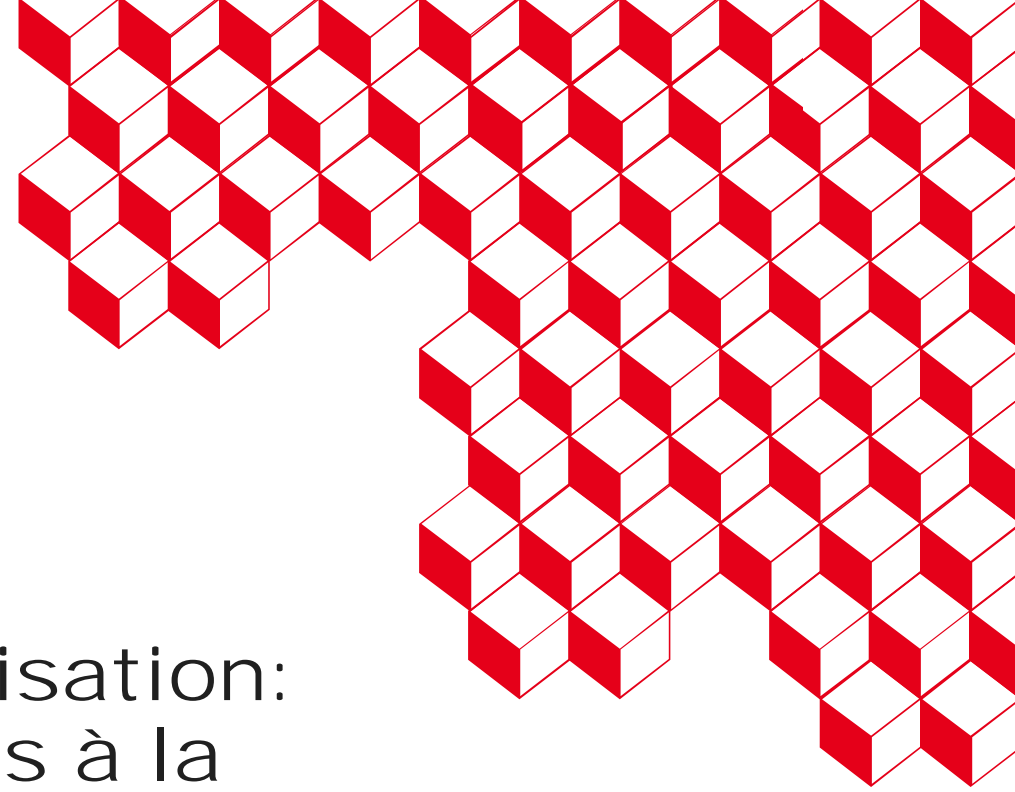




isec



Lien propriétés physiques – Modélisation:
Application des mesures physiques à la
modélisation

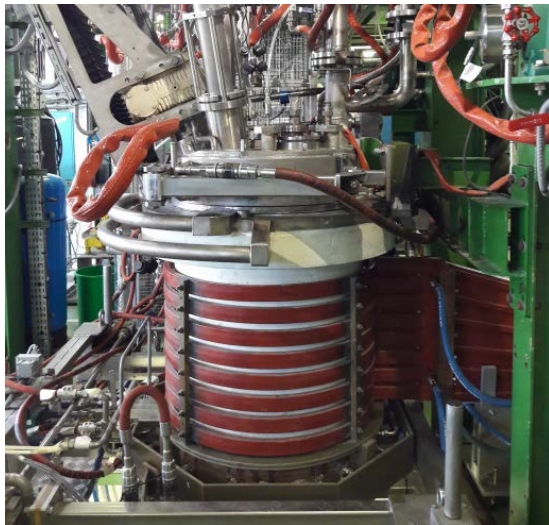
E. Sauvage

DES/ISEC/DPME/SEIP

Laboratoire de Développement des Procédé de Vitrification

Aperçu du procédé de confinement des déchets de haute activité

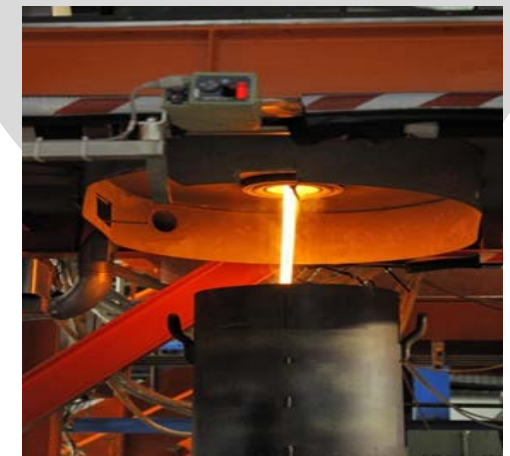
- Objectif : assurer un confinement à long terme des déchets de hautes activités (PF+AM) issus du retraitement des combustibles usés des centrales nucléaires
- La vitrification permet une incorporation à l'échelle atomique des déchets
- La technologie la plus récente de vitrification :
 - **Fusion par induction directe en creuset froid**



Prototype échelle 1:1 au CEA Marcoule



Surface libre du verre dans le four

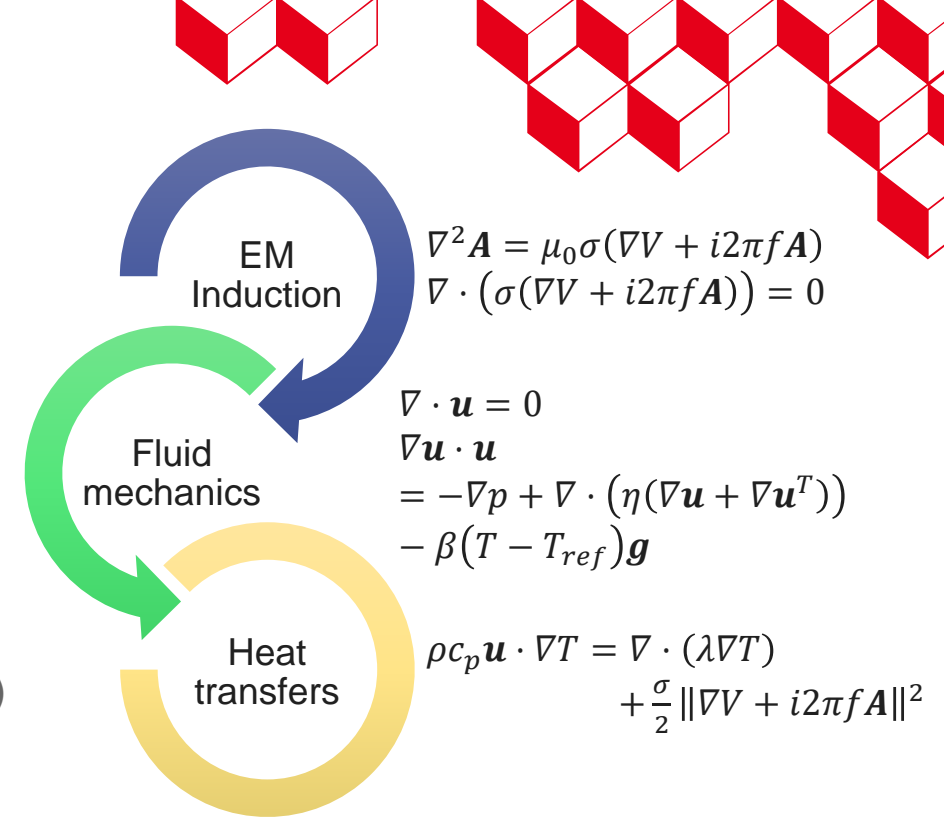
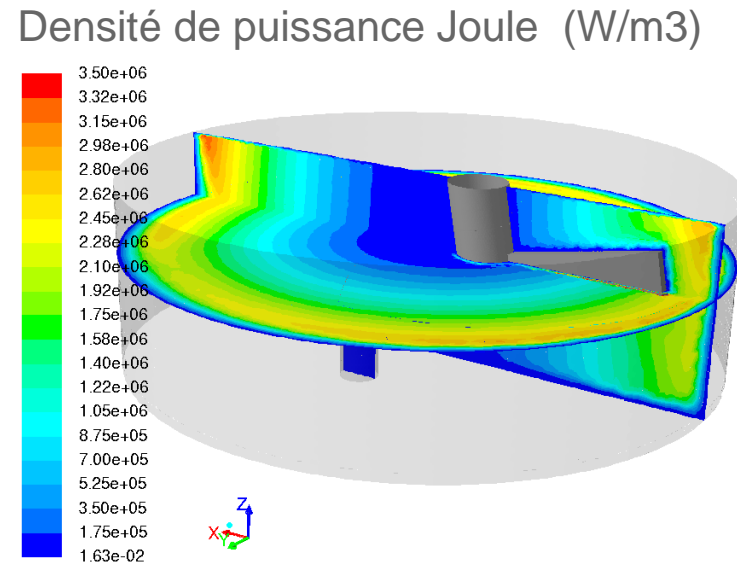
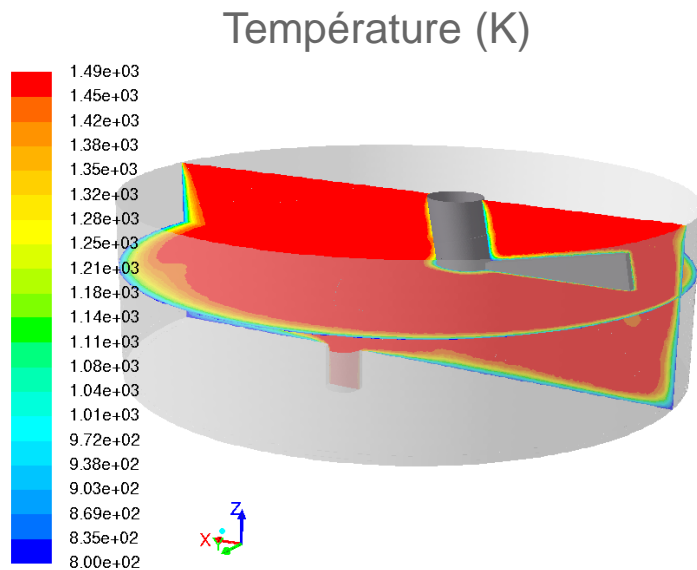


