

# Mécanismes fondamentaux du rendement du combustible et du revêtement

Mike Welland, I. Cheick-Njifon, N. Chornoboy, N. Ofori-Opoku, A. Prudil, C. Anghel, B. Bromley, K. Colins, F. Hilty, W. Richmond

## Objectifs :

- Étendre et exploiter l'expertise dans une gamme de techniques de modélisation de concepts de combustible et de revêtement
- Démontrer les avancées par des publications et des présentations
- Soutenir la participation aux conférences et aux initiatives de l'AEN OCDE
- Renforcer la capacité de répondre aux besoins des intervenants

Intervenant: CCSN

## Levier / soutiens :

- Projet de l'Agence de l'énergie nucléaire de l'OCDE
- Base de données internationale de thermodynamique des combustibles avancés
- Collaboration à la modélisation multiéchelle
- Collaboration à l'étude des enjeux scientifiques des systèmes de réacteur
- Plan d'action coopératif entre le DOE des États-Unis et NRCan
- Groupe de propriétaires CANDU
- Universités canadiennes : RMC, UOIT

**Tâches :** Les tâches sont divisées par échelle de longueur selon un paradigme multiéchelle comportant deux approches de modélisation complémentaires.

## Propriétés des matériaux

- Le modèle de cristal en champ de phase capture l'énergie des arrangements atomiques, dont les énergies et les défauts de la frontière du grain
- La théorie fonctionnelle de la densité permet de calculer les propriétés thermophysiques au moyen des premiers principes de structure électronique et de l'équation de transport de Boltzmann.

## Microstructure

- Un modèle de champ de phase dépendant de l'orientation prédit la croissance du grain et les bulles intergranulaires au moyen du raffinement de maille adaptatif.
- Un outil léger sert à générer des microstructures hexagonales irrégulières représentatives au moyen de caractéristiques réalistes.

## Comportement du gaz de fission

- Un modèle de champ de phase incorporant la thermodynamique de l'équilibre est en cours d'élaboration pour saisir le comportement des bulles intragranulaires

- Le modèle de phase incluse simule efficacement la croissance de bulles intergranulaires à moyenne échelle, la percolation et le dégagement de gaz sur des microstructures hétérogènes, réalistes.

#### Rendement du combustible integral

- Les codes de rendement du combustible, comme BISON et FAST, incorporent et lient les résultats à échelle de longueur inférieure en modèle de rendement intégral.
- L'apprentissage machine a été appliqué pour développer une corrélation de la source de chaleur de fission dans le combustible à partir de WINSEACL, puis utilisé dans les codes de rendement de combustible.

Ces travaux s'appuient sur les projets internes suivants :

- Modelling In-reactor Applications of MOX Fuel (terminé)
- Computational methods and modelling tools for advanced nuclear fuels development