (près de 6 % d'écart absolu) induit un écart de $\Delta B^{calc-mesure} = 0.12$ seulement. Ceci est dû à la forme des bulles qui sont considérées sphériques dans cette zone, le coefficient de Biot est donc moins sensible à la porosité dans cette zone.

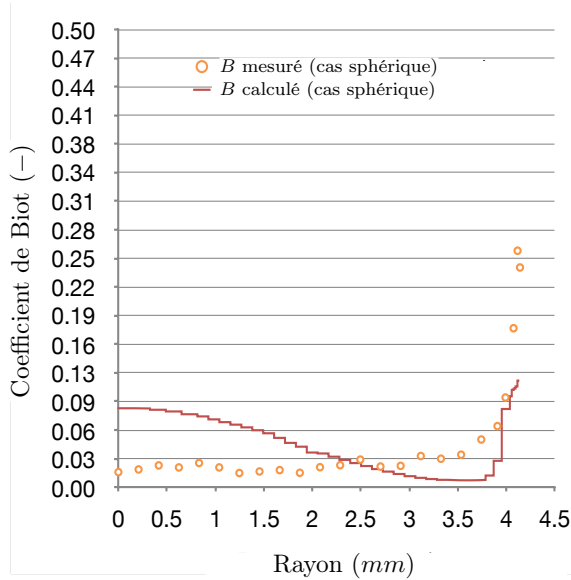


FIGURE 1.57 – Evolution du coefficient de Biot dans la pastille en considérant des bulles intergranulaires sphériques.

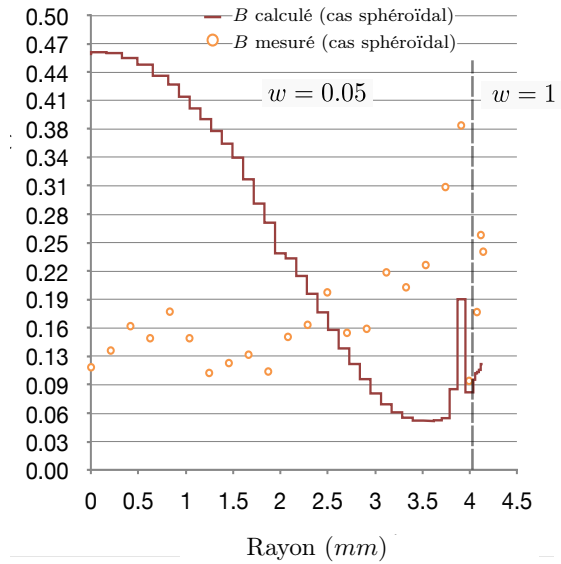


FIGURE 1.58 – Evolution du coefficient de Biot dans la pastille en considérant des bulles intergranulaires sphéroïdales.

La comparaison calcul-mesure dans le cas sphéroïdal permet d'établir l'influence de la fraction volumique pour un facteur de forme donné. Notamment pour des bulles très aplaties ($w = 0.05$) un faible écart de porosité (e.g. 2.5 % d'écart absolu pour les bulles intergranulaires en zone centrale) peut induire un écart important sur la valeur de B (e.g. $\Delta B^{calc-mesure} = 0.35$, dans ce cas).

Par conséquent, si la forme des bulles est prise en compte, alors la porosité doit être connue avec précision car le coefficient de Biot est très sensible à la fraction volumique dans ce cas.

D'après la comparaison entre le cas sphérique et le cas sphéroïdal, la forme des bulles – pour une fraction volumique fixée – a une forte influence sur la valeur du coefficient de Biot⁵⁸. Notamment, la mesure donne $B \in [0.035 - 0.045]$ pour les bulles intragranulaires en zone centrale, dans le cas des bulles sphériques (voir figure 1.55) alors que $B \in [0.12 - 0.15]$ pour la borne supérieure du cas des bulles sphéroïdales (voir figure 1.56) dont le facteur de forme est de 0.1, soit un facteur 3 entre les deux cas. Même pour la borne inférieure du coefficient de Biot ($w = 0.3$) l'écart avec le cas sphérique est non-négligeable ($\Delta B^{calc-mesure} \simeq 0.015$ en 0.25 mm).

58. Ici seules les valeurs provenant de la mesure sont comparées.

Ainsi, cette étude démontre que les bulles ne peuvent être considérées comme étant sphériques dans la modélisation.

D’après cette analyse, les encadrements des valeurs du coefficient de Biot (dont l’écart est noté ΔB) sont donnés pour les différentes zones du combustible tableau 1.19. Sur la base des discussions concernant la porosité et la forme des bulles, les estimations mixtes (à partir des paramètres calculés et/ou mesurés) des bornes hautes et basses du coefficient sont également données dans ce tableau. Les valeurs de ces bornes sont justifiées par la suite.

Concernant les bulles intragranulaires :

- En zone centrale ($0 - 2.16 \text{ mm}$), ces bulles devraient principalement être de taille sub-micrométrique. La porosité associée à cette population ainsi que la forme des bulles devraient donc être correctement mesurées (voir section 1.4.2.3). Les bornes du coefficient de Biot sont donc données par la mesure dans le cas sphéroïdal.
- En zone intermédiaire ($2.16 - 4.08 \text{ mm}$), la majorité des bulles intragranulaires devraient être de taille nanométrique. La porosité de ces bulles n’est donc pas mesurée, et la forme aplatie des bulles observées au MEB-FIB n’est représentative que des rares bulles submicrométriques, la forme des bulles nanométriques n’est donc pas connue. Par conséquent, le coefficient de Biot est calculé à partir de la porosité calculée et les bulles sont considérées comme étant sphériques.
- Dans le rim ($4.08 - 4.14 \text{ mm}$), Les bulles devraient être en position intergranulaire, le coefficient de Biot est supposé être nul.

Concernant les bulles intergranulaires :

- En zone saine ($0 - 4.08 \text{ mm}$), la simulation surestime fortement la porosité intergranulaire au centre et la sous-estime en périphérie. De plus, les mesures MEB-FIB montrent clairement que ces bulles sont loin d’être sphériques. Les valeurs du coefficient de Biot retenues sont donc données à partir des porosités mesurées en considérant le cas sphéroïdal.
- Dans le rim ($4.08 - 4.14 \text{ mm}$), le calcul sous-estime la porosité et les bulles observée sont sphériques, le coefficient de Biot est donc calculé à partir de la porosité mesuré en considérant le cas sphérique.

1.5. Estimation de la contrainte de sur-traction des différentes populations de bulles

Zone de la pastille	population	0 – 1 mm	1 – 2 mm	2 – 4.08 mm	4.08 – 4.14 mm
B d'après la mesure dans le cas de bulles sphériques	intra	0.035 – 0.045	0.037 – 0.041	0.01 – 0.046	0
	inter	0.017 – 0.027	0.009 – 0.019	0.007 – 0.021	0.04 – 0.26
B d'après la mesure dans le cas de bulles sphéroïdales	intra	0.05 – 0.15 $\Delta B = 0.07 - 0.086$	0.04 – 0.14 $\Delta B = 0.08$	0.03 – 0.15	0
	inter	0.11 – 0.17	0.065 – 0.145	0.047 – 0.142	0.04 – 0.26
B d'après la simulation dans le cas de bulles sphériques	intra	0.02 – 0.025	0.02 – 0.035	0.02 – 0.025	0 – 0.02
	inter	0.075 – 0.085	0.075 – 0.045	0.008 – 0.045	0.008 – 0.12
B d'après la simulation dans le cas de bulles sphéroïdales	intra	0.025 – 0.09 $\Delta B = 0.04 - 0.064$	0.025 – 0.12 $\Delta B = 0.064 - 0.086$	0.07 – 0.09	0 – 0.02
	inter	0.41 – 0.46	0.24 – 0.41	0.055 – 0.24	0.008 – 0.12
B estimations mixtes	intra	0.05 – 0.15 $\Delta B = 0.07 - 0.086$	0.04 – 0.14 $\Delta B = 0.08$	0.02 – 0.025	0
	inter	0.11 – 0.17	0.065 – 0.145	0.047 – 0.142	0.04 – 0.26

TABLE 1.19 – Encadrement des valeurs du coefficient de Biot en fonction des zones de la pastille pour différents cas.

1.5.2 Estimation des sur-contraintes de traction des bulles

À partir des estimations du coefficient de Biot et des pressions calculées à 1473 K (voir section 1.4.3), la sur-contrainte de traction induite par l'ensemble des populations de bulles est déterminée grâce à l'équation (1.17).

Il peut être montré [85] que pour des valeurs de B suffisamment faibles, la contrainte induite par l'ensemble des populations est égale à la superposition des contraintes de traction de chacune des populations (voir l'annexe A.5). Ainsi, seule la contrainte de la population dont l'apport est prépondérant dans chacune des zones est abordée par la suite.

Dans un premier temps, l'intensité des sur-contraintes de traction estimée antérieurement sur le combustible UO_2 étudié (i.e. à partir des pressions calculées par l'équation d'ALCYONE dans chacune des populations et des valeurs des coefficients de Biot déterminées à partir de la porosité calculée et en considérant des bulles sphériques) est rappelée figure 1.59 (voir les courbes en pointillé orange et verts représentant les contraintes induites par les bulles intra et intergranulaires respectivement). Dans ce cas, la moyenne de l'intensité de la sur-contrainte de traction vaut :

- En zone centrale, 20 MPa pour les bulles intragranulaires.
- En zone intermédiaire, 190 MPa pour les bulles intragranulaires.
- Dans le rim, 45 MPa pour les bulles intergranulaires.

Ces valeurs sont comparées aux estimations réalisées dans [85] sur un combustible UO_2 (que l'on désignera par combustible très fort taux par la suite) présentant un taux de combustion

1.5. Estimation de la contrainte de sur-traction des différentes populations de bulles

supérieur au combustible étudié. Ces estimations⁵⁹ réalisées en considérant des bulles sphériques sont reportés par la courbe violette sur la figure 1.59. Pour ces estimations l'intensité de la contrainte de traction de l'ensemble des cavités était de 280 MPa en zone centrale et de 200 MPa en zone intermédiaire. La comparaison⁶⁰ entre ces estimations relatives à un combustible très fort taux et les estimations antérieures (réalisées sur un combustible présentant un taux de combustion inférieur) suggère que l'intensité de la sur-contrainte de traction augmente en fonction de l'irradiation (environ 250 MPa d'écart en fonction du taux de combustion, comme l'illustre la comparaison entre les courbes en pointillés et la courbe violette). En revanche, l'irradiation ne semble pas avoir d'effet sur cette sur-contrainte en zone intermédiaire (l'intensité des contraintes est similaire dans les deux cas).

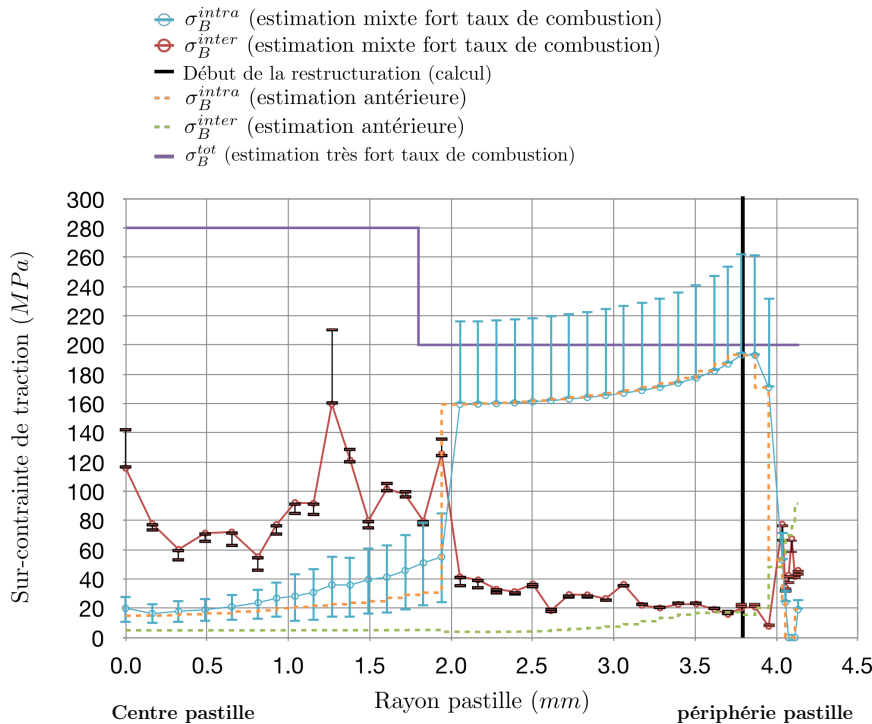


FIGURE 1.59 – Intensité de la sur-contrainte de traction des bulles (en MPa) à 1473 K en fonction du rayon pastille (en mm).

Dans un second temps, afin d'apprécier l'influence de la forme des cavités, l'intensité de la sur-contrainte est déterminée à partir des estimations mixtes de la pression (cf. tableau 1.17) et du coefficient de Biot (cf. tableau 1.19) réalisés sur le combustible étudié en section 1.4. Ainsi, ces estimations font intervenir la porosité mesurée pour déterminer P et B (si cette valeur est disponible) et la forme des cavités est prise en compte.

Pour le calcul des contraintes, une valeur moyenne des encadrements du coefficient de Biot est retenue, cette valeur s'exprime comme :

$$\langle B \rangle = \frac{B_{min} + B_{max}}{2} \quad (1.54)$$

59. Pour ce calcul, l'irradiation de base a été réalisée avec le modèle de gaz de fission MARGARET [104] (comportant deux populations de bulles intragranulaires).

60. Ces résultats ont été obtenus à des côtes axiales similaires et sont donc comparables.

1.5. Estimation de la contrainte de sur-traction des différentes populations de bulles

avec B_{min} et B_{max} les valeurs respectivement minimales et maximales de l'encadrement du coefficient de Biot à la position radiale considérée. Dans ce cas, les estimations de l'intensité de la sur-contrainte des bulles inter et intragranulaires sont illustrées figure 1.59 par les courbes rouge et cyan respectivement (les barres sur ces courbes sont présentées par la suite). La moyenne de l'intensité de la sur-contrainte de traction de la population dont l'apport est prépondérant vaut :

- En zone centrale, 95 *MPa* pour les bulles intergranulaires.
- En zone intermédiaire, 165 *MPa* pour les bulles intragranulaires.
- Dans le rim, 50 *MPa* pour les bulles intergranulaires.

La comparaison entre les estimations antérieures (porosité calculée et bulles sphériques) et les estimations réalisées dans cette étude (porosité calculée et mesurée et bulles sphéroïdales) met en évidence le fort impact de la forme des cavités sur l'intensité de la sur-contrainte de traction (plus de 90 *MPa* d'écart en zone centrale). Du point de vue de la modélisation, la prise en compte de la forme devrait donc avoir pour effet d'aboutir à une sollicitation du joint de grains plus importante. En revanche, la variation de cette contrainte exhibe les mêmes tendances (à savoir, une zone intermédiaire plus sollicitée que la zone centrale). Par conséquent, la localisation de la décohésion intergranulaire devrait être la même.

Concernant l'effet de l'irradiation, les sur-contraintes obtenues dans cette étude ne peuvent pas être comparées aux estimations réalisées à très fort taux de combustion, car ces dernières ont été réalisées en considérant des cavités sphériques. Afin de conclure sur l'influence de l'irradiation, ces estimations à très fort taux doivent donc être reprises en prenant en compte la forme des bulles. Pour cela, des observations 3D des bulles au MEB-FIB, sur des combustibles à des taux de combustion différents, sont nécessaires.

Dans le cadre des estimations réalisées pour cette étude, la superposition des encadrements du coefficient de Biot ΔB et de la pression ΔP permet de définir les bornes de la sur-contrainte de traction de chacune des populations. En ce sens, l'intensité de la sur-contrainte est estimée à une "incertitude" de calcul près, définie selon ⁶¹ :

$$\Delta\sigma_B = P_{eff}\Delta B + B\Delta P + \Delta P\Delta B \quad (1.55)$$

Les "incertitudes" de la contrainte induite par les bulles intra et intergranulaires sont représentées sur la figure 1.59 par des barres sur les courbes cyans et rouges respectivement. D'après cette figure, les "incertitudes" ont peu d'impact sur l'estimation de la sur-contrainte, en zone centrale et dans le rim ($\Delta\sigma_B$ vaut moins de 20 % de l'intensité de la sur-contrainte des bulles intergranulaires, population de bulles ayant un apport prépondérant à cette contrainte dans ces zones, cf. annexe A.4). En revanche, en zone intermédiaire, $\Delta\sigma_B$ est modérément important (36 % de l'intensité de la sur-contrainte de la population dont l'apport est prépondérant (intra), cf. annexe A.4).

À l'exception des bulles intragranulaires de précipitation de la zone centrale, les "incertitudes" de la sur-contrainte des cavités ne dépendent que de l'encadrement des pressions, car ΔB est nul dans ce cas. Pour les bulles de précipitation, "l'incertitude" de la sur-contrainte

61. Rappelons que $\Delta P_{eff} = \Delta P$

est en revanche majoritairement due à l'encadrement du coefficient de Biot (le terme en $P_{eff}\Delta B$ dans l'équation (1.55) participe pour plus de 90 % de "l'incertitude" de la sur-contrainte dans ce cas, cf. annexe A.4).

1.5.3 Conclusions et perspectives

Dans cette partie, la sur-contrainte de traction induite par la pressurisation des bulles est estimée à la température maximale atteinte par le combustible lors d'un transitoire thermique (1473 K). L'expression de cette sur-contrainte dépend de la porosité et des pressions des différentes populations de bulles. Une première estimation de cette contrainte avait été réalisée en prenant en compte la porosité calculée et en considérant que les bulles étaient sphériques. Cette estimation (réalisée sur un combustible à fort taux de combustion) est comparée aux estimations réalisées dans [85] sur un combustible UO_2 à un taux de combustion supérieur. D'après la comparaison, l'irradiation devrait avoir pour effet d'augmenter l'intensité de la sur-contrainte de traction des cavités en zone centrale, lorsque ces dernières sont sphériques.

À partir de l'analyse des observations MEB-FIB 3D du combustible UO_2 fort taux étudié en section 1.4, l'influence de la forme non-sphérique des bulles est ensuite prise en compte dans l'expression du coefficient de Biot, coefficient qui intervient dans le calcul de la sur-contrainte de traction. Pour ce faire, le modèle d'homogénéisation de Ponte Castañeda et Willis est retenu car il permet de déterminer la valeur de ce coefficient pour des bulles de forme sphéroïdale et dont la répartition est isotrope. Pour cette estimation la porosité mesurée est prise en compte. L'analyse réalisée permet de caractériser l'évolution radiale du coefficient de Biot en fonction de la porosité et de la forme des cavités :

- en zone centrale, la forme des bulles intragranulaires est soit sphéroïdale (dont le rapport de forme est compris entre 0.1 et 0.3) soit complexe (forme ne pouvant s'apparenter à un ellipsoïde), la distribution spatiale de ces bulles ne peut être déterminée clairement et leur porosité est légèrement sous-estimée par le calcul. Ainsi, le coefficient de Biot de ces bulles est encadré en fonction des valeurs hautes et basses du facteur de forme.
Les bulles intergranulaires ont une forme très aplatie, un facteur de forme très faible est donc retenu pour cette population. La distribution spatiale de ces cavités n'est pas aléatoire (car elles sont localisées au joint de grains par définition) et leur porosité est clairement surestimée par le calcul.
- En zone intermédiaire, le calcul prédit une taille de bulles nanométriques en position intragranulaire, or, de par la résolution minimale des images MEB ($0.03 \mu m$), ces cavités ne peuvent être observées expérimentalement. Par manque d'information sur leur forme, ces bulles sont considérées sphériques.
Les rares bulles intergranulaires observées sont très aplaties, le coefficient de Biot de ces bulles est donc calculé de la même manière qu'en zone centrale.
- Dans le rim, il est considéré que toutes les bulles se situent en position intergranulaire. Ces bulles ont une forme sphérique, leur porosité est clairement sous-estimée par le calcul. Le coefficient de Biot de ces bulles est donc calculé en utilisant le modèle de Mori-Tanaka (cavités sphériques).

D'après l'analyse, il est nécessaire de déterminer avec précision la porosité des populations de bulles les plus aplaties (au % près) afin de pouvoir quantifier la traction induite par ces bulles.

Sur la base des estimations mixtes du coefficient de Biot et des pressions (en considérant la porosité mesurée et calculée et en prenant en compte la forme des bulles observées) la sur-contrainte de traction des différentes populations de bulles est estimée. D'après ces estimations, l'intensité moyenne de cette sur-contrainte⁶² est de 95 *MPa* en zone centrale, 165 *MPa* en zone intermédiaire et 50 *MPa* dans le rim. Les encadrements de la pression et du coefficient de Biot permettent également de déterminer les "incertitudes" liées au calcul de cette contrainte. Ces "incertitudes" sont relativement faibles en zone centrale et dans le rim (moins de 20 % de l'intensité de la sur-contrainte), mais sont modérément importantes en zone intermédiaire (36 % de l'intensité de la sur-contrainte). Pour l'ensemble des cavités, ces "incertitudes" sont dues à l'encadrement des pressions, sauf pour les bulles intragranulaires de précipitation de la zone centrale, pour lesquelles l'encadrement du coefficient de Biot contribue majoritairement aux "incertitudes" (contribution de l'ordre de 90 %).

D'après la comparaison des estimations réalisées pour cette étude (bulles sphéroïdales) et des estimations antérieures (bulles sphériques), l'influence de la forme des cavités ne devrait pas avoir pour effet de modifier la localisation de la décohésion intergranulaire (même en considérant les "incertitudes", la zone intermédiaire reste plus sollicitée que le centre). En revanche, la prise en compte de la forme des cavités aboutit à une sollicitation du joint de grains plus importante (notamment en zone centrale, l'écart entre les sur-contraintes de traction est de plus de 90 *MPa*).

Afin d'affiner l'estimation de la sur-contrainte en zone centrale, les perspectives suivantes sont identifiées :

1. **Séparation d'échelles.** Au vu des valeurs parfois élevées du coefficient de Biot, le terme d'interaction entre les populations de bulles dans la résultante des contraintes de traction de l'ensemble des bulles (voir annexe A.5) pourrait ne plus être négligeable. Cette interaction devra donc être prise en compte dans la modélisation.
2. **Localisation spatiale.** L'utilisation du modèle de Ponte Castañeda et Willis pour estimer le coefficient de Biot, pré-suppose une distribution spatiale des bulles isotropes. Or, d'après l'analyse des images MEB-FIB en section 1.4.1.2, il est difficile de valider cette hypothèse. Afin de pallier cela, les mesures prévues au MET pourraient permettre de statuer sur la présence des bulles intragranulaires au sous-joint de grains en zone centrale. De plus, la statistique la distribution spatiale des bulles visibles au MEB pourrait être déterminée par une analyse approfondie des images 3D des cavités. Cette analyse est d'autant plus pertinente que des travaux récents [88] ont mis en évidence le fort impact de la distribution non uniforme des cavités sur les propriétés élastiques effective d'un milieu composé de cavités réparties au joint de grains. D'après cette étude, l'hypothèse de répartition spatiale uniforme devrait avoir pour effet de sous-estimer l'intensité de la sur-contrainte des cavités de manière significative.

62. Pour la population de bulles dont la contribution à l'intensité de la sur-contrainte totale est prépondérante et pour une température de 1473 *K*.

1.5. Estimation de la contrainte de sur-traction des différentes populations de bulles

Afin de réduire l'amplitude des "incertitudes" de calcul attachées à l'estimation de la sur-contrainte :

3. **Forme des bulles.** L'analyse des images 3D pourrait également permettre d'obtenir une valeur moyenne du facteur de forme des bulles intragranulaires de précipitation. Cette valeur permettrait d'affiner l'encadrement des estimations de la traction des bulles en zone centrale.

Les observations MET attendues permettront de décrire les bulles nanométriques (bulles qui ont été exclues de l'analyse dans notre cas) et ainsi permettre de valider/invalidier l'hypothèse de cavités sphériques qui a été retenue pour l'estimation de la sur-contrainte de cette population.

Enfin, afin de déterminer l'influence de l'irradiation :

4. **Effet du taux de combustion.** La prise en compte de la forme des bulles dans cette étude permet de mieux quantifier la sur-contrainte de traction induite par les bulles dans le combustible irradié. Sachant que cette contrainte devrait en partie expliquer l'influence de l'irradiation sur la décohérence intergranulaire (comme le suggère la comparaison entre les estimations antérieures et celles réalisées sur un combustible à très fort taux), il serait intéressant d'évaluer l'effet de l'irradiation sur cette contrainte. Pour cela, des examens MEB et MEB-FIB sur des combustibles irradiés à des taux de combustion différents permettraient de mesurer la porosité et la forme des bulles.

1.6 Conclusion du chapitre

Durant l'irradiation, le combustible subi des modifications microstructurales et voit notamment se former des bulles de gaz de fission en son sein. Du fait du gradient de température apparaissant entre le centre et la périphérie de la pastille lors de l'irradiation, ces modifications microstructurales dépendent de la position radiale considérée. Ainsi et pour le taux de combustion étudié ici, trois zones quasi-homogènes sont distinguées : la zone centrale (à un rayon pastille compris entre 0 et 2.16 *mm*), la zone intermédiaire (entre 2.16 et 4.08 *mm*) et la zone de rim (de 4.08 à 4.14 *mm*).

Lorsque la température du matériau augmente, la pression des bulles de gaz de fission augmentent également et engendrent des sollicitations dans la matrice du combustible. Ces sollicitations peuvent induire une décohésion intergranulaire (fissuration localisée au joint de grains). Or, la décohésion est supposée être un moteur de la fragmentation du combustible pendant un transitoire thermique accidentel. C'est pourquoi il est nécessaire de prendre en compte ce phénomène dans le cadre de la modélisation du comportement du combustible en situation d'APRP. Pour cela, un critère de décohésion existe dans l'OCS ALCYONE, mais le seuil associé à ce critère dépend empiriquement du taux de combustion. Afin de comprendre le mécanisme sous-jacent à cette dépendance, nous proposons d'affiner le bilan des contraintes dans la modélisation de la décohésion en prenant en compte la sur-contrainte de traction engendrée par l'ensemble des bulles de gaz. L'objet de ce chapitre a donc été de quantifier cette sur-contrainte, ce qui a consisté en particulier à déterminer la pression qui règne dans les bulles, leurs porosités et leurs formes.

Dans un premier temps, la pression attendue dans les bulles de gaz de fission en situation d'APRP est calculée grâce à l'équation d'état d'ALCYONE. Pour les domaines de volumes molaires et de températures considérés dans ce cas, l'estimation de la pression ne peut être systématiquement validée à cause du manque de mesures $P - V - T$ réalisées sur du xénon. Par conséquent, nous proposons de définir des bornes à ces pressions. Ces bornes sont déterminées à partir des mesures $P - V - T$ à la température ambiante vue par le combustible à l'issue de l'irradiation (300 *K*) et à partir des pressions extrapolées par Ronchi et calculées par une autre équation d'état (Soave) à la température maximale atteinte par le combustible en situation d'APRP (1473 *K*, température à laquelle les mesures $P - V - T$ sont manquantes). L'analyse permet de déterminer les pressions (évaluations et encadrements) obtenues à 1473 *K* en fonction du volume molaire :

- Pour un volume molaire de plus de 40 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$ (volume molaire représentatif des bulles submicrométriques et de taille supérieure), l'écart entre les bornes de la pression est relativement faible (inférieur à 20 % d'écart relatif, pour des pressions de l'ordre de quelques *MPa* à 1 *GPa*).
- Pour un volume molaire de moins de 40 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$ (volume molaire représentatif des bulles nanométriques les plus denses), ces écarts sont modérément importants (entre 15 et 40 % d'écart relatif, pour des pressions de l'ordre de 1 à 10 *GPa*).

Notons que ces conclusions seraient potentiellement différentes pour d'autres températures. En effet, pour les cavités les plus denses en gaz (bulles intragranulaires notamment) les écarts entre les bornes peuvent évoluer de façon significative en fonction de la température (jusqu'à un facteur 8 en valeur relative pour les volumes molaires étudiés et les températures attendues durant le transitoire).

1.6. Conclusion du chapitre

Dans un deuxième temps, le volume molaire des cavités (rapport entre la porosité et la quantité de gaz retenue dans les bulles) a été estimé afin de déterminer la pression qui règne dans ces bulles durant le transitoire. Pour cela, une simulation de l'irradiation a été réalisée sur un crayon UO_2 à fort taux de combustion, crayon ayant fait l'objet de différentes mesures post-irradiatoires. La comparaison entre les résultats de calcul et des mesures post-irradiatoires met en évidence un bon accord concernant les quantités de gaz contenues dans les bulles des différentes zones radiales de la pastille combustible. En revanche, des écarts significatifs sont constatés en ce qui concerne la porosité (entre 50 et 300 % d'écart relatif en fonction de la population de bulles et de la zone considérée). Ces écarts sur la porosité expliquent pourquoi le volume molaire est légèrement surestimé en zone centrale (39 % d'écart relatif), très fortement sous-prédit en zone intermédiaire (500 % d'écart relatif) et fortement sous-estimé dans le rim (100 % d'écart relatif).

Dans un troisième temps, la sur-contrainte de traction engendrée par la pressurisation des cavités est estimée dans le cadre de la poro-élasticité. D'après une première comparaison, si les bulles sont considérées sphériques, cette sur-contrainte devrait augmenter en fonction de l'irradiation en zone centrale. L'analyse des observations 3D du combustible au MEB-FIB ayant mis en évidence le caractère non-sphérique des bulles, l'influence de la forme des cavités sur l'intensité de la sur-contrainte a pu être pris en compte en assimilant les bulles à des sphéroïdes. Ainsi cette sur-contrainte dépend du facteur de forme de ces cavités sphéroïdales, facteur de forme qui est défini avec un encadrement lorsque sa valeur est variable.

Comme les écarts entre la porosité calculée et mesurée sont significatifs, nous proposons une estimation mixte de cette contrainte (en prenant en compte la quantité de gaz calculée, la porosité mesurée lorsque celle-ci est disponible et la forme des cavités). D'après ces estimations, l'intensité moyenne de la sur-contrainte⁶³ à 1473 K est de 95 MPa en zone centrale, 165 MPa en zone intermédiaire et de 50 MPa dans le rim. D'après ce résultat, la prise en compte de la forme non-sphérique des cavités n'a pas d'influence sur la localisation de la décohéssion, mais sur l'intensité de la sollicitation des joints de grains. Cette conclusion reste vraie même en considérant "l'incertitude" de calcul de la sur-contrainte, "incertitude" qui est liée à la loi d'état ou au caractère variable de la forme sphéroïdale des cavités. En effet, cette "incertitude"⁶³ est faible en zone centrale et dans le rim (inférieure à 20 % de l'intensité de la contrainte) et modérément importante en zone intermédiaire (36 % de l'intensité de la contrainte). Pour l'ensemble de ces bulles, "l'incertitude" est due à la loi d'état sauf pour les bulles intragranulaires de précipitation, pour lesquelles "l'incertitude" est due au facteur de forme.

Cette étude permet également d'estimer le chargement appliqué localement par les bulles intergranulaires. Comme nous l'avons vu en 1.2.2.1, ce chargement est une donnée d'entrée du modèle de décohéssion des joints de grains utilisé dans ALCYONE. Ces données seront par ailleurs utilisées dans le modèle de décohéssion proposé dans le chapitre 2 suivant. Le chargement des bulles intergranulaires dépend du taux de recouvrement au joint de grains, de la pression et de la tension de surface des bulles. D'après l'analyse, la tension de surface des bulles est négligeable devant leur pression. À cause des écarts entre porosité calculée et mesurée, le calcul de la pression des bulles intergranulaires sous-évalue fortement les

63. Pour la population de bulles dont l'apport est prépondérant.

estimations mixtes en zone centrale (90 % d'écart relatif) et sur-évalue très fortement ces estimations en zone intermédiaire et dans le rim (respectivement 537 % et 214 % d'écart relatif). Ainsi, la localisation des zones de décohésion prédite par le critère d'ALCYONE (sans prendre en compte la sur-contrainte de traction) peut potentiellement être différente en fonction de l'estimation retenue (calcul ou estimation mixte), preuve du fort impact des écarts calcul-mesure relatifs à la porosité sur la modélisation. Cette conclusion est indépendante des "incertitudes" de calcul de la sur-pression due à la loi d'état. En effet, ces "incertitudes" sont négligeables (moins de 11 % d'écart relatif) quelle que soit la zone considérée et le type d'estimation sauf en zone intermédiaire, zone dans laquelle les "incertitudes" de calcul sont modérées (43 % d'écart relatif).

A l'issue de ce travail, des perspectives détaillées ont été définies en section 1.5.3. Sur le plan expérimental, certaines mesures sont attendues/proposées afin d'affiner les estimations réalisées dans le cadre de ce chapitre :

- Les mesures MET attendues sur le combustible étudié permettront de mieux caractériser les bulles nanométriques (en termes de porosité, de distribution spatiale et de forme) et ainsi d'obtenir une estimation plus fine de l'intensité de la sur-contrainte, notamment en zone intermédiaire.
- Des mesures MEB et MEB-FIB sur des combustibles à différents taux de combustion permettraient de déterminer l'évolution de la sur-contrainte en fonction de l'irradiation. Une analyse approfondie des images existantes (statistique de la forme et de la distribution spatiale des cavités) est également proposée afin d'affiner l'estimation de cette contrainte en zone centrale (détermination de la forme des bulles intragranulaires de précipitation et validation/invalidation de l'hypothèse d'une distribution spatiale isotrope des cavités).
- Des mesures "monobulles" seraient nécessaires afin de valider l'ordre de grandeur des volumes molaires calculés dans les différentes populations de bulles.
- Des observations des bulles intergranulaires à partir de fractographies et/ou des analyses des images MEB-FIB sont proposées afin de mesurer l'évolution radiale du taux de recouvrement des bulles au joint de grains.

Sur le plan de la modélisation, nous proposons de prendre en compte des équations d'état obtenues récemment par simulations atomistiques afin de quantifier les bornes de la pression des bulles les plus denses, ce qui devrait avoir un impact sur les "incertitudes" de la sur-contrainte de la zone intermédiaire (bulles intragranulaires nanométriques). Enfin, le terme d'interaction entre les sur-contraintes des différentes populations de bulles (voir annexe A.5) devra être pris en compte dans la modélisation.

Les travaux réalisés dans le cadre de ce chapitre ont permis d'estimer les paramètres relatifs au chargement appliqué par les bulles de gaz de fission en transitoire. Pour chacune des zones radiales du combustible, les limites et les perspectives identifiées pour l'estimation (calcul et estimation mixte) de ces paramètres sont résumées dans le tableau 1.20, pour ce qui concerne la sur-pression des bulles et le tableau 1.21, pour ce qui concerne la sur-contrainte de traction. Dans ces tableaux, la variable à l'origine d'une limite ou d'une perspective est systématiquement rapportée. Par exemple, l'estimation mixte de P^{inter} en zone intermédiaire est réalisée en supposant que l'ensemble de la porosité fine (pour un rayon compris entre 0.03 et 3 μm) est égale à la porosité des bulles intergranulaires f_v^{inter} . Or, la taille des

1.6. Conclusion du chapitre

cavités permettant de discriminer la porosité intra et intergranulaire n'a pas été déterminée expérimentalement. Par conséquent, la limite de l'estimation mixte de P^{inter} dans cette zone est liée à la variable f_v^{inter} (cf. tableau 1.20).

En fonction des limites identifiées, un degré de confiance est attribué à l'estimation du paramètre :

- Degré 1 (qui ne concerne que le calcul), le paramètre calculé est entaché d'un écart calcul-mesure non-négligeable.
- Degré 2, le paramètre est calculé de façon satisfaisante (en terme d'écart calcul-mesure). Néanmoins, des perspectives ont été identifiées afin d'affiner le calcul ou la mesure du paramètre.
- Degré 3, le paramètre est calculé de façon satisfaisante et aucune perspective ne semble nécessaire pour affiner le calcul ou la mesure de ce paramètre.

Paramètre	Type d'estimation		Zone centrale	Zone intermédiaire	Rim
P^{intra}	Limites	Calcul	1 : f_v^{intra} sous-prédite	2 : - f_v^{intra} non-mesurée - ΔP^{intra} modéré (loi d'état)	-
		Estimation mixte	2 : Besoin de valider V_m^{intra} par des mesures locales	2 : f_v^{intra} non-observée	-
	Perspectives		Mesure "monobulle" : V_m^{intra}	- Prise en compte d'équation d'état adaptée au gaz dense : ΔP^{intra} - Mesures MET : J_v^{intra}	-
P^{inter}	Limites	Calcul	1 : f_v^{inter} sur-prédite	1 : - f_v^{inter} sous-prédite - ΔP^{inter} modéré (loi d'état)	1 : f_v^{inter} sous-prédite
		Estimation mixte	2 : Besoin de valider V_m^{inter} par des mesures locales	2 : Discrimination des porosités intra/inter non-déterminée : f_v^{inter}	3
	Perspectives		Mesure "monobulle" : V_m^{inter}	- Prise en compte d'équation d'état adaptée au gaz dense : ΔP^{inter} - Discrimination des porosités grâce au MET : f_v^{inter}	-
P^{intra}_γ	Limites	Calcul	3	2 : Bulles nano non-observées : r_b^{intra}	-
		Estimation mixte	3	2 : bulles nano non-observées : r_b^{intra}	-
	Perspectives		Mesure MET : r_b^{intra}	Mesure MET : r_b^{intra}	-
P^{inter}_γ	Limites	Calcul	1 : r_b^{inter} sous - prédit	1 : r_b^{inter} sous - prédit	1 : r_b^{inter} sous - prédit
		Estimation mixte	3	2 : Discrimination de la porosité intra/inter non-déterminée : r_b^{inter}	3
	Perspectives		-	Discrimination des porosité grâce au MET : r_b^{inter}	-
f_s^*	Limites calcul		2 : f_s^* non-observée	2 : f_s^* non-observée	-
	Perspectives		Fractographies, analyses MEB-FIB : f_s^*	Fractographies, analyses MEB-FIB : f_s^*	-

TABLE 1.20 – Résumé des limites et perspectives liées au calcul et à l'estimation mixte de la sur-pression des bulles et au calcul du taux de recouvrement des bulles au joint de grains.

Notons que la sur-contrainte de traction dépend de la porosité et de la pression, pression qui dépend elle-même de la porosité. Ainsi, les limites et perspectives identifiées pour la pression

sont identiques à celles identifiées pour la sur-contrainte et ne sont donc pas rappelées dans le tableau 1.21.

Paramètre	Type d'estimation		Zone centrale	Zone intermédiaire	Rim
σ_B^{intra}	Limites	Calcul	1: - Limite identifiée pour P^{intra} : f_v^{intra} - Incertitude sur la forme : ω^{intra}	2: - Limites identifiées pour P^{intra} : $f_v^{intra}, \Delta P^{intra}$ - Forme des bulles nano non-déterminée : ω^{intra}	-
		Estimation mixte	2: - Limite identifiée pour P^{intra} : f_v^{intra} - Incertitudes sur la forme : ω^{intra} - Incertitudes de localisation : B^{intra}	2: - Limite identifiée pour P^{intra} : f_v^{intra} - Incertitude sur la forme : ω^{intra} - Incertitude de localisation : B^{intra}	-
	Perspectives	- Perspective identifiée pour P^{intra} : V_m^{intra} - Prise en compte de l'effet de taille (cf. annexe A.5) : σ_B^{tot} - Localisation des bulles au sous-joint de grains au MET : B^{intra} - Analyse quantitative de la forme des bulles au MEB-FIB : $B^{intra}, \Delta B^{intra}$	- Perspectives identifiées pour P^{intra} : $f_v^{intra}, \Delta P^{intra}$ - Mesure de la forme et de la porosité des bulles nano au MET : B^{intra} - Analyse de la localisation au MEB : B^{intra}	-	
σ_B^{inter}	Limites	Calcul	1: - Limites identifiées pour P^{inter} : f_v^{inter} - Incertitude de localisation : B^{inter}	1: - Limites identifiées pour P^{inter} : $f_v^{inter}, \Delta P^{inter}$ - Incertitude de localisation : B^{inter}	1 : Limites identifiées pour P^{inter} : f_v^{inter}
		Estimation mixte	2 : Limites identifiées pour P^{inter} : V_m^{inter}	2 : Limites identifiées pour P^{inter} : f_v^{inter}	3
	Perspectives	- Perspectives identifiées pour P^{inter} : V_m^{inter} - Prise en compte de l'effet de taille (cf. annexe A.5) : σ_B^{tot} - Analyse de la localisation au MEB : B^{inter}	- Perspectives identifiées pour P^{inter} : $f_v^{inter}, \Delta P^{inter}$ - Analyse de la localisation au MEB : B^{inter}	-	

TABLE 1.21 – Résumé des limites et perspectives liées au calcul et à l'estimation mixte de la sur-contrainte de traction de l'ensemble des population de bulles.

Modélisation de la fragmentation du combustible par une approche couplant la méthode des éléments discrets et les modèles de zones cohésives

Sommaire

2.1	Modélisation de la fissuration fragile d'un milieu (zones cohésives)	104
2.1.1	Description d'un milieu élastique linéaire en présence d'un défaut	105
2.1.2	Les zones cohésives comme modèle d'endommagement surfacique .	106
2.1.3	Description du comportement des milieux granulaires	112
2.1.4	Description de la fragmentation d'un milieu continu par une approche discrète	113
2.2	Étude paramétrique de la modélisation du comportement à rupture du combustible par la méthode DEM-CZM	120
2.2.1	Définition du modèle DEM-CZM retenu pour modéliser le comportement à rupture du combustible	121
2.2.2	Définition du domaine paramétrique de l'étude	123
2.2.3	Étude paramétrique du modèle DEM-CZM à partir des simulations de recuit thermique	128
2.3	Proposition d'un critère à rupture du combustible sur la base des résultats de l'analyse paramétrique	138
2.3.1	Définition du critère	138
2.3.2	Illustration du critère dans le cadre de l'identification de la pression de confinement à rupture	141
2.4	Conclusion et perspectives	145

L'étude présentée dans le cadre du chapitre 1 a permis de déterminer le chargement engendré par les gaz de fission occlus dans le combustible. Connaissant ce chargement, nous souhaitons modéliser le comportement à rupture du combustible afin d'étudier l'influence des effets "système" (effet de la dépressurisation du crayon notamment) sur la fragmentation du matériau. Pour cela, le modèle utilisé doit permettre de représenter la fissuration du combustible sous l'effet moteur des gaz de fission et en prenant en compte le chargement externe appliqué à la pastille (effet de la pression de confinement notamment). Avec la multi-fissuration, le matériau ne peut plus être considéré comme continu et devient de nature granulaire. Le modèle doit donc également permettre de représenter cette transition, ce qui nécessite une modélisation des phénomènes intervenant à l'échelle locale (fissuration, contact, frottement, etc.).

Un modèle couplant la méthode des éléments discrets (DEM) et un modèle de zones cohésives (CZM) a été retenu. Ce modèle consiste à représenter le matériau comme un ensemble de fragments reliés les uns aux autres par des liaisons cohésives. Dans ce modèle, la fissuration est représentée par la rupture de ces liaisons, rupture qui intervient lorsque les sollicitations (imposées par les gaz de fission et le chargement extérieur) dépassent un certain seuil. Ce seuil dépend des paramètres relatifs au comportement à rupture du combustible : contrainte à rupture, taux de restitution critique, fraction surfacique de bulles au joint de grains. L'évolution de ces paramètres en fonction du taux de combustion est encore difficile à quantifier à ce jour. Nous allons donc chercher à déterminer les valeurs des paramètres permettant de représenter le comportement à rupture du combustible irradié dans le modèle DEM-CZM.

Pour cela, une analyse paramétrique du modèle est réalisée. Cette analyse s'appuie de manière qualitative sur les résultats expérimentaux qui ont mis en évidence un effet de la pression de confinement sur le maintien de l'intégrité du combustible (cf. section 1.2.1). Les paramètres du modèle cohésif sont donc déterminés de manière à représenter l'état du combustible (intact ou fragmenté) à l'issue du transitoire en fonction de la pression de confinement appliquée.

Dans un premier temps, les éléments théoriques permettant de définir le modèle DEM-CZM sont présentés. Dans un deuxième temps, on présente l'étude réalisée afin de déterminer les valeurs des paramètres relatifs au comportement à rupture du combustible. Dans un troisième temps, un critère d'amorce de fissure est défini sur la base de résultats de simulations.

2.1 Modélisation de la fissuration fragile d'un milieu (zones cohésives)

Par la suite, les aspects concernant le comportement fragile d'un défaut singulier sont abordés. Les modèles de zones cohésives sont ensuite présentés, ainsi que le modèle retenu. Le comportement des milieux granulaires est ensuite exposé. Enfin, le principe du modèle DEM-CZM est présenté dans le détail.

2.1.1 Description d'un milieu élastique linéaire en présence d'un défaut

Afin de décrire l'évolution de la fragmentation du combustible, le comportement du matériau lors de sa rupture doit être évalué. Le phénomène de rupture est généralement lié à la présence de défauts dans le milieu, défauts au niveau desquels la fissuration s'initie. La mécanique linéaire de la rupture [44] analyse l'effet de ces défauts sur les champs mécaniques sous les hypothèses suivantes : comportement élastique linéaire, petites perturbations, propagation du défaut quasi-statique. Par ailleurs, les expressions ci-dessous sont données dans le cas d'un matériau élastique isotrope.

La présence d'un défaut dans la structure induit une augmentation de l'intensité de contrainte dans les zones proches du défaut. L'état de contrainte dans le matériau est caractérisé par le tenseur des contraintes de Cauchy symétrique d'ordre 2, défini par : $\bar{\sigma}(x) = \sigma_{ij}(x) (\vec{e}_i \otimes \vec{e}_j)$, $i, j = 1, 2, 3$, l'opérateur \otimes étant le produit tensoriel. $\sigma_{ij}(x)$ est la composante ij du tenseur au point x et $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$ forment une base orthonormée dans \mathbb{R}^3 . Si les lèvres de la fissure sont libres de contrainte, ce champ de contrainte présente un comportement asymptotique en $\frac{1}{\sqrt{s}}$, avec s la distance par rapport à la pointe de fissure. La forme du champ de contrainte pour un mode $\alpha = I, II$ ou III est donnée par le développement limité (2.1) :

$$\sigma_{ij}(s, \theta) = \frac{K_\alpha}{2\pi\sqrt{s}} f'_{ij}{}^\alpha(\theta) + o\left(\frac{1}{\sqrt{s}}\right) \quad (2.1)$$

où $f'_{ij}{}^\alpha(\theta)$ dépend de la géométrie et du chargement appliqué et θ est l'angle par rapport à la pointe de fissure (coordonnées polaires). Les facteurs d'intensité de contrainte pour le mode K_α s'expriment en 2D par :

$$K_\alpha = \sigma\sqrt{\pi l} f_{fiss}(l, \psi_{fiss}) \quad (2.2)$$

avec f_{fiss} une fonction sans dimension dépendante de la longueur de la fissure l et de la géométrie du problème désignée par ψ_{fiss} , σ a la dimension d'une contrainte et dépend linéairement du chargement à l'infini.

La description du comportement de la fissure par un critère en contrainte en pointe de fissure est ardue du fait de la singularité de l'équation (2.1) (lorsque $s \rightarrow 0$). Le critère d'Irwin [64] suppose que la fissure se propage lorsque K_α atteint une valeur critique $K_{\alpha c}$ (ténacité). Dans le cas d'une fissure plane de longueur l le critère de propagation de la fissure est donné par (2.3)

$$\begin{cases} K_\alpha < K_{\alpha c} \Rightarrow \dot{l} = 0, \\ K_\alpha = K_{\alpha c} \Rightarrow \dot{l} > 0. \end{cases} \quad (2.3)$$

avec $\alpha = I, II, III$ et où \dot{l} est la vitesse de propagation de la fissure.

Bien que la contrainte en front de fissure soit infinie dans ce cadre élastique linéaire, l'énergie nécessaire à la formation ou l'extension d'une fissure est finie. Griffith [56] propose un critère énergétique :

$$G < G_c \Rightarrow \dot{l} = 0, \quad (2.4)$$

$$G \geq G_c \Rightarrow \dot{l} > 0. \quad (2.5)$$

où $G = -\frac{\partial \tilde{P}}{\partial l}$ est le taux de restitution de l'énergie (\tilde{P} est l'énergie potentielle stockée de la structure) et G_c sa valeur critique.

Le taux de restitution d'énergie peut s'écrire comme une fonction du facteur d'intensité de contrainte grâce à la formule d'Irwin [64]. Pour l'exemple et dans le cas particulier des déformations planes, cette formule s'exprime comme :

$$G = \frac{(1 - \nu^2)K_I^2}{E}; \quad (2.6)$$

avec ν le coefficient de Poisson et E le module d'Young.

Une troisième approche permettant de décrire l'évolution de la fissure est abordée à la section suivante 2.1.2. Cette approche permet d'exprimer, par l'introduction d'une contrainte de cohésion, un champ de contrainte régulier en tout point du milieu.

2.1.2 Les zones cohésives comme modèle d'endommagement surfacique

Lorsqu'un matériau se détériore suite à des sollicitations thermomécaniques, des défauts microscopiques (micro-cavités, micro-fissures) apparaissent. La croissance de ces défauts aboutit à l'amorce d'une fissure créant de nouvelles surfaces. Le champ de déplacement noté $\vec{u}(\vec{x})$ devient alors discontinu au niveau des lèvres de la fissure :

$$[\vec{u}] = \vec{u}^+ - \vec{u}^- \quad (2.7)$$

\vec{u}^+ et \vec{u}^- étant les déplacements respectifs de chaque lèvre de la fissure. La projection de ce vecteur saut de déplacement sur la partie normale et tangentielle de la fissure (illustré figure 2.1) est donnée par l'équation (2.8).

$$[\vec{u}] = u_N \vec{n} + \vec{u}_T \quad (2.8)$$

Avec $u_N = [\vec{u}] \cdot \vec{n}$ la partie normale du saut de déplacement, \vec{n} la normale à la fissure et \vec{u}_T le vecteur de saut de déplacement tangent (en 2D $\vec{u}_T = u_T \vec{t}$, \vec{t} étant le vecteur tangent à la fissure).

Les modèles de zones cohésives ont la particularité de permettre de décrire l'évolution spatiale et temporelle de la fissure et de représenter en détail les phénomènes intervenant au niveau des lèvres de la fissure (pression, frottement, plasticité,...) en conservant les éléments de la théorie de la mécanique de la rupture (notamment la notion de taux de restitution de l'énergie). Pour ces modèles, la fissure est définie en trois zones représentées figure 2.1 :

- une zone adhérente, pour laquelle le champ de déplacement est continu¹,
- une zone de cohésion (ou zone cohésive), dans laquelle l'endommagement se développe et des contraintes internes s'opposent à la création de surfaces,

1. La continuité du déplacement est telle que le champ de déformations qui en dérive respecte les conditions de compatibilité. Ces conditions assurent l'existence d'un champ de déplacements associé à un champ de déformations défini par un tenseur symétrique donné.

- une zone fissurée, pour laquelle l'interface est complètement rompue et les contraintes de cohésion sont nulles.

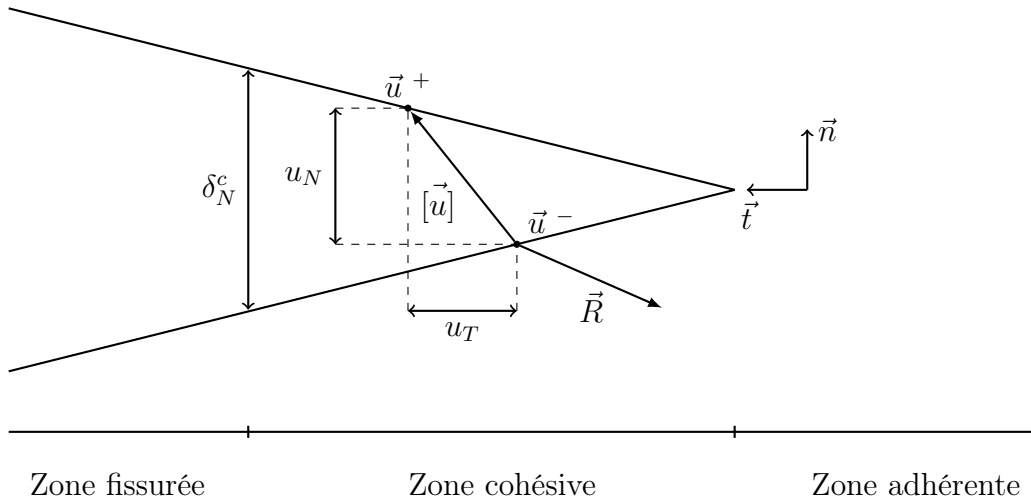


FIGURE 2.1 – Schéma d'une fissure et des différentes zones associées (en 2D).

