# Avancées de la simulation du comportement du combustible nucléaire en 3D et en transitoire rapide

P. GOLDBRONN<sup>a</sup>, J. SERCOMBE<sup>a</sup>, B. MICHEL<sup>a</sup>

a. CEA, DEN, DEC, F-13108 Saint-Paul-lez-Durance, France.

#### Résumé :

Nous présentons dans cet article les développements menés au CEA pour simuler en 3D le comportement des crayons combustibles pendant certains transitoires rapides. Ces développements sont effectués par le CEA en partenariat avec EDF et AREVA-NP dans le code de simulation couplé thermomécaniquephysicochimique des crayons combustibles ALCYONE [1] (plateforme PLEIADES). Une modélisation de l'écoulement du fluide caloporteur prenant en compte les différents régimes possibles (ébullition nucléée, passage du flux critique, ébullition en film) a été récemment incorporée au code. Ce modèle permet d'évaluer l'évolution de la température du gainage sur toute la hauteur d'un crayon combustible suivant une modélisation axisymétrique dite  $1D^{1/2}$  qui initialise le calcul local 3D. La prise en compte du phénomène d'Interaction Mécanique Pastille Gaine en transitoire incidentel et accidentel (contact mécanique pastille gaine accentué aux extrémités de pastilles, formation de plis sur la gaine, fissuration de la pastille, ...) a conduit à développer un schéma de calcul 3D modélisant le comportement d'un fragment de pastille et de la gaine en vis-à-vis. Pour caractériser les conditions d'apparition du ballonnement du gainage observé dans certains essais de transitoires RIA (voir [2]), une extension du schéma de calcul 3D à la simulation d'un empilement de pastilles a été proposée. Cette description permet notamment d'étudier l'effet d'un « point chaud local » (lié à l'atteinte du flux critique) et d'une « surpression locale » (liée à l'absence d'équilibre de pression dans le crayon) sur la déformation du qainage.

#### Abstract :

In this paper, we present the latest results obtained at the CEA concerning the 3D modeling of fuel rods behavior during Reactivity Initiated Accidents. The developments are part of a cooperative work with AREVA and EDF. They are performed in the multi-dimensional fuel code ALCYONE [1] (PLEIADES platform). A model describing the water coolant flow and accounting for the different state of the fluid (nucleate boiling, critical heat flux, vapor film) has recently been incorporated to the fuel code AL-CYONE. This model gives the evolution of the clad temperature axial profile along the fuel rod within the axisymetric  $1D^{1/2}$  scheme of ALCYONE to initialize the local 3D computation. The precise description of the Pellet Cladding Mechanical Interaction (PCMI) during incidental or accidental loading conditions (stress-strain concentration in front of pellet ends and pellet cracks, clad ridges) relies on the 3D scheme of ALCYONE which models the behavior of a pellet fragment and of the overlying cladding. This 3D model has recently been extended to allow for the simulation of stacked pellet fragments in order to reproduce the ballooning of the cladding observed in some RIA tests performed in experimental reactors ( [2]). The 3D multi-pellet scheme can thus be used to study the impact of a local hot spot (where the critical heat flux is reached) and of a local gas overpressure (assuming that the gas pressure is not uniform in the fuel rod) on the deformation of the cladding.

#### Mots clefs : RIA, 3D, thermomécanique

# 1 Introduction

Le code de simulation ALCYONE [3] permet de calculer l'évolution du comportement thermomécanique et physicochimique des crayons combustibles au cours des irradiations de base ainsi que des irradiations expérimentales de type rampe de puissance ou recuit thermique. Une modélisation axisymétrique dite  $1D^{1/2}$  permettant de simuler l'ensemble d'un crayon combustible ainsi qu'une modélisation 3D permettant de simuler le comportement local d'une pastille et du gainage en vis-à-vis sont disponibles. La possibilité de calculer des transitoires rapides a été développée pour simuler notamment les expériences du programme Rep-Na où des tronçons de crayon ont subi des pulses de type RIA dans le réacteur CABRI [4, 1], le caloporteur étant du sodium.

Nous présentons dans cet article les développements menés pour pouvoir simuler des transitoires rapides avec de l'eau comme caloporteur, notamment les futurs essais du programme CIP qui seront menés dans le réacteur CABRI. La thermohydraulique a été complétée en introduisant la modélisation utilisée dans le code SCANAIR [5] développé par l'IRSN. Cette modélisation prend en compte les régimes allant de la convection forcée liquide jusqu'à l'assèchement de la gaine.