Coulée de verre

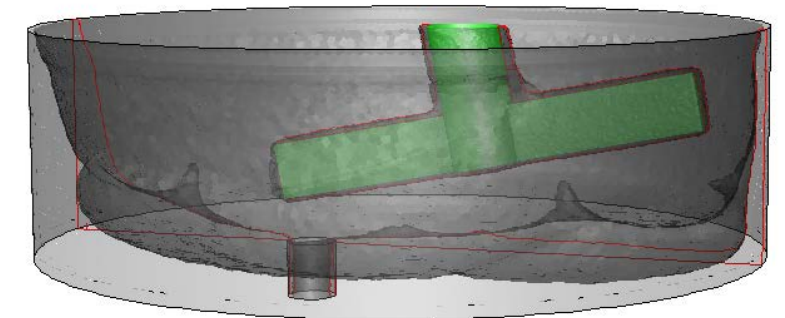
Simulation numérique du creuset froid

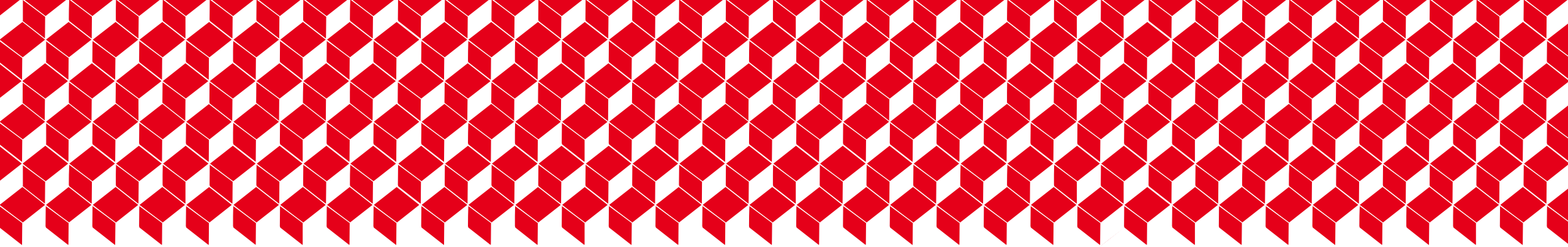
■ Modélisation multiphysique

- Approximation des régimes quasi-magnétostatique
- Ecoulement incompressible laminaire
- Forces de brassage électromagnétique négligeables



Profil numérique de l'autocreuset





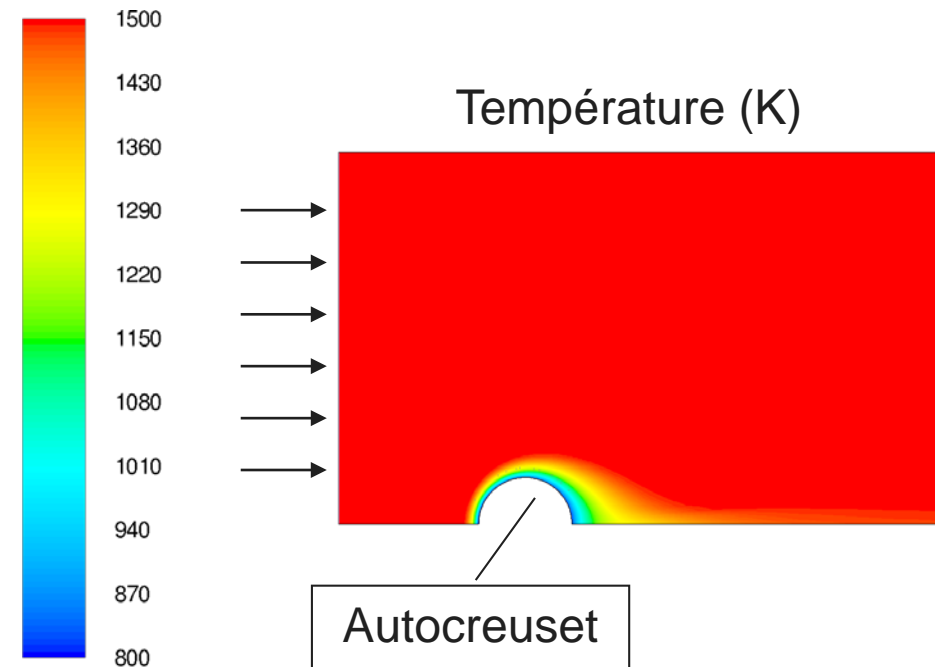
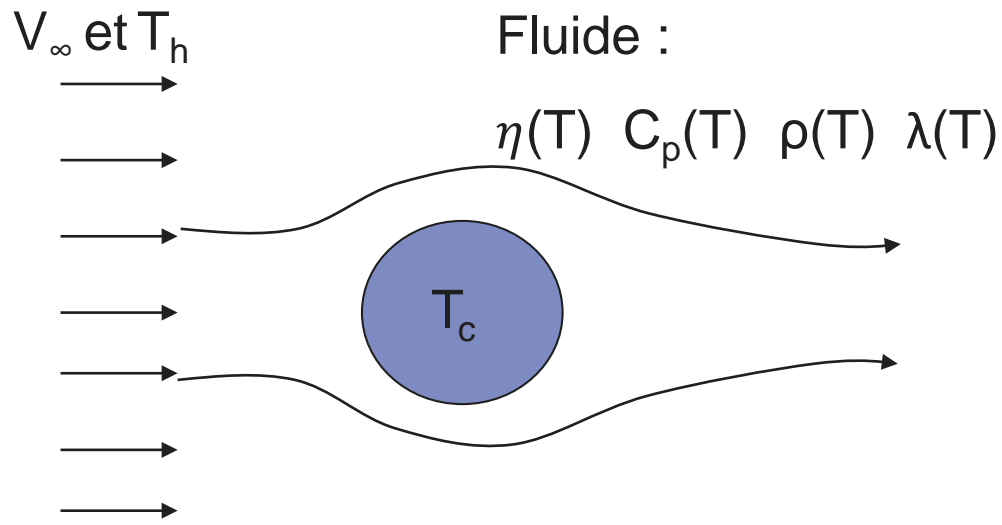
1 ■ Etude de sensibilité aux propriétés physiques

Etude de sensibilité numérique aux propriétés physiques

L'idée est de quantifier l'importance des différentes propriétés physiques dans les simulations pour orienter les efforts de caractérisation

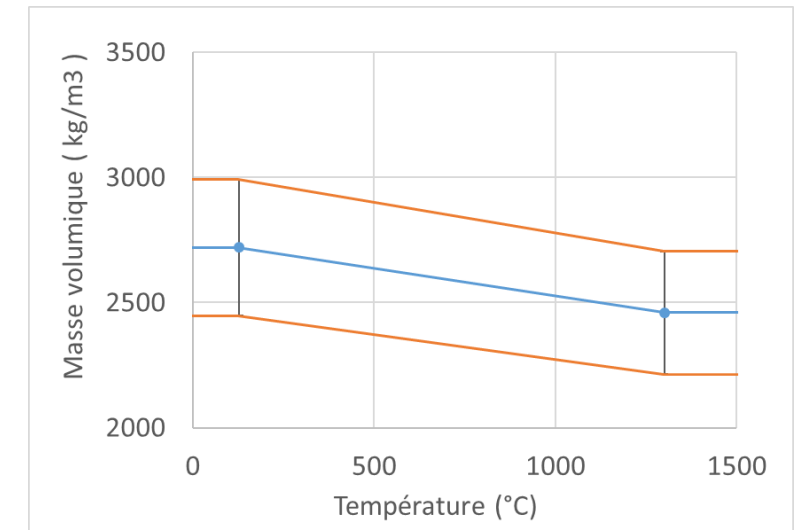
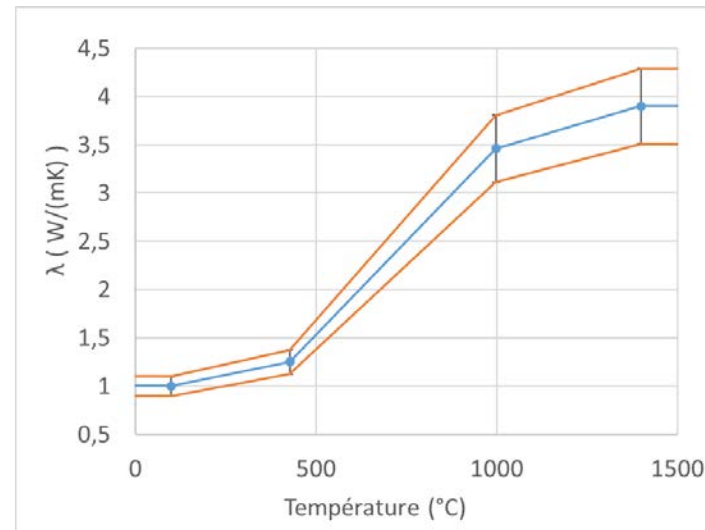
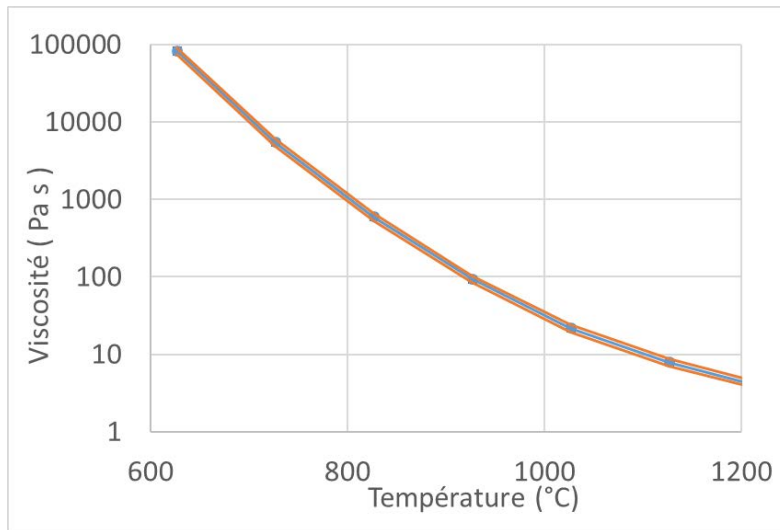
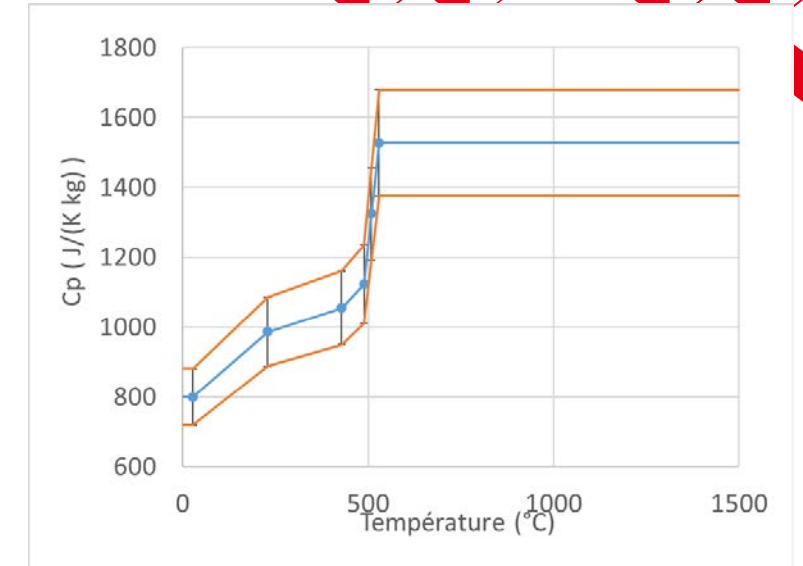
Configuration académique pour l'étude de sensibilité : convection de verre chaud autour d'un cylindre refroidi.

