



HAL
open science

Conception et développement d'un mailleur énergétique adaptatif pour la génération des bibliothèques multigroupes des codes de transport

Pietro Mosca

► **To cite this version:**

Pietro Mosca. Conception et développement d'un mailleur énergétique adaptatif pour la génération des bibliothèques multigroupes des codes de transport. Physique mathématique [math-ph]. Université Paris Sud - Paris XI, 2009. Français. NNT: . tel-00678561

HAL Id: tel-00678561

<https://theses.hal.science/tel-00678561>

Submitted on 13 Mar 2012

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.

THÈSE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ PARIS-SUD 11

École doctorale : Rayonnements et Environnement

présentée par

Pietro Mosca

pour obtenir le grade de

Docteur de l'Université Paris-Sud 11

**Conception et développement d'un mailleur énergétique adaptatif
pour la génération des bibliothèques multigroupes des codes de
transport**

soutenue le 9 décembre 2009, devant le jury composé de :

Bernard BERTHIER	Président
Richard SANCHEZ	Directeur de thèse
Paul REUSS	Rapporteur
Piero RAVETTO	Rapporteur
Claude MOUNIER	
Alain SANTAMARINA	

Laboratoire de rattachement :

Laboratoire des Logiciels pour la Physique des Réacteurs
Service d'Études des Réacteurs et de Mathématiques Appliquées
Département de Modélisation des Systèmes et Structures
Délégation aux Activités Nucléaires de Saclay
Direction de l'Énergie Nucléaire
Commissariat à l'Énergie Atomique

CEA, centre de Saclay
DEN/DANS/DM2S/SERMA/LLPR
91 191 Gif-sur-Yvette CEDEX

Conception et développement d'un mailleur énergétique adaptatif pour la génération des bibliothèques multigroupes des codes de transport

Pietro MOSCA

Résumé

Les codes déterministes de transport résolvent l'équation stationnaire de Boltzmann dans un formalisme discrétisé en énergie appelé multigroupe. La transformation des données continues en multigroupes est obtenue en moyennant les sections fortement variables des noyaux résonnants avec le flux solution des modèles physiques d'autoprotection et celles des noyaux non résonnants avec le spectre énergétique représentatif d'un type de réacteur. Jusqu'ici l'erreur induite par ce type de traitement ne pouvait qu'être évaluée *a posteriori*. Pour y remédier, nous avons étudié dans cette thèse un ensemble de méthodes, permettant de contrôler *a priori* la précision et le coût du calcul de transport multigroupe.

L'optimisation du maillage énergétique est réalisée selon un processus en deux étapes : la création d'un maillage de référence et sa condensation optimisée. Dans la première étape, en raffinant localement et globalement le maillage énergétique, on cherche une solution multigroupe sur un maillage énergétique fin avec une autoprotection en sous-groupes de précision équivalente au solveur de référence (Monte Carlo ou déterministe ponctuel). Dans la deuxième étape, une fois fixé le nombre de groupes en fonction du coût admissible du calcul et choisis les modèles d'autoprotection les plus adéquats pour la filière à traiter, on cherche les meilleures bornes du maillage de référence minimisant les erreurs des taux de réaction grâce à l'algorithme stochastique d'optimisation des essais particuliers.

Cette nouvelle approche a permis de définir des nouveaux maillages pour la filière rapide aussi précis que les maillages actuels mais présentant un nombre inférieur de groupes.

Mots clés : transport neutronique, théorie multigroupe, autoprotection, tables de probabilité, optimisation.

Conception and development of an adaptive energy mesher for multigroup library generation of the transport codes

Pietro MOSCA

Abstract

The deterministic transport codes solve the stationary Boltzmann equation in a discretized energy formalism called multigroup. The transformation of continuous data in a multigroup form is obtained by averaging the highly variable cross sections of the resonant isotopes with the solution of the self-shielding models and the remaining ones with the coarse energy spectrum of the reactor type. So far the error of such an approach could only be evaluated retrospectively. To remedy this, we studied in this thesis a set of methods to control a priori the accuracy and the cost of the multigroup transport computation.

The energy mesh optimisation is achieved using a two step process : the creation of a reference mesh and its optimized condensation. In the first stage, by refining locally and globally the energy mesh, we seek, on a fine energy mesh with subgroup self-shielding, a solution equivalent to a reference solver (Monte Carlo or pointwise deterministic solver). In the second step, once fixed the number of groups, depending on the acceptable computational cost, and chosen the most appropriate self-shielding models to the reactor type, we look for the best bounds of the reference mesh minimizing reaction rate errors by the particle swarm optimization algorithm.

This new approach allowed to define new meshes for fast reactors as accurate as the currently used ones, but with fewer groups.

Keywords : neutron transport, multigroup theory, self-shielding, probability tables, optimization.

Remerciements

Cette thèse a été réalisée au Commissariat à l'Énergie Atomique (CEA), dans le Laboratoire des Logiciels pour la Physique des Réacteurs (LLPR) du Service d'Études des Réacteurs et de Mathématiques Appliquées (SERMA). Je tiens à remercier le chef de service Monsieur Richard Lenain et le chef du laboratoire Monsieur Christophe Calvin pour m'avoir permis d'effectuer cette thèse.

Les professeurs Piero Ravetto et Paul Reuss ont toute ma reconnaissance pour avoir accepté d'être les rapporteurs de ma thèse. Je suis très heureux que Bernard Berthier et Alain Santamarina aient accepté de composer mon jury. Je les remercie pour l'intérêt qu'ils portent sur ce travail.

Claude Mounier, ingénieur responsable de ma thèse, a été un interlocuteur privilégié pendant ces trois ans. Sa bonne humeur, sa disponibilité et ses grandes compétences sur le traitement des sections efficaces et sur la physique des réacteurs ont contribué au bon déroulement de ma thèse. Pour cela, j'en suis très reconnaissant.

Je désire exprimer ma gratitude à Richard Sanchez non seulement pour le rôle de Directeur de cette thèse, mais aussi pour les nombreux conseils qu'il m'a donnés au cours de ces trois ans et en particulier pendant les derniers mois de la thèse.

Je tiens à remercier Gilles Arnaud, ingénieur du laboratoire de fluide numérique du centre de recherche CEA-Saclay, pour l'aide qui m'a donné pendant le développement des méthodes d'optimisation du maillage énergétique.

De plus, je veux remercier :

- Mireille Coste, Pierre Bellier et toute l'équipe du laboratoire LLPR pour leur soutien ;
- François Fevotte et Steve Chauvet pour les conseils et les enseignements de toute sorte donnés ;
- les thésards de l'association MAIOT du centre CEA de Saclay, pour les activités diverses et variées qu'ils m'ont proposées.

J'ai toujours trouvé une ambiance chaleureuse, surtout au repas de midi, de grande collaboration et disponibilité de part de tous les ingénieurs du SERMA. Je veux pour cela remercier : Igor Zmijarevic, Zarko Stankovski, Guillaume Campioni, Laure Maudelain, Jean-Michel Do et Nicolas Huot.

Je réserve une mention particulière à Sébastien Lahaye pour son grand travail de relecture du manuscrit et à Jean-Yves Moller pour l'aide en français pendant les derniers mois de rédaction.

Voglio ringraziare i miei colleghi e amici italiani del SERMA, Simone, Emiliano e Maurice, per la disponibilità che mi hanno sempre dimostrato in questi anni.

Infine, un ringraziamento é rivolto ai miei genitori, perché non si sono mai opposti alla mia scelta di lavorare in un Paese straniero ed, anzi, mi sono sempre stati di grande sostegno.

Table des matières

Introduction générale	1
I Rappels	5
1 Interaction neutron/matière	8
1.1 Neutron et Noyau	8
1.2 Mécanismes d'interactions neutron/noyau	10
1.3 Notion de section efficace	11
1.4 Phénomène de résonance	12
1.5 Formalismes nucléaires	12
1.6 Effet Doppler	13
2 Théorie du transport des neutrons	17
2.1 Grandeurs neutroniques	17
2.2 Équation de transport de Boltzmann	18
2.3 Formulation intégrale de l'équation de transport	20
2.4 Résolution de l'équation de transport	21
2.4.1 Calcul de valeur propre	21
2.4.2 Discrétisation de la variable énergétique	22
2.4.3 Discrétisation des variables angulaires et spatiales	22
2.4.4 Algorithme général	24
2.4.5 La méthode de Monte Carlo	24
2.4.6 Construction du processus statistique dans le code TRIPOLI4	26
3 État de l'art du traitement des données nucléaires pour la génération des bibliothèques multigroupes	28
3.1 Les données ENDF et les sections efficaces	28
3.1.1 La représentation ponctuelle	29
3.1.2 La représentation multigroupe	29
3.1.3 Les tables de probabilité	31
3.2 Le code NJOY	32
3.2.1 Sections efficaces	33
3.2.2 Matrice de transfert	34
3.3 Le code CALENDF	36
3.3.1 Calcul des probabilités et des paliers de la section totale	36
3.3.2 Plusieurs sections efficaces	37
3.4 Bibliothèque multigroupe du code APOLLO2	39
3.4.1 Sections de diffusion et matrices de transfert	40
3.4.2 Le spectre de fission	41
3.5 Le module d'autoprotection	41
3.5.1 Autoprotection selon le formalisme Livolant-Jeanpierre	42

