



**HAL**  
open science

# Développement d'une méthode DEM polyédrique pour la simulation de la relocalisation du combustible nucléaire lors d'un APRP

Thibault Bessiere, Serguei Potapov, Philippe Lafon, Antoine Ambard,  
Farhang Radjai

## ► To cite this version:

Thibault Bessiere, Serguei Potapov, Philippe Lafon, Antoine Ambard, Farhang Radjai. Développement d'une méthode DEM polyédrique pour la simulation de la relocalisation du combustible nucléaire lors d'un APRP. 16ème Colloque National en Calcul de Structures (CSMA 2024), CNRS; CSMA; ENS Paris-Saclay; CentraleSupélec, May 2024, Hyères, France. hal-04610923

**HAL Id: hal-04610923**

**<https://hal.science/hal-04610923v1>**

Submitted on 3 Dec 2024

**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.

# Développement d'une méthode DEM polyédrique pour la simulation de la relocalisation du combustible nucléaire lors d'un APRP

T. Bessiere<sup>1,2</sup>, S. Potapov<sup>3</sup>, P. Lafon<sup>3</sup>, A. Ambard<sup>1</sup>, F. Radjai<sup>2</sup>

<sup>1</sup> EDF R&D Les Renardières, Av. des Renardières, 77250 Écuellen, thibault.bessiere@edf.fr

<sup>2</sup> Laboratoire de Mécanique et Génie Civil, Université Montpellier 2, Place Eugène Bataillon, 34095 Montpellier

<sup>3</sup> EDF R&D Paris-Saclay, 7 Boulevard Gaspard Monge, 91120 Palaiseau

**Abstract** — Lors d'un Accident de Perte de Réfrigérant Primaire (APRP), les crayons combustibles sont soumis à des sollicitations thermo-mécaniques intenses. Celles-ci peuvent provoquer un ballonnement ponctuel de la gaine dans lequel le combustible, présent dans un état fragmenté, peut se relocaliser radialement et axialement et induire un état de température élevé conduisant à la rupture de la gaine, donc de la première barrière de sûreté. Des recherches visent à étudier cet effet grâce à des modèles numériques avancés. Ici, on propose d'assimiler le combustible fragmenté à un milieu granulaire et de mettre en œuvre une modélisation par éléments discrets de la relocalisation des fragments. L'objectif final étant de prendre en compte l'interaction entre fragments et gaz de fission ainsi que la rupture de la gaine et l'expulsion des fragments, un premier objectif est de reprendre la méthode des éléments discrets (DEM) disponible dans le code Europlexus, et de l'étendre à des géométries polyédriques, en s'inspirant d'une méthode utilisée dans le code Rockable basée sur des sphéro-polyèdres.

**Mots clés** — combustible nucléaire, simulation numérique, méthode des éléments discrets

## 1 Introduction

Le comportement des crayons combustible est étudié dans le cadre de scénarios accidentels hypothétiques dans lesquels figure l'Accident de Perte de Réfrigérant Primaire (APRP). Ce scénario se caractérise par la rupture d'une branche du circuit primaire à l'origine du dénoyage du cœur du réacteur. Lors d'un APRP, les crayons ne sont plus refroidis par le fluide caloporteur et subissent une montée progressive de température en peau externe des gaines pendant que la pression extérieure décroît. Ces effets peuvent conduire à un ballonnement et dans certains cas à un éclatement du crayon. Dans cette situation, les essais analytiques semi-intégraux<sup>1</sup> montrent que le combustible, naturellement fragmenté en conditions de fonctionnement normales, peut :

- se sur-fragmenter, pour des taux de combustion élevés ;
- se relocaliser : les fragments peuvent se déplacer radialement et axialement le long du crayon ;
- être expulsé hors du crayon, en cas d'éclatement de la gaine.

