

Modélisation de fragmentation pour un milieu poro-saturé et écoulement granulaire en présence d'un fluide. Application aux céramiques nucléaires.

J. BONNET^{a,1}, R. MASSON^{a,2}, E. MULLER^{a,3}, Y. MONERIE^b

a. CEA, DEN, DEC, Centre de Cadarache, 13108 Saint Paul lez Durance, France,
1, julien.bonnet@cea.fr - 2, renaud.masson@cea.fr - 3, emmanuelle.muller@cea.fr

b. Laboratoire de Mécanique et Génie Civil LMGC, Univ. Montpellier, CNRS, Montpellier, France,
yann.monerie@umontpellier.fr

Résumé :

Les céramiques nucléaires constituent des milieux fragiles poro-saturés qui, en usage, peuvent être considérée comme immergée dans un gaz environnant. Lors d'un accident postulé, la température augmente et le gaz environnant subit une dépressurisation. Ces conditions de chargement thermomécaniques sévères peuvent conduire à la fragmentation du matériau et le milieu divisé qui en résulte est alors amené à s'écouler en présence d'un fluide interstitiel. L'objectif de cette étude est de déterminer les conditions et le niveau de fragmentation du milieu et de caractériser l'écoulement granulaire associé.

La modélisation numérique s'appuie sur une fissuration cohésive thermo-hydraulique et une approche de type dynamique du contact avec force de trainée et fluide non résolu. Une attention particulière est portée à la génération de la microstructure polycristalline initiale d'un fragment de pastille de combustible nucléaire et la surfragmentation est modélisée en prenant en compte des chargements hydrauliques correspondant aux gaz de fission intergranulaires, à l'écoulement interstitiel et au gradient de pression macroscopique.

Mots clefs : écoulement granulaire dense immergé ; fragmentation ; zones cohésives

Abstract :

Nuclear ceramics are a fragile poro-saturated media which, in usage, can be considered as immersed in a gas. For an assumed accident, the medium's temperature rise and the surrounding gas experiences a depressurization. In this severe thermomechanical loading conditions, the material damage increases until fragmentation. The resulting divided medium flows in the presence of an interstitial fluid. The aim of the study is to determine the condition and the magnitude of the medium fragmentation and to characterize the associated granular flow.

The modeling is based on a thermo-hydraulic cohesive cracking and contact dynamic approach with drag force and an unresolved fluid flow. Particular interest is carried on the initial polycrystalline microstructure generation of a nuclear fuel fragment and fragmentation is modeled taking into account hydraulic loading coming from the intergranular fission gas, the interstitial flow and the macroscopic pressure gradient.

Key words : immersed dense granular flows ; fragmentation ; cohesive zone.

1 Contexte

L'objet de cette étude est une céramique nucléaire poreuse dont les cavités sont saturées en gaz et qui pour des sollicitations thermomécaniques sévères — associées à un accident postulé — peut être amenée à se fragmenter. Ce matériau poreux saturé est immergé dans un fluide gazeux soumis à un gradient de dépressurisation. Des expériences récentes suggèrent qu'une surfragmentation est possible sous l'effet de ce gradient. Pour un niveau de surfragmentation avancé le milieu ne peut plus être considéré comme continu et devient de nature granulaire. L'objectif de ces travaux est de déterminer les conditions et le niveau de cette surfragmentation et d'évaluer l'écoulement de l'éventuel milieu granulaire qui en résulte. Du point de vue mécanique, il s'agit d'un problème d'écoulement granulaire très dense en silo cylindrique sous gradient de pression.

Dans le cadre de ces analyses de transition entre comportement d'un milieu continu et écoulement d'un milieu discret, l'enjeu est, d'une part, de définir une méthode d'endommagement du matériau en présence d'un fluide interstitiel et, d'autre part, de gérer l'écoulement granulaire de l'ensemble des fragments immergés. Pour ce faire, le milieu est ici discrétisé en corps rigides polyédriques liés par une interface cohésive. L'effet du fluide interstitiel ainsi qu'un contact frottant post-rupture est pris en compte dans le comportement de l'interface cohésive.

Les modèles permettant de caractériser l'évolution de l'endommagement et les écoulements granulaires sont présentés en section 2. La section 3 porte sur l'application de ces modèles au cas de la fragmentation d'une structure cylindrique — une pastille de combustible nucléaire — subissant un gradient de pression et dont la représentation microstructurale est précisée. Les perspectives de l'étude quant à la représentation du fluide et l'évaluation de la fragmentation sont exposées section 4.