3.5.2	Autoprotection en sous-groupes	48
3.5.3	Limites des méthodes d'autoprotection	51
II	Développements théoriques	53
4	Principes du mailleur adaptatif	56
4.1	Type d'équation pour la solution de référence	57
4.1.1	La dépendance en espace	58
4.1.2	La dépendance en angle	59
4.2	L'approche pour l'optimisation du maillage énergétique	59
5	Solution multigroupe de référence	61
5.1	Construction du maillage de référence	61
5.1.1	Critères portant sur les taux et sur le flux	61
5.1.2	Critère portant sur le transfert	64
5.2	Sections efficaces pour le calcul de référence	66
5.2.1	Utilisation des sections et des distributions angulaires dans le code TRIPOLI4	67
5.2.2	Les sections et les matrices de transfert multigroupes dans AEMC . .	67
5.3	Résolution multigroupe de l'équation de transport	69
5.4	Algorithme d'obtention de la solution multigroupe de référence	71
5.5	Solveur ponctuel en énergie	71
5.5.1	Transfert élastique et isotrope dans le centre de masse	73
5.5.2	Transfert inélastique et isotrope dans le centre de masse	74
5.5.3	Prise en compte de l'anisotropie dans le système du centre de masse .	75
5.5.4	Calcul du flux	75
6	Condensation optimale du maillage de référence	77
6.1	Données multigroupes condensées	77
6.2	Autoprotection en sous-groupes	78
6.3	Autoprotection selon le formalisme de Livolant-Jeanpierre	79
6.3.1	Équation pour les tabulations des taux de référence	79
6.3.2	Équivalence continu-multigroupe	81
6.4	Extension de l'approche Livolant-Jeanpierre à un problème à source	82
6.5	Définition et minimisation de la fonctionnelle	83
6.5.1	Les algorithmes génétiques	85
6.5.2	Les essais particuliers	86
6.5.3	Croisement des maillages	87
III	Résultats	93
7	Test de validation de la méthode	96
7.1	Modélisation du spectre de fission	96
7.2	Comparaison des solveurs dans le domaine non résolu	99
7.2.1	Problèmes à source	100
7.2.2	Problème à valeur propre	105
7.2.3	Conclusion	108
7.3	Solveur ponctuel	108
7.3.1	Prise en compte des réactions inélastiques dans le noyau de transfert .	108
7.3.2	Contrôle de la précision du solveur ponctuel	112
7.4	Comparaison entre AEMC et APOLLO2	115

7.4.1	Méthode des sous-groupes	115
7.4.2	Méthode Livolant-Jeanpierre	116
7.5	Optimisation	120
7.5.1	Influence du maillage pour l'autoprotection Livolant Jeanpierre	120
7.5.2	Optimisation du maillage pour l'autoprotection Livolant-Jeanpierre .	122
8	Construction du maillage de référence pour la filière RNR-sodium	124
8.1	Définition de la base de cas	124
8.2	Sensibilité aux paramètres d'entrée	129
8.2.1	Effet de l'évaluation	129
8.2.2	Effet de la température	131
8.3	Obtention du maillage de référence RNR-sodium	133
8.3.1	Convergence multigroupe pour l'individuation des cas complexes . .	133
8.3.2	Comparaison avec le code de référence TRIPOLI4	135
8.3.3	Comparaison avec le solveur ponctuel	149
8.3.4	Vérification finale de convergence multigroupe	155
9	Optimisation et validation des maillages énergétiques	156
9.1	Optimisation	156
9.1.1	Opérateur approché de transport avec l'autoprotection en sous-groupes à isotope isolé	157
9.1.2	Étude de la courbe de performance précision-nombre de groupes pour la méthode des sous-groupes à isotope isolé	161
9.1.3	Choix de la méthode optimale d'autoprotection	175
9.1.4	Étude de la courbe de performance nombre de groupes - précision avec la méthode Livolant-Jeanpierre résolvant un problème à source .	178
9.1.5	Coût du calcul de transport et espace mémoire de la bibliothèque mul- tigroupe	191
9.2	Tests de validation avec APOLLO2 et TRIPOLI4	194
9.2.1	Caractéristiques du test sur la cellule RNR-sodium	194
9.2.2	Comparaison TRIPOLI4 et APOLLO2 sur la cellule RNR-sodium . . .	197
9.2.3	Caractéristiques du test sur la couverture fertile	206
9.2.4	Comparaison TRIPOLI4 et APOLLO2 sur le problème plan à source dans la couverture fertile	208
9.2.5	Conclusion des tests de validation	225
	Conclusions et perspectives	226
	A La méthode des probabilités de collision	229
	B Mailleur sur les taux de réaction	231
B.1	Calcul des taux de référence	231
B.2	Équivalence continu-multigroupe	232
B.3	Calcul d'une erreur variable par plage énergétique et noyau	233
	C Algorithme de résolution du solveur ponctuel	235
	Bibliographie	235

Introduction générale

Situation actuelle Les réacteurs nucléaires sont des systèmes complexes, dans lesquels différents domaines de la physique interviennent : thermohydraulique, mécanique des structures ou des matériaux et neutronique.

Les calculs de neutronique dits "de transport" cherchent à obtenir, par résolution numérique de l'équation stationnaire de Boltzmann, la distribution spatiale et énergétique de la population neutronique. Pour ce second aspect, tous les codes déterministes utilisent une représentation multigroupe consistant à découper en intervalles successifs (ou "groupes") la variable énergétique et à assimiler dans chacun d'eux la population des neutrons à une population monocinétique. Pour cela, les données physiques des noyaux (fonctions continues de l'énergie) sont transformées en données discrétisées en énergie (bibliothèque multigroupe). Cette transformation, dite de mise en groupe, est réalisée en moyennant :

- dynamiquement dans le code de transport, les sections fortement variables des noyaux résonnants avec le flux solution des modèles physiques d'autoprotection ;
- en amont dans le code de traitement des données nucléaires, les sections des noyaux non résonnants avec le spectre énergétique représentatif d'un type de réacteur ou d'une filière.

Le passage du continu vers le multigroupe entraîne une erreur qui est évaluée, pour l'instant, seulement *a posteriori* par comparaison avec les solutions continues des codes Monte Carlo. Comme l'indique le titre de la thèse, il s'agit pour nous de concevoir un ensemble de méthodes permettant de contrôler *a priori*, dans le processus de création des maillages énergétiques lui-même, la performance (rapport précision/coût) du calcul de transport multigroupe. Pour répondre à cet objectif, nous nous sommes appuyés sur l'existant et les tendances qui se dessinent en matière de création des bibliothèques multigroupes. Faisons brièvement l'état des lieux.

Au CEA, des bibliothèques multigroupes à 99, 172 et 281 groupes pour les réacteurs à spectre thermique et 1968 groupes pour les réacteurs à spectre rapide sont employées pour les études neutroniques et donnent des résultats assez satisfaisants. Tous ces maillages sont principalement utilisés pour les calculs de routine parce qu'ils offrent un bon compromis entre temps de simulation et précision. Aucun d'eux n'est vraiment adapté, au sens de l'optimum coût/précision, au traitement des différents problèmes de neutronique rencontrés (REP, REB, CANDU, RNR, divers réacteurs expérimentaux).

Dans le monde, le nombre de maillages énergétiques existants, en regardant ceux disponibles dans le code NJOY, est considérable : une vingtaine est disponible pour la modélisation des interactions neutrons - matière et une dizaine pour les interactions photons - matière. Pour chacun de ces maillages il est possible d'associer soit une fonction de pondération différente disponible dans le code soit d'en fournir une sous la forme d'une fonction continue interpolée linéairement.

Cette multiplicité des maillages et des fonctions de pondération provient d'une part des multiples applications neutroniques, et d'autre part, du souci des neutroniciens de ne pas gaspiller les ressources informatiques. En effet, un excès de groupes pourrait conduire à un défaut de modélisation ultérieur, par exemple, en contraignant le neutronicien soit à une

discrétisation spatiale trop approximative de l'assemblage, soit à mal reproduire les couplages spatiaux par le choix d'un motif élémentaire du réacteur trop petit. Pour cette raison, un maillage universel valable pour la diversité des applications ne semble pas une stratégie optimale en termes de performance. Au regard de ces constats, le principe de spécialisation des maillages pour une filière est un axe éprouvé d'amélioration de la précision.