On s'intéresse de manière spécifique à la modélisation de la *relocalisation* du combustible fragmenté et sur-fragmenté au droit des zones ballonnées du crayon combustible. La situation étudiée est illustrée sur la Figure 1. Des simulations numériques qui reposent sur la *Méthode des Eléments Discrets* (DEM) ont été proposées [8], [2], [6], [7] dans le but de décrire le phénomène de relocalisation par l'analyse de grandeurs clés : la fraction massique, la compacité<sup>2</sup> des fragments au droit du ballon, etc. Les résultats viennent ensuite souvent en appui à des codes combustible industriels visant à calculer la conductivité du lit de fragments dans la zone ballonnée et à déterminer la température de la gaine associée pour répondre à des critères de sûreté [9].

Dans ce travail, les possibilités offertes par la DEM ont été retenues dans le but de créer un modèle de relocalisation réaliste visant à représenter les principales caractéristiques du crayon combustible lors d'un APRP :

<sup>1</sup>essais expérimentaux réalisés à l'échelle d'un crayons combustible

<sup>2</sup>correspond au ratio du volume des fragments sur le volume total disponible

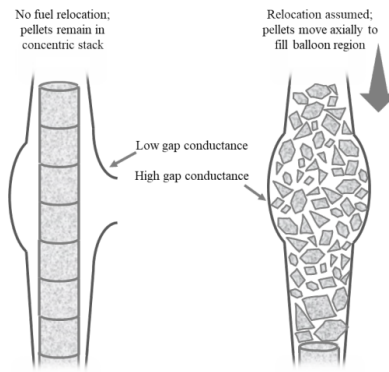


Figure 1: Illustration schématique de la relocalisation d'un lit de fragments et de ses conséquences sur le profil de températures le long de la gaine [3].

- la forme complexe des fragments ;
- la déformation de la gaine et l'interaction des fragments avec la paroi interne ;
- l'interaction du combustible avec les gaz de fission et le gaz de confinement ;
- la sur-fragmentation induite par la dépressurisation rapide du crayon en cas d'éclatement de la gaine.

Les développements sont réalisés au sein du code *Europlexus*<sup>3</sup> dans lequel une méthode DEM est implantée. Cette dernière a été initialement développée pour répondre à des problématiques de rupture de structures en béton armé en cas d'impact sévère. Pour ce faire, les structures sont « discrétisées » par un ensemble d'éléments discrets de forme sphérique reliés entre eux par des lois cohésives, calibrées de sorte à modéliser le comportement global d'un béton armé.

Pour répondre à la problématique de relocalisation, le premier objectif est d'étendre la méthode DEM implémentée sur *Europlexus* à des écoulements granulaires. Il s'agit pour cela de privilégier le contact-frottant aux lois cohésives liant les particules et d'introduire des géométries complexes de type polyédriques pour représenter la forme des particules.

Les généralités sur les méthodes DEM sont donc rappelées (section 2) dans le but de cerner les étapes de modélisation qui présentent des contraintes techniques induites par les géométries polyédriques (section 3). Une stratégie de modélisation inspirée du code *Rockable*<sup>4</sup> [1] est par la suite sélectionnée (section 4). On explique enfin le principe des méthodes mises en œuvre pour introduire des géométries polyédriques (section 5).

## 2 Généralités sur la DEM

Le principe d'une méthode aux éléments discrets consiste à résoudre un problème multi-contacts d'une collection de particules élémentaires rigide-indéformable en interaction ; cela s'articule autour de l'application du Principe Fondamental de la Dynamique (PFD) et des lois de contact-frottant (condition de Signorini, loi de frottement de Coulomb) qui lient forces et déplacements.

L'algorithme de résolution est similaire dans la plupart des méthodes discrètes, il se compose de trois étapes principales :

- *la détection des contact* détermine la liste de particules pour lesquelles un contact est défini à partir d'un critère de contact liant une particule candidate et une particule antagoniste ;

<sup>3</sup>code de dynamique rapide, propriété du CEA et du JRC (<http://www-epx.cea.fr/>) utilisé par EDF dans les études de sûreté

<sup>4</sup>code mettant en œuvre la méthode classique des éléments discrets, co-développé par le LMGC de Montpellier