2 Modèle de fissuration cohésive hydrauliquement accéléré

La multifissuration est modélisée par une approche cohésive couplée avec du contact frottant ; ce dernier est dédié à la gestion de l'écoulement granulaire post-fragmentation. Le milieu étant poro-saturé, les fissures du matériau sont pressurisées au fur et à mesure que l'endommagement surfacique se développe. Le modèle s'appuie sur les travaux de [11, 8, 12] et s'écrit :

$$-(\mathbf{R}_N + \mathbf{R}_N^{\text{coh}}) \in \partial I_{\mathbb{R}^+}(u_N), \quad (\mathbf{R}_T + \mathbf{R}_T^{\text{coh}}) \in \partial (\mu |\mathbf{R}_N + \mathbf{R}_N^{\text{coh}}| \|\dot{\mathbf{u}}_T\|) \quad (1)$$

$$\mathbf{R}^{\text{coh}} = \beta \left(C_N \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} + C_T \frac{\mathbf{u}_T \otimes \mathbf{u}_T}{\|\mathbf{u}_T\|^2} \right) \cdot [\mathbf{u}] - (1 - \beta)^\alpha p \mathbf{n} \quad \text{et} \quad h(\beta, [\mathbf{u}]) = 0, \quad \beta \in [0, 1] \quad (2)$$

où \mathbf{n} est la normale à la zone cohésive, les indices N et T indiquent les parties normale et tangentielle de l'effort surfacique total ($\mathbf{R} = \mathbf{R}_N \mathbf{n} + \mathbf{R}_T$), de l'effort cohésif ($\mathbf{R}^{\text{coh}} = \mathbf{R}_N^{\text{coh}} \mathbf{n} + \mathbf{R}_T^{\text{coh}}$) et du saut de déplacement ($[\mathbf{u}] = u_N \mathbf{n} + \mathbf{u}_T$), $\partial(f)$ désigne la sous différentielle de la fonction f , I_X est la fonction indicatrice de l'ensemble X , μ est le coefficient de frottement de Coulomb, β est une variable d'endommagement surfacique (en termes surfaciques, $\beta = 1 - D$ où D correspondrait à la notion classique d'endommagement volumique), h décrit l'évolution de l'endommagement avec les autres va-

riables internes du problème, α est un exposant et p la pression du gaz interstitiel. L'équation (1) fournit le couplage de l'endommagement surfacique avec le contact frottant. L'équation (2) donne d'une part l'évolution de l'effort cohésif avec le saut de déplacement et avec la pression interstitielle et d'autre part l'évolution de l'endommagement surfacique. Pour cette dernière, un modèle de type homographique est retenu :

$$h(\beta, [\mathbf{u}]) = \beta - \min(g(\|\mathbf{u}\|), g(\|\mathbf{u}\|_{\max})), \quad g(x) = \begin{cases} \beta_0 & \text{si } x \leq \delta_0 \\ \beta_0 \frac{\delta_0}{x} \left(1 - \left(\frac{x - \delta_0}{\delta_c - \delta_0}\right)^2\right) & \text{si } \delta_0 \leq x \leq \delta_c \\ 0 & \text{si } x \geq \delta_c \end{cases}$$

avec $\delta_0 = \frac{R_{\max}}{2} \left(\frac{1}{C_N} + \frac{1}{C_T}\right)$ l'ouverture cohésive seuil, $\delta_c = \frac{3}{2} \left(\frac{w}{R_{\max}} + \frac{\delta_0}{6}\right)$ l'ouverture cohésive critique, $0 \leq \beta_0 \leq 1$ un niveau initial d'endommagement surfacique, C_N et C_T les raideurs cohésives normale et tangente (en Pa/m), w une énergie de référence (en J/m^2), R_{\max} et $\|\mathbf{u}\|_{\max}$ sont les valeurs maximales atteintes respectivement par la réaction cohésive (en MPa) et par l'ouverture de la fissure $\|\mathbf{u}\|$.