L'accroissement des capacités des ordinateurs permet de réduire l'importance de la modélisation d'autoprotection par une augmentation du nombre de groupes dans certaines zones énergétiques. Ainsi de 99 groupes dans les années 70 en passant par 172 groupes dans les années 90, nous en sommes maintenant à 281 groupes. Le maillage SHEM à 281 groupes [Hfaiedh et Santamarina, 2005], [Hfaiedh, 2006] s'inscrit dans cette logique pour s'affranchir de l'autoprotection en dessous de 22,5 eV, zone où celle-ci est la plus cruciale dans un réacteur thermique. Dernièrement, le maillage raffiné SHEM à 361 groupes [Hébert et Santamarina, 2008] a été conçu pour améliorer la précision des calculs multigroupes dans le domaine énergétique compris entre 22,5 eV et 11,4 keV avec la méthode d'autoprotection SPM (*Subgroup Projection Method*) [Hébert, 2009]. Aux États-Unis, un maillage à 6064 groupes [Huria et Ouisloumen, 2008] a été proposé pour s'affranchir complètement des méthodes d'autoprotection. Toutefois, les problèmes liés à la taille mémoire requise par une telle bibliothèque multigroupe, surtout si on considère l'ordre du développement en polynômes de Legendre des matrices de transfert, réduit le champ d'application aux calculs de référence sur des géométries simples.

L'augmentation du nombre de groupes réduit ou annule le besoin de cette modélisation mais rend la résolution des solveurs multigroupes plus coûteuse. En revanche, les méthodes d'autoprotection permettent de réduire le nombre de groupes au prix d'un calcul au vol sur une géométrie représentative du réacteur pour obtenir les sections efficaces multigroupes des isotopes résonnants.

De ces dernières considérations, il résulte que, pour les années à venir, l'approche sans autoprotection n'est pas réaliste pour un usage de routine des codes de transport. Si on intègre la double nécessité de la spécialisation des maillages et de l'autoprotection, la solution optimale est dans la recherche conjointe du maillage et de la méthode d'autoprotection *ad hoc* pour une filière donnée.

Apport de la thèse Pour formuler brièvement l'objectif général de cette thèse, il s'agit pour nous de concevoir une palette de méthodes fournissant les maillages optimaux vis à vis des finalités d'utilisation, à savoir, par exemple, des calculs de conception ou de référence pour une filière de réacteur donnée. En anticipant sur une pratique future, nous pourrions imaginer que, suivant le besoin de l'utilisateur du code de transport, ce dernier puisse choisir parmi des bibliothèques optimales de la filière celle donnant la performance souhaitée. Ce choix serait instruit par une connaissance préalable de la performance évaluée en amont par les personnes créant les bibliothèques multigroupes. Comme l'objectif est de concevoir des méthodes d'optimisation des maillages énergétiques entrant dans le processus de création des bibliothèques multigroupes, nous ne pouvons commencer que par une appropriation de l'acquis en termes de traitement de données nucléaires et de méthodes d'autoprotection, acquis restitué dans la première partie et principalement dans le chapitre 3.

Optimisation par filière Dans le cadre de cette thèse, nous appellerons filière un ensemble de problèmes neutroniques en principe hétérogènes. Autrement dit, rien n'interdit de considérer une classe d'applications embrassant des situations neutroniques allant du REP au RNR-sodium en passant par le REB, en s'affranchissant donc du concept ordinaire de filière. Toutefois ces maillages énergétiques optimisés "multifilières" seront plus coûteux en temps de calcul que ceux optimisés pour des champs d'application pris isolément.

Nous nous sommes intéressés surtout à la variable d'énergie et nous avons fait le choix

de transposer les problèmes hétérogènes en un ensemble de problèmes en milieu homogène infini. La pertinence de cette transposition hétérogène-homogène sera discutée dans le chapitre 4 de la deuxième partie. Disons dès maintenant que celle-ci s'appuie notamment sur le principe d'équivalence hétérogène-homogène de l'autoprotection Livolant-Jeanpierre [Livolant et Jeanpierre, 1974]. En définitive, notre classe d'applications est formée par un ensemble de problèmes neutroniques en milieu homogène infini qui peuvent être paramétrés avec les grandeurs suivantes : la température, les concentrations des principaux noyaux, les dilutions et les sources neutroniques.

Solution de référence L'optimisation d'un maillage énergétique garantissant une précision donnée implique l'usage d'une solution de référence pour mesurer la valeur des diverses solutions approchées recherchées. En anticipant sur le résultat de la discussion conduite dans la deuxième partie, au chapitre 4, l'approche par un solveur probabiliste Monte Carlo s'avère illusoire. De même, la voie d'un solveur déterministe utilisant les sections ponctuelles n'est praticable, à l'heure actuelle, que sur certaines portions de l'axe énergétique. L'adoption comme solution de référence, d'une approche multigroupe avec une autoprotection en sous-groupes, sera justifiée au chapitre 5. Une procédure sera élaborée pour déterminer des maillages énergétiques de référence garantissant une solution de précision équivalente au Monte Carlo pour tous les problèmes neutroniques considérés (valeur propre et sources).

Solutions approchées optimales Dotés d'une solution de référence multigroupe, normalement très raffinée, il nous faut développer une méthode permettant une condensation optimale du maillage de référence sur une structure multigroupe plus grossière. Pour ce faire nous choisissons parmi les différents modèles d'autoprotection (méthodes des sous-groupes ou de Livolant-Jeanpierre ou voire une combinaison des deux) les méthodes les plus adéquates. Le nombre de groupes du calcul approché étant fixé en fonction du coût admissible, les bornes sont recherchées afin de minimiser les erreurs sur les taux de réactions. Le problème d'optimisation qui en découle est de type combinatoire. Le nombre des maillages grossiers possibles est considérable puisqu'il s'agit de trouver, pour fixer les ordres de grandeur, quelques centaines de bornes parmi des milliers. L'espace de recherche correspondant est tellement vaste que seuls les algorithmes d'optimisation génériques de type stochastique, permettent de fournir des solutions numériquement acceptables en explorant qu'une portion. Ce point est développé dans le chapitre 6 de la deuxième partie.

Répétons le, le choix de la méthode d'autoprotection est indissociable de l'optimisation. C'est pourquoi on trouvera aussi dans le chapitre 6 de la deuxième partie des développements concernant l'autoprotection avec notamment une extension de la méthode de Livolant-Jeanpierre.

Résultats La troisième partie est consacrée à la présentation des résultats. On montre d'abord une série de tests simples, utilisés pour valider la nouvelle méthode à la fois dans la phase de recherche de la solution multigroupe de référence et dans celle de la condensation optimisée. Les deux derniers chapitres sont dédiés à l'optimisation du maillage énergétique pour la filière des réacteurs à neutrons rapides refroidis au sodium. C'est une étude de cas montrant combien est ouvert le problème de la définition de la filière et de sa transposition de l'hétérogène en homogène. La validation des maillages optimisés sur des situations hétérogènes revient sur le point de départ de l'optimisation et permettra de discuter de la validité du choix de ne traiter que des cas homogènes dans la recherche des maillages optimisés.

Finalement, ce mémoire se conclut par une brève discussion des résultats obtenus, des perspectives ouvertes par ces études et des difficultés rencontrées non encore résolues.

Première partie

Rappels

Cette première partie aborde les principales notions de neutronique utiles à la compréhension des développements propres au sujet de la thèse.

On commence par des rappels de physique nucléaire relatifs à l'interaction neutron/noyau (cf. chapitre 1).

On présente ensuite l'équation de transport de Boltzmann, régissant le bilan des neutrons à l'intérieur d'un réacteur nucléaire (cf. chapitre 2).

On termine en faisant l'état de l'art pour le traitement des données multi-groupes (cf. chapitre 3).

Les deux premiers chapitres ne prétendent pas à l'originalité et constitue plutôt une synthèse partielle d'ouvrages généraux de physique nucléaire et de neutronique. Ils introduiront des concepts repris dans les différentes parties de la thèse.

Le dernier chapitre revêt une certaine importance dans ce manuscrit parce qu'il présente les éléments sur lesquels ce travail de recherche s'est appuyé mais aussi a apporté des améliorations.

Chapitre 1

Interaction neutron/matière

1.1 Neutron et Noyau

Découvert en 1932 par Chadwick, le neutron est une particule de charge nulle et de masse $m_n = 1,67493 \cdot 10^{-27} \text{kg}$. Sa charge électrique nulle en fait une particule très pénétrante dans la matière parce qu'elle n'a pas à vaincre les forces de répulsion coulombienne en se rapprochant du noyau. À l'état libre, il est radioactif et se désintègre avec une période de vie de 887 secondes en un proton p , un électron e^- et un neutrino $\bar{\nu}$ d'énergie 782keV ¹, selon le processus de radioactivité β^- suivant :

$$n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}.$$

Dans un réacteur nucléaire, le temps de vie d'un neutron, période qui sépare sa production de sa disparition, est inférieur à quelques millisecondes. On peut donc considérer cette particule comme stable en physique des réacteurs.