- *la résolution des forces de contact* se base sur des lois de contact-frottant qui permettent de lier les forces de contact à la distance et au déplacement relatif entre les particules ;
- *l'actualisation des mouvements* (positions, vitesses et accélérations) s'effectue à partir du PFD en prenant en compte les forces extérieures et les forces de contact qui agissent sur chaque particule. Les équations (1) permettent de décrire le mouvement de chaque particule  $j$  :

$$\begin{cases} m_j \ddot{\vec{x}}_j = \vec{F}_j^{ext} + \vec{R}_j \\ \mathbb{I}_j \dot{\vec{\omega}}_j + \vec{\omega}_j \wedge (\mathbb{I}_j \vec{\omega}_j) = \overleftrightarrow{\mathcal{M}}_j(\vec{F}_j^{ext}) + \overleftrightarrow{\mathcal{M}}_j(\vec{R}_j) \end{cases} \quad (1)$$

Avec pour chaque particule  $j$ ,  $m_j$  la masse,  $\ddot{\vec{x}}_j$  l'accélération,  $\vec{\omega}_j$  et  $\dot{\vec{\omega}}_j$  la vitesse et l'accélération angulaire,  $\mathbb{I}_j$  la matrice d'inertie,  $\vec{F}_j^{ext}$  et  $\overleftrightarrow{\mathcal{M}}_j(\vec{F}_j^{ext})$  respectivement la résultante et le moment des forces extérieures,  $\vec{R}_j$  et  $\overleftrightarrow{\mathcal{M}}_j(\vec{R}_j)$  respectivement la résultante et le moment des forces de contact. Les moments et la matrice d'inertie s'appliquent sur le centre d'inertie de la particule en  $OG_j$ .

Plusieurs approches de résolution se distinguent dans la manière de traiter ces étapes. La méthode de résolution qui est utilisée dans ce travail est la DEM introduite par Cundall et Strack en 1979 [5]. Cette méthode est basée sur un schéma d'intégration temporel explicite et considère des lois de contact-frottant régularisées qui autorisent une légère interpénétration des particules lors de la résolution des forces de contact. Pour cette raison, on lui assimile souvent le nom de « smooth » DEM.

### 3 Spécificités de la DEM induites par les géométries polyédriques

Les contraintes techniques induites par la prise en compte des formes polyédriques en smooth DEM peuvent être mises en évidence à travers la comparaison avec les particules sphériques au niveau de plusieurs étapes. Il s'agit simplement de les identifier dans cette partie avant de proposer des solutions dans les parties suivantes.

#### 1. La détection des contacts :

Dans le cas de deux particules sphériques  $a$  et  $b$  suffisamment proches, le critère de contact peut se résumer à une simple inéquation :

$$\delta_n \leq (r_a + r_b) \quad (2)$$

où  $\delta_n$  est définie comme la distance algébrique qui sépare le centre de gravité de chacune des particules et  $r$  le rayon des particules.

Le critère de détection des contacts entre des particules polyédriques quelconques reste plus difficile à formuler. De même, l'actualisation des paramètres de contact qui est liée à l'étape de détection (position du contact, normale de contact, interpénétration...) n'est pas triviale.

#### 2. La résolution de l'équation d'équilibre à plusieurs niveaux :

- Le schéma d'intégration en temps explicite nécessite d'inverser la matrice de masse<sup>5</sup>. L'utilisation de matrices diagonales permet de faciliter le processus d'inversion.

Les particules sphériques permettent d'obtenir des matrices d'inerties naturellement diagonales à chaque pas de temps où les moments d'inertie suivant les axes  $x$ ,  $y$  et  $z$  sont connus :  $I_{G_x} = I_{G_y} = I_{G_z} = \frac{2}{5} m r^2$ . Dans le cas de particules de forme polyédrique, la matrice d'inertie n'est pas connue d'avance et nécessite d'être précalculée.

<sup>5</sup>la matrice de masse concatène les masses (mouvement de translation) et les moments d'inertie (mouvement de rotation) de toutes les particules

- La matrice d'inertie des particules polyédriques n'est pas diagonale dans le repère absolu et elle varie à chaque pas de temps, il est donc nécessaire d'introduire un repère relatif<sup>6</sup> et d'actualiser ce repère pour que les termes de la matrice ne varient pas d'un pas de temps à l'autre.
- Le terme  $\vec{\omega}_j \wedge (\mathbb{I}_j \vec{\omega}_j)$  prenant en compte les dérivées entraînées qui apparaissent dans l'équation 1 ne s'annule plus lorsque les particules ne sont pas sphériques.

