

IRSN

INSTITUT
DE RADIOPROTECTION
ET DE SÛRETÉ NUCLÉAIRE

Faire avancer la sûreté nucléaire

AKTIS

L'actualité de la recherche à l'IRSN

N° **26**
Été 2017

FOCUS

*Mieux connaître
l'HYDRURATION des gaines
pour prévoir leur RUPTURE*



AVANCÉES

Quantifier
les incertitudes
pour mieux évaluer
les conséquences
après un accident
nucléaire



FORMATION

Évaluer les doses
neutroniques secondaires
en protonthérapie

L'HYDRURATION DES GAINES, UN ENJEU MAJEUR POUR LA SÛRETÉ DU PARC NUCLÉAIRE FRANÇAIS



© Antoine Douaud / IRSN

Dans les réacteurs à combustible solide, la gaine contient, protège et isole les matériaux radioactifs. Le choix des matériaux de gainage est dicté par un savant compromis entre leurs propriétés mécaniques et leurs caractéristiques neutroniques (telles qu'ils absorbent le moins possible les neutrons dans le domaine d'énergie choisi pour le fonctionnement). Ainsi, les gaines des réacteurs à eau sous pression français sont constituées d'alliages de zirconium.

Suite à l'action de l'eau sous pression en réacteur (mais aussi dans une moindre mesure dans les piscines d'entreposage), les gaines subissent une hydruration qui les fragilise, accroissant le risque

de leur rupture et pouvant conduire à empêcher le refroidissement du cœur en situation accidentelle.

Ces aspects sont des enjeux majeurs de sûreté, d'autant plus que les gestions avancées du combustible dans les réacteurs et l'évolution du réseau électrique ont tendance à augmenter les sollicitations sur le combustible par l'allongement des campagnes et par une demande accrue de flexibilité d'exploitation.

L'IRSN s'intéresse activement au phénomène d'hydruration, du point de vue théorique, en recherchant la compréhension des phénomènes physiques qui l'engendrent et, le cas échéant, l'amplifient, et d'un point de vue expérimental, en réalisant et participant à des expérimentations dans le but d'apporter le support nécessaire aux développements théoriques.

L'article *Mieux connaître l'hydruration des gaines pour prévoir leur rupture* rend bien compte d'une activité de l'Institut qui revêt une grande importance pour l'exploitation sûre des réacteurs du parc nucléaire français. Cette recherche fait de l'IRSN un acteur de premier plan à l'échelle mondiale en matière de sûreté du combustible nucléaire.

Giovanni Bruna,
Directeur scientifique

SOMMAIRE

ÉDITO

Giovanni Bruna

AVANCÉES DE LA RECHERCHE

PAGE 3

- Quantifier les incertitudes pour mieux évaluer les conséquences après un accident nucléaire

FOCUS

PAGE 5

Mieux connaître l'hydruration des gaines pour prévoir leur rupture

FORMATION PAR LA RECHERCHE

PAGE 9

- Un nouveau modèle de pyrolyse de matériaux semi-transparents
- Évaluer les doses neutroniques secondaires en protonthérapie

VIE DE LA RECHERCHE

PAGE 11

- Installations de recherche
- Thèses
- Soutenances

Glossaire ^{GL0}

PAGE 12

Aktis est la lettre d'information scientifique de l'IRSN. Elle présente les principaux résultats de recherches menées par l'Institut dans les domaines de la radioprotection, de la sûreté et de la sécurité nucléaire. Gratuite, elle est aussi diffusée sous forme de mail. Éditeur IRSN - standard : +33 (0)1 58 35 88 88 - www.irsn.fr - Directeur de la publication : Jean-Christophe Niel - Directeur de la rédaction : Matthieu Schuler - Rédactrice en chef : Sandrine Marano - Comité de lecture : Giovanni Bruna, Matthieu Schuler - Comité éditorial : Gauzelin Barbier, Giovanni Bruna, Aleth Delattre, Jean-Michel Evrard, Christine Gouedranche, Pascale Monti, Audrey de Santis, Matthieu Schuler - Rédaction : Sandrine Marano - Réalisation : www.grouperougevil.fr - 24855 Impression : Idéale Prod, certifiée Imprim'Vert - ISSN : 2110-588X - Droits de reproduction sous réserve d'accord de notre part et de mention de la source. Conformément à la loi N° 2004-801 du 6 août 2004 relative à la protection des personnes physiques à l'égard des traitements de données à caractère personnel et modifiant la loi N° 78-17 du 6 janvier 1978 relative à l'informatique, aux fichiers et aux libertés, tout utilisateur ayant déposé des informations directement ou indirectement nominatives, peut demander la communication de ces informations et les faire rectifier le cas échéant.



Photo de couverture -
Rupture sur une gaine de Zircalox en raison d'hydrures radiaux.
© IRSN

QUANTIFIER *les incertitudes* pour mieux évaluer LES CONSÉQUENCES après un ACCIDENT NUCLÉAIRE

Après un accident nucléaire, comme cela a été le cas après celui de Fukushima, les décisions concernant la protection des populations, la consommation des denrées alimentaires et les zones habitables seraient notamment prises sur la base de recommandations de l'IRSN. Elles se fonderaient sur les résultats de modélisations qui évaluent les transferts des radionucléides dans l'environnement et la chaîne alimentaire humaine. Or les modèles, dont le développement s'est intensifié après l'accident de Tchernobyl, contiennent des incertitudes qui sont inhérentes ou propres aux données utilisées (météorologiques, rejets, etc.). Des recherches sont entreprises pour les caractériser et si possible, les réduire.

