



HAL
open science

Influence des champs thermomécaniques sur la rétention de l'hydrogène dans les composants du tokamak ITER

Shihao Bian, Y. Charles, Jonathan Mougenot, Xavier Bonnin

► To cite this version:

Shihao Bian, Y. Charles, Jonathan Mougenot, Xavier Bonnin. Influence des champs thermomécaniques sur la rétention de l'hydrogène dans les composants du tokamak ITER. Recueil des Journées Jeunes Chercheurs 2021, CEFACOR, Nov 2021, En distanciel, France. pp.49-58. hal-03579742

HAL Id: hal-03579742

<https://hal.science/hal-03579742v1>

Submitted on 1 Apr 2022

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.

Influence des champs thermomécaniques sur la rétention de l'hydrogène dans les composants du tokamak ITER

S. Bian¹, Y. Charles¹, J. Mougenot¹, X. Bonnin²

¹ Université Sorbonne Paris Nord, Laboratoire des Sciences des Procédés et des Matériaux, LSPM, CNRS, UPR 3407, 99 avenue Jean-Baptiste Clément, F-93430 Villetaneuse, France.

² ITER Organization, Route de Vinon sur Verdon, CS90 046, 13067 St Paul Lez Durance Cedex, France.

1. Introduction

Les composants Diagnostic First Wall (DFW) du tokamak ITER sont des éléments de structure destinés à porter des appareils de diagnostic du plasma et les panneaux de protection de la chambre à vide. Composés en acier 316L, ces composants sont soumis à des cycles de flux de chaleur et d'atomes (notamment le tritium, isotope radioactif de l'hydrogène). Ces atomes diffusent dans la structure et sont piégés par les défauts du matériau (lacunes, dislocations, ...).

L'estimation de la quantité de tritium contenu dans les DFW en fonction des cycles de chargement est nécessaire pour des questions de sûreté (pollution radioactive) et de tenue des composants (fragilisation). En particulier, la profondeur de diffusion des isotopes d'hydrogène doit être calculée afin de remonter aux valeurs des flux de perméation dans les circuits de refroidissement.

La plupart des codes numériques dédiés au transport et au piégeage de l'hydrogène dans les matériaux de structure, dans un contexte de fusion, prennent en compte l'influence des champs thermiques mais n'incluent pas l'effet des champs mécaniques. Afin d'estimer l'impact de ces derniers (plasticité, contrainte, dilatation) sur la rétention de l'hydrogène dans les DFW, des calculs sont réalisés avec le code à éléments finis Abaqus. Ces calculs couplent, au sein d'une même itération, la résolution transitoire de l'équation de la chaleur, la diffusion assistée par la pression hydrostatique et la diffusion et le piégeage transitoire de l'hydrogène [1,2] tout en prenant en compte les pièges créés par déformation plastique. L'impact de chaque terme sur la création des pièges, la diffusion de l'hydrogène et le développement de la plasticité sont évalués en fonction des hypothèses de modélisation (contraintes planes...) et en fonction du nombre des cycles de chargement.

2. Modélisation

a. Diffusion et piégeage de l'hydrogène

Dans un matériau, les atomes d'hydrogène diffusent à travers les sites interstitiels et peuvent être piégés sur les défauts. La concentration en hydrogène est classiquement définie comme $C = C_L + C_T$, dans laquelle C_L désigne la concentration diffusive et $C_T = \sum_i C_{T,i}$ celle piégée (ici sur i pièges). Les valeurs adimensionnelles θ_L et $\theta_{T,i}$ désignent respectivement l'occupation des sites interstitiels et pièges, dont les densités sont notées N_L et $N_{T,i}$:

$$\begin{cases} C_L = N_L \theta_L \\ C_T = \sum_i C_{T,i} = \sum_i N_{T,i} \theta_{T,i} \end{cases} \quad (1)$$