L'étape de résolution des forces de contacts est similaire dans le cas des particules sphériques et polyédriques.

## 4 Stratégie de modélisation

Plusieurs approches présentes dans la littérature ont été envisagées pour appliquer la DEM à des géométries complexes, une première méthode consiste à construire les fragments à partir de particules sphériques reliées entre elles par des liens cohésifs. On retrouve cette stratégie appliquée à la relocalisation dans les modélisations de *Govers et Verwerft* [6] ou dans la thèse d'*Amarsid* [2].

D'autres modélisations ont choisi de prendre le problème au sens strict en adaptant le corps de la méthode DEM à des géométries polyédriques, c'est le cas de méthodes développées dans le code LMGC90. Celles-ci ont été exploitées dans le cadre de la problématique de relocalisation du combustible [4], [9].

Le code Rockable, adopte quant à lui une approche inédite basée sur les sphéro-polyèdres. Le principe est de partir d'une forme polyédrique initiale et de la remplir en balayant une sphère sur tous les bords et faces du solide. D'un point de vue mathématique, ces formes peuvent être interprétées comme la somme de Minkowski d'un polyèdre et d'une sphère, d'où leur nom de sphéro-polyèdres. Le volume de la particule correspondra ainsi au volume du polyèdre initial auquel on ajoute un certain rayon, le rayon de Minkowski. La Figure 2 illustre un exemple de galet non-convexe sous forme de sphéro-polyèdre.

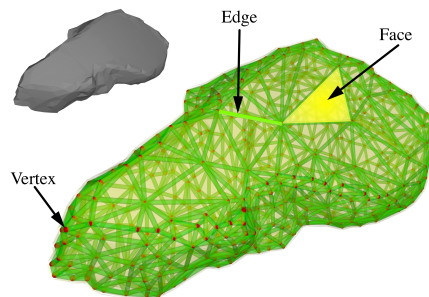


Figure 2: Représentation d'un sphéro-polyèdre d'après la documentation de Rockable [1]

Les sphéro-polyèdres réunissent les avantages des deux approches de clusters de sphères ou polyèdres stricts, sans leurs inconvénients : ils permettent d'obtenir des formes plus réalistes que les agrégats de particules et plus adaptés aux objectifs de couplage que l'on envisage avec le fluide et le modèle de fragmentation (formes non-poreuse, fissuration nette). D'autre part, la détection des contacts et la définition des interactions de contact (coordonnées du point de contact, normale au contact, interpénétration...) s'avèrent grandement facilitées par rapport aux polyèdres stricts et moins coûteuses en temps de calcul.

L'approche finalement retenue est inspirée de celle proposée par le code Rockable s'avère la plus optimisée pour concilier le réalisme de la forme des fragments et une mise en œuvre abordable.

<sup>6</sup>dans lequel la matrice devient diagonale

## 5 Description des méthodes développées

Cette partie présente les méthodes mises en œuvre pour introduire des géométries polyédriques au niveau des étapes de résolution identifiées dans la partie 3 : la détection des contacts, la construction de la matrice de masse et l'actualisation du repère relatif de chaque particule.

### 5.1 Détection des contacts

L'approche des sphéro-polyèdres revient à considérer des sphères pour former les sommets, des cylindres pour former les arêtes et des polygones avec une épaisseur pour former les faces du polyèdre, ces formes élémentaires sont facilement paramétrables et de même rayon/ épaisseur. Toutes les configurations de contact entre deux sphéro-polyèdres peuvent ainsi se réduire à un ensemble de quatre types de contact :

- *sommet-sommet* correspondant au contact entre deux sphères ;
- *sommet-arête* correspondant au contact entre une sphère et un cylindre ;
- *sommet-face* correspondant au contact entre une sphère et un polygone plan ;
- *arête-arête* correspondant au contact entre deux cylindres.