Pour évaluer les conséquences sanitaires et environnementales d'un rejet accidentel d'éléments radioactifs dans l'atmosphère, l'IRSN utilise plusieurs types de modèles⁽¹⁾ : dispersion atmosphérique, dépôts des éléments radioactifs, transferts dans les sols, aux plantes et aux animaux, et évaluation des doses à l'homme (via différentes voies d'exposition : inhalation, immersion dans le panache radioactif, ingestion d'aliments contaminés...). Les résultats fournis par les logiciels fondés sur ces modèles contiennent des incertitudes ; celles-ci proviennent du manque de connaissance sur les rejets, sur les données météorologiques (données d'entrée), et des défauts de la modélisation numérique, des paramètres déterministes du modèle, etc. Ces incertitudes sont essentielles à quantifier et il est nécessaire de développer des outils et des méthodes permettant de les prendre en compte pour une meilleure évaluation du risque radiologique. L'analyse consiste d'abord à recenser les variables incertaines et à évaluer les incertitudes associées. Puis, « l'étude de sensibilité globale » permet de voir comment une petite variation de ces données incertaines influe sur les résultats des simulations, tels que les concentrations dans l'air, la quantité de radionucléides déposés au sol ou les doses.

Une telle étude a été réalisée durant un post-doctorat par Sylvain Girard sur le cas d'étude de l'accident de Fukushima en utilisant le modèle de dispersion atmosphérique à longue distance (ldX) de l'IRSN. L'analyse bibliographique a permis de définir des plages dans lesquelles faire varier les paramètres physiques et météorologiques

incertains (vent, pluie, vitesses de dépôt des radionucléides...). Puis il a réalisé une étude de sensibilité globale, qui consiste à faire varier tous les paramètres incertains pas à pas, pour parcourir tout l'espace possible des variables d'entrée et à réaliser une simulation pour chaque variation.

Deux méthodes

Pour définir les variations et classer les résultats, deux méthodes d'étude de sensibilité globale ont été utilisées. L'une est une méthode de criblage (méthode Morris) qui permet de classer les variables en trois catégories : peu influentes, moyennement influentes, et très influentes. Cette première approche a mis en évidence la grande sensibilité des résultats vis-à-vis de la nature et de la quantité des rejets, notamment les rejets d'iodes. Elle a également permis de montrer que les variables les plus influentes changent au cours du temps, et ne sont pas les mêmes en fonction de la variable de sortie que l'on prédit, que l'on soit près de la source ou loin de la source, ou qu'il s'agisse de la dose liée à l'inhalation ou à l'exposition externe.

La seconde, appelée méthode de Sobol, a permis de quantifier plus finement la part de l'incertitude du résultat due aux variables d'entrée. Cette méthode est plus précise que le criblage de Morris, mais elle nécessite un plus grand nombre de simulations. Il a été nécessaire de passer par la construction d'un émulateur, ou méta-modèle, qui est une approximation du modèle complexe moins coûteuse en temps de calcul, construite en utilisant des méthodes statistiques (ici, un processus



CONTACT

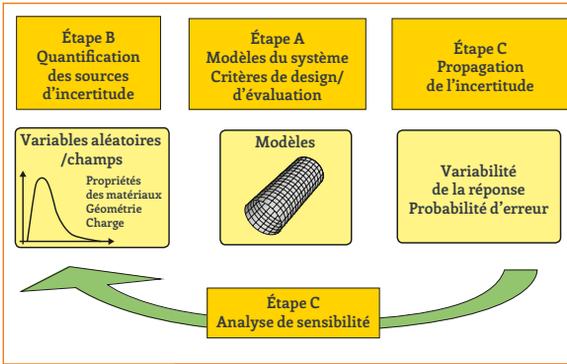
Irène KORSAKISSOK
irene.korsakissok@irsn.fr

Bureau de modélisation des transferts dans l'environnement pour l'étude des conséquences des accidents (BMCA)

Marie SIMON-CORNU
marie.simon-cornu@irsn.fr

Service d'étude et de surveillance de la radioactivité dans l'environnement (SESURE)

⁽¹⁾ Les modèles de dispersion atmosphérique permettent, à partir d'une estimation des rejets (« terme source ») et de la météorologie, de simuler la concentration de radionucléides dans l'atmosphère, et la répartition des dépôts sur le sol et la végétation. Ces modèles, ldX pour la « longue distance » et pX dédié à la courte distance, sont couplés à un module d'évaluation des doses liées à l'exposition des populations à la radioactivité (dose externe et par voie d'inhalation). Ils sont inclus dans la plateforme opérationnelle C3X utilisée à l'IRSN pour évaluer les conséquences d'un accident et préconiser des actions de protection des populations. D'autres modèles simulent les transferts des dépôts radioactifs dans le sol, les plantes et les animaux. Ainsi, SYMBOISE, couplé à C3X, permet notamment de prendre en compte la dose aux populations humaines liée à l'ingestion de denrées contaminées pour la gestion d'une crise.



Démarche de l'analyse d'incertitude.
© IRSN

PUBLICATIONS

• Girard S. *et al.*
« Emulation and Sobol' sensitivity analysis of an atmospheric dispersion model applied to the Fukushima nuclear accident » *J. Geophys. Res. Atmos.* :121 (2016) 3484 – 3496



• Sy M. M. *et al.*
« Foliar interception of radionuclides in dry conditions: a meta-analysis using a Bayesian modeling approach » *Journal of Environmental Radioactivity*; 147 (2015) 63-75



gaussien ou « krigeage »). Comme un émulateur ne peut pas représenter des données de sortie aussi complexes que celles du modèle lui-même, les émulateurs de cette étude ont été construits pour représenter deux grandeurs : la moyenne spatiale des doses externes sur tout le Japon, et la dose externe au cours des rejets en différentes stations de mesures de niveau de rayonnement ambiant (un émulateur par station). Ces méthodes de sensibilité globales ont été, depuis, appliquées au modèle de dispersion à courte distance (dénommé pX). Ce travail a mis en lumière l'importance de prendre en compte les incertitudes liées à la météorologie et au terme source, une tâche qui se poursuit actuellement au cours d'une thèse et au sein du projet européen CONFIDENCE débuté cette année.