- La variable de sortie est la puissance thermique échangée du verre vers le cylindre refroidi.



Etude de sensibilité numérique aux propriétés physiques

- Modélisation de propriétés physique du verre en fonction de la température
 - Issu de différentes mesures d'un verre « nucléaire » standard
- Variabilité de +/-10% appliquée aux points de mesures des lois
 - Viscosité, masse volumique, Cp, conductivité thermique



Etude de sensibilité numérique aux propriétés physiques

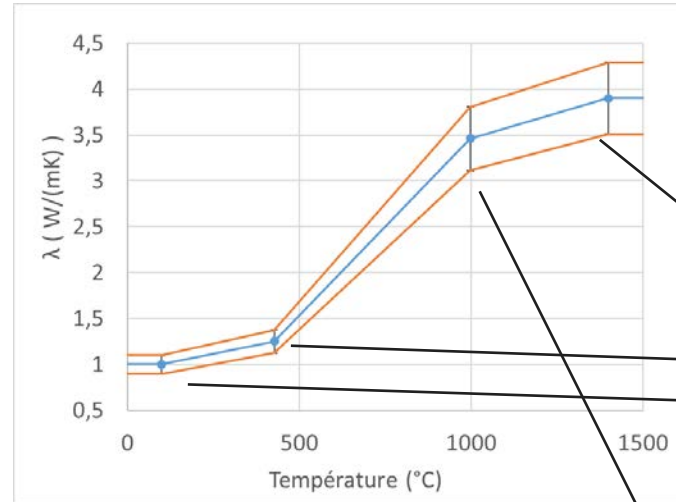
Propagation d'incertitudes

- Utilisation du logiciel Uranie (CEA-DM2S) pour la propagation d'incertitude
- 700 calculs différents réalisés avec une variation aléatoire de tous les points des propriétés physiques

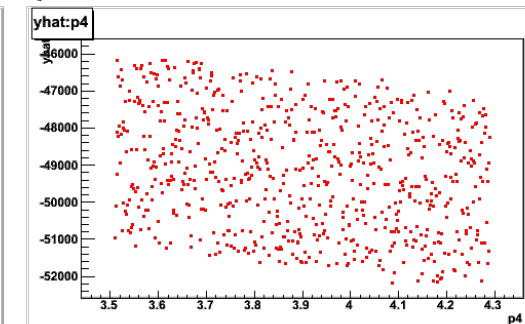
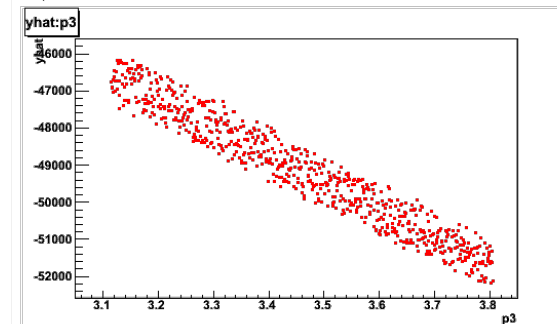
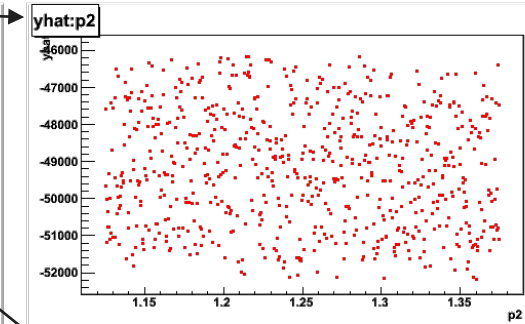
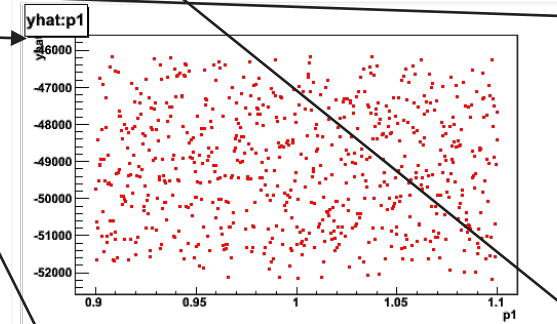
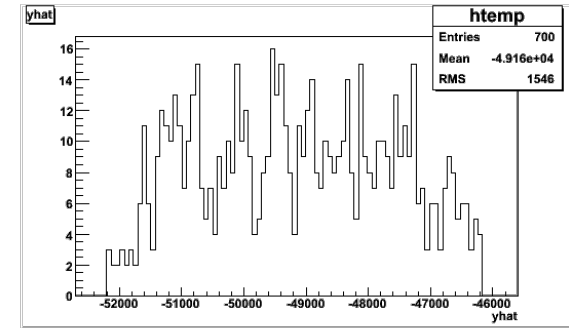
→ +/-10% d'incertitude sur les points des lois de propriétés physique en fonction de la température

→ La zone sensible est [800-1100]°C

Conductivité thermique



Puissance thermique échangée



Etude de sensibilité numérique aux propriétés physiques

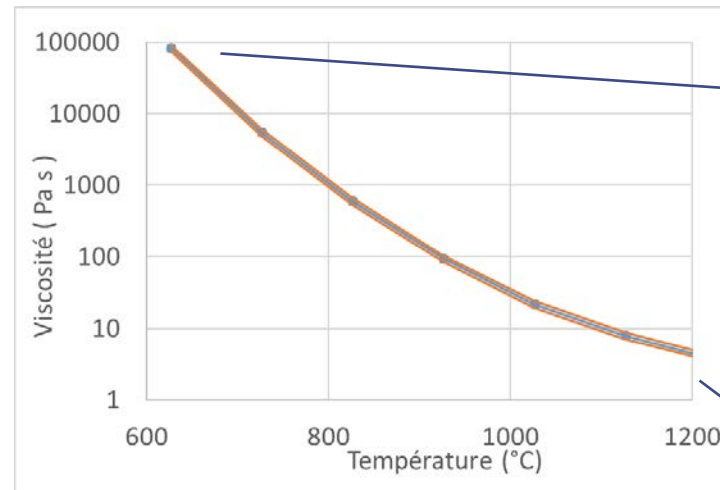
Propagation d'incertitudes

- Utilisation du logiciel Uranie (CEA-DM2S) pour la propagation d'incertitude
- 700 calculs différents réalisés avec une variation aléatoire de tous les points des propriétés physiques

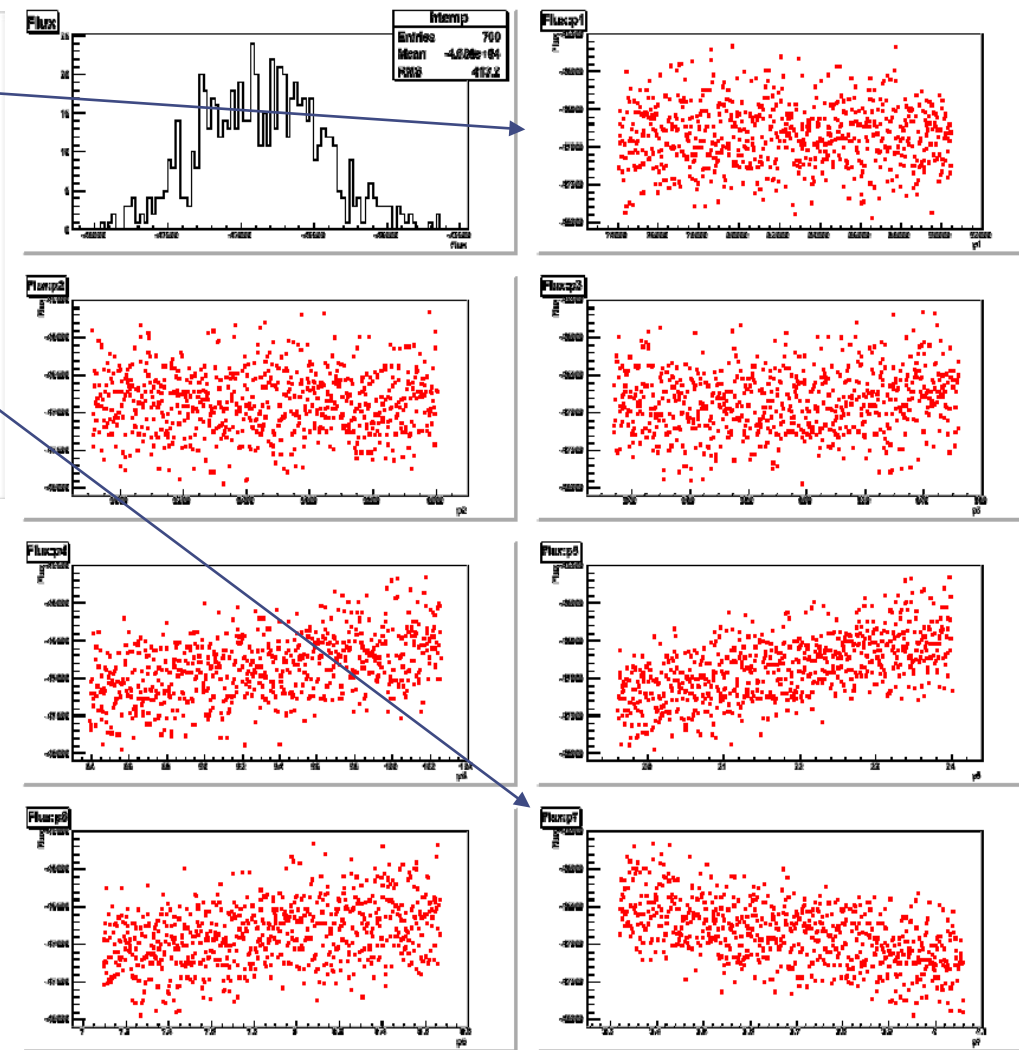
→ La viscosité à basse température ($< 850^{\circ}\text{C}$) n'a pas de forte influence sur le résultat.

→ L'influence est bien visible à partir de 1000°C .