Les autres types de contacts peuvent être obtenus en combinant ces quatre types élémentaires. Par exemple, le contact entre deux faces peut être remplacé par des contacts arête-arête et sommet-face.

A partir de la liste de contacts, l'algorithme actualise facilement les paramètres liés à chaque type d'interaction : la position du point de contact  $\vec{OC}$ , le vecteur normal au contact  $\vec{n}$  et l'interpénétration  $\delta_n$ . Ces paramètres sont nécessaires à la résolution des forces de contact.

### 5.2 Conception de particules polyédriques et construction de la matrice de masse

Les fragments de combustible à l'intérieur de la pastille sont générés en utilisant la méthode de *tessellation de Voronoï*; cette technique permet d'obtenir une distribution de grains polyédriques de forme aléatoire tout en contrôlant la taille caractéristique globale des formes. Il s'agit d'une première approximation efficace pour représenter l'état de fragmentation du combustible.

Les propriétés massiques des sphéro-polyèdres, qui permettent de définir la matrice de masse dans l'équation de la dynamique sont ensuite calculées à partir de *l'intégration numérique de Monte-Carlo*. Le principe de la méthode repose sur l'approximation de l'intégrale de la fonction  $f$  sur un volume  $V$  :

$$\int_V f dV = V \langle f \rangle \pm \sqrt{\frac{\langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2}{N}} \quad (3)$$

où  $\langle \rangle$  correspond à la moyenne arithmétique d'un échantillon de  $N$  points.

L'algorithme d'intégration se coordonne en plusieurs étapes. Il est d'abord nécessaire de créer un volume  $V_{box}$  (pavé droit) englobant la particule. Un ensemble de points  $\vec{p}$  est ensuite généré de façon aléatoire à l'intérieur de  $V_{box}$ , en suivant une distribution de Sobol, dont le but est de remplir l'espace par un nuage de points uniforme.

Une fonction  $\varphi$  est définie de sorte à déterminer si un point  $\vec{p}$  est compris ou non dans le volume  $V_p$  de la particule :

$$\begin{cases} \varphi(\vec{p}) = 1 & \text{si } \vec{p} \in V_p \\ \varphi(\vec{p}) = 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (4)$$

L'équation (3) est ensuite appliquée aux intégrales qui permettent de définir les propriétés massiques du polyèdre :

- son volume contenu dans  $V_{box}$  :

$$V_p = \int_{V_{box}} \varphi(\vec{p}) dV \simeq V_{box} \langle \varphi(\vec{p}) \rangle$$

- la position du centre d'inertie  $G_j$  :

$$\overrightarrow{OG_j} = \frac{1}{V_p} \int_{V_{box}} \vec{p} \varphi(\vec{p}) dV \simeq \frac{V_{box}}{V_p} \langle \vec{p} \varphi(\vec{p}) \rangle \quad (5)$$

- la matrice d'inertie exprimée sur le point  $G_j$  selon la base canonique  $\mathcal{B}$  dont les composantes sont explicitées ci-dessous :

$$\begin{aligned} I_{G_x} &= \rho_p \int_{V_{box}} (y^2 + z^2) \varphi(\vec{p}) dV = \rho_p V_{box} \langle (y^2 + z^2) \varphi(\vec{p}) \rangle ; \\ I_{G_y} &= \rho_p V_{box} \langle (x^2 + z^2) \varphi(\vec{p}) \rangle ; \quad I_{G_z} = \rho_p V_{box} \langle (x^2 + y^2) \varphi(\vec{p}) \rangle ; \\ I_{xy} &= \rho_p \int_{V_{box}} (xy) \varphi(\vec{p}) dV = \rho_p V_{box} \langle (xy) \varphi(\vec{p}) \rangle ; \\ I_{yz} &= \rho_p V_{box} \langle (yz) \varphi(\vec{p}) \rangle ; \quad I_{xz} = \rho_p V_{box} \langle (xz) \varphi(\vec{p}) \rangle \end{aligned} \quad (6)$$

Avec  $\rho_p$  la masse volumique de la particule (considérée homogène) et  $(x, y, z)^T = (\vec{p} - \overrightarrow{OG_j})$

Il est finalement possible de construire le référentiel  $\mathcal{R}_j$  à partir du centre d'inertie de la particule  $G_j$  et d'une base  $\mathcal{B}_j$ . Il s'agit du référentiel associé à une particule et dans lequel sont exprimées les équations de la dynamique en rotation.