On associe au neutron, comme à toute particule, une longueur d'onde λ , qui est donnée par la relation de de Broglie :

$$\lambda = \frac{h}{p},$$

où $h = 6,62608 \cdot 10^{-34} \text{J} \cdot \text{s}$ est la constante de Planck et p est le module de l'impulsion. Pour des énergies inférieures à 94 MeV, le neutron peut être considéré non relativiste (sa vitesse est inférieure à $0.43 \cdot c$), son énergie cinétique s'exprime :

$$E = \frac{1}{2} m_n v^2 = \frac{p^2}{2m_n}.$$

Dans ces conditions, la longueur d'onde associée devient :

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_n E}}.$$

Donnons quelques ordres de grandeur. Pour un neutron thermique soit à une énergie de 25,3 meV, la longueur d'onde est de $1.809 \cdot 10^{-8} \text{cm}$, dimension du même ordre de grandeur que le diamètre de l'atome. Pour un neutron rapide d'une énergie de 1 MeV, la longueur d'onde est de $2,860 \cdot 10^{-12} \text{cm}$, ce qui est du même ordre que le diamètre du noyau. La quantification du moment orbital du neutron par rapport au noyau donne :

$$pb = l \frac{h}{2\pi},$$

¹1eV = $1,60218 \cdot 10^{-19} \text{J}$

où le paramètre d'impact b représente la distance entre la direction de vol du neutron et le noyau. L'interaction est prépondérante si le paramètre d'impact est inférieur au rayon "efficace" R du noyau, ce qui implique :

$$l = 2\pi \frac{pb}{h} < 2\pi \frac{pR}{h} = 2\pi \frac{R}{\lambda}.$$

Pour des neutrons lents $R < \lambda$, la seule solution est $l = 0$ (neutron de type s). Avec l'augmentation de l'énergie, des solutions pour $l = 1, 2, \dots$ sont admissibles (neutron de type p, d). En général, la probabilité d'interaction neutron/noyau, proportionnelle à la longueur d'onde, est plus élevée pour un neutron lent que pour un neutron rapide.

Les nucléons formant un noyau composent un système dont les énergies ne peuvent prendre qu'un certain ensemble de valeurs, qui correspondent aux valeurs propres E_n de l'opérateur Hamiltonien décrivant les forces à l'intérieur d'un noyau. L'ensemble de ces valeurs propres est appelé ensemble de niveaux. L'état fondamental d'un noyau correspond à une condition d'énergie minimale, les autres sont appelés "états excités". À chacun de ces niveaux correspond un moment cinétique total, une parité et un spin.

Avant de subir une décroissance, un noyau reste dans un état excité pendant une durée τ dite durée de vie. Cette valeur, d'après le principe d'incertitude de Heisenberg, vaut :

$$\tau = \frac{\hbar}{\Gamma^*},$$

où on a utilisé la convention $\hbar = h/2\pi$ et Γ^* , appelée largeur du niveau, représente l'incertitude avec laquelle on connaît l'énergie d'excitation. Un noyau peut décroître de plusieurs façons en émettant : des rayons gamma, des neutrons, des particules chargées (proton, alpha ...). Pour chacun de ces modes de décroissance, on associe un temps de vie τ_i et une largeur partielle de niveau $\Gamma_i = \hbar/\tau_i$. On définit aussi la largeur totale comme somme des largeurs partielles $\Gamma = \sum_i \Gamma_i$.

Différents modèles sont utilisés pour reproduire les distributions expérimentales des niveaux.

La distribution des niveaux voisins de même parité et spin est bien reproduite par la loi de Wigner. Pour exprimer cette loi, on utilise l'espacement réduit comme rapport de l'espacement des niveaux et de sa valeur moyenne $x = \frac{D}{\langle D \rangle}$. La probabilité pour qu'un espacement réduit soit compris entre x et $x + dx$ est donnée par :

$$p(x)dx = \frac{\pi}{2} x \exp\left(-\frac{\pi}{4} x^2\right) dx.$$

Cette loi est aussi connue "loi de répulsion des niveaux", puisque la probabilité d'avoir des espacements très petits est faible.

La distribution des largeurs partielles Γ_i suit une loi du χ^2 avec n degrés de liberté :

$$P(\Gamma_i, n) = \frac{n/2}{\Gamma(n/2)} \left(\frac{n}{2}\Gamma_i\right)^{n/2-1} \exp\left(-\frac{xn}{2}\right).$$

Pour la plupart des largeurs partielles on a $n = 1$ et la distribution suit une loi de Porter-Thomas.

Selon le rapport des masses du noyau cible et du neutron $A = \frac{M}{m_n}$, les espacements moyens des noyaux vont :

- quelques MeV pour les noyaux avec A inférieur à 10,
- quelques keV pour les noyaux avec A inférieur à 100,
- quelques eV pour les noyaux lourds ayant A supérieur à 200.

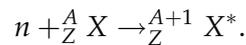
Pour une étude plus détaillée, le lecteur intéressé peut consulter l'ouvrage de D. Blanc [Blanc, 2000] et de M. C. Glasstone et Edlund [Glasstone et Edlund, 1952].

1.2 Mécanismes d'interactions neutron/noyau

Les principales interactions neutron/noyau sont la **diffusion potentielle** et la **désexcitation d'un noyau composé**.

La première peut avoir lieu quelle que soit l'énergie incidente du neutron et se caractérise par une simple diffusion de l'onde associée au neutron par la barrière du potentiel du noyau. Cette diffusion peut être traitée classiquement comme le choc de deux boules de billard. Il constitue le principal processus de ralentissement des neutrons dans les réacteurs à neutrons thermiques.

La deuxième est déduite par un modèle approché d'interaction valable jusqu'à une vingtaine de MeV, permettant de rendre compte des faits expérimentaux. D'après le modèle du noyau composé, lorsque le neutron incident pénètre dans le noyau cible ${}^A_Z X$, il y a formation d'un noyau composé ${}^{A+1}_Z X^*$ dans un état excité :



L'énergie d'excitation $E_c(A+1, Z)$ du noyau composé est égale à la somme de l'énergie cinétique totale de l'ensemble neutron/noyau dans le système du centre de masse, appelée énergie disponible² E_{dis} , et de l'énergie de séparation d'un neutron du noyau composé³ $S_n(A+1, Z)$. On fait l'hypothèse que l'énergie d'excitation du noyau est distribuée entre tous les nucléons du noyau pendant la durée de vie du noyau composé.

Il y a presque un facteur 10^7 entre le temps de formation du noyau composé (d'environ 10^{-22} s) et la durée de vie du noyau composé (de l'ordre de 10^{-15} s). On considère donc que les voies de sortie et le mode de formation du noyau sont indépendants. Ces modes de désexcitation sont possibles moyennant la conservation des quantités physiques suivantes : nombre de nucléons, charge électrique, "masse-énergie", impulsion, moment cinétique et parité. Les principaux modes de désexcitation jouant un rôle important dans les réacteurs nucléaires sont [Tellier, 1989] :

– réémission d'un neutron. Il y a deux possibilités :

1. la **diffusion élastique** notée **(n,n)** lorsque le noyau résiduel ${}^A_Z X$ est laissé dans son état fondamental : ${}^{A+1}_Z X^* \rightarrow n + {}^A_Z X$
2. la **diffusion inélastique** notée **(n,n')** lorsque le noyau résiduel retourne à son état fondamental par émission de rayonnement γ : $\begin{cases} {}^{A+1}_Z X^* \rightarrow n + {}^A_Z X^* \\ {}^A_Z X^* + \gamma \rightarrow {}^A_Z X \end{cases}$.

Ce type de réaction n'est possible que si l'énergie cinétique du neutron incident est au moins égale à l'énergie du premier niveau excité du noyau cible.

- émission de rayonnement γ . Le noyau redescend sur son état fondamental par émission d'un ou plusieurs γ , avec un spectre discret en énergie dépendant de l'énergie d'excitation, du spin et de la parité. C'est la **capture radiative** notée **(n, γ)**.
- scission du noyau composé en plusieurs morceaux. Le noyau est scindé en deux et, plus rarement, en trois fragments respectivement fission binaire et fission ternaire. Les produits de fissions sont des descendantes des fragments primaires. Cette réaction totale de **fission**, notée **(n,F)**, peut générer entre 0 et 6 neutrons. Si elle a lieu pour des neutrons de très faibles énergies, le noyau est dit fissile. Dans tous les autres cas, la fission dévient significative en dépassant des énergies associées aux barrières de fission. Les réactions partielles de fission produites **(n,nf)**, **(n,2nf)**, ..., sont appelées réactions de deuxième, troisième, quatrième, cinquième et sixième chance. Les seuils de ces réactions partielles pour les noyaux lourds pairs-pairs démarrent aux alentours de 6 MeV

²Si on note m_n la masse du neutron et M la masse du noyau, l'énergie disponible du système neutron/noyau vaut $E_{dis} = \frac{1}{2}\mu v_r^2$. Dans cette formule, $\mu = \frac{m_n M}{M+m_n}$ est la masse réduite et v_r est le module de la vitesse relative du neutron par rapport au noyau.

³L'énergie de séparation du dernier neutron est de l'ordre de 4 - 9 MeV.

et croissent d'une façon régulière. Comme le domaine énergétique des applications en physique de réacteurs est limité à l'intervalle de 10^{-5} eV à 20 MeV, la contribution de toute réaction de fission au-delà de la troisième chance est négligeable. La majeure partie des émissions de neutron par fission est instantanée (émission **prompte**), la partie restante provient de la décroissance β^- de certains produits de fission appelés précurseurs (émission **retardée**⁴).