Viscosité



Puissance thermique échangée



Etude de sensibilité numérique aux propriétés physiques

Résultats globaux de la propagation des incertitudes

- Si les propriétés varient de +/-10% la puissance simulée varie de +/-12%

Incertitude en %	Densité	Kth	Cp	Viscosité
Flux thermique	9	12	6	5

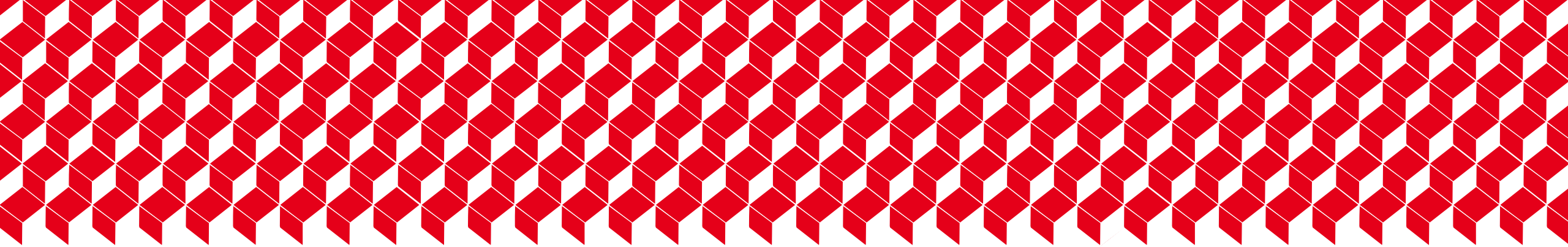
Les propriétés physiques par importance décroissantes sont :

- Conductivité thermique en zone pâteuse [600-1100]°C
- Densité et Cp à chaud
- Viscosité >1000°C

Orientation des efforts de caractérisation des propriétés physiques dans les domaines d'intérêt

Perspectives :

Faire la propagation des incertitudes avec les incertitudes de mesures et de composition



2 ■ Conductivité électrique, percolation particulaire

La conductivité électrique du verre nucléaire UOx

- Matrice de verre homogène (composé d'une trentaine d'éléments)
 - Conductivité électrique ionique thermodépendante (loi d'Arrhenius)

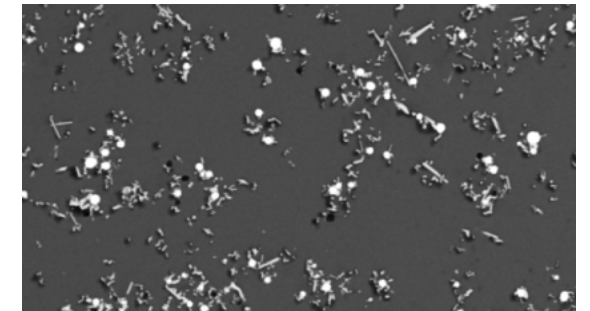
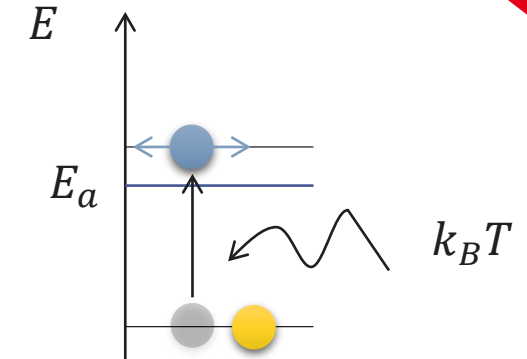
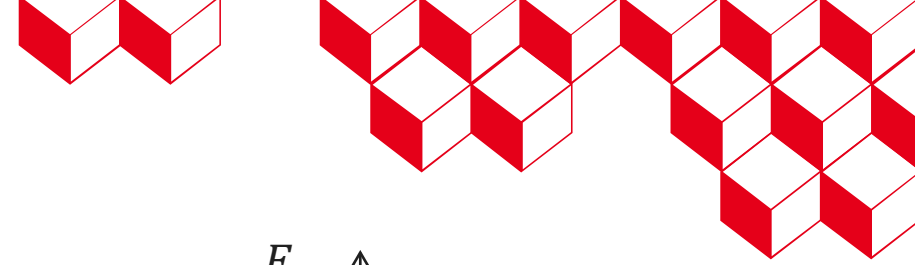
$$\longrightarrow \sigma(T)$$

- Particules de platinoïdes de **conductivité électrique métallique bien supérieure au verre** $\sigma_i \approx 10^6 \text{ S/m}$

- Aiguilles de dioxyde de ruthénium (RuO_2), sphères de palladium-rhodium-tellure ($Pd - Rh - Te$)
- Champ de concentration $C(t, \mathbf{x})$

$$\longrightarrow \sigma(C)$$

- Détermination expérimentale de $\sigma(C)$ difficile (Simonnet et al. 2005)
 - Etat de dispersion difficilement contrôlable (sédimentation)
 - Effet des électrodes
 - ...



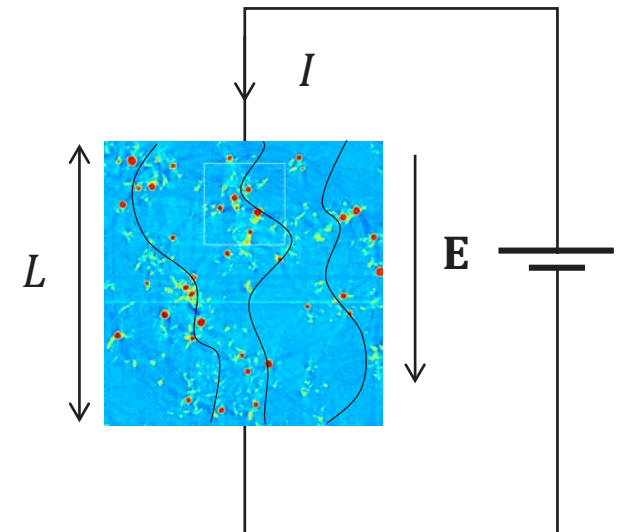
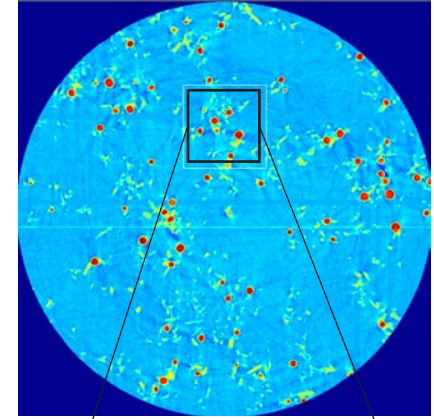
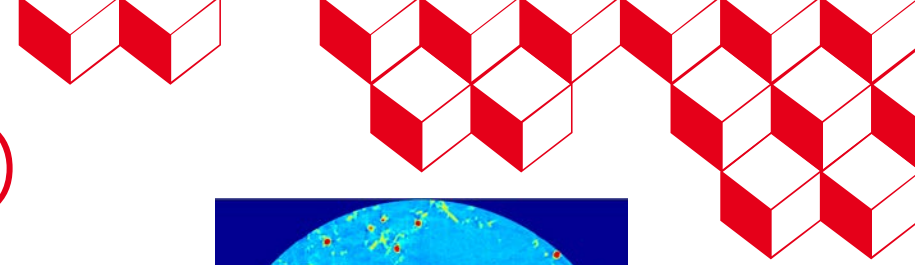
Stratégie adoptée : homogénéisation (« upscaling »)

- Scans de plusieurs échantillons de verre par microtomographie aux rayons X
- Traitement de seuillage particules / verre
- Résolution de la conduction de courants continus dans un grand nombre de sous-domaines cubiques de concentrations C différentes

$$\sigma = \frac{I}{E}$$

- Proposition et ajustement **d'une loi de percolation continue** pour obtenir une conductivité effective dépendante du taux de platinoïdes

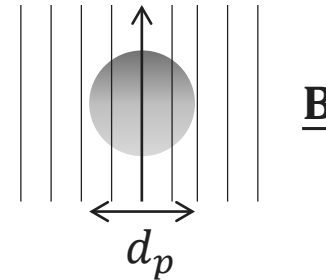
$$\sigma = f(C)$$



Séparation d'échelle : pertinence de l'homogénéisation pour l'induction électromagnétique

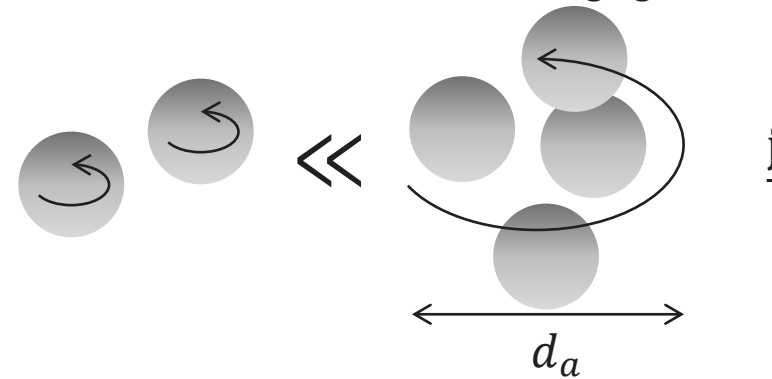
- Deux conditions de séparation d'échelle originales ont été dérivées pour l'utilisation d'une conductivité effective
 - 1) Les particules n'influencent pas le champ magnétique (régime de grande peau électromagnétique dans les particules donc **pas de modulation ni de mutuelle**)