Avec le développement de la fissuration dans le matériau, des fragments sont générés et forment un milieu granulaire confiné avec une pression interne post-rupture. Les comportements rhéologiques de tels milieux granulaires immergés, localement très denses et composés de particules non-sphériques sont encore mal compris [5]. Nous en proposons ici une estimation numérique basée sur la méthode des éléments discrets en prenant en compte les efforts générés par le contact frottant entre chaque corps du système. Les relations (1) forment un problème de complémentarité qui est résolu sans régularisation ni pénalisation à l'aide de la méthode *non-smooth contact dynamic* [6, 9]. Le couplage avec la cohésion est traité par l'approche rapportée dans [7]. La résolution couplée est effectuée grâce au logiciel LMG90 [3].

3 Un modèle de fragmentation appliqué au cas d'une structure cylindrique sous chargement

En se basant sur les modèles présentés plus haut, une simulation du comportement d'une céramique nucléaire soumise à des conditions de sollicitations correspondant à un accident postulé est réalisée. Dans cette situation, la température du milieu augmente au cours du temps tandis que le fluide environnant subit un gradient de pression. L'objectif est ici de déterminer l'évolution de la fragmentation du milieu en fonction de ces sollicitations thermomécaniques.

Le matériau est représenté par une collection compacte de grains polyédriques définissant un cylindre d'axes Oz et de rayon \bar{r} , FIGURE 1 à gauche. Ces grains sont considérés comme étant indéformables et sont tous en interaction via le modèle (1)-(2), FIGURE 2. Un ensemble de grains représente un fragment pouvant se surfragmenter si les interfaces cohésives sont rompues.

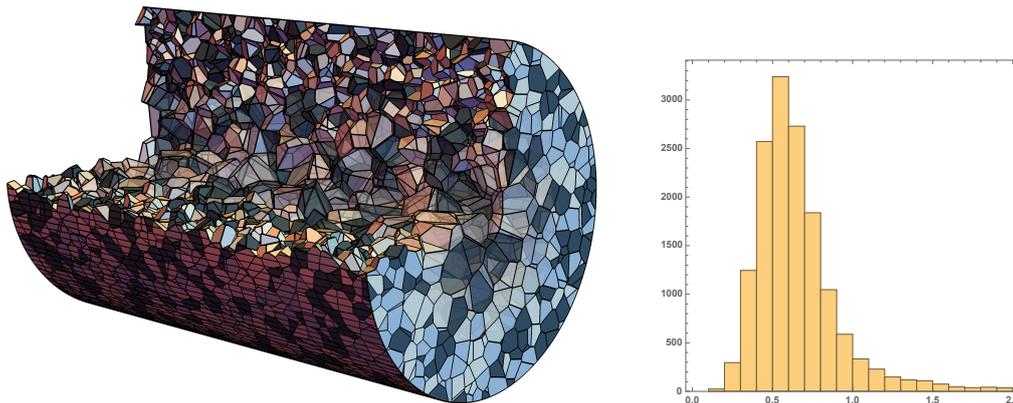


FIGURE 1 – Visualisation d'un ensemble de grains polyédriques modélisant une pastille de combustible nucléaire : gradient de tailles du centre vers la périphérie. Histogramme du volume des grains polyédriques en (mm^3).

La morphologie de la collection de grains polyédriques est obtenue par un pavage de Voronoï du domaine réalisé grâce au logiciel NEPER [10] et correspondant à un ensemble de germes dont la distribution spatiale est homogène axialement et orthoradialement et possède un gradient radialement. Sur la FIGURE 1, la densité de ces germes est plus faible au centre qu'en périphérie. La distribution des tailles caractéristiques des grains est contrôlée.

Les propriétés des zones cohésives dépendent de la contrainte seuil à partir de laquelle l'interface cohésive s'endommage $R_{max} = 2 \text{ GPa}$ et de l'énergie de décohésion $w = 5 \text{ J.m}^{-2}$ [4]. Le coefficient de frottement entre les fragments est de $\mu = 0.3$. À la base du cylindre, un appui plan annulaire bloque la translation selon z pour $z < z_{min}$ le long d'un périmètre de la base circulaire du cylindre, représentant un potentiel ancrage du combustible à son gainage au-dessus d'une zone ballonnée. Le chargement peut être classifié en deux échelles :