Nous présentons également les développements menés pour caractériser les conditions d'apparition du ballonnement du gainage observé dans certains essais de transitoires RIA (voir [2]). Pour cela, une extension du schéma de calcul 3D à la simulation d'un empilement de pastilles a été réalisée. Cette description permet notamment d'étudier l'effet d'un « point chaud local » (lié à l'atteinte du flux critique) et d'une « surpression locale » (liée à l'absence d'équilibre de pression dans le crayon) sur la déformation du gainage.

# 2 Schéma de calcul 1D et 3D du code Alcyone

Le schéma 1D est basé sur un découpage axial du crayon en un ensemble de tranches (voir figure 1) dont chacune est représentative du comportement moyen de quelques pastilles (un crayon d'environ 200 pastilles est généralement modélisé en 30 tranches). Chaque tranche est modélisée en géométrie 1D axisymétrique en déformations planes généralisées. Un tel schéma permet de simuler l'ensemble du crayon combustible et de calculer des grandeurs caractérisant le comportement global du crayon, à savoir les volumes libres, le relâchement des gaz de fission, la pression interne, les allongements de la colonne combustible et de la gaine. Il permet également d'estimer la déformation moyenne du combustible et surtout de la gaine sur une portion axiale du crayon qui peut ensuite être comparé à la profilométrie expérimentale.

Le schéma 3D s'intéresse au comportement d'un fragment correspondant à 1/8 d'une pastille combustible, en considérant une pré-fracturation de la pastille qui apparaît presque instantanément lors de la première montée en puissance. Compte tenu des symétries, le maillage de la simulation ne représente qu'1/32 d'une pastille (voir figure 2), entourée de la portion de gaine correspondante. Une telle modélisation permet d'accéder au comportement mécanique local de la pastille (diabolo, comblement de l'évidement, gradients verticaux, ...), et notamment à l'étude de l'Interaction Pastille Gaine en vue de prévoir l'occurrence de la rupture de la gaine. Ce schéma nécessite au préalable un calcul 1D duquel on extrait les valeurs de température extérieure de la partie non oxydée de la gaine. À chaque pas de temps du calcul 3D, cette température est alors imposée comme conditions aux limites sur la paroi externe de la gaine.



FIGURE 1 – Schéma de calcul 1D du code Alcyone

#### 3 Thermohydraulique de l'eau en condition RIA

La modélisation introduite dans le code ALCYONE est celle utilisée dans le code SCANAIR [5, 2] développé par l'IRSN. La figure 3 présente l'évolution du flux de chaleur entre la gaine et l'eau en fonction des différents régimes d'écoulement qui dépendent de la température externe de la gaine. Un premier régime en convection forcée liquide utilise la corrélation de Dittus-Boelter pour calculer le coefficient d'échange. Lorsque la paroi de la gaine atteint la température de saturation le flux de chaleur est calculé par interpolation linéaire jusqu'au flux critique déterminé avec la corrélation de Badcock-Wilcox. Lorsque la température critique est dépassée en paroi, la transition entre l'ébullition nucléée et l'écoulement en film vapeur stable (assèchement de la gaine) est calculé avec une loi d'évolution qui relie le flux critique au flux calculé avec la corrélation de Bishop-Sandberg-Tong, corrélation utilisée pour l'écoulement en film vapeur.

Dans le cas des transitoires rapides, nous utilisons la loi de comportement du gainage viscoplastique anisotrope sans seuil de contrainte développée dans la thèse de M. LE SAUX [6]. Cette loi vise à caractériser le comportement du Zy4 dans la gamme de vitesse et de température propre au RIA. Elle couvre un domaine de température allant de 20 à 1100 °C, de vitesse de déformation allant de 3.10 <sup>-4</sup> à 5 s<sup>-1</sup> et de fluence allant de 0 à 10 <sup>26</sup> n/m<sup>2</sup>.

Nous avons mis en œuvre un calcul de pulse issu d'un rapport de l'OCDE en cours de parution concernant les résultats d'un benchmark international. Il s'agit du pulse CIP3-1 décrit dans ce benchmark. Le crayon père est un crayon UO<sub>2</sub> avec une gaine en Zircaloy4, irradié pendant 5 cycles, ayant un taux de combustion moyen d'environ 75 GWj/tM. Le tronçon de crayon soumis au pulse fait 54 cm et est refroidi par de l'eau à 155 bars avec un débit de 4 m/s. Le pulse à une durée de 10 ms pour une énergie injectée au plan de flux maximum de 115 cal/g. Le maximum du pulse à lieu à 0,08 s.