$$\frac{d_p}{\sqrt{\frac{2}{\mu_0 \sigma_i \omega}}} \sim 10^{-2} \ll 1$$



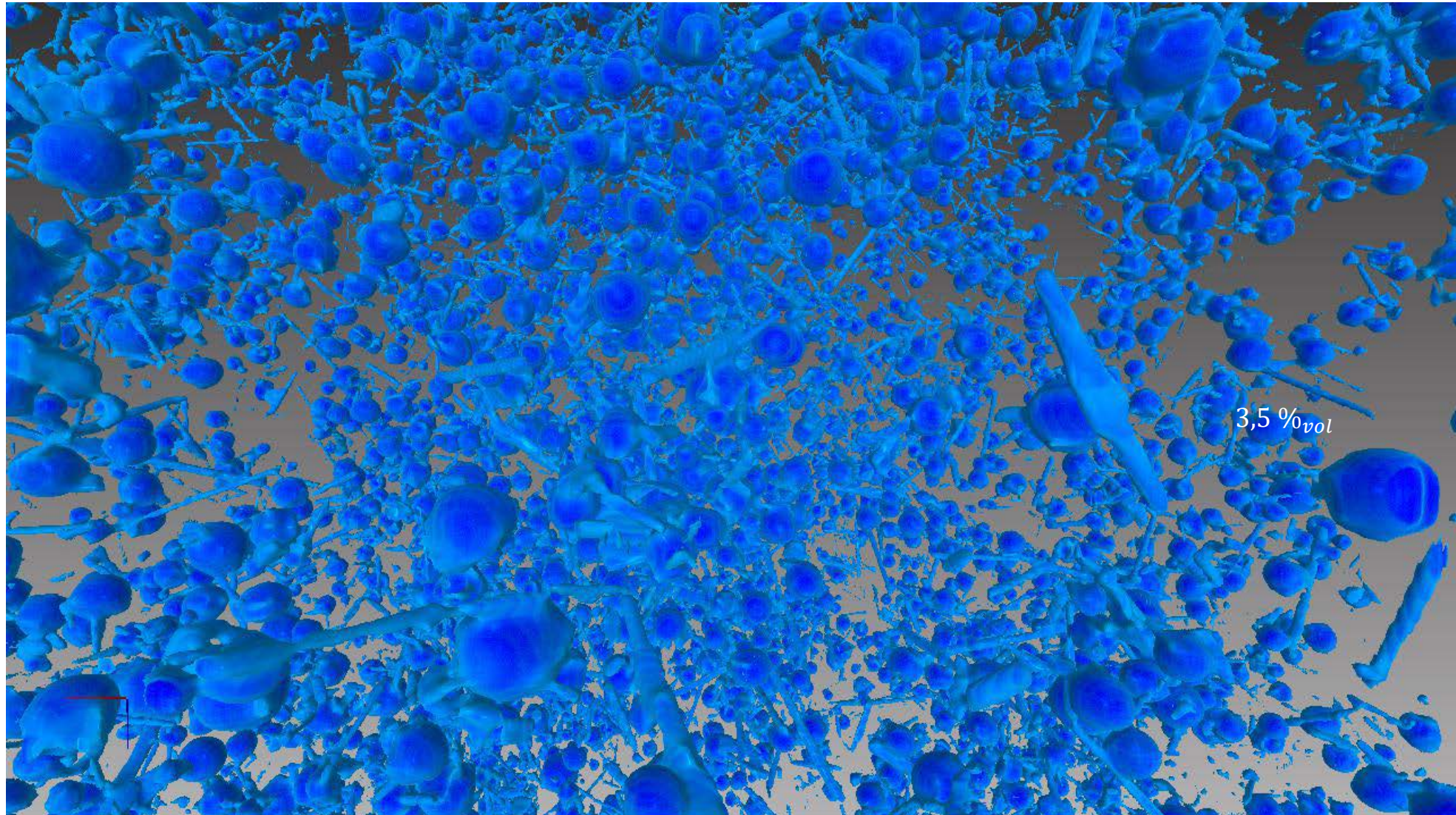
- 2) L'induction de puissance Joule dans les particules individuelles est négligeable devant l'induction à l'échelle du système

$$\left(\frac{d_p}{d_a}\right)^2 \frac{\sigma_i C_p}{\sigma_m} \sim 10^{-2} \ll 1$$



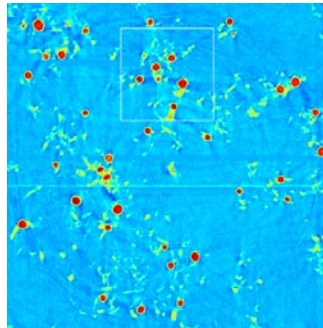
Microtomographies aux rayons X

- Réalisées à l'European Synchrotron Radiation Facility (ESRF, ID19)
- Taille du voxel $0,16^3 \mu\text{m}^3$

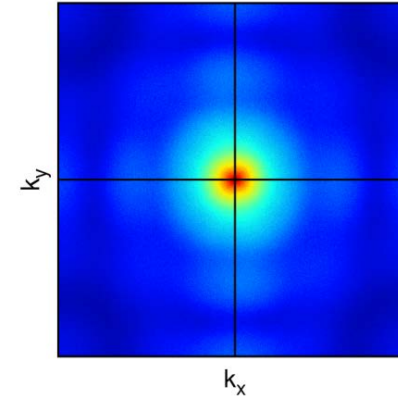


Isotropie et Volume Élémentaire Représentatif (VER)

- Isotropie du verre (pas d'orientation préférentielle des aiguilles) ?
 - Moyenne des densités spectrales de puissance 2D de plusieurs coupes



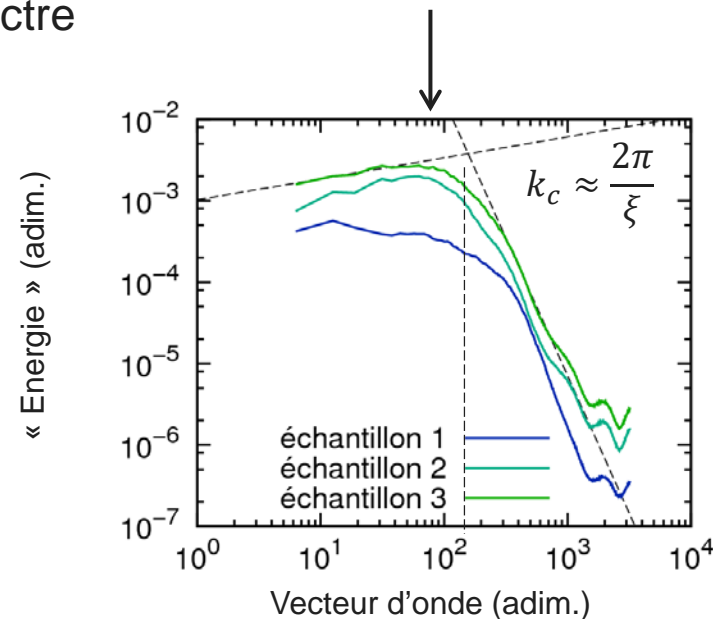
Transformée de Fourier



- Evaluation du VER
 - La longueur d'autocorrélation ξ est obtenue à partir du spectre

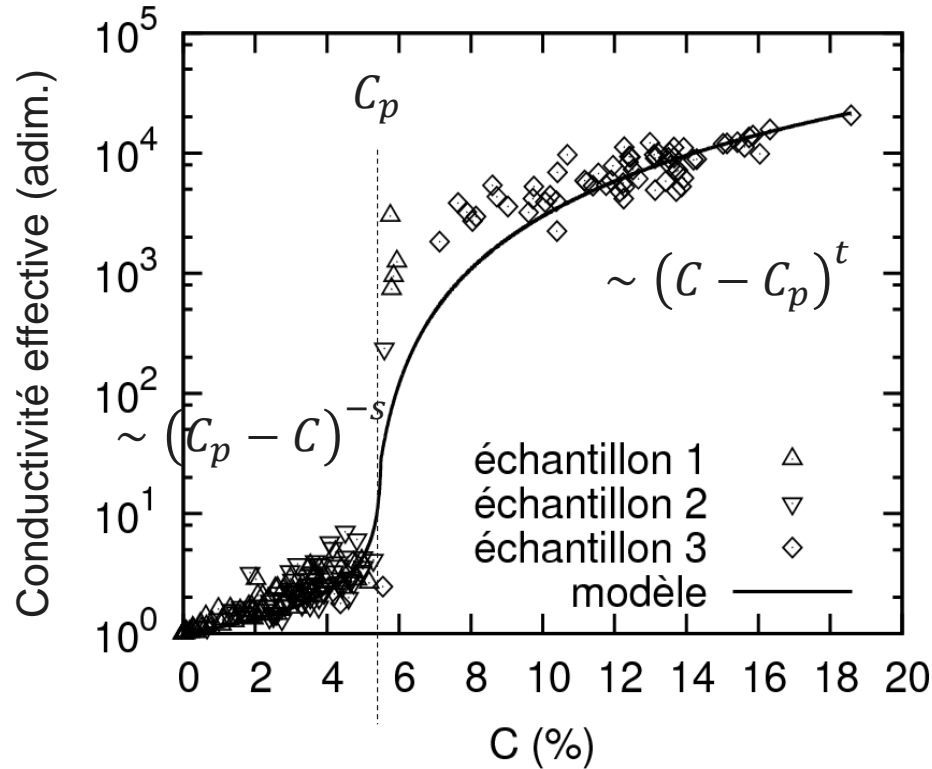
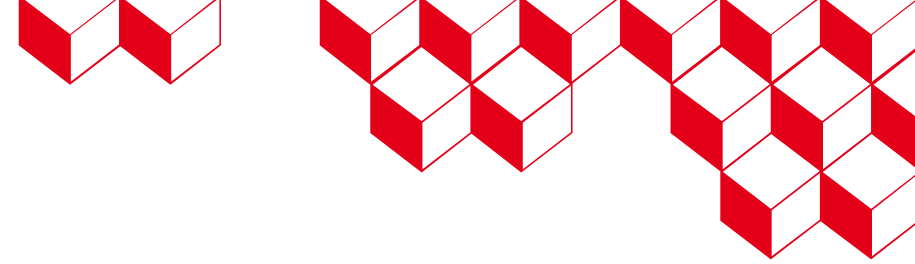
$$VER^{\frac{1}{3}} = 10\xi \approx 61 \mu\text{m} \approx 10d_p$$

- Conclusions
 - Boîtes de calcul de taille $L = 64 \mu\text{m}$
 - Orientation indifférente



Echantillon	\bar{C} (% _{vol})	Fréquence des densités (% _{vol})	Imagerie 2D	Résultats 3D (tubes de courants)
1	2,5 %			
2	3,5 %			
3	11,2 %			

Résultats des simulations de conduction de courant



$$\sigma = f(C, C_p, s, t)$$

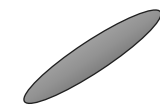
Plus de 200 VERs
100 h de calcul

- Seuil de percolation de $C_p = 5,5 \%_{vol}$, comparable au cas d'ellipsoïdes prolates (Garboczi et al. 1995)

- Exposants critiques

Exposant	Cette étude	Clerc et al. 1990
s	0,63	0,73
t	2,0	1,9

$$C_p \approx \frac{0.6}{\Psi}$$



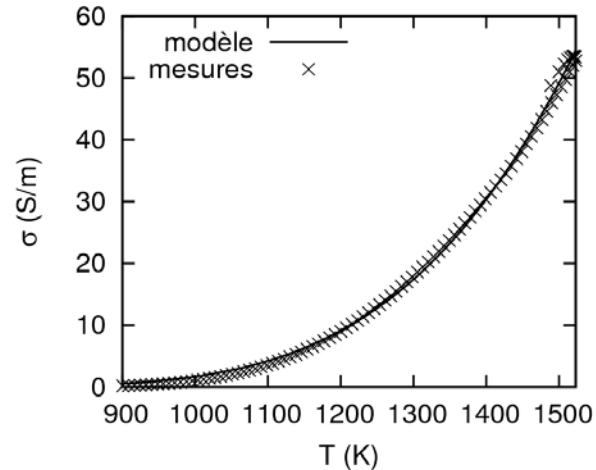
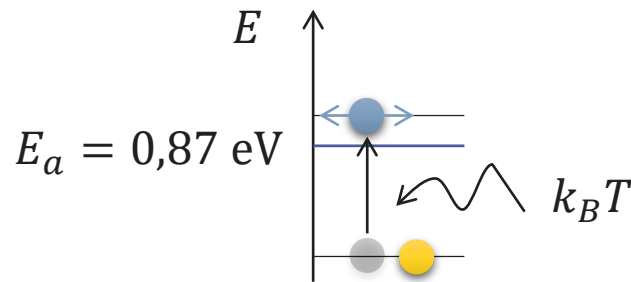
rapport d'aspect $\Psi \approx 10$