Le comportement de la zone de cohésion est décrit par l'évolution du vecteur de contrainte qui se développe au niveau de la surface en cours de fissuration (contrainte cohésive) $\vec{R} = \bar{\sigma} \cdot \vec{n}$ en fonction du saut de déplacement $[u]$. La décomposition normale-tangente du vecteur de contrainte s'écrit :

$$\vec{R} = R_N \vec{n} + \vec{R}_T \quad (2.9)$$

avec $R_N = \vec{R} \cdot \vec{n}$ la partie normale de la contrainte et \vec{R}_T le vecteur de contrainte tangent (en 2D $\vec{R}_T = R_T \vec{t}$).

La loi de comportement, exprimant l'évolution du vecteur de contrainte dans la zone cohésive en fonction du saut de déplacement, est généralement divisée en trois phases (pour les modèles intrinsèques) comme illustré figure 2.2 :

- Une phase élastique, pour laquelle la relation entre la contrainte et le saut de déplacement dépend de la raideur de l'interface (notée C_N comme sur la figure 2.2, pour le comportement normal ou C_T pour le comportement tangent). Si la phase élastique est linéaire, alors cette raideur est constante. À cette étape, les déformations sont réversibles jusqu'à ce qu'une contrainte seuil (notée R_{max}) soit atteinte.
- Une phase d'endommagement ou d'adoucissement, pour laquelle la relation entre la contrainte dépend toujours du saut de déplacement, mais la raideur de l'interface diminue une fois la contrainte seuil R_{max} atteinte.
- Une phase post-rupture, lorsque le saut de déplacement critique est atteint, pour laquelle la contrainte devient nulle. Par la suite δ_N^c désigne le seuil de déplacement normal et δ_T^c le seuil de déplacement tangentiel en 2D.

À cette étape, la loi de comportement de la zone cohésive peut être étendue pour prendre en compte une pression post-rupture P_{eff}^{czm} (e.g. pression des gaz de fission) sur les surfaces fissurées. Dans ce cas, la contrainte normale dans la zone cohésive est

2.1. Modélisation de la fissuration fragile d'un milieu (zones cohésives)

égale à la pression post-rupture $R_N = P_{eff}^{czm}$. La contrainte est alors de même signe que le saut de déplacement normale, car la pression a pour effet d'écarter les lèvres de la fissure. Nous verrons en section 2.2, comment cette pression permet de prendre en compte le chargement appliqué par les gaz de fission occlus dans le combustible.

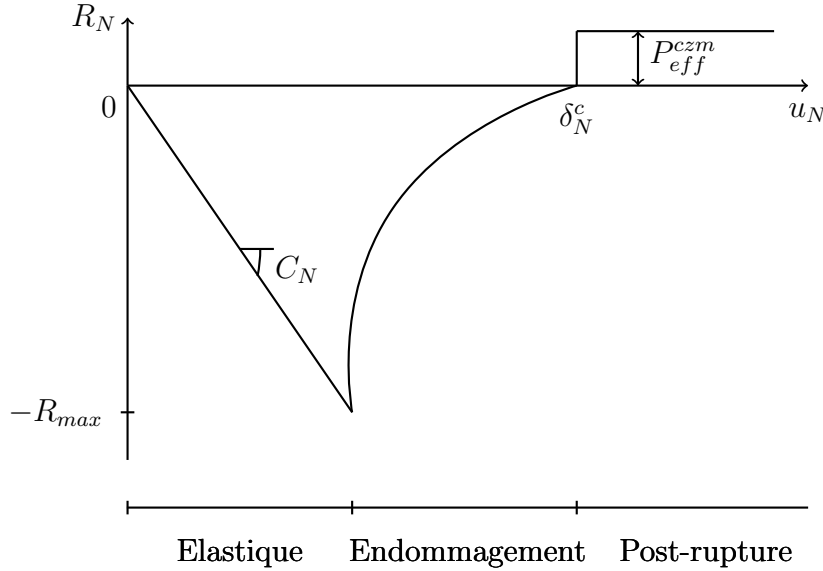


FIGURE 2.2 – Courbe de l'évolution de la contrainte cohésive normale en fonction du saut de déplacement normal.

Le saut de déplacement lors de la phase d'endommagement peut être associé à la déformation engendrée par la création et la croissance des micro-cavités jusqu'au saut de déplacement seuil δ_N^c . Ce saut de déplacement seuil est une fonction du ratio entre l'énergie de séparation de surface Ψ_H^{sep} et la contrainte seuil R_{max} (qui sont des paramètres matériau), ratio qui est homogène à une distance. En ce sens, δ_N^c n'est pas nécessairement une distance physique et peut être vu comme une longueur caractéristique du matériau [96]. Après décohésion, $[\vec{u}]$ représente l'écartement entre les lèvres de la fissure.

La loi de comportement peut être définie de manière à décrire l'évolution des fissures lorsqu'elles sont soumises à une sollicitation tridimensionnelle (i.e. en mode mixte). Pour ce faire, la densité libre d'énergie libre de cohésion peut être exprimée (dans le cas isotherme) comme [108] :

$$\Psi_H = \Psi_H(u_N, \vec{u}_T, \vec{\chi}') \quad (2.10)$$

avec $\vec{\chi}'$ une collection de variables internes décrivant la décohésion. Dans cette section on ne considère pas de variables internes autres que u_N et \vec{u}_T .

La relation entre les contraintes cohésives et le saut de déplacement dérive de cette densité d'énergie libre selon :

$$\frac{\partial \Psi_H}{\partial u_N} = R_N \text{ et } \frac{\partial \Psi_H}{\partial \vec{u}_T} = \vec{R}_T \quad (2.11)$$

Lorsque la densité d'énergie libre de cohésion atteint l'énergie de séparation Ψ_H^{sep} , l'interface est rompue. Comme détaillé en annexe B.1, cette énergie peut être reliée au taux de

restitution critique par la relation suivante :

$$\Psi_H^{sep} = \int_0^{\delta_c} R' d\delta = G_c \quad (2.12)$$

avec δ_c le saut de déplacement effectif critique valant $\delta_c = \sqrt{\delta_n^2 + \alpha^2 \|\vec{\delta}_T^c\|^2}$, α définissant le ratio entre le cisaillement et l'effort de traction, $d\delta$ est la variation infinitésimale du saut de déplacement effectif $\delta = \sqrt{u_N^2 + \alpha^2 \|\vec{u}_T\|^2}$ et $R' = \sqrt{R_N^2 + \alpha^{-2} \|\vec{R}^T\|^2}$ la contrainte cohésive effective.

Dans le cadre de cette thèse les modèles de zones cohésives sont retenus pour représenter la fissuration. Ces modèles présentent les avantages suivants :

- L'amorçage de la fissure ne nécessite pas de définir un critère ou une loi ad hoc, la fissure est amorcée naturellement en fonction du chargement.
- Le modèle permet un suivi spatial de la fissure quel que soit son état de stabilité. Il n'est pas nécessaire de définir un critère de branchement. En particulier le couplage des méthodes de zones cohésives avec la méthode des éléments finis [143] ou des éléments discrets permet de modéliser l'évolution de la fissuration d'une structure donnée.
- Le modèle permet d'imposer des conditions limites de différentes formes aux lèvres de la fissure (autre que des conditions libres $\vec{\sigma} \cdot \vec{n} = \vec{0}$), telle qu'une pression du fluide.
- D'après l'équation (2.12), l'énergie de cohésion développée dans la zone cohésive (i.e. l'aire sous la courbe de la figure 2.2 en 1D) est égale au taux de restitution critique G_c . La théorie des zones cohésives est cohérente avec l'approche de Griffith.

Ces modèles présentent aussi certaines limites principalement liées aux instabilités (sauts de solutions) et au fait que la description de la zone cohésive est purement surfacique :

- Les lois cohésives avec une raideur initiale introduisent une souplesse additionnelle dans la structure. Cet artefact peut s'avérer pénalisant lorsque les zones cohésives sont utilisées en couplage avec des éléments volumiques déformables. Puisque les zones cohésives sont généralement placées à l'interface entre chaque élément, une discrétisation plus fine aboutit à une augmentation de la souplesse additionnelle apporté par les éléments cohésifs. Blal et al. [15] proposent un critère permettant de minorer cette souplesse :

$$\frac{C_N L_{mesh}}{E} \geq \gamma_{mesh} \frac{q_{mesh}}{q_{mesh} + 1} \left(1 + \frac{4C_N}{3C_T} \right). \quad (2.13)$$

Avec q_{mesh} une perte de raideur apparente tolérée par l'utilisateur, γ_{mesh} et L_{mesh} des paramètres liés au maillage.

- Des sauts de solution peuvent apparaître au moment de la rupture de l'interface et induire une perte d'unicité de la solution. Afin de pallier cela, plusieurs solutions peuvent être abordées, notamment en introduisant une viscosité d'endommagement, en utilisant une théorie du premier gradient de la variable d'endommagement ou encore en résolvant le problème de manière dynamique (voir [91]).
- Le chemin de fissuration doit être prédéfini arbitrairement. Il n'existe pas de preuve que l'augmentation du nombre d'éléments cohésifs garantisse la convergence vers une solution unique du trajet de fissuration [109].

2.1.2.1 une loi cohésive mixte couplée avec du frottement

Les modèles de zones cohésives permettent une description microscopique du comportement de la fissure et peuvent par conséquent, prendre en compte les différents phénomènes physiques pouvant avoir lieu à cette échelle (nucléation des micro-cavités, frottement, contact, ...). Le modèle RCCM (Raous, Cangémi, Cocu et Monerie) [91, 116] est retenu dans le cadre de notre étude, car il permet de décrire la rupture en mode mixte en prenant en compte le frottement dès la phase d'endommagement, le contact unilatéral adhésif et une pression post-rupture. Pour ce faire, une variable β traduisant l'intensité d'adhésion entre les surfaces de la zone cohésive [45] est introduite dans le modèle. La diminution de β signifie que les liens microscopiques sont rompus, pour $\beta = 1$, l'interface est non-endommagée et pour $\beta = 0$, elle est rompue.

D'après le modèle, les contraintes qui se développent dans la zone cohésive sont régies par les équations suivantes :

$$-(R_N + R_N^{coh}) \in \partial_{I_{\mathbb{R}^+}}(u_N) \quad (2.14)$$

$$\vec{R}_T + \vec{R}_T^{coh} \in \partial_{\vec{u}_T} \left(\mu_f |R_N + R_N^{coh}| \|\vec{u}_T\| \right) \quad (2.15)$$

où $\vec{R}^{coh} = R_N^{coh} \vec{n} + \vec{R}_T^{coh}$ est la contrainte cohésive qui s'oppose à la fissuration et qui est nulle lorsque $\beta = 0$, $I_{\mathbb{R}^+}$ est une fonction indicatrice garantissant l'unilatéralité du contact entre les surfaces ($u_N \geq 0$), μ_f est le coefficient de frottement des lèvres de la fissure et ∂f désigne le sous-différentiel de la fonction f .

La dérivation des équations (2.14) et (2.15) est détaillée en annexe B.2. Cette dérivation permet d'exprimer les lois régissant le comportement de la zone cohésive.

Pour le contact unilatéral (ou condition de Signorini) avec adhésion, la dérivation de l'équation (2.14) donne une loi de complémentarité :

$$R_N + R_N^{coh} \geq 0, u_N \geq 0, (R_N + R_N^{coh}) u_N = 0. \quad (2.16)$$

Et, pour le frottement de Coulomb avec adhésion, la dérivation de l'équation (2.15) s'exprime comme :

$$\left\| \vec{R}_T + \vec{R}_T^{coh} \right\| \leq \mu_f |R_N + R_N^{coh}|. \quad (2.17)$$

Avec

$$\left\| \vec{R}_T + \vec{R}_T^{coh} \right\| < \mu_f |R_N + R_N^{coh}| \Rightarrow \vec{u}_T = \vec{0}, \quad (2.18)$$

$$\left\| \vec{R}_T + \vec{R}_T^{coh} \right\| = \mu_f |R_N + R_N^{coh}| \Rightarrow \exists \lambda \geq 0, \vec{u}_T = -\lambda \left(\vec{R}_T + \vec{R}_T^{coh} \right). \quad (2.19)$$

Afin de déterminer les contraintes développées au niveau de la zone cohésive, il est nécessaire de connaître l'évolution de la contrainte de cohésion \vec{R}^{coh} en fonction de l'adhérence β . Pour ce faire, une loi d'adhésion avec prise en compte d'une pression appliquée sur les lèvres de la fissure est retenue [111] [127]. D'après cette loi, la contrainte de cohésion s'exprime en fonction du saut de déplacement selon :

$$\vec{R}_{coh} = \bar{K}^s(\beta) \cdot [\vec{u}] - (1 - \beta)^{b_p} P_{eff}^{czm} \vec{n} \quad (2.20)$$

avec P_{eff}^{czm} la pression post-rupture appliquée sur les lèvres de la fissure, b_p un exposant et $\bar{K}^s(\beta)$ le tenseur de rigidité surfacique endommageable. Pour la loi cohésive, la forme de ce tenseur est donnée par :

$$\bar{K}^s(\beta) = \beta \times \left(C_N \vec{n} \otimes \vec{n} + C_T \frac{\vec{u}_T \otimes \vec{u}_T}{\vec{u}_T \cdot \vec{u}_T} \right) \quad (2.21)$$

En suivant le formalisme de Perales et al. [110], l'évolution de l'intensité de l'adhésion s'exprime comme :

$$\beta = \min [g_\beta(\|\vec{u}\|), g_\beta(\|\vec{u}\|_{max})] \quad (2.22)$$

avec $\|\vec{u}\|_{max}$ le saut de déplacement maximal et g_β une fonction décrivant l'adoucissement de l'interface selon :

$$g_\beta(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \leq \delta_e \\ \frac{\delta_e}{x} \left(1 - \left(\frac{x - \delta_e}{\delta_c - \delta_e} \right) \right) & \text{si } \delta_e \leq x \leq \delta_c \\ 0 & \text{si } x \geq \delta_c \end{cases} \quad (2.23)$$

avec δ_e le saut de déplacement seuil à partir duquel la zone cohésive s'endommage et δ_c le saut déplacement critique à rupture de la zone cohésive. En prenant en compte la mixité d'ouverture de fissure [14], le saut de déplacement à initiation de l'endommagement s'exprime comme :

$$\delta_e = \frac{\|\vec{u}\|}{\sqrt{\left(\frac{u_N}{\delta_e^N} \right)^2 + \left(\frac{\|\vec{u}_T\|}{\delta_e^T} \right)^2}} \quad (2.24)$$

où δ_e^N et δ_e^T sont les sauts de déplacement à initiation de l'endommagement pour une sollicitation purement normale ou tangente respectivement. Le saut de déplacement à rupture s'exprime comme :

$$\delta_c = \frac{3}{2} \left(\frac{\sqrt{\left(\frac{u_N}{\delta_e^N} \right)^2 + \left(\frac{\|\vec{u}_T\|}{\delta_e^T} \right)^2}}{\frac{R_{max}^N u_N^2}{G_c^N \delta_e^N} + \frac{R_{max}^T \|\vec{u}_T\|^2}{G_c^T \delta_e^T}} + \frac{\delta_e}{6} \right) \quad (2.25)$$

avec R_{max}^N et R_{max}^T la contrainte cohésive maximale respectivement normale et tangente et G_c^N et G_c^T est l'énergie de rupture respectivement normale et tangente. Par la suite les propriétés à rupture normale et tangente sont considérées équivalente, ainsi on a $R_{max}^N = R_{max}^T = R_{max}$ et $G_c^N = G_c^T = G_c$.

Connaissant l'ensemble des lois de comportement interfaciales, les contraintes qui se développent dans la zone cohésive peuvent être déterminées. Lorsque l'interface est soumise à une traction, d'après les équations (2.16) et (2.20), la contrainte normale s'exprime comme $R_N = \beta C_N u_N - (1 - \beta)^{b_p} P_{eff}^{czm}$. De la même manière, les équations (2.17)-(2.19) et (2.20) assurent que $\vec{R}_T = \beta C_T \vec{u}_T$. Ainsi, le comportement en traction de la zone cohésive est purement linéaire et complètement régi par les raideurs C_N et C_T tant que l'interface est saine ($\beta = 1$).

On peut ajouter à ce modèle une apparition progressive du frottement avec l'endommagement surfacique [91] :

$$\mu_f = f(\beta)\bar{\mu}. \quad (2.26)$$

Avec $\bar{\mu}$ le coefficient de frottement post-rupture et $f(\beta)$ une fonction décroissante de l'adhésion définie tel que $0 \leq f(\beta) \leq 1$ ($f(\beta) = 1 - \beta$ dans [92]).

Dans le cadre de la modélisation de la fragmentation de la pastille, le modèle présenté dans cette partie est retenu : il permet de prendre en compte les phénomènes intervenant lors de la fissuration du combustible irradié, notamment l'effet d'une pression dans les fissures (imposée par les gaz de fission). Le modèle permet de plus de traiter du comportement post-rupture du matériau (contact frottant sur les surfaces fissurées) dans un formalisme permettant de modéliser un milieu fragmenté comme nous le verrons par la suite.

2.1.3 Description du comportement des milieux granulaires

Le combustible est sous forme de gros fragments (dus aux macro-fissures apparaissant en début d'irradiation) qui peuvent se sur-fragmenter en situation d'APRP. Dans le cadre de ce travail, il s'agit donc de décrire l'évolution du milieu granulaire formé par ces fragments de combustible, fragments dont la taille est amenée à évoluer. Par la suite, le terme de granulat désigne un fragment de combustible composant le milieu granulaire. Le comportement d'un milieu granulaire dépend de mécanismes opérants à différentes échelles qui peuvent être distinguées de la façon suivante :

- l'échelle microscopique, définie comme étant de la taille caractéristique des surfaces de contact,
- l'échelle du granulat (ou d'une collection de granulat), à laquelle les différentes forces de contact et de frottement agissent,
- l'échelle de l'ensemble du milieu granulaire, pour laquelle le comportement est fortement dépendant des conditions limites et de la géométrie de ces dernières.

Si les efforts de contact et de frottement entre chacune des particules du milieu et la géométrie de l'empilement granulaire sont connus, les champs macroscopiques décrivant l'état mécanique du milieu peuvent être déduits. Ces champs sont obtenus en moyennant les variables microscopiques sur un volume représentatif Ω_V . Pour cela une fonction de moyenne $g^m(\vec{x})$ est définie telle que :

- $\int_{\Omega} g^m(\vec{x}) d\Omega = 1$ avec Ω le domaine sur lequel g^m est évaluée,
- le maximum de la fonction est atteint en $\vec{x} = \vec{0}$,
- $g^m(\vec{x})$ tend vers 0 pour tous les points situés en dehors du domaine représentatif Ω_V .

Les champs scalaires peuvent être définis en tout point du milieu par le biais de cette fonction, e.g. la densité massique est donnée par :

$$\langle \rho(\vec{x}, t) \rangle = m \sum_{\alpha=1}^{N_c} g^m(\vec{x} - \vec{x}_{\alpha}(t)), \quad (2.27)$$

avec $\langle \rho \rangle$ la densité moyenne du milieu, m la masse d'un corps (en considérant que tous les corps ont la même masse), \vec{x}_α la coordonnée du centre d'inertie du corps α et N_c le nombre de corps appartenant au domaine Ω_V . En prenant une fonction porte pour la fonction de moyenne donnée par :

$$g^m(\vec{x}) = \frac{1}{|\Omega_V|} H(R_V - \|\vec{x}\|) \quad (2.28)$$

avec $H(x)$ la fonction d'Heaviside valant 1 pour $x > 0$ et 0 pour $x < 0$, et R_V le rayon du volume $|\Omega_V|$ défini sphérique, l'équation (2.27) devient :

$$\langle \rho(\vec{x}, t) \rangle = \frac{N_c m}{|\Omega_V|} \quad (2.29)$$

Les valeurs vectorielles et tensorielles sont obtenues de la même manière. Les composantes du vecteur de vitesse $\langle \vec{v} \rangle$ moyenne s'écrivent :

$$\langle v_i(\vec{x}, t) \rangle = \frac{m}{\rho} \sum_{\alpha=1}^{N_c} v_{i,\alpha} g^m(\vec{x} - \vec{x}_\alpha(t)), \quad (2.30)$$

avec $v_{i,\alpha}$ la $i^{\text{ème}}$ composante du vecteur vitesse \vec{v}_α du centre d'inertie du corps α . Soit d'après (2.28) :

$$\langle v_i(\vec{x}, t) \rangle = \frac{1}{N_c} \sum_{\alpha=1}^{N_c} v_{i,\alpha}. \quad (2.31)$$

Le champ de contrainte – dans le cas où les déformations sont quasi-statiques – est donné par le tenseur de contrainte lié aux efforts de contact selon [51] :

$$\langle \sigma_{ij} \rangle = -\frac{1}{|\Omega_V|} \sum_{i_c \in \Omega_V} f_i^{i_c} l_j^{i_c} \quad (2.32)$$

avec \vec{l}^{i_c} le vecteur de branche reliant les centres d'inerties des deux corps en contact et dont le sens est défini selon la normale du contact i_c , $\vec{f}^{i_c} = \vec{R}^{i_c} S^{i_c}$ la force de contact exercée au niveau de contact i_c , où \vec{R}^{i_c} est le vecteur de contrainte qui s'applique sur la surface de contact S^{i_c} . Le détail des calculs permettant d'obtenir l'expression (2.32) est donné en annexe C.1. Si l'inertie des particules est importante, l'expression du tenseur des contraintes devient [4] :

$$\langle \sigma_{ij} \rangle = -\frac{1}{|\Omega_V|} \sum_{i_c \in \Omega_V} f_i^{i_c} l_j^{i_c} - \rho \sum_{\alpha=1}^{N_c} \delta v_{i,\alpha} \delta v_{j,\alpha} \quad (2.33)$$

avec $\delta \vec{v}_\alpha = \vec{v}_\alpha - \langle \vec{v} \rangle$ la fluctuation de la vitesse du corps α par rapport à la vitesse moyenne.

2.1.4 Description de la fragmentation d'un milieu continu par une approche discrète

Afin de modéliser la fragmentation du combustible en APRP, il est nécessaire de décrire la transition d'un milieu continu (la pastille de combustible) à un milieu discret (les fragments de combustible). Les interactions à l'échelle microscopique (celle des surfaces de contact) sont décrites afin de pouvoir représenter le comportement du milieu. Pour ce faire, la méthode

des éléments discrets (DEM), qui consiste à déterminer la cinématique de chacun des granulats (les fragments de combustible) en fonction de leurs interactions (contact, frottement, cohésion, etc.), a été retenue.

Cette méthode, couplée au modèle de zone cohésive, permet de décrire l'évolution de l'endommagement du matériau de l'amorce d'une fissure jusqu'à sa fragmentation. Le matériau est décrit comme un assemblage de corps rigides (fragments élémentaires) initialement liés par le biais d'interactions cohésives qui vont se rompre en fonction des sollicitations appliquées. Après la rupture de ces liaisons, les corps peuvent interagir par contact et frottement. Afin de déterminer les efforts engendrés par les interactions entre corps, la méthode de résolution de la dynamique de contact non-régulière (NSCD) est utilisée. Le principe de cette méthode de résolution consiste, sur un pas de temps :

1. La vitesse de chacun des corps est déterminée en fonction des efforts appliqués en omettant les forces d'interaction. Ces vitesses sont appelées vitesses prédites.
 - 1.1. Ces vitesses sont ensuite intégrées afin d'obtenir les positions prédites des granulats.
 - 1.2. Pour les interactions cohésives, connaissant les vitesses prédites, le déplacement relatif entre les granulats peut être déterminé, ce qui permet d'évaluer l'endommagement surfacique $(1 - \beta)$ grâce à la loi d'adhésion du modèle de zones cohésives.
2. Aux positions prédites, les éventuels nouveaux contacts entre corps sont détectés et les forces d'interaction sont déterminées.
3. La vitesse des corps est alors réévaluée en prenant en compte ces nouvelles forces.

Par la suite, cette méthode de résolution est présentée dans le détail.

2.1.4.1 La méthode Non Smooth Contact Dynamics (NSCD)

La cinématique d'un ensemble de corps rigides est régie par le principe fondamental de la dynamique. Le mouvement de chacun de ces corps, dans le repère principale d'inertie, est décrit par les équations de la résultante dynamique (2.34) et du moment dynamique (2.35) :

$$m_\alpha \frac{d\vec{v}_\alpha}{dt} = \vec{F}_{ext,\alpha} + \vec{f}_\alpha \quad (2.34)$$

$$J_\alpha \frac{d\vec{\omega}_\alpha}{dt} = \vec{M}_{ext,\alpha} - \vec{\omega}_\alpha \wedge (J_\alpha \vec{\omega}_\alpha) + \vec{M}_\alpha \quad (2.35)$$

avec l'indice α ($1 \leq \alpha \leq N_c$) qui désigne le α^{ieme} corps, m_α la masse, J_α la matrice d'inertie, \vec{v}_α la vitesse du centre de masse, $\vec{\omega}_\alpha$ le vecteur vitesse rotation du centre de masse, $\vec{F}_{ext,\alpha}$ et $\vec{M}_{ext,\alpha}$ respectivement, la résultante et le moment des forces extérieures, \vec{f}_α et \vec{M}_α respectivement, la résultante et le moment des efforts de contact. Dans cette sous-partie, nous ne considérons que les efforts de contact-frottant, la prise en compte des efforts de cohésion sera abordée par la suite.

Moreau [93] et Jean [66] proposent une résolution de la dynamique des corps compatible avec le caractère discontinu des chocs, des sauts de vitesse ou encore des glissements. Dans un premier temps, les vecteurs intervenants dans (2.34) et (2.35) sont concaténés (e.g., $\vec{v} =$

$(\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_\alpha, \dots, \vec{v}_{N_c})$) et ces équations sont ré-écrites au sens des mesures différentielles :

$$\mathbb{M}d\vec{v} = \vec{F}_{ext}dt + d\vec{f} \quad (2.36)$$

$$\mathbb{J}d\vec{\omega} = \left(\vec{M}_{ext} + \vec{M}_{rot} \right) dt + d\vec{M} \quad (2.37)$$

avec

$$\vec{M}_{rot} = \vec{\omega} \wedge (\mathbb{J}\vec{\omega}), \quad \mathbb{M} = \begin{pmatrix} m_1 I_d & & \\ & \dots & \\ & & m_{N_c} I_d \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \mathbb{J} = \begin{pmatrix} J_1 & & \\ & \dots & \\ & & J_{N_c} \end{pmatrix} \quad (2.38)$$

où I_d est la matrice unité dans la dimension du problème, $d\vec{v}$ est la mesure différentielle de \vec{v} , dt est la mesure de Lebesgue et dt' est une mesure réelle positive pour laquelle $d\vec{v}$ possède une densité.

Les équations (2.36) et (2.37) sont ensuite intégrées sur l'intervalle de temps $[t_i, t_f]$ de longueur Δt , avec t_i et t_f respectivement le temps de début et de fin de l'incrément temporel sur lequel le calcul est résolu. Cette intégration donne :

$$\mathbb{M}(\vec{v}(t_f) - \vec{v}(t_i)) = \int_{t_i}^{t_f} \vec{F}_{ext}dt + \vec{f}(t_f)\Delta t \quad (2.39)$$

$$\mathbb{J}(\vec{\omega}(t_f) - \vec{\omega}(t_i)) = \int_{t_i}^{t_f} \left(\vec{M}_{ext} + \vec{M}_{rot} \right) dt + \vec{M}(t_f)\Delta t \quad (2.40)$$

Les intégrales de $\vec{f}dt'$ et $\vec{M}dt'$ sont exprimées en fonction de la valeur moyenne des impulsions et des moments liés aux impulsions intervenants entre t_i et t_f :

$$\vec{f}(t_f) = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_i}^{t_f} \vec{f}(t)dt' \quad \text{et} \quad \vec{M}(t_f) = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_i}^{t_f} \vec{M}(t)dt' \quad \text{avec} \quad \vec{f}(t_f) \equiv \vec{f} \quad \text{et} \quad \vec{M}(t_f) \equiv \vec{M}$$

Les vitesses et rotations sont déduites de l'intégration :

$$\vec{v}(t_f) = \vec{v}_{free} + \Delta t \mathbb{M}^{-1} \vec{f} \quad (2.41)$$

$$\vec{\omega}(t_f) = \vec{\omega}_{free} + \Delta t \mathbb{J}^{-1} \vec{M} \quad (2.42)$$

avec \vec{v}_{free} et $\vec{\omega}_{free}$ respectivement les vitesses et les rotations libres, en omettant les interactions entre corps :

$$\vec{v}_{free} = \vec{v}(t_i) + \mathbb{M}^{-1} \int_{t_i}^{t_f} \vec{F}_{ext}dt \quad (2.43)$$

$$\vec{\omega}_{free} = \vec{\omega}(t_i) + \mathbb{J}^{-1} \int_{t_i}^{t_f} \vec{M}_{ext} + \vec{M}_{rot} dt \quad (2.44)$$

La vitesse relative \vec{U}^{i_c} des corps au contact i_c s'exprime selon :

$$\vec{U}^{i_c} = \mathbb{H}^{i_c, T} \begin{pmatrix} \vec{v} \\ \vec{\omega} \end{pmatrix} \quad (2.45)$$

2.1. Modélisation de la fissuration fragile d'un milieu (zones cohésives)

où $\mathbb{H}^{i_c, T}$ est la transposée de la matrice de passage du repère global au repère local du contact :

$$\vec{U}^{i_c}(t_f) = \vec{U}_{free}^{i_c} + \Delta t \mathbb{H}^{i_c, T} \begin{pmatrix} \mathbb{M}^{-1} \vec{f} \\ \mathbb{J}^{-1} \vec{M} \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad \vec{U}_{free}^{i_c} = \mathbb{H}^{i_c, T} \begin{pmatrix} \vec{v}_{free} \\ \vec{\omega}_{free} \end{pmatrix} \quad (2.46)$$

soit

$$\vec{U}^{i_c}(t_f) = \vec{U}_{free}^{i_c} + \Delta t \mathbb{H}^{i_c, T} \bar{\mathbb{M}}^{-1} \begin{pmatrix} \vec{f} \\ \vec{M} \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad \bar{\mathbb{M}} = \begin{pmatrix} \mathbb{M} & 0 \\ 0 & \mathbb{J} \end{pmatrix} \quad (2.47)$$

En introduisant \vec{f}^{i_c} (resp. \vec{M}^{i_c}) la contribution du contact i_c à la résultante des efforts (resp. des moments) de contact \vec{f} (resp. \vec{M}), telle que :

$$\vec{f} = \sum_{j_c=1}^{N_{contact}} \vec{f}^{j_c} \quad \text{et} \quad \vec{M} = \sum_{j_c=1}^{N_{contact}} \vec{M}^{j_c} \quad \text{on a} \quad \begin{pmatrix} \vec{f}^{i_c} \\ \vec{M}^{i_c} \end{pmatrix} = \mathbb{H}^{i_c} \vec{F}^{i_c} \quad \text{soit} \quad \begin{pmatrix} \vec{f} \\ \vec{M} \end{pmatrix} = \sum_{i_c=1}^{N_{contact}} \mathbb{H}^{i_c} \vec{F}^{i_c} \quad (2.48)$$

avec $N_{contact}$ le nombre de contact, on a :

$$\vec{U}^{i_c}(t_f) = \vec{U}_{free}^{i_c} + \sum_{j_c=1}^{N_{contact}} W^{i_c j_c} \Delta t \vec{F}^{j_c} \quad \text{avec} \quad W^{i_c j_c} = \mathbb{H}^{i_c, T} \bar{\mathbb{M}}^{-1} \mathbb{H}^{j_c} \quad \text{l'opérateur de Delassus} \quad (2.49)$$

D'après l'équation (2.49), la vitesse relative du contact i_c dépend de la vitesse relative des corps en l'absence d'interaction entre corps et des efforts imposés par l'ensemble de ces interactions. En isolant la contribution du contact i_c , la vitesse relative s'exprime comme :

$$\vec{U}^{i_c}(t_f) = \vec{U}_{free, loc}^{i_c} + W^{i_c i_c} \Delta t \vec{F}^{i_c} \quad \text{où} \quad \vec{U}_{free, loc}^{i_c} = \vec{U}_{free}^{i_c} + \sum_{j_c \neq i_c}^{N_{contact}} W^{i_c j_c} \Delta t \vec{F}^{j_c} \quad (2.50)$$

Le problème de contact est résolu par une méthode de Gaus-Seidel : les efforts et les vitesses relatives au contact i_c sont déterminés de manière itérative en considérant que les valeurs aux autres contacts j_c sont connues (en particulier, sur un pas de temps, les contacts $j_c < i_c$ sont déjà résolus et les contacts $j_c > i_c$ sont figés dans la configuration du pas de temps précédent).

Si tous les contacts j_c sont figés, la résolution du contact i_c revient à trouver la vitesse relative $\vec{U}^{i_c}(t_f)$ et l'effort \vec{F}^{i_c} vérifiant (2.50) et respectant les relations de contact unilatéral et de frottement sans adhésion (équations (2.16)-(2.19) avec $\vec{R}^{coh} = \vec{0}$)². Il existe une relation linéaire entre la vitesse relative et l'impulsion de contact, ainsi le couple de solutions $(\vec{U}^{i_c}, \vec{F}^{i_c})$ est donné par l'intersection de l'hyperplan défini par $\vec{U}_{free, loc}^{i_c} + \Delta t W^{i_c i_c} \vec{F}^{i_c}$ avec les graphes des relations de contact et frottement. En 2D, cela se traduit par la recherche de l'intersection de la droite représentée par l'équation (2.50) avec les graphes comme indiqué par la figure 2.3.

2. La pression post-rupture peut également être prise en compte, auquel cas $\vec{R}^{coh} = -P_{eff}^{czm} \vec{n}$. Par souci de simplification, cette pression n'est pas prise en compte ici et sera traitée par la suite.

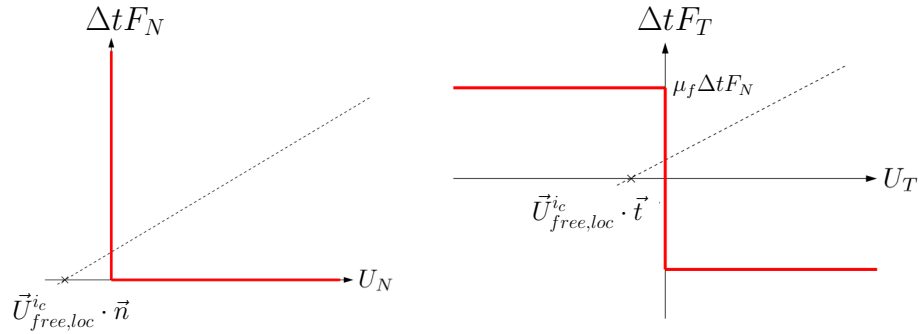


FIGURE 2.3 – Représentation de la droite obtenue par l'équation (2.50) avec les graphes des relations de contact (à gauche) et de frottement (à droite) [84].

Pour le schéma d'intégration en temps, une θ -méthode est utilisée. Connaissant les variables à l'instant initial t_i , les vitesses et les rotations sont déterminées à un temps médian défini par :

$$t_m = t_i + (1 - \Delta t(1 - \zeta))\vec{v}(t_i) \quad (2.51)$$

où $\zeta \in [0, 1]$ est une constante permettant de pondérer les solutions. Pour cette étape de prédiction, les positions des granulats sont déterminées en intégrant les vitesses de translation

$$\vec{x}(t_m) = \vec{x}(t_i) + \Delta t(1 - \zeta)\vec{v}(t_i). \quad (2.52)$$

Les vitesses et rotations libres sont calculées selon :

$$\vec{v}_{free} = \vec{v}(t_i) + \Delta t \mathbb{M} \left[(1 - \zeta)\vec{F}_{ext}(t_i) + \zeta\vec{F}_{ext}(t_f) \right] \quad (2.53)$$

$$\vec{\omega}_{free} = \vec{\omega}(t_i) + \Delta t \mathbb{J} \left[\vec{M}_{rot}(t_i) + (1 - \zeta)\vec{M}_{ext}(t_i) + \zeta\vec{M}_{ext}(t_f) \right]. \quad (2.54)$$

Dans cette configuration, les contacts sont détectés et les efforts associés sont déterminés par l'algorithme de Gaus-Seidel. À l'étape de correction, les vitesses et les rotations sont déterminées en prenant en compte les efforts de contact d'après (2.41) et (2.42). Après intégration, les positions corrigées sont déterminées par :

$$\vec{x}(t_f) = \vec{x}(t_m) + \zeta \Delta t \vec{x}(t_f). \quad (2.55)$$

Comme chaque contact a été résolu en considérant les autres contacts précédents comme figés, des interpénétrations peuvent exister : la solution est donc comparée à un critère de convergence et le calcul des efforts de contact et des vitesses relatives est ré-itéré jusqu'à convergence.

2.1.4.2 Prise en compte des efforts de cohésion

Cette méthode peut être couplée au modèle de zones cohésives afin de décrire la fissuration d'un matériau. Dans ce cas, les interactions entre corps sont enrichies en intégrant les efforts cohésifs qui dépendent des sauts de déplacement entre corps. Dans un premier temps, l'adhérence du contact i_c , β^{i_c} est déterminée par l'équation (2.22) (cf. section 2.1.2.1) à partir

2.1. Modélisation de la fissuration fragile d'un milieu (zones cohésives)

de la valeur de \vec{U}^{i_c} dans (2.50). Dans un deuxième temps, l'effort de cohésion au niveau du contact i_c est pris en compte. Cet effort s'écrit :

$$\vec{F}^{coh,i_c} = \int_{S^{i_c}} \vec{R}^{coh,i_c} dS = \vec{R}^{coh,i_c} S^{i_c} \quad (2.56)$$

avec S^{i_c} la surface de contact au point de contact i_c ³ et en rappelant que \vec{R}^{coh,i_c} est le vecteur de contrainte de cohésion en i_c . L'effort de cohésion est déterminé en introduisant le changement de variable suivant :

$$\vec{F}^{i_c} = \vec{F}^{i_c} + \vec{F}^{coh,i_c} \quad \text{avec} \quad \vec{F}^{coh,i_c} = \left(\bar{K}^s(\beta^{i_c}) \cdot [\vec{u}]^{i_c} - (1 - \beta^{i_c})^{b_p} P_{eff}^{czm,i_c} \vec{n}^{i_c} \right) S^{i_c} \quad (2.57)$$

En introduisant cette variable dans (2.50), l'équation devient :

$$\vec{U}^{i_c} = \vec{U}_{free}^{i_c} + \sum_{j_c \neq i_c} \Delta t W^{i_c j_c} \vec{F}^{j_c}(t_f) + W^{i_c i_c} \Delta t \vec{F}^{i_c} \quad (2.58)$$

$$\vec{U}^{i_c} = \vec{U}_{free}^{i_c} + \sum_{j_c \neq i_c} \Delta t W^{i_c j_c} \vec{F}^{j_c}(t_f) + W^{i_c i_c} \Delta t \left(\vec{F}^{i_c} - \vec{F}^{coh,i_c} \right) \quad (2.59)$$

$$\vec{U}^{i_c} = \vec{U}_{free,loc}^{i_c} + W^{i_c i_c} \Delta t \vec{F}^{i_c}, \quad (2.60)$$

en posant :

$$\vec{U}_{free,loc}^{i_c} = \vec{U}_{free,loc}^{i_c} - \Delta t W^{i_c i_c} \vec{F}^{coh,i_c}. \quad (2.61)$$

La prise en compte de la cohésion a donc pour effet de translater la vitesse libre de la valeur $W^{i_c i_c} \Delta t \vec{F}^{coh,i_c}$. Remarquons que le changement de variables dans l'équation (2.58) ne concerne que le contact i_c car, durant la résolution de l'algorithme de Gaus-Seidel, la contribution des efforts de cohésion des autres contacts j_c est déjà pris en compte à cette étape pour $j_c < i_c$ ou a été pris en compte à l'étape précédente pour $j_c > i_c$.

3. la répartition de la contrainte cohésive est considérée constante sur la surface de contact.

2.1.4.3 Résumé du schéma de calcul NSCD-CZM

La résolution itérative de la dynamique de contact en prenant en compte les efforts de cohésion est résumé par l'algorithme 1, avec T_F le temps final de simulation :

Algorithme 1 Algorithme de résolution du contact par la méthode NSCD

tant que $t_f < T_F$ **faire**

Calcul des positions prédites $\vec{x}(t_m)$, d'après l'équation (2.52)

Calcul de la vitesse et la vitesse de rotation libre \vec{v}_{free} et $\vec{\omega}_{free}$
d'après (2.53) et (2.54) respectivement

Détection du contact

Construction des opérateurs de passage du repère globale aux repères locaux \mathbb{H}

Calcul des vitesses libres relatives \vec{U}_{free} d'après (2.46)

pour pour k de 1 à N_{iter} **faire**

pour pour i_c de 0 à $N_{contact}$ **faire**

Evaluation de $\vec{U}_{free,loc}^{i_c}$ dans l'équation (2.50)

Estimation du saut de déplacement $u_N^{i_c}$, $\vec{u}_T^{i_c}$ en intégrant $\vec{U}_{free,loc}^{i_c}$

Calcul de β^{i_c} d'après l'équation (2.22)

Calcul de l'effort de cohésion d'après :

$$\vec{F}^{coh,i_c} = \left(\bar{K}^s(\beta^{i_c}) \cdot [\vec{u}]^{i_c} - (1 - \beta^{i_c})^{b_p} P_{eff}^{czm,i_c} \vec{n}^{i_c} \right) S^{i_c}$$

Changement de variable $\vec{U}_{free,loc}^{i_c} = \vec{U}_{free,loc}^{i_c} - W^{i_c} \Delta t \vec{F}^{coh,i_c}$

Calcul de la vitesse relative en prenant en compte l'effort de cohésion :

$$\vec{U}^{i_c} = \vec{U}_{free,loc}^{i_c} + \Delta t W^{i_c} \vec{F}^{i_c}$$

Calcul du couple $(\vec{U}^{i_c}, \vec{F}^{i_c})$

$i_c \leftarrow i_c + 1$

▷ incrémentation de l'indice du contact

fin pour

Calcul de la vitesse et de la vitesse de rotation corrigées

\vec{v} et $\vec{\omega}$ d'après (2.41) et (2.42) respectivement

Calcul de la position corrigée $\vec{x}(t_f)$ d'après (2.55)

si Convergence **alors**

$k \leftarrow N_{iter}$

▷ S'il y a convergence du calcul
alors la deuxième boucle est terminée

sinon

$k \leftarrow k + 1$

▷ incrémentation de l'indice
d'itération de la résolution du contact

fin si

fin pour

$t_i \leftarrow t_i + \Delta t$

▷ incrémentation du temps

fin tant que

2.2 Étude paramétrique de la modélisation du comportement à rupture du combustible par la méthode DEM-CZM

Dans le cadre de l'étude de la sur-fragmentation du combustible lors de la dépressurisation du crayon, nous cherchons à modéliser le comportement du matériau à partir de la méthode des éléments discrets (DEM) couplée au modèle de zone cohésive (CZM). Ce modèle DEM-CZM s'appuie sur :

- une représentation microstructurale de la pastille par une collection de granulats polyédriques indéformables,
- le modèle de zone cohésive RCCM présenté en section 2.1.2.1 afin de représenter la potentielle fissuration en prenant en compte le contact frottant entre les surfaces fissurées et la pression appliquée par les gaz de fission post-rupture,
- les résultats de simulations ALCYONE de l'irradiation de base du crayon étudié en section 1.4. Comme nous l'avons vu, ces résultats permettent d'obtenir une estimation fine de l'état de ces gaz, notamment en termes de tailles de bulles, de fraction volumique et de pression. Ces différents paramètres sont pris en compte afin de définir le chargement appliqué au combustible dans le modèle.

Les calculs sont réalisés grâce au code de calcul LMG90 [39] qui permet de résoudre la dynamique de contact entre éléments discrets avec la méthode NSCD (cf. section 2.1.4.1) en prenant en compte les différentes interactions entre granulats (contact-frottant, cohésion, etc.).

Afin de simplifier le modèle et l'interprétation des résultats, la sur-contrainte de traction engendrée par l'ensemble des cavités (cf. chapitre 1) n'est pas prise en compte. Seul le chargement appliqué par les bulles intergranulaires est considéré. Pour ce faire, la pression post-rupture P_{eff}^{czm} (assimilée à la sur-pression des bulles intergranulaires) est appliquée sur une fraction surfacique de zones cohésives (assimilée au taux de recouvrement des bulles au joint de grains f_s^*). Le comportement du combustible dans le modèle dépend alors du chargement appliqué par les gaz de fission (à travers P_{eff}^{czm} et f_s^*) et des propriétés à rupture du combustible (la contrainte cohésive maximale R_{max} et le taux de restitution critique de l'énergie G_c). Ces paramètres ne sont pas connus avec exactitude sur combustible irradié :

- Si les propriétés à rupture sont connues sur combustible vierge, leur évolution avec l'irradiation est encore à l'étude [60]. Un encadrement de ces propriétés est donc défini à partir de mesures issues de la littérature.
- Le taux de recouvrement des bulles au joint de grains n'a pas été mesuré expérimentalement (cf. section 1.4.3.4) et la pression calculée dans les bulles est en contradiction avec les estimations mixtes (porosité mesurée et quantité de gaz calculée). Des mesures supplémentaires sont nécessaires afin de déterminer précisément ces paramètres (voir tableau 1.20). De plus, la température à laquelle la pression des bulles est suffisante pour initier la fragmentation du combustible n'est pas connue avec précision.

Les incertitudes liées à ces quantités amènent à proposer une analyse paramétrique du modèle. Comme le combustible irradié est hétérogène (le chargement appliqué par les gaz de fission et les propriétés microstructurales varient radialement), cette analyse est réalisée en

distinguant la pastille en plusieurs zones radiales. Cette étude doit permettre de définir la valeur des paramètres à retenir pour le comportement à rupture du combustible en situation de dépressurisation du crayon, situation qui fera l'objet de l'étude présentée au chapitre 3.

Dans le chapitre présent, le critère permettant de déterminer la représentativité du modèle est basé sur les résultats des traitements thermiques réalisés à une pression de confinement contrôlée. Comme mentionné en section 1.2.1, la pression de confinement à effet bénéfique sur le maintien de l'intégrité du combustible en transitoire [59, 133]. Pour cette étude, il est supposé qu'une pression de confinement de 10 MPa est suffisante pour que le combustible reste intacte à l'issue du transitoire. À partir de cette hypothèse, la proposition suivante peut être définie :

Est jugé représentatif, un modèle qui permet de représenter, d'une part, le fait que le matériau se fragmente lorsqu'il est soumis au seul chargement mécanique induit par la pressurisation des cavités (la pression de confinement atmosphérique étant quasi-nulle) et, d'autre part, le fait que ce même matériau reste intègre lorsque ce chargement est contrebalancé par l'application d'une pression externe de confinement de 10 MPa.

Ainsi, le respect de cette proposition par le modèle permet de représenter de manière quantitative l'effet bénéfique du confinement mis en évidence expérimentalement. Dans le cadre de cette étude, il s'agit donc de déterminer les paramètres pour lesquels cette proposition est vérifiée.

Dans la sous-section 2.2.1, la modélisation du combustible par la méthode DEM-CZM est présentée dans le détail et le domaine paramétrique de l'étude est défini. En sous-section 2.2.2, les paramètres (estimations et encadrements) pour l'analyse paramétrique sont présentées. En sous-section 2.2.3, les paramètres permettant de représenter le comportement à rupture des différentes zones du combustible sont identifiés à partir de la simulation des recuits thermiques sur un échantillon de pastille.

2.2.1 Définition du modèle DEM-CZM retenu pour modéliser le comportement à rupture du combustible

2.2.1.1 Représentation géométrique de la pastille

La pastille est représentée comme un assemblage de corps **polyédriques** indéformables, comme illustré figure 2.4, figure où l'on voit clairement les fragments élémentaires. Des liaisons cohésives sont introduites entre deux fragments voisins. Lorsque ces liaisons sont rompues, l'endommagement est total et les fragments élémentaires sont désolidarisés. Ainsi, l'état de fragmentation maximal qui puisse être atteint par le combustible dans le modèle est défini par cet ensemble de fragments une fois la totalité des liaisons rompues.

Pour les études présentées par la suite, la taille des fragments (i.e. le diamètre d'une sphère ayant le même volume) est spatialement quasi-uniforme. L'influence de la variation de la taille des fragments ne sera pas traitée dans le cadre de cette étude, mais une méthodologie permettant de générer les polyèdres en contrôlant leur taille en fonction de la position radiale dans la pastille a été définie dans cette optique en annexe C.4.

2.2. Étude paramétrique de la modélisation du comportement à rupture du combustible par la méthode DEM-CZM

Pour cette étude, la taille des fragments est d'environ 1 mm de diamètre et la pastille est discrétisée par un ensemble de 610 fragments (ce qui représente environ 15000 points de contact initialement). La taille des fragments est donc 100 fois plus grande que la taille des grains de combustible (d'un diamètre d'environ 10 μm dans les zones non-restructurée) et de l'ordre de grandeur de la taille des fragments issus des expériences simulant l'APRP (entre 0.75 et 1 mm de moyenne pour les combustibles les plus fragmentés) [128].

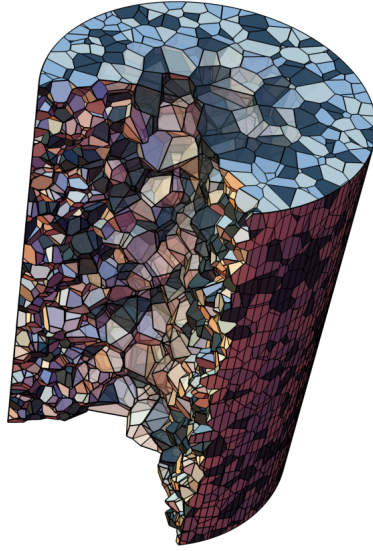


FIGURE 2.4 – Représentation de la pastille définie par une collection de granulats polyédriques.

Par la suite le chargement appliqué à ces fragments élémentaires est présenté.

2.2.1.2 Définition du chargement appliqué et des conditions limites

En section 1.4.3.3, le chargement induit par les bulles intergranulaires a été estimé. Dans le modèle DEM-CZM, ce chargement est appliqué localement au niveau des surfaces entre fragments élémentaires. Pour ce faire, l'intensité d'adhésion des liaisons et la pression post-rupture (i.e., respectivement les variables β et P_{eff}^{czm} dans l'expression de la contrainte cohésive (2.21)), sont définies de la manière suivante :

- Soit $\beta = 1$ et $P_{eff}^{czm} \neq 0$ (interfaces noires sur la figure 2.5) : la liaison entre les surfaces est initialement non-endommagée (ou saine) et son comportement peut évoluer vers la rupture au fur et à mesure que le modèle de zones cohésives s'endommage (cf. section 2.1.2.1). Lorsque cette liaison est rompue, la pression P_{eff}^{czm} s'applique sur les surfaces fissurées.
- Soit $\beta = 0$ et $P_{eff}^{czm} \neq 0$ (interfaces rouges sur la figure 2.5) : la surface est initialement fissurée et pressurisée afin de représenter le chargement appliqué localement par les bulles intergranulaires (voir section 1.4.3.3). Dans ce cas, le comportement de l'interface est régi par les relations de contact unilatéral et de frottement avec prise en compte de la pression (équations (2.16)-(2.19) avec $\vec{R}^{coh} = -P_{eff}^{czm}\vec{n}$).

2.2. Étude paramétrique de la modélisation du comportement à rupture du combustible par la méthode DEM-CZM

Afin de prendre en compte la pression de confinement appliquée au combustible (la pression du four), une force est appliquée en chacun des fragments élémentaires comportant des surfaces libres⁴. Cette force est définie selon :

$$\vec{F}_{conf}^{\alpha} = \sum_{s \in \mathcal{S}_l^{\alpha}} P_{conf} S_s (-\vec{n}_s) \quad (2.62)$$

avec \mathcal{S}_l^{α} l'ensemble des surfaces libres du fragment α , P_{conf} la pression de confinement appliquée au combustible, S_s et \vec{n}_s respectivement l'aire et la normale sortante de la $s^{\text{ième}}$ surface libre du fragment α .

Dans le modèle, la pression de confinement est discrétisée par des efforts ponctuels au niveau des fragments. Or, l'assemblage de ces fragments n'est pas symétrique (voir figure 2.4), par conséquent, la somme de ces efforts ponctuels n'est pas rigoureusement nulle ($\sum_{\alpha}^{N_c} \vec{F}_{conf}^{\alpha} \neq \vec{0}$, avec N_c le nombre de fragments élémentaires). Cet assemblage étant composé de corps rigides, la moindre force appliquée aura pour effet d'engendrer une accélération et donc un mouvement de corps rigide de l'assemblage. Ce mouvement de corps doit être supprimé car les normales dans l'équation (2.62) sont déterminées dans la configuration initiale et ne sont pas ré-actualisées au cours du calcul. Pour corriger cela, un des granulats situés sur l'axe central de la pastille est encastré (voir figure 2.5). Enfin, la pastille repose sur appui-plan qui représente le creuset du four.