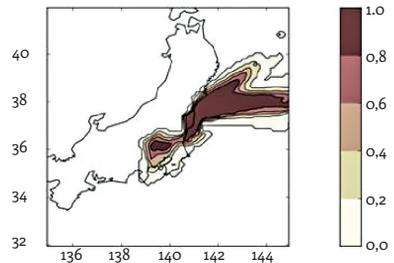
Transfert aux denrées alimentaires

Une méthode similaire (analyse d'incertitudes puis étude de sensibilité globale) a été appliquée par Mouhamadou Moustapha Sy dans le cadre de sa thèse, à une partie de la chaîne de calcul c'est-à-dire du dépôt radioactif jusqu'aux conséquences dosimétriques *via* le transfert aux denrées alimentaires d'origine végétale ou animale. M.M. Sy s'est tout d'abord intéressé à la quantification des incertitudes liées aux paramètres d'entrée, en commençant par l'interception sèche, soit le ratio entre la quantité de radionucléides déposés à la surface des feuilles des plantes (herbe et légumes feuilles) et la quantité totale de radionucléides déposés, en absence de pluie. M.M. Sy a mis en œuvre une méta-analyse, c'est-à-dire une démarche statistique combinant les résultats d'une série d'études indépendantes. Sur les 145 données utilisées, 114 ont été extraites de la « littérature grise » de l'IRSN tels que les rapports internes et cahiers de laboratoire, qui offrent un accès

direct aux données brutes avant leur synthèse dans les publications. Ces données ont été analysées par inférence bayésienne. Cette méthode statistique quantifie l'incertitude sur un paramètre à l'aide d'une distribution de probabilité dite hiérarchique : cette méthode permet de séparer incertitude et variabilité sur un paramètre, sachant que dans ce cas, la variabilité correspond aux différences entre espèces végétales et entre formes physiques des radionucléides. M.M. Sy a pu définir des distributions de valeurs de cette interception sèche pouvant remplacer la valeur ponctuelle utilisée par défaut dans le logiciel SYMBOISE. Le doctorant a ensuite appliqué la même démarche à deux autres paramètres : l'interception humide, et le processus de « weathering » c'est-à-dire la perte de radionucléides avec le vent, la pluie ou la dilution due à la croissance de la plante. Au terme de cette étape initiale de quantification d'incertitudes, M.M. Sy a appliqué les deux méthodes d'analyse d'incertitude et d'étude de sensibilité globales Morris et Sobol' à deux cas, un accident hypothétique et l'accident de Fukushima, pour quantifier les incertitudes des résultats.

Ces travaux permettent d'évaluer l'impact des incertitudes sur les calculs de dose à l'homme. À terme, ils seront utilisés pour l'appui à la gestion de crise, de façon à présenter une évaluation du risque tenant compte des incertitudes, plutôt qu'issues d'un unique calcul déterministe. Au-delà de l'évolution des outils logiciels, cela implique aussi d'écouter les décideurs, sur les apports possibles de ce type de résultats dans leur processus d'aide à la décision. C'est un des enjeux des projets européens CONFIDENCE et TERRITORIES qui viennent d'être lancés.

Proba de dépasser - 2011-03-15 00-00



Carte de la probabilité de dépasser un seuil de débit de dose ambiant de 125 microSv/h à une date donnée (ici, le 15 mars 2011 à 00h). La valeur 1 correspond à une probabilité de 100 %.

© IRSN

Mieux connaître L'HYDRURATION des gaines pour prévoir leur RUPTURE

La gaine des crayons de combustible nucléaire est la première barrière de confinement⁽¹⁾ de la matière radioactive; c'est aussi un élément de la géométrie du cœur. Sa résistance dans les conditions d'exploitation des réacteurs nucléaires, ou dans celles du transport et de l'entreposage en piscine des combustibles usés, est donc importante pour la sûreté. Au-delà, en conditions accidentelles, la gaine doit être suffisamment résistante pour que le cœur conserve une structure qui, malgré les déformations, n'empêche pas la pénétration de l'eau et donc le refroidissement. Or, durant l'utilisation du combustible en réacteur, le phénomène « d'hydruration » dégrade les propriétés mécaniques des gaines, phénomène qui prend une importance croissante avec un maintien prolongé du combustible en réacteur. L'IRSN consacre des recherches pour mieux caractériser ce phénomène et améliorer les outils de simulation du comportement du combustible.

Le cœur d'un réacteur nucléaire français est refroidi en permanence par de l'eau à 300 °C qui corrode lentement la gaine en alliage de zirconium du combustible et, ce faisant, produit de l'hydrogène. Les atomes d'hydrogène ainsi libérés sont en partie adsorbés par la gaine, diffusent dans la structure cristalline de l'alliage, et précipitent sous la forme d'hydrures de zirconium au niveau atomique. Les nano-hydrures ainsi formés s'agglomèrent pour former des plaquettes de l'ordre du micron (dites « macroscopiques ») observables en microscopie optique. Or ce phénomène est susceptible de dégrader la tenue mécanique des gaines de combustible – notamment la résistance à la rupture. L'influence de l'hydrogène sur le comportement mécanique des gaines en situation accidentelle a

été mise en évidence à l'occasion de programmes expérimentaux majeurs menés à partir de 1995. Afin de comprendre et modéliser finement les mécanismes d'hydruration des alliages ainsi que son impact sur le comportement mécanique des gaines, l'IRSN a lancé plusieurs travaux de recherche sur un type d'alliage, le Zircaloy⁽²⁾.