- émission de particules chargées : protons, deutons, tritons ou particules α . On parle de réactions **(n,p)**, **(n,d)**, **(n,t)** et **(n, α)**.
- émission de plusieurs neutrons. Ce sont les réactions **(n,xn)**, x variant de 2 à 4.

Parmi toutes ces réactions de désexcitation, certaines ne peuvent avoir lieu que si le neutron incident a une énergie minimale : ce sont les **réactions à seuil**.

En neutronique, on distingue trois grandes catégories d'interactions : la **diffusion**, la **fission** et l'**absorption**. Les interactions de diffusion sont : la diffusion potentielle, la diffusion résonnante élastique et inélastique et les réactions (n,xn). Les autres interactions rentrent dans la catégorie de l'absorption : capture radiative, fission et émission de particules chargées. Parmi ces dernières, on distingue la fission pour calculer la source de neutrons par fission.

1.3 Notion de section efficace

La section efficace macroscopique d'un noyau permet d'évaluer le rythme de n'importe quelle réaction nucléaire. Cette grandeur, notée Σ , est définie comme la probabilité $p(s)ds$ qu'une particule subisse une interaction donnée avec un noyau en traversant une épaisseur ds de matière :

$$p(s)ds = \Sigma ds = N\sigma ds, \quad (1.1)$$

où N représente le nombre de noyaux par unité de volume et σ est la section efficace microscopique. Une probabilité étant sans dimension, on en déduit qu'une section efficace macroscopique a les dimensions de l'inverse d'une longueur et qu'une section efficace microscopique a les dimensions d'une surface. Les unités de mesure usuelles en neutronique sont respectivement le cm^{-1} et le barn ($1 \text{ barn} = 10^{-24} cm^2$) pour les sections macroscopiques et les sections microscopiques. Pour un milieu isotrope, les sections efficaces sont seulement fonctions de l'énergie. Si le milieu est anisotrope, la section dépend également de la direction du neutron incident. Dans un milieu isotrope, on appelle libre parcours moyen, noté λ , l'inverse d'une section efficace macroscopique. Cette grandeur mesure la distance moyenne parcourue par la particule avant la première collision.

Lorsque l'on considère la probabilité que le neutron subisse une interaction quelconque, la probabilité d'interaction est proportionnelle à la section macroscopique totale Σ . Si on considère une réaction spécifique ρ , le coefficient de proportionnalité est Σ_ρ . La section efficace totale est égale à la somme de toutes les réactions partielles. En particulier, dans les problèmes de physique de réacteurs, les relations suivantes sont appliquées :

$$\begin{aligned} \Sigma &= \Sigma_a + \Sigma_s, \\ \sigma &= \sigma_a + \sigma_s, \end{aligned}$$

où les indices a, s représentent respectivement l'absorption et la diffusion.

Lorsqu'un milieu est constitué d'un mélange de n noyaux, la section efficace macroscopique est la somme des sections efficaces macroscopiques de chaque noyau :

$$\Sigma = \sum_{x=1}^n \Sigma_x.$$

⁴La plupart des neutrons retardés est émis par décroissance β^- . La seule exception sont les fissions induites par rayonnement γ du deutérium et du béryllium (photoneutrons).

Cette relation suppose qu'il n'y a pas d'interaction entre l'onde du neutron et le réseau atomique ou moléculaire. Cette hypothèse est licite pour des énergies au-dessus de quelques électronvolts et elle peut être en défaut en dessous de 0.1 eV notamment dans les milieux cristallins (Graphite, Beryllium). On dispose donc de sections efficaces spécifiques selon le type de composé considéré.

1.4 Phénomène de résonance

Les mesures des sections efficaces ont montré que, pour certaines énergies du neutron incident, la valeur des sections efficaces est très élevée. On explique ce phénomène par la théorie de formation du noyau composé. En effet, si l'énergie disponible dans le système neutron-noyau est très proche de la distance entre le niveau fondamental et l'un des niveaux excités du noyau, la probabilité de formation du noyau composé est grande [Lynn, 1968]. Ce phénomène est appelé phénomène de résonance.

Selon l'espacement des niveaux excités du noyau composé et la résolution énergétique des moyens de mesure, on distingue trois domaines énergétiques : le **domaine résolu**, le **domaine non résolu** et le **continuum**.

Le premier domaine se situe entre quelques eV et quelques centaines de keV pour les noyaux tel l'uranium 238. Il est caractérisé par la présence de niveaux bien séparés et clairement identifiés lorsqu'on effectue des mesures. Dans ce domaine, la largeur des niveaux est très inférieure à l'espacement moyen des niveaux et chaque résonance est bien détectée. Plus l'énergie augmente, plus les niveaux tendent à devenir indiscernable à cause de la largeur qui croît puisque leur durée de vie se réduit.

Dans le domaine non résolu, situé entre quelques centaines de keV et 1 MeV, l'espacement moyen des niveaux est du même ordre de grandeur que la largeur des niveaux. La résolution des appareils de mesure ne permet plus de discerner chaque résonance y compris avec un refroidissement de la cible à 0 K. Dans ce domaine énergétique, on ne dispose donc que des grandeurs moyennes et des distributions statistiques théoriques (lois de Wigner et distribution du χ^2) validées à partir du domaine résolu.

À plus haute énergie, l'espacement moyen est inférieur à la largeur des niveaux et les résonances se recouvrent mutuellement. Cette zone, appelée continuum, est caractérisée par une variation lente des sections efficaces en fonction de l'énergie. La limite entre domaine résolu et non résolu est uniquement dictée par la résolution des appareils de mesure.

1.5 Formalismes nucléaires

Les formalismes nucléaires sont des modèles physiques servant à reconstruire les sections efficaces [Glasstone et Edlund, 1952], [Blaise et Fort]. Ils sont basés sur la mécanique quantique et font l'hypothèse de formation d'un noyau composé lors d'une interaction nucléaire. Tous ces formalismes sont une simplification du formalisme dit de la "matrice R", qui n'est applicable qu'en réduisant le nombre de voies. Du plus simple au plus général on trouve :

- le formalisme de **Breit et Wigner simple niveau** qui est valable si on peut négliger l'interférence entre niveaux et résonances ;
- le formalisme de **Breit et Wigner multi niveaux** qui prend en compte l'interférence entre les voies mais pas entre les niveaux ;
- le formalisme de **Reich et Moore** qui néglige l'interférence entre les voies gamma de différents niveaux.

On détaille par la suite les formules analytiques du modèle Breit et Wigner simple niveau. Les sections de capture et de fission, dénotée par l'indice i , sont représentées par une

lorentzienne centrée sur l'énergie du pic de la résonance E_0 :

$$\sigma_i(E) = \pi\bar{\lambda}^2 g_j \frac{\Gamma_n \Gamma_i}{(E - E_0)^2 + (\frac{\Gamma}{2})^2},$$

pour les sections de diffusion élastique, on ajoute un terme d'interférence et un terme constant, appelé section potentielle σ_p , donnant :

$$\sigma_s(E) = \pi\bar{\lambda}^2 g_j \frac{\Gamma_n^2}{(E - E_0)^2 + (\frac{\Gamma}{2})^2} + 2\bar{\lambda} g_j \sqrt{\pi\sigma_p} \frac{\Gamma_n(E - E_0)}{(E - E_0)^2 + (\frac{\Gamma}{2})^2} + \sigma_p.$$

La section totale est obtenue par sommation de toutes les réactions possibles pour le noyau. Dans ces formules, on emploie les conventions suivantes :

- $\bar{\lambda}$ est la longueur d'onde réduite du neutron ;
- $g_j = \frac{2j+1}{(2i+1)(2s+1)}$ est le facteur statistique du spin, j est le moment cinétique du noyau composé, i est le moment cinétique du noyau cible et $s = 1/2$ est le spin du neutron ;
- Γ_n , Γ_i et $\Gamma = \Gamma_n + \Gamma_i$ sont les largeurs de diffusion résonnante, de capture radiative et totale. La largeur de diffusion résonnante varie en \sqrt{E} pour les neutrons d'onde s , tandis que la largeur de capture radiative est presque constante en énergie.

Le terme d'interférence est négatif pour des énergies $E < E_0$, ce qui produit une forte chute de la section de diffusion. Le milieu devient transparent aux neutrons pour ces énergies (fenêtre neutronique). La dépendance en $1/\sqrt{E}$ de la longueur d'onde λ fait qu'à très basse énergie et loin de E_0 : la section de capture ou de fission varie en $1/\sqrt{E}$ et la section de diffusion élastique reste presque constante.

Les figures 1.1 et 1.2 montrent respectivement l'allure des sections efficaces pour un noyau résonnant et non résonnant.

