

**Intitulé du Sujet de Thèse :** Etude numérique de la physico-chimie de l'interaction corium-béton.

**Laboratoire :** MADIREL, Aix-Marseille Université-CNRS, Centre Scientifique de Saint Jérôme,  
52, Av. Escadrille Normandie-Niemen 13013, Marseille, France.

**Equipe :** Axe 1

**Directeur de thèse HDR (100%) :** Mickaël ANTONI

Codirecteur HDR (50%) : /

Co-encadrant HDR ou non HDR (0%) : Rémi CHAUVIN

email : m.antoni@univ-amu.fr, remi.chauvin@cea.fr

### Contexte

Ce projet de thèse a pour objectif d'apporter de nouvelles connaissances dans la compréhension des mécanismes physico-chimiques survenant lors de l'interaction entre des métaux et des oxydes en fusion et des bétons. Il s'inscrit dans le domaine des accidents graves de réacteurs nucléaires, comme ceux survenus à Fukushima Daiichi en 2011. Les bétons sont des matériaux chimiquement stables avec d'excellentes propriétés mécaniques dans des conditions de pression et de température standard mais présentent un comportement fortement dégradé lorsqu'ils sont soumis à des températures élevées [1].

Lors d'un accident nucléaire grave, un magma complexe et agressif, appelé corium, mélange de combustible nucléaire fondu et de matériaux structurels du réacteur défaillant est produit à très haute température ( $T > 2500^{\circ}\text{C}$ ). Ce mélange peut endommager la dernière barrière de confinement constituée par le béton du radier du réacteur avant dissémination dans l'environnement, ce qu'il faut impérativement éviter.

Des expériences préliminaires menées avec des échantillons de béton munis d'une charge d'acier inoxydable en fusion, un des constituants des réacteurs, ont montré que la cinétique de dégradation, résultant notamment de l'activation de mécanismes de dégazage, peut créer un important réseau de fractures. Ce réseau produit des chemins privilégiés pour la progression du corium et donc modifier sensiblement les temps mis en jeu pour sa dégradation.

Ce projet de thèse vise à simuler numériquement des accidents graves et notamment du corium. Le MADIREL et le CEA disposent pour cela du code CIMAC [2], qui résout les équations de Navier-Stokes en triphasique avec une méthode de reconstruction d'interface VOF-PLIC. A ce stade, la réactivité chimique des bétons étudiés n'est pas encore prise en compte. Il n'est donc pas possible de modéliser l'impact de l'oxydation de la phase métallique par l'oxygène dégagé lors de la séquence accidentelle ce qui constitue une importante limitation. Le CEA dispose également d'outils de simulation de réactions chimiques, basées sur des équilibres et méthodes de minimisation de l'énergie de Gibbs, mais qui ne prennent pas en compte les écoulements survenant dans le corium.

L'objectif principal de ce projet de thèse est d'étudier la dégradation de bétons soumis à de très fortes contraintes thermiques (températures pouvant aller jusqu'à  $2500^{\circ}\text{C}$ ) avec CIMAC et d'améliorer la modélisation du bain de corium. Il s'agira notamment de simuler les phénomènes physico-chimiques en jeu et notamment les phénomènes d'oxydation, les cinétiques de dégradation et les phénomènes capillaires dans le bain de corium. Le problème de la fracturation, de la réactivité des matériaux, des modifications de porosité et des flux entrant de chaleur sera également abordé par l'implémentation de nouveaux modèles. Les résultats numériques obtenus seront comparés à des expériences pour leur validation.

Cette étude devrait permettre, à terme, d'obtenir des informations originales sur les mécanismes impliqués au premier ordre dans la phase initiale de dégradation des bétons lors d'accidents nucléaires graves. Elle entre dans le cadre plus large du projet ANR IMMOC dans lequel sont impliqués les laboratoires NAVIER (Marne la Vallée), PROMES (Font-Romeu) et CEREGE (Arbois).

### Descriptif du projet

Le déroulement de la thèse comportera trois phases :

- 1 – La première phase consistera à prendre en main le code CIMAC et à implémenter des modèles numériques de matériaux en conditions extrêmes ( $T > 2500^{\circ}\text{C}$ ). Une attention particulière sera notamment apportée aux modèles décrivant la chimie des bétons (réactivité, dégazage, dissolution, etc).
- 2 – Dans la deuxième phase, des simulations numériques seront réalisées en prenant en compte l'injection de gaz dans ce bain à différents débits. Cette phase permettra de décrire la cinétique de dégradation des bétons ainsi que la physico-chimie des phénomènes d'oxydation dans le bain de corium. Pour ce faire, les outils de chimie du CEA pourront être utilisés (il s'agira notamment d'utiliser des bases de données du CEA pour les propriétés des bétons à différentes températures). Une attention particulière sera également portée à la physico-chimie de l'interface métal/oxyde.
- 3 – Dans la dernière phase, l'étendue et les processus de dégradation des bétons seront simulés en couplant le code CIMAC avec des outils numériques du CEA (TOLBIAC-ICB ou CAST3M) pour une prise en compte précise des conditions aux limites. Selon l'avancée des phases 1 et 2, une collaboration étroite avec un post-doctorant sur le couplage CIMAC/CAST3M pourra être envisagée.

### Profil recherché

Le poste s'adresse à un(e) candidat(e) titulaire d'un Master de chimie ou d'un diplôme d'ingénieur, disposant d'une solide formation en physico-chimie des matériaux et d'un intérêt marqué pour la modélisation numérique appliquée à des problématiques complexes.

Le/la candidat(e) devra démontrer une bonne maîtrise des outils de simulation numérique ainsi que des langages de programmation scientifique (tels que Python, C++ ou Fortran), indispensables pour le développement, l'implémentation et la validation de modèles chimiques et physiques. Une expérience préalable en calcul scientifique, en résolution d'équations aux dérivées partielles ou en méthodes numériques avancées sera particulièrement appréciée.

Des connaissances en thermochimie, en transferts thermiques et/ou en milieux multiphasiques constitueront un atout important pour appréhender les phénomènes couplés au cœur du projet. Une sensibilité aux problématiques de physico-chimie à haute température, de réactivité des matériaux ou de mécanique des fluides complexes sera également valorisée.

Le/la candidat(e) devra faire preuve de curiosité, d'initiative et d'une réelle motivation pour la recherche appliquée, ainsi que d'une capacité à travailler en équipe dans un environnement collaboratif entre laboratoires académiques et organismes de recherche.

### Références Bibliographiques

- [1] Mastori, H., Piluso, P., Haquet, J.-F., Denoyel, R., Antoni, M., *Limestone-Siliceous and Siliceous concretes thermal damaging at high temperature*, Construction and Building Materials, 228, (2019), 116671, DOI: 10.1016/j.conbuildmat.2019.08.052.
- [2] Boulin, A., Haquet, J. F., Piluso, P., Semenov, M., Antoni, M., Washiya, T., Kitagaki, T., *Hydrodynamic numerical simulations of a prototypical oxide-metal corium melt representative of Fukushima 1-F1 severe accident conditions*. Advances in Thermal Hydraulics, (2018).