Orientation des hydrures

L'hydruration des gaines montre des effets différents selon l'échelle à laquelle elle est observée, et selon le type de sollicitation auquel ces gaines sont soumises. À l'échelle macroscopique, tout d'abord, deux principaux aspects sont étudiés : les conditions de précipitation de l'hydrogène, notamment celles

EDF, Studsvik, INSA de Lyon, Université de Manchester, CINA M Marseille

CONTACT

Jean Desquines
jean.desquines@irsn.fr

Laboratoire d'expérimentation en mécanique et matériaux (LE2M)

Fabienne Ribeiro
fabienne.ribeiro@irsn.fr

Laboratoire de physique et de thermomécanique des matériaux (LPTM)

⁽¹⁾ Dans les réacteurs à eau sous pression, il existe trois barrières de confinement : la gaine, le circuit primaire dans lequel se trouve le cœur du réacteur (les crayons de combustible), et l'enceinte du bâtiment réacteur.

⁽²⁾ Le Zircaloy, mot issu d'une association entre zirconium et alloy (alliage en anglais) est un nom générique pour des alliages associant du zirconium avec une petite proportion d'autres éléments tels que l'étain, le chrome, le fer, le nickel ou le hafnium.

Visualisation des hydrures radiaux et des éventuelles ruptures sur une coupe de gaine de Zircaloy.

© IRSN/
Francesco Acerbis





Vue au microscope optique d'une gaine montrant des hydrures.

© IRSN/Stéphane Charbaut

qui favorisent la formation de fissures traversant radialement l'épaisseur de la gaine ; et la mobilité de l'hydrogène à travers la gaine.

L'un des paramètres importants est l'orientation des hydrures précipités : les hydrures de zirconium radiaux, c'est-à-dire perpendiculaires à la paroi de la gaine, favorisent en effet la formation de fissures radiales dans la gaine notamment lors des manutentions (transports ou entreposage). Des essais ont été réalisés à l'IRSN pour identifier les conditions d'apparition de ces hydrures radiaux. Des gaines incluant de l'hydrogène à différentes concentrations ont été portées à deux températures, 350 °C et 450 °C, en les soumettant à des contraintes mécaniques représentant la pression des gaz présents dans la gaine, pression qui augmente avec la température. Ces tests ont permis d'identifier et de décrire la précipitation des hydrures (dans la direction radiale ou axiale) en fonction des contraintes, de la température et de la teneur en hydrogène. Ces tests ont aussi caractérisé la fragilisation induite par les hydrures radiaux. En s'appuyant sur ces résultats et sur des simulations par des logiciels de calculs mécaniques, les chercheurs de l'IRSN ont développé des modèles pour prédire la

quantité d'hydrures radiaux dans une gaine après un transport ou à l'issue d'un entreposage. Ces nouveaux modèles doivent à présent être intégrés dans les outils de simulation de comportement du combustible en irradiation (logiciel FRAPCON) afin d'alimenter les logiciels de simulation du combustible en situation accidentelle, SCANAIR et DRACCAR de l'IRSN. Ils devront également être validés au moyen d'échantillons plus représentatifs du matériau irradié.

En parallèle de ces travaux d'analyse structurelle sur la formation des hydrures, les chercheurs étudient les gaines hydrurées dans des conditions similaires à celles d'accidents pour vérifier qu'elles conserveraient une structure permettant au cœur d'être refroidi. Par exemple, dans le cas d'un accident de perte de réfrigérant primaire ou APRP⁽³⁾, une partie du cœur peut se trouver momentanément hors de l'eau, entraînant une augmentation progressive de la température et de la pression dans les crayons de combustible. Les systèmes d'injection de sécurité du réacteur enverraient alors de l'eau pour refroidir le combustible. Or, la trempe de gaines fragilisées par des hydrures de zirconium pourrait conduire à une rupture franche, entraînant

une modification importante de la géométrie du cœur qui empêche de le refroidir. Pour compléter d'autres travaux réalisés dans le monde à ce sujet, les recherches de l'IRSN se sont concentrées sur les conditions d'une rupture de la gaine à température ambiante après le refroidissement. Des gaines de combustible chargées au préalable à différentes concentrations d'hydrures de zirconium, ont été oxydées sous vapeur à 1 200 °C afin de simuler les conditions d'un APRP, puis trempées dans l'eau jusqu'à température ambiante. Les tests mécaniques réalisés ensuite montrent que le matériau est fragilisé par l'accumulation d'oxygène et par la présence d'hydrogène dans la couche métallique de la gaine. L'analyse détaillée des modifications chimiques subies par la gaine est réalisée dans le cadre d'une thèse par Élodie Torres, qui développe un modèle permettant de simuler la mobilité de l'hydrogène dans la gaine en cas d'APRP. Une fois intégré dans les logiciels de comportement du combustible de l'IRSN, ce modèle permettra de mieux prédire la résistance mécanique de gaines hydrurées à la trempe.