Composition des dépendances

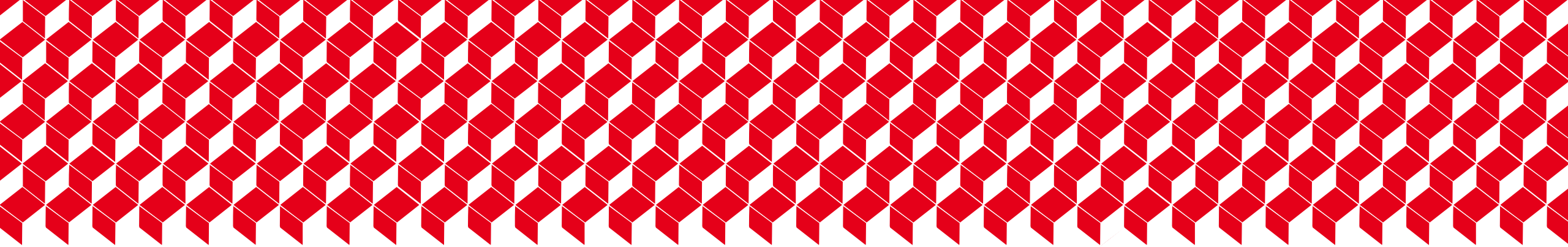
Loi d'Arrhenius $\sigma(T)$ Loi de percolation $\sigma(C)$

$$\sigma(T, C < C_p) = A_\sigma \exp\left(-\frac{E_a}{k_B T}\right) \left(\frac{C_p - C + C \left(\frac{\sigma_i}{A_\sigma} \exp\left(\frac{E_a}{k_B T}\right)\right)^{-\frac{1}{t+s}}}{C_p}\right)^{-s}$$

- Mesures de conductivité électriques σ en fonction de la température ($C = 0,7 \%_{vol}$)
 - Ajustement du facteur pré-exponentiel A_σ et de l'énergie d'activation E_a
 - Identification des porteurs de charge : alcalins ●



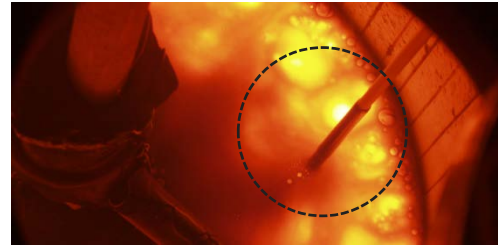
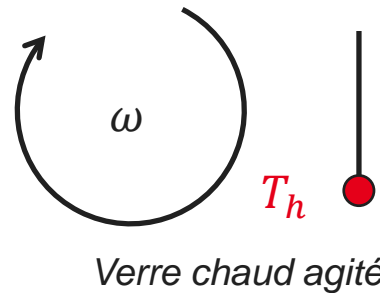
- Loi complète utilisée aujourd'hui – méthode de détermination transposable à d'autres verres



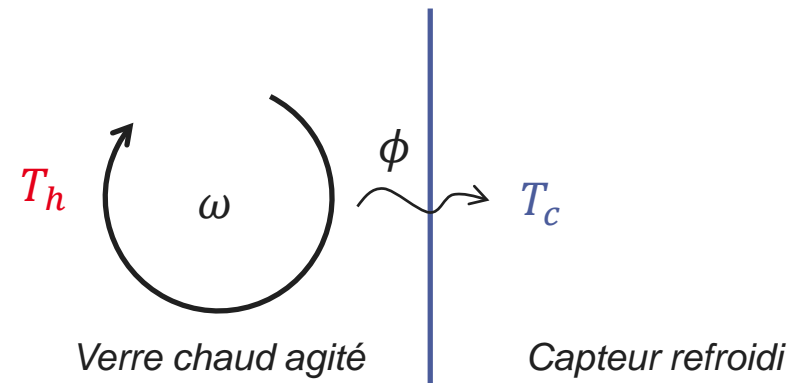
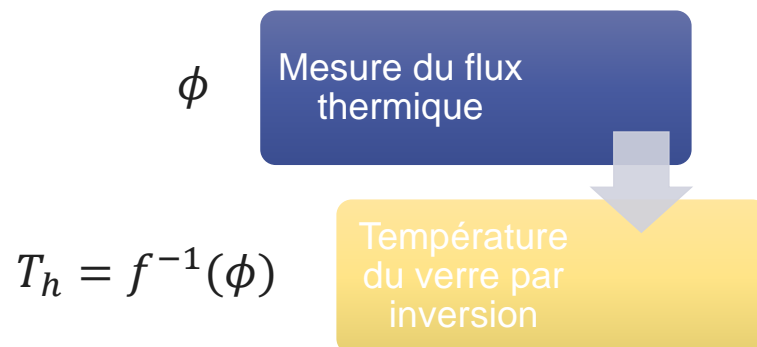
3 ■ Mesure de température du verre par méthode indirecte

Stratégies de contrôle de la température

- Une mesure précise de la température est généralement souhaitée pour assurer la qualité du matériau produit
- Deux types de méthodes existent :
 - **Directe** : le capteur de température doit tolérer le flux de verre chaud et corrosif



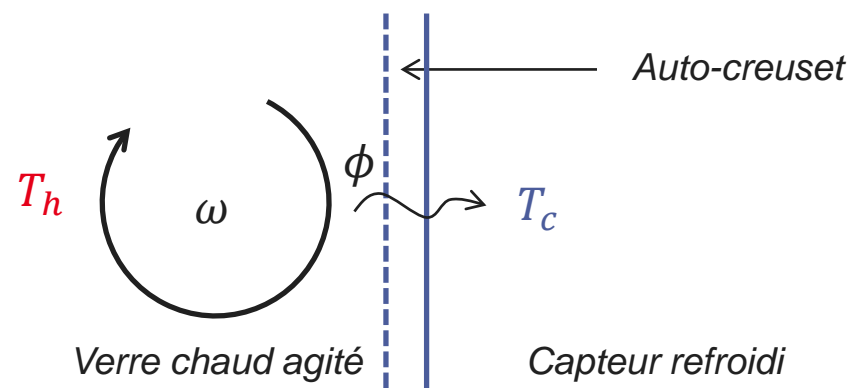
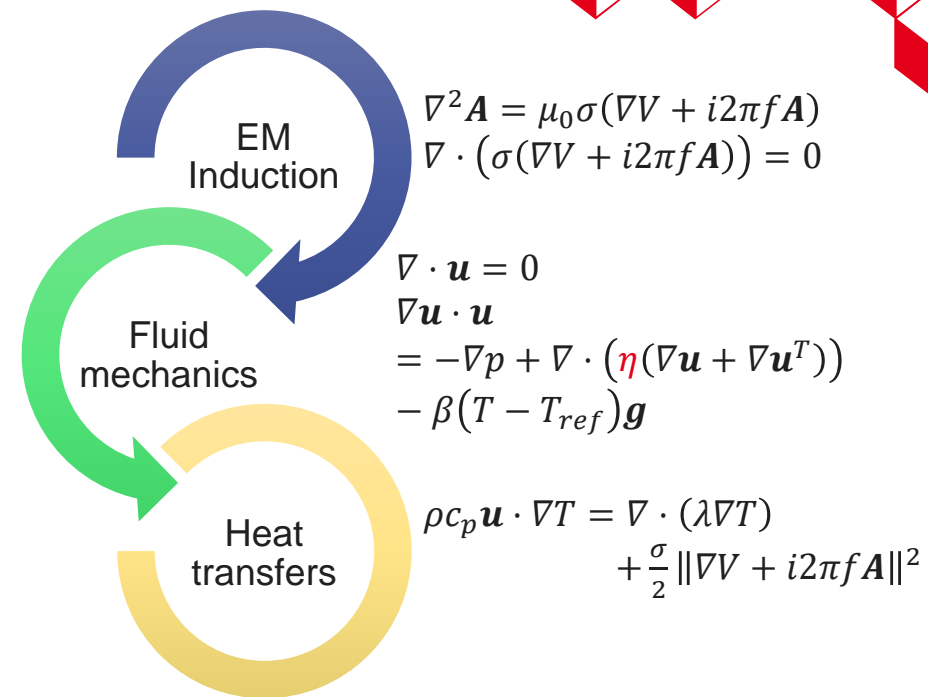
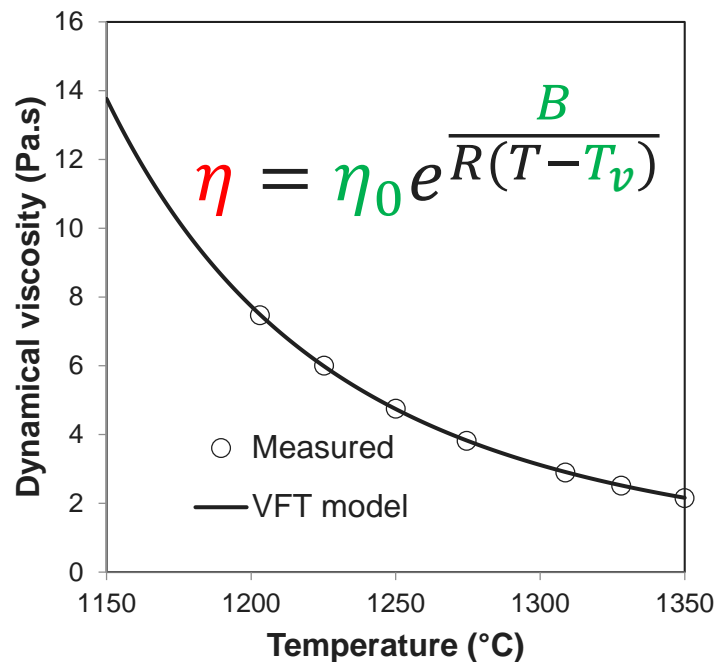
- **Indirecte** : nécessite une formule / corrélation $\phi = f(T_h)$