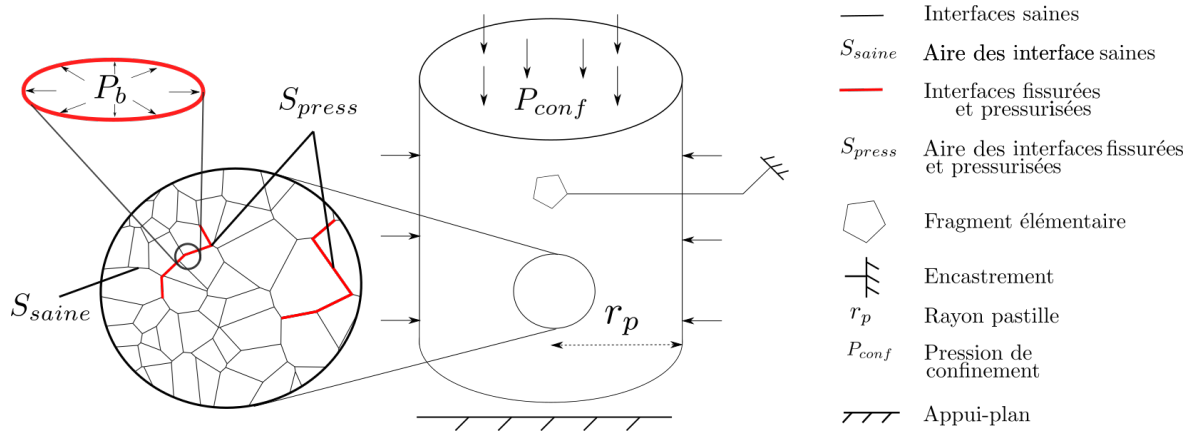


FIGURE 2.5 – Représentation des chargements et des conditions limites appliquées à la pastille.

2.2.2 Définition du domaine paramétrique de l'étude

Cette section présente le domaine paramétrique d'étude. Dans le cadre de cette étude, la zone de rim est exclue de l'analyse, seuls les paramètres représentatifs de la zone saine sont retenus.

Les différents paramètres du modèle sont les suivants :

4. Les surfaces sont dites libres si elles ne présentent aucune liaison cohésive

2.2. Étude paramétrique de la modélisation du comportement à rupture du combustible par la méthode DEM-CZM

Les paramètres géométriques : la taille des fragments élémentaires r_{fe} (i.e. diamètre moyen d'une sphère de même volume), qui est quasiment uniforme⁵ dans l'ensemble de la pastille et vaut environ 1 mm.

Les propriétés à rupture :

- La contrainte cohésive maximale R_{max} , dont la valeur est définie par la suite.
- Le taux de restitution critique G_c , dont la valeur est également définie par la suite.

Les propriétés post-rupture : le coefficient de frottement entre les granulats μ_f . Ce coefficient est difficilement mesurable expérimentalement, sa valeur est donc arbitrairement imposée à 0.3.

Le paramètre microstructural f_s^* : la fraction surfacique de zones cohésives rompues et pressurisées f_s^* (assimilée à la fraction surfacique de bulles intergranulaires au joint de grains), définie comme :

$$f_s^* = \frac{S_{press}}{S_{press} + S_{saine}} \quad (2.63)$$

où S_{press} est la somme des aires des surfaces initialement rompues et pressurisées et S_{saine} est la somme des aires des surfaces initialement non-endommagées (voir figure 2.5). La distribution spatiale de ces zones cohésives rompues est aléatoire dans le combustible. Pour ce faire, la liste des liaisons est parcourue et pour chacune d'entre elles, une fonction booléenne est évaluée. Cette fonction vaut 0 ou 1 lorsque la liaison est définie comme étant respectivement intacte ou rompue. Cette fonction suit une loi de probabilité uniforme continue dont la densité est égale à la valeur de f_s^* .

Cette méthode de définition des zones cohésives initialement rompues et pressurisées est appliquée systématiquement au début des simulations réalisées. Ainsi, la distribution spatiale aléatoire de ces zones cohésives est différente pour chaque calcul.

Le chargement imposé par les gaz de fission : la pression dans les zones cohésives qui intervient dans l'équation (2.20), qui est ici assimilée à la sur-pression des bulles intergranulaires : $P_{eff}^{czm} = P^{inter} - P_{\gamma}^{inter}$ avec P^{inter} la pression des bulles intergranulaires et P_{γ}^{inter} la tension de surface (qui est faible devant la pression, cf. section 1.4.3.3).

Le chargement externe : la pression de confinement appliquée sur les surfaces libres de la pastille P_{conf} , qui vaut 0.1 MPa (pression atmosphérique) ou 10 MPa (pression supposée garantir maintien de l'intégrité du combustible).

Les paramètres dont l'influence est étudiée dans cette partie sont la propriété à rupture R_{max} , la fraction surfacique de bulles f_s^* et la sur-pression appliquée par les bulles intergranulaires P_{eff}^{czm} .

Concernant les propriétés à rupture, différentes mesures ont été réalisées afin de déterminer les valeurs du taux de restitution critique G_c sur des combustibles UO_2 . Les résultats des mesures sont reportés dans le tableau 2.1 :

5. Avec la méthode de génération des fragments élémentaires retenues (voir annexe C.4) la distribution de taille des fragments est légèrement dispersée autour d'une valeur moyenne.

2.2. Étude paramétrique de la modélisation du comportement à rupture du combustible par la méthode DEM-CZM

Auteurs	G_c (en $J.m^{-2}$)
Kutty et al. [75]	[4.7 – 8.7]
Gong et al. [52]	[3.9 – 62]
Gatt et al. [49]	[6 – 10]
Henry et al. [60]	[0.6 – 13.9] ⁶

TABLE 2.1 – Résumé des mesures du taux de restitution critique du combustible UO_2 .

Les mesures de Kutty et al. [75] et Gong et al. [52] ne concernent que le combustible vierge, or, comme le suggèrent les mesures sur combustibles irradiés de Gatt et al. [49], le taux de restitution critique du matériau devrait diminuer avec le taux de combustion. Nous souhaitons représenter le comportement d'un combustible à fort taux de combustion. Par conséquent, la valeur de G_c retenue pour les simulations est de $5 J.m^{-2}$, ce qui correspond aux valeurs basses des mesures. Il est à noter que l'influence de l'irradiation sur G_c n'est pas clairement établie, des études ont été initiées dans le cas de l' UO_2 dopé chrome et sont en cours pour l' UO_2 standard (non-dopé) [60].

Les mesures mettent également en évidence un effet d'échelle important concernant la mesure de la contrainte à rupture R_{max} . En effet, les mesures de flexion sur des éprouvettes d' UO_2 irradié permettent de mesurer des contraintes à rupture :

- comprises entre 60 et 140 MPa lorsque la taille de l'éprouvette est de l'ordre de la dizaine de mm (mesures macroscopiques) [49],
- d'environ 3 GPa pour des micro-éprouvettes dont la longueur est de l'ordre de la dizaine de μm (mesures microscopiques) [60].

Dans le cadre de nos travaux, la taille caractéristique des fragments (1 mm) amène à retenir les valeurs obtenues par mesures macroscopiques. L'influence de la contrainte à rupture est donc étudiée sur un intervalle de 50 à 150 MPa , intervalle légèrement plus étendu que celui mesuré.

Concernant les paramètres relatifs au chargement des bulles intergranulaires, la fraction surfacique de bulles au joint de grains f_s^* et la sur-pression de ces cavités P_{eff}^{czm} sont déterminées à partir des résultats de simulation de l'irradiation de base présentée en section 1.4.3.3. Les résultats de calculs de l'évolution radiale de la fraction surfacique de bulles⁷ et de la sur-pression (calculées à partir de l'équation d'état d'ALCYONE) sont reportées figure 2.6 et 2.7⁸ respectivement.

6. Cette étude se focalise sur le comportement à rupture de la zone saine du combustible, c'est pourquoi les mesures réalisées dans le rim ne sont pas retenues.

7. La valeur de la fraction surfacique réduite est reportée, i.e., la valeur de cette fraction en prenant en compte l'ensemble des défauts présent au joint de grains (fissure, porosité de fabrication, etc.).

8. Les résultats de calcul exploités ici ont été obtenus avec une version d'ALCYONE différente de l'étude présentée au chapitre 1. C'est pourquoi les résultats de la figure 2.7 diffère de ce reportés figures 1.52 et 1.53.

2.2. Étude paramétrique de la modélisation du comportement à rupture du combustible par la méthode DEM-CZM

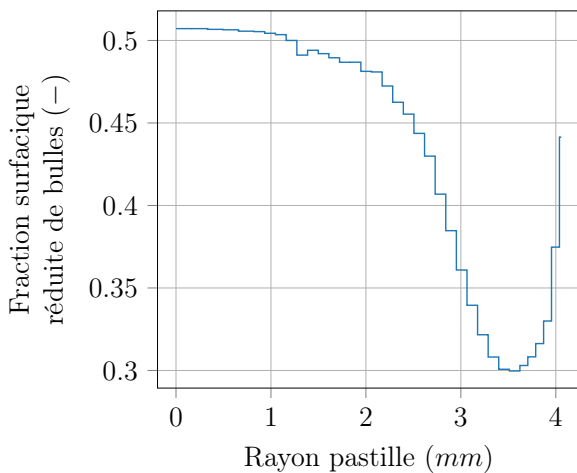


FIGURE 2.6 – Évolution de la fraction surfacique réduite de bulles (sans unité) en fonction du rayon pastille (en mm).

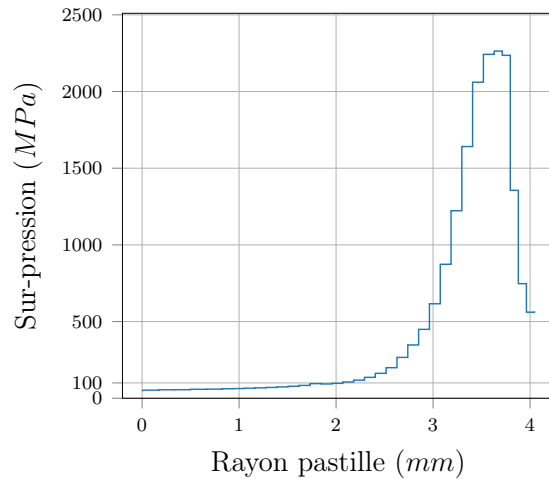


FIGURE 2.7 – Évolution de la sur-pression des bulles intergranulaires (en MPa) à $1473\ K$ en fonction du rayon pastille (en mm).

L'évolution du calcul de ces paramètres amène à distinguer le combustible en trois zones radiales, comme illustré figure 2.8 (sans considérer la zone de rim) :

- La zone centrale (entre 0 et 2 mm), pour laquelle la fraction surfacique de bulles est relativement élevée (entre 0.47 et 0.51) et la sur-pression des bulles intergranulaires est inférieure à la centaine de MPa .
- La partie centrale de la zone intermédiaire (entre 2 et 3.5 mm), pour laquelle la sur-pression des bulles est de l'ordre de plusieurs centaines de MPa (entre 90 et 871 MPa) et la fraction surfacique de bulles évolue entre 0.35 et 0.47.
- La périphérie de la zone intermédiaire (entre 3.5 et 4 mm), pour laquelle la sur-pression des bulles est de l'ordre du GPa et la fraction surfacique est minimale (jusqu'à 0.3).

Comme la tension de surface des bulles est négligeable quelle que soit la zone considérée (cf. section 1.4.3.3), la sur-pression dépend principalement de la pression qui règne dans les cavités. Le calcul de cette pression est en contradiction avec les estimations mixtes (obtenues à partir de la quantité de gaz calculée et de la porosité mesurée). Pour déterminer la pression des bulles intergranulaires avec précision, des mesures supplémentaires sont nécessaires (cf. tableau 1.20).

En revanche, les estimations mixtes et le calcul mettent tous deux en évidence une forte variation de cette pression en fonction de la position radiale (d'un facteur 5 à 10 entre la zone centrale et la zone intermédiaire, cf. figures 1.52 et 1.53). En se basant sur le calcul des pressions, l'influence de l'hétérogénéité du chargement sur l'évolution radiale des paramètres du modèle DEM-CZM va donc être étudié.

2.2. Étude paramétrique de la modélisation du comportement à rupture du combustible par la méthode DEM-CZM

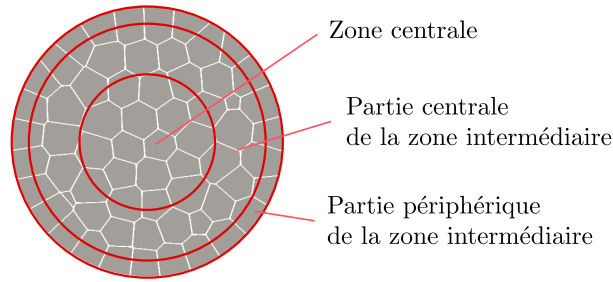


FIGURE 2.8 – Illustration des différentes zones en fonction de la taille des granulats (vue du dessus de la pastille).

Chacune des trois zones du combustible est traitée indépendamment sur un échantillon numérique représentatif de la zone considérée (les propriétés et le chargement identifiés dans la zone sont homogènes dans l'échantillon). Ces échantillons ont les mêmes dimensions et une taille de granulat identique quelle que soit l'épaisseur de la zone. Le comportement à rupture est donc supposé être indépendant de la taille des granulats et de l'échantillon.

Pour cette étude, la sur-pression des bulles intergranulaires est évaluée à la température à laquelle le combustible est censé se fragmenter. Cette température seuil est définie à un encadrement près, car sa valeur n'est pas connue avec précision expérimentalement. Capps et al. [25] mettent en évidence un seuil de fragmentation à 1073 K , seuil qui définit la valeur inférieure de l'encadrement. La valeur supérieure est définie comme étant la température maximale atteinte par le combustible en situation d'APRP, soit 1473 K . L'encadrement de la température permet de définir des bornes basses et hautes de la sur-pression des bulles (notées P_{min}^{czm} et P_{max}^{czm} respectivement), bornes qui sont reportées dans le tableau 2.2.

La fraction surfacique de bulles au joint de grains n'a pas été mesurée expérimentalement (cf. section 1.4.3.4), l'encadrement de cette valeur est donc défini à partir du calcul. Afin de pouvoir représenter le maintien de l'intégrité du combustible pour une pression de confinement de 10 MPa avec le modèle DEM-CZM, il est apparu nécessaire d'appliquer la pression des bulles intergranulaires sur une fraction surfacique de moins de 50 % (valeur calculée en zone centrale, voir figure 2.6). Des valeurs de f_s^* plus faible que celles calculées ont donc dues être retenues. Ces fractions surfaciques ont été choisies de manière à représenter qualitativement les résultats de simulation, à savoir, une fraction surfacique de bulles plus élevée au centre qu'en périphérie du combustible. Ainsi, les bornes retenues pour f_s^* sont de 0.1 et 0.4 en zone centrale et dans la partie centrale de la zone intermédiaire et de 0.01 et 0.04 dans la partie périphérique de la zone intermédiaire.

La fraction surfacique et la sur-pression des bulles (calculée par l'équation (1.50)) sont considérées homogènes par zone. Ce sont donc les valeurs moyennes qui sont retenues. Les valeurs des sur-pressions, des fractions surfaciques des bulles et des propriétés à rupture retenues pour l'étude sont reportées dans le tableau 2.2.

2.2. Étude paramétrique de la modélisation du comportement à rupture du combustible par la méthode DEM-CZM

Zone considérée	$\langle V_m \rangle$ ($cm^3.mol^{-1}$)	P_γ^{inter} ⁹ (MPa)	P_{czm}^{min} (MPa)	P_{czm}^{max} (MPa)	f_s^* (-)	R_{max} (MPa)	G_c ($J.m^{-2}$)
Zone centrale	173	2	52	77	[0.1-0.4]	[50 – 150]	5
Partie centrale de la zone intermédiaire	91	6	164	242	[0.1-0.4]		
Partie périphérique de la zone intermédiaire	41	11	1047	1330	[0.01-0.04]		

TABLE 2.2 – Résumé des valeurs des paramètres retenues pour l'étude paramétrique du modèle DEM-CZM.

Connaissant le domaine d'étude, nous cherchons désormais à déterminer précisément les paramètres permettant de représenter le comportement à rupture des différentes zones du combustible au sens défini par la proposition 2.2.1.

2.2.3 Étude paramétrique du modèle DEM-CZM à partir des simulations de recuit thermique

2.2.3.1 Méthodologie retenue pour déterminer les paramètres représentatifs de chacune des zones du combustible

Comme les propriétés du combustible sont hétérogènes à l'échelle de la pastille, les paramètres sont identifiés zone par zone. Pour ce faire, la proposition 2.2.1 est supposée être applicable indépendamment à chacune de ces zones. Ainsi, les paramètres du modèle sont déterminés de manière à représenter le maintien de l'intégrité de la zone considérée pour une pression de confinement de 10 MPa et la fragmentation à pression atmosphérique. Pour cela, le comportement à rupture du combustible en transitoire est simulé avec le modèle DEM-CZM sur un échantillon numérique de la pastille.

Cet échantillon illustré figure 2.9 est une carotte de la pastille dont le rayon est de 2 mm . Pour cette étude, il est supposé que la géométrie de l'échantillon n'a pas d'influence sur le comportement à rupture du combustible. C'est pourquoi les simulations sont réalisées sur le même échantillon quelle que soit la zone considérée.

Chaque calcul réalisé sur cet échantillon dure environ 50 heures.

9. La tension de surface calculée est retenue ici, mais notons que cette valeur est faible devant la pression quelle que soit l'estimation retenue (calcul ou mesure), cf. section 1.4.3.3.

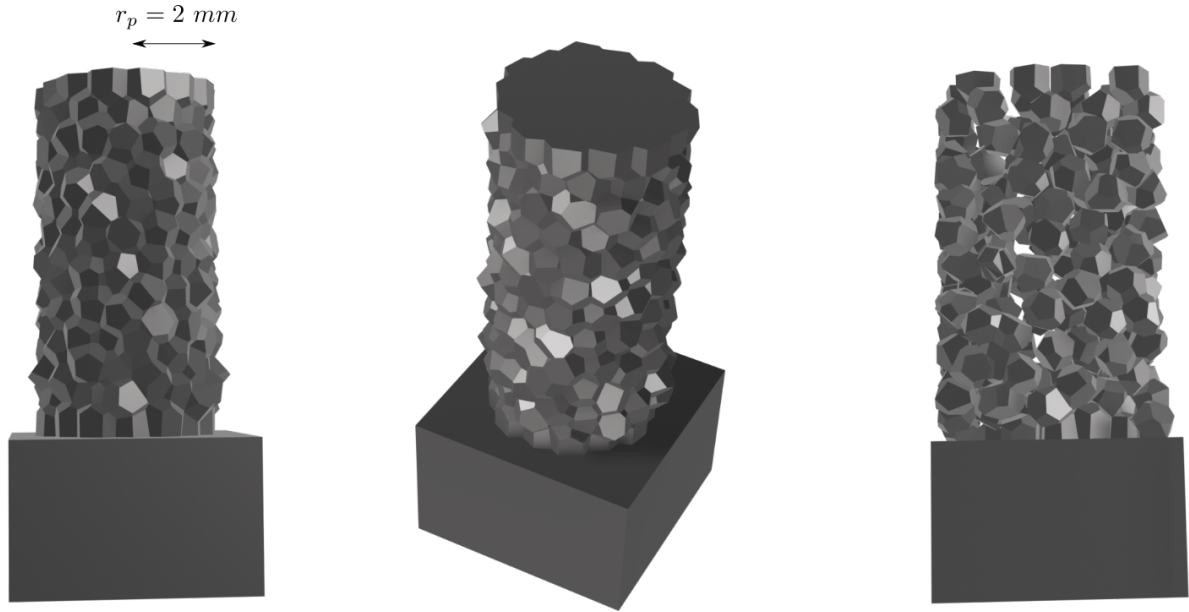


FIGURE 2.9 – Représentation de l'échantillon de combustible non-endommagée de face (à gauche) et de dessus (au centre) et de l'échantillon fragmenté (à droite) dans le modèle DEM-CZM.

Dans ces simulations, la fragmentation du combustible intervient lorsque la sur-pression appliquée dans les zones cohésives représentant les bulles intergranulaires (initialement à $\beta = 0$ et $P_{eff}^{czm} \neq 0$) est suffisante pour rompre les liaisons des interfaces voisines. Or, dans le modèle, le travail fourni par la pression des bulles est sur-évalué dès lors que la fissuration est amorcée et ce pour les raisons suivantes :

- L'évolution de la sur-pression appliquée par les bulles est basée sur une hypothèse de réservoir infini. Par conséquent, cette sur-pression est constante en fonction du saut de déplacement calculé dans les zones cohésives rompues. Or, l'écartement des surfaces induit une augmentation du volume occupé par le gaz et devrait donc engendrer une diminution de la pression.
- Une fois que les interfaces initialement saines sont rompues, la sur-pression des bulles s'applique sur les surfaces nouvellement fissurées d'après l'expression (2.21). Par conséquent, l'intensité du chargement appliqué par les gaz de fission augmente en fonction de l'avancée de la fissuration.
- Les fragments élémentaires sont indéformables, ce qui implique que le travail fourni par la pression ne peut pas être transformé en énergie élastique dans ce cas.

Par conséquent, comme l'énergie surfacique nécessaire pour rompre ces surfaces (G_c) est spatialement homogène, si l'énergie apportée par la sur-pression est suffisante pour rompre une interface, alors la totalité des interfaces sont rompues. La réponse du modèle au chargement appliqué est donc essentiellement binaire : soit la pastille est intègre à la fin du chargement, soit la pastille est complètement fragmentée, comme illustré figure 2.9.

Cette sur-évaluation du travail fourni par la pression implique également que le modèle ne permet de décrire que l'amorce de la fissuration car le comportement post-rupture sur-

2.2. Étude paramétrique de la modélisation du comportement à rupture du combustible par la méthode DEM-CZM

prédit le chargement. Par conséquent, dans le modèle le jeu de paramètres à retenir pour représenter le maintien de l'intégrité de la pastille pour une pression de confinement de 10 MPa est obtenue par une approche conservative.

Par la suite, les résultats des simulations des recuits de la zone centrale sont présentés.

2.2.3.2 Identification des paramètres représentatifs de la zone centrale

Tout d'abord, une série de simulations est réalisée à $P_{conf} = 10 \text{ MPa}$, afin de déterminer s'il existe un ensemble de paramètres appartenant au domaine défini en section 2.2.2, qui permette de représenter le comportement attendu (maintien de l'intégrité du combustible à l'issue du chargement). Pour ces calculs, une combinaison des bornes hautes et basses des paramètres est utilisée et la sur-pression des bulles est représentative de la zone centrale ($P_{eff}^{czm} = 52 \text{ MPa}$ ou 77 MPa).

Les résultats des différents calculs en fonction du triplet de paramètres (f_s^* , R_{max} , P_{eff}^{czm}) sont représentés sur la figure 2.10, sur laquelle chaque point de couleur désigne un calcul. Les points verts représentent les calculs pour lesquelles la pastille est restée intègre et les points rouges ceux pour lesquelles le combustible s'est totalement fragmenté.

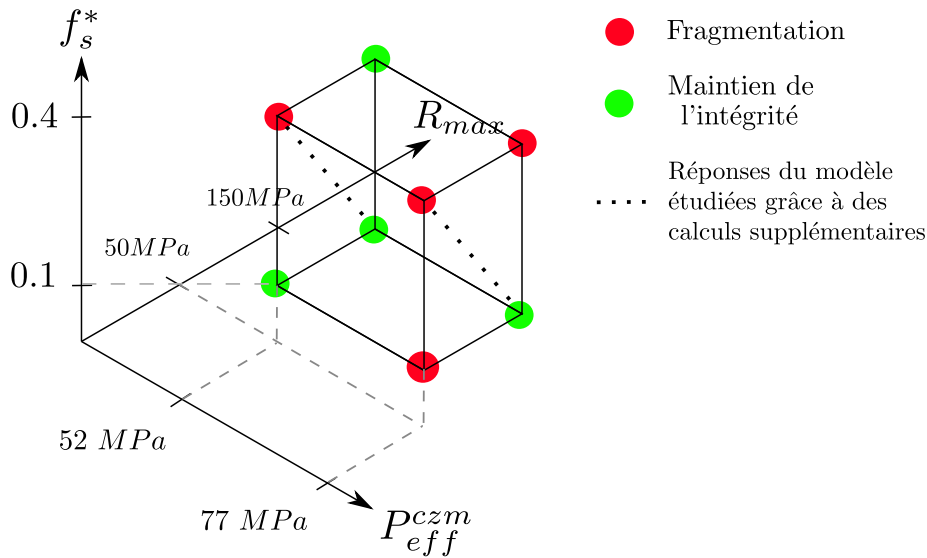


FIGURE 2.10 – Représentation des résultats des simulations des recuits à $P_{conf} = 10 \text{ MPa}$ réalisées avec les bornes des paramètres.

D'après ces résultats, le domaine paramétrique est suffisamment étendu pour qu'il existe des triplets (f_s^* , R_{max} , P_{eff}^{czm}) pour lesquels le comportement observé expérimentalement est reproduit (maintien de l'intégrité) et des triplets pour lesquels ce comportement n'est pas reproduit (fragmentation). Par exemple, si R_{max} est égal à 50 MPa et f_s^* est égal à 0.1, une sur-pression des bulles intergranulaires inférieure à 52 MPa conduit à une pastille intègre. La fragmentation intervient en revanche si cette sur-pression atteint et/ou dépasse les 77 MPa (voir les pointillés gris sur la figure 2.10). Cela conforte donc les choix réalisés afin de définir les bornes des paramètres.

2.2. Étude paramétrique de la modélisation du comportement à rupture du combustible par la méthode DEM-CZM

L'analyse doit maintenant être affinée afin de déterminer avec précision les paramètres permettant de vérifier la proposition 2.2.1. Pour ce faire, deux séries de simulations sont réalisées, à $P_{conf} = 10 \text{ MPa}$ et $P_{conf} = 0.1 \text{ MPa}$ respectivement. Pour ces deux séries de calculs, la fraction surfacique de bulles et la contrainte maximale des zones cohésives varient d'un calcul à l'autre et la sur-pression des bulles reste la même (voir les droites en pointillés sur la figure 2.10).

Pour une sur-pression de 52 MPa (à une température de 1073 K), les résultats des simulations réalisées à $P_{conf} = 10 \text{ MPa}$ et $P_{conf} = 0.1 \text{ MPa}$ sont représentés respectivement sur les figures 2.11.a et 2.11.b, pour une contrainte à rupture et une fraction surfacique de bulles données. Comme précédemment, les points verts représentent les cas pour lesquels le combustible est intact à l'issue du chargement et les points rouges les cas où la pastille s'est fragmentée.

2.2. Étude paramétrique de la modélisation du comportement à rupture du combustible par la méthode DEM-CZM

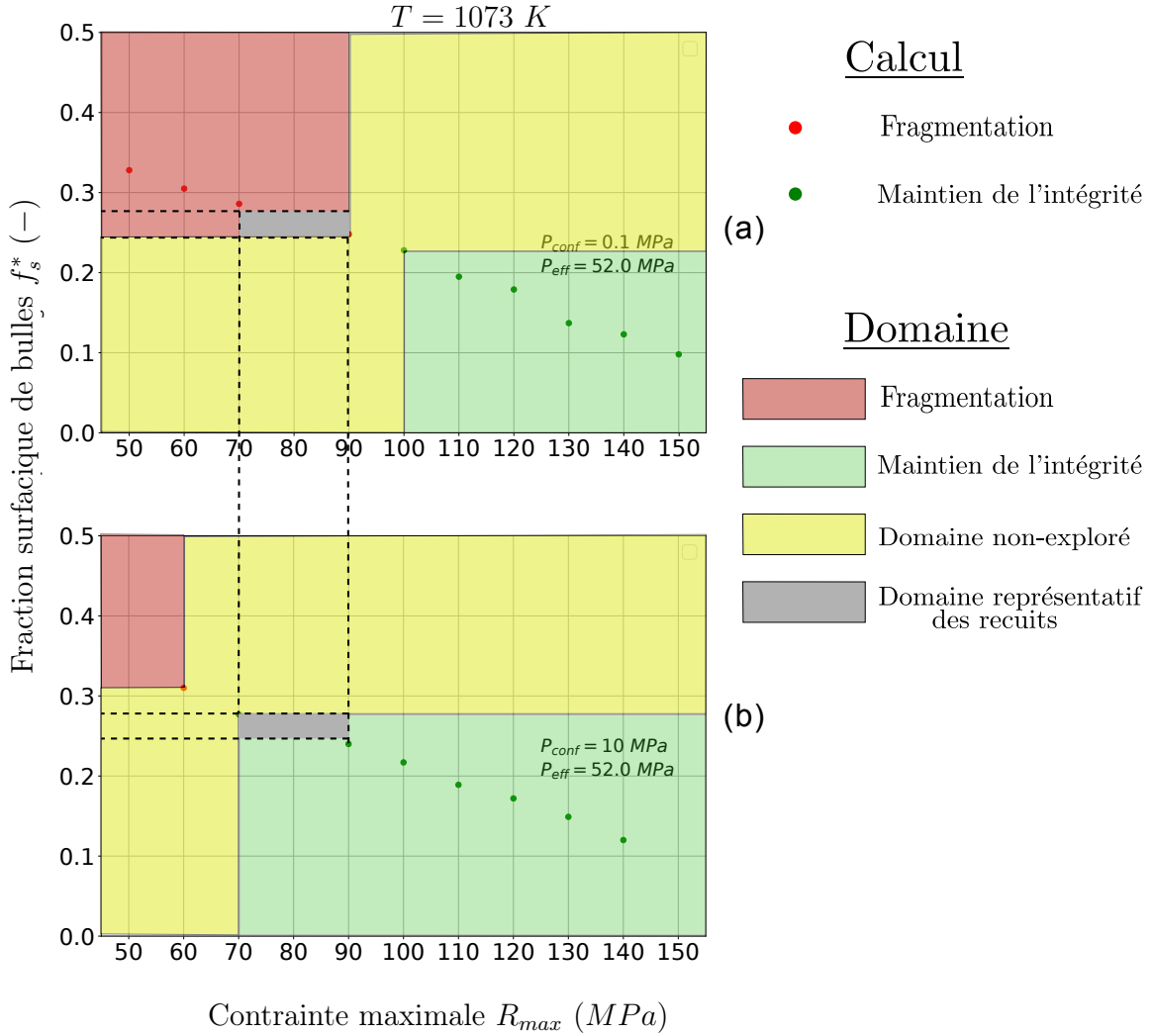


FIGURE 2.11 – Graphes représentant les résultats de simulation des recuits thermiques à $P_{conf} = 0.1 MPa$ (a) et $P_{conf} = 10 MPa$ (b) avec une sur-pression des bulles intergranulaires de $52 MPa$ représentative de la zone centrale à $1073 K$.

D'après ces résultats, il est clair qu'une simulation pour laquelle le combustible est resté intègre (ou s'est fragmenté) aurait reproduit le même comportement si la contrainte maximale avait été plus élevée (resp. plus faible) et/ou si la fraction surfacique de bulles avait été plus faible (resp. plus élevée). C'est pourquoi les couples (f_s^*, R_{max}) appartenant au domaine désigné par la zone verte (resp. rouge) sur la figure 2.11 définissent l'ensemble des valeurs pour lesquelles la pastille devrait a priori rester intacte (resp. se fragmenter) à l'issue du chargement.

L'intersection du domaine pour lequel la pastille se fragmente pour $P_{conf} = 0.1 MPa$ (zone rouge sur la figure 2.11 a) et du domaine pour lequel la pastille reste intacte pour $P_{conf} = 10 MPa$ (zone verte sur la figure 2.11 b) définit l'ensemble des paramètres pour lesquels le modèle vérifie la proposition 2.2.1 (zone grise). Par conséquent, à $1073 K$, les paramètres pour lesquels le modèle représente le comportement à rupture de la zone centrale du combustible, appartiennent aux intervalles suivants :

- $f_s^* \in [0.25, 0.28]$

2.2. Étude paramétrique de la modélisation du comportement à rupture du combustible par la méthode DEM-CZM

— $R_{max} \in [70, 90] \text{ MPa}$

La même démarche est appliquée pour une sur-pression des bulles de 77 MPa (à une température de 1473 K). Les résultats des simulations des recuits réalisés à $P_{conf} = 0.1 \text{ MPa}$ et $P_{conf} = 10 \text{ MPa}$ sont illustrés sur les figures 2.12.a et 2.12.b respectivement.

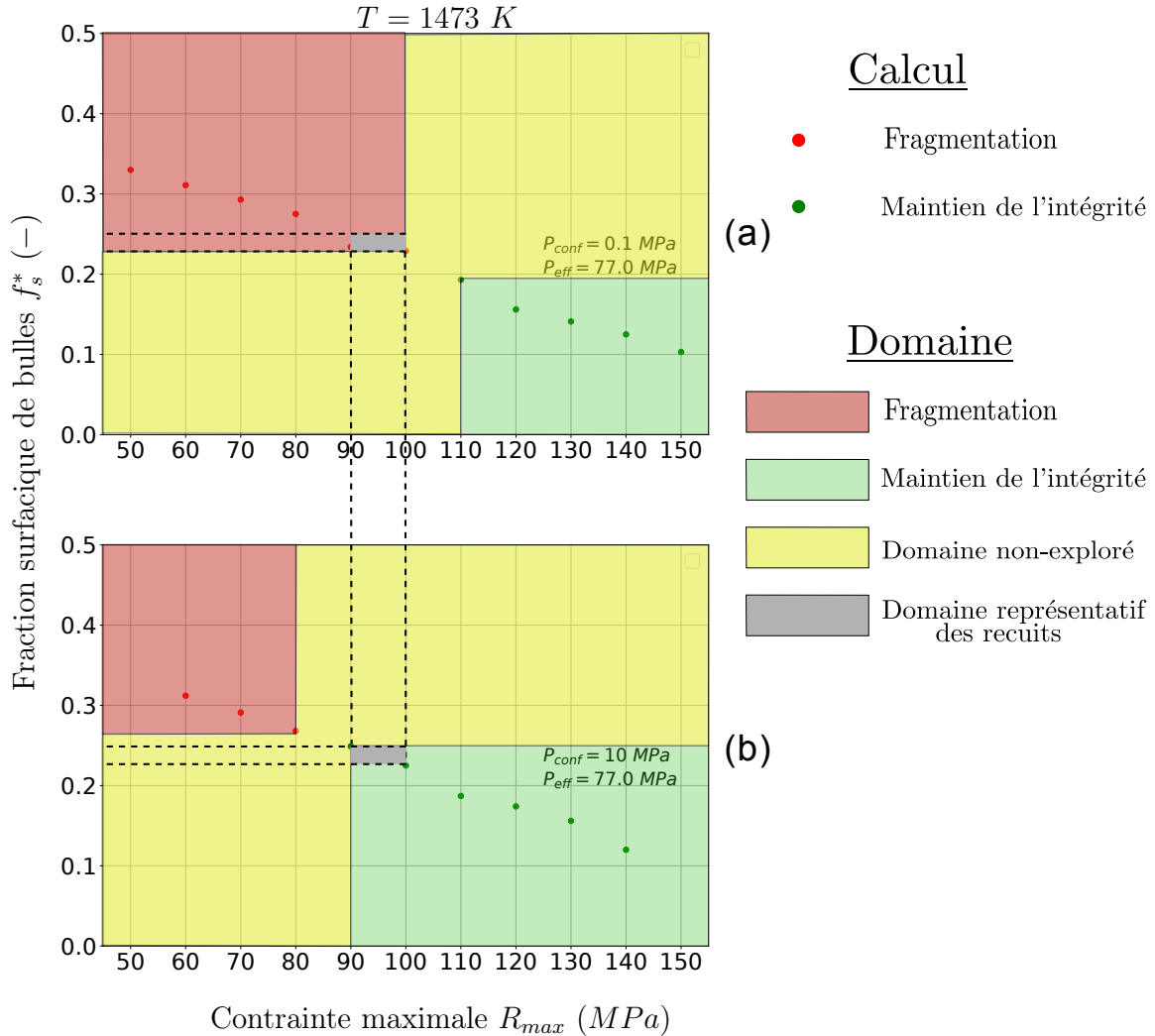


FIGURE 2.12 – Graphes représentant les résultats de simulation des recuits thermiques à $P_{conf} = 0.1 \text{ MPa}$ (a) et $P_{conf} = 10 \text{ MPa}$ (b) avec une sur-pression des bulles intergranulaires de 77 MPa représentative de la zone centrale à 1473 K .

D'après ces résultats, les paramètres pour lesquels le modèle représente le comportement à rupture de la zone centrale (voir zone grise sur la figure 2.12), lorsque celle-ci se fragmente à 1473 K , appartiennent aux intervalles suivants :

- $f_s^* \in [0.23, 0.25]$
- $R_{max} \in [90, 100] \text{ MPa}$

D'après l'ensemble des résultats obtenus pour la zone centrale, l'intersection des intervalles obtenus pour R_{max} et f_s^* à 1073 K et 1473 K définit le couple (f_s^*, R_{max}) permettant de vé-

2.2. Étude paramétrique de la modélisation du comportement à rupture du combustible par la méthode DEM-CZM

référer la proposition 2.2.1 lorsque la fragmentation du combustible intervient entre ces deux températures, à savoir :

- $f_s^* = 0.25$
- $R_{max} = 90 \text{ MPa}$.

2.2.3.3 Identification des paramètres représentatifs de la partie centrale de la zone intermédiaire

La même analyse est réalisée sur un échantillon identique (cf. section 2.2.3.1) afin d'identifier les paramètres de la partie centrale de la zone intermédiaire (pour un rayon pastille compris entre 2 et 3.5 mm, cf. figure 2.8). Pour ce faire, comme précédemment, des simulations des recuits à $P_{conf} = 10 \text{ MPa}$ sont réalisées à une sur-pression donnée et pour différentes valeurs de fraction surfacique de bulles et de contrainte à rupture.

Les résultats des simulations réalisées à une sur-pression de 164 MPa et 242 MPa (soit une température de 1073 K et 1473 K respectivement) sont reportés sur la figure 2.13 à gauche et à droite respectivement. D'après ces figures, les paramètres permettant de représenter le comportement de la pastille à $P_{conf} = 10 \text{ MPa}$ (zone verte) sont compris sur les intervalles suivants à 1073 K :

- $f_s^* \in]0, 0.12]$
- $R_{max} \in [140, 150] \text{ MPa}$

et sur les intervalles suivants à 1473 K :

- $f_s^* \in]0, 0.09]$
- $R_{max} \geq 150 \text{ MPa}$

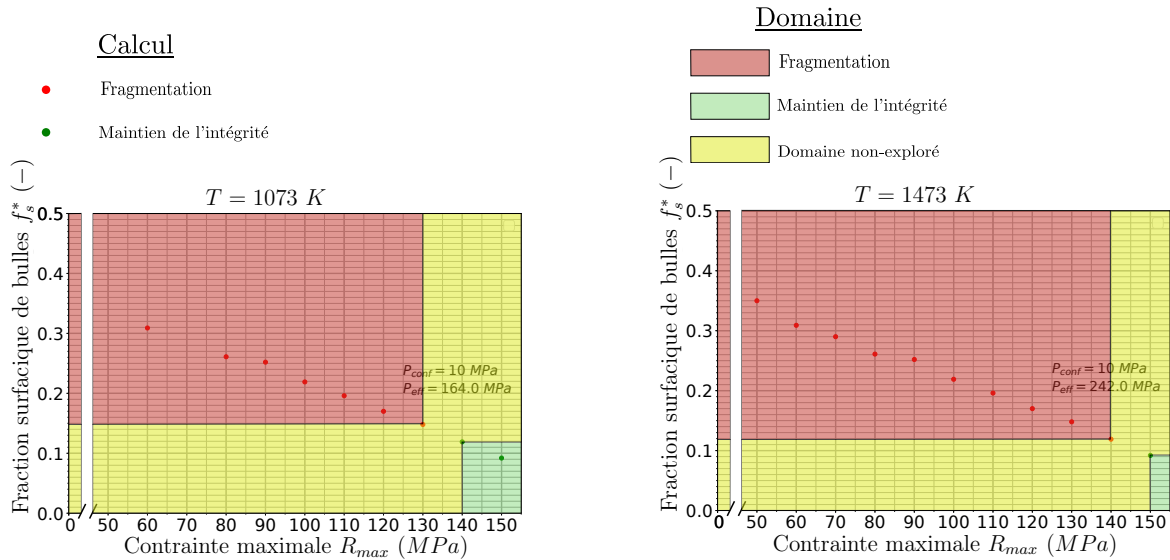


FIGURE 2.13 – Graphes représentant les résultats de simulation des recuits thermiques à $P_{conf} = 10 \text{ MPa}$ avec une sur-pression des bulles intergranulaires de 164 MPa (à gauche) 242 MPa (à droite) représentative de la zone intermédiaire à 1073 K (à gauche) 1473 K (à droite).

2.2. Étude paramétrique de la modélisation du comportement à rupture du combustible par la méthode DEM-CZM

Afin de consolider l'identification des paramètres permettant de vérifier la proposition 2.2.1, cette étude pourrait être prolongée avec des simulations à $P_{conf} = 0.1 \text{ MPa}$.

D'après ces résultats, la contrainte à rupture à retenir dans le modèle afin de représenter le maintien de l'intégrité de la partie centrale de la zone intermédiaire entre 1073 et 1473 K à $P_{conf} = 10 \text{ MPa}$ est de 150 MPa (intersection des intervalles déterminés pour R_{max} aux deux températures). Les résultats de simulation suggèrent donc que la contrainte à rupture est plus élevée en zone intermédiaire qu'en zone centrale (90 MPa, cf. section 2.2.3.2). Ce résultat a été obtenu sans considérer l'influence du taux de restitution critique. Afin de déterminer l'évolution radiale des propriétés à rupture dans le modèle (R_{max} et G_c), une analyse paramétrique en encadrant la valeur de G_c est nécessaire.

2.2.3.4 Identification des paramètres représentatifs de périphérie de la zone intermédiaire

Comme nous l'avons vu, la sur-pression calculée dans les bulles intergranulaires est très élevée en périphérie de la zone intermédiaire (de l'ordre du GPa, pour un rayon pastille supérieur à 3.5 mm, cf. figure 2.8). Afin de déterminer si le modèle permet de représenter le comportement à rupture d'une zone soumise à un chargement aussi intense, des simulations de recuit à $P_{conf} = 10 \text{ MPa}$ sont réalisées avec une sur-pression de bulle de 1.33 GPa (1473 K) et pour différentes valeurs de fraction surfacique de bulles et de contrainte à rupture sur le même échantillon (cf. section 2.2.3.1).

D'après les résultats représentés sur figure 2.14, le combustible se fragmente systématiquement dans ces conditions, et ce malgré les très faibles valeurs de fraction surfacique retenues dans cette zone (moins de 4 %, cf. tableau 2.2). Si l'hypothèse émise pour établir la proposition 2.2.1 est conservée (maintien de l'intégrité de chaque zone du combustible lorsque $P_{conf} = 10 \text{ MPa}$) alors le chargement appliqué par les gaz de fission est surestimé et/ou que la contrainte à rupture est sous-estimée.

Concernant le chargement, la comparaison entre le calcul et les estimations mixtes suggère que la pression calculée dans cette zone est fortement surestimée (cf. tableau 1.18). Afin de statuer sur ce point, des mesures supplémentaires ont été identifiées (voir perspectives identifiées pour P^{inter} au tableau 1.20), mesures qui permettront de déterminer plus précisément la pression. Les simulations dans cette zone pourraient donc être reprises en prenant en compte l'apport de ces mesures. Ces calculs permettraient alors de vérifier que la contrainte à rupture à retenir dans ce cas¹⁰ appartient en effet au domaine paramétrique (i.e. aux mesures macroscopiques de R_{max} de l'ordre de la centaine de MPa, voir section 2.2.2). Dans le cas contraire, les mesures microscopiques de R_{max} (environ 3 GPa) devront être retenues pour modéliser le comportement à rupture de cette zone.

La fragmentation systématique du combustible est également due à la sur-évaluation du chargement par le modèle (hypothèse de réservoir de gaz infini et augmentation du chargement avec la fissuration, cf. section 2.2.3.1). À cause de cette sur-évaluation, le modèle

10. Pour modéliser le maintien de l'intégrité du combustible en périphérie de la zone intermédiaire lorsque $P_{conf} = 10 \text{ MPa}$.

2.2. Étude paramétrique de la modélisation du comportement à rupture du combustible par la méthode DEM-CZM

ne représente que l'amorce de la fissuration. Afin de palier cela, une diminution de la pression post-rupture en fonction du saut de déplacement et le calcul du relâchement des gaz de fission pourraient être introduits dans la modélisation. Ces améliorations permettraient alors de distinguer l'amorce de la fissuration de la fragmentation du combustible dans la simulation.

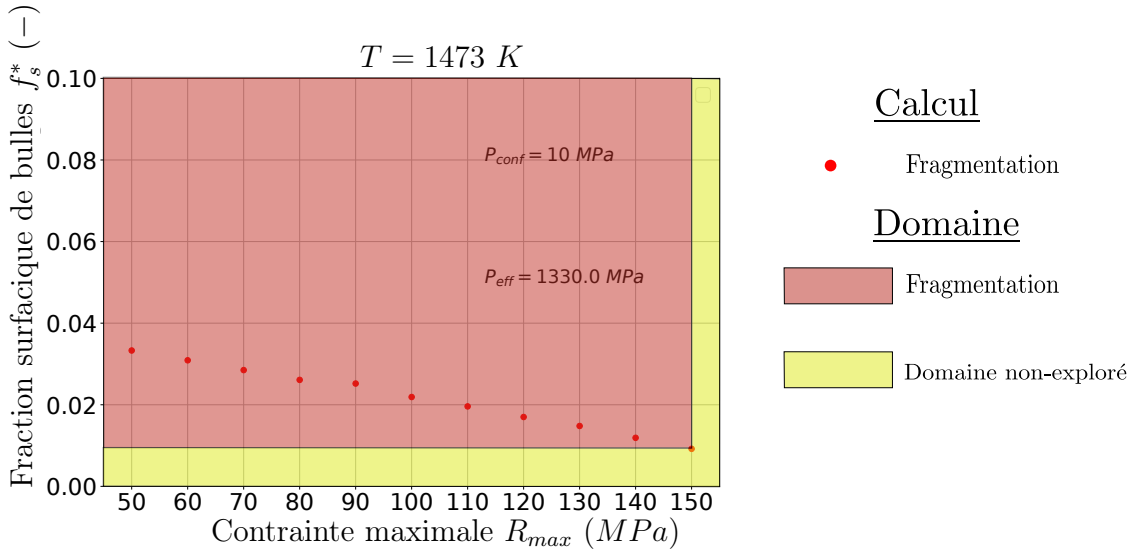


FIGURE 2.14 – Graphes représentant les résultats de simulation des recuits thermiques réalisés à $P_{conf} = 10 \text{ MPa}$ avec une sur-pression des bulles intergranulaires de 1330 MPa représentative de la périphérie de la zone intermédiaire à 1473 K .

Notons que, puisque le modèle représente systématiquement la fragmentation de la périphérie lorsque $P_{conf} = 10 \text{ MPa}$, le même comportement est attendu pour $P_{conf} = 0.1 \text{ MPa}$.

2.2.3.5 Etude du comportement à rupture sur la pastille entière

Enfin, connaissant la réponse du modèle en fonction des paramètres retenus dans chacune des zones du combustible, le comportement à rupture de l'ensemble de la pastille (à l'exception de la zone de rim) est déterminé. En particulier, nous cherchons à déterminer l'influence d'une variation radiale des paramètres sur la fragmentation de la pastille. Pour cela, deux simulations de recuits thermiques sont réalisées à 1073 K sur la géométrie de la pastille entière ($r_p = 4 \text{ mm}$) avec des propriétés différentes au centre (à un rayon pastille compris entre 0 et 2 mm) et en périphérie (à un rayon pastille compris entre 2 et 4 mm).

Comme les paramètres permettant de modéliser le maintien de l'intégrité de la périphérie de la zone intermédiaire n'ont pas été identifiés, cette zone n'est pas prise en compte pour cette étude. Pour ces calculs, les paramètres retenus sont les suivants : Pour ces calculs, les choix retenus pour déterminer les paramètres sont les suivants :

- La sur-pression des bulles intergranulaires est déterminée à 1073 K , soit une sur-pression P_{eff}^{czm} de 52 MPa en zone centrale et de 164 MPa en zone intermédiaire.
- La contrainte à rupture est identique dans les deux zones et vaut $R_{max} = 70 \text{ MPa}$.

2.2. Étude paramétrique de la modélisation du comportement à rupture du combustible par la méthode DEM-CZM

- La fraction surfacique de bulles en zone centrale est choisie de manière à ce que le comportement de la pastille respecte la proposition 2.2.1 (fragmentation lorsque $P_{conf} = 0.1 \text{ MPa}$ et maintien de l'intégrité pour $P_{conf} = 10 \text{ MPa}$). La valeur retenue dans cette zone est de $f_s^* = 0.27$. Pour cette valeur, il est possible de vérifier que le couple (f_s^*, R_{max}) appartient effectivement au domaine permettant de respecter la proposition 2.2.1 (zone grise sur la figure 2.11).
- La fraction surfacique de bulles en zone intermédiaire est choisie de manière à ce que la fragmentation intervienne dans cette zone quelle que soit la pression de confinement imposée. La valeur retenue dans cette zone est de $f_s^* = 0.22$. Comme précédemment, il est possible de vérifier que le couple (f_s^*, R_{max}) appartient effectivement au domaine pour lequel la zone intermédiaire se fragmente pour $P_{conf} = 0.1 \text{ MPa}$ et 10 MPa (zone rouge sur la figure 2.13 à gauche).

Les calculs sont réalisés dans les conditions suivantes :

1. À la pression de confinement atmosphérique ($P_{conf} = 0.1 \text{ MPa}$). Dans ces conditions, le modèle devrait prédire une fragmentation dans la totalité de la pastille, zone centrale et intermédiaire.
2. À une pression de confinement de 10 MPa . Avec les paramètres retenus, le modèle devrait prédire une fragmentation en zone intermédiaire et un maintien de l'intégrité en zone centrale.

Les résultats de ces calculs sont résumés dans le tableau suivant :

n°	f_s^* en zone centrale	f_s^* en zone intermédiaire	R_{max} (MPa)	P_{eff}^{czm} en zone centrale (MPa)	P_{eff}^{czm} en zone intermédiaire (MPa)	P_{conf} (MPa)	Etat de la pastille
1	0.27	0.224	70	52	164	0.1	Fragmentation totale
2	0.27	0.224	70	52	164	10	Fragmentation totale

TABLE 2.3 – Résumé des paramètres d'entrées et des résultats des simulations des traitements thermique sur pastille entière à 1073 K .

Comme attendu, lors du calcul n°1 ($P_{conf} = 0.1 \text{ MPa}$), l'intégralité de la pastille s'est fragmentée. En revanche, pour le calcul n°2 ($P_{conf} = 10 \text{ MPa}$), le modèle prédit une fragmentation dans toutes les zones, y compris dans la zone centrale (censée rester intègre). Ce comportement s'explique par le fait que le travail fourni par la pression des gaz de fission est sur-évalué dans la modélisation lorsque la fissuration est amorcée, comme mentionné en section 2.2.3.1. Ainsi, dès lors que la fissuration intervient dans une zone, le chargement appliqué engendre une rupture des interfaces dans toute la pastille.

Par conséquent, l'état de la pastille à l'issue du chargement est piloté par le comportement à rupture de la zone susceptible de se fragmenter en premier. Cet effet a deux conséquences dans la simulation :

2.3. Proposition d'un critère à rupture du combustible sur la base des résultats de l'analyse paramétrique

- D'une part, la périphérie de la zone intermédiaire (qui contient des bulles dont la pression est de l'ordre du GPa) ne peut pas être prise en compte dans le modèle avec les paramètres retenus. En effet, comme nous l'avons montré en partie 2.2.3.4, dans la simulation, la périphérie de la pastille se fragmente quelles que soient les conditions (voir figure 2.14). La présence de cette zone dans le modèle aura donc pour effet de faire se fragmenter l'ensemble de la pastille systématiquement.
- D'autre part, il n'est pas nécessaire d'imposer des paramètres (f_s^* , R_{max} , P_{eff}^{czm}) différents dans les zones de la pastille pour déterminer si le combustible peut se fragmenter. La réponse du modèle sera identique si les paramètres de la zone la plus susceptible de se fragmenter sont appliqués de façon homogène dans l'ensemble de la pastille.

Les différents résultats présentés dans cette partie 2.2.3 permettent de déterminer l'état de fragmentation du combustible en fonction des paramètres retenus et du chargement appliqué. Sur la base de ces résultats, nous proposons un critère d'amorce de fissure qui pourrait être utilisé dans le schéma de calcul dédié à l'APRP d'ALCYONE.

2.3 Proposition d'un critère à rupture du combustible sur la base des résultats de l'analyse paramétrique

Les différents résultats de simulations obtenus grâce à l'analyse paramétrique permettent de prédire l'état du combustible (fragmenté ou intact) en fonction des propriétés à rupture et du chargement appliqué par les gaz de fission. À partir de ces résultats, nous proposons dans cette partie d'établir un critère permettant de déterminer l'amorce de la fissuration¹¹ du combustible. Ce critère dépend des paramètres du modèle DEM-CZM (f_s^* , R_{max} , P_{eff}^{czm}), paramètres qui sont pris en compte dans la modélisation de la décohésion des joints de grains dans ALCYONE. Ainsi, le critère proposé pourrait à terme être intégré dans l'OCS.