Interaction de l'hydrogène avec les défauts

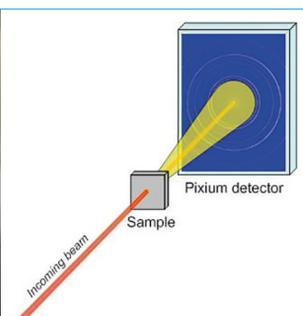
Un autre type d'accident qui pourrait se produire dans un réacteur est l'accident d'éjection de grappe⁽⁴⁾, ou RIA (*Reactivity Initiated Accident*), dont l'étude demande de connaître précisément l'état de la gaine avant l'accident et donc de comprendre

la formation des hydrures. Ceci nécessite d'utiliser des moyens expérimentaux spécifiques afin de suivre des phénomènes rapides. Depuis plusieurs années, l'IRSN et ses partenaires réalisent des expériences sur l'European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) à Grenoble qui permet d'observer la nature cristallographique et la cinétique de formation des hydrures. La compréhension de ces mécanismes reste en effet encore controversée bien qu'ils aient été largement étudiés. Les expériences ont mis en évidence que la présence d'hydrogène dans le Zircaloy induit des contraintes additionnelles importantes dans la matrice métallique, confirmant ainsi les observations d'autres auteurs pour qui l'hydrogène interstitiel provoque une dilatation significative du réseau cristallin. Ces travaux se poursuivent actuellement à l'IRSN dans le cadre du projet ANR SIZHYP (2013-2018), dont une partie a été réalisée durant le post-doctorat de Cédric Leclère. L'interprétation des campagnes d'études réalisées permettra de mieux comprendre la précipitation des hydrures.

Ces précédents travaux caractérisent les effets mécaniques de l'hydruration des gaines de combustible sur les paramètres cristallographiques des matériaux (structure, distances entre les plans d'atomes). Mais pour une compréhension fine des phénomènes induits par la présence d'hydrogène et mis en évidence expérimentalement, les chercheurs de l'IRSN ont par ailleurs entrepris de modéliser à l'échelle atomique ces mécanismes

⁽³⁾ L'accident de perte de réfrigérant primaire, ou APRP, pourrait se produire en cas de brèche dans le circuit d'eau dit « primaire » qui refroidit directement le cœur du réacteur. L'eau s'écoule hors de la cuve, dont le cœur n'est donc plus refroidi. Des systèmes de sauvegarde sont prévus pour injecter de l'eau dans la cuve pour refroidir le cœur.

⁽⁴⁾ Le RIA, ou accident d'éjection de crayons modérateurs de la réaction, résulterait de la rupture du carter d'un mécanisme de commande de grappe. La température dans le combustible atteint alors très brutalement une valeur élevée. Cette excursion de puissance est contrebalancée par « l'effet doppler ».



Dispositif expérimental sur la ligne de lumière Id15 à l'ESRF. Le faisceau de rayon X incident vient traverser l'échantillon avant de frapper le détecteur. Les anneaux de diffractions obtenus permettent d'identifier les caractéristiques cristallographiques de l'échantillon.

© IRSN

PUBLICATIONS

• J. Desquines *et al.*
« A new model on radial hydride precipitation in Zircaloy-4 claddings under decaying stress and temperature transient », International Conference on Management of Spent Fuel from Nuclear Power Reactors - An Integrated Approach to the Back-End of the Fuel Cycle, At Vienna, Austria, June 2015



• J. Desquines *et al.*
« Embrittlement of pre-hydrated Zircaloy-4 by steam oxidation under simulated LOCA transients », *Journal of Nuclear Materials*, 2016, 469, 20-31



• A. Dufresne *et al.*
« How to derive tight-binding spd potentials? Application to zirconium », *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2015 Aug 26; 27 (33): 336301



⁽⁴⁾ Le programme international Cabri (CIP) vise à étudier le comportement des crayons de combustible nucléaire et de leur gainage, lors d'un accident d'injection de réactivité (RIA) dans les réacteurs à eau sous pression (REP).

d'hydruration des gaines. L'étude atomistique d'un matériau nécessite d'une part de disposer d'un modèle de potentiel, c'est-à-dire un modèle énergétique décrivant les interactions entre les différents atomes du système, et d'autre part des méthodes thermostostatiques (Dynamique Moléculaire ou Monte-Carlo) qui permettent de prendre en compte les effets de la température. Dans le cas du système Zirconium-Hydrogène (Zr-H), il n'existait pas encore dans la littérature de modèle d'interaction, prenant en compte la température, à la fois précis (permettant de différencier les phases cristallographiques possibles), et raisonnable en temps de calcul (pour les calculs statistiques). C'est donc à cette première étape que s'est attelée Alice Dufresne durant sa thèse.

La doctorante a développé pour le zirconium un modèle de potentiel en liaisons fortes fondé sur des grandeurs issues de calculs *ab initio*⁽⁴⁾. Ce modèle, de précision ajustable, permet d'accéder à l'énergie du système de façon simplifiée tout en gardant suffisamment d'informations sur sa structure électronique pour que le potentiel soit utilisable dans une large gamme de paramètres structuraux (nature des phases cristallographiques, distances interatomiques). Il a ensuite été étendu avec succès

au système Zr-H. Plus globalement, la méthode mise en place pendant cette thèse pourrait être appliquée à d'autres systèmes métalliques, couplant métal et éléments organiques (hydrogène, carbone, azote, oxygène...).

Ce modèle est actuellement utilisé dans les travaux de Paul Eymeoud, dont la thèse vise à modéliser le diagramme de phase Zirconium-Hydrogène ainsi que la cinétique des transitions de phase, grâce à des simulations Monte-Carlo. Ces recherches permettront de comprendre et de quantifier le lien entre précipités d'hydrures de zirconium et contraintes mécaniques locales dans le métal. La finalité, à terme, est d'affiner la précision des modèles réalisés à l'échelle macroscopique.

Les travaux réalisés depuis de nombreuses années sur le Zircaloy, approfondis par ces résultats, permettent de mettre au point des modèles de plus en plus performants pour les évaluations de sûreté. De plus, les expériences globales, qui pourront bientôt être réalisées dans le cadre du programme Cabri-CIP⁽⁵⁾, viendront compléter l'arsenal des données nécessaires à la validation des modèles. Les méthodes acquises au cours de ces travaux pourront être utilisées pour l'analyse des nouveaux alliages choisis dans l'industrie nucléaire.