FIGURE 3 – Flux de chaleur entre l'oxyde et la gaine [5]



FIGURE 4 – Température dans le gainage au plan de flux maximal

La figure 4 montre l'évolution de la température interne et externe du gainage au plan de flux maximal.

Le passage du flux critique à 0,09 s entraîne une chute rapide du flux de chaleur transmis au caloporteur et donc une augmentation de la température du gainage. Cette augmentation de température du gainage conduit ensuite très rapidement à l'assèchement du gainage à 0,095 s.

#### 4 Ballonnement

La figure 5 présente la température du gainage aux cotes  $z=35 \text{ mm} (4^{\text{ème}} \text{ pastille})$  et  $z=45 \text{ mm} (5^{\text{ème}} \text{ pastille})$ . C'est entre ces deux cotes que le flux critique est dépassé. Ce passage du flux critique entraîne, sur une faible hauteur, des variations de température du gainage très importantes (point chaud local). Cette zone de transition très marquée résulte bien entendu de la modélisation thermohydraulique simplifiée utilisée. Dans la réalité, l'ensemble des instabilités de l'écoulement étendra plus ou moins cette zone.



FIGURE 5 – Température du gainage en bas de crayon

Pour avoir une estimation des conditions propices à l'apparition d'un ballonnement, nous avons, avec la loi de comportement de M. LE SAUX [6], étudié la stabilité dimensionnelle d'un tube, représentant la gaine du crayon combustible, pour différentes températures et pressions pendant des paliers de 10 s. La pression extérieure a été fixée à 15,5 MPa. Le chargement supplémentaire éventuel lié à l'interaction pastille-gaine et dû au gonflement et à la dilatation du combustible n'a pas été pris en compte. La courbe de la figure 6 montre la limite en terme de couple pression température au delà de laquelle pourrait se déclencher un ballonnement de la gaine. Suivant le niveau de température, la pression limite locale est soit supérieure à 18 MPa (température de la gaine de 700 °C au passage du flux critique le plus bas), soit supérieure à 16 MPa (température de la gaine de 850 °C au plan de flux maximum).

Cette zone présente un grand intérêt pour l'initiation du ballonnement. En effet, la température augmentant rapidement sur une petite zone, cela entraîne une augmentation locale de la pression interne du crayon et une diminution de la résistance mécanique de la gaine. C'est cette zone que nous étudierons avec la modélisation 3D multipastilles afin de décrire de manière précise les différents volumes de vides existants au niveau des pastilles (évidements, chanfreins, fissures) et entre les pastilles et la gaine (jeu). De ces volumes et de leurs évolutions, notamment du jeu en cas de ballonnement, dépendent directement le calcul de la surpression locale en cas d'absence d'équilibre de pression dans le crayon.



FIGURE 6 – Limite de stabilité du gainage en fonction du couple température dans le gainage/pression interne (pression externe de 15,5 MPa)

La pression interne dans le crayon est de 4,7 MPa avant le déclenchement du pulse de puissance. Le pulse fait monter en température le combustible et la pression interne passe à 6,7 MPa. Le volume libre local (porosité, évidement et chanfrein) est estimé à 10 mm<sup>3</sup>. En supposant que le gaz ne migre pas, pour dépasser les 16 MPa au plan de flux maximum ou les 18 MPa au passage du flux critique le plus bas, il nous manque environ 23  $\mu$ mol ou 27  $\mu$ mol de gaz. Cela représente un relâchement supplémentaire de 4,6 % ou 5,4 % des gaz de fission. La quantité de gaz disponible en intergranulaire représente environ 16 % des gaz de fission, il faudrait donc relâcher 1/3 de ces gaz pour atteindre la pression limite. Les

relâchements observés lors des essais présentant un ballonnement de la gaine peuvent atteindre plus de 20%, ce qui indique que le mécanisme supposé être responsable du phénomène est possible.

La problématique maintenant est d'évaluer de la manière la plus précise possible les volumes libres locaux, la quantité et la cinétique de relâchement des gaz de fission ainsi que leur diffusion dans le crayon pour évaluer au mieux la pression locale. Cela ne pourra se faire sans des données expérimentales précises à l'issue des essais CIP.

### 5 Modélisation 3D multi-pastilles

Pour pouvoir calculer le ballonnement observé dans certains essais de transitoires RIA [2, 7], une extension du schéma de calcul 3D à la simulation d'un empilement de pastilles a été réalisée (figure 8). Cela permet de bien représenter les ballonnements observés expérimentalement qui s'étendent sur plusieurs pastilles comme le montre la figure 7 prise après l'essais TK1 effectué dans le réacteur d'essai Japonais NSRR.