Par la suite, les éléments permettant d'établir ce critère sont exposés et sont mis en lien avec le critère existant dans ALCYONE. Le critère est ensuite utilisé afin de définir la pression de confinement seuil à partir de laquelle le combustible est susceptible de se fragmenter en transitoire.

2.3.1 Définition du critère

Pour les simulations DEM-CZM présentées en parties 2.2.3, le chargement imposé par les gaz de fission est pris en compte en appliquant la pression exercée par les bulles intergranulaires localement au niveau des zones cohésives initialement rompues ($\beta = 0$ et $P_{eff}^{czm} \neq 0$). La contrainte résultante de ce chargement dépend des paramètres suivants :

- la fraction surfacique de bulles f_s^* ,
- la sur-pression des bulles P_{eff}^{czm} ,
- et la pression de confinement appliquée à la pastille P_{conf} .

11. Rappelons que le modèle DEM-CZM ne permet de prédire que l'amorce de la fissuration et non la fragmentation, cf.section 2.2.3.1.

2.3. Proposition d'un critère à rupture du combustible sur la base des résultats de l'analyse paramétrique

Comme nous l'avons vu en section 1.2.2.1, la contrainte de traction du joint de grains induite par les bulles intergranulaires σ_b peut être exprimée en fonction de ces paramètres d'après l'équation (1.10), dont on rappelle l'expression (avec les hypothèses retenues dans ce chapitre¹²) :

$$\sigma_b = \frac{f_s^* P_{eff}^{czm} - P_{conf}}{1 - f_s^*}$$

Cette équation, qui permet de définir le critère de décohésion du joint de grains dans ALCYONE, est obtenue en considérant que les bulles intergranulaires sont lenticulaires. L'expression précédente peut être généralisée pour des bulles de forme quelconque, comme illustré figure 2.15 :

$$\sigma_b = C_\sigma (f_s^* P_{eff}^{czm} - P_{conf}) \quad (2.64)$$

où C_σ est un facteur de type concentration de contrainte. L'expression de la contrainte dans le critère de décohésion d'ALCYONE (1.10) peut alors être vue comme un cas particulier de l'équation (2.64) pour lequel le facteur de concentration de contrainte s'exprime comme :

$$C_\sigma = \frac{1}{1 - f_s^*} \quad (2.65)$$

Connaissant le chargement appliqué, nous cherchons à définir le seuil à partir duquel la fissuration du matériau est amorcée. Dans le modèle DEM-CZM, le chargement appliqué par les gaz de fission ne peut qu'augmenter (à cause de l'hypothèse de réservoir infini et de l'augmentation du chargement avec la fissuration, voir section 2.2.3.1). Par conséquent, si la contrainte maximale R_{max} est atteinte dans les zones cohésives saines ($\beta = 1$), ces zones seront amenées à s'endommager puis à rompre. Ainsi, R_{max} peut être défini comme le seuil à partir duquel le matériau se fissure.

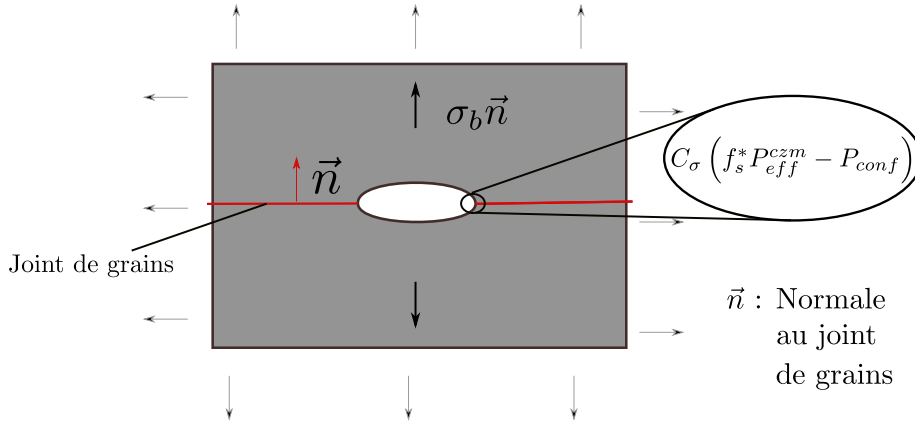


FIGURE 2.15 – Représentation d'une cavité intergranulaire dans un milieu infini soumise à une contrainte de traction.

12. la fraction surfacique de bulles au joint de grains est assimilée à la fraction surfacique de zones cohésives initialement rompues et pressurisées $f_s = f_s^*$ et la sur-pression des bulles intergranulaire est assimilée à la pression post-rupture $P_{eff} = P_{eff}^{czm}$

2.3. Proposition d'un critère à rupture du combustible sur la base des résultats de l'analyse paramétrique

Dans ce cas, le critère d'amorce de fissure est défini par l'inégalité suivante :

$$C_\sigma (f_s^* P_{eff}^{czm} - P_{conf}) \leq R_{max} \quad (2.66)$$

Ce critère permet d'évaluer les conditions dans lesquelles la fissuration intervient, en traduisant la compétition entre le chargement imposé par les gaz de fission et la pression de confinement. À partir des résultats de simulations, connaissant les différents paramètres d'entrée des calculs (f_s^* , R_{max} , P_{eff}^{czm} , P_{conf}) et l'état du combustible à l'issue du chargement, la valeur de C_σ vérifiant l'atteinte du critère (2.67) est déterminée. Ce paramètre C_σ est encadré par les valeurs à partir desquelles la pastille reste intègre (respectivement se fragmente), voir figure 2.16.

Les différentes séries de calculs sont distinguées par le couple de valeur (P_{eff}^{czm} , P_{conf}) utilisées, couple qui est reporté en abscisse. Comme précédemment, les différents points de couleur désignent l'état de la pastille à l'issue du calcul (en vert ou rouge respectivement lorsque le combustible est resté intact ou s'est fragmenté). Les encadrements de C_σ sont représentés par les droites en pointillés noirs et définissent l'intervalle suivant :

$$C_\sigma \in [5.81, 9.11] \quad (2.67)$$

Comme nous l'avons vu précédemment, le modèle ne permet pas de représenter le comportement à rupture du combustible lorsque la pression imposée par les bulles intergranulaires est de l'ordre du GPa , ainsi, les simulations de recuits de la zone périphérique du combustible (dont le couple sur-pression des bulles, pression de confinement est de $(1330, 10) MPa$) ne sont pas retenus pour définir le critère.

Notons que lorsque la cavité est sphérique, $C_\sigma = 3$. Le facteur de concentration de contrainte défini par l'équation (2.67) est supérieur à 3, mais reste du même ordre de grandeur. Ainsi, la valeur du facteur de concentration de contrainte retenue pour le critère d'amorce de fissure suggère que les bulles intergranulaires sont des défauts plus pénalisant qu'une sphère.

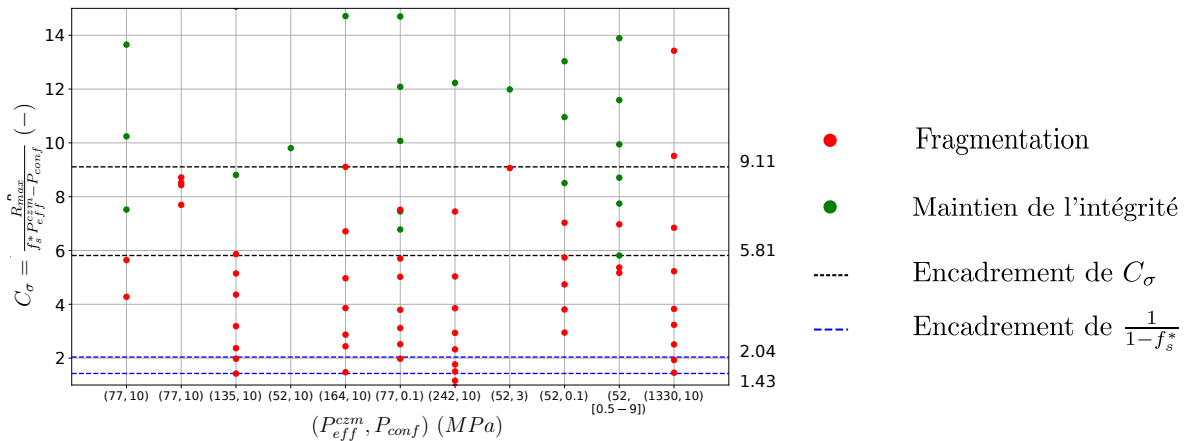


FIGURE 2.16 – Graphes des résultats des différentes simulations de recuits en fonction du facteur de concentration de contrainte.

De par sa forme simple, ce critère pourrait être utilisé dans le cadre de la modélisation du comportement du combustible dans un OCS tel qu'ALCYONE. Il pourrait notamment être implémenté dans le schéma APRP afin de déterminer le lien entre la décohésion et la fragmentation du combustible dans la modélisation. Une approche conservative consisterait à utiliser le facteur de concentration de contrainte le plus pénalisant :

$$C_\sigma = 9.11 \quad (2.68)$$

Les pseudo-facteurs de concentration du critère existant dans ALCYONE (2.65) sont illustrés par les pointillés bleus sur la figure 2.16. Comme l'illustre la figure, la valeur de C_σ dans le critère existant (qui varie entre 2.04 en zone centrale où $f_s^* = 0.51$ et 1.43 en zone intermédiaire où $f_s^* = 0.3$, voir pointillés bleus) est bien plus faible que celle proposée par l'équation (2.68) (pointillés noirs).

Ainsi, en retenant le facteur exprimé par (2.68) et pour obtenir l'état de décohésion calculé par le critère existant, il serait nécessaire d'augmenter la contrainte à rupture du joint de grains d'ALCYONE (par rapport à la contrainte obtenue par la corrélation empirique cf. section 1.2.2.1). Ce résultat suggère donc que la forme du critère de décohésion d'ALCYONE amène à sous-évaluer la contrainte à rupture des joints de grains du combustible.

Par la suite, nous cherchons à définir la pression de confinement à partir de laquelle le combustible est susceptible de se fragmenter en situation de recuit thermique sous une pression de confinement imposée comprise entre 0.1 et 10 MPa. Afin d'illustrer les potentiels champs d'application du critère proposé, les résultats de simulations sont mis en relation avec le seuil défini par l'équation (2.67).

2.3.2 Illustration du critère dans le cadre de l'identification de la pression de confinement à rupture

Afin de déterminer la pression de confinement à partir de laquelle les zones du combustible sont susceptibles de se fragmenter pour une température donnée, des simulations ont été réalisées sur un échantillon de pastille. Contrairement à la campagne de calcul précédente (cf. section 2.2.3) le triplet de paramètres (f_s^* , R_{max} , P_{eff}^{czm}) est fixé et la pression de confinement P_{conf} varie en fonction du calcul. Le jeu de paramètres retenu est déterminé de manière à vérifier la proposition 2.2.1 en zone centrale à 1073 K. Comme en section 2.2.3.5, les paramètres retenus pour représenter le comportement de cette zone sont les suivants :

- une fraction surfacique de bulles $f_s^* = 0.27$,
- une contrainte cohésive maximale $R_{max} = 70$ MPa,
- une sur-pression des bulles intergranulaires $P_{eff}^{czm} = 52$ MPa.

Pour ces différents calculs, la pression de confinement varie de 10 MPa (pression par laquelle la pastille reste intègre) à 0.1 MPa (pression pour laquelle la pastille se fragmente), ce qui permet de définir la pression critique, notée P_{conf}^{crit} , à partir de laquelle la transition entre le maintien de l'intégrité du combustible et la fragmentation intervient.

Les résultats sont présentés sur le graphe 2.17, sur lequel l'état de la pastille à l'issue du chargement (en vert ou rouge pour le cas où la pastille est intègre ou s'est fragmentée respectivement) est reporté avec en ordonnée la valeur du pseudo-facteur de concentration de contrainte C_σ et en abscisse la pression de confinement appliquée à la pastille.

2.3. Proposition d'un critère à rupture du combustible sur la base des résultats de l'analyse paramétrique

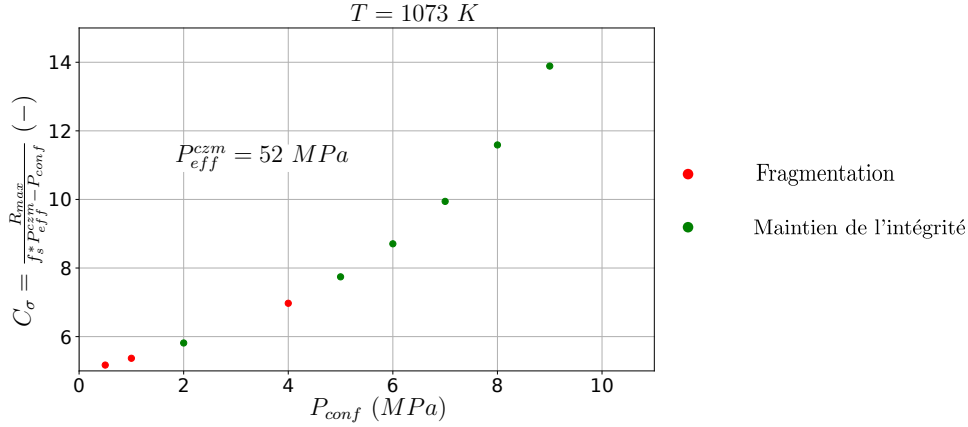


FIGURE 2.17 – Évolution de l'état de fragmentation de la pastille (intacte ou fragmentée) en fonction du pseudo-facteur de concentration de contrainte et de la pression de confinement.

D'après cette figure, la pression de confinement critique devrait être comprise entre 4 MPa (pression maximale à partir de laquelle la fragmentation intervient) et 5 MPa (pression minimale à partir de laquelle la fragmentation n'est plus observée si la pression de confinement augmente). Néanmoins, l'évolution de l'état de fragmentation en fonction de la pression de confinement est non-monotone (alternance entre le maintien de l'intégrité et la fragmentation du combustible pour P_{conf} compris entre 2 et 5 MPa, voir figure 2.17). Ces résultats suggèrent une influence de la distribution spatiale des zones cohésives représentant les bulles, distribution qui est aléatoire et différente pour chaque calcul (cf. section 2.2.2)¹³.

Concernant cette influence, rappelons que le modèle permet de prédire l'amorce de la fissuration mais pas la fragmentation, car le chargement appliqué est surévalué (cf. section 2.2.3.1). Sans cette surévaluation, il est possible que les calculs pour lesquels la fragmentation est intervenue à cause de la distribution spatiale des zones cohésives (pour $P_{conf} = 4 MPa$) conduisent à une amorce de fissure sans propagation. Par conséquent, l'impact de la distribution spatiale sur la fragmentation du combustible dans notre modèle est exacerbé par la surévaluation du chargement.

Sur la base de ces résultats, nous proposons de mettre en relation la pression de confinement critique obtenue, à la valeur déterminée à partir du critère défini par l'équation (2.67). Pour ce faire, les variables R_{max} , P_{eff}^c et f_s^* étant fixées, le pseudo-facteur de concentration de contrainte C_σ est exprimé comme une fonction de la pression de confinement appliquée P_{conf} , fonction représentée par la courbe noire sur la figure 2.18. Lorsque la pression de confinement critique est atteinte l'égalité suivante est vérifiée :

$$P_{conf}^{crit} = f_s^* P_{eff}^c - \frac{R_{max}}{C_\sigma} \quad \text{avec} \quad C_\sigma \in [5.81, 9.11]. \quad (2.69)$$

La pression de confinement critique prédite par le critère est comprise entre 2 et 6.35 MPa pour la zone centrale (illustrée par les droites en pointillés rouges sur la figure 2.18). Ces pressions correspondent aux valeurs attendues pour un recuit réalisé sur une carotte de la

13. L'influence de la distribution spatiale aléatoire sur le comportement à rupture de la pastille sera étudié en section 3.2.

2.3. Proposition d'un critère à rupture du combustible sur la base des résultats de l'analyse paramétrique

pastille (puisque ce sont les paramètres identifiés en zone centrale qui ont été retenus dans ce cas).

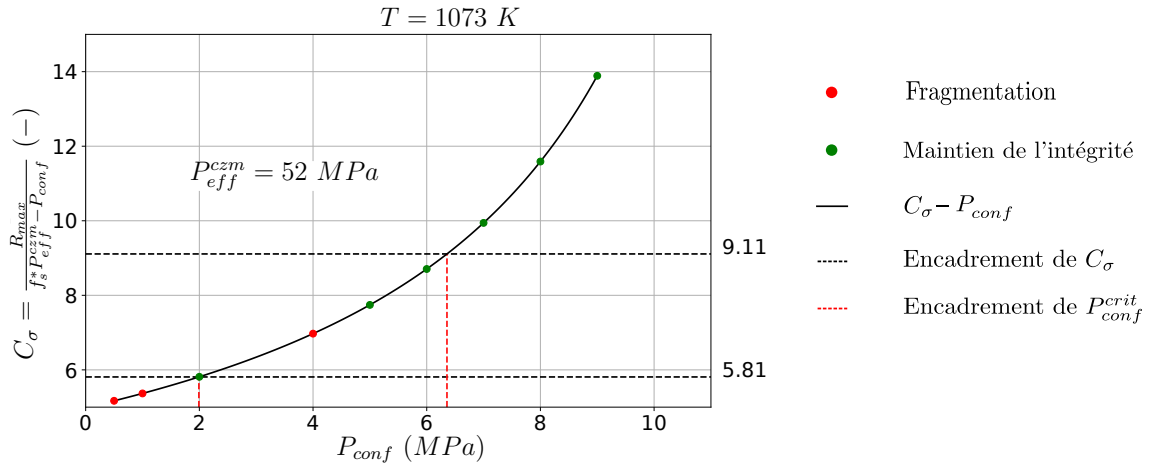


FIGURE 2.18 – Évolution du pseudo-facteur de concentration de contrainte en fonction de la pression de confinement.

Nous proposons d'appliquer la même démarche afin d'identifier la pression de confinement critique pour un recuit réalisé sur la partie centrale de la zone intermédiaire. Cette pression est évaluée à partir du critère (2.69) en prenant en compte les paramètres identifiés dans cette zone lorsque la température est de $1073 K$. Rappelons qu'à cette température, la surpression des bulles est de $P_{eff}^{czm} = 164 MPa$ et les paramètres permettant de représenter le maintien de l'intégrité du combustible lorsque $P_{conf} = 10 MPa$ appartiennent aux intervalles suivants (cf. section 2.2.3.4) :

- $f_s^* \in]0, 0.12]$
- $R_{max} \in [140, 150] MPa$

À partir de ces encadrements, les valeurs retenues pour déterminer la pression de confinement critique sont choisies de manière à potentiellement vérifier la proposition 2.2.1 (i.e. à représenter la fragmentation pour $P_{conf} = 0.1 MPa$). Pour ce faire, le chargement appliqué par les bulles est maximisé (en retenant $f_s^* = 0.12$) et la contrainte à rupture est minimisée (en retenant $R_{max} = 140 MPa$).

D'après l'équation (2.69), la pression critique obtenue est comprise sur l'intervalle suivant : $P_{conf}^{crit} \in [0.1, 4.3] MPa$ ¹⁴. Le critère prédit donc un maintien de l'intégrité pour une pression de confinement de plus de $4.3 MPa$ et une fragmentation potentielle si la pression est inférieure à cette valeur.

Sous cette forme, le critère pourrait être utilisé dans ALCYONE afin d'étudier le comportement d'échantillons combustibles subissant des recuits thermiques à pression contrôlée dans l'installation MEXIICO [59]. Néanmoins, ce critère n'est applicable que lorsque la pression

14. L'intervalle obtenu par l'équation (2.69) est de $P_{conf}^{crit} \in [-4.4, 4.3] MPa$, mais les valeurs négatives de P_{conf}^{crit} (contrainte hydrostatique de traction) sont en dehors du domaine d'application car ce critère est défini pour $P_{conf} \in [0.1, 10] MPa$

2.3. Proposition d'un critère à rupture du combustible sur la base des résultats de l'analyse paramétrique

de confinement est uniforme. En ce sens, le critère ne permet pas directement de modéliser la fragmentation en situation accidentelle, situation pour laquelle la pression de confinement varie spatialement. Nous verrons, au chapitre 3 comment ce critère peut être adaptée pour prédire la pression de confinement critique en situation d'APRP, notamment durant la dépressurisation du crayon.

2.4 Conclusion et perspectives

Dans le cadre de ce chapitre, un modèle couplant la méthode des éléments discrets (DEM) et un modèle de zones cohésives (CZM) a été utilisé afin de simuler le comportement à rupture du combustible en situation de recuit thermique à pression de confinement imposée. À partir de ce modèle, les paramètres représentatifs du comportement à rupture des différentes zones du combustible (la contrainte à rupture, R_{max} , et le taux de recouvrement des bulles au joint de grains, f_s^*) ont été identifiées. Pour cela, une analyse paramétrique du modèle a été réalisée en supposant que le combustible se fragmente à pression atmosphérique (0.1 MPa) et reste intègre pour une pression de confinement de 10 MPa.

Les résultats de cette étude ont permis d'identifier les paramètres représentatifs du comportement à rupture de la zone centrale ($R_{max} = 90$ MPa et $f_s^* = 0.25$) et de la partie centrale de la zone intermédiaire ($R_{max} = 150$ MPa et $f_s^* = 0.1$). En périphérie de la zone intermédiaire, le modèle ne permet pas de représenter le maintien de l'intégrité du combustible avec les paramètres retenus, ce qui suggère une surévaluation du chargement (due à la surestimation de la pression calculées dans les bulles intergranulaires et à l'hypothèse de réservoir infini du modèle) et/ou une sous-estimation de la contrainte à rupture.

Appliquées à la modélisation de la pastille entière, les simulations réalisées permettent de montrer que la fragmentation du combustible dans le modèle est conditionnée par le comportement à rupture de la zone susceptible de se fragmenter en premier. Par conséquent :

- La partie périphérique de la zone intermédiaire ne peut être prise en compte dans le modèle en l'état. En effet, la présence de cette zone dans le modèle aboutirait systématiquement à la fragmentation de la pastille (même dans les conditions censées être suffisantes au maintien de l'intégrité du combustible).
- Il n'est pas nécessaire de définir des paramètres différents dans chacune des zones de la pastille. En effet, seuls les paramètres représentatifs de la zone la plus susceptible de se fragmenter peuvent être retenus.

Enfin, sur la base des différents résultats de calculs, un critère d'amorce de fissure a été défini. L'expression du critère fait intervenir un pseudo-facteur de concentration de contrainte qui a été estimé à partir des résultats de simulations. Ce critère permet de prédire la pression de confinement critique à partir de laquelle une zone du combustible est susceptible de se fragmenter. D'après le critère, la zone centrale devrait se fragmenter pour une pression de confinement critique comprise entre 2 et 6.3 MPa, avec les hypothèses retenues (i.e. en supposant que la fragmentation s'amorce dans cette zone à 1073 K). En partie centrale de la zone intermédiaire, le critère suggère un maintien de l'intégrité pour une pression de confinement de plus de 4.3 MPa et une potentielle fragmentation pour des pressions inférieures.

Concernant les perspectives :

1. Identification des paramètres représentatifs du comportement à rupture de la pastille.

Dans la continuité du travail présenté dans ce chapitre, l'identification des paramètres permettant de représenter le comportement de la pastille doit être prolongé. Pour ce faire, le domaine paramétrique devra être redéfini en prenant en compte les mesures

attendues, mesures qui permettront de d'affiner l'estimation de la sur-pression des bulles. La sur-contrainte de traction engendrée par les bulles intragranulaires devra également être prise en compte¹⁵. Afin de compléter l'identification des paramètres en zone intermédiaire :

- Dans la partie périphérique de cette zone, en prenant en compte les nouvelles mesures dans l'estimation de la pression des bulles intergranulaires, les paramètres permettant de vérifier la proposition 2.2.1 pourront être identifiés. Ainsi, il sera possible de déterminer si les mesures de la contrainte à rupture macroscopiques ($\simeq 100 \text{ MPa}$) ou microscopiques ($\simeq 3 \text{ GPa}$) doivent être retenues dans cette zone.
- Il convient de réaliser des séries de calculs à différentes pressions de confinement afin de prolonger le travail d'identification des paramètres. Les paramètres (sur-pression et pression de confinement) des calculs réalisés et à réaliser sont résumés dans le tableau 2.4 :

P_{conf} (MPa) \ $P_{eff}^{czm} P_{conf}$ (MPa)	164 centre zone intermédiaire borne basse	242 centre zone intermédiaire borne haute	1047 périphérie zone intermédiaire borne basse	1330 périphérie zone intermédiaire borne haute
0.1	à réaliser	à réaliser	à réaliser	à réaliser
10	Fait	Fait	à réaliser	Fait

TABLE 2.4 – Résumé des calculs réalisés et à réaliser en zone intermédiaire.

Enfin, l'ensemble de ces résultats supposent qu'il existe une pression de confinement seuil de 10 MPa permettant de garantir le maintien de l'intégrité de chacune des zones du combustible indépendamment. Cette hypothèse reste à confirmer en fonction des résultats expérimentaux obtenus dans les installations de traitement thermique MERARG et MEXIICO sur pastille entière et micro-carottes [59].

2. Proposition d'amélioration de la modélisation de la décohésion intergranulaire.

Le critère d'amorce de fissure défini par l'équation (2.67) pourrait être implémenté dans le schéma de calcul dédié à l'APRP d'ALCYONE. À partir de ces implémentations, les recuits réalisés dans les installations MERARG et MEXIICO pourraient être simulés. La comparaison calcul-mesure permettrait d'identifier la contrainte à rupture des joints de grains à retenir pour représenter l'état de fragmentation observé expérimentalement. L'analyse réalisée dans ce chapitre suggère que l'utilisation du critère proposé amènerait à retenir une contrainte à rupture du joint de grains plus élevée que celle retenue actuellement dans ALCYONE.

3. Propositions d'amélioration du modèle DEM-CZM.

Les différentes simulations réalisées avec le modèle DEM-CZM mettent en évidence le fort impact de la surestimation du travail fourni par la pression imposée par les gaz de fission, une fois la fissuration amorcée (voir la section 2.2.3.1). Afin de pallier cela, il conviendrait :

15. La sur-contrainte engendrée par l'ensemble des cavités ne serait pas prise en compte, car le chargement appliqué par les bulles intergranulaires serait alors déjà pris en compte localement à travers la pression post-rupture P_{eff}^{czm} .

- De modéliser les fragments élémentaires comme des milieux déformables.
- D’implémenter une loi de pression post-rupture dans laquelle la pression appliquée est une fonction décroissante du saut de déplacement normal. Pour ce faire, un volume molaire pourrait être affecté à chacune des zones cohésives initialement rompues. Le volume molaire de la $i_c^{\text{ième}}$ zone cohésive serait alors déterminé par l’équation suivante :

$$V_m^{i_c}(u_N^{i_c}, n^{i_c}) = \frac{S^{i_c} u_N^{i_c}}{n_g^{i_c}} \quad (2.70)$$

avec S^{i_c} l’aire de la surface affectée à la $i_c^{\text{ième}}$ zone cohésive, $u_N^{i_c}$ le saut de déplacement normal ($S^{i_c} u_N^{i_c}$ représente le volume occupé par le gaz) et $n_g^{i_c}$ le nombre de mole de gaz déterminé par un calcul ALCYONE de l’irradiation de base. La pression qui règne au niveau de la zone cohésive serait alors déterminée, à une température donnée, par le biais d’une équation d’état (cf. section 1.3.2.1).

Cette implémentation permettrait de mieux estimer le travail fourni par les gaz de fission dans le modèle.

Concernant ce dernier point, le fait d’affecter une quantité de gaz à chacune des zones cohésives rompues permettrait également de déterminer un relâchement des gaz de fission dans le modèle DEM-CZM. Pour ce faire, il serait nécessaire de déterminer si les fissures – définies par un ensemble de zones cohésives voisines rompues – sont débouchantes, au sens où la surface qui leur est attachée est connectée aux surfaces libres du combustible. La quantité de gaz relâché pourrait alors être déterminée par un modèle d’écoulement de fluide dans un milieu poreux de type Darcy [37].

À partir de ces améliorations, l’analyse paramétrique du modèle pourrait être reprise. Les implémentations concernant l’amélioration du bilan énergétique pourraient permettre d’identifier les paramètres représentatifs de la périphérie du combustible. De plus, la comparaison du relâchement calculé et mesuré permettrait d’affiner l’identification des paramètres. En effet, la contrainte à rupture et le taux de recouvrement à retenir pourraient être déterminés de manière à ce que le relâchement calculé corresponde à l’expérience.

Étude de la fragmentation et de la relocalisation du combustible lors de la dépressurisation du crayon

Sommaire

3.1	État de l'art de l'étude du comportement du combustible en situation d'APRP par la méthode DEM	151
3.1.1	Étude de la relocalisation du combustible en l'absence de fluide par la DEM	151
3.1.2	Étude du comportement du combustible comme un milieu granulaire immergé	154
3.2	Modélisation de la fragmentation du combustible sous l'effet de la dépressurisation du crayon	160
3.3	Modélisation de l'écoulement par une approche de type fluide non-résolu	166
3.3.1	Présentation de la modélisation de type fluide non-résolu	167
3.3.2	Présentation de la méthode de couplage existante sur des corps sphériques	168
3.3.3	Implémentation d'une interface numérique permettant d'adapter le couplage fluide-granulats au cas de corps polyédriques	171
3.4	Étude de l'influence de la taille de la brèche sur l'éjection du combustible	176
3.4.1	Prise en compte de la turbulence par un modèle de viscosité de turbulence	176
3.4.2	Modélisation de la relocalisation et de l'éjection des fragments par le biais du couplage fluide-granulats adapté aux corps polyédriques	178
3.5	Conclusions et perspectives	187

Comme vu en section 1.2.1, les campagnes expérimentales simulant l'APRP ont mis en évidence le rôle des effets "système" (pression des plena, ballonnement de la gaine, perte d'étanchéité du crayon, ...) sur la fragmentation du combustible. Ces expériences ont notamment démontré que la fragmentation est de plus grande ampleur lorsque la gaine a rompu durant la séquence accidentelle. Ce résultat suggère un effet moteur de la dépressurisation du crayon suite à sa perte d'étanchéité. Ce moteur étant identifié, il doit être pris en compte dans le schéma de calcul d'ALCYONE dédié à la modélisation du comportement du combustible en situation d'APRP. Pour ce faire, les conditions dans lesquelles le combustible est susceptible de se fragmenter dans cette situation vont être étudiées dans le cadre de ce chapitre.

Afin de déterminer ces conditions, la méthode des éléments discrets (DEM), présentée en section 2.1.4.1, est retenue. Cette méthode a déjà été utilisée dans le but de caractériser l'écoulement granulaire de fragments de combustible lors de leur relocalisation et de leur éjection [2, 84, 53]. Récemment, le développement de modèles couplant une méthode de résolution d'écoulement de fluide à la DEM a permis d'étudier l'influence des gaz de remplissage et du caloporteur sur les écoulements de fragments de combustible sous l'effet de la dépressurisation à partir de simulations 2D [2].

Nous cherchons à déterminer ici les conditions aboutissant à la fragmentation et à l'éjection du combustible lors de la dépressurisation du crayon. Pour cette étude, le crayon est supposé avoir ballonné et rompu comme illustré figure 3.1. Le comportement à rupture de la pastille située au-dessus du ballon va alors être étudié.

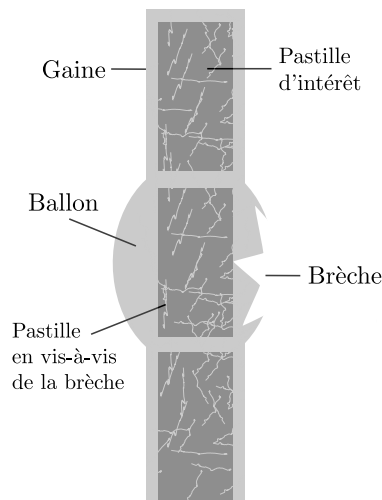


FIGURE 3.1 – Illustration du crayon durant la dépressurisation du crayon.

Pour ce faire, l'effet de la dépressurisation du gaz de remplissage sur la fragmentation du combustible sera modélisé à partir du modèle DEM-CZM 3D présenté au chapitre 2. Tout d'abord, le champ de pression qui règne dans le gaz de remplissage sera défini de manière à représenter l'écart de pression attendu entre l'intérieur et l'extérieur du crayon. Par la suite, dans l'optique de préciser l'évolution de ce champ de pression, une méthode de résolution d'écoulement de fluide couplée à la DEM sera retenue. Cette dernière est initialement

applicable pour des fragments sphériques. Elle sera donc adaptée aux formes polyédriques (cf. section 2.2.1.1). Les simulations réalisées à partir de cette nouvelle méthode n'ayant pas permis de conclure quant à l'effet de la dépressurisation du crayon sur la fragmentation du combustible durant sa relocalisation, le couplage sera appliqué au cas de la modélisation de l'éjection d'un combustible déjà fragmenté. Les résultats de cette modélisation permettront d'évaluer l'influence de la taille de la brèche sur la quantité de combustible éjecté en prenant en compte l'effet moteur de l'écoulement du gaz de remplissage.

L'organisation de ce chapitre est la suivante : Dans un premier temps, l'état de l'art des études du comportement du combustible fragmenté en situation d'APRP par le biais de la méthode DEM est présenté. Dans un deuxième temps, l'influence de la dépressurisation du crayon sur la fragmentation du combustible est étudiée à partir du modèle DEM-CZM. Dans un troisième temps, une méthode de couplage fluide-granulats adaptée à la prise en compte de fragments polyédriques est présentée. Enfin, dans un quatrième temps, cette méthode est appliquée au cas de l'éjection des fragments de combustible hors du crayon sous l'effet de la dépressurisation.

3.1 État de l'art de l'étude du comportement du combustible en situation d'APRP par la méthode DEM

Comme vu au chapitre 2, la méthode des éléments discrets (DEM) permet de modéliser finement le comportement d'un milieu granulaire. Cette méthode a été utilisée afin d'étudier le comportement du combustible fragmenté dans différentes configurations représentatives de l'APRP (relocalisation suite au ballonnement de la gaine, éjection à travers la brèche, ...).

3.1.1 Étude de la relocalisation du combustible en l'absence de fluide par la DEM

Dans Martin [84], le combustible fragmenté est représenté par un ensemble de disques (2D) s'écoulant à travers un orifice de diamètre d_o dans un cylindre de diamètre d_s (un rectangle en 2D) comme illustré figure 3.2. L'orifice représente la section efficace à travers laquelle le combustible est susceptible de se relocaliser, alors qu'une partie des fragments de combustible sont encastrés sur la partie basse de la colonne combustible, sur une distance $d_s - d_o$. La zone sous l'orifice n'est pas représentée : il s'agit d'un ballon avec brèche. Par la suite, ces diamètres sont adimensionnés par la taille moyenne des fragments $\langle d \rangle$, de sorte que :

$$R_0 = \frac{d_o}{\langle d \rangle}$$

représente la taille adimensionnée de l'ouverture du silo. Il existe différentes phases d'écoulement granulaire sous poids propre en fonction de la taille de l'orifice :

- Le blocage totale, si $R_0 \leq R_B$, où R_B est la taille minimale nécessaire au passage d'un granulats.
- L'écoulement intermittent de type avalanches-blocages (R_0 est moyen).
- La vidange totale, si $R_0 \geq R_f$, où R_f est la taille critique de l'orifice à partir de laquelle le blocage des granulats au niveau de l'orifice n'est plus possible.

3.1. État de l'art de l'étude du comportement du combustible en situation d'APRP par la méthode DEM

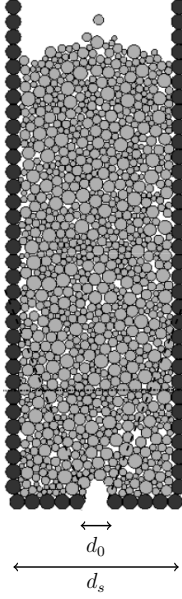


FIGURE 3.2 – Schéma de l'empilement de sphères 2D représentant le combustible fragmenté (disques gris), les sphères noires représentent la gaine (parois latérales) ou les fragments ancrés à la gaine (parois basses) [84].

Dans cette configuration, le débit granulaire à travers l'orifice suit la loi empirique de Beverloo [10] (en 2D) :

$$Q = C_B(R_o - R_B)^{\frac{3}{2}}. \quad (3.1)$$

avec C_B une constante et $R_B \simeq 1$ est le diamètre adimensionné à partir duquel l'écoulement des granulats n'est pas possible. À partir des simulations de la relocalisation du combustible, Martin [84] propose de ré-interpréter la loi de Beverloo. Pour ces simulations, la cinématique des granulats au niveau de l'orifice est connue, ainsi le débit peut être défini (en 2D) comme :

$$Q = n_p v_{out} (R_o - R_B) \quad (3.2)$$

avec n_p le nombre de particules par unité de volume de la zone dite "fluidisée" dans laquelle les particules sont en chute libre et v_{out} la vitesse normalisée des particules passant par l'orifice. En exprimant la vitesse moyenne de sortie des granulats en fonction de la taille de l'orifice et en constatant que le nombre de particules sortant n_p est constant, la loi de Beverloo peut être réinterprétée :

$$Q = C_v C_n \sqrt{l_{zf}} (R_o - R_B)^{\frac{3}{2}} \quad (3.3)$$

avec l_{zf} le rapport d'aspect de la zone "fluidisée" supposée rectangulaire, C_n le nombre de particules par unité de volume normalisé et C_v une constante homogène à la racine carrée d'une longueur par unité de temps. Cette loi permet d'exprimer le nombre moyen de particules s'écoulant entre deux blocages comme étant :

$$\langle N \rangle = C_N (R_f - R_o)^{-\gamma_z} (R_o - R_B)^{\frac{3}{2}} \quad (3.4)$$

avec $R_f \simeq 6.25$ le diamètre d'ouverture normalisé à partir duquel la vidange des fragments est totale et $\gamma_z \simeq 2.6$ une constante. À partir de l'équation (3.4), l'analyse proposée par Martin [84] permet d'exprimer le taux de relocalisation (rapport entre le volume

de combustible relocalisé et le volume du ballon) en fonction de la géométrie du ballon, l'épaisseur de combustible ancré dans la gaine et la taille des fragments. Un calcul conservatif permet d'estimer des bornes basses et hautes du taux de relocalisation de la masse de la colonne combustible au-dessus du ballon (α_{rel}^+ et α_{rel}^- respectivement) en fonction de la taille moyenne des fragments adimensionnée par le rayon de la gaine $\langle \bar{d} \rangle$, comme illustré figure 3.3.

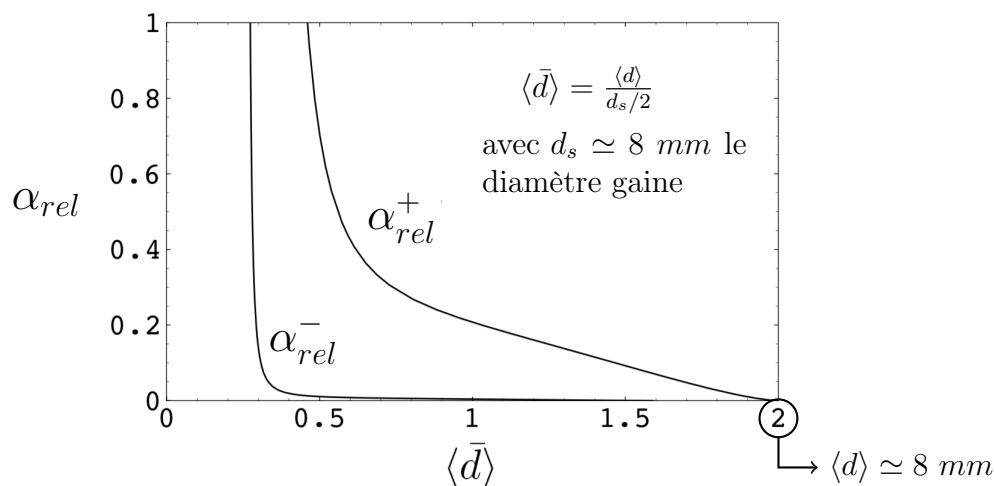


FIGURE 3.3 – Courbes d'évolution du taux de relocalisation α_{rel} en fonction du rapport entre le diamètre moyen des granules et le rayon interne de la gaine d'après l'équation (3.4) [84].

Govers et Verwerft [53] représentent les fragments de la zone saine du combustible comme une collection de sphères (cluster) formant un solide indéformable et la gaine par un cylindre pouvant se déformer. Ces travaux ont permis d'étudier l'influence du gonflement lié à la formation du rim sur la quantité de combustible relocalisé suite au ballonnement de la gaine. Pour ce faire, le rim est représenté par des sphères enchevêtrées¹ aux fragments de la zone saine, sphères dont la présence a pour effet de diminuer le jeu pastille-gaine. D'après cette étude, la relocalisation du combustible ne peut intervenir que pour une déformation de gaine de plus de 1 % en l'absence de rim et entre 1 % et 5 % lorsque le rim est présent. Les résultats permettent également de déterminer une compacité après relocalisation entre 0.5 et 0.6, en accord avec les résultats expérimentaux [47]. Des simulations sur un grand nombre de pastilles (une colonne granulaire de plus de 30 cm soit environ 25 pastilles) avec une gaine entaillée ont permis de montrer le potentiel de la méthode pour représenter la dispersion du combustible après relocalisation.

Ces résultats sont obtenus dans le cas sec, i.e. en l'absence de fluide. Néanmoins le comportement du milieu granulaire formé par les fragments de combustible peut être impacté par la présence d'un fluide, que ce soit le gaz de remplissage du crayon ou le caloporteur qui s'introduit dans la gaine suite à la formation d'une brèche. Le comportement des milieux granulaires en présence d'un fluide (milieu granulaire immergé) dans ces conditions est présenté par la suite.

1. Avec la méthode smooth-DEM [35] qui est retenue pour cette étude, l'interpénétration des sphères est possible.

3.1.2 Étude du comportement du combustible comme un milieu granulaire immergé

3.1.2.1 Description de la rhéologie des milieux granulaires immergés

Afin de modéliser un milieu granulaire en présence d'un fluide, il est nécessaire de prendre en compte les sollicitations induites par l'écoulement de ce fluide. En ne considérant que le fluide dans un premier temps, les équations régissant son écoulement dans un système fermé, pour un fluide Newtonien (dont la viscosité est constante) incompressible (dont la densité est constante), sont les équations de Navier-Stokes et de conservation de la masse :

$$\frac{\partial \rho_f \vec{v}_f}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot [\rho_f \vec{v}_f \otimes \vec{v}_f] = -\vec{\nabla} P_f + \vec{\nabla} \cdot [2\eta_f \vec{\nabla}_s \vec{v}_f] + \rho_f \vec{g} + \vec{F}_{vol} \quad (3.5)$$

$$\frac{\partial \rho_f}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho_f \vec{v}_f) = 0 \quad (3.6)$$

où \otimes est le produit tensoriel, P_f est la pression, \vec{v}_f est la vitesse, ρ_f est la densité volumique, η_f est la viscosité du fluide, $\vec{\nabla}_s = \frac{1}{2} (\vec{\nabla} + \vec{\nabla}^T)$ où $\vec{\nabla}^T$ est la transposée de l'opérateur gradient, \vec{g} est le vecteur de gravité et \vec{F}_{vol} est le vecteur d'efforts volumiques qui sera considéré nul par la suite.

La nature de l'écoulement est caractérisée par le nombre de Reynolds qui permet d'évaluer le rapport entre les forces inertielles et les forces visqueuses du fluide :

$$R_e = \frac{\rho_f v_{f0} L_f}{\eta_f} \quad (3.7)$$

avec v_{f0} la vitesse caractéristique du fluide et L_f la longueur caractéristique de l'écoulement de fluide. Il est à noter que, lorsque le nombre de Reynolds est faible ($R_e \ll 1$), les forces d'inertie sont faibles comparées aux forces visqueuses et le terme en $\vec{\nabla} \cdot [\rho_f \vec{v}_f \otimes \vec{v}_f]$ dans l'équation (3.5) peut alors être négligé, on a alors un écoulement de Stokes. En revanche, lorsque $R_e > 2000$, l'écoulement est turbulent et tous les termes de cette équation sont importants ainsi que leurs fluctuations.

Connaissant les équations qui régissent l'écoulement du fluide, il s'agit maintenant de représenter le comportement du milieu granulaire immergé. Une première approche consiste à associer le système formé par le fluide (dit fluide "réel", dans ce cas) et le milieu granulaire à un fluide équivalent. Dans ce cas, du fait de la présence des granulates, la viscosité du fluide équivalent η_{feq} est plus élevée que celle du fluide réel. La rhéologie du milieu granulaire immergé peut alors être décrite en remplaçant η_f par η_{feq} dans l'équation (3.5).

Le premier modèle se basant sur cette approche peut être attribué à Einstein [40]. En considérant un écoulement de Stokes ($R_e \ll 1$) autour d'une sphère rigide isolée, l'auteur démontre que l'évolution de la viscosité du fluide équivalent s'exprime comme :

$$\eta_{feq}(\psi) \simeq \eta_f \left(1 + \frac{5}{2} \psi \right) \quad (3.8)$$

où η_{feq} est la viscosité effective du fluide équivalent et pour rappel, ψ est la compacité du milieu granulaire. Cette équation est valable tant que le milieu granulaire est suffisamment dilué ($\psi < 0.05$).

En revanche, lorsque la compacité est élevée, l'interaction entre les particules a un fort impact sur la viscosité effective, les corps génèrent des forces hydrodynamiques et interagissent par contact frottant, etc. Parmi les corrélations empiriques existantes, celles de Krieger et Dougherty [74] est en bon accord avec les différentes données expérimentales existantes dans la littérature [58]. L'expression obtenue est la suivante :

$$\eta_{feq}(\psi) = \eta_f \left(1 - \frac{\psi}{\psi_c}\right)^{-2.5\psi_c} \quad (3.9)$$

Cette équation fait apparaître la compacité critique ψ_c , à partir de laquelle la viscosité effective tend vers l'infini. Pour ce régime d'écoulement quasi-statique de blocage, le milieu a un comportement élasto-plastique et ne peut s'écouler que lorsque le cisaillement appliqué dépasse une valeur seuil. D'après le critère de Coulomb, ce seuil s'exprime comme :

$$|R_N| \leq \mu_{eff}|R_T| \quad (3.10)$$

En rappelant que $\vec{R} = \bar{\sigma} \cdot \vec{n}' = R_N \vec{n}' + R_T \vec{t}'$ en 2D (voir annexe C.2 pour le cas 3D), avec \vec{n}' et \vec{t}' illustrés figure 3.4. μ_{eff} est le coefficient de frottement effectif (constant) qui caractérise la résistance au cisaillement du milieu.

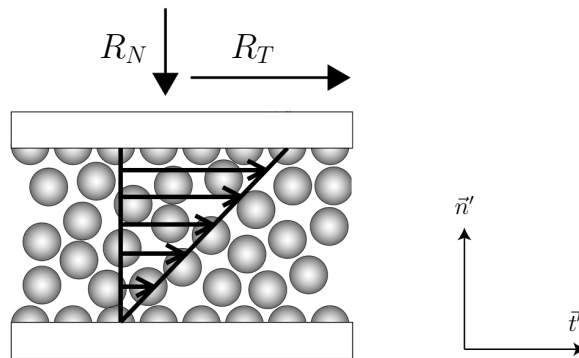


FIGURE 3.4 – Schéma d'un milieu granulaire subissant un cisaillement plan, tiré de [4].

Afin de décrire l'écoulement du milieu granulaire immergé, une approche alternative consiste à décrire les champs de contraintes en fonction du coefficient de frottement interne. Dans le cas sec (sans fluide), le coefficient de frottement effectif n'est plus constant une fois le seuil (3.10) atteint et s'exprime comme [36] :

$$\mu_{eff}(I_g) = \frac{|R_T|}{|R_N|} \quad (3.11)$$

avec I_g le nombre inertiel donné par l'équation (3.12), cette quantité adimensionnée permet de caractériser l'état rhéologique du milieu granulaire :

$$I_g = |\dot{\epsilon}_t| \langle d \rangle \sqrt{\frac{\rho_p}{|R_N|}}, \quad (3.12)$$

avec $\dot{\epsilon}_t$ le taux de cisaillement et en rappelant ρ_p la densité des granulats. Pour $I_g \ll 1$, le régime d'écoulement est quasi-statique et le coefficient de frottement effectif est constant (voir

3.1. État de l'art de l'étude du comportement du combustible en situation d'APRP par la méthode DEM

équation (3.10)). Une valeur importante de I_g (supérieur à 0.1), correspond à un régime dit collisionnel où la compacité du milieu est faible et les efforts sont dominés par les chocs entre particules. Il existe un régime intermédiaire appelé inertiel dense pour $10^{-3} < I_g < 10^{-1}$ où l'inertie des particules est importante mais les efforts de contact ne peuvent être négligés. La rhéologie du milieu granulaire peut être décrite de manière locale en se basant sur la définition du nombre inertiel, des modèles basés sur cette approche sont présentés en annexe C.3.

Dans le cadre des milieux granulaires immergés, Boyer et al. [19] montrent que les propriétés rhéologiques du milieu (la compacité et le coefficient de frottement effectif) peuvent s'écrire comme une fonction univoque du nombre visqueux J (analogue au nombre inertiel I_g) et défini par :

$$J = \frac{\eta_f |\dot{\epsilon}_t|}{R_N} \quad (3.13)$$

L'expression de la compacité et du coefficient de frottement effectif en fonction de ce nombre visqueux permet de définir les lois de comportement du milieu granulaire immergé tant que l'inertie des granulats est négligeable (voir annexe C.3).

Les lois de comportement obtenues permettent de décrire la rhéologie d'écoulements granulaires immergés² dans des configurations simples. En revanche, ce type de description n'est pas directement applicable dans le cadre de l'étude de la fragmentation, relocalisation et l'éjection du combustible, car les fragments doivent être traités comme un milieu discret. Par conséquent, le fluide et les fragments de combustible doivent être traités comme deux phases distinctes. Pour ce faire, des simulations numériques couplant une modélisation de l'écoulement du fluide à la méthode DEM sont utilisées. Les études existantes concernant le comportement du combustible avec ce type de couplage sont présentées par la suite.

3.1.2.2 Étude du comportement du combustible fragmenté en interaction avec un fluide

Afin de prendre en compte l'influence du gaz de remplissage sur la relocalisation des fragments de combustible, Martin [84] propose de modéliser l'écoulement du gaz par une approche de type "fluide non résolu" : les champs représentatifs de l'écoulement sont moyennés sur un élément de volume (voir aussi section 3.3).

En suivant l'approche développée par McNamara et al. [87], le fluide est considéré comme étant un gaz parfait et le nombre de Reynolds est supposé être inférieur à 1 (écoulement de Stokes). Les équations de conservation de la masse du fluide et du solide permettent alors d'exprimer la relation suivante :

$$\psi \left(\frac{\partial P_f}{\partial t} + \vec{v}_f \cdot \vec{\nabla} P_f \right) = \vec{\nabla} \cdot \left(P_f \frac{\kappa}{\eta_f} \vec{\nabla} P_f \right) - P_f \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_f \quad (3.14)$$

avec κ est la perméabilité effective du milieu granulaire. Pour un milieu composé de granulats sphériques, la perméabilité peut être exprimée par la relation de Carman-Kozeny [26] :

$$\kappa = \frac{\langle d \rangle^2 \psi^3}{180(1 - \psi)^2} \quad (3.15)$$

2. Il est à noter que les deux approches susmentionnées (en associant le milieu granulaire immergé à un fluide équivalent ou un milieu continu) sont équivalentes [19].

3.1. État de l'art de l'étude du comportement du combustible en situation d'APRP par la méthode DEM

En supposant les contraintes visqueuses et le poids du fluide négligeables devant la pression, l'effort exercé par le fluide sur une particule γ est donné par :

$$\vec{F}_{f,\gamma} = \frac{-V_\gamma}{1-\psi} \vec{\nabla} P_f|_{\vec{x}_\gamma} \quad (3.16)$$

avec V_γ et \vec{x}_γ le volume et la position de la particule γ respectivement.

À partir de ce modèle, les simulations d'écoulement granulaire à travers un orifice (voir figure 3.2) ont été réalisées en prenant en compte la présence du gaz [84]. D'après les résultats, la loi de Beverloo (3.1) est toujours vérifiée dans ce cas, seule la vitesse des particules en sortie de silo v_{out} est modifiée par le fluide. Appliqué à la relocalisation, ce résultat conforte donc l'analyse aboutissant à la définition des bornes du taux de relocalisation (voir figure 3.3).