La base  $\mathcal{B}_j$  est construite de sorte que la matrice d'inertie soit diagonale. Il s'agit donc de déterminer les valeurs propres  $v_1, v_2, v_3$  de la matrice et leur vecteurs propres associés. Les composantes de la matrice d'inertie réexprimée sur le point  $G_j$  selon la base  $\mathcal{B}_j$  se notent ainsi  $I_{G_x} = v_1, I_{G_y} = v_2, I_{G_z} = v_3$  et sont nulles ailleurs.

Les vecteurs propres exprimés selon le repère absolu  $\mathcal{R}_0$  fournissent la matrice de passage permettant d'effectuer le changement de base de  $\mathcal{B}$  à  $\mathcal{B}_j$ . Un *quaternion*  $\hat{q}_j$  obtenu à partir de la matrice de passage permet ensuite de décrire l'orientation de la particule au cours du temps.

### 5.3 Actualisation du mouvement des particules

La discrétisation spatiale des équations du PFD avec  $n$  éléments discrets à 6 degrés de liberté mène à la résolution de  $n$  équations différentielles (EDO) en temps :

$$\begin{aligned} \mathbb{M} \ddot{\vec{X}} &= \vec{F}^{ext} - \vec{F}^{int} \\ \Rightarrow \begin{pmatrix} m_1 \\ m_1 \\ m_1 \\ I_{11} \\ I_{12} \\ I_{13} \\ \vdots \\ m_n \\ m_n \\ m_n \\ I_{n1} \\ I_{n2} \\ I_{n3} \end{pmatrix}^T \cdot \begin{pmatrix} \ddot{x}_{11} \\ \ddot{x}_{12} \\ \ddot{x}_{13} \\ \dot{\omega}_{11} \\ \dot{\omega}_{12} \\ \dot{\omega}_{13} \\ \vdots \\ \ddot{x}_{n1} \\ \ddot{x}_{n2} \\ \ddot{x}_{n3} \\ \dot{\omega}_{n1} \\ \dot{\omega}_{n2} \\ \dot{\omega}_{n3} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} f_{11}^{ext} \\ f_{12}^{ext} \\ f_{13}^{ext} \\ \mathcal{M}(f_{11}^{ext}) - ((I_{13} - I_{12}) \omega_{13} \omega_{12}) \\ \mathcal{M}(f_{12}^{ext}) - ((I_{11} - I_{13}) \omega_{11} \omega_{13}) \\ \mathcal{M}(f_{13}^{ext}) - ((I_{12} - I_{11}) \omega_{12} \omega_{11}) \\ \vdots \\ f_{n1}^{ext} \\ f_{n2}^{ext} \\ f_{n3}^{ext} \\ \mathcal{M}(f_{n1}^{ext}) - ((I_{n3} - I_{n2}) \omega_{n3} \omega_{n2}) \\ \mathcal{M}(f_{n2}^{ext}) - ((I_{n1} - I_{n3}) \omega_{n1} \omega_{n3}) \\ \mathcal{M}(f_{n3}^{ext}) - ((I_{n2} - I_{n1}) \omega_{n2} \omega_{n1}) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} f_{11}^{int} \\ f_{12}^{int} \\ f_{13}^{int} \\ \mathcal{M}(f_{11}^{int}) \\ \mathcal{M}(f_{12}^{int}) \\ \mathcal{M}(f_{13}^{int}) \\ \vdots \\ f_{n1}^{int} \\ f_{n2}^{int} \\ f_{n3}^{int} \\ \mathcal{M}(f_{n1}^{int}) \\ \mathcal{M}(f_{n2}^{int}) \\ \mathcal{M}(f_{n3}^{int}) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (7)$$

où  $\mathbb{M}$  est la matrice de masse,  $\vec{\ddot{X}}$  l'accélération du centre de masse,  $\vec{F}^{ext}$  les forces externes dans lesquelles apparaissent les dérivées entraînées et  $\vec{F}^{int}$  les forces internes.