Modélisation multiphysique + VFT

- Viscosité du verre dépendante de la température η
 - Un auto-creuset recouvre le capteur de flux thermique
 - Fort impact sur la corrélation

Vogel-Fulcher-Tammann (VFT) equation



Méthode inverse de mesure de température

- Analyse de couche limite du problème thermo-hydraulique sous les hypothèses :

- Régime permanent
- Convection forcée
- Loi de viscosité de type VFT : $\eta = \eta_0 e^{\frac{B}{R(T-T_v)}}$

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \\ \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} = -\nabla p + \nabla \cdot (\eta(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)) \\ \rho c_p \mathbf{u} \cdot \nabla T = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) \end{array} \right. \longrightarrow \phi(T_h, \omega) = \left(\frac{T_h - T_v}{\alpha} \right)^{1+\gamma} \omega^{1/2}$$

Avec l'exposant $\gamma = \frac{B}{3R(\langle T_h \rangle - T_v)} \approx 2$

- Formule de corrélation non classique
 - Dépend fortement des paramètres de la loi VFT (mesurée avec un rhéomètre)
 - Ne dépend pas de la température de refroidissement (à cause de l'auto-creuset)
 - Forte variation du flux thermique avec la température chaude (effet de fluidification)

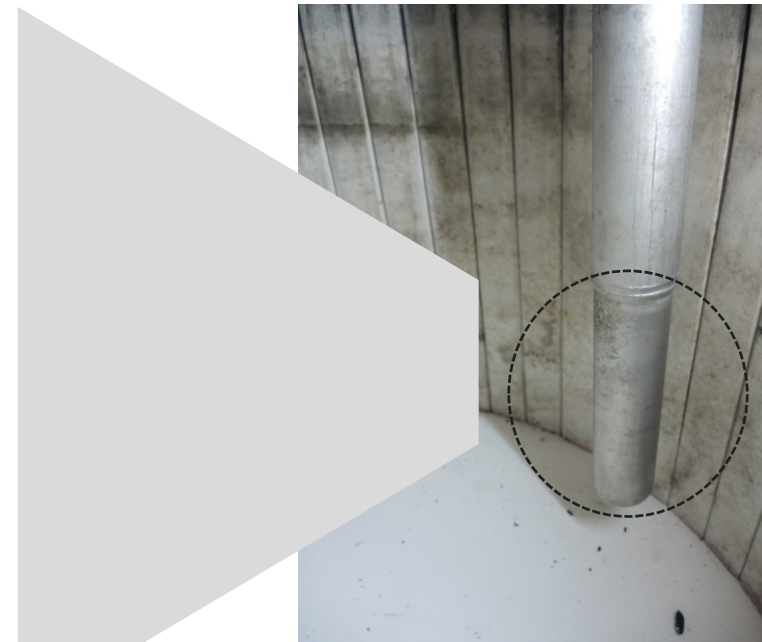
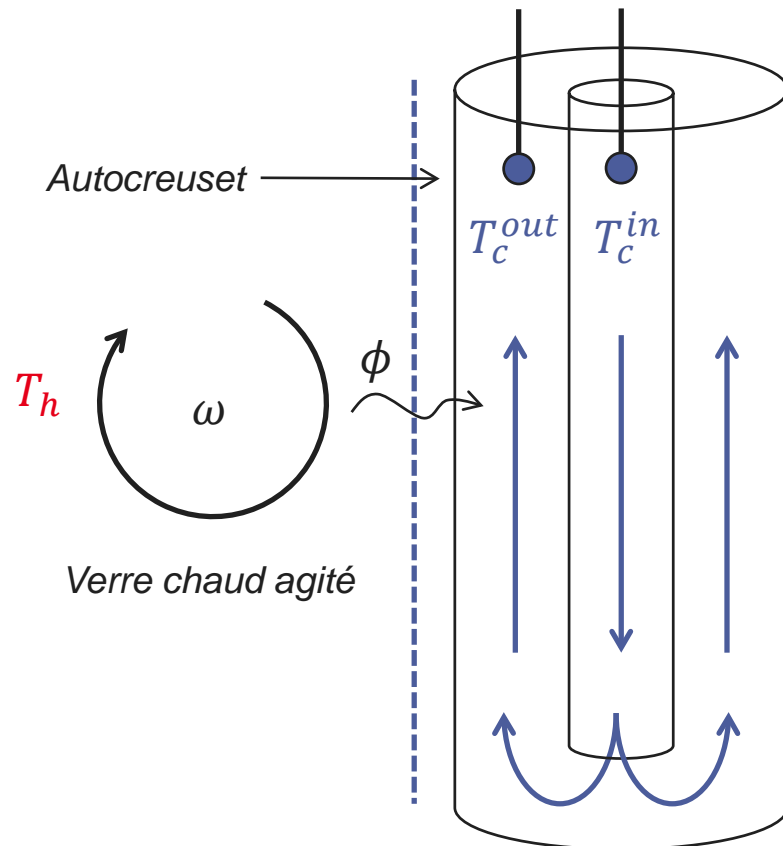
- L'inversion de la corrélation, donne un estimateur de la température

$$T_h = T_v + \alpha \left(\phi \omega^{-1/2} \right)^{1/1+\gamma}$$

- Etape suivante : déterminer la constante α dépendant de la géométrie du capteur et de l'écoulement

Conception du fluxmètre

- Canne inox refroidie à l'eau immergée dans le bain de verre
- Le flux thermique ϕ est calculé à partir de l'élévation de la température d'eau $\phi \propto T_c^{out} - T_c^{in}$

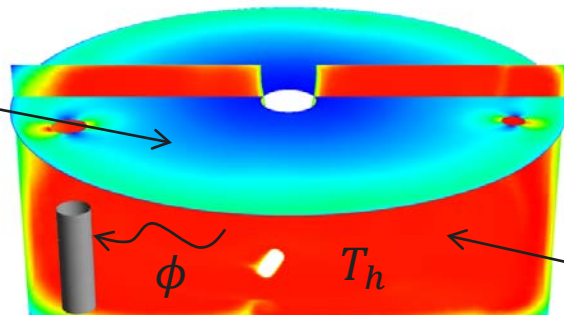


Captur de flux thermique dans le creuset froid

Simulation du fluxmètre

- Toutes les physiques sont résolues en volume finis dans ANSYS® Fluent
- Calculs
 - Différentes température chaude sont atteintes en augmentant le champs magnétique extérieur (source)
 - Brassage mécanique constant à $\omega \approx 50 \text{ tr/min}$ résolu par la technique Multiple Reference Frame
- Bonne corrélation entre la loi et les simulations avec une constante $\alpha \approx 55.9 \text{ (SI)}$

Champs de puissance
Joule



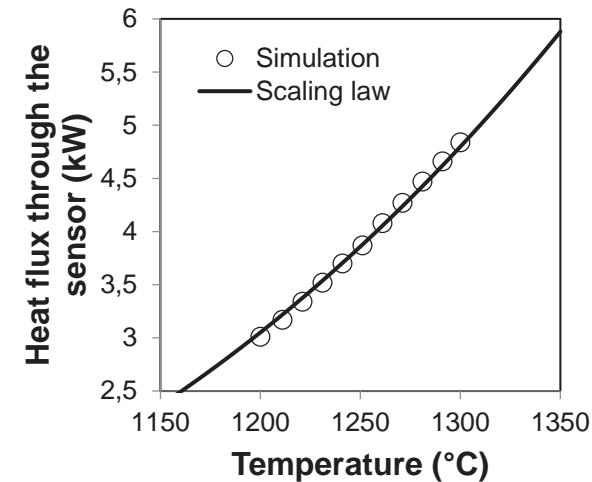
Champs de température

Vérification de la formule de corrélation température / flux thermique

Trouver une valeur de la constante α

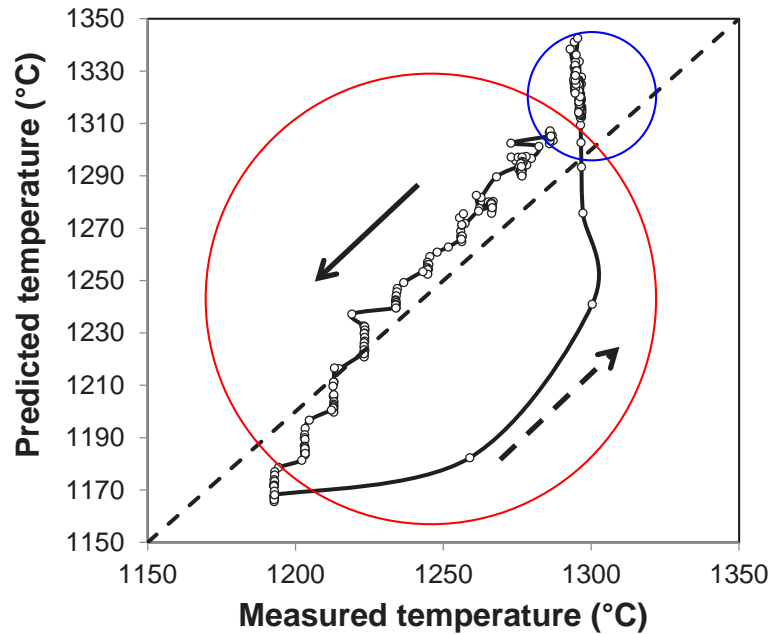
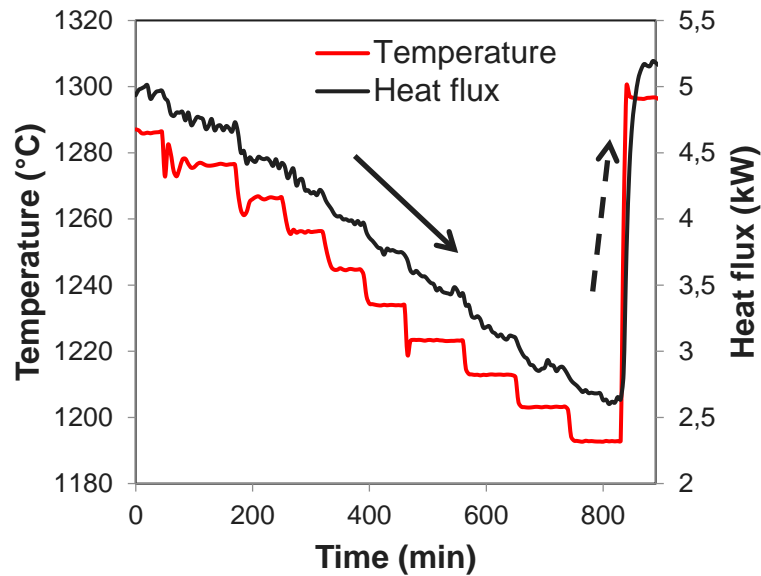
Estimation du flux thermique pour le bon dimensionnement du capteur

$$\phi(T_h, \omega) = \left(\frac{T_h - T_v}{\alpha} \right)^{1+\gamma} \omega^{1/2}$$