Amarsid [2] propose d'étudier l'influence du fluide caloporteur sur le comportement des fragments de combustible. Cette étude 2D se base sur une méthode DEM couplée à la LBM (Lattice Boltzmann Method). Sur la base de ce modèle, l'auteur propose d'étudier la relocalisation des fragments de combustible en présence du fluide caloporteur. Dans ces conditions, le nombre inertiel est grand ($I_g > 10^{-3}$) et la relation (3.13) n'est plus valable, le régime est dit visco-inertiel. Ainsi, sur la base de calculs DEM-LBM, l'écoulement du milieu granulaire immergé est décrit par un nombre visco-inertiel, qui permet de quantifier l'effet conjugué de l'inertie des granulats et de la viscosité du fluide :

$$I_v = \sqrt{I_g^2 + \alpha_v J^2} \quad (3.17)$$

avec α_v une constante adimensionnée qui traduit le poids relatif des effets visqueux et inertiels. Ainsi, le coefficient de frottement effectif et la compacité du milieu peuvent s'exprimer dans le régime visco-inertiel comme :

$$\mu_{eff}(I_v) = \mu_s + \frac{\mu_v - \mu_s}{1 + \frac{I_{v0}}{I_v}} \quad (3.18)$$

$$\psi(I_v) = \frac{\psi_c}{1 + a_a I_v} \quad (3.19)$$

avec I_{v0} et a_a des constantes, μ_s et μ_v sont les coefficients de frottement effectif dans le régime quasi-statique et dans le cas $I_v \gg I_{v0}$ respectivement. Les expressions (3.19) et (3.17) associées aux définitions des nombres adimensionnés J (voir équation (3.13)) et I_g (voir équation (3.12)) permettent d'établir la relation entre la contrainte de compression R_N et la compacité selon :

$$\frac{1}{\psi - 1} = \frac{1}{\psi' - 1} - C_s \ln \frac{R_N}{R'_N} \quad (3.20)$$

avec C_s le coefficient de compression, R'_N et ψ' une contrainte et une compacité de référence telles que $I_v(R'_N) = \frac{1}{a_a} \left(\frac{\psi_c}{\psi'} - 1 \right)$.

Ces simulations ont été appliquées au cas d'un débit granulaire à travers un orifice afin d'étudier la relocalisation-éjection du combustible. D'après les résultats obtenus, le débit des

3.1. État de l'art de l'étude du comportement du combustible en situation d'APRP par la méthode DEM

fragments est modifié par la présence du fluide visqueux, contrairement à ce qui a été obtenu par Martin [84] où la viscosité du gaz était faible. Dans ce cas, la loi des débits devient :

$$Q = n_p \gamma_v (R_o - R_B)^2 + n_p v_{out}^f (R_o - R_B) \quad (3.21)$$

avec γ_v une constante et v_{out}^f la vitesse normalisée des particules passant l'orifice lorsque R_o tend vers la taille d'ouverture adimensionnée à partir de laquelle l'écoulement granulaire se bloque R_B .

Le modèle a été appliqué au cas de la fragmentation du combustible lors de l'APRP dans un calcul 2D [2]. Dans ce cas, les fragments de combustible sont représentés par des assemblages de granulats sphériques liés par une loi d'adhésion (Bonded-Particle Model). Ces assemblages de granulats forment des fragments polyédriques qui peuvent se surfragmenter en fonction du chargement, comme illustré figure 3.5 (les granulats de même couleur forment un fragment). Ces fragments sont empilés entre des murs indéformables, représentant la gaine, radialement seule la moitié du crayon est représentée et des conditions de déformations planes sans symétrie sont retenues. La gaine (traits blancs sur la figure 3.5) a soit une forme régulière (à gauche), soit déformée afin de représenter le ballonnement (à droite) et cette gaine est supposée avoir rompue.

Lors des calculs réalisés dans [2], les conditions limites en pression vont induire un écoulement du fluide et engendrer des efforts en chacun des granulats. Ces efforts peuvent alors amener les liens cohésifs à se rompre, il y a alors fragmentation. Dans une première situation, la pression à l'intérieur du crayon est initialement uniforme et vaut P_{plena} . Au niveau de la brèche, pour représenter qualitativement l'effet de la dépressurisation, la pression est fixée à une valeur P_{ec} telle que $P_{plena} - P_{ec} = 1 \text{ MPa}$. D'après les résultats illustrés figure 3.5, la fragmentation est faible et n'intervient que lorsque la gaine a ballonné. Dans un second cas, en plus du chargement susmentionné, une pression constante au cours du temps est exercée sur les parties supérieures et inférieures de la colonne de combustible (hypothèse de réservoir infini) afin de représenter un effet des plena. Dans ce cas, comme illustré figure 3.6, la pression des plena a un effet moteur sur la fragmentation, effet qui est aggravé par la présence du ballon.

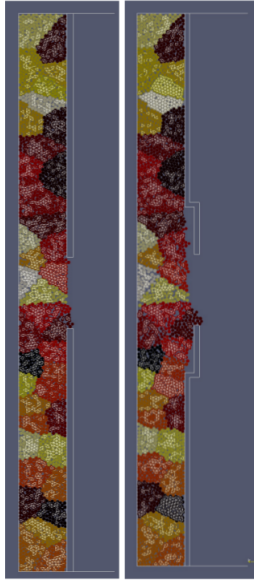


FIGURE 3.5 – Schéma de la situation d'éjection pour laquelle la pression dans le crayon évolue librement [2].

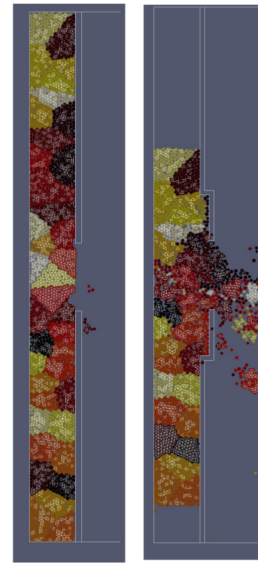


FIGURE 3.6 – Schéma de la situation d'éjection pour laquelle la pression en haut et bas de la colonne de combustible est fixée [2].

Ces études ont permis d'approfondir la compréhension des mécanismes d'éjection et de fragmentation du combustible en APRP. Néanmoins, ces travaux présentent certaines limites :

- Le modèle de Govers et Verwerft [53] ne représente pas l'effet du fluide.
- Dans Martin [84] les granulats sont sphériques. Or, comme nous le verrons, la forme des fragments a une influence sur l'écoulement granulaire,
- Dans Amarsid [2], les calculs ont été réalisés en supposant que le chargement et la géométrie respectait les hypothèses de déformations planes en 2D. Or, après fragmentation du combustible, ces hypothèses ne peuvent plus être considérées comme valides. Une représentation des fragments en 3D est donc nécessaire afin d'obtenir des simulations proches de la configuration réelle.

Par la suite, la fragmentation et l'éjection du combustible sont étudiées à partir d'un modèle DEM tridimensionnel.

3.2 Modélisation de la fragmentation du combustible sous l'effet de la dépressurisation du crayon

Cette première étude vise à déterminer les conditions pour lesquelles le combustible est susceptible de se fragmenter lors de la dépressurisation du crayon. Dans ce cas, l'écoulement de gaz ainsi que l'éjection des fragments ne sont pas représentés, seul l'effet de la variation de pression autour de la pastille combustible est modélisé dans cette section. Pour ce faire, le modèle DEM-CZM (cf. chapitre 2) est utilisé, sachant que les paramètres permettant de représenter le comportement à rupture du combustible (contrainte à rupture et taux de recouvrement des bulles au joint de granulats) ont été identifiés en section 2.2.3. Grâce aux simulations réalisées en section 2.3.2, l'intensité du champ de pression de confinement à partir de laquelle le combustible se fragmente a été déterminée, dans le cas où ce champ est uniforme. Or, lors de la dépressurisation, ce champ de pression varie en fonction de la position dans le crayon. Nous cherchons donc à déterminer ici pour quel chargement appliqué à la pastille la fragmentation intervient, lorsque le champ de pression de confinement est spatialement variable.

Pour des raisons d'efficacité numérique, une seule pastille est prise en compte dans le modèle. La pastille située au-dessus du ballon (pastille d'intérêt sur la figure 3.1) est retenue, car si les conditions nécessaires au maintien de l'intégrité de cette pastille sont respectées, alors la relocalisation des pastilles situées au-dessus n'est pas possible (approche conservative). Pour les simulations réalisées, cette pastille peut se fragmenter en fonction des sollicitations, mais les fragments ne peuvent se relocaliser dans le ballon : un appui-plan se situe au niveau de la surface inférieure de la pastille. Par hypothèse, à la côte de cette pastille dans le crayon, le champ de pression du gaz de remplissage ne dépend que de la position axiale.

En ce qui concerne le chargement, afin de prendre en compte la variation axiale de la pression du gaz de remplissage, la répartition de la pression de confinement appliquée à la pastille est définie de manière à représenter l'écart de pression attendu entre l'intérieur et l'extérieur du crayon lors de sa dépressurisation. La pression de confinement suit l'évolution suivante sur l'intervalle de temps $[t_i, t_f]$:

1. Initialement ($t = t_i$), une pression de confinement uniforme $P_{plena} = 8 \text{ MPa}$ est appliquée sur l'ensemble des surfaces libres de la pastille (si ces surfaces ne sont pas déjà pressurisées par les gaz de fission).
2. Pour $t \in [t_i, \frac{t_f}{2}]$, la pression appliquée sur la face supérieure de la pastille P_{sup} reste constante, d'après l'équation (3.22). La pression sur la face inférieure P_{inf} diminue au cours du temps jusqu'à devenir nulle à $\frac{t_f}{2}$, d'après l'équation (3.23). À un instant $t \in [t_i, t_f]$, l'évolution axiale de la pression entre les faces supérieures et inférieures suit une loi puissance définie par l'équation (3.24).
3. Pour $t \in [\frac{t_f}{2}, t_f]$, la pression sur la face supérieure de la pastille diminue jusqu'à devenir nulle à t_f (voir l'équation (3.22)), afin de représenter la vidange du crayon à la fin du calcul.

3.2. Modélisation de la fragmentation du combustible sous l'effet de la dépressurisation du crayon

Ces évolutions sont définies par :

$$P_{sup}(t) = \begin{cases} P_{plena} & \text{si } t \leq \frac{t_f}{2} \\ 2P_{plena} \left(1 - \frac{t}{t_f}\right) & \text{si } t \geq \frac{t_f}{2} \end{cases} \quad (3.22)$$

$$P_{inf}(t) = \begin{cases} P_{plena} \left(1 - 2\frac{t}{t_f}\right) & \text{si } t \leq \frac{t_f}{2} \\ 0 & \text{si } t \geq \frac{t_f}{2} \end{cases} \quad (3.23)$$

$$P_{conf}(z, t) = P_{inf}(t) + \left(\frac{z}{h}\right)^n (P_{sup}(t) - P_{inf}(t)) \quad (3.24)$$

avec h la hauteur de la pastille. L'évolution du profil axial de la pression de confinement pour différentes valeurs de n est illustré figure 3.7 ($z = 0 \text{ mm}$ et $z = 12 \text{ mm}$ sont les positions des faces inférieures et supérieures de la pastille respectivement). Les efforts engendrés au niveau des fragments élémentaires comportant des surfaces libres sont illustrés figure 3.8 dans le cas d'un profil linéaire ($n = 1$).

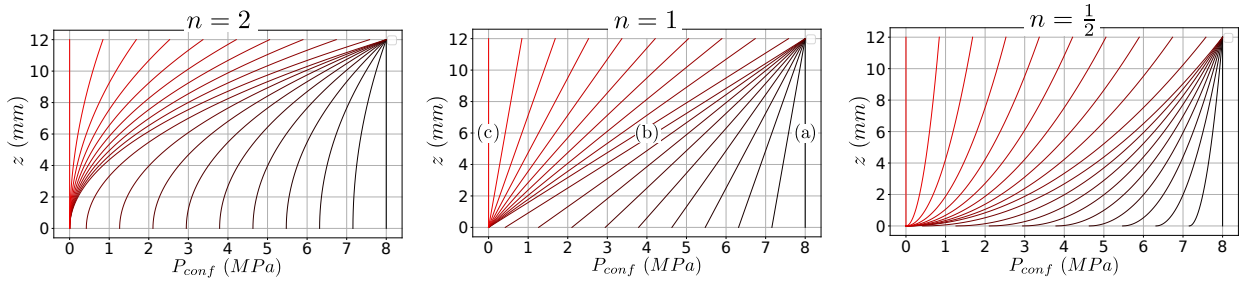


FIGURE 3.7 – Évolution des profils axiaux de pression de confinement à différents instants (en noir à t_i et en rouge vif à t_f) pour différentes valeurs de n .

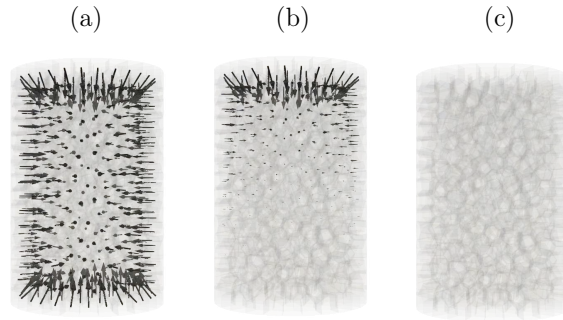


FIGURE 3.8 – Représentation des efforts appliqués par la pression de confinement à différents instants de la dépressurisation (à t_i (a), à $t_f/2$ (b) et à t_f (c), voir figure 3.7 au centre) pour $n = 1$.

Pour ces simulations, les paramètres utilisés dans le modèle sont ceux qui permettent de représenter le comportement à rupture du combustible. Ainsi, les paramètres qui ont été utilisés en section 2.3.2 pour déterminer la pression de confinement à partir de laquelle la fragmentation intervient (lorsque cette pression est uniforme) sont retenus, à savoir :

3.2. Modélisation de la fragmentation du combustible sous l'effet de la dépressurisation du crayon

- Une fraction surfacique de zones cohésives initialement rompues et pressurisées de $f_s^* = 0.27$.
- Une contrainte à rupture du joint de granulats de $R_{max} = 70 \text{ MPa}$.
- Une sur-pression des bulles intergranulaires constante au cours du temps et égale à $P_{eff}^{czm} = 52 \text{ MPa}$ ³.

Ainsi, grâce à l'étude présentée précédemment, nous savons que pour le triplet de paramètres retenu, le combustible reste intègre lorsqu'une pression de confinement de 8 MPa lui est appliqué et est fragmenté lorsque cette pression est nulle (cf. section 2.3.2). Il s'agit donc de déterminer l'instant t_{crit} à partir duquel le combustible se fissure durant la chute de pression du crayon. Connaissant cet instant, le profil de pression de confinement critique (la pression à partir de laquelle la pastille se fissure) peut ensuite être déterminé à partir des équations (3.22)-(3.24).

L'instant de rupture t_{crit} est défini comme étant le temps à partir duquel l'incrément de fraction surfacique des zones cohésives rompues par le chargement (i.e. la fraction surfacique de zones cohésives qui sont rompues sans compter les zones initialement rompues et pressurisées) devient non-nulle⁴. Cette fraction surfacique, notée Δf_s^* , est définie par :

$$\Delta f_s^* = \frac{S_{\beta=0} - S_{\beta=0}^{ini}}{S_{tot}^{ini}} \quad (3.25)$$

où $S_{\beta=0}$ et $S_{\beta=0}^{ini}$ sont les surfaces de zones cohésives rompues à l'instant t et t_i respectivement et S_{tot}^{ini} est la surface totale de zones cohésives à l'instant initial (saines et rompues). Un exemple de l'évolution de Δf_s^* au cours du temps est illustré figure 3.9. Dans ce cas, l'instant de rupture est de $t_{crit} = 0.35 \text{ s} = 0.58 t_f$. Le profil de pression critique, illustré figure 3.10, peut donc être déduit en injectant $t = t_{crit}$ dans l'équation (3.24).

3. Rappelons que le choix de cette sur-pression revient à supposer que la fissuration du combustible intervient à une température 1073 K .

4. En particulier, le temps critique a été défini comme le moment où la fraction surfacique de zones cohésives rompues par le chargement est supérieur à $\Delta f_s^* = 0.01 \%$.

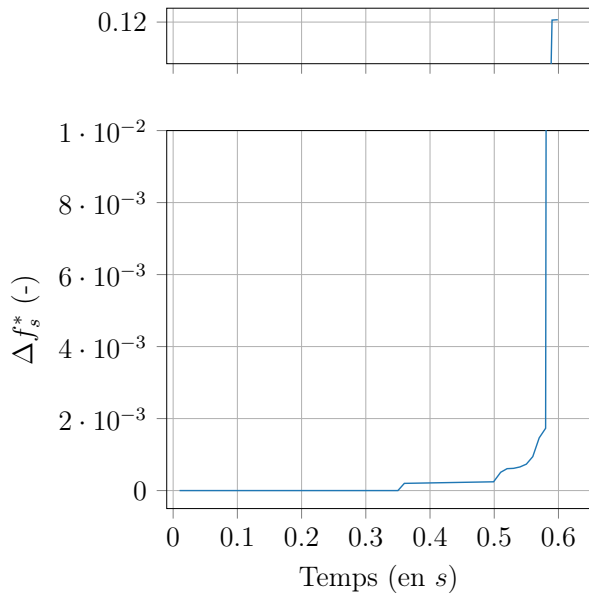


FIGURE 3.9 – Évolution de la fraction surfacique de zones cohésives rompues suite au chargement en fonction du temps (en s).

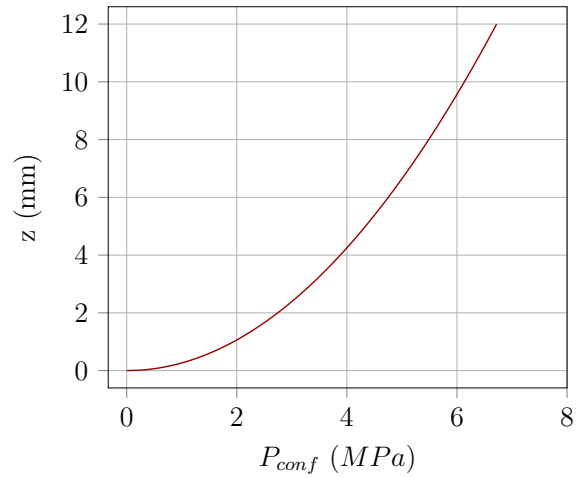


FIGURE 3.10 – Évolution axiale de la pression de confinement critique (à $t = t_{crit}$) correspondant (en MPa) pour $n = 0.5$.

Les conditions aboutissant à la fragmentation dans le modèle, lorsque la pression de confinement est variable, sont déterminées par la suite. Pour ce faire, dans un premier temps, l'influence des paramètres aléatoires du modèle dans ces conditions de chargement est étudiée.

Le premier paramètre aléatoire du modèle est la distribution spatiale des zones cohésives rompues et pressurisées, de fraction surfacique f_s^* . Comme mentionné en section 2.2.2, cette distribution spatiale est aléatoire et différente pour chaque calcul.

Le second paramètre aléatoire est la morphologie des fragments élémentaires. En effet, avec la méthode implémentée pour générer la pastille, la forme des fragments élémentaires suit une statistique choisie à l'avance mais n'est pas déterministe (cf. annexe C.4). Comme les surfaces entre fragments définissent les interfaces qui peuvent se fissurer, les chemins de fissuration suivent donc également une certaine statistique.

Pour déterminer l'influence de ces paramètres, les calculs suivants sont réalisés :

- Pour l'étude de la distribution spatiale des zones cohésives initialement rompues et pressurisées (calculs 1 et 2). Ces deux calculs sont réalisés dans les mêmes conditions (i.e. avec des propriétés, un chargement et une pastille – l'ensemble des fragments élémentaires – identiques) mais une distribution spatiale différente.
- Pour l'étude de la morphologie des fragments élémentaires (calculs 2 et 3). Ces deux simulations sont réalisées dans les mêmes conditions (propriétés et chargement identiques et une distribution spatiale de zones cohésives différente), mais avec deux pastilles différentes (pastilles 1 et 2). La taille moyenne des fragments de ces deux pastilles est similaire (et cette taille est quasiment uniforme dans la pastille) mais la forme des fragments est différente.

Pour l'ensemble de ces calculs (1 à 3), nous avons choisi un profil axial de la pression est

3.2. Modélisation de la fragmentation du combustible sous l'effet de la dépressurisation du crayon

linéaire ($n = 1$ dans l'équation (3.24)).

Dans un second temps, l'influence de la forme des profils de pression sur le comportement à rupture de la pastille est étudiée (calcul 3, 4 et 5). Pour ce faire, les calculs sont réalisés dans des conditions similaires (la morphologie des fragments est identique mais, la distribution spatiale des zones cohésives pressurisées est différente) mais avec un profil de pression différent. Pour ces calculs, désignés par les numéros 3, 4 et 5, l'exposant n de la loi de pression de confinement (voir équation (3.24)) sont de 1, $\frac{1}{2}$ et 2 respectivement.

Pour les différents calculs réalisés, les paramètres d'entrée, les instants de rupture sont résumés dans le tableau 3.1. Dans ce tableau, est également reportée la pression de confinement critique volumique moyenne. Comme la pression est constante pour une position axiale donnée, cette moyenne s'écrit :

$$\langle P_{conf}^{crit} \rangle = \frac{1}{h} \int_0^h P_{conf}^{crit}(z) dz \quad (3.26)$$

Numéro du calcul	Numéro de la pastille	n exposant de la loi de pression	Instant à rupture $\frac{t}{t_f}$ (-)	$\langle P_{conf}^{crit} \rangle$ Pression moyenne à rupture (MPa)
1	1	1	0.52	3.9
2	1	1	0.5	4
3	2	1	0.45	4.4
4	2	2	0.58	2.2
5	2	1/2	0.75	2.66




 Distribution spatiale
  Morphologie des fragments
  Profil de pression

TABLE 3.1 – Résumé des paramètres d'entrée des différents calculs.

Connaissant les instants de rupture de chaque calcul, les profils de pression critiques sont déterminés. Les profils obtenus pour chaque calcul sont reportés sur la figure 3.11. D'après cette figure :

- Concernant l'étude de l'impact des paramètres aléatoires (calculs 1, 2 et 3), la dispersion des résultats est faible (l'écart entre les pressions critiques est de moins de 1 MPa quel que soit z). Par conséquent, la distribution spatiale des zones cohésives (courbes en pointillés rouges) et la morphologie des fragments (courbes en orange) ont peu d'influence sur le comportement à rupture du combustible à cette échelle et pour ces conditions de chargement.
- Concernant l'étude de l'influence du profil de pression (calculs 3, 4 et 5, courbes cyans), les écarts entre les pressions de confinement critique appliquées localement (à un z donné) sont importants (jusqu'à plus de 3.5 MPa). En revanche, les valeurs moyennes de ces pressions sont proches (voir tableau 3.1). Il semble donc que la pression de confinement moyenne à l'échelle d'une pastille soit un paramètre pertinent pour déterminer le comportement à rupture du combustible.

3.2. Modélisation de la fragmentation du combustible sous l'effet de la dépressurisation du crayon

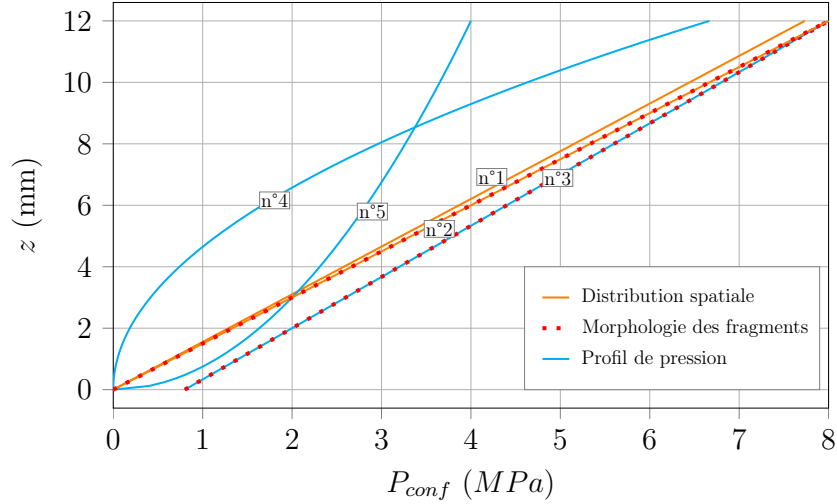


FIGURE 3.11 – Profil de pression de confinement à rupture pour les différentes simulations.

Par conséquent, il est possible de définir une valeur de pression de confinement critique moyenne $\langle P_{conf}^{crit} \rangle$ à partir de laquelle la fissuration du combustible est amorcée durant la perte d'étanchéité du crayon. D'après les résultats de simulations (cf. tableau 3.1), cette pression critique moyenne est comprise entre 2.2 et 4.4 MPa. Afin de prédire cette pression critique, nous proposons de retenir le critère d'amorce de fissure défini en section 2.3.2, sachant que ce critère a permis de déterminer le champ de pression critique dans les conditions d'un recuit à pression de confinement contrôlée (pour un champ de pression uniforme). Pour ce faire, la pression de confinement est substituée par sa valeur moyenne dans l'équation (2.69), ce qui permet de ré-exprimer le critère comme :

$$\langle P_{conf}^{crit} \rangle = f_s^* P_{eff}^{czm} - \frac{R_{max}}{C_\sigma} \quad \text{en rappelant que} \quad C_\sigma \in [5.81, 9.11] \quad (3.27)$$

avec $f_s^* = 0.27$, $R_{max} = 70 \text{ MPa}$ et $P_{eff}^{czm} = 52 \text{ MPa}$. D'après cette équation et les résultats de simulation, l'encadrement de la pression de confinement moyenne critique est le suivant :

$$\langle P_{conf}^{crit} \rangle \in \underbrace{[2.2, 4.4] \text{ MPa}}_{\text{D'après les simulations}} \subset \underbrace{[2, 6.3] \text{ MPa}}_{\text{D'après (3.27)}} \subset \underbrace{[0, 8] \text{ MPa}}_{\text{Borne de la pression du crayon}}$$

Ainsi, l'encadrement de la pression critique obtenu grâce au critère d'amorce de fissure est cohérent avec les résultats de simulations. Ce critère semble donc effectivement applicable pour déterminer le chargement à rupture de la pastille lors de la dépressurisation du crayon et ce, indépendamment de la variation des paramètres aléatoires et de la forme du profil de pression.

Ce dernier point est à confirmer en modélisant l'écoulement du gaz de remplissage hors du crayon dans ces calculs. Dans cette optique, un couplage fluide-granulats adapté aux corps polyédriques a été implémenté. Ces développements sont présentés par la suite.

3.3 Modélisation de l'écoulement par une approche de type fluide non-résolu

Dans le cadre de notre étude, nous souhaitons modéliser l'écoulement du gaz de remplissage afin de prendre en compte l'effet de la dépressurisation du crayon sur le comportement du combustible. Afin de représenter cet écoulement, une modélisation de type fluide "non-résolu" est retenue. Pour ces modèles, les variables relatives à l'écoulement (vitesse et pression du fluide) sont moyennées sur un élément de volume en prenant en compte la présence d'un milieu granulaire. La taille caractéristique de cet élément de volume, notée l_f , est définie de manière à respecter la condition suivante :

$$l_f \gg \langle d \rangle \quad (3.28)$$

en rappelant que $\langle d \rangle$ est la taille moyenne des granules. D'après (3.28), il y a une séparation d'échelle entre les champs moyennés, qui décrivent l'écoulement du fluide et les champs locaux, qui décrivent la dynamique des granules. La figure 3.12 illustre la discrétisation du domaine de fluide par le maillage éléments finis et les granules immergés dans ce fluide.

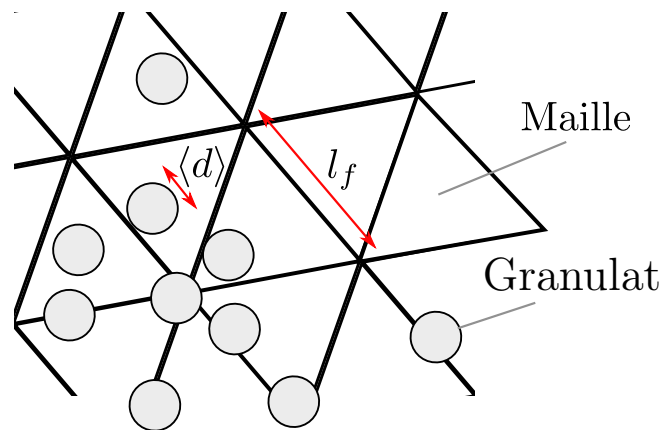


FIGURE 3.12 – Schéma du maillage éléments finis et des granules.

Ce type de méthode permet de s'affranchir d'une résolution des équations de Navier-Stokes à l'échelle des granules. Les équations régissant les champs moyennés, relatifs à l'écoulement du fluide, sont résolues par la méthode des éléments finis, grâce au code de calcul MIGFLOW [32]. Ce code est couplé à LMGC90 [39] afin de modéliser la dynamique de contact entre les granules. Ce couplage fluide-granules permet d'une part, de bénéficier de la richesse de la description des phénomènes micromécaniques intervenants à l'échelle des surfaces du granule (fissuration, contact frottant, etc.) et d'autre part, d'évaluer l'effet de l'écoulement de fluide en un temps de calcul raisonnable.

Le maillage éléments finis 3D sur lequel l'écoulement est résolu ainsi que les granules sont illustrés figure 3.13. Pour les calculs présentés dans cette section, la taille caractéristique du maillage est confondue avec la taille caractéristique du volume sur lequel les champs de fluide sont moyennés vaut $l_f = 3 \text{ mm}$ et la taille des granules sphériques est de $\langle d_{sp} \rangle = 0.5 \text{ mm}$.

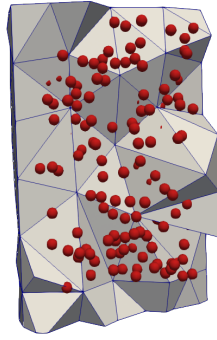


FIGURE 3.13 – Illustration du maillage éléments finis en 3D dont certaines mailles sont supprimées afin de visualiser les granulats.

Le couplage fluide-granulats existant permet de modéliser le comportement de milieu granulaire immergé dans diverses configurations. Néanmoins, son application est limitée au cas de milieux granulaires composés de granulats sphériques. Or, pour le modèle DEM-CZM utilisé, les fragments de combustible doivent être représentés par des polyèdres. Afin de pallier cela, la méthode de couplage fluide-granulats existante a été adaptée pour prendre en compte des corps polyédriques. L'objet de cette section est de présenter les développements réalisés.

3.3.1 Présentation de la modélisation de type fluide non-résolu

Afin de modéliser l'écoulement du gaz par une approche de type fluide "non-résolu", les champs décrivant cet écoulement sont moyennés par le biais d'une fonction de pondération, notée g^{mf} . En retenant l'approche de Anderson et Jackson [3], cette fonction est définie telle que :

$$4\pi \int_{\Omega} g^{mf}(r)r^2 dr = 1, \quad (3.29)$$

où Ω désigne la totalité du domaine et r la distance entre deux points de l'espace. Avec cette fonction de pondération, la moyenne spatiale d'une quantité scalaire χ est définie par :

$$\phi_f(\vec{x})\langle\chi\rangle^f(\vec{x}) = \int_{\Omega_f} \chi(\vec{y})g^{mf}(\|\vec{x} - \vec{y}\|) dV_y \quad (3.30)$$

où $\langle\chi\rangle^f(\vec{x})$ est la valeur moyenne de χ dans le domaine fluide Ω_f évaluée à la position \vec{x} , dV_y est un élément de volume avoisinant la position \vec{y} et ϕ_f est la fraction volumique du fluide ou porosité. Par souci de concision, les champs moyennés au sens de l'équation (3.30) sont notés en gras : $\chi(\vec{x}) = \langle\chi\rangle^f(\vec{x})$

Par la suite, nous considérons que les granulats sont complètement immergés dans le fluide, par conséquent la porosité est reliée à la compacité des granulats sphérique ψ_{sp} selon :

$$\phi_f = 1 - \psi_{sp} \quad (3.31)$$

Cette porosité est calculée au $n_i^{\text{ième}}$ nœud du maillage élément fini d'après :

$$\phi_f^{n_i} = 1 - \sum_{\vec{x}_\gamma \in \Omega_{n_i}} \frac{V_\gamma}{\|\Omega_{n_i}\|} \quad (3.32)$$

où \vec{x}_γ et V_γ sont respectivement la position et le volume du granulat γ appartenant au volume Ω_{n_i} attaché au nœud n_i . Cette valeur nodale est ensuite interpolée afin d'obtenir l'expression de ϕ_f en tout point de l'espace.

En multipliant les membres des équations de Navier-Stokes incompressibles (3.5)-(3.6) par la fonction de pondération g^{mf} et intégrant sur Ω_f le système d'équations régissant l'écoulement du fluide dans le modèle devient :

$$\frac{\partial \rho_f \phi_f \vec{v}_f}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot [\rho_f \phi_f \vec{v}_f \otimes \vec{v}_f] = -\phi_f \vec{\nabla} P_f + \vec{\nabla} \cdot [2\phi_f \eta_f \vec{\nabla}_s \vec{v}_f] + \rho_f \phi_f \vec{g} \quad (3.33)$$

$$+ \sum_{\gamma \in \mathcal{S}} \vec{F}_{f,\gamma} \delta^{Dirac}|_{\vec{x}_\gamma}$$

$$\frac{\partial \phi_f}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\phi_f \vec{v}_f) = 0 \quad (3.34)$$

où $\vec{F}_{f,\gamma}$ est la force exercée par le fluide sur le granulat γ , \mathcal{S} est l'ensemble des indices des granulats appartenant au domaine et $\delta^{Dirac}|_{\vec{x}_\gamma}$ est la fonction de Dirac évaluée à la position \vec{x}_γ du granulat γ .

En l'état, le système d'équations (3.33)-(3.34) comporte plus d'inconnues (\vec{v}_f , P_f et $\vec{F}_{f,\gamma}$, soit 7 inconnues scalaires) que d'équations (6 équations scalaires), il est donc nécessaire d'introduire une équation de fermeture. Pour cela, l'expression de la force d'interaction fluide-granulats doit être obtenue. Cette expression pourrait être déterminée en intégrant les contraintes appliquées par le fluide sur les surfaces de chaque granulat, mais cette intégration ne peut être réalisée car le fluide n'est pas représenté à cette échelle d'après (3.28) (les champs de vitesses et de pression du fluide ne sont pas connus au niveau local). Pour pallier cela, la force exercée par le fluide sur les granulats est déterminée par une corrélation empirique. Lorsque les granulats sont sphériques, cette force s'exprime comme [33] :

$$\vec{F}_{f,\gamma} = -V_\gamma \vec{\nabla} P_f|_{\vec{x}_\gamma} - \vec{f}_{drag,\gamma} \quad (3.35)$$

où V_γ est le volume du corps γ et $\vec{f}_{drag,\gamma}$ la force de traînée de vitesse qui s'exprime comme :

$$\vec{f}_{drag,\gamma} = \underbrace{\phi_f^{-1.8}|_{\vec{x}_\gamma} \pi r_{g,\gamma}^2 \frac{\rho_f}{2} \left(0.63 \|\vec{v}_\gamma - \vec{v}_f\|^{0.5} + 4.8 \left[\frac{\eta_f}{2r_{g,\gamma} \rho_f \phi_f|_{x_\gamma}} \right]^{0.5} \right)^2}_{K^{drag}(\phi_f, \vec{x}_\gamma, \vec{v}_\gamma, \vec{v}_f)} (\vec{v}_\gamma - \vec{v}_f) \quad (3.36)$$

où \vec{v}_γ et $r_{g,\gamma}$ sont respectivement la vitesse et le rayon du $\gamma^{i\text{ème}}$ granulat et K^{drag} est un facteur de paramétrisation.

3.3.2 Présentation de la méthode de couplage existante sur des corps sphériques

Cette méthode de résolution du fluide a été couplée à la dynamique de contact non-régulière afin de modéliser le comportement des milieux granulaires immergés [33]. Ce couplage consiste à déterminer les champs relatifs au fluide en résolvant les équations présentées

précédemment. Cette résolution permet alors de déterminer les forces de traînée, forces qui sont ensuite appliquées aux granulates afin de résoudre leur dynamique de contact. Afin de déterminer l'évolution temporelle des champs provenant de la résolution du fluide d'une part et du contact d'autre part, un schéma de couplage explicite a été retenu. Ainsi, à chaque étape de résolution du fluide, les variables issues de la résolution de la dynamique de contact sont connues et inversement.

Afin de résoudre l'écoulement du fluide, les équations (3.33) et (3.34) sont discrétisées temporellement. Par la suite, les indices j et $j + 1$ désignent les valeurs de la variable à l'instant t_j et $t_j + \Delta t$ respectivement telles que $t_j < T_f$ avec T_f le temps de simulation. La résolution de l'écoulement consiste alors à déterminer P_f^{j+1} et \vec{v}_f^{j+1} tels que :

$$\rho_f \frac{\vec{v}_f^{j+1} \phi_f^{j+1} - \vec{v}_f^j \phi_f^j}{\Delta t} + \vec{\nabla} \cdot [\rho_f \phi_f^{j+1} \vec{v}_f^{j+1} \otimes \vec{v}_f^j] = -\phi_f^j \vec{\nabla} P_f^{j+1} + \vec{\nabla} \cdot [2\phi_f^j \eta_f \vec{\nabla}_s \vec{v}_f^{j+1}] \quad (3.37)$$

$$+ \rho_f \phi_f^j \vec{g} - \sum_{\gamma \in \mathcal{S}} \vec{F}_{f,\gamma}^{j+1} \delta^{Dirac}|_{\vec{x}_\gamma}$$

$$\frac{\phi_f^j - \phi_f^{j-1}}{\Delta t} + \vec{\nabla} \cdot (\phi_f^{j+1} \vec{v}_f^{j+1}) = 0 \quad (3.38)$$

Pour déterminer la force de traînée $\vec{F}_{f,\gamma}^{j+1}$ dans (3.37), il est nécessaire de connaître la vitesse des granulates (voir équations (3.35)-(3.36)) à l'itération $j + 1$. Or, comme le couplage est explicite, cette vitesse n'est pas connue à cet instant, elle doit donc être estimée. Pour cela, connaissant les efforts de contact appliqués aux granulates à l'itération j , notés \vec{f}_γ^j , la vitesse estimée \vec{v}_γ^* peut être déterminée à partir du principe fondamental de la dynamique, qui avec la discrétisation temporelle retenue, s'exprime comme :

$$\frac{\vec{v}_\gamma^* - \vec{v}_\gamma^j}{\Delta t} = \vec{g} + \frac{1}{m_\gamma} (\vec{F}_{f,\gamma}^{j+1} + \vec{f}_\gamma^j). \quad (3.39)$$

Connaissant l'expression de la vitesse estimée, la force de traînée peut alors être déterminée par la relation suivante :

$$\vec{F}_{f,\gamma}^{j+1} = -V_\gamma \vec{\nabla} P_f^{j+1}|_{\vec{x}_\gamma^j} - K^{drag}(\phi^j, \vec{x}_\gamma^j, \vec{v}_\gamma^j, \vec{v}_f^j) (\vec{v}_\gamma^* - \vec{v}_f^{j+1}). \quad (3.40)$$

Cette force de traînée est ensuite appliquée aux granulates comme une force externe afin de résoudre la dynamique de contact.

Pour des raisons de stabilité numérique, le couplage fluide-granulates est résolu par un schéma d'intégration temporelle de prédiction-corrrection. Le principe de ce schéma est le suivant (pour $\gamma \in \mathcal{S}$) :

0. Tout d'abord, connaissant le volume et la position des granulates ($V_\gamma^i, \vec{x}_\gamma^i$, respectivement), la porosité est déterminée par l'équation (3.32).

1. À l'étape de prédiction, connaissant la porosité, la vitesse du fluide, la vitesse des granulates et les forces de contact appliquées aux granulates ($\phi_f^{i-1}, \phi_f^i, \vec{v}_f^i, \vec{v}_\gamma^i, \vec{f}_\gamma^i$), le fluide est résolu afin de déterminer la vitesse de fluide et les forces de traînée prédites (\vec{v}_f^{pred} et $\vec{F}_{f,\gamma}^{pred}$, respectivement). Ces forces de traînée sont ensuite appliquées comme des efforts extérieurs en chacun des granulates ($\vec{F}_{f,\gamma} = \vec{F}_{ext,\gamma}$). Connaissant ces efforts, la dynamique de contact est résolue grâce à la NSCD (voir section 2.1.4.1). Afin d'éviter les interpénétrations entre granulates, la NSCD est résolue en N_Δ sous-pas de temps $\Delta t' = \Delta t/N_\Delta$. À l'issue de cette résolution, les positions, les vitesses et les forces de contact prédites des granulates ($\vec{x}_\gamma^{pred}, \vec{v}_\gamma^{pred}, \vec{f}_\gamma^{pred}$, respectivement) sont connues. L'ensemble des variables (le temps et les champs relatifs au fluide et aux granulates) sont ensuite réinitialisées, sauf la vitesse prédite des granulates (\vec{v}_γ^{pred}) qui est conservée.
2. À l'étape de correction, connaissant la porosité, la vitesse du fluide et les efforts de contact à l'itération i (et la porosité à l'itération $i-1$) et la vitesse prédite des granulates \vec{v}_γ^{pred} , le fluide est une nouvelle fois résolu afin de déterminer une vitesse et une force de traînée corrigées (\vec{v}_f^{corr} et $\vec{F}_{f,\gamma}^{corr}$, respectivement).
3. Enfin, la vitesse de fluide et la force de traînée finale (\vec{v}_f^{i+1} et $\vec{F}_{f,\gamma}^{i+1}$ respectivement) sont déterminées comme étant la moyenne des solutions prédites et corrigées, selon les équations (3.41) et (3.42) respectivement :

$$\vec{v}_f^{i+1} = \zeta \vec{v}_f^{pred} + (1 - \zeta) \vec{v}_f^{corr} \quad (3.41)$$

$$\vec{F}_{f,\gamma}^{i+1} = \zeta \vec{F}_{f,\gamma}^{pred} + (1 - \zeta) \vec{F}_{f,\gamma}^{corr} \quad (3.42)$$

avec $\zeta \in [0, 1]$ une variable de pondération des solutions prédites et corrigées.

À partir des forces de traînée finales $F_{f,\gamma}^{i+1}$, la dynamique de contact entre granulates est résolue une seconde fois afin de déterminer la vitesse des granulates et les forces de contact finales.

Afin d'apprécier l'évolution des variables au cours des différentes itérations, ce schéma d'intégration est résumé par la suite (voir [33] pour une présentation détaillée de l'algorithme) :

Algorithme 2 Algorithme de résolution du coupage fluide-granulats pour des corps sphériques

tant que $t < t_f$ **faire**

Calcul de ϕ_f^i connaissant $(\vec{x}_\gamma^i, V_\gamma^i)$ d'après (3.32)

Prédiction

Calcul de $(\vec{v}_f^{pred}, \vec{F}_{f,\gamma}^{pred})$ connaissant $(\phi_f^{i-1}, \phi_f^i, \vec{v}_f^i, \vec{v}_\gamma^i, \vec{f}_\gamma^i)$ à partir de (3.37) - (3.40)

$\Delta t' = \Delta t / N_\Delta$, $t' = t$

tant que $t' < t + \Delta t$ **faire**

Calcul de $(\vec{x}_\gamma^{pred}, \vec{v}_\gamma^{pred}, \vec{f}_\gamma^{pred})$ connaissant $(\vec{x}_\gamma^i, \vec{v}_\gamma^i, \vec{F}_{f,\gamma}^{pred})$ grâce à la NSCD (voir 2.1.4.1)

$t' \leftarrow t' + \Delta t'$

fin tant que

Réinitialisation du calcul en conservant \vec{v}_γ^{pred}

Correction

Calcul de $(\vec{v}_f^{corr}, \vec{F}_{f,\gamma}^{corr})$ connaissant $(\phi_f^{i-1}, \phi_f^i, \vec{v}_f^i, \vec{v}_\gamma^{pred}, \vec{f}_\gamma^i)$ à partir de (3.37) - (3.40)

Solution fluide

Calcul de $(\vec{v}_f^{i+1}, \vec{F}_{f,\gamma}^{i+1})$ d'après les équations (3.41) et (3.42) respectivement

$\Delta t' = \Delta t / N_\Delta$, $t' = t$

tant que $t' < t + \Delta t$ **faire**

Calcul de $(\vec{x}_\gamma^{i+1}, \vec{v}_\gamma^{i+1}, \vec{f}_\gamma^{i+1})$ connaissant $(\vec{x}_\gamma^i, \vec{v}_\gamma^i, \vec{F}_{f,\gamma}^{i+1})$ grâce à la NSCD (voir 2.1.4.1)

$t' \leftarrow t' + \Delta t'$

fin tant que

$t \leftarrow t + \Delta t$

fin tant que

Pour le couplage présenté dans cette partie, l'expression de la force de traînée (3.36) n'est valable que pour des sphères. En cela, ce couplage n'est pas directement applicable dans le cadre de notre étude, pour laquelle les fragments élémentaires doivent être représentés par des polyèdres. Afin de pallier cela, une interface numérique a été implémentée afin de prendre en compte la présence de corps polyédriques dans le couplage fluide-granulats existant. Le principe de cette implémentation est présenté dans la section qui suit.

3.3.3 Implémentation d'une interface numérique permettant d'adapter le couplage fluide-granulats au cas de corps polyédriques

3.3.3.1 Génération des corps sphériques

Dans cette partie, les granulats sont représentés par des fragments élémentaires polyédriques dans la modélisation couplant fluide non-résolu et dynamique de contact. Pour ce faire, chacun des fragments élémentaires polyédriques est discrétisé en une collection de sphères. Ces sphères sont des objets fictifs au sens où elles n'interviennent pas dans la résolution de la dynamique de contact, mais sont utilisées lors de la résolution de l'écoulement de fluide pour calculer :

- La force de traînée appliquée aux fragments élémentaires \vec{F}_f , comme nous le verrons par la suite.
- La porosité ϕ_f à partir de l'équation (3.32).

De ce fait, ces sphères peuvent être vues comme une discrétisation ponctuelle des fragments, représentative du squelette poreux du combustible fragmenté à travers lequel le fluide

3.3. Modélisation de l'écoulement par une approche de type fluide non-résolu

s'écoule. De même, les fragments polyédriques sont également des objets fictifs du point de vue de l'écoulement de fluide puisqu'ils n'interviennent que dans la résolution de la dynamique de contact.

Pour une collection de sphères \mathcal{S}^α associée au fragment α , la sphère γ est définie comme étant fixe dans le repère local \mathcal{R}^α du fragment si $\gamma \in \mathcal{S}^\alpha$. Le mouvement de la sphère γ dans le repère absolu \mathcal{R}^Ω est donc imposé par la cinématique du fragment α et le déplacement relatif entre deux sphères d'une même collection n'est pas permis.

Afin de définir ces collections, dans un premier temps, un ensemble de sphères est placé dans un cylindre aux dimensions de la pastille, puis sédimenté sous gravité pour obtenir un assemblage de sphères compact. L'assemblage de sphères obtenu est illustré figure 3.14.a.

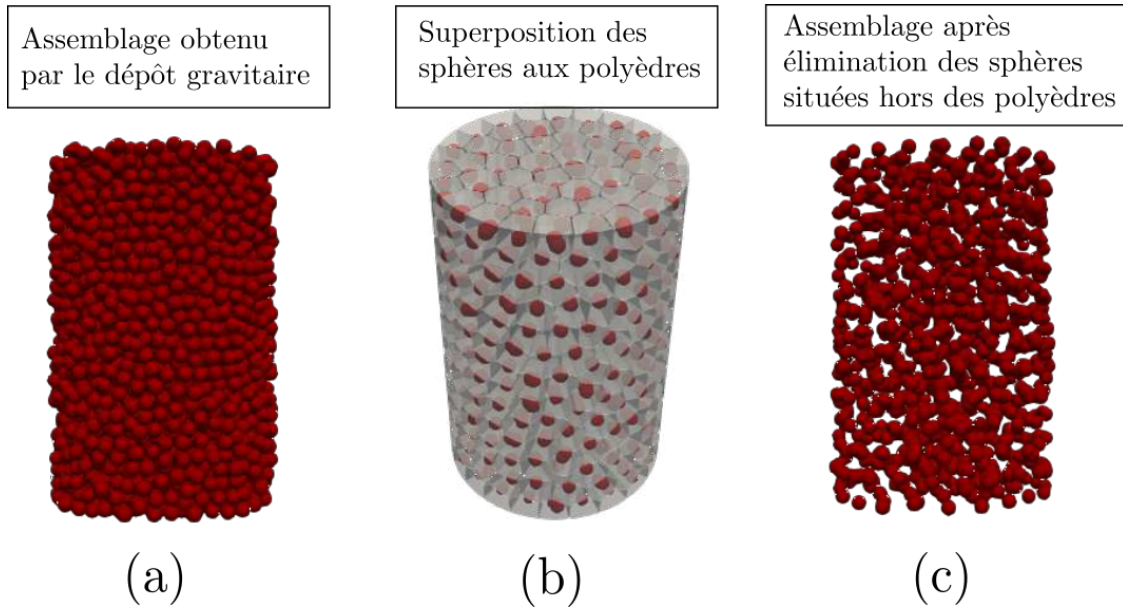


FIGURE 3.14 – Illustration d'un empilement de sphères superposé aux fragments élémentaires.

Dans un second temps, les fragments élémentaires composant la pastille sont superposés à cet assemblage, comme illustré figure 3.14.b. Dans cette configuration, les positions des corps (sphères et fragments) étant connues, les sphères peuvent être associées à leur polyèdre respectif. Afin d'éviter leur interpénétration lors de la résolution du calcul, seules les sphères dont le volume est contenu dans un polyèdre donné sont associées à ce dernier⁵. La condition permettant de définir si une sphère γ est contenue dans un polyèdre α s'exprime comme :

$$[\vec{x}_\gamma + r_{g,\gamma}\vec{n}_f - \vec{c}_f] \cdot \vec{n}_f \leq 0, \quad \forall f \in [1, \dots, N_f^\alpha] \quad (3.43)$$

où $r_{g,\gamma}$ est le rayon de la $\gamma^{\text{ième}}$ sphère, \vec{n}_f et \vec{c}_f sont respectivement les normales et les centres de la $f^{\text{ième}}$ surface du polyèdre α qui contient N_f^α surfaces. Les sphères ne respectant pas le critère défini par l'équation (3.43) sont éliminées du calcul. L'assemblage de sphères obtenu suite à cette élimination est illustré figure 3.14.c. Pour les calculs présentés par la suite, le nombre de sphères par polyèdre est d'environ 1.6 après élimination.

5. En effet, s'il y a interpénétration, le volume total de ces sphères diminue ce qui rend invalide l'équation de conservation de la masse (3.34). L'interpénétration peut donc empêcher la résolution du calcul.

3.3.3.2 Calcul des efforts appliqués par le fluide sur les fragments polyédriques

Grâce à la définition des sphères, la porosité est déterminée par le biais de l'équation (3.32). Connaissant la porosité, l'écoulement de fluide peut être résolu. À l'issue de cette résolution, une force de traînée est calculée en chacune des sphères. Ces forces sont ensuite communiquées aux polyèdres afin de résoudre la dynamique de contact : l'effort $\vec{F}_{f,\gamma}$ exercé sur une sphère $\gamma \in \mathcal{S}^\alpha$ est appliquée au polyèdre α à la position \vec{x}_γ , comme une force extérieure. L'ensemble des forces appliquées au niveau des sphères engendre alors des résultantes d'efforts et de moments qui sont déterminées par les équations (3.44) et (3.45) respectivement :

$$\vec{F}_{ext,\alpha} = \sum_{\gamma \in \mathcal{S}^\alpha} \vec{F}_{f,\gamma} \quad (3.44)$$

$$\vec{M}_{ext,\alpha}|_{\mathcal{R}_\alpha} = \sum_{\gamma \in \mathcal{S}^\alpha} A|_{\mathcal{R}_\Omega \rightarrow \mathcal{R}_\alpha} \cdot \vec{M}_{ext,\alpha}|_{\mathcal{R}_\Omega} \quad (3.45)$$

où $A|_{\mathcal{R}_\Omega \rightarrow \mathcal{R}_\alpha}$ est la matrice de passage du référentiel absolu \mathcal{R}_Ω au référentiel \mathcal{R}_α local du fragment α et $\vec{M}_{ext,\alpha}|_{\mathcal{R}_\Omega}$ est le moment engendré par la force appliquée en \vec{x}_γ dans le référentiel \mathcal{R}_Ω et qui s'exprime comme :

$$\vec{M}_{ext,\alpha}|_{\mathcal{R}_\Omega} = \overrightarrow{GM}_\gamma|_{\mathcal{R}_\Omega} \wedge \vec{F}_{f,\gamma}|_{\mathcal{R}_\Omega} \quad (3.46)$$

avec $\overrightarrow{GM}_\gamma$ le vecteur bras de levier entre le centre de la sphère γ et le barycentre du fragment α , bras de levier qui s'exprime comme :

$$\overrightarrow{GM}_\gamma = \overrightarrow{OM}_\gamma - \overrightarrow{OG}_\alpha = \vec{x}_\gamma - \vec{c}_\alpha^{bary} \quad (3.47)$$

où $\overrightarrow{OM}_\gamma$ et $\overrightarrow{OG}_\alpha$ sont respectivement les vecteurs positions du centre de la sphère γ et du barycentre du fragment α (\vec{c}_α^{bary}).