● Zr	— V1	— V3'
● H	— V2	— V4
● lacune	— V3	— V4'

V1~ -V3' >> |V2|~|V4| >> |V3|~|V4'|

Structure cristallographique des hydrures ZrH: les Vi indiquent les différents termes d'interactions atomiques à ajuster.

© IRSN

Un nouveau modèle de PYROLYSE de MATÉRIAUX SEMI-TRANSPARENTS

Les boîtes à gants, couramment utilisées dans les installations nucléaires pour manipuler des produits radioactifs, contiennent un matériau, le PMMA^{GLO}, qui peut contribuer à propager un incendie. Une thèse vient d'en modéliser la pyrolyse, afin de mieux prédire le développement d'un incendie de ce type d'équipement dans les évaluations de sûreté.

Prédire, avec un bon niveau de confiance, l'évolution d'un incendie à l'aide d'un logiciel de simulation dépend principalement de la précision avec laquelle la combustion du foyer est déterminée. Ceci passe par des modèles⁽¹⁾ de changement de phase ou de pyrolyse^{GLO}. Jusqu'à la thèse d'Ahmed Kacem, les modèles implantés dans les logiciels de l'IRSN ont été essentiellement validés pour des matériaux inertes^{GLO} et des foyers simples, comme les nappes de liquide. Ils s'avèrent cependant peu précis pour des feux de solides dont la composition et les caractéristiques peuvent changer au cours de leur dégradation physico-chimique liée à leur combustion. Ahmed Kacem a mis au point un modèle plus réaliste de pyrolyse volumique, qui prend en compte le rayonnement dans le solide, et la régression de l'interface gaz/solide, et qui est adapté à des solides semi-transparents tels que le PMMA. Ce modèle a

été implémenté dans le logiciel ISIS de simulation des incendies en trois dimensions développé par l'IRSN. De plus, à l'aide d'un algorithme génétique^{GLO}, un jeu unique de paramètres cinétiques pour la pyrolyse a été déterminé à partir d'expériences de pyrolyse pure⁽²⁾.

Pyrolyse avec flamme

Puis le modèle global a été confronté à des expériences de pyrolyse avec flamme sur des plaques planes carrées de PMMA de 10, 20 et 40 cm de côté. Le modèle reproduit correctement les phénomènes observés : la vitesse de régression de la surface solide, quasiment constante en fonction du temps, ainsi que la contribution radiative au flux de chaleur total reçu par la plaque sur sa face en combustion, de l'ordre de 80 % quelle que soit la taille de l'échantillon. Les résultats simulés sont en bon accord avec ceux de la littérature et ceux de l'expérience en termes de flux de chaleur, de température de gaz et de vitesse de régression de la surface au centre de la plaque, et de hauteur de flamme. Pour simuler la pyrolyse du PMMA en atmosphère sous-oxygénée, le processus de combustion a été modélisé à l'aide d'une chimie à deux étapes, impliquant la formation et l'oxydation du monoxyde de carbone, et en prenant en compte le phénomène d'extinction de la flamme en fonction de la température et de la concentration en oxygène. Le modèle a été validé sur des expériences réalisées dans le dispositif CADUCEE de l'IRSN, où des plaques de PMMA de 20 cm de côté ont été brûlées dans une atmosphère contenant 18,5 % et 19,5 % en volume d'oxygène. Il reproduit correctement la baisse du taux de pyrolyse total et les températures de flamme avec la fraction volumique d'oxygène.

Ce modèle mis au point par Ahmed Kacem s'avère ainsi applicable pour une large gamme de situations dans lesquelles la pyrolyse d'un matériau du même type que le PMMA peut se produire.

CONTACT

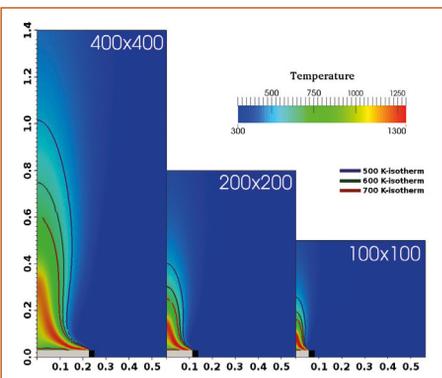
Sylvain Suard
sylvain.suard@irsn.fr

⁽¹⁾ Ces modèles indiquent quels gaz combustibles émanent du foyer et réagissent avec l'oxygène de l'air dans la zone de la flamme.

⁽²⁾ Les expériences de pyrolyse pure sont des expériences de pyrolyse sans flamme.

PUBLICATION

• *Modélisation numérique de la pyrolyse en atmosphères normalement oxygénée et sous-oxygénée*, thèse soutenue par Ahmed Kacem le 30 mai 2016 à l'université Aix-Marseille, spécialité énergétique ; Ecole doctorale 353, Sciences pour l'ingénieur : mécanique, physique, micro et nanoélectronique.



Champs de température (en K) et les isothermes à 500, 600 et 700 K pour trois tailles (100 x 100 mm, 200 x 200 mm, 400 x 400 mm) de plaques de PMMA simulées à $t = 1000$ s. Le rectangle gris représente la plaque de PMMA et le rectangle noir correspond à la partie de la plaque sous le masque métallique.

© IRSN

ÉVALUER LES DOSES *neutroniques secondaires* EN PROTONTHÉRAPIE

 Centre de protonthérapie d'Orsay - Institut Curie, Centre Antoine Lacassagne de Nice.