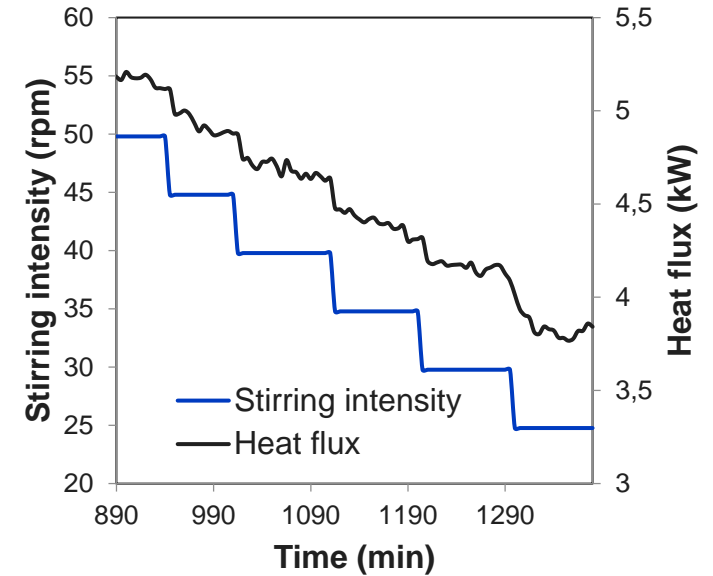


Validation expérimentale

- Utilisation d'un verre borosilicate simulé pour la vitrification des produits de fission
- Deux étapes
 - Vitesse de brassage constante, variation de la température
 - Température constante, vitesse de brassage variable



$$T_v + \alpha(\phi\omega^{-1/2})^{1/1+\gamma} \text{ versus } T_h$$

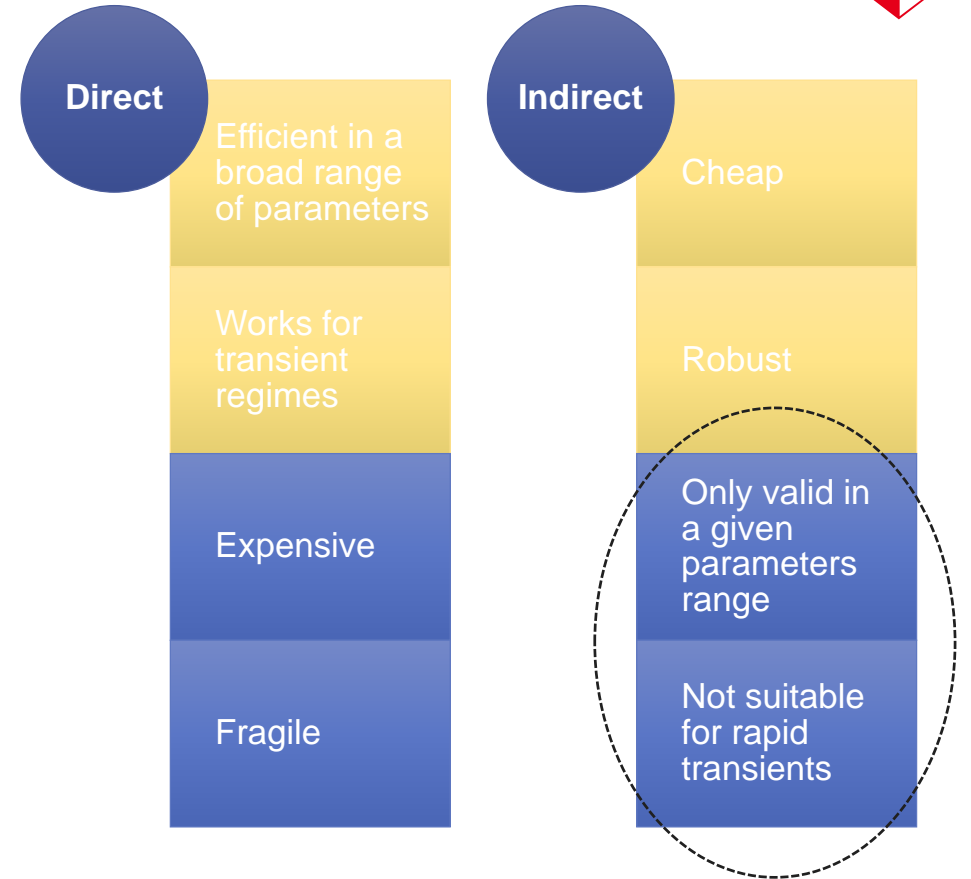


Conclusion

- La mesure de température indirecte en creuset froid dépend de :
 - La précision de mesure des flux thermique
 - Trouver des corrélations pertinentes pour les lois de transfert de la chaleur
- La simulation numérique multiphysique est une aide pour concevoir :
 - Le capteur de flux thermique
 - L'estimateur de la température
- Pour le moment les deux méthodes sont complémentaires



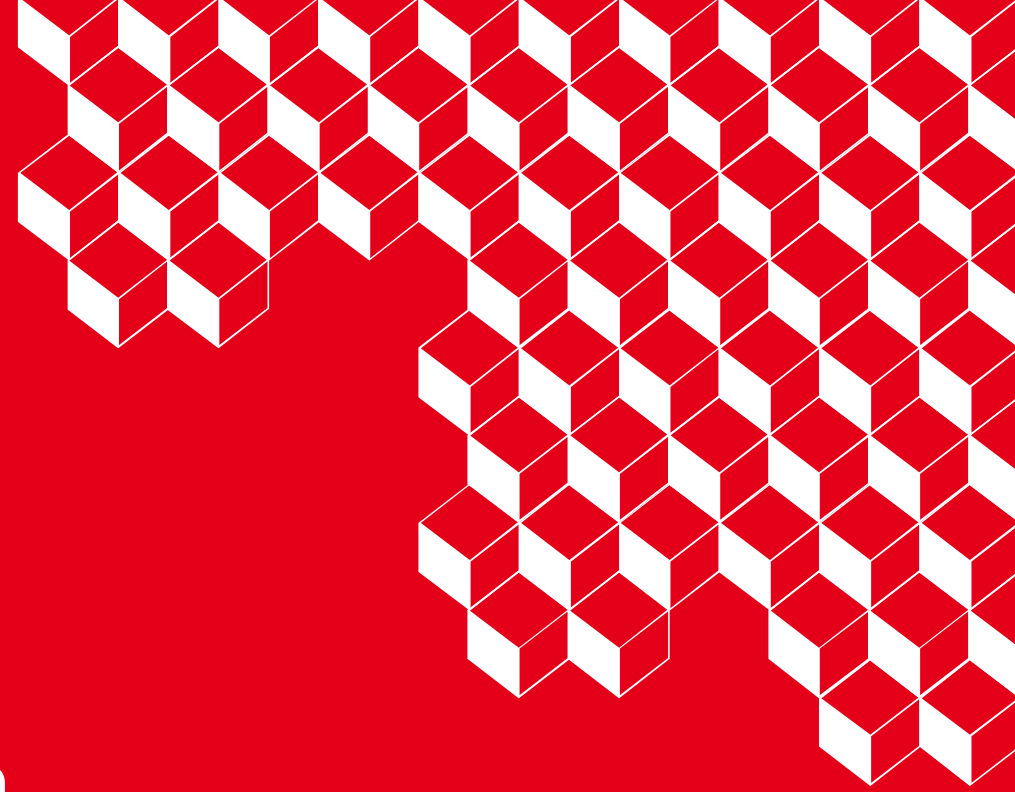
Autocreuset autour du capteur de flux



Improving the temperature estimator



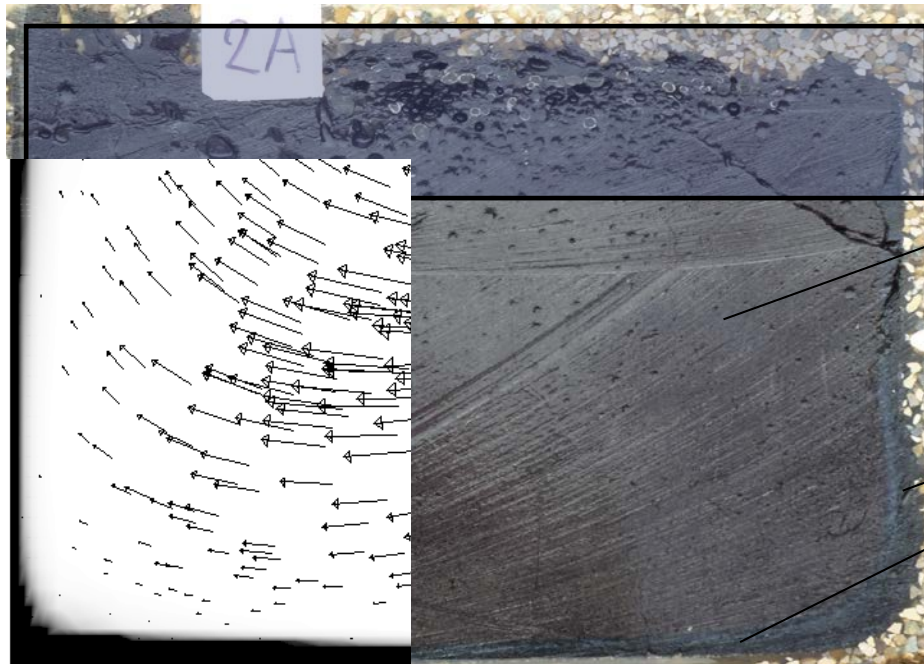
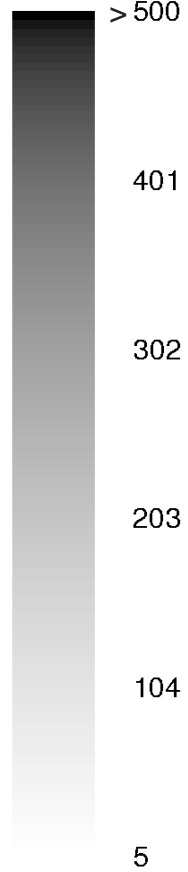
Merci de votre attention



Validation exemple

Slice of inactive glass in a cold crucible during elaboration. The cold crucible has been removed after fast cooldow

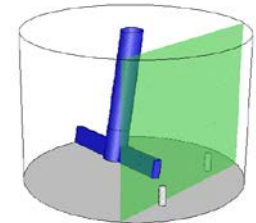
Pa s



Cold cap layer

Elaborate glass

“Skull melter”
(solidified glass layer)



Skull melter thickness varies spatially in the crucible depending on the local convection condition