La figure 1.1 représente les sections efficaces de capture et de diffusion élastique de l'uranium 238. On peut observer le comportement en $1/v$ de la section efficace à basse énergie et les nombreuses résonances du domaine résolu. Alors que la section de capture est une fonction symétrique autour des pics des résonances, la section efficace de diffusion est dissymétrique. La section totale qui en résulte est une fonction symétrique autour des premières résonances et de plus en plus dissymétrique à plus haute énergie. Dans le domaine non résolu, on représente la seule valeur moyenne de la section efficace.

La figure 1.2 décrit la section efficace de diffusion de l'hydrogène. Cet isotope est le noyau le plus léger, sa section efficace est très régulière.

1.6 Effet Doppler

Les rappels de cette section ont été en partie repris de l'ouvrage d'Alain Hebert [Hébert, 1983].

Les différents formalismes nucléaires permettent généralement d'obtenir l'expression analytique de la section efficace à la température absolue de 0 K.

Pour prendre en compte l'effet de l'agitation thermique, on suppose que le noyau possède le spectre d'un gaz libre dans un milieu isotrope à la température absolue T . Ce spectre suit la loi des vitesses de Maxwell-Boltzmann :

$$P(\vec{V}, T) d\vec{V} = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{3/2} \exp(-\alpha V^2) d\vec{V},$$

où $\alpha = \frac{M}{2kT}$, k est la constante de Boltzmann, M la masse du noyau et \vec{V} le vecteur de la vitesse du noyau, de module V . Pour certaines compositions dans l'intervalle énergétique situé

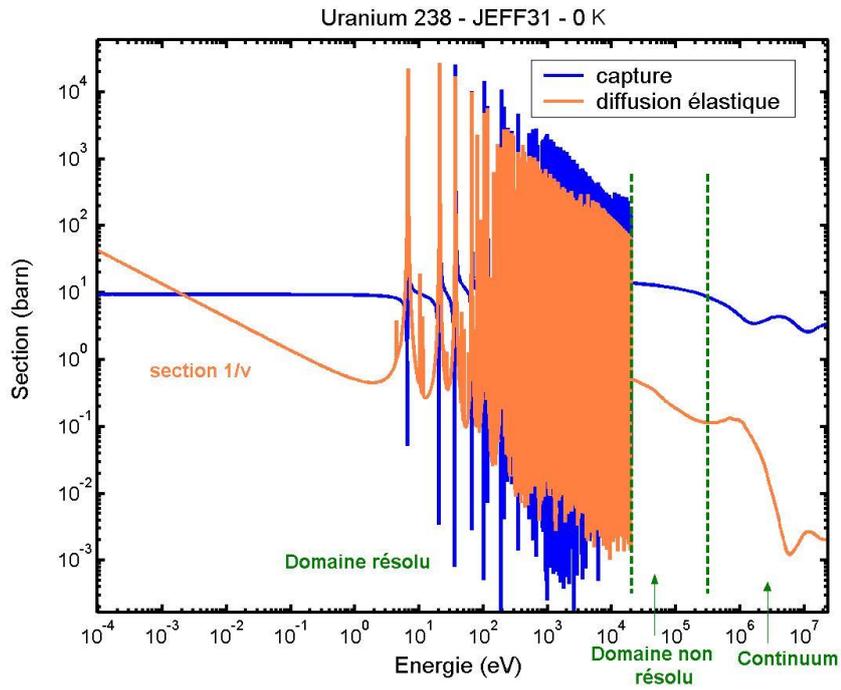


FIG. 1.1: Section efficace de l'uranium 238.

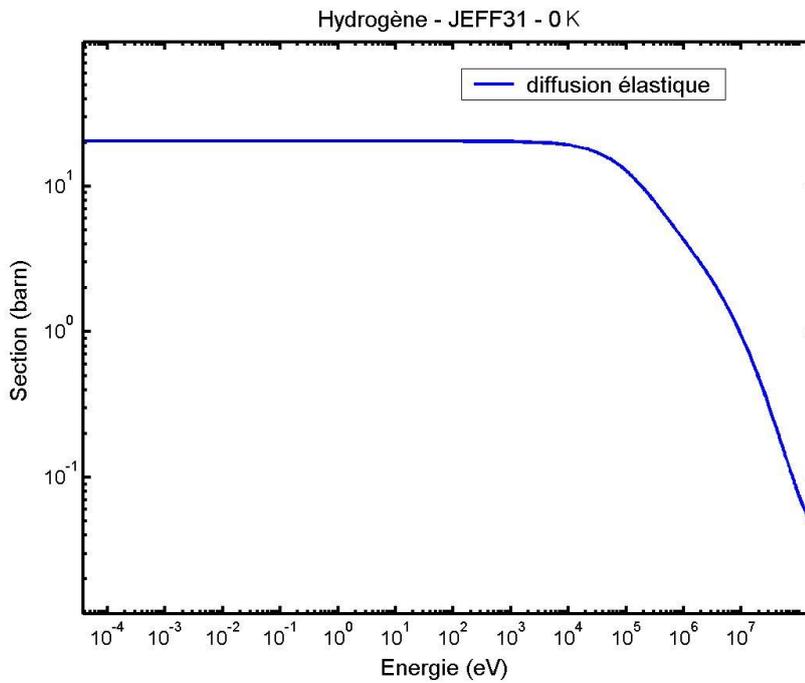


FIG. 1.2: Section efficace de l'hydrogène libre.

entre 10^{-4} et 5 eV, des modèles plus adaptés sont appliqués comme le modèle de Nelkin pour l'eau et le deutérium et le modèle cristallin pour le graphite⁵.

La section efficace effective à la température T , $\bar{\sigma}(v, T)$, est définie comme la section efficace qui préserve, pour un noyau cible immobile, les taux de réaction obtenus avec la vraie section efficace. Puisque le taux de réaction est proportionnel au produit de la vitesse par la section efficace, on a :

$$v\bar{\sigma}(v, T) = \int |\vec{v} - \vec{V}| \sigma(|\vec{v} - \vec{V}|) P(\vec{V}, T) d\vec{V},$$

où \vec{v} est la vitesse du neutron incident. Cette formule implique qu'une section efficace nucléaire en $1/v$ n'est pas affectée par l'agitation thermique.

En intégrant l'expression de la section effective thermique, on parvient à la formule suivante :

$$\bar{\sigma}(E, T) = \int_0^\infty \sigma(E') S(E, E', T) dE',$$

$$S(E, E', T) = \frac{1}{\Delta(E)\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{E'}{E}} \left[\exp\left(-\frac{A}{kT} (\sqrt{E} - \sqrt{E'})^2\right) - \exp\left(-\frac{A}{kT} (\sqrt{E} + \sqrt{E'})^2\right) \right],$$

où $\Delta(E) = 2\sqrt{\frac{EkT}{A}}$ est la largeur Doppler, $E' = \frac{A+1}{A}E_{dis}$ est l'énergie disponible dans le référentiel du laboratoire et $S(E, E', T)$ représente le noyau Doppler. Comme l'expression du noyau Doppler est complexe et afin d'en comprendre l'effet, il est possible de négliger la deuxième exponentielle et de faire un développement limité du premier exposant, car seules les énergies autour du pic de la résonance ont une contribution significative.

En faisant ces simplifications du noyau Doppler et en remplaçant $\sigma(E')$ par une expression analytique d'un formalisme nucléaire, on peut calculer la section $\bar{\sigma}(E, T)$. Appliquons le formalisme Breit et Wigner simple niveau et introduisons la fonction $\beta(E) = 2\Delta(E)/\Gamma(E)$. La section efficace élargie Doppler qui en découle satisfait les propriétés suivantes :

- à température nulle ($\beta \rightarrow 0$), elle tend vers la section efficace à 0 K ;
- lorsque on s'éloigne suffisamment du pic de la résonance ($\beta \rightarrow \infty$), elle est indépendante de la température.

On peut aussi montrer que l'effet Doppler "déforme" la courbe de la section efficace de la façon suivante :

- il diminue l'amplitude et il augmente la largeur, en passant d'une largeur Γ à une largeur $\Gamma + \Delta(E)$ à mi-hauteur ;
- le maximum de la section efficace est décalé vers les hautes énergies ;
- l'aire sous la courbe est indépendante de la température.

En général, le phénomène de l'élargissement Doppler est remarquable sur tous les noyaux dont la largeur des résonances est faible comparée à $\Delta(E)$ (noyaux lourds et certains noyaux intermédiaires). Les figures 1.3 et 1.4 montrent les effets de ce phénomène sur un noyau lourd (l'uranium 238) et un noyau léger résonnant (le sodium 23). Alors qu'on observe une modification de la section efficace de l'uranium 238, la section efficace du sodium 23 reste inchangée.

⁵Ce modèle représente le phénomène de diffusion cohérente (pics de Bragg).