CONTACT

Isabelle Clairand
isabelle.clairand@irsn.fr

Laboratoire de dosimétrie des rayonnements ionisants - LDRI

⁽¹⁾ La protonthérapie est en plein essor avec plus d'une cinquantaine de centres en activité et une trentaine en construction dans le monde. En France, deux centres sont opérationnels depuis le début des années 1990, le Centre Antoine Lacassagne (CAL) à Nice et le Centre de protonthérapie d'Orsay de l'Institut Curie (CPO) à Orsay.

⁽²⁾ Beaucoup plus lourds que les photons, les protons sont peu déviés sur leur trajet et délivrent toute leur énergie cinétique sur leur cible, en l'occurrence les cellules cancéreuses.

PUBLICATION

• Développement d'un modèle analytique dédié au calcul des doses secondaires neutroniques aux organes sains des patients en protonthérapie. Thèse soutenue par Anthony Bonfrate le 24 novembre 2016 à Orsay. École doctorale n°576 Particules Hadrons Energie et Noyau: Instrumentation, Image, Cosmos et Simulation / PHENICS, Spécialité de doctorat: Radio et hadron-thérapies. Tuteur de thèse: Jad Farah (IRSN); directeur de thèse: Joël Hérault (CAL).

Dans le domaine médical, caractériser précisément la dose reçue est un point clé pour améliorer la radioprotection, tant pour les patients que pour les praticiens. Dans le cas de la protonthérapie, la modélisation récente du rayonnement neutronique secondaire permettra de minimiser ce dernier.

La protonthérapie⁽¹⁾ est une technique de radiothérapie externe qui utilise des faisceaux de protons pour irradier les cellules cancéreuses. Comparée à la radiothérapie classique utilisant des photons, elle délivre une dose élevée à la tumeur tout en épargnant les tissus sains grâce aux propriétés balistiques des protons⁽²⁾. Elle est indiquée pour certaines tumeurs oculaires et intracrâniennes. Cependant, des neutrons dits secondaires sont créés lors de l'irradiation et génèrent des doses aux tissus sains, aujourd'hui non évaluées lors de la planification du traitement. Une thèse menée à l'IRSN, en collaboration avec le Centre de protonthérapie d'Orsay (CPO) de l'Institut Curie et le Centre Antoine Lacassagne de Nice, par Anthony Bonfrate a permis d'élaborer un modèle analytique pour évaluer ces doses.

Un modèle numérique avait été développé lors de thèses précédentes (F. Martinetti et R. Sayah) sur la base du code de calcul Monte Carlo MCNPX^{GL0} pour une configuration de traitement donnée.

A. Bonfrate l'a tout d'abord étendu à trois autres configurations. La capacité du modèle à reproduire les distributions de doses neutroniques a été validée par des mesures effectuées *in situ*.

Puis le doctorant l'a utilisé pour calculer les doses neutroniques délivrées aux organes sains de fantômes numériques^{GL0} (voxélisés) représentant des patients de 1 an, 10 ans et adulte, dans le cas d'un traitement de tumeur intracrânienne. Ensuite, en les faisant varier, il a classé les différents paramètres d'entrée (énergie, collimation, etc.) en fonction de leur influence sur les doses, identifiant ainsi quelques actions possibles pour minimiser les doses neutroniques secondaires.



Centre Antoine Lacassagne de Nice. La tête rotative isocentrique compacte (appelée Gantry) permet d'orienter le faisceau d'irradiation selon différentes incidences autour du patient.
© Centre Antoine Lacassagne

Pour tout type de tumeur

À l'aide de ces éléments, A. Bonfrate a alors construit une équation constituant un modèle analytique utilisable pour tout type de tumeur et toutes les installations de protonthérapie. Il a décliné le modèle en fonction des trois incidences possibles du faisceau par rapport au patient. Il en a calé les paramètres à l'aide des données obtenues lors des simulations avec l'un des trois fantômes numériques, et l'a validé avec les données obtenues avec les deux autres fantômes. L'écart entre les données calculées par le modèle et les données numériques est d'environ 30 %, soit 100 µGy par Gray délivré à la tumeur, ce qui reste relativement élevé.

Le modèle analytique a enfin été testé au centre de protonthérapie de Nice en simulant un traitement ophtalmologique, avec des paramètres *ad hoc* adaptés au lieu et au traitement.

Les écarts obtenus entre la simulation et les mesures montrent que le modèle est fiable et flexible, tout en demandant quelques ajustements afin de réduire ces écarts.

THÈSES

SABINE HOFFMANN LAURÉATE DU CONCOURS « 3 MINUTES POUR UNE THÈSE » DE L'IRSN



Sabine Hoffmann
© IRSN/Sandrine Marano

Sabine Hoffmann a remporté le prix de la deuxième édition du concours « 3 minutes pour une thèse » de l'IRSN le 29 mars 2017 pendant les Journées des thèses, un séminaire organisé

chaque année pour que les doctorants de l'Institut échangent sur leurs travaux. La doctorante du Laboratoire d'épidémiologie de l'IRSN a exposé avec brio dans ce format exigeant sa thèse sur « *l'approche hiérarchique bayésienne pour la prise en compte d'erreurs de mesure d'exposition chroniques et à faibles doses de rayonnements ionisants dans l'estimation du risque de cancers radio-induits. Application à une cohorte de mineurs d'uranium* ». Le concours « 3 minutes pour une thèse » 2017 a vu s'affronter dix doctorants de l'IRSN de 2^e et 3^e années, dans un format inspiré du concours international Ma thèse en 180s (MT180).

SOUTENANCES

HDR D'AURÉLIE DESBRÉE

Aurélié Desbrée a soutenu son habilitation à diriger des recherches, intitulée *De la dosimétrie standard à la dosimétrie personnalisée en médecine nucléaire : évaluation des risques aux tissus sains et optimisation de la planification de traitement* le 26 avril 2017 à Orsay. Les acquis et les outils développés lors de ses travaux sont particulièrement prometteurs pour poursuivre des coopérations avec les équipes de la recherche clinique en appui aux pratiques impliquant des radionucléides.