Le flux d'hydrogène diffusif est défini sur la base de la loi de Fick, tenant compte de l'effet de la pression hydrostatique $P_H = -1/3 \text{ tr } \boldsymbol{\sigma}$, où $\boldsymbol{\sigma}$ est le tenseur de contrainte [3,4] :

$$\boldsymbol{\varphi}_L = -D_L \nabla C_L - D_L C_L \frac{V_H}{RT} \nabla P_H \quad (2)$$

où R est la constante des gaz parfaits, T la température, D_L le coefficient de diffusion de l'hydrogène et V_H le volume molaire partiel de l'hydrogène. La conservation de la masse conduit l'équation de diffusion et piégeage, telle que définie par Sofronis et McMeeking [5] :

$$\frac{\partial C_L}{\partial t} + \frac{\partial C_T}{\partial t} = \nabla \cdot \left(D_L \nabla C_L + D_L C_L \frac{V_H}{RT} \nabla P_H \right) \quad (3)$$

La concentration d'hydrogène piégée peut être calculée à partir de l'équation dite de McNabb et Foster, pour $C_L \ll N_L$ (ou $\theta_L \ll 1$), qui correspond au piégeage transitoire [6] :

$$\frac{\partial C_{T,i}}{\partial t} = \frac{k_i}{N_L} C_L (N_{T,i} - C_{T,i}) - p_i C_{T,i} \quad (4)$$

où p_i et k_i sont les vitesses de réaction de dépiégeage et de piégeage.

b. Équation de la chaleur

L'équation de la chaleur est donnée équation (5), où ρ est la masse volumique, C_p la chaleur spécifique et λ la diffusivité thermique

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) \quad (5)$$

La variation temporelle de la température induit un tenseur de dilatation thermique tel que

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{th} = \alpha (T - T_{init}) \mathbf{I} \quad (6)$$

où T_{init} est la température initiale, et \mathbf{I} est le tenseur identité.

c. Champs mécaniques

Le comportement élasto-(thermo)plastique du matériau est modélisé par un comportement à écrouissage isotrope avec une limite élastique décrite par la loi de Johnson-Cook [7] :

$$\sigma_Y = (A + B \varepsilon_p^n) (1 + C \ln \dot{\varepsilon}^*) (1 - T^{*m}) \quad (7)$$

où $\dot{\varepsilon}^*$ est le taux de déformation de référence pris ici égal à 1 s^{-1} , ε_p est la déformation plastique équivalente, et T^* une température adimensionalisée telle que

$$T^* = \frac{T - T_{amb}}{T_{amb} - T_{fusion}} \quad (8)$$

T_{amb} et T_{fusion} représentent respectivement la température initiale (prise égale à 300 K) et la température de fusion (considérée comme étant égale à 1356 K).

d. Résolution du problème couplé

Le système chimio-thermo-mécanique décrit dans les trois paragraphes précédents est résolu de manière entièrement couplée (couplage fort) à l'aide du logiciel par éléments finis Abaqus, en se basant sur la procédure 'coupled temp-displacement' et des procédures utilisateurs (voir [8,9] pour des précisions sur l'implémentation), qui se transmettent un certain nombre de données :

- une procédure UMAT permettant de résoudre le problème thermomécanique et de calculer le gradient de pression hydrostatique et la déformation plastique équivalente ;

- une procédure UMATHT permettant de résoudre le problème de transport et de multi-piégeage transitoire de l'hydrogène assisté par les champs thermiques et mécaniques ;
- une procédure UEL qui permet de résoudre le problème thermique transitoire ;
- une procédure UEXPAN qui permet de déterminer la dilatation thermique. L'utilisation de cette procédure permet de ne pas se préoccuper de la contribution thermique dans les déformations transmises par Abaqus à la procédure UMAT.

e. Paramètres matériaux

Les paramètres utilisés sont globalement les mêmes que ceux utilisés dans [2] : les paramètres thermomécaniques sont issus de [10], avec un coefficient de dilatation considéré comme indépendant de la température [11]. Enfin, les données pour la diffusion de l'hydrogène sont issues de [12,13]. Deux types de pièges sont ici considérés, de même énergie (égale à 0.7 eV [13]) mais de densités différentes : $N_{T,1} = 8.42 \times 10^{19}$ site/mm³ [13] et $\log N_{T,2} = 23.26 - 2.33e^{-5.5\varepsilon_p}$, où ε_p est la déformation plastique équivalente [5]. Les paramètres de cinétique de piégeage sont les mêmes que dans [13].