3.3.3.3 Calcul de la pseudo-force de contact des sphères

Connaissant les résultantes des efforts et des moments appliqués par le fluide sur les fragments, la dynamique de contact peut être résolue (voir algorithme 2). La vitesse, la position et les forces de contact de chacun des fragments polyédriques sont alors modifiées. Ces forces de contact interviennent dans la résolution de l'écoulement et doivent donc être communiquées au solveur fluide. Comme ces sphères n'interviennent pas dans la résolution de la dynamique de contact, les forces de contact sont calculées au niveau des polyèdres. Néanmoins, la dynamique des sphères est connue et permet de déduire une pseudo-force de contact \vec{f} qui s'exprime, pour une sphère γ , comme :

$$\vec{f}_\gamma^{i+1} = \left(\frac{\vec{v}_\gamma^{i+1} - \vec{v}_\gamma^i}{\Delta t} \right) m_\gamma - \vec{F}_{f,\gamma}^i \quad (3.48)$$

avec m_γ la masse de la $\gamma^{\text{ième}}$ sphère.

3.3.3.4 Calcul de la cinématique des sphères en fonction du mouvement des fragments polyédriques

Suite à la résolution du contact, les fragments polyédriques se sont déplacés et leurs vitesses de translation et de rotation ont changé. La position et la vitesse des sphères doivent donc

être actualisées en fonction du déplacement et de la nouvelle cinématique des fragments (ces sphères étant fixes dans le repère local du fragment). Pour ce faire, la position actualisée d'une sphère $\gamma \in \mathcal{S}^\alpha$ est déterminée par la décomposition suivante :

$$\vec{x}_\gamma = \overrightarrow{OM}_\gamma = \overrightarrow{OG}_\alpha + \overrightarrow{GM}_\gamma \quad (3.49)$$

où $\overrightarrow{OG}_\alpha$ est la position du barycentre du polyèdre α , position qui est connue suite à la résolution du contact, et $\overrightarrow{GM}_\gamma$ est le bras de levier qui est déterminé par :

$$\overrightarrow{GM}_\gamma|_{\mathcal{R}_\alpha} = A^T|_{\mathcal{R}_\Omega \rightarrow \mathcal{R}_\alpha} \cdot \overrightarrow{GM}_\gamma^{ini}|_{\mathcal{R}_\Omega} \quad (3.50)$$

où $\overrightarrow{GM}_\gamma^{ini}|_{\mathcal{R}_\Omega}$ est le vecteur bras de levier de la sphère γ au temps initial du calcul et $A^T|_{\mathcal{R}_\Omega \rightarrow \mathcal{R}_\alpha}$ est la matrice de passage du référentiel \mathcal{R}_α à \mathcal{R}_Ω (transposée de $A|_{\mathcal{R}_\Omega \rightarrow \mathcal{R}_\alpha}$), matrice qui a été actualisée suite à la rotation du polyèdre α (et donc de son référentiel \mathcal{R}_α) à l'issue de la résolution du contact.

Suite à cette actualisation, les sphères retrouvent leur position initial dans le référentiel local du fragment. Ainsi, la non-interpénétration des sphères est garantie.

De même, la vitesse actualisée d'une sphère γ est déterminée en décomposant la contribution de la vitesse de translation et de rotation du fragment α , selon :

$$\vec{v}_\gamma|_{\mathcal{R}_\alpha} = \vec{v}_\alpha|_{\mathcal{R}_\alpha} + \vec{\omega}_\alpha|_{\mathcal{R}_\alpha} \wedge \overrightarrow{GM}_\gamma|_{\mathcal{R}_\alpha} \quad (3.51)$$

avec $\vec{v}_\gamma|_{\mathcal{R}_\alpha}$ la vitesse de centre d'inertie du fragment α et $\vec{\omega}_\alpha|_{\mathcal{R}_\alpha}$ sa vitesse de rotation.

3.3.3.5 Solution du calcul

Cette partie a permis de démontrer en quoi la discrétisation des corps polyédriques en une collection de sphères "fictives" permet de déterminer les champs suivants :

- Les efforts et moments engendrés par la force de traînée du fluide sur les fragments, grâce auxquels la dynamique de contact peut être résolue.
- La vitesse et la position des granulats (sphériques) suite à la résolution du contact, grâce auxquelles la force de traînée et la porosité peuvent être évaluées. Ainsi, l'écoulement du fluide peut être résolu.

De ce fait, le couplage de la dynamique de contact et de la résolution du fluide peut être utilisé sur des corps polyédriques, en suivant le schéma de prédiction-corrrection. L'algorithme de couplage obtenu est présenté par le schéma suivant (pour $\gamma \in \mathcal{S}^\alpha$) :

3.3. Modélisation de l'écoulement par une approche de type fluide non-résolu

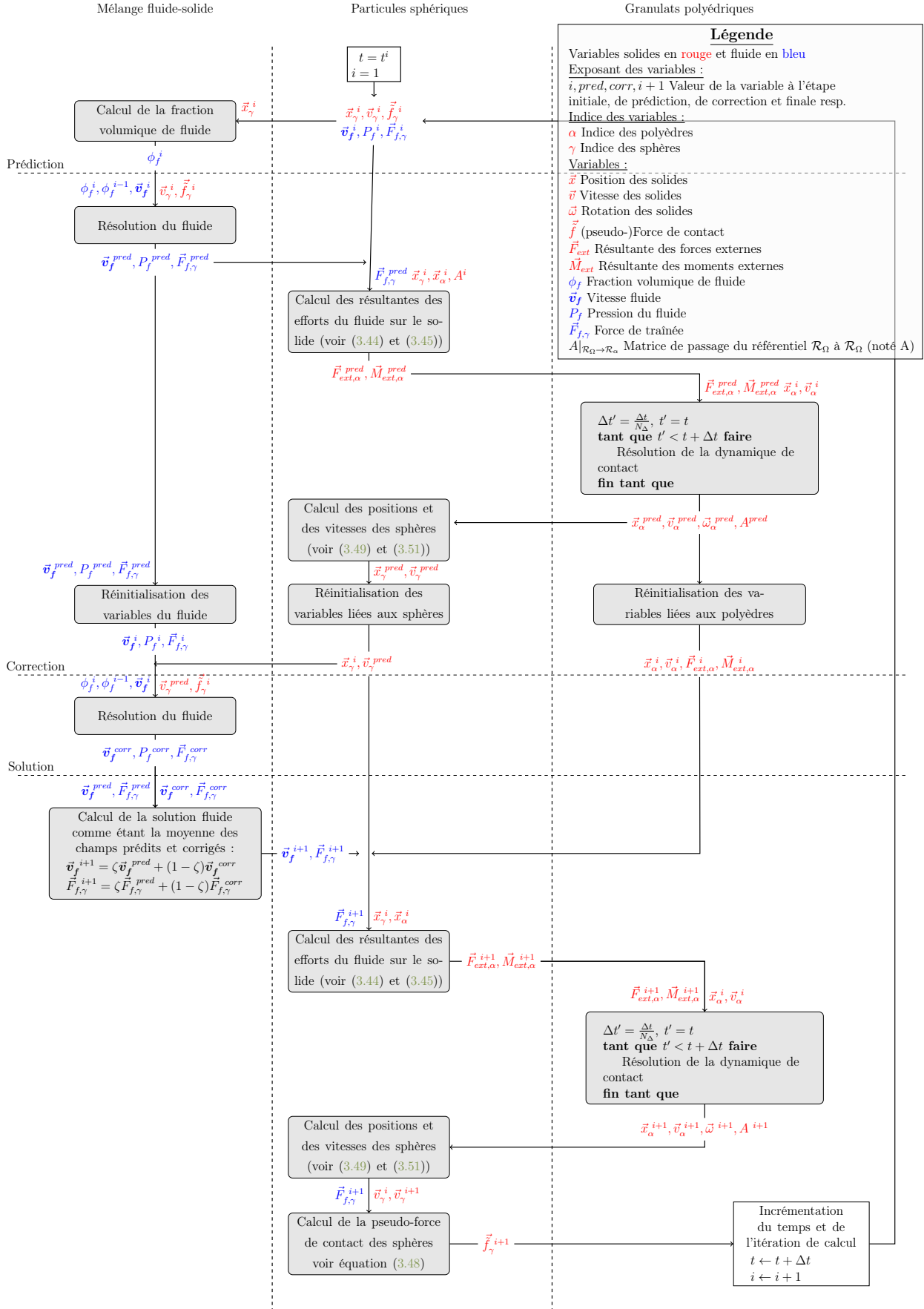


FIGURE 3.15 – Algorithme de couplage fluide-granulats adapté aux corps polyédriques

3.4 Étude de l'influence de la taille de la brèche sur l'éjection du combustible

Le couplage fluide-granulats, présenté dans la partie précédente, permet de modéliser l'écoulement d'un fluide dans un milieu granulaire composé de granulats polyédriques. Par conséquent, ce couplage peut être utilisé dans le cadre de la modélisation DEM-CZM afin d'étudier la fragmentation du combustible lors de sa relocalisation durant la dépressurisation du crayon. Les simulations présentées en section 3.2 ont donc été réalisées en prenant cette fois en compte l'écoulement du gaz de remplissage. Néanmoins, ces simulations n'ont pas permis de conclure quant au comportement à rupture du combustible dans cette situation, car les calculs présentent certaines instabilités numériques liées à des propagations d'erreurs dans l'évolution des vitesses et des pressions du fluide.

En revanche, le couplage implémenté a pu être appliqué au cas de la modélisation de l'éjection des fragments. Comme nous l'avons vu en section 3.1, la simulation DEM permet d'évaluer la capacité des fragments à être relocalisés et/ou éjectés en fonction des paramètres dont l'influence est difficilement quantifiable expérimentalement (taille des fragments, compacité du milieu, ...). Dans le cadre de cette partie, l'influence de la taille de la brèche sur le volume de fragment éjecté lors de la dépressurisation est étudiée. Cette étude consiste en particulier à déterminer les conditions dans lesquelles le milieu granulaire composé par des fragments polyédriques 3D peut s'écouler à travers la brèche lorsque sa compacité évolue fortement (la compacité des polyèdres ψ_{pr} étant de l'ordre de $\simeq 0.9$ avant relocalisation et peut diminuer d'un ordre de grandeur durant l'éjection) et en prenant en compte l'effet moteur d'un écoulement de gaz à forte cinétique.

3.4.1 Prise en compte de la turbulence par un modèle de viscosité de turbulence

Dans le cadre de cette étude, il est supposé que le gaz de remplissage est composé d'Hélium pur (l'impact de la présence des gaz de fission est négligé), sa viscosité est donc de $\eta_f = 1 \times 10^{-5} Pa.s$ et sa densité à 8 MPa et 1473 K est de $\rho_f = 2.8 kg.m^{-3}$ [78]. Afin de déterminer la nature de l'écoulement du gaz, il convient de déterminer le nombre de Reynolds durant la perte d'étanchéité du crayon. La vitesse du gaz dans ces conditions n'est pas connue, mais comme la cinétique de dépressurisation du crayon est importante (7 s), il semble raisonnable de supposer que cette vitesse est supérieure à $1 m.s^{-1}$ dans le ballon. La taille caractéristique de l'écoulement est définie comme étant la hauteur de la brèche (de l'ordre de $L_f = 10 mm$ d'après les résultats expérimentaux [128]). Par conséquent, d'après l'équation (3.7), le nombre de Reynolds est supérieur à 2000. Dans ces conditions, l'écoulement est turbulent.

Une des propriétés de la turbulence est que la fluctuation spatiale du champ de vitesse autour de sa valeur moyenne (en termes d'intensité) est non-négligeable. Or, pour le modèle de fluide non-résolu (équations (3.33) et (3.34)), les champs relatifs au fluide sont moyennés spatialement et les fluctuations de vitesse et les fluctuations de forces de traînée associées sont supposées être nulles. Par conséquent, l'effort exercé par le fluide sur les granulats est sous-estimé dans ces conditions. Afin de pallier cela et en première approche, un terme de frottement visqueux supplémentaire est introduite dans la modélisation. Pour ce faire, la

viscosité η_f dans l'équation (3.33) est remplacée par le terme suivant : $\eta'_f = \eta_f + \eta_t$ avec η_t la viscosité de turbulence. Cette "viscosité" de turbulence est une constante qui permet de rendre compte de l'impact des fluctuations de la vitesse sur l'écoulement. En cela, cette variable n'est pas une propriété du fluide, mais un paramètre caractéristique de l'écoulement.

La valeur de la viscosité de turbulence est donc définie de manière à représenter l'écoulement visé. En l'occurrence, l'évolution axiale du champ de pression dans le fluide doit être de 8 MPa sur la hauteur de la pastille. Pour ce faire, le modèle de viscosité de turbulence dans un milieu poreux de Masuoka et Takatsu [86] est utilisé. D'après l'auteur, la viscosité de turbulence s'exprime en fonction du gradient de la pression comme :

$$\|\vec{\nabla} P_f\| = \chi_t \frac{\eta_t}{\kappa} v_{fz} \quad (3.52)$$

où χ_t est un facteur de correction que nous supposons égale à⁶ 1, κ est la perméabilité et v_{fz} est la vitesse du fluide dans la direction de l'écoulement (selon z). Cette équation fait apparaître la vitesse du fluide, qui n'est pas connue, une relation supplémentaire est donc nécessaire pour déterminer η_t . Une corrélation empirique obtenue dans le cas d'un écoulement de fluide turbulent dans un milieu composé de sphères est utilisée [13]. Cette corrélation s'exprime comme :

$$\|\vec{\nabla} P_f\| = \frac{K_{res} \rho_f v_{fz}^2}{\sqrt{\kappa}} \quad \text{avec} \quad K_{res} = \frac{0.14}{\sqrt{\psi^3}} \quad (3.53)$$

À partir des équations (3.52) et (3.53), la viscosité de turbulence peut alors être définie selon :

$$\eta_t = \sqrt{K_{res} \rho_f \|\vec{\nabla} P_f\| \kappa^{\frac{3}{2}}}. \quad (3.54)$$

Afin de déterminer la valeur de η_t , la perméabilité du combustible et l'intensité du gradient de pression doivent encore être estimées.

La perméabilité est déterminée grâce à la relation de Carman-Kozeny (3.15). D'après cette équation et en supposant que le squelette poreux du combustible peut être assimilé à un assemblage de sphères de diamètre moyen $\langle d_{sp} \rangle = 0.5 \text{ mm}$ (cf. section 3.3.3.1) dont la compacité est de $\psi_{sp} = 0.9$, la perméabilité du combustible est d'environ $\kappa = 0.12 \text{ mm}^2$. Concernant le gradient de pression, en supposant que l'évolution axiale du champ de pression entre le haut et le bas de la pastille est linéaire, l'intensité du gradient de pression s'exprime comme :

$$\|\vec{\nabla} P_f\| = \frac{\Delta P_f}{h} \quad (3.55)$$

avec $h = 12 \text{ mm}$ la hauteur de la pastille. Pour un écart de pression $\Delta P_f = 8 \text{ MPa}$, l'intensité du gradient de pression est de $660 \times 10^3 \text{ Pa.mm}^{-1}$. Par conséquent, l'ordre de grandeur de la viscosité de turbulence est de 1 Pa.s d'après (3.54).

6. A noter que dans [86], l'égalité $\chi_t = 1$ suppose que $P_f = \frac{3}{2} k_t$, avec k_t l'énergie cinétique de turbulence. Or, dans notre cas k_t n'a pas pu être pris en compte, des implémentations supplémentaires sont nécessaires pour ce faire.

3.4.2 Modélisation de la relocalisation et de l'éjection des fragments par le biais du couplage fluide-granulats adapté aux corps polyédriques

3.4.2.1 Présentation de la simulation

Connaissant la valeur de la viscosité de turbulence à retenir, l'influence de la taille de la brèche sur la relocalisation et l'éjection du combustible lors de la dépressurisation du crayon est étudiée grâce au couplage fluide-granulats implémenté. Comme en section 3.2, seule la pastille située au-dessus du ballon est modélisée (pastille d'intérêt), la pastille en vis-à-vis de la brèche est supposée avoir été éjectée. Comme nous l'avons vu, il n'a pas été possible de modéliser la fissuration du combustible, ainsi la pastille est considérée comme étant initialement totalement fragmentée (les fragments élémentaires sont tous désolidarisés). Afin de représenter l'accrochage entre le combustible et la gaine, une partie des granulats situés sur la périphérie de la surface inférieure de la pastille sont encastrés (ces fragments sont l'équivalent des disques noirs sur la figure 3.2). Pour que la relocalisation soit possible dans ces conditions, un certain espacement entre les fragments est nécessaire pour que ces derniers puissent se déplacer et enclencher l'écoulement granulaire. Comme illustré figure 3.16, la taille des fragments initialement engendrés (annexe C.4) est réduite de 5 % (voir figure 3.16, à droite), ce qui représente une diminution du volume de 14 %. La taille moyenne des polyèdres de cette pastille est de $\langle d_{pr} \rangle = 1.35 \text{ mm}$.

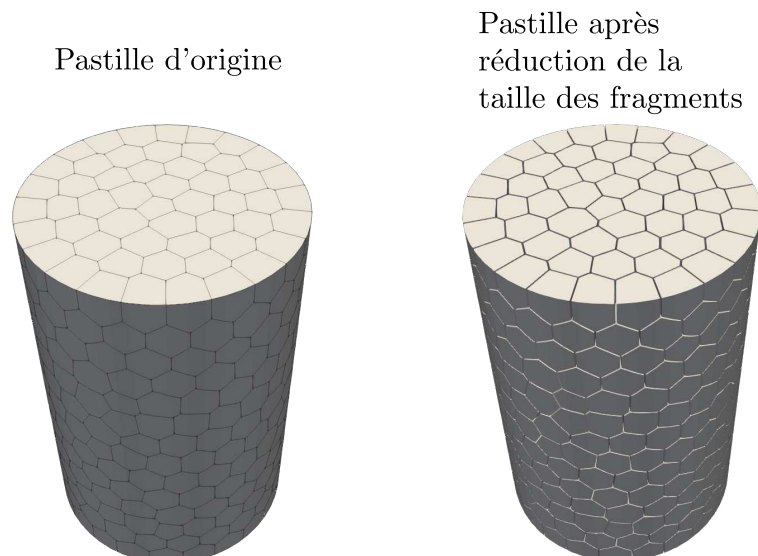


FIGURE 3.16 – Illustration de la pastille avant et après réduction de la taille des fragments.

Pour cette modélisation, le ballonnement et la formation de la brèche sont supposés avoir eu lieu avant l'instant initial du calcul. Afin de représenter l'écoulement du gaz de remplissage hors du crayon dans ces conditions, un domaine de fluide est défini. Comme la masse totale des granulats doit être conservée au cours du temps (voir équation (3.34)), les fragments ne doivent pas quitter ce domaine de fluide. Des murs se situent donc sur les surfaces définissant les bords du domaine afin d'imposer une condition unilatérale de contact au niveau de ces surfaces.

Le domaine de fluide, illustré figure 3.17, peut être distingué en trois zones :

- La partie du crayon qui n'est pas ballonnée, dans laquelle se situe la pastille de combustible.
- La partie ballonnée, représentée par un diamètre de gaine plus élevé dans cette zone. Une brèche se situe sur toute la hauteur du ballon, hauteur qui est fixée à $h_{ballon} = 14 \text{ mm}$, ce qui correspond à une taille déjà observée expérimentalement [128]. Sur la figure 3.17 à droite, il est possible de visualiser les fragments éjectés à travers la brèche.
- Une zone hors du crayon, dans laquelle les fragments éjectés peuvent évoluer. La présence de cette zone est nécessaire, car elle permet d'empêcher les fragments éjectés de quitter le domaine de fluide.

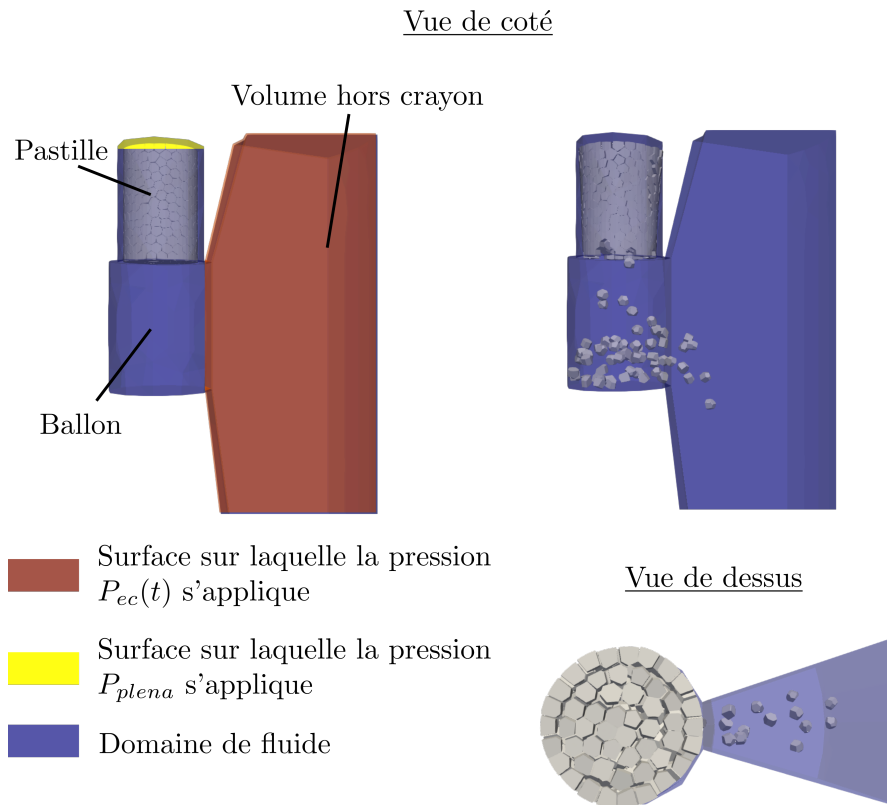


FIGURE 3.17 – Illustration de la modélisation de l'éjection du combustible fragmenté.

La pression du plenum $P_{plena} = 8 \text{ MPa}$ est imposée sur la surface supérieure de la partie du domaine représentant la partie non-ballonnée du crayon (surface jaune). Cette pression est constante au cours du temps (hypothèse de réservoir infini). Afin de représenter la dépressurisation du crayon, la pression à l'extérieur du crayon P_{ec} , qui s'applique sur les surfaces de la zone hors crayon (surface rouge), diminue au cours du temps selon :

$$P_{ec}(t) = P_{plena} \left(1 - \frac{t}{t_f} \right) \quad (3.56)$$

avec $t_f = 1 \text{ s}$ le temps de dépressurisation (pour des raisons d'efficacité numérique, ce temps de calcul est inférieur au temps réel de la dépressurisation). Il est à noter que la pression

3.4. Étude de l'influence de la taille de la brèche sur l'éjection du combustible

P_{ec} devrait idéalement être définie au niveau de la surface représentant la brèche, mais les conditions limites ne peuvent être imposées que sur les bords du domaine fluide.

L'évolution du champ de pression obtenue est représentée à ⁷ $t = \frac{t_f}{8}$ figure 3.18. Afin d'apprécier cette évolution, les fragments ne sont pas représentés et le sens de l'écoulement du gaz est illustré par les lignes de courant ⁸ en blanc. D'après cette figure, la pression varie axialement dans la zone située en amont du ballon (écart de pression de 0.1 MPa sur une hauteur de 12 mm). En revanche, dans le reste du domaine (ballon et zone hors crayon) le champ de pression est quasi-uniforme. Par conséquent, le fait d'imposer la condition limite de chute de pression (3.56) sur les bords de la zone hors crayon plutôt que sur la surface de la brèche n'a pas d'impact sur l'évolution globale de la pression.

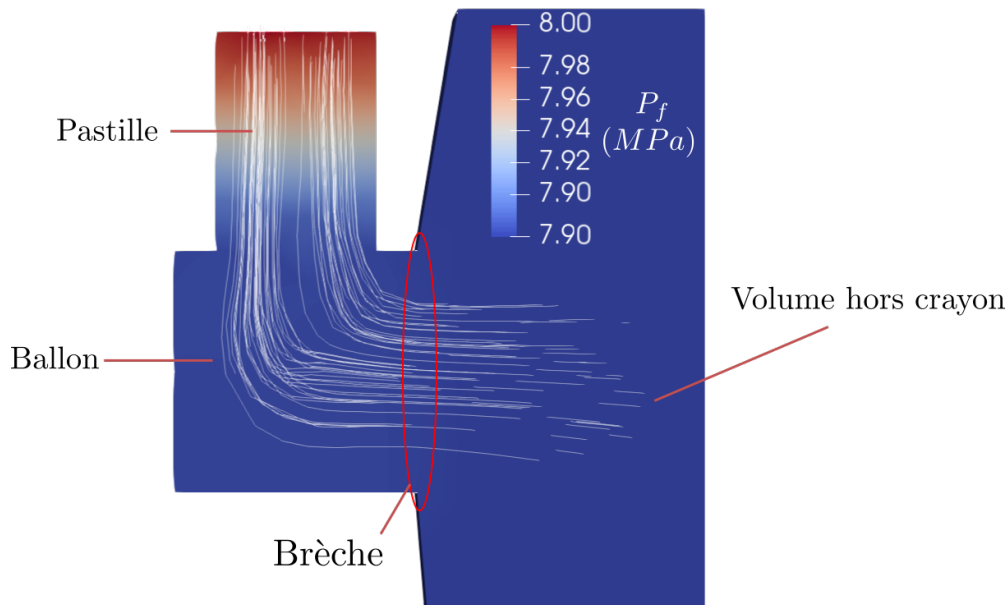


FIGURE 3.18 – Évolution du champ de pression dans le domaine fluide.

Les conditions limites en pression ont pour effet d'engendrer un écoulement du fluide. La figure 3.19 permet d'illustrer la vitesse du fluide (l'intensité de la vitesse est représentée par la couleur des lignes de courant à une position donnée). D'après cette figure, la vitesse du fluide est relativement uniforme dans le crayon et accélère après la brèche (entre 1 et 2 m.s^{-1} de différence entre l'intérieur et l'extérieur du crayon). Comme illustré figure 3.20, cet écoulement fluide constitue un effet moteur qui contribue à l'expulsion des granules hors du crayon.

7. Dans ces simulations, la cinétique d'éjection des granules est plus rapide que la cinétique de dépressurisation du crayon. En effet, si on considère en première approximation que les granules sont en chute libre, leur temps de parcours entre le bas de la pastille et le bas du ballon est donné par : $t_{parcours} = \sqrt{\frac{2h_{ballon}}{g}} = 0.05 \text{ s}$ à comparer au temps de dépressurisation $t_f = 1 \text{ s}$. C'est pourquoi, les simulations ont été interrompues avant $t = t_f$

8. La ligne de courant est définie comme étant une courbe dont la tangente est en tout point colinéaire au vecteur de vitesse du fluide \vec{v}_f .

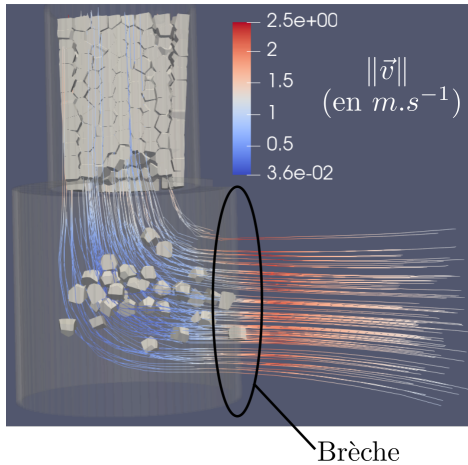


FIGURE 3.19 – Vue en coupe du crayon illustrant les lignes de courant du fluide.

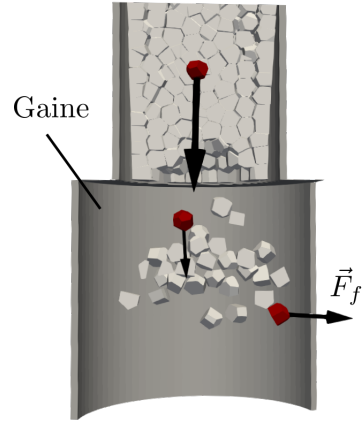


FIGURE 3.20 – Vue en coupe du crayon illustrant les efforts de traînée engendrés sur trois granulats (en rouge) à différentes positions.

Dans le cadre des simulations présentées, la séquence d'éjection se déroule en deux étapes :

1. La relocalisation des fragments situés en amont du ballon.
2. L'éjection des fragments relocalisés à travers la brèche.

Ces deux étapes peuvent être assimilées à un écoulement granulaire en silo à travers un orifice. Afin d'illustrer cet écoulement granulaire, la vitesse des granulats est représentée sur la figure 3.21, à l'étape de relocalisation (a et b) et d'éjection (c et d). Dans le cas de la relocalisation, l'orifice à travers lequel les granulats s'écoulent est représenté par la couronne de fragments encastrés à la gaine (fragments entourés en jaune, voir figure 3.21.a et b). L'épaisseur de cette couronne est de la largeur d'un fragment. Avec la taille de fragment retenue ($\langle d_{pr} \rangle = 1.35 \text{ mm}$), le diamètre externe de cette couronne adimensionné par la taille moyenne des granulats est de $R_s \simeq 8$ et le diamètre adimensionné interne est de $R_0 \simeq 7$. Dans le cas de l'éjection, l'orifice est la brèche elle-même (voir figure 3.21.c et d), la largeur adimensionnée de cette brèche $L_{brèche}$ varie entre 1.3 et 5.5 en fonction des calculs.

3.4. Étude de l'influence de la taille de la brèche sur l'éjection du combustible

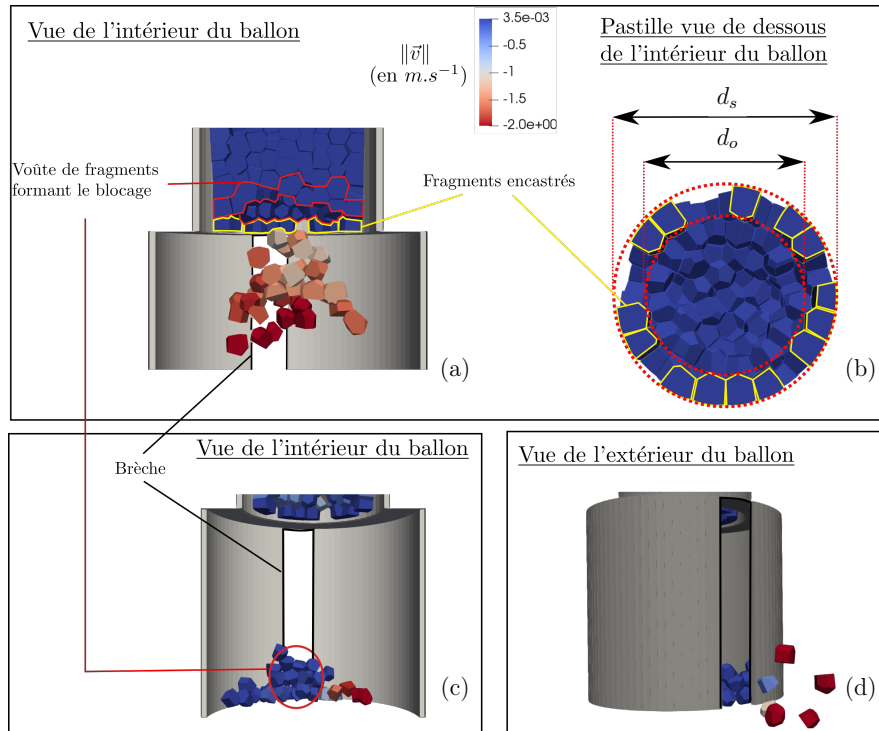


FIGURE 3.21 – Illustration du blocage des fragments au niveau du ballon (a et b) et de la brèche (c et d).

Lorsqu'une collection de granulats située en amont de l'orifice crée une voûte d'arc-boutement, l'écoulement granulaire se bloque (voir fragments entourés d'une ligne pleine rouge sur la figure 3.21). Ces voûtes de granulats sont notamment caractérisées par leur compacité, la distribution des chaînes de forces entre granulats et le type de contact (contact entre deux faces, une arête et une face, etc.). Les chaînes de forces de contact normales au niveau des voûtes formées en amont du ballon et au niveau de la brèche sont représentées figure 3.22 (à gauche et à droite respectivement). Afin de visualiser ces chaînes, les granulats sont représentés en transparence et seuls les efforts dont l'intensité est supérieure à $2 \times 10^{-2} N$ sont reportés.

D'après cette figure, les voûtes de fragments statiques formées lors de la relocalisation (en amont du ballon) et de l'éjection (au niveau de la brèche) sont de nature différente :

- En amont du ballon, la compacité des fragments est très élevée, les efforts de contact sont répartis sur les bords de l'orifice et le contact entre granulats est majoritairement de type face/face (voir zoom dans le cercle rouge à gauche).
- Au niveau de la brèche, la compacité est plus faible, les efforts de contact sont répartis au niveau de l'orifice et différents types de contact sont possibles (face/face, arêtes/face, sommet/faces, voir zoom dans le cercle rouge à droite).

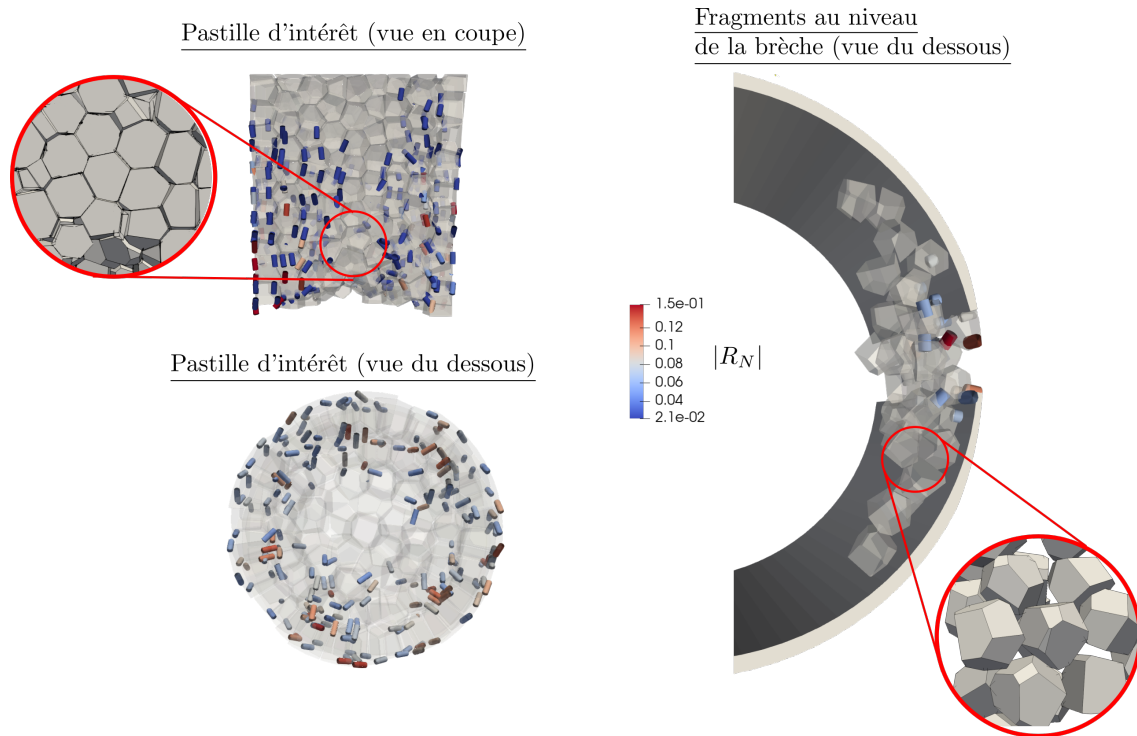


FIGURE 3.22 – Illustration des chaînes de contact dans le cas de la relocalisation (à gauche) et de l'éjection (à droite).

L'étude de l'éjection du combustible consiste donc à déterminer la capacité de l'écoulement granulaire à se bloquer durant l'étape de relocalisation et d'éjection à partir des simulations réalisées.

3.4.2.2 Résultats de l'étude d'influence de la taille de la brèche sur l'éjection du combustible

À partir de ce modèle, une campagne de calculs a été réalisée afin de déterminer l'influence de la déformation de la gaine et de la taille de la brèche sur la quantité de combustible éjecté. Pour ce faire, trois géométries de gaine ont été retenues, une non-déformée (0 %) et deux pour lesquelles les déformations radiales sont de 20 % et 30 %. Pour chaque géométrie, le secteur angulaire de la brèche varie entre 15° et 45°, les largeurs de brèche obtenues et leurs valeurs adimensionnées par la taille moyenne des granulats sont reportées dans le tableau 3.2. Pour une géométrie de ballon et une taille de brèche donnée, deux calculs sont réalisés chacun avec une pastille différente (deux échantillons), mais avec la même taille moyenne de fragment polyédrique ($\langle d_{pr} \rangle = 1.35 \text{ mm}$).

3.4. Étude de l'influence de la taille de la brèche sur l'éjection du combustible

Déformation de la gaine (en %)	Largeur de la brèche (en mm)	Largeur de la brèche adimensionnée L_{breche} (-)
0	1.7 – 4.9	1.3 – 3.6
10	2.1 – 5.9	1.6 – 4.4
20	2.6 – 7.4	1.9 – 5.5

TABLE 3.2 – Largeurs de brèche obtenues en fonction de la déformation du ballon.

Dans un premier temps, l'influence de la taille du ballon et de la brèche sur le volume de combustible relocalisé est étudiée. En particulier, nous cherchons à déterminer l'évolution du volume de combustible relocalisé V_{rel} , adimensionné par le volume de la pastille $V_{pastille} = 603 \text{ mm}^3$, en fonction de la taille de la brèche adimensionnée L_{breche} . Cette évolution est représentée figure 3.23 pour une gaine non-déformée (0 %) et déformée à 20 % et 30 % (illustré par les courbes bleues, orange et vertes respectivement), les barres sur les courbes représentent la valeur haute et basse du volume relocalisé adimensionné pour les deux calculs réalisés (chacun avec une pastille différente). D'après cette figure, le volume relocalisé est compris entre et 6.8 % et 9.5 % et cette quantité n'est corrélée ni à la taille du ballon ni à la largeur de la brèche.

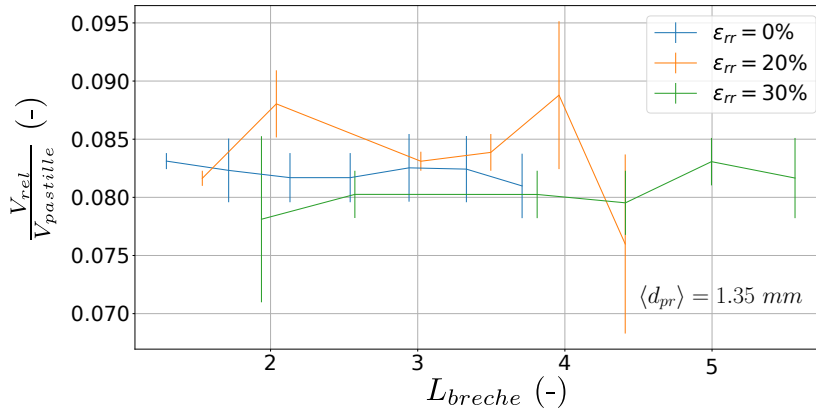


FIGURE 3.23 – Volume de combustible relocalisé adimensionné par le volume pastille en fonction de la taille de brèche adimensionnée.

Ainsi, la quantité de combustible relocalisé est relativement faible, ce qui est en contradiction avec la relation (3.4) obtenue par Martin [84]. En effet, d'après cette relation, le blocage des fragments en amont du ballon n'est plus possible pour $R_0 \geq 6.25$. Or, dans notre cas $R_0 \simeq 7$ (voir figure 3.21) alors que l'écoulement des fragments est systématiquement bloqué ($R_f = \frac{d_0}{\langle d \rangle}$, le diamètre d'orifice critique à partir duquel la vidange des fragments est totale, n'est donc pas connu mais est nécessairement supérieur à 7). Ce désaccord s'explique en partie par le fait que la valeur de R_f dans (3.4), ait été déterminé à partir des résultats de simulations pour lesquels les fragments de combustible étaient sphériques. Or, d'une part, les fragments polyédriques sont plus anguleux que des sphères et d'autre part, la compacité maximale qui peut être atteinte localement pour des polyèdres est proche de $\psi_{pr} = 1$ (voir

zoom sur la figure 3.22 à gauche) alors que dans le cas des sphères, cette compacité maximale est de $\psi_{sp} = 0.64$ (Random Closed Packing [4]). Comme le blocage d'un écoulement granulaire est favorisé par la compacité du milieu⁹, R_f est potentiellement plus élevé lorsque les granulats sont polyédriques.

Dans un deuxième temps, le volume éjecté hors du crayon en fonction de la taille de brèche est étudié. Pour ce faire, l'évolution du volume éjecté V_{ej} adimensionné par le volume relocalisé (qui représente moins de 10 % du volume de la pastille) en fonction de la taille de la brèche adimensionnée est représentée figure 3.24.

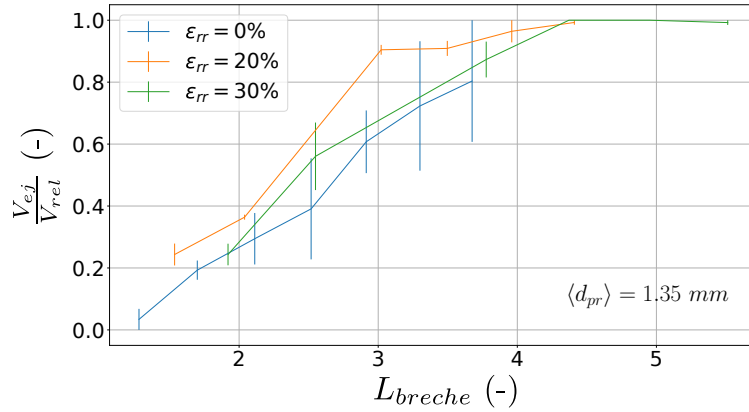


FIGURE 3.24 – Volume de combustible éjecté adimensionné par le volume relocalisé en fonction de la taille de brèche adimensionnée.

D'après cette figure, comme précédemment, le volume éjecté n'est pas corrélé à la déformation de la gaine, ce qui suggère que le ballon n'a pas d'influence sur le blocage de l'écoulement granulaire au niveau de la brèche. En revanche, le volume éjecté augmente clairement en fonction de la largeur de la brèche, cette évolution peut être décomposée en trois phases :

- Pour une largeur de brèche adimensionnée telle que $L_{breche} \in [0, 1.3]$, de façon triviale, la quantité éjectée est faible ou nulle.
- Pour $L_{breche} \in [1.3, 3.7]$, le volume éjecté évolue quasi-linéairement en fonction de la taille de la brèche. Sur cet intervalle, la dispersion de la quantité éjectée pour une taille de brèche donnée est maximale (voir les barres sur les courbes).
- Pour $L_{breche} > 3.7$, la totalité du combustible relocalisé peut être éjecté à travers la brèche. Cette taille de brèche définit donc le diamètre critique de l'orifice à partir de laquelle la vidange des fragments contenus dans le ballon a lieu, on a donc $R_f = 3.7$ dans ce cas.

Remarquons que la taille critique de l'orifice est bien plus élevée lors de la relocalisation ($R_f > 7$) que durant l'éjection ($R_f = 3.7$). Cela est dû à la nature du blocage qui est différente à ces deux positions et notamment au fait que la compacité soit plus faible au niveau de la brèche qu'en amont du ballon (voir zoom sur la figure 3.22).

9. En effet, le coefficient de frottement interne augmente en fonction de la compacité, voir équations (C.29) et (C.30) en annexe C.3.

3.4. Étude de l'influence de la taille de la brèche sur l'éjection du combustible

Dans un troisième temps, le volume éjecté adimensionné par le volume de la pastille en fonction de la taille de brèche adimensionnée est représenté sur la figure 3.25. Cette figure permet de quantifier l'évolution du volume éjecté en fonction des effets qui viennent d'être mis en évidence au sujet de la relocalisation et de l'éjection. En particulier, le blocage des granulats au niveau de la brèche a pour effet de limiter l'éjection du volume de combustible relocalisé (volume compris entre 6.8 à 9.5 % du volume de la pastille) tant que la largeur de la brèche est inférieure à $3.7 \langle d_{pr} \rangle$. Néanmoins, le fait que la quantité éjectée soit faible est principalement attribuable à la relocalisation à cause de la forte compacité des fragments à cette étape (proche de $\psi_{pr} = 1$ localement).

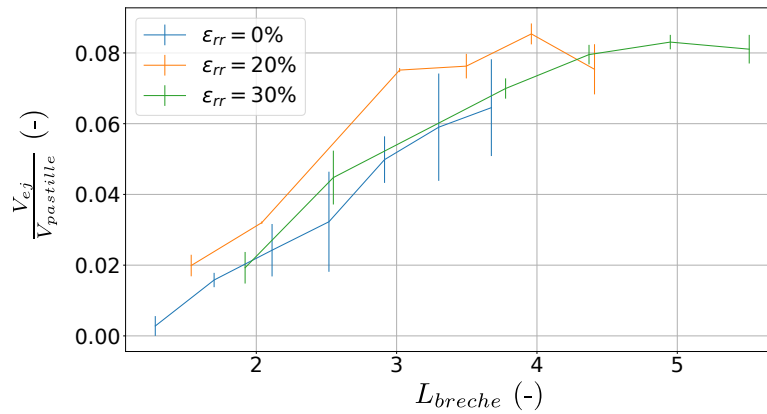


FIGURE 3.25 – Volume de combustible éjecté adimensionné le volume de la pastille en fonction de la taille de brèche adimensionnée.

3.5 Conclusions et perspectives

Dans le cadre de ce chapitre, la fragmentation du combustible, ainsi que son éjection suite à la formation d'une brèche dans la gaine durant l'APRP, ont été étudiées. Cette étude s'appuie, d'une part, sur le modèle DEM-CZM présenté dans le chapitre 2 et d'autre part, sur une modélisation d'écoulement fluide-granulats à fluide non-résolu et à granulats polyédriques.

Les travaux antérieurs ayant permis de modéliser le comportement du combustible en situation d'APRP par le biais de la DEM ont été présentés. L'influence de la dépressurisation du crayon sur le comportement à rupture de la pastille a été étudiée grâce au modèle DEM-CZM. Pour ce faire, l'évolution axiale du profil de pression a été définie de manière à représenter l'écart de pression attendu entre l'intérieur et l'extérieur du crayon.

Les résultats obtenus suggèrent que, pour les profils de pression de confinement étudiés, la moyenne volumique de cette pression est un paramètre pertinent pour déterminer le comportement à rupture du combustible, et ce, que le gradient de cette pression soit nul (pression uniforme) ou non (pression variable spatialement). Ainsi, le critère d'amorce de fissure défini en section 2.3.2 est applicable dans cette situation et ce, indépendamment des paramètres aléatoires du modèle (morphologie des fragments et distribution spatiale des zones cohésives). Pour cela, la pression de confinement doit être substituée par sa valeur moyenne dans l'expression du critère. En accord avec les résultats des simulations réalisées, le critère prédit une amorce de fissure pour une pression moyenne appliquée à la pastille comprise entre 2 et 6.3 MPa (pour une valeur comprise entre 2.2 et 4.4 MPa, d'après la simulation), avec les hypothèses retenues (fissuration est amorcée en zone centrale à 1073 K).

Dans l'optique d'étudier l'influence de l'écoulement du gaz de remplissage sur le comportement à rupture du combustible durant la dépressurisation, une méthode couplant la DEM à une résolution de type "fluide non-résolu" a été retenue. Afin de représenter la fissuration du combustible dans le modèle, le couplage existant a été adapté de manière à prendre compte des fragments de forme polyédriques. Ainsi, la fragmentation du combustible durant la dépressurisation du crayon a pu être modélisée grâce au couplage, mais les calculs réalisés n'ont pas permis de conclure pour l'instant.

En revanche, ce couplage a été appliqué à la modélisation de l'éjection des fragments de combustible lors de la perte d'étanchéité du crayon. À partir des résultats de simulations, l'influence de la taille du ballon et de la brèche sur le volume de combustible relocalisé et éjecté dans cette situation a pu être étudiée. D'après les résultats de cette étude :

- Durant la relocalisation, la taille critique de l'orifice à partir de laquelle la vidange des fragments a lieu R_f (définie dans ce cas comme le rapport entre le diamètre interne de la couronne de fragments ancrés à la gaine et la taille moyenne des fragments) est supérieure à 7. Cette taille, obtenue lorsque les fragments sont polyédriques, est plus élevée que celle calculée pour des fragments sphériques ($R_f = 6.25$ d'après Martin [84]). Cette différence de comportement est attribuée à la compacité au niveau de l'orifice : elle est potentiellement plus élevée pour des fragments polyédriques (compacité maximale proche de 1) que des fragments sphériques (compacité maximale d'environ 0.64).
- Durant l'éjection, la compacité des fragments au niveau de la brèche étant plus faible

qu'à l'étape de relocalisation, la taille critique de l'orifice (définie dans ce cas comme le rapport entre la largeur de la brèche et la taille moyenne des fragments) est également plus faible ($R_f = 3.7$ pour l'éjection, contre plus de $R_f > 7$ durant la relocalisation).

- Le volume de combustible éjecté représente moins de 10 % du volume totale de la pastille. Cette faible quantité est principalement attribuable au blocage de l'écoulement durant la relocalisation.

Au niveau des perspectives de ce travail :

1. Influence de l'écoulement de gaz sur la fragmentation du combustible.

Les raisons d'apparition des instabilités numériques lors des calculs de fragmentation avec le couplage fluide-granulats doivent être investiguées afin de pouvoir mener à terme l'étude présentée en section 3.2. Ces calculs permettront d'évaluer les profils de pressions à rupture ce qui permettra de déterminer si l'éjection peut induire une fragmentation. Ainsi, l'applicabilité du critère d'amorce de fissure pourra être vérifiée dans ce cas.

2. Influence d'un gradient de taille des fragments sur le comportement à rupture.

D'après les mesures réalisées sur un combustible irradié ayant subi un recuit thermique [102], il semble que la taille des fragments de la pastille soit dépendante de la position radiale. Afin de représenter cet effet dans la modélisation, une méthode de génération de pastille à taille de fragments variable a été développée et est présentée en annexe C.4. En se basant sur cette méthode, il serait intéressant d'étudier l'influence d'un gradient de taille de granulats sur le comportement à rupture du combustible dans le modèle DEM-CZM.

3. Influence de la granulométrie des fragments sur la quantité éjectée

Concernant les simulations de l'éjection, des tamisages ont été réalisés à la suite d'expériences pour lesquelles le combustible s'est fragmenté [128]. La granulométrie des fragments obtenue pourrait être utilisée afin de générer la pastille du modèle DEM (voir annexe C.4) avec une distribution de taille des fragments plus représentative. Des simulations d'éjection pourraient alors être réalisées avec la pastille obtenue afin d'affiner le calcul du volume de fragment éjecté.

4. Influence des paramètres locaux du milieu granulaire sur la relocalisation-éjection du combustible.

D'après les résultats de simulation de l'éjection, la taille critique d'orifice¹⁰ à partir de laquelle l'écoulement des fragments diverge dépend fortement des paramètres locaux et notamment de la compacité au niveau de l'orifice. Par conséquent, il serait intéressant de déterminer l'influence de ces paramètres sur le débit granulaire. Pour ce faire, une étude de sensibilité de la taille des fragments polyédriques sur la quantité de combustible éjecté pourrait être réalisée.

5. Application du couplage fluide-granulats à différentes problématiques.

Enfin, le couplage implémenté pourrait également être appliqué à d'autres situations pour lesquelles la modélisation d'un milieu granulaire en interaction avec un fluide est nécessaire. Un exemple d'application dans le cadre industriel pourrait être la modélisation de l'obstruction par les dépôts d'oxydes des structures tubulaires des générateurs de vapeur des réacteurs [1].

10. Que ce soit le diamètre de la couronne de fragments ancrés à la gaine ou la largeur de la brèche.

Conclusion générale

Ce travail de thèse s'inscrit dans le cadre de l'étude du comportement du combustible UO_2 irradié en situation d'un accident de perte de réfrigérant primaire (APRP). Durant l'APRP, le crayon subi un chargement thermo-mécanique intense pouvant aboutir à la fragmentation de la pastille de combustible. Pour un état de fragmentation fin, il existe un risque de dispersion du combustible hors de la première barrière de confinement des produits de fission (à savoir, la gaine du crayon). La non-éjection de produits radioactifs hors de la gaine étant un enjeu de sûreté majeur, les conditions aboutissant à la fragmentation du combustible sont étudiées dans le cadre d'un programme de recherche national et international. Les différentes expériences réalisées lors de ces programmes ont permis d'identifier les moteurs de la fragmentation du combustible.

Dans le cadre de cette thèse, la démarche générale a consisté à étudier l'influence de ces moteurs, afin de proposer des améliorations de la modélisation de la fragmentation du combustible dans l'outil de calcul scientifique ALCYONE de la plateforme PLEIADES. Parmi les moteurs de la fragmentation, l'influence des gaz produits par la fission a été étudiée. Ces gaz forment des bulles au sein du combustible, dans le grain et au joint de grains dans les zones saines (zone centrale et intermédiaire) et en position intergranulaire dans le rim. Ces bulles, lorsqu'elles sont sur-pressurisées, engendrent une contrainte qui semble avoir un effet sur la décohésion intergranulaire (fissuration localisée au joint de grains). L'intensité de cette contrainte durant un APRP a donc été estimée à partir d'une caractérisation fine du combustible irradié.