LES DERNIÈRES SOUTENANCES DE THÈSE

- *Modifications du glycome endothélial vasculaire dans le contexte d'une irradiation à forte dose par Cyprien Jaillet*, le 1^{er} février 2017 à Fontenay-aux-Roses ;
- *Prise en compte des mécanismes de transports dans la fissuration des matériaux hétérogènes : application à la durée de vie d'exploitation des centrales nucléaires* par **Lionel Bichet**, le 30 janvier 2017 à Montpellier ;
- *Étude de transporteurs impliqués dans l'absorption racinaire et la translocation de césium chez Arabidopsis thaliana* par **Laure Génies** ; le 26 janvier 2017 à Saint-Paul-lez-Durance.

INSTALLATIONS DE RECHERCHE

PLUSIEURS NOUVELLES INSTALLATIONS MISES EN SERVICE



Installation MICADO Lab
© IRSN/Francesco Acerbis

Les données issues de l'expérimentation sont un élément fondamental pour valider les codes de calculs et les méthodes développés par l'IRSN pour assurer ses missions d'évaluation en sûreté ou sécurité nucléaire et en radioprotection. Elles sont également indispensables au développement des connaissances pour mieux appréhender les mécanismes de la contamination ou de l'irradiation du vivant et de l'environnement, et leurs effets, ainsi que les phénomènes physiques impliqués en sûreté nucléaire. Ces expérimentations nécessitent des installations permettant de mettre en œuvre des radioéléments, dans des conditions proches de ce qui se passerait en réalité. Pour certains programmes stratégiques, qui demandent des installations expérimentales spécifiques n'existant pas dans d'autres institutions, l'IRSN investit dans ses laboratoires. Ainsi, l'installation MICADO-Lab vient d'être inaugurée le 22 mai sur le site de Cadarache (Bouches-du-Rhône) afin de pouvoir irradier sur de longues périodes des organismes vivants représentatifs de la faune environnementale. En 2016, trois installations ont été inaugurées : MIRCOM, dédiée à l'analyse des effets de la radioactivité dans les cellules, ODE qui permet l'étude du vieillissement du béton, toutes deux également sur le site de Cadarache, et PERSEE sur le site de Saclay dont l'objectif est d'étudier les systèmes de piégeage de l'iode.



Installation ODE
© IRSN/Gilles Bertin-Maghit



Installation PERSEE
© IRSN/Francesco Acerbis

+ En savoir plus sur les actualités scientifiques



+ En savoir plus sur les vidéos des candidats au concours 2017



+ En savoir plus sur La recherche par la recherche à l'IRSN



ALGORITHME GÉNÉTIQUE:

Algorithme qui utilise itérativement des processus aléatoires en appliquant la notion de « sélection naturelle » (dérivée de celle de la biologie dans le domaine informatique) afin d'obtenir une solution approchée à un problème d'optimisation.

CALCUL AB INITIO DE LA STRUCTURE ÉLECTRONIQUE:

On utilise la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) qui est une méthode de calcul quantique permettant l'étude de la structure électronique du matériau, sans introduire de paramètre *a priori*.

FANTÔME NUMÉRIQUE:

Maquette numérique d'un corps ou d'une partie de corps humain. Lorsqu'il est dit voxelisé, la représentation numérique est en 3 dimensions.

MATÉRIAUX INERTES:

Ne présentant pas de (sans) réactions chimiques.

MCNPX : Plateforme logicielle de simulation numérique utilisant la méthode de Monte Carlo (calculs basés sur des probabilités) pour simuler les interactions des rayonnements dans la matière.

MÉTABOLITES : Molécules organiques de petite taille (masse < 1000g.mol⁻¹) produites par des voies métaboliques ou cascades enzymatiques (glucose, acides aminés, acides gras...) contenus dans un organisme.

MÉTABOLOMIQUE : Analyse globale de l'ensemble des métabolites mesurables dans un milieu biologique.

PMMA : Polyméthacrylate de méthyle.

PYROLYSE : Au sens strict, décomposition chimique d'une substance sous l'action d'une source de chaleur en l'absence d'oxygène ou en atmosphère pauvre en oxygène. Dans le domaine du risque incendie, aucune hypothèse n'est émise sur la présence d'oxygène: le mot pyrolyse est utilisé au sens large pour décrire la dégradation des matériaux combustibles et la production de gaz combustibles qui alimentent la flamme.

L'Institut de radioprotection et de sûreté nucléaire (IRSN) est un organisme public d'expertise et de recherche pour la sûreté et la sécurité nucléaires et la radioprotection. Il intervient comme expert en appui aux autorités publiques. Il exerce également des missions de service public qui lui sont confiées par la réglementation. Il contribue notamment à la surveillance radiologique du territoire national et des travailleurs, à la gestion des situations d'urgence et à l'information du public. Il met son expertise à la disposition de partenaires et de clients français ou étrangers.

Pour consulter la version numérique d'Aktis, accéder aux publications scientifiques et aux informations complémentaires en ligne, et pour s'abonner, rendez-vous sur le site Internet de l'IRSN : www.irsn.fr/aktis

**SIÈGE SOCIAL**

31 avenue de la Division Leclerc
 92260 Fontenay-aux-Roses
 France
 RCS Nanterre B 440 546 018

TÉLÉPHONE

+33 (0)1 58 35 88 88

COURRIER

BP 17 - 92262 Fontenay-aux-Roses
 Cedex - France

SITE INTERNET

www.irsn.fr