3. Configuration du problème

La géométrie du DFW (sous forme d'un fichier CAD fourni par l'Organisation ITER) est présentée Figure 1a. Pour des raisons de simplicité, seule une partie de cette géométrie sera modélisée (indiquée par un rectangle rouge). Chaque conduit cylindrique représente un conduit pour le fluide de refroidissement.

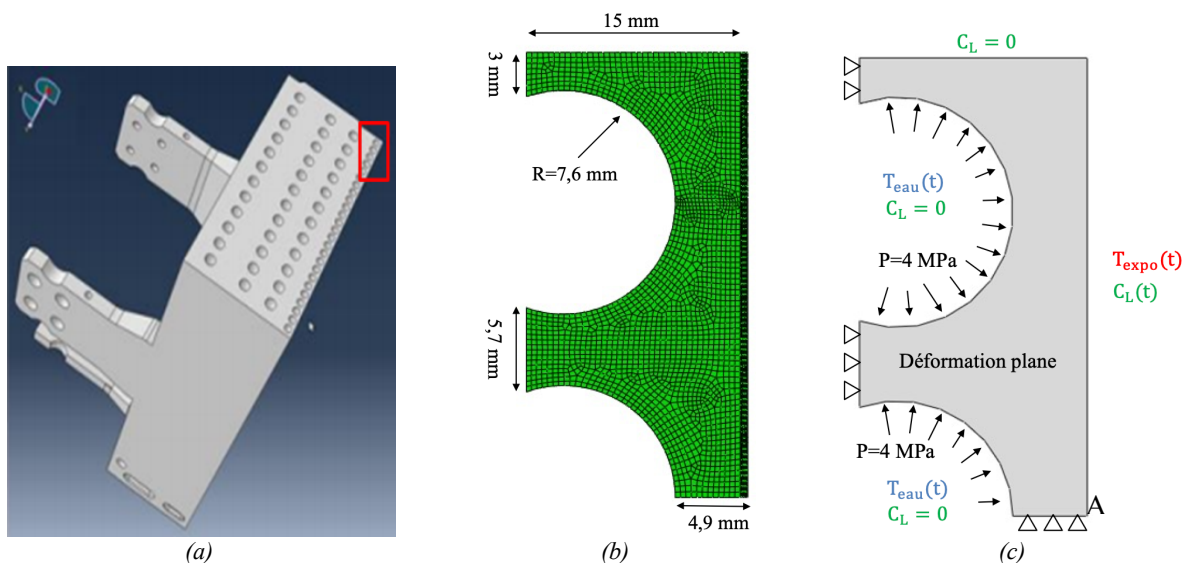


Figure 1. (a) DFW et partie modélisée dans la présente étude (dans un rectangle rouge), (b) maillage et dimension du modèle, et (c) conditions aux limites appliquées.

La partie d'intérêt est modélisée en 2D et maillée avec un peu moins de 4000 éléments linéaires à intégration complète, tel qu'illustré sur la Figure 1b. Le maillage a été optimisé en se basant sur les résultats des champs mécaniques et de diffusion de l'hydrogène.