Le second moteur est l'effet de la dépressurisation du crayon suite à la formation d'une brèche dans la gaine. Cet effet a été étudié par le biais d'une méthode permettant de modéliser la fissuration du matériau. Une première étape a consisté à déterminer les paramètres permettant de représenter le comportement à rupture du combustible irradié. Puis, connaissant ces paramètres, le modèle a été appliqué à la situation accidentelle visée, afin d'étudier les conditions dans lesquelles le combustible est susceptible de se fragmenter. Enfin, ces travaux ont été prolongés afin d'étudier l'influence de la taille de la brèche sur l'éjection des fragments de combustible hors du crayon.

La première étude a consisté à répondre à la question suivante : quelle est l'intensité de la sur-contrainte de traction appliquée par les bulles de gaz de fission au combustible durant

l'APRP ? Cette sur-contrainte dépend de paramètres (porosités, quantité et répartition des gaz de fission, pression des cavités) qui, pour être déterminés, nécessitent une caractérisation fine de la microstructure du combustible et de l'état des gaz de fission à l'issue de l'irradiation de base. Pour cela, une simulation de l'irradiation de base du combustible et des microanalyses ont été réalisées. La confrontation des résultats de simulation et d'examen met en évidence un bon accord calcul-mesure au niveau des quantités de gaz dans les cavités. Néanmoins, des écarts calcul-mesure significatifs sont également observés concernant la porosité (en particulier en zone intermédiaire et dans le rim). Une estimation mixte a donc été proposée, en prenant en compte les paramètres mesurés et/ou calculés lorsqu'ils sont jugés pertinents.

Sur la base de ces résultats, la sur-contrainte de traction a été estimée (estimation et incertitude) en tenant compte de la forme non-sphérique des cavités, forme mise en évidence par les examens au MEB-FIB. Les incertitudes associées à cette estimation sont dues au calcul de la pression (lois d'état) pour l'ensemble des cavités quelle que soit la position radiale, sauf pour les bulles intragranulaires de la zone centrale, pour lesquelles ces incertitudes sont dues à la variabilité de leur forme. D'après l'analyse, l'intensité moyenne de la sur-contrainte¹¹ est de 95 *MPa* (avec 12 % d'écart relatif du fait des incertitudes) en zone centrale, 165 *MPa* (avec 36 % d'écart relatif) en zone intermédiaire et de 50 *MPa* (avec 20 % d'écart relatif) dans le rim. C'est donc la zone intermédiaire qui est la plus sollicitée, résultat qui n'est modifié ni par la forme des cavités (sphérique ou non), ni par la prise en compte des incertitudes.

Dans le rim, le degré de confiance accordé à l'estimation de cette sur-contrainte (estimation et incertitude) est jugé satisfaisant, car les paramètres microstructuraux pertinents (forme et porosité des cavités) sont mesurés avec précision (car l'ensemble des cavités sont sphériques et visibles au MEB). En revanche en zone saine, les estimations¹¹ doivent être affinées afin d'augmenter leur degré de confiance. En effet :

- En zone centrale, l'ordre de grandeur du volume molaire et la localisation des cavités ne peuvent être validés à partir des mesures expérimentales réalisées.
- En zone intermédiaire, les cavités nanométriques n'ont pas pu être caractérisées expérimentalement (en terme de taille, de porosité, de forme, de localisation et de pression).

Connaissant le chargement appliqué par les gaz de fission, la deuxième étude a consisté à répondre à la question suivante : quelles sont les propriétés à rupture du combustible irradié ? Pour ce faire, le comportement à rupture du combustible en transitoire thermique a été simulé par un modèle couplant la méthode des éléments discrets (DEM) et un modèle de zones cohésives (CZM). Une analyse paramétrique de ce modèle DEM-CZM a permis de déterminer les valeurs des propriétés à rupture du combustible (la contrainte à rupture et le taux de recouvrement des joints de grains par les bulles). Pour cela, chacune des zones radiales du combustible en situation de recuit est supposée se fragmenter à pression atmosphérique (0.1 *MPa*) et rester intègre pour une pression de confinement de 10 *MPa*. L'identification de ces propriétés a été réalisée en zone centrale et de la partie centrale de la zone intermédiaire du combustible. En périphérie de la zone intermédiaire, ces propriétés n'ont pas pu être déterminées ce qui suggère une surévaluation du chargement et/ou une sous-estimation de

11. À la température maximale du combustible durant l'accident (1473 *K*) et pour la population de bulles dont l'apport est prépondérant.

la contrainte à rupture. Le modèle doit encore être amélioré afin de pallier cela.

À partir des résultats obtenus, un critère de fissuration a été établi afin de prédire : pour quel chargement externe appliqué à la pastille, le combustible est-il susceptible de se fragmenter, lorsque la pression de confinement appliqué à la pastille est uniforme. D'après l'analyse, le critère peut être appliqué au cas de la dépressurisation du crayon en APRP (pression de confinement variable spatialement) en remplaçant la pression par sa valeur moyenne dans l'expression du critère.

Afin d'affiner la représentation de l'écoulement du gaz de remplissage, une méthode couplant la DEM à une modélisation d'écoulement de fluide "non-résolu" a été retenue. Des développements ont été réalisés afin de représenter la forme polyédrique des fragments. Les simulations réalisées avec ce couplage n'ont pas permis de conclure quant à la fragmentation du combustible durant son éjection. Néanmoins, le couplage a pu être appliqué à la modélisation de l'éjection du combustible afin de répondre à une quatrième et nouvelle question : quelle est l'influence de la taille de la brèche sur la quantité de fragments de combustible éjecté, lorsque ces derniers sont de forme polyédrique ? Les résultats obtenus suggèrent un fort impact de la forme des fragments. En effet, la taille critique de l'orifice¹² à partir de laquelle les fragments de combustible sont totalement vidangés est plus élevée si ces derniers sont polyédriques plutôt que sphériques. Cette forme favorise le blocage de l'écoulement granulaire, en particulier lors de leur relocalisation, ce qui explique la faible quantité de fragments éjectés (moins de 10 % du volume totale de la pastille).

Ce travail permet d'identifier certaines perspectives concernant l'étude du comportement du combustible durant l'APRP.

Sur le plan expérimental :

Examens post-irradiatoires.

1. Les mesures MET prévues sur le combustible étudié au chapitre 1 permettront de mieux caractériser les bulles nanométriques (en termes de porosité, de distribution spatiale et de forme) et ainsi d'affiner l'estimation de l'intensité de la sur-contrainte de traction, notamment en zone intermédiaire.
2. Des mesures MEB-FIB sur des combustibles à différents taux de combustion sont nécessaires afin d'évaluer l'influence de l'irradiation sur l'intensité de la sur-contrainte de traction engendrée par les cavités (sachant qu'une première comparaison, en considérant des bulles sphériques, met en évidence une augmentation de la sur-contrainte en fonction de l'irradiation en zone centrale). Une analyse approfondie des images existantes (statistique de la forme et de la distribution spatiale des cavités) est également proposée afin d'affiner l'estimation de cette contrainte en zone centrale.
3. Des mesures "monobulle" [22] seraient nécessaires afin de valider l'ordre de grandeur des volumes molaires calculés dans les bulles.
4. Des observations des bulles intergranulaires à partir de fractographies et/ou des analyses des images MEB-FIB sont proposées afin de mesurer l'évolution radiale de la fraction surfacique des bulles au joint de grains.

Traitements thermiques.

12. Cet orifice est représenté par une couronne de fragments ancrés à la gaine lors de la relocalisation et par la brèche lors de l'éjection.

1. Les hypothèses retenues pour mener l'étude du comportement du combustible en transitoire restent à confirmer grâce aux résultats expérimentaux obtenus dans les installations de traitement thermique MERARG et MEXIICO sur pastille entière et micro-carottes [59].

Sur le plan de la modélisation :

Modélisation de la fragmentation dans ALCYONE.

1. Des équations d'état obtenues récemment par simulations atomistiques [67] pourraient être prises en compte dans la quantification des incertitudes liées au calcul de la pression.
2. Le terme d'interaction entre les différentes populations de bulles dans l'expression de la sur-contrainte de traction des cavités devra être pris en compte dans la modélisation.
3. Les critères proposés pour la décohésion intergranulaire (chapitre 1) et l'amorce de fissure (chapitres 2 et 3) doivent désormais être implémentés dans le schéma de calcul APRP d'ALCYONE. À partir de ces implémentations, les recuits réalisés dans les installations MERARG et MEXIICO pourraient être simulés. La comparaison calcul-mesure permettrait d'identifier la contrainte à rupture des joints de grains à retenir pour représenter l'état de fragmentation observé expérimentalement.

Modélisation du comportement à rupture du combustible par le biais du modèle DEM-CZM.

1. L'identification des paramètres représentatifs du comportement à rupture du combustible doit encore être poursuivie en zone intermédiaire. Cette analyse permettra de déterminer si le chargement retenu est surestimé et/ou si la contrainte à rupture est sous-estimée.
2. Les différentes améliorations proposées pour le modèle DEM-CZM (chapitre 2) permettraient d'affiner la modélisation des recuits thermiques, d'une part et l'interprétation des résultats de calculs d'autre part. Notamment, les améliorations concernant le bilan énergétique (déformation des fragments, pression dépendant de l'ouverture des fissures) pourraient permettre d'identifier les paramètres représentatifs de la périphérie du combustible. Le calcul du relâchement des gaz de fission pourrait également être comparé aux mesures réalisées lors des recuits afin d'affiner la comparaison calcul-mesure. Enfin, l'influence d'un gradient de taille de fragment (cf. annexe C.4) sur le comportement à rupture du combustible pourrait être étudiée à partir de ces modélisations.

Couplage fluide-granulats.

1. Concernant la dépressurisation du crayon, les origines des instabilités numériques apparues lors des simulations de ce phénomène doivent être investiguées afin de déterminer l'influence de l'écoulement du gaz de remplissage dans ce cas.
Concernant les calculs de relocalisation-éjection, la granulométrie des fragments obtenus à l'issue des expériences simulant l'APRP pourrait être utilisée afin de générer la pastille du modèle DEM (cf. annexe C.4). Cela permettrait d'affiner le calcul du volume de fragments éjectés lors des simulations. Pour cette modélisation, le blocage des fragments semble dépendre fortement des paramètres locaux (compacité, type de contact, nature du contact). Une étude de sensibilité du modèle pourrait être réalisée afin de préciser cette dépendance.
Enfin, le couplage implémenté pourrait également être appliqué à d'autres situations

pour lesquelles la modélisation d'un milieu granulaire en interaction avec un fluide est nécessaire (par exemple, la modélisation de l'obstruction des structures tubulaire des générateurs de vapeur des réacteurs par les dépôts d'oxydes [1]).

Annexes

Annexes relatives au chapitre 1

A.1 Comparaison des pressions calculées par l'équation d'ALCYONE et de Soave à haut volume molaire

Dans cette annexe, l'évolution des écarts entre les pressions calculées mesurées et extrapolées est déterminée à haut volume molaire ($V_m > 100 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$) entre 300 K à 1473 K.

Les pressions calculées par les équations d'état (courbes en pointillés), les extrapolations de Ronchi (carrés bleus) et les mesures isochores de Waibel et Michels et al. (triangles noirs et verts respectivement) à $121 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$ et de Rabinovich et al. [114] (triangles violets) à $143 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$ sont illustrées figures A.1 et A.2 respectivement. La comparaison montre que l'écart entre les pressions calculées et les pressions mesurées (jusqu'à 730 K) et/ou extrapolées (jusqu'à 1500 K) est de quelques MPa.

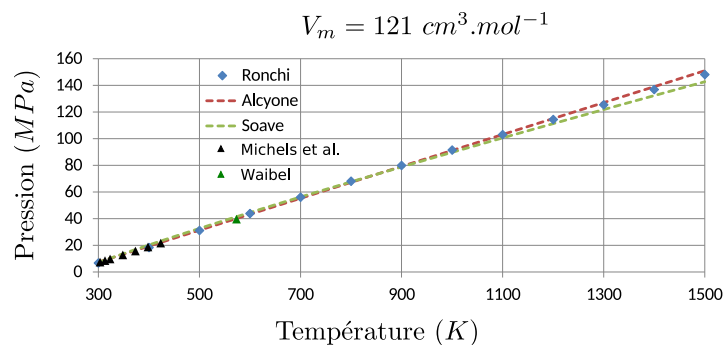


FIGURE A.1 – Pression calculée et mesurée (en MPa) en fonction de la température (en K) à $121 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$.

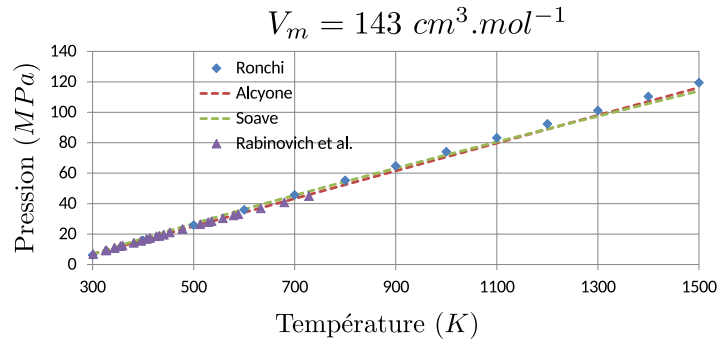


FIGURE A.2 – Pression calculée et mesurée (en MPa) en fonction de la température (en K) à $143 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$.

Ainsi, les pressions extrapolées, mesurées et calculées par les équations d'état sont en accord sur à haut volume molaire aux température attendues en transitoire. Par conséquent, les bornes de la pression calculée par l'équation d'ALCYONE sont quasiment confondues quelle que soit la température pour des volumes molaires de plus de $100 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$.

A.2 Détail des évolutions des encadrements de la pression calculée par l'équation d'ALCYONE

L'évolution de l'écart entre les bornes de la pression (courbe violette) à 303 K est reportée sur les figures A.3 et A.4. Les pressions calculées par l'équation d'ALCYONE, de Soave et de Ronchi sont reportées par les courbes rouges, vertes et grises respectivement, les mesures de volumes molaires dans les bulles de gaz de fission sont indiquées par les droites noires. D'après ces figures, pour l'ensemble des bulles ($V_m < 100 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$), la pression calculée par l'équation d'ALCYONE surestime la valeur mesurée.

Sur l'intervalle des volumes molaires intermédiaires (de 40 à 100 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$, voir figure A.3), la pression calculée par l'équation d'ALCYONE (courbe rouge) à température ambiante varie entre 8 et 480 MPa. Les écarts entre les bornes de la pression (courbe violette) sont relativement importants (entre 4 et 141 MPa).

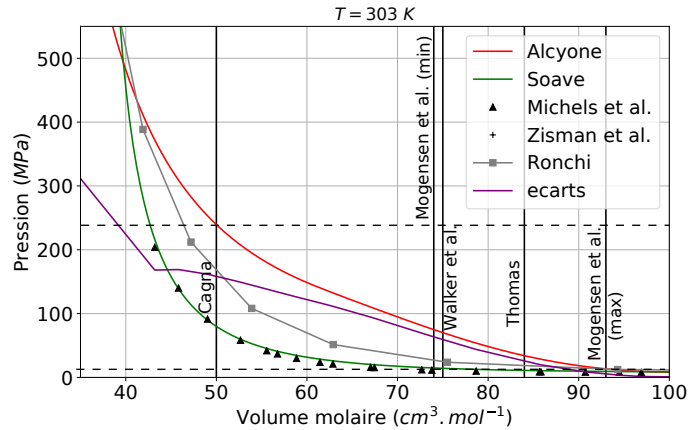


FIGURE A.3 – Évolution de la pression et des écarts entre les bornes (en MPa) en fonction du volume molaire (en $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$) à 303 K, aux volumes molaires représentatifs des bulles submicrométriques. Zoom de la figure 1.16.

A très bas volume molaire (de 22.5 à 40 $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$, voir figure A.4), les pressions calculées par l'équation d'ALCYONE sont très élevées (entre 480 MPa et 12.1 GPa). Les écarts entre les bornes sont également relativement importants (141 MPa et 5.2 GPa) et augmentent lorsque le volume molaire diminue.

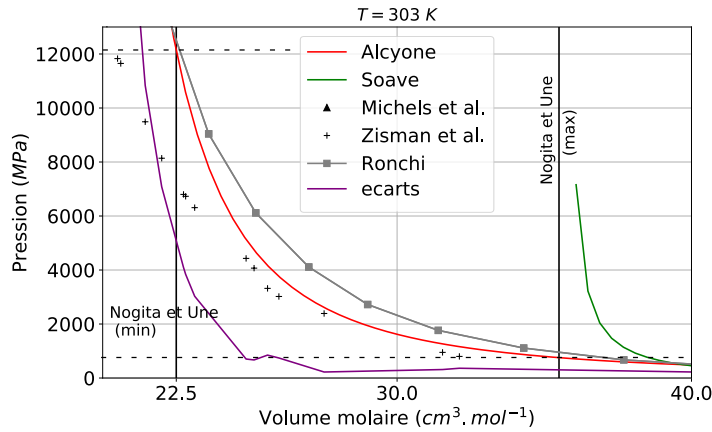


FIGURE A.4 – Évolution de la pression et des écarts entre les bornes (en MPa) en fonction du volume molaire (en $cm^3.mol^{-1}$) à $303 K$, aux volumes molaires représentatifs des bulles nanométriques. Zoom de la figure 1.16.

A la température maximale du transitoire thermique ($1473 K$) et intermédiaires (de 40 à $100 cm^3.mol^{-1}$), les évolutions des pressions et des écarts entre les bornes sont illustrées sur la figure A.5. Les pressions calculées par l'équation d'ALCYONE varient entre $200 MPa$ et $1427 MPa$ alors que les écarts entre les bornes sont relativement faibles (entre 17 et $105 MPa$).

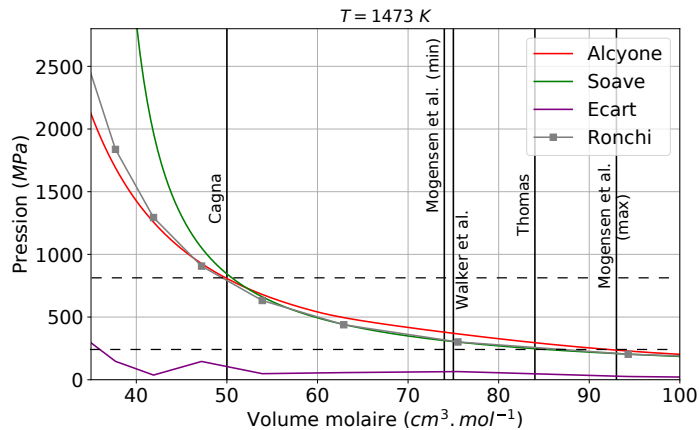


FIGURE A.5 – Évolution de la pression et des écarts entre les bornes (en MPa) en fonction du volume molaire (en $cm^3.mol^{-1}$) à $1473 K$, aux volumes molaires représentatifs des bulles submicrométriques. Zoom de la figure 1.18.

A très bas volume molaire (de 22.5 à $40 cm^3.mol^{-1}$), les évolutions des pressions et des écarts entre les bornes sont illustrées sur la figure A.6. Les pressions calculées par l'équation d'ALCYONE atteignent la dizaine de GPa (entre 1.4 et $13.3 GPa$, droites en pointillés noirs). Comme à température ambiante, les écarts entre les bornes augmentent lorsque le volume molaire diminue et ces écarts sont également relativement importants (entre $270 MPa$ et $4.4 GPa$).

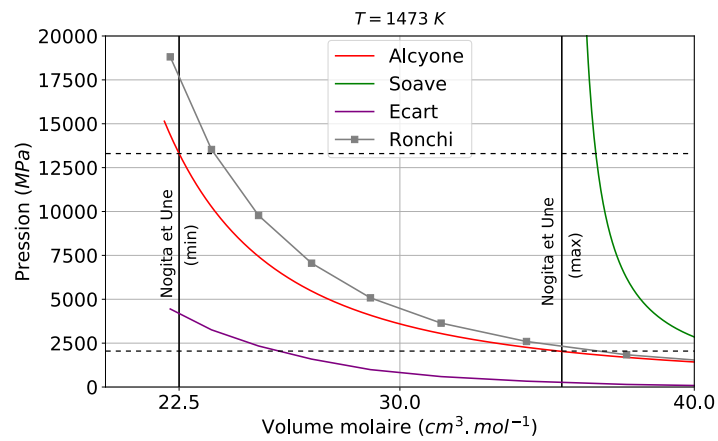


FIGURE A.6 – Évolution de la pression et des écarts entre les bornes (en MPa) en fonction du volume molaire (en $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$) à 1473 K , aux volumes molaires représentatifs des bulles submicrométriques. Zoom de la figure 1.18.

A.3 Estimations des coefficients d'élasticité par la méthode Ponte Castañeda et Willis

Le modèle de de Ponte Castañeda et Willis [29] permet d'estimer par une borne supérieure les modules d'élasticités effectifs d'un milieu contenant des cavités de forme ellipsoïdales. Les expressions des modules d'élasticité pour des cavités ellipsoïdales orientées aléatoirement et réparties de façon isotrope sont données dans [138], dans ce cas, le module de compressibilité est donné par :

$$k^{hom} = -\frac{k_n}{k_d} \quad (\text{A.1})$$

avec

$$k_n = 2k'\mu_e \left[k' (2f_v + (-3 + 4f_v) w^2) (-2 + w^2 + w^4) + 2(-1 + f_v) w^2 (-1 - w^2 + 2w^4) \mu_e \right. \\ \left. + w \arccos(w) (2\sqrt{1 - w^2} (3k' (1 + f_v + (-1 + 2f_v) w^2) + (-1 + f_v) (-1 + 4w^2) \mu_e) \right. \\ \left. - 9k'w \arccos(w)) \right]$$

et

$$k_d = (-1 + w)(1 + w) \left[3f_vk' (1 + 2w^2) (k' (2 + w^2) + w^2\mu_e) \right. \\ \left. + 2w^2\mu_e (3k' (2 + w^2) + 2\mu_e + 4w^2\mu_e) \right] \\ + w \arccos(w) \left[\sqrt{1 - w^2} (9f_vk'^2 (1 + 2w^2) + 3k' (-4 - f_v + 4(1 + f_v) w^2) \mu_e \right. \\ \left. + 4(-1 + 4w^2) \mu_e^2) + 18k'w\mu_e \arccos(w) \right]$$

avec $w = \frac{b}{a}$ le rapport de forme des cavités, a et b étant la demi-longueur du grand et du petit axe de la cavité respectivement.

Dans le cas particulier des fissures ($w \rightarrow 0$), l'équation (A.1) devient :

$$k^{hom} = k' - k' \frac{12\alpha_c(1 - \nu)^2}{9\pi(1 - 2\nu) + 4\alpha_c(1 + \nu)^2} \quad (\text{A.2})$$

avec ν le coefficient de Poisson de la matrice du milieu et $\alpha_c = \frac{4}{3}\pi b^3 N_c$, avec N_c le nombre de fissures par unité de volume.

A.4 Détail des "incertitudes" de la sur-contrainte de traction des bulles

La moyenne de l'intensité de la sur-contrainte de la population de bulles dont l'apport est prépondérant et son "incertitude" sont reportées dans le tableau A.1, ainsi que le rapport entre ces deux valeurs. Afin d'identifier les termes prépondérant dans l'expression de $\Delta\sigma_B$, le premier et le deuxième terme à droite dans l'équation (1.55) sont également reportés sous forme adimensionnée (le terme en $\Delta P \Delta B$ n'est pas reporté car il est négligeable).

Zone de la pastille	Zone centrale (0 – 2.16 mm)		Zone intermédiaire (2.16 – 4.08 mm)		Rim 4.08 – 4.14 mm
	intra	inter	intra	inter	inter
σ_B (en MPa)	36	95	165	27	50
$\Delta\sigma_B$ (en MPa)	38	11	60	2	10
$\Delta\sigma_B/\sigma_B$ (en %)	106	12	36	7	20
$P_{eff}\Delta B/\Delta\sigma_B$ (en %)	95	0	0	0	0
$B\Delta P/\Delta\sigma_B$ (en %)	5	100	100	100	100

TABLE A.1 – Résumé des écarts des encadrements de la sur-contrainte de traction des bulles.

A.5 Prise en compte de l'ensemble des populations de bulles dans la sur-contrainte de traction

La sur-contrainte de traction pour une seule population de bulles (les bulles intragranulaires en l'occurrence) s'exprime comme :

$$\sigma_{Bi} = P_{eff,i} B_i \quad (\text{A.3})$$

avec B_i le coefficient de Biot de la population de bulles donné par (1.51) et $P_{eff,i}$ la surpression régnant dans la population. La contrainte qui règne dans le matériau s'écrit alors :

$$\bar{\sigma} = \bar{C}^{(4)} : \bar{\epsilon} - P_{eff,i} B_i \bar{\bar{I}} \quad (\text{A.4})$$

avec $\bar{\sigma}$ le tenseur des contraintes, $\bar{C}^{(4)}$ le tenseur des modules d'élasticité du matériau, $\bar{\epsilon}$ le tenseur de déformation et $\bar{\bar{I}}$ le tenseur identité d'ordre 2. Si une deuxième population de bulles dont la taille caractéristique est d'au moins un ordre de grandeur de différence avec la première population (en l'occurrence les bulles intergranulaires) est présente, alors la contrainte qui règne dans le matériau s'écrit [138] :

$$\bar{\sigma} = \bar{C}^{(4)} : \bar{\epsilon} - P_{eff,j} B_j \bar{\bar{I}} + (B_j - 1) B_i P_{eff,i} \bar{\bar{I}} \quad (\text{A.5})$$

avec B_j et $P_{eff,j}$ respectivement le coefficient et la pression de la deuxième population de bulles (des bulles intergranulaires). L'équation (A.5) fait intervenir un terme croisé en $B_j B_i$ entre les coefficients de Biot des populations existants à deux échelles différentes, ce terme est négligeable lorsque B_j est petit devant l'unité :

$$\begin{aligned} B_j &\ll 1 \\ &\Leftrightarrow \\ B_j B_i P_{eff,i} &\ll B_i P_{eff,i} \end{aligned}$$

L'équation (A.5) devient alors :

$$\bar{\sigma} = \bar{C}^{(4)} : \bar{\epsilon} - P_{eff,j} B_j \bar{\bar{I}} - B_i P_{eff,i} \bar{\bar{I}} \quad (\text{A.6})$$

Au premier ordre il y a donc superposition des contraintes de sur-traction de chacune des populations de bulles. Ceci est vrai même pour un plus grand nombre de populations (tant que les coefficients de Biot restent petits devant l'unité), ce qui permet de généraliser l'équation (A.6) par :

$$\bar{\sigma} = \bar{C}^{(4)} : \bar{\epsilon} - \sum_k P_{eff,k} B_k \bar{\bar{I}} \quad (\text{A.7})$$

avec B_k et $P_{eff,k}$ le coefficient et la pression de la $k^{\text{ème}}$ population de bulles.

Annexes relatives au modèle de zones cohésives

B.1 Expression de l'énergie libre de cohésion en fonction de la contrainte et du saut de déplacement effectif

D'après Ortiz et Pandolfi [108], le saut de déplacement effectif au niveau d'une fissure peut s'exprimer sous la forme suivante :

$$\delta = \sqrt{u_N^2 + \alpha^2 \|\vec{u}_T\|^2} \quad (\text{B.1})$$

avec α un paramètre permettant de définir un poids entre le saut de déplacement tangent et normal à la fissure. Il est ensuite supposé que la densité d'énergie libre cohésive dépend uniquement du déplacement effectif :

$$\Psi_H(u_N, \vec{u}_T) = \Psi_H(\delta) \quad (\text{B.2})$$

Dans ces conditions la loi cohésive peut s'écrire en toute généralité :

$$\vec{R} = \frac{R}{\delta} (\alpha^2 \vec{u}_T + u_N \vec{n}) \quad (\text{B.3})$$

avec :

$$R = \frac{\partial \Psi_H}{\partial \delta} \quad (\text{B.4})$$

la contrainte cohésive effective.

En notant $\vec{R} = R_N \vec{n} + \vec{R}_T$, l'expression (B.3) conduit à :

$$R_N = \frac{R}{\delta} u_N \quad (\text{B.5})$$

$$\vec{R}_T = \frac{R}{\delta} \alpha^2 \vec{u}_T \quad (\text{B.6})$$

La somme des carrés des expressions (B.5) et (B.6) donne :

$$R_N^2 + \left\| \vec{R}_T \right\|^2 \alpha^{-2} = \frac{R^2}{\delta^2} \left(u_N^2 + \alpha^2 \|\vec{u}_T\|^2 \right). \quad (\text{B.7})$$

Donc, d'après (B.1), la relation (B.7) se simplifie pour donner :

$$R = \sqrt{R_N^2 + \left\| \vec{R}_T \right\|^2 \alpha^{-2}}. \quad (\text{B.8})$$

L'expression de la contrainte cohésive effective étant définie, la relation entre l'énergie de séparation Ψ_H^{sep} et R peut être déduite d'après l'expression de l'intégrale de Rice J_R [119]. La définition de cette intégrale donne :

$$J_R = \int_{\Gamma_T} \left(W_{elas} dy - \sigma_{ik} n_k^\Gamma \frac{\partial u_i}{\partial x} d\Gamma \right) \quad (\text{B.9})$$

avec W_{elas} la densité d'énergie élastique, Γ_T un contour fermé, \vec{n}^Γ la normale au contour Γ_T et les axes x et y étant orientés respectivement selon $-\vec{t}$ et \vec{n} (représentés FIGURE 2.1). La valeur de cette intégrale étant indépendante du contour pour un matériau élastique homogène, Γ_T peut être défini le long de la surface supérieure et inférieure de la zone cohésive, dans ce cas $dy = 0$. En rappelant que $\vec{R} = \bar{\sigma} \cdot \vec{n}$ (avec $\vec{n} = \vec{n}^\Gamma$ dans ce cas) et que $\vec{u} = [\vec{u}]$ sur la fissure, l'intégrale de Rice devient :

$$J_R = \int_{\Gamma_T} \left(R_i \frac{\partial [u_i]}{\partial x} dx \right) \quad (\text{B.10})$$

D'après les expressions (B.1) et (B.3) l'intégrale peut être réécrite de la manière suivante :

$$J_R = \int_0^{l_{czm}} R \frac{\partial \delta}{\partial x} dx \quad (\text{B.11})$$

avec l_{czm} la longueur de la zone cohésive (en 2D). Un changement de variable permet d'exprimer cette valeur en faisant intervenir le saut déplacement critique :

$$J_R = \int_0^{\delta_c} R d\delta. \quad (\text{B.12})$$

Or l'intégrale J_R est égale au taux de restitution critique de l'énergie, lui-même égal à Ψ_H^{sep} pour une fissure se propageant en ligne droite [91], on a donc :

$$\Psi_H^{sep} = G_c = \int_0^{\delta_c} R d\delta. \quad (\text{B.13})$$

B.2 Dérivation des lois de comportement du modèle RCCM

Dans le modèle RCCM les lois de comportement dérivent des équations (2.14) et (2.15), rappelées ici :

$$-(R_N + R_N^{coh}) \in \partial_{I_{\mathbb{R}^+}}(u_N) \quad (\text{B.14})$$

$$\vec{R}_T + \vec{R}_T^{coh} \in \partial_{\vec{u}_T} \left(\mu_f |R_N + R_N^{coh}| \|\vec{u}_T\| \right) \quad (\text{B.15})$$

\vec{R} étant non-différentiables en tous points, les lois de comportements sont données sous forme de sous-différentielles.

Soit f une fonction convexe, un vecteur $\vec{\zeta} \in \mathbb{R}^n$ est appelé sous-gradient de f au point $\vec{x}_0 \in \text{dom}(f)$ si :

$$\forall \vec{x} \in \text{dom}(f), f(\vec{x}) \geq f(\vec{x}_0) + \vec{\zeta} \cdot (\vec{x} - \vec{x}_0)$$

avec $\text{dom}(f)$ le domaine de définition de f . L'ensemble de tous les sous-gradients $\vec{\zeta}$ en \vec{x}_0 est appelé sous-différentiel de f [122].

L'équation (B.14) fait intervenir l'indicatrice du $I_K(u_N)$ sur l'ensemble $K \in \mathbb{R}^n$ convexe fermé, définie par [122] :

$$I_K(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \in K \\ +\infty & \text{sinon .} \end{cases} \quad (\text{B.16})$$

La présence de cette fonction indicatrice rend l'équation non différentiable, la sous-différentielle de $I_K(\vec{x}_0)$ pour $\vec{x}_0 \in \partial K$ est définie par :

$$\partial_{I_K(\vec{x}_0)} = \{ \vec{\zeta} \in \mathbb{R}^n, \vec{\zeta} \cdot (\vec{x} - \vec{x}_0) \leq 0, \forall \vec{x} \in K \} \quad (\text{B.17})$$

Afin de prendre en compte l'unilatéralité du contact K est défini comme étant \mathbb{R}^+ (l'ensemble des réels positifs). L'expression précédente de la sous-différentielle intervenant dans l'équation (B.14) s'écrit :

$$\partial_{I_{\mathbb{R}^+}}(u_N) = \{ u_\eta \in \mathbb{R}, u_\eta(u_x - u_N) \leq 0, \forall u_x \in \mathbb{R}^+ \} \quad (\text{B.18})$$

avec u_N évalué sur \mathbb{R}^+ ($u_N \geq 0$).

Si $u_N = 0$ on a :

$$\partial_{I_{\mathbb{R}^+}}(u_N = 0) = \{ u_\eta \in \mathbb{R}, u_\eta u_x \leq 0, \forall u_x \in \mathbb{R}^+ \} \quad (\text{B.19})$$

$$= \{ u_\eta \in \mathbb{R}, u_\eta \leq 0 \} \quad (\text{B.20})$$

$$= [-\infty, 0[\quad (\text{B.21})$$

si $u_N > 0$ on a :

$$\partial_{I_{\mathbb{R}^+}}(u_N > 0) = \{ u_\eta \in \mathbb{R}, \begin{cases} u_\eta \leq 0 & \text{si } u_x > u_N \\ u_\eta \in \mathbb{R} & \text{si } u_x = u_N \\ u_\eta \geq 0 & \text{si } u_x < u_N \end{cases}, \forall u_x \in \mathbb{R}^+ \} \quad (\text{B.22})$$

$$= \{0\} \quad (\text{B.23})$$

Par conséquent la relation (B.14) devient :

$$u_N \geq 0 \quad (\text{B.24})$$

$$R_N + R_N^{coh} \geq 0 \text{ si } u_N = 0 \quad (\text{B.25})$$

$$R_N + R_N^{coh} = 0 \text{ si } u_N > 0 \quad (\text{B.26})$$

Ces équations peuvent être reformulées pour donner la condition de contact adhésif unilatérale donnée par (2.16) et rappelée ici :

$$R_N + R_N^{coh} \geq 0, u_N \geq 0, (R_N + R_N^{coh}) u_N = 0 \quad (\text{B.27})$$

La relation (B.15) fait intervenir la sous-différentielle d'une norme. Cette sous différentielle pour une norme 2 s'exprime comme étant :

$$\partial f(\vec{x}) = \arg_{\|\vec{y}\| \leq 1} \max(\vec{x} \cdot \vec{y}) \quad (\text{B.28})$$

A partir de cette définition, il peut être démontré que l'équation (B.15) s'écrit [24] :

$$\left\| \vec{R}_T + \vec{R}_T^{coh} \right\| \leq \mu_f |R_N + R_N^{coh}| \quad (\text{B.29})$$

Avec

$$\left\| \vec{R}_T + \vec{R}_T^{coh} \right\| < \mu_f |R_N + R_N^{coh}| \Rightarrow \dot{u}_T = 0 \quad (\text{B.30})$$

$$\left\| \vec{R}_T + \vec{R}_T^{coh} \right\| = \mu_f |R_N + R_N^{coh}| \Rightarrow \exists \lambda \geq 0, \dot{u}_T = -\lambda \left(\vec{R}_T + \vec{R}_T^{coh} \right) \quad (\text{B.31})$$

Annexes relatives au milieu granulaire

C.1 Détail du calcul de la contrainte dans un milieu granulaire

L'équilibre dynamique des contraintes sous forme eulerienne donne :

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = \frac{\partial (\rho v_i)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho v_i v_j)}{\partial x_j} \quad (\text{C.1})$$

d'après (2.30) l'équation (C.1) peut s'exprimer comme :

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial t} \left(m \sum_{\alpha=1}^{N_c} v_{i,\alpha} g^m(\vec{x} - \vec{x}_\alpha(t)) \right) + \frac{\partial (\rho v_i v_j)}{\partial x_j} \quad (\text{C.2})$$

En supposant que la série $\sum_{\alpha=1}^{N_c} \frac{\partial}{\partial t} (v_{i,\alpha} g^m(\vec{x} - \vec{x}_\alpha(t)))$ converge uniformément, l'équation (C.2) peut s'écrire :

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = m \left(\sum_{\alpha=1}^{N_c} \frac{\partial v_{i,\alpha}}{\partial t} g^m(\vec{x} - \vec{x}_\alpha(t)) - \sum_{\alpha=1}^{N_c} v_{i,\alpha} v_{j,\alpha} \frac{\partial g^m(\vec{x} - \vec{x}_\alpha(t))}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial \rho v_i v_j}{\partial x_j} \quad (\text{C.3})$$

Si la déformation du milieu est considérée comme étant quasi-statique on a alors :

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = m \left(\sum_{\alpha=1}^{N_c} \frac{\partial v_{i,\alpha}}{\partial t} g^m(\vec{x} - \vec{x}_\alpha(t)) \right) \quad (\text{C.4})$$

Afin d'obtenir l'expression du tenseur des contraintes, le terme de droite de l'équation (C.4) doit être écrit sous forme d'une divergence. Or, d'après le principe fondamental de la dynamique :

$$m \frac{\partial v_{i,\alpha}}{\partial t} = \sum_{\beta, \beta \neq \alpha}^{N_c} f_i^{\alpha\beta} \quad (\text{C.5})$$

avec $f_i^{\alpha\beta}$ l'effort de contact exercé par le corps α sur le corps β dans la direction i . D'après la troisième loi de Newton $f_i^{\alpha\beta} = -f_i^{\beta\alpha}$ ce qui donne $f_i^{\alpha\beta} = f_i^{\beta\alpha} = (1/2) (f_i^{\alpha\beta} - f_i^{\beta\alpha})$. Ainsi

le terme de droite de l'équation (C.4) peut s'exprimer comme :

$$\sum_{\alpha, \beta \neq \alpha}^{N_c} f_i^{\alpha\beta}(t) g^m(\vec{x} - \vec{x}_\alpha(t)) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta, \beta \neq \alpha}^{N_c} f_i^{\alpha\beta}(t) [g^m(\vec{x} - \vec{x}_\alpha(t)) - g^m(\vec{x} - \vec{x}_\beta(t))] \quad (\text{C.6})$$

De plus on a [51] :

$$g^m(\vec{x} - \vec{x}_\alpha(t)) - g^m(\vec{x} - \vec{x}_\beta(t)) = - \int_0^1 \frac{\partial}{\partial s} g^m(\vec{x} - \vec{x}_\beta(t) + s\vec{x}^{\alpha\beta}(t)) ds \quad (\text{C.7})$$

$$= - \int_0^1 x_j^{\alpha\beta} \frac{\partial}{\partial x_j} g^m(\vec{x} - \vec{x}_\beta(t) + s\vec{x}^{\alpha\beta}(t)) ds \quad (\text{C.8})$$

avec $\vec{x}^{\alpha\beta}(t) = \vec{x}_\alpha(t) - \vec{x}_\beta(t)$. D'après (C.5), (C.6) et (C.8) l'équation (C.4) devient :

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[-\frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta, \alpha \neq \beta}^{N_c} f_i^{\alpha\beta}(t) x_j^{\alpha\beta}(t) \int_0^1 g^m(\vec{x} - \vec{x}_\beta(t) + s\vec{x}^{\alpha\beta}(t)) ds \right] \quad (\text{C.9})$$

en prenant la forme donnée par l'équation (2.28) pour g^m , il vient [4] :

$$\sigma_{ij} = \frac{-1}{V} \sum_{\alpha, \beta, \alpha \neq \beta}^{N_c} f_i^{\alpha\beta} x_j^{\alpha\beta} \quad (\text{C.10})$$

La plupart des couples de corps α et β n'étant pas en contact, dans la majorité des cas $f_i^{\alpha\beta}$ sera nulle. Par conséquent, la définition du tenseur des contraintes est donnée ici au point de contact i_c compris dans le volume V selon :

$$\sigma_{ij} = -\frac{1}{V} \sum_{i_c \in V} f_i^{i_c} l_j^{i_c} \quad (\text{C.11})$$

avec $f_i^{i_c} = f_i^{\alpha\beta}$ et $l_j^{i_c} = \vec{x}^{\alpha\beta}$ les corps α et β étant en contact au point de contact i_c .

C.2 Définition du critère de Mohr-Coulomb

Afin d'évaluer le critère donné par l'équation (3.10), l'orientation du plan sur lequel la condition de glissement est respectée doit être définie. Cette direction n'est a priori pas connue, il est donc nécessaire de définir l'état de contraintes dans toutes les directions possibles afin d'appliquer le critère dans un cas général. Pour cela le tenseur des contraintes est exprimé dans la base de ses directions principales, ce qui donne :

$$\bar{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_I & 0 \\ 0 & \sigma_{II} \end{pmatrix} \quad (\text{C.12})$$

avec $\sigma_I > \sigma_{II}$ les contraintes principales. Le vecteur contrainte porté par la normale \vec{n}' à un plan quelconque est donné par :

$$\vec{R} = \bar{\sigma} \cdot \vec{n}' \quad (\text{C.13})$$

avec $\vec{n}' = (\sin(\theta), -\cos(\theta))$ dans un repère (\vec{x}, \vec{y}) orthonormal donné. En projetant ce vecteur sur les axes des directions principales du tenseur des contraintes \vec{e}_I, \vec{e}_{II} , définies telles que $\bar{\sigma} = \sigma_I(\vec{e}_I \otimes \vec{e}_I) + \sigma_{II}(\vec{e}_{II} \otimes \vec{e}_{II})$ lorsque $\bar{\sigma}$ est exprimé dans la base des directions principales, on a :

$$R_I = \bar{\sigma} \cdot \vec{n}' \cdot \vec{e}_I = \sigma_I \sin(\theta) \quad (\text{C.14})$$

$$R_{II} = \bar{\sigma} \cdot \vec{n}' \cdot \vec{e}_{II} = -\sigma_{II} \cos(\theta) \quad (\text{C.15})$$

La projection de ce vecteur sur la normale et le vecteur tangent $\vec{t}' = (\cos(\theta), \sin(\theta))$ au plan considéré donne :

$$R_N = (\bar{\sigma} \cdot \vec{n}') \cdot \vec{n}' = R_I \sin(\theta) - R_{II} \cos(\theta) \quad (\text{C.16})$$

$$R_T = (\bar{\sigma} \cdot \vec{n}') \cdot \vec{t}' = R_I \cos(\theta) + R_{II} \sin(\theta). \quad (\text{C.17})$$

En injectant (C.14) et (C.15) dans (C.16) et (C.17) l'expression devient :

$$R_N = \sigma_I \sin^2(\theta) + \sigma_{II} \cos^2(\theta) \quad (\text{C.18})$$

$$R_T = \sigma_I \cos(\theta) \sin(\theta) - \sigma_{II} \cos(\theta) \sin(\theta). \quad (\text{C.19})$$

Or comme $\cos(2\theta) = \cos^2(\theta) - \sin^2(\theta)$, $\cos^2(\theta) + \sin^2(\theta) = 1$ et $\sin(2\theta) = 2 \cos(\theta) \sin(\theta)$, les expressions précédentes deviennent :

$$R_N = \frac{1}{2}(\sigma_I + \sigma_{II}) + \frac{1}{2} \cos(2\theta) (\sigma_I - \sigma_{II}) \quad (\text{C.20})$$

$$\sigma_t = \frac{1}{2} \sin(2\theta) (\sigma_I - \sigma_{II}) \quad (\text{C.21})$$

soit :

$$R_N - R_{N0} = r_{mc} \cos(2\theta) \quad (\text{C.22})$$

$$R_T - R_{T0} = r_{mc} \sin(2\theta) \quad (\text{C.23})$$

où $R_{N0} = (1/2)(\sigma_I + \sigma_{II})$, $R_{T0} = 0$ et $r_{mc} = (1/2)(\sigma_I - \sigma_{II})$ définissent le cercle de Mohr dans le plan R_N, R_T , représenté par la figure C.1. D'après cette figure, le critère peut être

interprété géométriquement : le glissement intervient lorsque la droite de pente $\tan(\theta_{Coul})$ est tangente au cercle de Mohr comme le montre la FIGURE C.1.

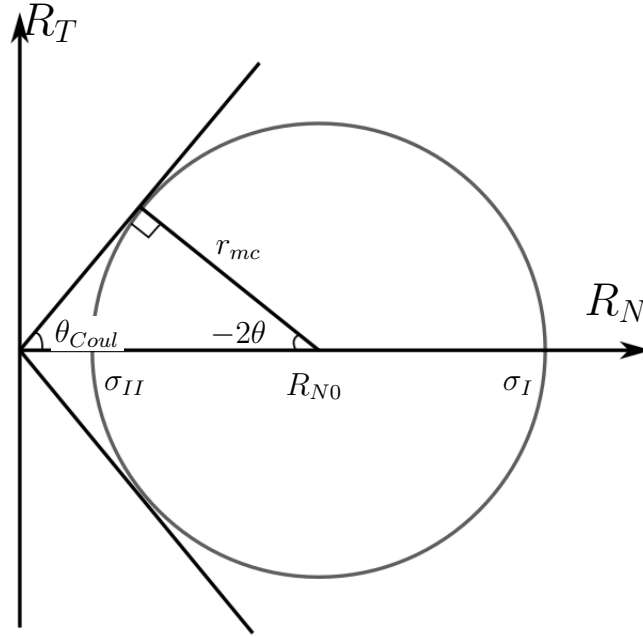


FIGURE C.1 – Cercle de Mohr avec représentation du critère de Coulomb (3.10) (sans cohésion) dans le cas bidimensionnel.

L'expression du critère de Coulomb en fonction des contraintes principales peut être obtenue par la relation trigonométrique suivante :

$$\sin(\theta_{Coul}) = \frac{r_{mc}}{R_{N0}} = \pm \frac{\sigma_I - \sigma_{II}}{\sigma_I + \sigma_{II}}, \quad (C.24)$$

cette relation permet de définir une fonction de seuil de plasticité qui est nulle lorsque le critère est atteint :

$$f_p(\bar{\sigma}) = (\sigma_I - \sigma_{II})^2 - (\sigma_I + \sigma_{II})^2 \sin^2(\theta_{Coul}). \quad (C.25)$$

De plus, les expressions (C.22) et (C.23) permettent de déduire la normale au plan pour lequel le critère est atteint. D'après la relation : $2\theta = \pm(\frac{\pi}{2} - \theta_{Coul})$ la normale au plan s'exprime comme :

$$\vec{n}'' = \pm \begin{pmatrix} \sin(\frac{\pi}{4} - \frac{\theta_{Coul}}{2}) \\ -\cos(\frac{\pi}{4} - \frac{\theta_{Coul}}{2}) \end{pmatrix}. \quad (C.26)$$

Le raisonnement aboutissant à l'expression de la fonction seuil donné par (C.25) peut être généralisée au cas 3D via le plus grand des cercles de Mohr, ce qui donne :

$$f_p(\bar{\sigma}) = (\sigma_I - \sigma_{III})^2 - (\sigma_I + \sigma_{III})^2 \sin^2(\theta_{Coul}) \quad (C.27)$$

avec $\sigma_I > \sigma_{II} > \sigma_{III}$ les contraintes principales dans le cas tridimensionnel.

C.3 Les modèles de da Cruz et Jop

Dans le régime quasi-statique ($I_g < 10^{-3}$) les déformations sont très faibles et le comportement du matériau est régi par les interactions de contact entre particules. Dans le régime collisionnel ($I_g > 0.1$) le comportement des granulats est indépendant des voisins et le milieu peut être assimilé à un gaz dense [23]. Dans un tel régime, la contrainte dépend du carré du taux de cisaillement selon la relation de Bagnold [7] :

$$\sigma_{ij} = f_{ij}^B(\psi)\rho_p d^2 \dot{\epsilon}_t^2 \quad (\text{C.28})$$

avec $f_{ij}^B(\psi)$ une fonction sans dimension dépendante de la compacité du milieu. A l'interface entre le régime collisionnel et le régime quasi-statique, les écoulements inertiels denses sont caractérisés par des interactions présentant des contacts de longue durée et des collisions. Ces écoulements présentent un comportement complexe à décrire de part la forte corrélation entre la vitesse des particules et les efforts de contact. Le milieu granulaire dans ce régime peut être associé à un milieu viscoplastique.

Une équation constitutive pour un milieu granulaire subissant un cisaillement plan est proposée par da Cruz et al. [36]. Dans cette étude, des simulations numériques ont été réalisées afin de représenter le comportement de l'écoulement granulaire dans de telles conditions. D'après l'analyse de l'évolution des caractéristiques de l'écoulement, la compacité et le coefficient de frottement effectif dépendent linéairement du nombre inertiel selon les équations (C.29) et (C.30) respectivement :

$$\psi(I_g) = \psi_{max} - a_{dc} I_g \quad (\text{C.29})$$

$$\mu_{eff} = \mu_{eff}^{min} + b_{dc} I_g \quad (\text{C.30})$$

où a_{dc} et b_{dc} sont des constantes qui varient en fonction du coefficient de frottement entre particules, ψ_{max} est la compacité du milieu au repos et μ_{eff}^{min} est le coefficient de frottement effectif du milieu pour $I_g \rightarrow 0$ (le coefficient n'ayant pas de sens pour un milieu au repos). D'après l'analyse dimensionnelle, la contrainte dans le système dépend de la compacité et du taux de cisaillement. Les expressions (C.29) et (C.30) associées à la définition de I_g (3.12) permettent d'exprimer la loi de comportement du milieu comme étant :

$$R_N = \frac{a_{dc}^2}{(\psi_{max} - \psi)^2} m \dot{\epsilon}_t^2 \quad (\text{C.31})$$

$$R_T = \mu_{eff}^{min} R_N + \frac{a_{dc} b_{dc}}{(\psi_{max} - \psi)} m \dot{\epsilon}_t^2 \quad (\text{C.32})$$

Cette loi comporte un terme plastique de type coulomb $\mu_{eff}^{min} R_N$ et un terme de type Bagnold proportionnels à $\dot{\epsilon}_t^2$.

Les expressions des paramètres adimensionnés I_g et μ_{eff} données respectivement par les équations (3.12) et (3.10) peuvent être généralisées au cas tridimensionnel. Le nombre inertiel peut alors s'écrire comme étant :

$$I_g = \|\bar{\dot{\epsilon}}\| \langle d \rangle \sqrt{\frac{\rho_p}{|\sigma_H|}}. \quad (\text{C.33})$$

Avec $\|\bar{\dot{\epsilon}}\| = \sqrt{\frac{2}{3}\dot{\epsilon}_{ij}\dot{\epsilon}_{ij}}$ et $\sigma_H = \frac{1}{3}Tr(\bar{\sigma})$, la contrainte hydrostatique. Et le coefficient de friction effectif s'exprime comme :

$$\mu_{eff} = \frac{\|\bar{\sigma}^d\|}{\sigma_H}. \quad (\text{C.34})$$

Avec $\|\bar{\sigma}^d\| = \sqrt{\frac{3}{2}\sigma_{ij}^d\sigma_{ij}^d}$, $\bar{\sigma}^d$ étant la partie déviatorique de la contrainte, donnée par l'équation (C.35) :

$$\sigma_{ij} = \sigma_H \bar{I}_{ij} + \sigma_{ij}^d \quad (\text{C.35})$$

avec \bar{I} le tenseur identité. En se basant sur cette formulation Jop et al. [71] proposent une loi de comportement tridimensionnelle d'un écoulement granulaire inertiel. En faisant l'hypothèse que la variation de compacité est négligeable, le milieu peut être décrit comme un fluide incompressible. La contrainte déviatorique peut être exprimé comme :

$$\sigma_{ij}^d = \eta(\|\bar{\dot{\epsilon}}\|, \sigma_H) \dot{\epsilon}_{ij}. \quad (\text{C.36})$$

Avec $\eta(\|\bar{\dot{\epsilon}}\|, \sigma_H)$ la viscosité effective du système dont la forme est :

$$\eta(\|\bar{\dot{\epsilon}}\|, \sigma_H) = \mu_{eff}(I_g) \frac{\sigma_H}{\|\bar{\dot{\epsilon}}\|} \quad (\text{C.37})$$

L'expression du coefficient de frottement effectif du milieu qui dépend du nombre inertiel est donnée par :

$$\mu_{eff}(I_g) = \mu_s + \frac{\mu_2 - \mu_s}{\frac{I_0}{I_g} + 1}. \quad (\text{C.38})$$

Avec I_0 une constante, μ_s et μ_2 les coefficients de frottement effectif dans le régime quasi-statique et collisionnel respectivement. Une propriété de l'équation (C.36) est qu'elle fait apparaître un critère de plasticité de type Coulomb lorsque le cisaillement tend vers 0. Ainsi le matériau ne peut se déformer plastiquement tant que la condition (C.39) est respectée.

$$\|\bar{\sigma}^d\| < \mu_s \sigma_H. \quad (\text{C.39})$$

La forme de l'équation (C.36) est généralement utilisée pour les fluides viscoplastiques ou fluides de Bingham caractérisés par un seuil avant écoulement. Le milieu granulaire présente la spécificité d'avoir une viscosité dépendante à la fois du taux de cisaillement et de la contrainte hydrostatique. Cette dépendance est due au caractère frottant des particules.