- À l'échelle locale, une contrainte est générée par la pressurisation de zones préfiissurées traduisant des collections de bulles intergranulaires. Ces préfiissures correspondent à une variable d'endommagement surfacique nulle ($\beta = 0$) conduisant à une pression p sur les lèvres de la fissure locale (cf. insert FIGURE 2). Dans la situation accidentelle supposée, la température du milieu augmente au cours du temps induisant une augmentation du niveau de pression dans ces fissures.
- À l'échelle de la pastille, le fluide environnant est soumis à un gradient de pression dont l'amplitude augmente au cours du temps. Ce gradient s'exerce sur les surfaces externes du solide et traduit une dépressurisation correspondant à un champ de pression P_f uniforme en r et variant en z selon l'équation (3) :

$$P_f(z, t) = \frac{z^2}{h^2} (P_{sup} - P_{inf}(t)) + P_{inf}(t) \quad (3)$$

avec h la hauteur du cylindre, P_{sup} une pression constante imposée à la face supérieure du cylindre et $P_{inf}(t)$ la pression exercée sur la face inférieure évoluant au cours du temps selon :

$$P_{inf}(t) = P_{sup} + (P_{t_f} - P_{sup}) \frac{t}{t_f} \quad (4)$$

P_{t_f} étant la valeur de pression atteinte sur la face inférieure au temps final t_f . En première

approximation, la force imposée à un solide polyédrique est donnée par l'intégrale du champ de pression sur une sphère de volume équivalent. Une pression de confinement constante et uniforme P_g est imposée sur la surface radiale du cylindre.

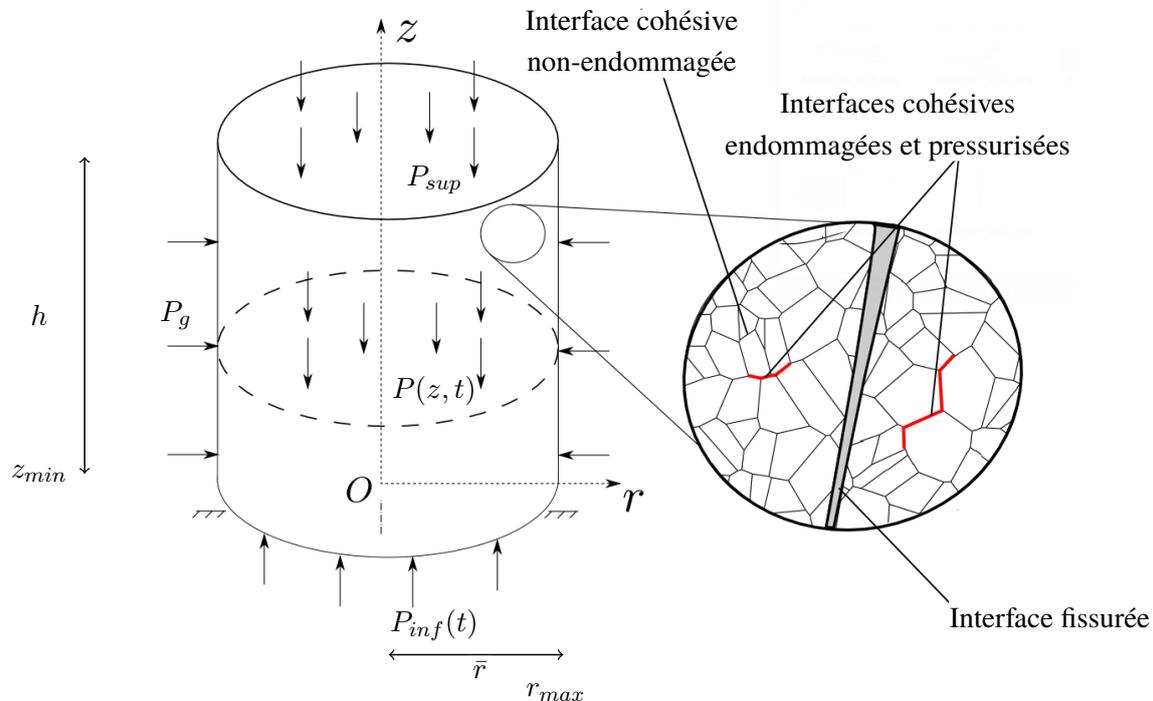


FIGURE 2 – Schéma du chargement sur un cylindre d'axe Oz de rayon \bar{r} . Les flèches représentent le champ de pression appliqué. Dans l'insert : vue en coupe des solides polyédriques composant la structure. Les traits noirs représentent les interfaces cohésives pouvant s'endommager et se rompre en fonction du chargement. Les traits rouges, des interfaces endommagées dans lesquelles le gaz présent dans les fissures impose une pression aux lèvres. La surface grise désigne une interface rompue au niveau de laquelle les interactions sont de type contact frottant.