Comme montré sur la Figure 1c, des conditions aux limites de symétrie sont imposées sur les bords inférieur et gauche, et la géométrie est considérée comme étant dans le plan de symétrie de la pièce (déformations planes). L'eau circulant dans les tubes de refroidissement induit une pression constante sur le DFW de 4 MPa. Sur la face droite, exposée au plasma, des cycles thermiques et de chargement en hydrogène sont imposés. La surface supérieure est considérée comme une surface libre pour l'hydrogène ($C_L=0$) et de symétrie pour la température (flux normal nul). Sur les tubes de refroidissement, $C_L=0$ est imposé, de même qu'un cycle de température.

Le scénario choisi pour notre étude est illustré sur la Figure 2. Il consiste en 160 cycles de chargement de 3 jours chacun (Phase 1), et d'un cycle de recuit de 8 mois (Phase 2), à température constante et sans exposition à l'hydrogène.

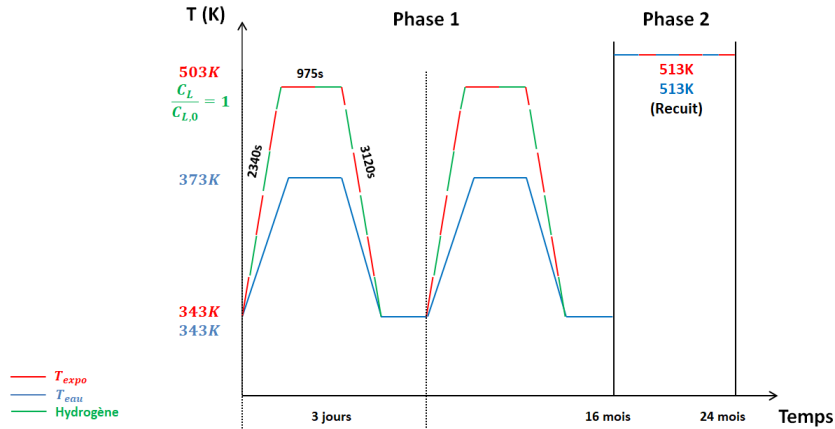


Figure 2. Scénario de chargement (température & exposition à l'hydrogène).

Chaque cycle de 3 jours est constitué d'une montée, d'un plateau, et d'une descente des températures sur la surface d'exposition (T_{expo}) et de l'eau circulant dans les tuyaux (T_{eau}), accompagnés d'une exposition à l'hydrogène à la surface d'exposition, suivies d'une phase de maintien à basse température (sans hydrogène). Un cycle correspond à la concaténation temporelle sur 3 jours de 13 décharges plasma quotidiennes de 400 secondes chacune. Ce cycle est répété sur 16 mois. L'implantation en hydrogène est modélisée par une concentration en hydrogène à la surface $C_{L,0}$, telle que [14] :

$$C_{L,0} = \frac{R_p \Gamma}{D_L} = 1.46 \times 10^{14} \text{ atm/mm}^3 \quad (9)$$

où Γ représente le flux d'échange de charge de l'hydrogène ($2 \times 10^{19} \text{ atom.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$), R_p représente la profondeur moyenne d'implantation (13 nm) [2].

4. Résultats

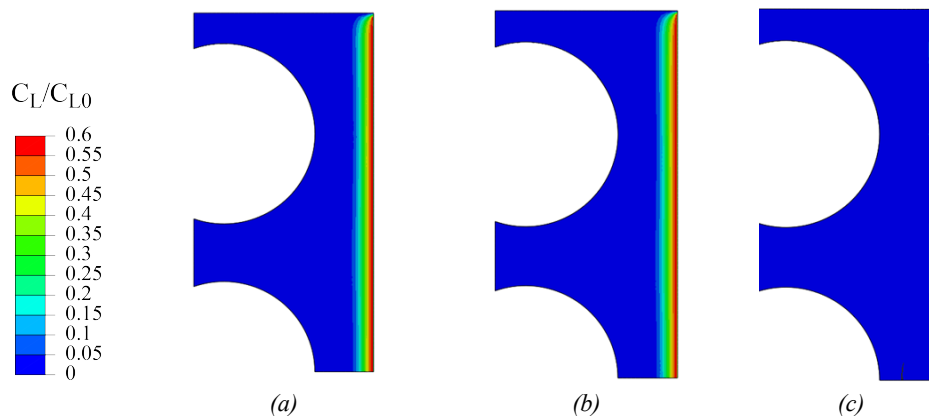


Figure 3. Répartition de $C_L/C_{L,0}$ à la fin de la phase 1 : (a) sans aucun chargement mécanique, (b) avec seulement la pression des tuyaux de fluide, (c) avec tous les champs thermomécaniques.