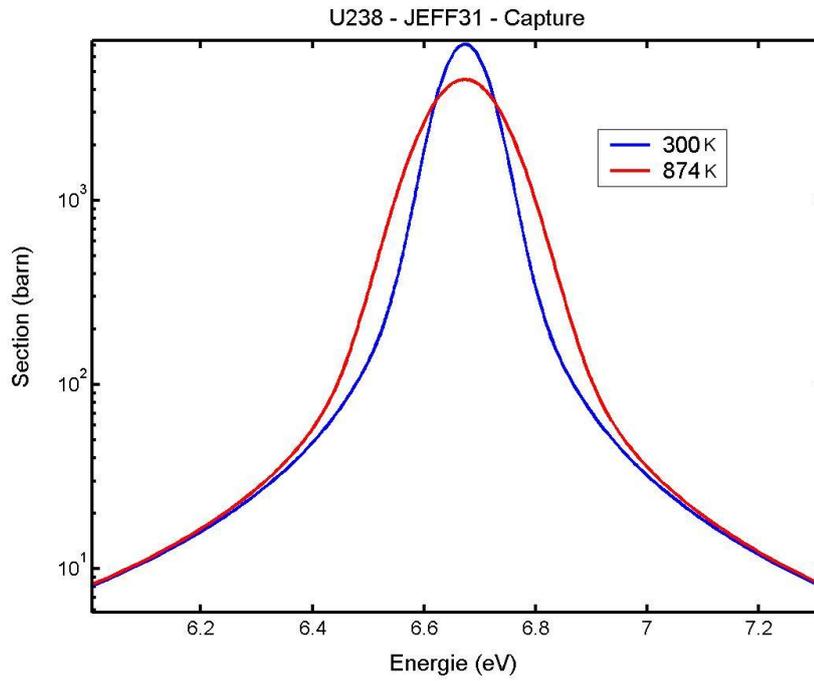


FIG. 1.3: Illustration de l'effet Doppler sur la résonance à 6,67 eV de l'uranium 238.

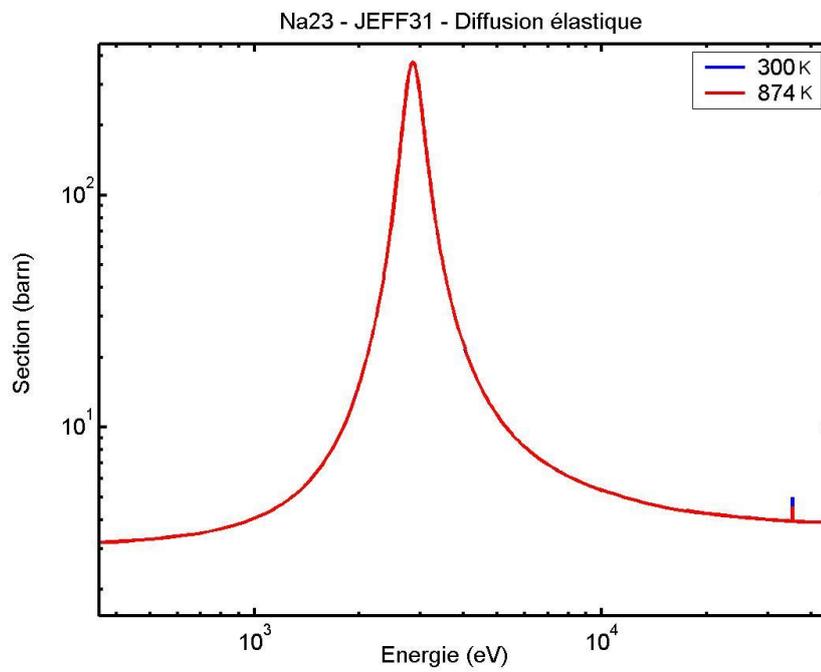


FIG. 1.4: Illustration de l'effet Doppler sur la résonance à 3 keV du sodium 23.

Chapitre 2

Théorie du transport des neutrons

2.1 Grandeurs neutroniques

La population neutronique dans le cœur d'un réacteur nucléaire ($\approx 10^8$ neutrons/cm³) est très élevée mais en même temps peu dense par rapport à celle de la matière dans laquelle les neutrons diffusent ($\approx 10^{23}$ atomes/cm³). De ce fait, on peut considérer la population neutronique comme un gaz raréfié en évolution, sur lequel un traitement statistique est effectué pour évaluer un effectif moyen sur certains critères [Bussac et Reuss, 1985].

Pour repérer complètement un neutron, il faut connaître les variables suivantes :

- sa position dans l'espace \vec{r} (trois variables),
- le module de la vitesse ou de l'énergie cinétique $E = \frac{1}{2}m_n v^2$, qui caractérise son mouvement,
- la direction angulaire $\vec{\Omega}$ (deux variables),
- l'instant t considéré.

La grandeur utilisée pour décrire la population neutronique d'un point de vue statistique est la densité neutronique en phase $n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$. Elle est définie telle que

$$n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) d^3r dE d^2\Omega$$

soit le nombre de neutrons à l'instant t , dans l'élément de volume d^3r entourant le point \vec{r} , dans l'intervalle énergétique dE autour de la valeur E , dans l'élément d'angle solide $d^2\Omega$ autour de la direction $\vec{\Omega}$. Plus usuellement, on utilise le **flux neutronique en phase**, définie par :

$$\psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = v n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t),$$

et le **flux neutronique**, correspondant à :

$$\Phi(\vec{r}, E, t) = \int_{4\pi} \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) d^2\Omega,$$

où 4π est la mesure de la sphère unité des directions $\vec{\Omega}$.

Pour définir une équation de bilan on utilise les grandeurs suivantes : les taux de réaction, les sources, le courant et le coefficient de multiplication effectif.

Le **taux de réaction** $T_\rho(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$ exprime le nombre de réactions de type ρ par unité de temps, de volume, d'énergie et d'angle solide. Puisque la probabilité d'interaction ρ d'un neutron dans la matière pendant l'intervalle de temps dt est $\Sigma_\rho ds = \Sigma_\rho v dt$, pour une densité en phase de neutrons n , le taux de réaction est donné par :

$$T_\rho(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) v \Sigma_\rho(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = \Sigma_\rho(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t).$$

Par analogie au flux neutronique, on définit aussi le taux de réaction global par :

$$T_\rho(\vec{r}, E, t) = \int_{4\pi} \Sigma_\rho(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) d^2\Omega.$$

Les **sources** de neutrons présentes dans un milieu sont représentées par une fonction $Q_{ext}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$ telle que : $Q_{ext}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)d^3rdEd^2\Omega dt$ soit le nombre de neutrons émis dans l'élément infinitésimal $d^3rdEd^2\Omega dt$.

Le **courant** donne le nombre de neutrons traversant une surface d'aire unitaire par unité de temps. Si on considère un élément d^2r sur une surface de normale \vec{n} au point \vec{r} , le nombre de neutrons de vitesse v et de direction $\vec{\Omega}$ qui vont le traverser pendant l'intervalle de temps dt vaut :

$$n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)vdt d^2r \vec{\Omega} \cdot \vec{n} = \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)\vec{\Omega} \cdot \vec{n} d^2r dt.$$

Cette expression nous amène à définir la fonction vectorielle courant \vec{J} suivante :

$$\vec{J}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)\vec{\Omega},$$

qui, multipliée scalairement par $\vec{n}d^2r$, exprime le nombre de neutrons d'énergie E et de direction $\vec{\Omega}$ traversant la surface d^2r par unité de temps. Ce produit scalaire est positif pour un courant dans la direction de la normale \vec{n} (normalement sortante) et négatif dans le cas contraire.

Enfin, le **coefficient de multiplication effectif**, noté k_{eff} , est par définition le nombre moyen de neutrons générés par un neutron issu des fissions. Il est calculé comme quotient entre le nombre de neutrons produits par fission et le nombre de neutrons disparaissant du système.

Un neutron peut disparaître du système soit à cause des réactions d'absorption A soit par fuite F . On comptabilise l'émission de x neutrons (x étant supérieur à 1) des réactions (n, xn) dans le taux d'excès Ex . Si on note avec P le nombre de neutrons produits par fission, le coefficient de multiplication effectif est donné par :

$$k_{eff} = \frac{P}{A - Ex + F}.$$

Selon la valeur du coefficient de multiplication effectif, on fait les distinctions suivantes :

- si $k_{eff} < 1$ le nombre de neutrons est décroissant au cours de la réaction en chaîne et le système est dit sous-critique ;
- si $k_{eff} = 1$ le nombre de neutrons est constant au cours de la réaction en chaîne et le système est dit critique ;
- si $k_{eff} > 1$ le nombre de neutrons est croissant au cours de la réaction en chaîne et le système est dit sur-critique.

Pour connaître la variation de la population neutronique en fonction du temps, on définit la réactivité ρ . Elle évalue la différence du coefficient de multiplication effectif par rapport à sa valeur en condition stationnaire critique. Elle s'exprime par :

$$\rho = \frac{k_{eff} - 1}{k_{eff}},$$

et est mesuré en pcm (pour cent mille).