Le système d'équation est exprimé dans le repère absolu pour les termes de translation et dans le repère principal d'inertie de chaque particule pour les termes de rotation.

On utilise un schéma aux différences finies centrées pour intégrer les vitesses et les positions. Un pas de temps correspond à  $\Delta t$ . Chaque instant  $t_i$  est défini comme :  $t_i = i \Delta t$  et  $t_{i+1} = t_i + \Delta t$ .

$$\begin{cases} \dot{\vec{x}}(t_{i+1}) = \dot{\vec{x}}(t_i) + \frac{\Delta t}{2} (\ddot{\vec{x}}(t_i) + \ddot{\vec{x}}(t_{i+1})) \\ \vec{x}(t_{i+1}) = \vec{x}(t_i) + \Delta t (\dot{\vec{x}}(t_i) + \frac{\Delta t}{2} \ddot{\vec{x}}(t_i)) \end{cases} \quad (8)$$

L'actualisation du mouvement s'effectue à partir des positions  $\vec{x}(t_i)$  et  $\hat{q}(t_i)$  et des vitesses  $\dot{\vec{x}}(t_i)$  et  $\vec{\omega}(t_i)$  connues au pas de temps actuel qui permettent de déterminer les vitesses au demi-pas de temps suivant :

$$\begin{aligned} \dot{\vec{x}}(t_{i+\frac{1}{2}}) &= \dot{\vec{x}}(t_i) + \frac{\Delta t}{2} \ddot{\vec{x}}(t_i) \\ \vec{\omega}(t_{i+\frac{1}{2}}) &= \vec{\omega}(t_i) + \frac{\Delta t}{2} \dot{\vec{\omega}}(t_i) \end{aligned} \quad (9)$$

Les positions au pas de temps suivant sont calculées à partir des vitesses obtenues précédemment :

$$\begin{aligned} \vec{x}(t_{i+1}) &= \vec{x}(t_i) + \Delta t \dot{\vec{x}}(t_{i+\frac{1}{2}}) \\ \hat{q}(t_{i+1}) &= \hat{q}(t_i) + \Delta t \dot{\hat{q}}(t_{i+\frac{1}{2}}) \end{aligned} \quad (10)$$

*Remarque* : La dérivée première du quaternion représentant la position angulaire peut être exprimée à l'aide du vecteur vitesse de rotation par :

$$\dot{\hat{q}}(t) = \frac{1}{2} \vec{\omega}(t) \hat{q}(t) \quad (11)$$

où  $\vec{\omega} = (0, \vec{\omega})$  représente un quaternion pur constitué de sa seule partie imaginaire.

Cette configuration est utilisée pour résoudre les forces et moments de contact à l'instant  $t_{i+1}$  :

$$[\vec{R}_j(t_{i+1}) ; \vec{\mathcal{M}}_j(\vec{R}_j)(t_{i+1})]$$

La vitesse de rotation et les moments de force exprimés dans le repère absolu, sont réécrits dans la base locale  $\mathcal{R}_j$  en utilisant le conjugué du quaternion décrivant la position angulaire :

$$\begin{aligned} \vec{\omega}_j /_{\mathcal{R}_j} &= \hat{q}_j^{-1} \vec{\omega}_j \hat{q}_j \\ \vec{\mathcal{M}}_j(\vec{F}) /_{\mathcal{R}_j} &= \hat{q}_j^{-1} \vec{\mathcal{M}}_j(\vec{F}) \hat{q}_j \end{aligned} \quad (12)$$

$$\vec{F} = \vec{R}_j \text{ ou } \vec{F}_j^{ext}$$

Les accélérations au pas de temps suivant sont ensuite déterminées par la résolution de l'équation de la dynamique (7) en inversant les composantes de la matrice de masse<sup>7</sup> :

$$[\vec{\ddot{x}}(t_{i+1}) ; \dot{\vec{\omega}}(t_{i+1})]$$

<sup>7</sup>exprimée sous forme de vecteur car la matrice est diagonale



L'accélération angulaire obtenue dans le repère principal d'inertie est réexprimée dans le référentiel absolu  $\mathcal{R}_0$  :

$$\dot{\vec{\omega}}_j = \hat{q}_j \dot{\vec{\omega}}_{j/\mathcal{R}_j} \hat{q}_j^{-1} \quad (13)$$

Les accélérations permettent finalement de calculer les vitesses au pas de temps suivant en utilisant la première des équations (8).