Trois calculs ont été effectués : un calcul de diffusion/piégeage pur (sans chargement mécanique), un calcul ne considérant que la pression exercée par l'eau dans les circuits de refroidissement, et un calcul prenant en compte en plus la dilatation thermique. Les champs de diffusion à la fin de la phase 1 sont donnés sur la Figure 3.

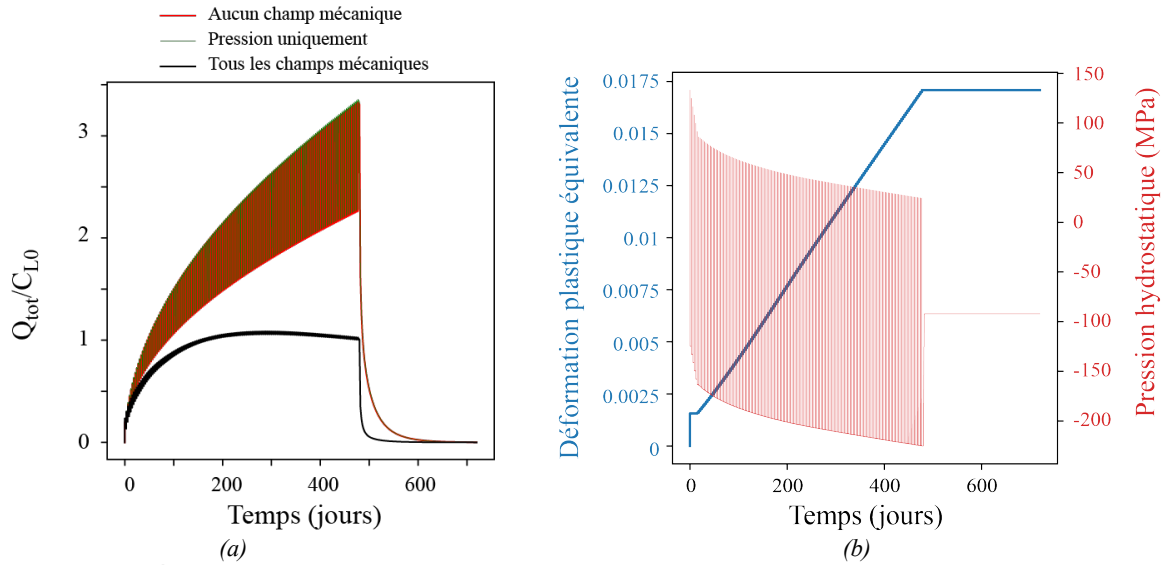


Figure 4. (a) Évolution de la quantité totale d'hydrogène $Q_{tot} = \int (C_L + C_T)dV$ normalisée par $C_{L,0}$ en fonction du temps, pour les trois configurations, (b) déformation plastique équivalente (bleu) & pression hydrostatique (rouge) sur le point A (voir la Figure 1c) au cours du temps dans le cas où tous les champs mécaniques sont résolus.

Alors que la pression du fluide impacte peu la pénétration et la rétention de l'hydrogène dans la structure, les champs thermomécaniques les limitent fortement : la profondeur de pénétration de l'hydrogène après 160 cycles est ainsi plus faible (Figure 3c). L'évolution de quantité totale d'hydrogène est représentée Figure 4a, elle sature à partir d'une centaine de jours (puis décroît légèrement) dans le cas où la résolution des champs mécaniques est complète, alors qu'elle reste croissante si les champs thermomécaniques ne sont pas pris en compte.