FIGURE 7 – Examen du crayon TK-1 ballonnés [7]



FIGURE 8 – Calcul 3D multi-pastilles

La description du ballonnement dans un code de calcul combustible nécessite en effet de bien traiter le fort couplage thermo-physico-mécanique inhérent au phénomène. Après passage du flux critique, l'assèchement de la paroi externe de la gaine en certains points conduit en effet à une élévation de sa température. En conséquence et sous l'effet combiné de la pression interne du crayon et de la poussée de la pastille, la gaine se déforme ce qui conduit à la réouverture du jeu pastille gaine. Les contraintes dans la pastille sont alors relaxées ce qui induit un relâchement des gaz de fission piégés dans la matrice UO2 qui contribue alors à l'augmentation de la pression interne du crayon. Comme le phénomène est très rapide, la pression n'a pas forcément le temps de s'homogénéiser et la pression locale dépend alors des vides disponibles au voisinage de la gaine. Le schéma 3D multi-pastille permet une estimation précise de ces vides (chanfrein, évidement, fractures, ...) à tout instant du calcul et donc de la sollicitation de la gaine. Le ballonnement résulte alors d'un équilibre entre la pression locale et la déformation de la gaine qui vient relaxer cette dernière. L'échelle de description adéquate pour ce phénomène est donc la pastille compte tenu de l'importance de la géométrie initiale de la pastille et des jeux à l'interface pastille gaine.

## 6 Conclusions

L'introduction dans le code ALCYONE de la modélisation thermohydraulique [5] utilisée dans le code SCANAIR [2] permet maintenant de calculer l'évolution de la température du gainage au cours d'un pulse RIA en caloporteur eau avec notamment la détermination du passage du flux critique et l'assèchement de la gaine.

La mise en place d'un nouveau schéma 3D multi-pastilles devrait permettre alors, sur la base d'une estimation précise des déformations et contraintes locales dans la pastille et de la gaine, d'avoir accès aux différents volumes libres disponibles. Le phénomène étant très rapide, les gaz de fission relâchés localement durant le transitoire n'ont pas forcément le temps de migrer pour équilibrer la pression interne du crayon, ce qui peut conduire à une surpression locale. Le ballonnement éventuel résulterait alors d'un équilibre entre cette surpression locale et la déformation de la gaine qui vient relaxer cette dernière. Des calculs 3D sont en cours pour vérifier cette hypothèse qui devra ensuite être confrontée aux résultats des essais de pulse du programme CIP.

## Références

- J. SERCOMBE, E. FÉDÉRICI, M. LE SAUX, B. MICHEL et C. POUSSARD : 1D and 3D modelling of PCMI during a RIA with ALCYONE V1.1. Actes conférence internationale Top Fuel 2010, Orlando, Septembre, 2010.
- [2] A. MOAL : Advanced models for the simulation of Post-DNB Phenomena during Reactivity Initiated Accidents with SCANAIR. Actes conférence internationale Top Fuel 2010, Orlando, Septembre, 2010.
- [3] V. MARELLE, J. SERCOMBE, B. MICHEL et R. TAWIZGANT : Thermo-mechanical modeling of PWR fuel with ALCYONE. T2-028, 2011 Water Reactor Fuel Performance Meeting , Chengdu, China, Sept. 11-14, 2011.
- [4] J. PAPIN, B. CAZALIS, J.M. FRIZONNET, J. DESQUINES, F. LEMOINE, V. GEORGENTHUM, F. LA-MARE et M. PETIT : Summary and interpretation of the CABRI REP-Na Program. Nuclear Technology, 157(3):230–250, 2007.
- [5] V. BESSIRON : Modelling of Clad-to-Coolant Heat Transfer for RIA Applications. Journal of NUCLEAR SCIENCE and TECHNOLOGY, 44(2):211–221, 2006.
- [6] M. Le SAUX : Comportement et rupture de gaines en zircaloy4 detendu vierges, hydrurees ou irradiees en situation accidentelle de type RIA. Thèse CEA-R-6248, 2008.
- T. FUKETA et H. Sasajima ansd T. SUGIYAMA : Behavior of high-burnup PWR fuels with low-tin zircaloy-4 cladding under Reactivity-Initiated-Accident conditions. Nuclear Technology, 133:50–62, 2001.