## 6 Conclusion et perspectives

Des recherches sont menées dans le but d'obtenir un modèle numérique réaliste qui permette de simuler le phénomène de relocalisation du combustible en situation d'APRP. Jusqu'à présent, une grande partie des travaux a été consacrée à des développements numériques visant à étendre la méthode DEM à des géométries polyédriques. Pour ce faire, les difficultés techniques ont été identifiées et une stratégie de modélisation a été proposée. Celle-ci se base sur une représentation sphéro-polyédriques des particules, déjà utilisée dans le code Rockable. Les méthodes mises en place pour appliquer la DEM à ces géométries ont été décrites, elles sont développées sur le code Europlexus.

A partir des développements réalisés, des objectifs de simulation ont été définis. Il sera tout d'abord nécessaire de mettre en place des cas tests simples pour la validation de la méthode DEM polyédrique. A ce titre, des comparaisons avec des cas tests sur le code Rockable auront leur intérêt. Il s'agira ensuite de choisir une configuration réaliste pour étudier l'effet de divers paramètres (distribution de taille et de la forme des fragments, polydispersité, déformation de la zone ballonnée) sur la relocalisation du combustible dans le cas d'un milieu granulaire sec. Pour évaluer et quantifier l'influence de ces paramètres en post-traitement, des grandeurs caractéristiques devront être définies (la compacité et la fraction massique du lit de fragment ou encore la position axiale maximale de la colonne de fragments après relocalisation).

Par la suite, d'autres développements doivent être effectués pour prendre en compte les effets de l'interaction des fragments avec les parois de la gaine et les gaz de fission mais aussi les effets de la sur-fragmentation. Différentes méthodes de couplage impliquant la DEM sont envisagées et pour ce faire la prise en compte de géométries polyédriques offre un bon point de départ.

## References

- [1] <http://richefeu.gitbook.io/cdm/dem/discrete-element-method>
- [2] L. Amarsid. *Rhéologie des écoulements granulaires immergés dans un fluide visqueux*, thèse de doctorat de l'Université de Montpellier 2, 2015.
- [3] M. Bales, A. Chung, J. Corson, L. Kyriazidis. *Interpretation of research on fuel fragmentation, relocation, and dispersal at high burnup*, Washington (DC): The US Nuclear Regulatory Commission, 2021.
- [4] J. Bonnet *Modélisation des mécanismes de fragmentation du combustible UO2 en situation d'accident de perte de réfrigérant primaire*, thèse de doctorat de l'Université de Montpellier 2, 2021.
- [5] P A. Cundall, O DL. Strack. *A discrete numerical model for granular assemblies*, geotechnique, Thomas Telford Ltd, 47-65, 1979.
- [6] K. Govers, M. Verwerft. *Discrete element method study of fuel relocation and dispersal during loss-of-coolant accidents*, Journal of Nuclear Materials, Elsevier, 322-332, 2016.
- [7] Z. Ma, K. Shirvan, Y. Wu, GH. Su. *A three-dimensional axial fuel relocation framework with discrete element method to support burnup extension*, Journal of Nuclear Materials, Elsevier, 152408, 2020.
- [8] A. Martin, *Ecoulement confiné d'un matériau granulaire en interaction avec un gaz, application à la relocalisation du combustible nucléaire*, thèse de doctorat de l'Université de Montpellier 2, 2010.
- [9] J-M. Vanson, S. Malaval, A. Boulouré. *Étude du modèle de relocalisation axiale du schéma ALCYONE-CARACAS par Méthode des Éléments Discrets*, Rapport CEA, 2020.