Ces simulations visent à définir l'état de surfragmentation qu'il est possible d'atteindre en fonction de l'état de fragmentation initial, du gradient de pression et de l'élévation de température. Cette analyse sera présentée essentiellement sous la forme d'une statistique de distribution de fragments en taille et en localisation spatiale.

4 Conclusions et perspectives

Ce travail concerne l'étude numérique de la fragmentation d'un milieu pro-saturé fragile soumis à un chargement thermo-mécanique sévère. La modélisation proposée s'appuie sur :

1. Une approche cohésive pour la fissuration hydrauliquement activée où un modèle d'endommagement surfacique est couplé à l'apparition progressive d'une pression de gaz interstitiel et de contact frottant.
2. Une microstructure numérique de forme cylindrique composée d'une collection de grains polyédriques dont la statistique morphologique est contrôlée. Ces grains sont rigides, ils peuvent être initialement tous adhérents (pastille non fracturée initialement) ou regroupés par blocs (pas-

tille initialement préfragmentée). Les fragments initiaux contiennent des préfissures préstressées traduisant la présence de gaz de fission aux joints de grain par exemple.

3. Un couplage fluide-grains à fluide non résolu [1] capable de prendre en compte de forts gradients de pression sur de larges collections granulaires. Les variables relatives aux corps solides sont prises en compte dans la moyenne des champs et la force générée par le fluide sur les corps solides est estimée par une formule empirique pour un milieu granulaire immergé composé de particules sphériques. La résolution du problème par la méthode des éléments finis sera réalisée grâce au code de calcul MIGFLOW [2].

Le résultat attendu de l'étude est une analyse de l'état mécanique du matériau en termes de répartition de l'endommagement surfacique dans la pastille et de distribution de tailles de fragments. L'influence des paramètres moteurs de la fragmentation – à savoir l'état de la microstructure initiale, la valeur de l'énergie de décohésion, l'intensité du gradient de pression et le niveau de pression du gaz interstitiel – sera évaluée par une étude de sensibilité du modèle.

Remerciements

Les auteurs remercient le soutien financier du Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives ainsi qu'EDF et FRAMATOME, ainsi que F.Dubois pour ses développements dans LMGC90.

Références

- [1] T. B. Anderson et R. Jackson, Fluid Mechanical Description of Fluidized Beds. Equations of Motion, Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals, 6(4) :527–539, Novembre 1967
- [2] M. Constant, F. Dubois et J. Lambrechts, Implementation of an unresolved stabilised FEM–DEM model to solve immersed granular flows, Comp. Part, Mech., 1-14, 2018.
- [3] F. Dubois et M. Jean, LMGC90 une plateforme de développement dédiée à la modélisation des problèmes d'interaction, Actes du sixième colloque national en calcul des structures, 2003.
- [4] A.G. Evans et Davidge, The strength and fracture of stoichiometric polycrystalline UO₂. Journal of Nuclear Materials, p. 255, 1969.
- [5] E. Guazzelli et O. Pouliquen, Rheology of dense granular suspensions, Journal of fluid mechanics, 852, P1, 2018.
- [6] M. Jean, The non-smooth contact dynamics method, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 177(3-4) :235–257, 1999.
- [7] M. Jean, V. Acary, et Y. Monerie, Non-smooth contact dynamics approach of cohesive materials, Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 359(1789) :2497–2518, 2001.
- [8] 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.
- [9] J.-J. Moreau, Some numerical methods in multibody dynamics : Application to granular materials, European Journal of Mechanics A/Solids, supp. :93–114, 1994.

- [10] R. Quey, P.R. Dawson, 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,
- [11] 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 - Séries IIB - Mechanics-Physics-Chemistry-Astronomy*, 325(9) :503–509, 1997.
- [12] A. Socié, F. Dubois, Y. Monerie, et F. Perales, Modélisation chimio-mécanique de la fissuration de matériaux cimentaires : vieillissement et tenue des enceintes de confinement des centrales nucléaires, *Colloque national Mécamat*, 2018