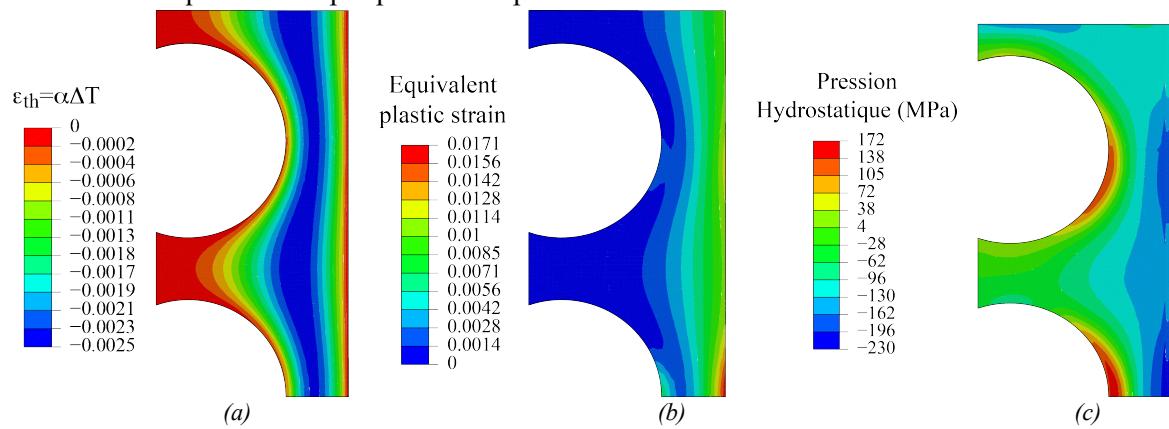


Figure 5. A la fin de la phase 1 : (a) champ de dilatation thermique, (b) champ de déformation plastique équivalente, (c) champ de pression hydrostatique.

Du fait de l'hypothèse de déformation plane, la dilatation thermique (Figure 5a) à chaque cycle génère de la déformation plastique (Figure 5b, Figure 4b), qui a son tour, augmente la densité du piège 2 (sans que celle-ci ne devienne significative par rapport à la densité du piège 1 : au point A, le rapport $N_{T,1}/N_{T,2}$ passe de 9.9×10^7 à 6.11×10^7 à la fin de la phase 1) et surtout, génère des contraintes résiduelles et un champ de pression hydrostatique (Figure 5c, Figure 4b). Ces contraintes modifient la capacité de diffusion de l'hydrogène : elle accélère la diffusion (et donc désorption) à la surface (valeurs négatives) tandis qu'elles ralentissent la diffusion en volume (valeurs positives) ; ce qui explique donc les différences obtenues sur les champs de diffusion et l'inventaire total.

5. Conclusion

Les résultats présentés dans cette étude montrent que, lors de la première phase de chargement sur les DFW, les champs mécaniques jouent un rôle de limiteur de diffusion et de piégeage de l'hydrogène à

travers les variations de pression hydrostatique induites par la dilatation thermique. Leur résolution est donc positive car ils diminuent la contribution des DFW sur l’inventaire maximum autorisé dans le tokamak. Cependant, les hypothèses utilisées sont extrêmement restrictives mécaniquement (déformation plane, symétries) et devront être ajustées afin de mieux prendre en compte la géométrie réelle des DFW. L’influence des paramètres de chargement et de piégeage feront l’objet d’une étude approfondie notamment le choix de la concaténation des cycles car plus les phases de montée et de descente de température sont nombreuses, plus l’effet de la dilatation thermique sera exacerbé.

Avertissement : Les points de vue et opinions exprimés dans ce document ne reflètent pas nécessairement ceux de l’Organisation ITER. ITER est l’installation nucléaire de base INB-174.