Dans le cadre des milieux granulaire immergé (en présence de fluide), Boyer et al. [19] montrent que la compacité et le coefficient de frottement effectif peuvent s'écrire comme des fonction du nombre visqueux J (voir équation (3.13)) :

$$\psi(J) = \frac{\psi_{min}}{1 + \sqrt{J}} \quad (\text{C.40})$$

$$\mu_{eff}(J) = \mu_s + \frac{\mu_2 - \mu_s}{\frac{I_0}{J} + 1} + J + \frac{5}{2}\psi_{min}\sqrt{J} \quad (\text{C.41})$$

avec ψ_{min} la compacité du milieu lorsque $J \rightarrow 0$.

C.4 Définition d'un algorithme de régularisation des fragments élémentaires

C.4.1 Principe de la méthode de génération des fragments

Dans le modèle DEM-CZM, le combustible est défini par un assemblage de fragments élémentaires polyédriques indéformables liés par des interactions cohésives. Pour ce modèle, l'état de fragmentation maximal de chacune des zones radiale est prédéfini par la taille des fragments élémentaires dans ces zones. Comme un fragment élémentaire ne peut se fissurer, ainsi, si la totalité des interactions cohésives sont rompues, le combustible ne peut plus se fragmenter. L'état de fragmentation maximal de chacune des zones du combustible est donc prédéfini dans le modèle. Or, d'après les mesures réalisées sur un combustible irradié ayant subi un recuit thermique [102], il semble que la taille des fragments de la pastille dépende de la position radiale. Afin de représenter cet effet dans la modélisation, la variation radiale de la taille des fragments élémentaires doit être contrôlée. Pour ce faire, le logiciel NEPER [113] est utilisé car il permet de générer des corps polyédriques dont la statistique de taille peut être prédéfinie, par le biais de la méthode de Voronoï.

Cette méthode consiste à discrétiser un domaine Ω_s par un ensemble de polyèdres sans recouvrement ni espacement. Afin de générer cette discrétisation, une collection de points \mathcal{S}_V , appelés germes, est définie. Un germe G_α de position $\vec{x}_{g,\alpha}$ est alors associé à un polyèdre C_α tel que :

$$C_\alpha = \{\vec{x} \in \Omega_s \mid \|\vec{x} - \vec{x}_{g,\alpha}\| < \|\vec{x} - \vec{x}_{g,\alpha'}\| \quad \forall \alpha' \neq \alpha\} \quad (\text{C.42})$$

avec \vec{x} un point quelconque du domaine. D'après l'équation (C.42), l'ensemble de polyèdres est défini de sorte que pour un point \vec{x} appartenant à C_α , le germe le plus proche de ce point soit G_α . Cette propriété implique que la taille des polyèdres obtenus dans une zone donnée (i.e. leur rayon moyen) est dépendante de la densité locale des germes (plus cette densité est élevée et plus la taille des polyèdres sera petite).

Ainsi, la taille des fragments élémentaires générés par la méthode de Voronoï peut être contrôlée en définissant les positions des germes dans le domaine Ω_s . Pour cela, ces positions sont définies de manière à ce que la distance entre deux germes voisins soit égale à la taille de polyèdre visée dans cette zone.

Afin d'obtenir une distribution de taille de fragments qui soit dispersée, ces germes sont ensuite translatés à une nouvelle position définie au hasard. Cette nouvelle position est déterminée par une fonction aléatoire qui suit une densité de probabilité normale de moyenne nulle et dont l'écart type est égale à une fraction (en général entre un cinquième et un dixième) de la taille de polyèdre visée. Cet écart type définit la distance caractéristique sur laquelle les germes sont translatés (par définition de la loi normale, en moyenne 68 % des germes sont translatés d'une distance inférieure ou égale à l'écart type). Suite à la translation d'un germe associé à un polyèdre donné, les positions des sommets de ce polyèdre sont également translatées. Par conséquent, la taille et la forme de ce polyèdre sont modifiées et ce de manière aléatoire.

La figure C.2 est une illustration d'une collection de germes translatés pour laquelle la taille visée des polyèdres est plus grande au centre (points rouges) qu'en périphérie (points verts).

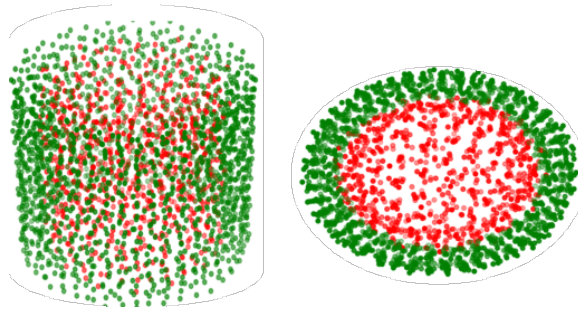


FIGURE C.2 – Illustration des germes du pavage de Voronoï définissant les fragments élémentaires de la pastille.

C.4.2 Principe de la méthode de régularisation des fragments

A partir de cette collection de germes, les fragments sont générés. Les fragments obtenus peuvent présenter des arêtes de petite taille, comme l'illustre la figure C.3. La présence de ces petites arêtes est problématique dans notre cas, car elles peuvent empêcher la résolution de la dynamique de contact entre fragments. En effet, lors de la résolution il existe une étape de détection de contact (voir l'algorithme 1 en section 2.1.4.1) qui requiert de triangulariser la surface des fragments (i.e. discrétiser la surface en un ensemble de triangles). Si les triangles générés sont irréguliers, au sens où le rapport entre le plus petit et le plus grand de ses côtés est inférieur à une certaine tolérance, la détection de contact ne peut être résolue numériquement.

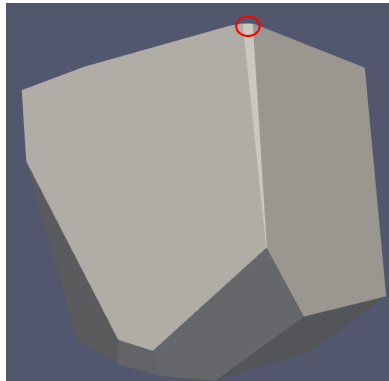


FIGURE C.3 – Image d'un polyèdre présentant une petite arête (encerclée en rouge), empêchant la résolution de la dynamique de contact.

Une méthode de régularisation existe dans NEPER et consiste à remplacer une arête de petite taille par un seul sommet. Néanmoins, cette méthode ne peut pas être appliquée dans notre cas, car elle peut générer des polyèdres non-convexes, ce qui empêche également la résolution de la dynamique de contact. Par conséquent, une méthode de régularisation permettant de conserver la convexité des polyèdres a été implémentée.

Cette méthode, introduite par Lloyd [80], consiste à translater les germes du pavage aux barycentres des polyèdres qui leur sont associés, puis à régénérer le pavage de Voronoï à partir de cette nouvelle collection de germes obtenue. Ces étapes sont alors répétées jusqu'à ce qu'un critère soit atteint. Pour un nombre d'itérations suffisant cet algorithme permet supprimer les petites arêtes.

En revanche, la répétition de l'algorithme a pour effet d'uniformiser la taille de l'ensemble des polyèdres. Afin d'éviter cela, l'algorithme est appliqué localement au niveau des polyèdres contenant la plus petite des arêtes du pavage, dont la longueur est notée l_{min} . Une fois que ces polyèdres sont identifiés, leur barycentre est calculé en triangularisant leur surface d'après l'équation suivante [105] :

$$\vec{c}^{bary} \cdot \vec{e}_i = \frac{1}{2V_{poly}} \sum_{j=0}^{N_{tri}-1} \frac{1}{24} \vec{n}_j^{tri} \cdot \vec{e}_i \left[\left((\vec{a}_j + \vec{b}_j) \cdot \vec{e}_i \right)^2 + \left((\vec{b}_j + \vec{c}_j) \cdot \vec{e}_i \right)^2 + \left((\vec{c}_j + \vec{a}_j) \cdot \vec{e}_i \right)^2 \right] \quad (C.43)$$

où $\vec{e}_i \in \{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3\}$ est un vecteur de base de \mathbb{R}^3 , N_{tri} est le nombre de triangles permettant de discrétiser les faces du polyèdre avec $(\vec{a}_i, \vec{b}_i, \vec{c}_i)$ les vecteurs définissant les arêtes du $i^{\text{ème}}$ triangle et dont le sens est défini tel que $\vec{n}^{tri} = (\vec{b}_i - \vec{a}_i) \wedge (\vec{c}_i - \vec{a}_i)$, \vec{n}^{tri} étant la normale sortante au triangle. V_{poly} est le volume du polyèdre défini par :

$$V_{poly} = \frac{1}{6} \sum_{j=0}^{N_{tri}-1} \vec{a}_j \cdot \vec{n}_j^{tri} \quad (C.44)$$

Connaissant la position des barycentres des polyèdres contenant la plus petite des arêtes, les germes associés sont translétés au niveau de ces barycentres. L'algorithme est ensuite répété jusqu'à ce que la plus petite des arêtes soit supérieure à une taille critique l_{min}^{tol} ou qu'un nombre d'itération maximale N_{iter}^{tol} soit atteint (avec N_{iter} le nombre d'itération). La figure C.4 présente l'évolution de la longueur de la plus petite des arêtes en fonction du nombre d'itérations.

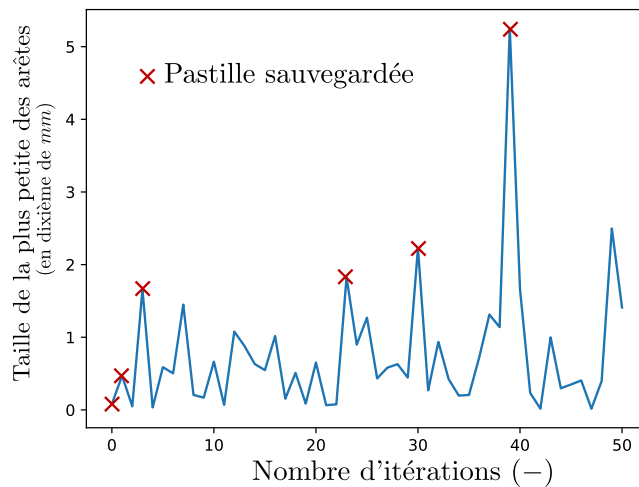


FIGURE C.4 – Evolution de la longueur de la plus petite des arêtes en fonction du nombre d'itération de l'algorithme de régularisation de géométrie.

Comme l'illustre cette figure, cette évolution est non-monotone. Par conséquent, parmi l'ensemble des collections de polyèdres générées, la dernière n'est pas nécessairement la meilleure au sens où la longueur de la plus petite des arêtes de cette collection n'est pas la plus grande à avoir été générée. C'est pourquoi, à l'itération k , la collection de polyèdres générée $\mathcal{S}^k(C)$ est sauvegardée si la longueur de la plus petite de ses arêtes l_{min}^k respecte le critère suivant :

$$l_{min}^k > \max\{l_{min}^m | k < m\} = l_{min}^{max} \quad (\text{C.45})$$

avec l_{min}^{max} la longueur de la meilleure collection de polyèdres. Les collections sauvegardées au cours des itérations sont désignées par les croix rouges sur la figure C.4.

L'algorithme de régularisation est résumé par la suite :

Algorithme 3 Algorithme de régularisation de la géométrie

Génération des coordonnées des germes

Translation de la position des germes aléatoirement

$l_{min} \leftarrow 0$

tant que $l_{min} < l_{min}^{tol}$ ou $N_{iter} < N_{iter}^{tol}$ **faire**

 Génération du pavage de Voronoï (NEPER)

 Calcul de la longueur de la plus petite des arêtes l_{min}

si $l_{min} < l_{min}^{max}$ **alors**

$l_{min}^{max} \leftarrow l_{min}$

 Sauvegarde de la géométrie

fin si

 Récupération des indices $\{\alpha_m, \dots, \alpha_n\}$ des polyèdres contenant la plus petite des arêtes

pour $\alpha \in \{\alpha_m, \dots, \alpha_n\}$ **faire**

 Calcul du barycentre du polyèdre identifié \vec{c}_α^{bary} d'après l'équation (C.43)

 Translation du germe G_α vers le barycentre \vec{c}_α^{bary}

fin pour

fin tant que

Bibliographie

- [1] O. Ait Oucheggou, V. Pointeau, G. Ricciardi, É. Guazzelli, et L. Bergougnoux. Particle-laden flow around an obstacle in a square pipe : experiments and modeling. *Mechanics & Industry*, 21(5) :517, 2020. [Cité pages 188 et 193.]
- [2] L. Amarsid. *Rhéologie des écoulements granulaires immergés dans un fluide visqueux*. Thèse de doctorat, Université de Montpellier, 2016. [Cité pages viii, xv, xvi, xviii, xix, 150, 157, 158 et 159.]
- [3] T. B. Anderson et R. Jackson. Fluid Mechanical Description of Fluidized Beds. Equations of Motion. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 6(4) :527–539, 1967. [Cité page 167.]
- [4] B. Andreotti, Y. Forterre, et O. Pouliquen. *Granular media : between fluid and solid*. Cambridge University Press, Cambridge, 2013. ISBN 978-1-107-03479-2. [Cité pages viii, 113, 155, 185 et 210.]
- [5] B. Ang et B. Su. Carbon emission intensity in electricity production : A global analysis. *Energy Policy*, 94 :56–63, 2016. [Cité page 1.]
- [6] A. Baddeley et E. B. V. Jensen. *Stereology for statisticians*. Chapman & Hall/CRC, Boca Raton, FL, 2005. ISBN 978-0-203-49681-7 978-1-58488-405-7 978-1-135-43836-4 978-1-135-43831-9 978-1-135-43835-7. [Cité page 51.]
- [7] R. A. Bagnold. Experiments on a gravity-free dispersion of large solid spheres in a Newtonian fluid under shear. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 225(1160) :49–63, 1954. [Cité page 213.]
- [8] H. Bailly, D. Ménessier, et C. Prunier. *Le combustible nucléaire des réacteurs à eau sous pression et des réacteurs à neutrons rapides*. Eyrolles, Paris, 1996. ISBN 2-7272-0183-4. [Cité pages v et 13.]
- [9] J. A. Beattie, R. J. Barriault, et J. S. Brierley. The Compressibility of Gaseous Xenon. II. The Virial Coefficients and Potential Parameters of Xenon. *The Journal of Chemical Physics*, 19(10) :1222–1226, 1951. [Cité page 29.]

- [10] W. Beverloo, H. Leniger, et J. van de Velde. The flow of granular solids through orifices. *Chemical Engineering Science*, 15(3-4) :260–269, 1961. [Cité page 152.]
- [11] A. Bianco, C. Vitanza, M. Seidl, A. Wensauer, W. Faber, et R. Macián-Juan. Experimental investigation on the causes for pellet fragmentation under LOCA conditions. *Journal of Nuclear Materials*, 465 :260–267, 2015. [Cité page 17.]
- [12] M. A. Biot. General Theory of Three Dimensional Consolidation. *Journal of Applied Physics*, 12(2) :155–164, 1941. [Cité page 24.]
- [13] R. B. Bird, W. E. Stewart, et E. N. Lightfoot. *Transport phenomena*. Wiley, New York, rev. 2. ed edition, 2007. ISBN 978-0-470-11539-8. OCLC : 255914840. [Cité page 177.]
- [14] M. Bisoffi-Sauve. *Etude des ouvrages maçonnés en pierre par la méthode des éléments discrets : caractérisation et modélisation du comportement cohésif des joints*. Thèse de doctorat, Université de Montpellier, 2016. [Cité page 111.]
- [15] N. Blal, L. Daridon, Y. Monerie, et S. Pagano. Criteria on the artificial compliance inherent to the intrinsic cohesive zone. *Comptes Rendus Mécanique*, 339(12) :789–795, 2011. [Cité page 109.]
- [16] P. Blanpain, C. Garnier, P. Imbert, et H. Salaun. Thermomécanique du combustible des réacteurs à eau sous pression. *Techniques de l'ingénieur Conception, construction et exploitation des réacteurs nucléaires*, base documentaire : TIB204DUO.(ref. article : bn3060), 2011. [Cité pages v et 10.]
- [17] G. Boittin. Spécifications et premiers éléments de validation d'un modèle de fracturation des joints de grains dans alcyone 1.4. Note technique NT 15-018 DEC/SESC/LSC, CEA, 2015. [Cité page 23.]
- [18] A. Boulorre, C. Struzik, P. Goldbronn, I. Guenot-Delahaie, et J. Sercombe. Fuel behaviour modelling in accident conditions in ALCYONE fuel performance code. *IAEA TECDOC SERIES*, page 40, 2020. [Cité pages 2 et 24.]
- [19] F. Boyer, E. Guazzelli, et O. Pouliquen. Unifying Suspension and Granular Rheology. *Physical Review Letters*, 107(18) :188301, 2011. [Cité pages 156 et 214.]
- [20] D. Brenner. The Art and Science of an Analytic Potential. *physica status solidi (b)*, 217(1) :23–40, 2000. [Cité page 27.]
- [21] R. A. Buckingham. The Classical Equation of State of Gaseous Helium, Neon and Argon. *Proceedings of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 168(933) :264–283, 1938. [Cité page 28.]
- [22] C. Cagna. *Influence des gaz de fission sur l'état mécanique des combustibles oxydes irradiés*. Thèse de doctorat, Paris, ENSAM, 2016. [Cité pages vi, 32, 33, 34, 35, 36, 37, 40, 41, 54, 55, 67 et 191.]
- [23] C. S. Campbell. Rapid Granular Flows. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 22(1) : 57–90, 1990. [Cité page 213.]

- [24] L. Cangémi. *Frottement et adhérence : modèle, traitement numérique et application à l'interface fibre/matrice*. Thèse de doctorat, Aix-Marseille 2, 1997. [Cité page 208.]
- [25] N. Capps, C. Jensen, F. Cappia, J. Harp, K. Terrani, N. Woolstenhulme, et D. Wachs. A Critical Review of High Burnup Fuel Fragmentation, Relocation, and Dispersal under Loss-Of-Coolant Accident Conditions. *Journal of Nuclear Materials*, 546 :152750, 2021. [Cité page 127.]
- [26] Carman. Fluid flow through granular beds. *Trans. Inst. Chem.*, 75 :S32–S48, 1937. [Cité page 156.]
- [27] N. F. Carnahan et K. E. Starling. Equation of State for Nonattracting Rigid Spheres. *The Journal of Chemical Physics*, 51(2) :635–636, 1969. [Cité page 28.]
- [28] E. Casanova. *Comportement des gaz de fission dans un combustible irradié lors d'un transitoire de puissance*. Thèse de doctorat, Aix-Marseille 1, 1998. [Cité page 28.]
- [29] P. Castañeda et R. Willis. The effect of spatial distribution on the effective behavior of composite materials and cracked media. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 43(12) :1919–1951, 1995. [Cité pages xv, 86 et 202.]
- [30] P. Chakraborty, M. R. Tonks, et G. Pastore. Modeling the influence of bubble pressure on grain boundary separation and fission gas release. *Journal of Nuclear Materials*, 452(1-3) :95–101, 2014. [Cité pages xvii et 23.]
- [31] Commissariat à l'énergie atomique (Paris), A. Ballagny, B. Bonin, et J.-C. Brachet. *Les combustibles nucléaires*. Commissariat à l'énergie atomique, Paris, 2008. ISBN 978-2-281-11325-9. [Cité pages v, 9 et 13.]
- [32] M. Constant, F. Dubois, et J. Lambrechts. Implementation of an unresolved stabilised FEM–DEM model to solve immersed granular flows. *Comp. Part. Mech.*, 6(2) :213–226, 2018. [Cité pages 3 et 166.]
- [33] M. Constant, N. Coppin, F. Dubois, V. Vidal, V. Legat, et J. Lambrechts. Simulation of air invasion in immersed granular beds with an unresolved FEM–DEM model. *Computational Particle Mechanics*, 2020. [Cité pages 168 et 170.]
- [34] E. Coulon-Picard. *Master fuel for nuclear energy*. Cours master Manuen INSTN, France, 2017. [Cité pages v, 7 et 12.]
- [35] P. Cundall, A. A Computer Model for Simulating Progressive, Large-Scale Movements in Blocky Rock Systems. *Symposium Soc. Internat.*, 1971. [Cité page 153.]
- [36] F. da Cruz, S. Emam, M. Prochnow, J.-N. Roux, et F. Chevoir. Rheophysics of dense granular materials : Discrete simulation of plane shear flows. *Physical Review E*, 72 (2), 2005. [Cité pages xvi, 155 et 213.]
- [37] H. Darcy. *exposition et application des principes à suivre et des formules à employer dans les questions de distribution d'eau...* Librairie des corps impériaux des ponts et chaussées et des mines, victor dalmont edition, 1856. [Cité page 147.]

- [38] L. Desgranges, C. Valot, B. Pasquet, J. Lamontagne, T. Blay, et I. Roure. A method for the quantification of total xenon concentration in irradiated nuclear fuel with SIMS and EPMA. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B : Beam Interactions with Materials and Atoms*, 266(1) :147–154, 2008. [Cité pages 34 et 54.]
- [39] F. Dubois et M. Jean. LMGC90 une plateforme de développement dédiée à la modélisation des problèmes d’interaction. In *Actes du sixieme colloque national en calcul des structures*, volume 1, pages 111–118, 2003. [Cité pages 3, 120 et 166.]
- [40] A. Einstein. Eine neue Bestimmung der Moleküldimensionen. *Annalen der Physik*, 324(2) :289–306, 1906. [Cité page 154.]
- [41] Enerdata. Electricity domestic consumption, 2019. URL yearbook.enerdata.net/electricity/electricity-domestic-consumption-data.html. [Cité page 1.]
- [42] M. Flanagan et P. Askeljung. Observations of Fuel Fragmentation, Mobility and Release in Integral, High-Burnup, Fueled LOCA Tests. *Enlarged Halden Program Group Meeting, Sandefjord, Norway*, pages 2–7, 2011. [Cité pages 2 et 16.]
- [43] T. Forgeron, J. Brachet, F. Barcelo, A. Castaing, J. Hivroz, J. Mardon, et C. Bernaudat. Experiment and Modeling of Advanced Fuel Rod Cladding Behavior Under LOCA Conditions : Alpha-Beta Phase Transformation Kinetics and EDGAR Methodology. In G. Sabol et G. Moan, editors, *Zirconium in the Nuclear Industry : Twelfth International Symposium*, pages 256–256–23. ASTM International, 100 Barr Harbor Drive, PO Box C700, West Conshohocken, PA 19428-2959, 2000. ISBN 978-0-8031-2499-8. [Cité page 17.]
- [44] D. François, A. Pineau, et A. Zaoui. *Comportement mécanique des matériaux, Viscoplasticité, endommagement, mécanique de la rupture et mécanique du contact*. Lavoisier : Hermès Science, Paris, 1993. ISBN 978-2-7462-2348-6 978-2-7462-2346-2. [Cité page 105.]
- [45] M. Fremond. Contact with Adhesion. In J. J. Moreau et P. D. Panagiotopoulos, editors, *Nonsmooth Mechanics and Applications*, pages 177–221. Springer Vienna, Vienna, 1988. ISBN 978-3-211-82066-7 978-3-7091-2624-0. [Cité page 110.]
- [46] M. Freshley, D. Brite, J. Daniel, et P. Hart. Irradiation-induced densification of UO₂ pellet fuel. *Journal of Nuclear Materials*, 62(2-3) :138–166, 1976. [Cité page 52.]
- [47] T. Fuketa, F. Nagase, C. Grandjean, M. Petit, Z. Hozer, S. Kelppe, G. Khvostov, B. Hafidi, B. Therache, L. Heins, M. Valach, J. Voglewede, et W. Wiesenack. Safety Significance of the Halden IFA-650 LOCA Test Results. Technical Report NEA-CSNI-R-2010-5, Organisation for Economic Co-Operation and Development, 2010. [Cité page 153.]
- [48] P. Garcia, P. Martin, G. Carlot, E. Castelier, M. Ripert, C. Sabathier, C. Valot, F. D’Acapito, J.-L. Hazemann, O. Proux, et V. Nassif. A study of xenon aggregates in uranium dioxide using X-ray absorption spectroscopy. *Journal of Nuclear Materials*, 352(1-3) :136–143, 2006. [Cité page 34.]

- [49] J.-M. Gatt, J. Sercombe, I. Aubrun, et J.-C. Ménard. Experimental and numerical study of fracture mechanisms in UO₂ nuclear fuel. *Engineering Failure Analysis*, 47 : 299–311, 2015. [Cité pages 23 et 125.]
- [50] P. Goldbronn, J. Sercombe, et B. Michel. Avancées de la simulation du comportement du combustible nucléaire en 3D et en transitoire rapide. In *Congrès Français de Mécanique*, page 6, 2013. [Cité pages 2 et 18.]
- [51] I. Goldhirsch et C. Goldenberg. On the microscopic foundations of elasticity. *The European Physical Journal E*, 9(3) :245–251, 2002. [Cité pages 113 et 210.]
- [52] B. Gong, D. Frazer, T. Yao, P. Hosemann, M. Tonks, et J. Lian. Nano and micro-indentation testing of sintered UO₂ fuel pellets with controlled microstructure and stoichiometry. *Journal of Nuclear Materials*, 516 :169–177, 2019. [Cité page 125.]
- [53] K. Govers et M. Verwerft. Discrete element method study of fuel relocation and dispersal during loss-of-coolant accidents. *Journal of Nuclear Materials*, 478 :322–332, 2016. [Cité pages 150, 153 et 159.]
- [54] P. R. Granfors, A. T. Macrander, et R. O. Simmons. Crystalline xenon : Lattice parameters, thermal expansion, thermal vacancies, and equation of state. *Physical Review B*, 24(8) :4753–4763, 1981. [Cité page 26.]
- [55] G. Greenwood, A. Foreman, et D. Rimmer. The role of vacancies and dislocations in the nucleation and growth of gas bubbles in irradiated fissile material. *Journal of Nuclear Materials*, 1(4) :305–324, 1959. [Cité page 35.]
- [56] A. A. Griffith. The Phenomena of Rupture and Flow in Solids. *Philosophical Transactions of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 221 (582-593) :163–198, 1921. [Cité page 105.]
- [57] E. Gruber, W. Bohl, et M. Stevenson. Analysis of fuel motion after loss of integrity of pins. Technical Report ANL-RDP-15 Chapter 9.1, Argonne National Laboratory, Argonne National Laboratory, Argonne, IL, USA, 1973. [Cité page 21.]
- [58] É. Guazzelli et O. Pouliquen. Rheology of dense granular suspensions. *Journal of Fluid Mechanics*, 852, 2018. [Cité page 155.]
- [59] Hanus, E., Malgouyres, P., Clement, S., Alloncle, R., Pontillon, M., Bernard, S., Gleizes, B., Masson, R., Pontillon, Y., et Noirot, J. MEXIICO a new equipment to study the pressure impact on the irradiated fuel behavior. In *Top Fuel Meeting 2016*, 2016. [Cité pages 17, 121, 143, 146 et 192.]
- [60] R. Henry, I. Zacharie-Aubrun, T. Blay, N. Tarisien, S. Chalal, X. Iltis, J.-M. Gatt, C. Langlois, et S. Meille. Irradiation effects on the fracture properties of UO₂ fuels studied by micro-mechanical testing. *Journal of Nuclear Materials*, 536 :152179, 2020. [Cité pages 23, 120 et 125.]
- [61] J.-P. Hiernaut, T. Wiss, J.-Y. Colle, H. Thiele, C. Walker, W. Goll, et R. Konings. Fission product release and microstructure changes during laboratory annealing of a very high burn-up fuel specimen. *Journal of Nuclear Materials*, 377(2) :313–324, 2008. [Cité page 19.]

- [62] J. O. Hirschfelder, C. F. Curtiss, et R. B. Bird. Molecular Theory of Gases and Liquids. *Physics Today*, 8(3) :17–17, 1955. [Cité pages 27 et 29.]
- [63] IEA. IEA, Total energy supply, Data and statistics, 2019. URL <https://www.iea.org/data-and-statistics?country=WORLD&fuel=EnergySupply&indicator=TPESbySource>. [Cité page 1.]
- [64] Irwin, G. R. Analysis of Stresses and Strains Near the End of a Crack Traversing a Plate. *J. Appl. Mech.*, pages 351–369, 1957. [Cité pages 105 et 106.]
- [65] N. Javed. Oxygen solubility in uranium mononitride phase. *Journal of the Less Common Metals*, 29(2) :155–159, 1972. [Cité page 12.]
- [66] M. Jean. The non-smooth contact dynamics method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 177(3-4) :235–257, 1999. [Cité page 114.]
- [67] A. Jelea. An equation of state for xenon/krypton mixtures confined in the nuclear fuels. *Journal of Nuclear Materials*, 530 :151952, 2020. [Cité pages 46 et 192.]
- [68] A. Jelea, R.-M. Pellenq, et F. Ribeiro. An atomistic modeling of the xenon bubble behavior in the UO₂ matrix. *Journal of Nuclear Materials*, 444(1-3) :153–160, 2014. [Cité page 46.]
- [69] L. O. Jernkvist. A review of analytical criteria for fission gas induced fragmentation of oxide fuel in accident conditions. *Progress in Nuclear Energy*, 119 :103188, 2020. [Cité pages v, 21, 22 et 23.]
- [70] L. O. Jernkvist et A. Massih. Models for axial relocation of fragmented and pulverized fuel pellets. Models For Axial Relocation of Fragmented and Pulverized Fuel Pellets in Distending Fuel Rods and Its Effects on Fuel Rod Heat Load Report SSM2015 :37, Swedish Radiation Safety Authority, Stockholm, 2015. [Cité pages v et 20.]
- [71] P. Jop, Y. Forterre, et O. Pouliquen. A constitutive law for dense granular flows. *Nature*, 441(7094) :727–730, 2006. [Cité pages xviii et 214.]
- [72] J. Karlsson, P. Magnusson, P. Tejlund, A. Puranen, M. Konig, P. Beccau, et G. Grandi. The Studsvik cladding integrity project (SCIP) III-Overview. In *12 International conference on WWER fuel performance, modelling and experimental support*, Bulgaria, 2017. [Cité page 17.]
- [73] S. Kashibe, K. Une, et K. Nogita. Formation and growth of intragranular fission gas bubbles in UO₂ fuels with burnup of 6–83 GWd/t. *Journal of Nuclear Materials*, 206(1) :22–34, 1993. [Cité page 13.]
- [74] I. M. Krieger et T. J. Dougherty. A Mechanism for Non-Newtonian Flow in Suspensions of Rigid Spheres. *Transactions of the Society of Rheology*, 3(1) :137–152, 1959. [Cité page 155.]
- [75] T. R. G. Kutty, K. N. Chandrasekharan, J. P. Panakkal, et J. K. Ghosh. Fracture toughness and fracture surface energy of sintered uranium dioxide fuel pellets. *Journal of Materials Science Letters*, 6(3) :260–262, 1987. [Cité pages 23 et 125.]

- [76] J. Lamontagne, J. Noirot, L. Desgranges, T. Blay, B. Pasquet, et I. Roure. Detection of Gas Bubble by SIMS in Irradiated Nuclear Fuel. *Microchimica Acta*, 145(1-4) :91–94, 2004. [Cité page 55.]
- [77] F. Lemoine. High burnup fuel behavior related to fission gas effects under reactivity initiated accidents (RIA) conditions. *Journal of Nuclear Materials*, 248 :238–248, 1997. [Cité page 22.]
- [78] Lenntech. Chemical properties of helium, 1998. URL www.lenntech.com/periodic/elements/he.htm. [Cité page 176.]
- [79] I. Lindholm. A review of dry-out heat fluxes and coolability of particle beds. APRI 4, Stage 2 Report. Technical report, Swedish Nuclear Power Inspectorate, 2002. [Cité page 16.]
- [80] S. Lloyd. Least squares quantization in PCM. *IEEE Transactions on Information Theory*, 28(2) :129–137, 1982. [Cité page 217.]
- [81] P. Lösönen. On the behaviour of intragranular fission gas in UO₂ fuel. *Journal of Nuclear Materials*, 280(1) :56–72, 2000. [Cité page 12.]
- [82] P. Lucuta, H. Matzke, R. Verrall, et H. Tasman. Thermal conductivity of SIMFUEL. *Journal of Nuclear Materials*, 188 :198–204, 1992. [Cité page 8.]
- [83] J. MacEwan et W. Stevens. Xenon diffusion in UO₂. *Journal of Nuclear Materials*, 11 (1) :77–93, 1964. [Cité page 12.]
- [84] A. Martin. *Écoulement confiné d'un matériau granulaire en interaction avec un gaz, application à la relocalisation du combustible nucléaire*. Thèse de doctorat, Université de Montpellier, 2010. [Cité pages vii, viii, xv, 117, 150, 151, 152, 153, 156, 157, 158, 159, 184 et 187.]
- [85] R. Masson. Deux voies d'améliorations de la modélisation de la fracturation intergranulaire du combustible UO₂ (zone saines) en situations transitoires de type APRP. Note technique NT-17-010 DEC/SESC/LIPA, CEA, 2017. [Cité pages 24, 25, 86, 91 et 94.]
- [86] T. Masuoka et Y. Takatsu. Turbulence model for flow through porous media. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 39(13) :2803–2809, 1996. [Cité pages xviii et 177.]
- [87] S. McNamara, E. G. Flekkøy, et K. J. Måløy. Grains and gas flow : Molecular dynamics with hydrodynamic interactions. *Physical Review E*, 61(4) :4054–4059, 2000. [Cité page 156.]
- [88] J. Meynard, M. Ibrahim, A. Monnier, M. Bornert, E. Castelier, C. Duguay, M. Garajeu, et R. Masson. Effective properties of an isotropic solid weakened by micro-cracks located at inter-granular boundaries. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, page 104647, 2021. URL <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0022509621002866>. [Cité page 95.]

- [89] A. Michels, T. Wassenaar, G. Wolkers, et J. Dawson. Thermodynamic properties of xenon as a function of density up to 520 amagat and as a function of pressure up to 2800 atmospheres, at temperatures between 0°C and 150°C. *Physica*, 22(1-5) :17–28, 1956. [Cité page 29.]
- [90] M. Mogensen, C. Bagger, et C. Walker. An experimental study of the distribution of retained xenon in transient-tested UO₂ fuel. *Journal of Nuclear Materials*, 199(2) : 85–101, 1993. [Cité pages 33, 36, 37 et 41.]
- [91] Y. Monerie. *Fissuration des matériaux composites : rôle de l'interface fibre/matrice*. Thèse de doctorat, université Aix-Marseille, 2000. [Cité pages 109, 110, 112 et 206.]
- [92] Y. Monerie et V. Acary. Formulation dynamique d'un modèle de zone cohésive tridimensionnel couplant endommagement et frottement. *Revue Européenne des Éléments Finis*, 10(2-4) :489–503, 2001. [Cité page 112.]
- [93] J. J. Moreau. Some numerical methods in multibody dynamics : application to granular materials. *European Journal of Mechanics*, 13 :93–114, 1994. [Cité page 114.]
- [94] T. Mori et K. Tanaka. Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta Metallurgica*, 21(5) :571–574, 1973. [Cité pages 85 et 86.]
- [95] A. Mulero, C. Galain, et F. Cuadros. Equations of state for hard spheres. A review of accuracy and applications. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 3(22) :4991–4999, 2001. [Cité page 46.]
- [96] A. Needleman. A Continuum Model for Void Nucleation by Inclusion Debonding. *Journal of Applied Mechanics*, 54(3) :525, 1987. [Cité page 108.]
- [97] K. Nogita et K. Une. Irradiation-induced recrystallization in high burnup UO₂ fuel. *Journal of Nuclear Materials*, 226(3) :302–310, 1995. [Cité pages 35 et 36.]
- [98] K. Nogita et K. Une. High resolution TEM observation and density estimation of Xe bubbles in high burnup UO₂ fuels. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B : Beam Interactions with Materials and Atoms*, 141(1-4) :481–486, 1998. [Cité pages 26, 34, 36, 37, 41 et 67.]
- [99] J. Noirot, L. Noirot, L. Desgranges, J. Lamontagne, T. Blay, B. Pasquet, et E. Muller. Fission gas inventory in PWR high burnup fuel : experimental characterization and modelling. In *Meeting on LWR Fuel Performance*, page 10, Orlando Florida USA, 2004. [Cité pages 34, 36 et 37.]
- [100] J. Noirot, L. Desgranges, et J. Lamontagne. Detailed characterisations of high burn-up structures in oxide fuels. *Journal of Nuclear Materials*, 372(2-3) :318–339, 2008. [Cité pages v et 11.]
- [101] J. Noirot, I. Aubrun, L. Desgranges, K. Hanifi, J. Lamontagne, B. Pasquet, Ch. Valot, P. Blanpain, et H. Cognon. High Burnup Changes in UO₂ Fuels Irradiated Up to 83 GWd/T in M5 Claddings. *Nuclear Engineering and Technology*, 41(2), 2009. [Cité pages 34, 36 et 37.]

- [102] J. Noirot, T. Blay, J. Lamontagne, L. Fayette, Y. Pontillon, et X. Pujol. Size and radial origin of fragments formed while heating a 83 GWd/t_u PWR fuel up to 1200° C. In *WGFS LOCA Workshop*, Aix-en-Provence, France, 2015. [Cité pages 188 et 215.]
- [103] J. Noirot, I. Zacharie-Aubrun, et T. Blay. FIB/SEM examination of a high burn-up UO₂ in the center of the pellet. In *Top Water Reactor Fuel Performance Meeting*, page 10, Jeju-do, South Korea, 2017. WRFPM. [Cité pages v et 15.]
- [104] L. Noirot. MARGARET : A comprehensive code for the description of fission gas behavior. *Nuclear Engineering and Design*, 241(6) :2099–2118, 2011. [Cité pages 32, 83 et 92.]
- [105] R. Nürnberg. Calculating the area and centroid of a polygon in 2d, 2013. URL wwwf.imperial.ac.uk/~rn/centroid.pdf. [Cité page 217.]
- [106] D. R. Olander. *Fundamental aspects of nuclear reactor fuel elements : prepared for the Division of Reactor Development and Demonstration, Energy Research and Development Administration*. Technical Information Center, Office of Public Affairs, Energy Research and Development Administration ; available [from] National Technical Information Service, U.S. Dept. of Commerce, Oak Ridge, Tenn. : Springfield, Va, 1976. ISBN 978-0-87079-031-7. [Cité pages 12, 26 et 35.]
- [107] H. K. Onnes. Expression of the equation of state of gases and liquids by means of series.”. In R. S. Cohen, K. Gavroglu, et Y. Gouderoulis, editors, *Through Measurement to Knowledge*, volume 124, pages 146–163. Springer Netherlands, Dordrecht, 1991. ISBN 978-94-010-7433-9 978-94-009-2079-8. [Cité page 27.]
- [108] M. Ortiz et A. Pandolfi. Finite-deformation irreversible cohesive elements for three-dimensional crack-propagation analysis. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 44(9) :1267–1282, 1999. [Cité pages 108 et 205.]
- [109] K. D. Papoulia, C.-H. Sam, et S. A. Vavasis. Time continuity in cohesive finite element modeling. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 58(5) :679–701, 2003. [Cité page 109.]
- [110] F. Perales, S. Bourgeois, A. Chrysochoos, et Y. Monerie. Two field multibody method for periodic homogenization in fracture mechanics of nonlinear heterogeneous materials. *Engineering Fracture Mechanics*, 75(11) :3378–3398, 2008. [Cité page 111.]
- [111] F. Perales. *Fissuration des matériaux à gradient de propriétés. Application au Zircaloy hydruré*. Thèse de doctorat, Université de Montpellier, 2005. [Cité page 110.]
- [112] Y. Pontillon, M. P. Ferroud-Plattet, D. Parrat, S. Ravel, G. Ducros, C. Struzik, I. Aubrun, G. Eminent, J. Noirot, et A. Harrer. Experimental and Theoretical Investigation of Fission Gas Release from UO₂ up to 70 GWd/t under Simulated LOCA Type Conditions : The GASPARD Program. In *Proceeding of the 2004 International Meeting on LWR Fuel Performance, Orlando, Florida*, page 10, 2004. [Cité pages v et 19.]
- [113] R. Quey, P. Dawson, et F. Barbe. Large-scale 3D random polycrystals for the finite element method : Generation, meshing and remeshing. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 200(17-20) :1729–1745, 2011. [Cité page 215.]

- [114] V. A. Rabinovich, L. A. Tokina, et V. M. Berezin. Experimental investigation of compressibility of krypton and xenon in temperature range 300/720 0 K under pressure to 400 bar. *Teplofizika vys. temperatur*, 11(1) :64–69, 1974. [Cité pages 29 et 197.]
- [115] W. Ramsay et M. W. Travers. II. Argon and its companions. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical or Physical Character*, 197(287-299) :47–89, 1901. [Cité page 29.]
- [116] M. Raous, L. Cangémi, et M. Cocu. Un modèle couplant adhérence et frottement pour le contact entre deux solides déformables. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences - Series IIB - Mechanics-Physics-Chemistry-Astronomy*, 325(9) :503–509, 1997. [Cité page 110.]
- [117] O. Redlich et J. N. S. Kwong. On the Thermodynamics of Solutions. V. An Equation of State. Fugacities of Gaseous Solutions. *Chemical Reviews*, 44(1) :233–244, 1949. [Cité page 27.]
- [118] F. H. Ree et W. G. Hoover. Fifth and Sixth Virial Coefficients for Hard Spheres and Hard Disks. *The Journal of Chemical Physics*, 40(4) :939–950, 1964. [Cité page 28.]
- [119] J. Rice et G. Rosengren. Plane strain deformation near a crack tip in a power-law hardening material. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 16(1) :1–12, 1968. [Cité page 206.]
- [120] J. Rogelj, D. Shindell, K. Jiang, S. Fifita, P. Forster, V. Ginzburg, C. Handa, H. Kheshgi, S. Kobayashi, E. Kriegler, L. Mundaca, R. Sférian, et M. Vilariño. Mitigation Pathways Compatible with 1.5°C in the Context of Sustainable Development. An IPCC Special Report on the impacts of global warming of 1.5°C above pre-industrial levels and related global greenhouse gas emission pathways, in the context of strengthening the global response to the threat of climate change, sustainable development, and efforts to eradicate poverty, Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC), 2018. [Cité page 1.]
- [121] C. Ronchi. Extrapolated equation of state for rare gases at high temperatures and densities. *Journal of Nuclear Materials*, 96(3) :314–328, 1981. [Cité pages 29, 30, 31 et 44.]
- [122] A. Rondepierre. Introduction à l'optimisation convexe non différentiable. Technical report, INSA de Toulouse, 2016. [Cité page 207.]
- [123] V. V. Rondinella et T. Wiss. The high burn-up structure in nuclear fuel. *Materials today*, 13(12) :24–32, 2010. [Cité page 10.]
- [124] M. Salvo. *Étude expérimentale et modélisation du comportement mécanique du combustible UO₂ en compression à haute température et forte vitesse de sollicitation*. Thèse de doctorat, université Aix-Marseille, 2014. [Cité pages xv et 23.]
- [125] F. N. Skomurski, R. C. Ewing, A. L. Rohl, J. D. Gale, et U. Becker. Quantum mechanical vs. empirical potential modeling of uranium dioxide (UO₂) surfaces : (111), (110), and (100). *American Mineralogist*, 91(11-12) :1761–1772, 2006. [Cité page 38.]

- [126] G. Soave. Improvement of the Van Der Waals equation of state. *Chemical Engineering Science*, 39(2) :357–369, 1984. [Cité page 27.]
- [127] A. Socié. *Modélisation chimio-mécanique de la fissuration de matériaux cimentaires : vieillissement et tenue des enceintes de confinement des centrales nucléaires*. Thèse de doctorat, Université de Montpellier, Montpellier, 2019. [Cité page 110.]
- [128] H. Sonnenburg, W. Wiesenack, J. Karlsson, J. Noirot, V. Garat, N. Waeckel, F. Khat-tout, a. Cabrera-Salcedo, J. Zhang, G. Khvostov, a. Gorzel, V. Brankov, F. Nagase, P. Raynaud, M. Bales, T. Taurines, T. Nakajima, et A. Alvestav. Report on Fuel Frag-mentation, Relocation, Dispersal. rapport de l’OCDE NEA/CSNI/R(2016)16, OECD, 2016. [Cité pages v, 2, 16, 17, 18, 122, 176, 179 et 188.]
- [129] J. Spino, K. Vennix, et M. Coquerelle. Detailed characterisation of the rim microstruc-ture in PWR fuels in the burn-up range 40–67 GWd/tM. *Journal of Nuclear Materials*, 231(3) :179–190, 1996. [Cité pages v, 14, 15 et 52.]
- [130] L. E. Thomas. Condensed-phase xenon and krypton in UO₂ spent fuel. *Fundamental Aspects of Inert Gases in Solids*, 1991. [Cité pages 34, 36, 37 et 41.]
- [131] M. Tonks, D. Andersson, R. Devanathan, R. Dubourg, A. El-Azab, M. Freyss, F. Iglesias, K. Kulacsy, G. Pastore, S. R. Phillpot, et M. Welland. Unit mechanisms of fission gas release : Current understanding and future needs. *Journal of Nuclear Materials*, 504 :300–317, 2018. [Cité pages v et 14.]
- [132] N. Trégourès. L’Accident par Perte de Réfrigérant Primaire : phénoménologie, critères de sûreté, simulation. *Revue Générale Nucléaire*, (6) :67–74, 2013. [Cité pages 1 et 16.]
- [133] J. A. Turnbull, S. K. Yagnik, M. Hirai, D. M. Staicu, et C. T. Walker. An Assessment of the Fuel Pulverization Threshold During LOCA-Type Temperature Transients. *Nu-clear Science and Engineering*, 179(4) :477–485, 2015. [Cité pages v, 17, 19, 20 et 121.]
- [134] J. Turnbull et R. Cornell. The re-resolution of gas atoms from bubbles during the irradiation of UO₂. *Journal of Nuclear Materials*, 36(2) :161–168, 1970. [Cité page 12.]
- [135] K. Une, S. Kashibe, et A. Takagi. Fission Gas Release Behavior from High Burnup UO₂ Fuels under Rapid Heating Conditions. *Journal of Nuclear Science and Technology*, 43(9) :1161–1171, 2006. [Cité page 19.]
- [136] United States Department of Energy, Nuclear fuel pellets and a fuel rod. Nuclear Waste Explained, 2005. URL <https://web.archive.org/web/20050301083622/http://ocrwm.doe.gov:80/ymp/about/keyfacts.shtml>. [Cité pages v et 7.]
- [137] M. Verwerft. Multiple voltage electron probe microanalysis of fission gas bubbles in irradiated nuclear fuel. *Journal of Nuclear Materials*, 282(2-3) :97–111, 2000. [Cité page 73.]
- [138] P.-G. Vincent. *Modélisation micromécanique de la croissance et de la percolation de pores sous pression dans une matrice céramique à haute température*. Thèse de docto-rat, Aix-Marseille 1, 2007. [Cité pages 25, 202 et 204.]

- [139] E. Waibel. Zur berechnung von pile-up-spektren. *Nuclear Instruments and Methods*, 74(2) :236–244, 1969. [Cité page 29.]
- [140] C. Walker, S. Bremier, S. Portier, R. Hasnaoui, et W. Goll. SIMS analysis of an UO_2 fuel irradiated at low temperature to 65MWd/kgHM. *Journal of Nuclear Materials*, 393(2) :212–223, 2009. [Cité pages 34, 36, 37, 38 et 41.]
- [141] E. Whalley, Y. Lupien, et W. G. Schneider. The compressibility of gases at high temperatures : Xenon in the temperature range 0° to 700°C . and the pressure range 8 to 50 atmospheres. *Canadian Journal of Chemistry*, 33(4) :633–636, 1955. [Cité page 29.]
- [142] R. White. The development of grain-face porosity in irradiated oxide fuel. *Journal of Nuclear Materials*, 325(1) :61–77, 2004. [Cité pages 13, 21 et 85.]
- [143] X.-P. Xu et A. Needleman. Numerical simulations of fast crack growth in brittle solids. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 42(9) :1397–1434, 1994. [Cité page 109.]
- [144] A. N. Zisman, I. V. Aleksandrov, et S. M. Stishov. X-ray study of equations of state of solid xenon and cesium iodide at pressures up to 55 Gpa. *Phys.Rev.*, 1985. [Cité page 29.]

Modélisation des mécanismes de fragmentation du combustible UO_2 en situation d'Accident de Perte de Réfrigérant Primaire (APRP)

Résumé : Des expériences récentes ont permis d'identifier les mécanismes de fragmentation du combustible UO_2 en situation de transitoire thermique de type APRP. Cette thèse a pour objectif d'étudier ces mécanismes afin d'améliorer la compréhension et la modélisation de la fragmentation.

Le premier mécanisme étudié est l'effet de la pressurisation des bulles de gaz de fission présentes au sein du matériau. Pour cela, la contrainte engendrée par la pressurisation de ces bulles est estimée et les incertitudes associées sont quantifiées. Cette étude s'appuie sur (1) une analyse des équations d'état permettant de déterminer la pression des cavités, (2) une évaluation de l'état du matériau à l'issue de l'irradiation de base (porosité, quantité de gaz, ...) à partir de résultats de simulation et d'examen post-irradiatoires, (3) une estimation de la contrainte qui prend en compte la forme non-sphérique des bulles observées en 3D au MEB-FIB.

Le second mécanisme étudié est l'effet d'une chute de la pression appliquée au combustible due à la perte d'étanchéité du crayon. La fissuration du combustible en transitoire est modélisée par le biais d'un modèle couplant la méthode des éléments discrets (DEM) et un modèle de zones cohésives (CZM). L'analyse paramétrique du modèle DEM-CZM permet d'identifier les paramètres représentatifs du comportement à rupture du combustible lors de recuit à pression de confinement contrôlée (pression uniforme). Sur la base des résultats obtenus, un critère d'amorce de fissure est établi.

Le comportement à rupture du combustible lors de la perte d'étanchéité du crayon (gradient axial de pression le long de la colonne fissile) est ensuite simulé grâce au modèle DEM-CZM. Les résultats permettent de conclure que le critère d'amorce de fissure proposé est applicable au cas d'une chute de pression non-uniforme. Le modèle est enfin couplé à une modélisation des écoulements granulaires immergés et l'éjection des fragments hors de la gaine est étudiée. Les résultats suggèrent une forte influence de la forme des fragments (polyédrique ou sphérique) sur la quantité éjectée.

Mots-clés : APRP, fragmentation relocalisation éjection du combustible, gaz de fission, élément discret, zone cohésive, écoulement granulaire immergé

Modelling of the UO_2 fuel fragmentation during a Loss Of Coolant Accident (LOCA)

Abstract : Recent experiences allowed to identify the UO_2 fuel fragmentation mechanisms during a LOCA type thermal transient. This PhD thesis aims to study these mechanisms to enhance the understanding and the modeling of fragmentation.

The first mechanism which is studied is the effect of the pressure of fission gas bubbles that are present in the material. To achieve this, the stress induced by the bubble pressurisation is estimated and the uncertainty associated are quantified. This study draws upon (1) an analysis of the equation of state that allows the determination of the cavity pressure, (2) an assessment of material state after irradiation (porosity, gas quantity, ...) from the results of simulation and post-irradiation examinations (3) an estimate of the stress taking into account the non-spheric bubble shape observed in 3D by MEB-FIB.

The second mechanism studied is the effect of a drop of the pressure applied to the fuel due to a loss of sealing. To do so, the fuel fissuration during a transient is simulated by a model coupling the discret element method (DEM) and a cohesive zone model (CZM). The parametrical analysis of the DEM-CZM model allows the identification of the parameters representative of the fracture behavior of the fuel during an annealing test at controlled pressure (pression uniforme). Based on the results obtained, a crack initiation criteria is established.

The fracture behavior of the fuel during the loss of sealing (axial pressure gradient along the fissile stack) is simulated with the DEM-CZM model. The results uphold the conclusion that the proposed crack initiation criteria can be applied to the case of a non-uniform pressure drop. The model is then coupled to a immersed granular flow modeling and the fragments dispersal out of the cladding is studied. The results suggest a strong influence of the fragments shape (polyhedral or spherical) on the dispersed quantity.

key words : LOCA, fuel fragmentation relocalisation and dispersal (FFRD), fission gas, discret element method, cohesive zone model, immersed granular flows