6. Bibliographie

- [1] S. Benannoune, Y. Charles, J. Mougenot, M. Gaspérini, and G. De Temmerman, “Numerical simulation by finite element modelling of diffusion and transient hydrogen trapping processes in plasma facing components,” *Nucl Mat Ener*, vol. 19, pp. 42–46, May 2019.
- [2] S. Benannoune, Y. Charles, J. Mougenot, M. Gaspérini, and G. De Temmerman, “Multidimensional finite-element simulations of the diffusion and trapping of hydrogen in plasma-facing components including thermal expansion.,” *Phys Scr*, vol. 171, p. 014011, Feb. 2020.
- [3] J. C. M. Li, R. A. Oriani, and L. S. Darken, “The Thermodynamics of Stressed Solids,” *Z Phys Chem*, vol. 49, no. 3, pp. 271–290, May 1966.
- [4] J. O. Bogkris, W. Beck, M. A. Genshaw, P. K. Subramanyan, and F. S. Williams, “The effect of stress on the chemical potential of hydrogen in iron and steel,” vol. 19, no. 11, pp. 1209–1218, Nov. 1971.
- [5] P. Sofronis and R. M. McMeeking, “Numerical analysis of hydrogen transport near a blunting crack tip,” *J Mech Phys Solids*, vol. 37, no. 3, pp. 317–350, 1989.
- [6] A. McNabb and P. K. Foster, “A new analysis of the diffusion of hydrogen in iron and ferritic steels,” *Trans Metall Soc AIME*, vol. 227, no. 3, pp. 618–627, 1963.
- [7] G. R. Johnson and W. H. Cook, “A constitutive model and data for materials subjected to large strains, high strain rates, and high temperatures,” presented at the 7th International Symposium on Ballistics, the Hague, the Netherlands, 1983, pp. 541–547.
- [8] Y. Charles, T. H. Nguyen, and M. Gaspérini, “Comparison of hydrogen transport through pre-deformed synthetic polycrystals and homogeneous samples by finite element analysis,” *Int J Hydrog Energy*, vol. 42, no. 31, pp. 20336–20350, Jun. 2017.
- [9] E. Vasikaran, Y. Charles, and P. Gilormini, “Implementation of a reaction-diffusion process in the Abaqus finite element software,” *Mech Indus*, vol. 21, no. 5, p. 508, 2020.
- [10] D. Umbrello, R. M’Saoubi, and J. C. Outeiro, “The influence of Johnson–Cook material constants on finite element simulation of machining of AISI 316L steel,” *Int J Mach Tool Manu*, vol. 47, no. 3, pp. 462–470, Mar. 2007.
- [11] O. Sayman, F. Sen, E. Celik, and Y. Arman, “Thermal stress analysis of Wc–Co/Cr–Ni multilayer coatings on 316L steel substrate during cooling process,” *Mater Des*, vol. 30, no. 3, pp. 770–774, Mar. 2009.
- [12] R. D. Penzhorn, Y. Torikai, S. Naoe, K. Akaishi, A. Perevezentsev, K. Watanabe, and M. Matsuyama, “Distribution and Mobility of Tritium in Type 316 Stainless Steel,” *Fusion Sci Technol*, vol. 57, no. 3, pp. 185–195, Apr. 2010.
- [13] R. D. Penzhorn, Y. Torikai, K. Watanabe, M. Matsuyama, and A. Perevezentsev, “On the fate of tritium in thermally treated stainless steel type 316L,” *J Nucl Mater*, vol. 429, no. 1, pp. 346–352, Oct. 2012.
- [14] E. A. Hodille, N. Fernandez, Z. A. Piazza, M. Ajmalghan, and Y. Ferro, “Hydrogen supersaturated layers in H/D plasma-loaded tungsten: A global model based on thermodynamics, kinetics and density functional theory data,” *Phys Rev Mater*, vol. 2, no. 9, p. 093802, Sep. 2018.