2.2 Équation de transport de Boltzmann

L'équation de transport de Boltzmann exprime la relation de bilan de la population neutronique d'un système étudié [Reuss, 2003]. Elle est déduite en effectuant un bilan du nombre de neutrons entre les instants t et $t + dt$ dans un élément de phase $d^3rdEd^2\Omega$:

$$n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t + dt) - n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = \frac{\partial}{\partial t} n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) d^3rdEd^2\Omega dt.$$

Comme dans la plupart des systèmes nucléaires les matériaux solides sont polycristallins, formés de cristaux orientés aléatoirement de petites tailles devant le libre parcours moyen des neutrons, l'hypothèse de milieu isotrope est acceptable. On utilise donc des sections efficaces indépendantes de la direction du neutron incident et moyennées sur la sphère unité des directions angulaires $\bar{\sigma}_\rho(E) = 1/4\pi \int_{4\pi} \sigma(E, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega}$.

Pour écrire le bilan neutronique on néglige les collisions neutron-neutron, car on assimile la population des neutrons à un gaz raréfié. En plus, comme expliqué dans la section 1.1, le temps de vie d'un neutron dans un réacteur est beaucoup plus faible que son temps de désintégration β , c'est pourquoi cette particule est considérée stable. La variation de la population neutronique est donc réglée par quatre phénomènes physiques : les fuites, la disparition par choc, les arrivées par transfert et la source.

Sous les hypothèses ainsi établies, en considérant un volume D quelconque, délimité par une surface S , l'équation linéaire de Boltzmann en milieu isotrope pour les neutrons s'exprime par :

$$\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) + L\psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = H\psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) + F\Phi(\vec{r}, E, t) + Q_{ext}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) \quad (2.1)$$

où L, H, F sont des opérateurs explicités ci-dessous.

L'opérateur L est donné par :

$$\Sigma(\vec{r}, E, t) + \nabla \cdot \vec{\Omega}, \quad (2.2)$$

il prend en compte la disparition par choc et les fuites. Ces dernières sont déduites en utilisant le théorème de la divergence de Gauss pour calculer les courants sortants et rentrants à travers les surfaces élémentaires de l'élément de phase $d^3rdEd^2\Omega$.

Le terme H comptabilise les arrivées par transfert, il est donné par :

$$H\psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = \sum_x \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d^2\Omega' \Sigma_{s,x}(\vec{r}, E', t) p_{s,x}(E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) \psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}', t), \quad (2.3)$$

où $\Sigma_{s,x}(\vec{r}, E', t)$ est la section macroscopique de diffusion (cf. 1.2) et $p_{s,x}(E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega})$ est la probabilité pour un neutron d'être transféré de l'énergie E' à l'énergie E et de la direction $\vec{\Omega}'$ à la direction $\vec{\Omega}$. Il faut observer que cette probabilité dans un milieu isotrope dépend uniquement du produit scalaire entre les directions d'arrivée et de départ.

L'opérateur F modélise la production de neutrons par les fissions et il est donné par :

$$F\Phi(\vec{r}, E, t) = \frac{1}{4\pi} \sum_{x \in f_{iss}} \int_0^\infty dE' \chi_{f,x}(E, E') (\nu \Sigma)_{f,x}(\vec{r}, E', t) \Phi(\vec{r}, E', t). \quad (2.4)$$

Dans cette expression, $\chi_{f,x}(E, E')$ est le spectre d'émission des neutrons par fission, ν_x le nombre moyen de neutrons produits par fission et $\Sigma_{f,x}$ est la section macroscopique de fission. La somme en x porte sur tous les noyaux fissiles dans le domaine D . Cette formulation suppose que l'émission des neutrons par fission est isotrope et que le spectre de fission $\chi_{f,x}(E, E')$ dépend de l'énergie du neutron incident. Cette dépendance est faible dans le domaine énergétique entre 0 et 2 keV, tandis qu'elle ne peut pas être négligée au-dessus de 6 MeV à cause des réactions de deuxième et troisième chance de fission (cf. 1.2).

L'équation (2.1) est intégral-différentielle au premier ordre, intégrale par rapport aux variables E et $\vec{\Omega}$ et différentielle par rapport à l'espace \vec{r} et au temps t .

Dans le cadre de la simulation du fonctionnement d'un réacteur nucléaire, on recherche généralement une solution stationnaire du problème de transport et les éventuelles variations temporelles ne sont généralement traitées que comme une suite d'états stationnaires.

Une telle solution de l'équation de Boltzmann peut exister soit lorsque la source est autonome soit lorsqu'une condition critique est assurée. Dans ce dernier cadre, on considère l'équation :

$$L\psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = H\psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \frac{1}{k_{eff}} F\Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}), \quad (2.5)$$

où les notations de (2.1) sont utilisées.

Un ensemble non triviale de solutions de l'équation (2.5) existe pour certaines valeurs discrètes du k_{eff} . Ces dernières sont obtenues par résolution d'un problème à valeur propre, où k_{eff} représente la valeur propre et ψ est le vecteur propre associé. La solution fondamentale est le vecteur propre associé à la plus grande valeur du k_{eff} . Elle est la seule solution physique du problème, c'est à dire positive dans tout l'espace des phases où l'équation (2.5) est résolue.

Dans la suite de ce document, on discute uniquement de la résolution de l'équation stationnaire de Boltzmann.

2.3 Formulation intégrale de l'équation de transport

On peut obtenir une formulation de type intégrale équivalente à l'équation de transport (2.5) [Lewis et Miller, 1984]. Prenons l'équation de transport (2.5), substituons la dérivée directionnelle le long de la direction du trajet du neutron à l'opérateur $\vec{\Omega} \cdot \nabla$. On obtient la formulation suivante :

$$\frac{d\psi(\vec{r} + s\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega})}{ds} + \Sigma(\vec{r} + s\vec{\Omega}, E)\psi(\vec{r} + s\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}) = Q(\vec{r} + s\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}),$$

où s est la distance parcourue par le neutron et $Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$ est la densité d'émission, grandeur qui contient les contributions des transferts, de la fission et d'une éventuelle source externe.

En faisant le changement de variable $R = -s$ et en intégrant le long de la trajectoire du neutron on parvient à la formulation intégrale de l'équation de transport :

$$\psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \psi_{in}(\vec{r} - R\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}) \exp^{-\tau(\vec{r}, \vec{r} - R\vec{\Omega}, E)} + \int_0^R dR' Q(\vec{r} - R'\vec{\Omega}, \vec{\Omega}, E) \exp^{-\tau(\vec{r}, \vec{r} - R'\vec{\Omega}, E)}, \quad (2.6)$$

où on a défini la longueur optique $\tau(\vec{r}, \vec{r} - R'\vec{\Omega}, E) = \int_0^{R'} \Sigma(\vec{r} - R''\vec{\Omega}, E) dR''$ et $\psi_{in}(\vec{r} - R\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega})$ est le flux rentrant dans le système. En faisant tendre R vers l'infini, le flux neutronique devient :

$$\psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \int_0^\infty dR' \left[Q'(\vec{r} - R'\vec{\Omega}, \vec{\Omega}, E) + Q_{ext}(\vec{r} - R'\vec{\Omega}, \vec{\Omega}, E) \right] \exp^{-\tau(\vec{r}, \vec{r} - R'\vec{\Omega}, E)}, \quad (2.7)$$

où Q' représente la densité d'émission, dépourvue de la source externe. En remplaçant le flux neutronique par la densité de collision $\Psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \Sigma(\vec{r}, E)\psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$, l'équation (2.7) peut être réécrite sous la forme :

$$\Psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \int_{4\pi} d^2\Omega' \int_0^\infty dE' K(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) \Psi(\vec{r}', E', \vec{\Omega}') + S_1(\vec{r}, E, \vec{\Omega}), \quad (2.8)$$

où les notations suivantes ont été employées :

- $T(\vec{r}, E) = \Sigma(\vec{r}, E) \int_0^\infty dR' \exp^{-\tau(\vec{r}, \vec{r} - R'\vec{\Omega}, E)}$ opérateur de transport ;
- $C(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') = \frac{\sum_x \Sigma_{s,x}(\vec{r}, E') p_{s,x}(E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega})}{\Sigma(\vec{r}, E)}$ noyau de l'opérateur de collision ;

- $P(\vec{r}, E' \rightarrow E) = \frac{1}{4\pi k_{eff}} \frac{\sum_{x \in fiss} \chi_{f,x}(E, E') (\nu \Sigma)_{f,x}(\vec{r}, E')}{\Sigma(\vec{r}, E)}$ noyau de l'opérateur de fission ;
- $K = T(C + P)$ opérateur de transfert ;
- $S_1 = TQ_{ext}$ source de première collision.

2.4 Résolution de l'équation de transport

La résolution de l'équation de transport s'appuie sur deux approches différentes : une approche déterministe et une approche statistique. La première résout l'équation de transport dans un format discrétisé en partant soit de la formulation intégral-différentielle (comme les méthodes S_N et nodales) soit de la formulation intégrale (méthode des probabilités de collision et des caractéristiques). La deuxième approche est la méthode de Monte Carlo, elle donne accès à une solution probabiliste en reproduisant statistiquement les phénomènes physiques d'interaction neutron-matière. Par rapport aux méthodes déterministes, elle nécessite un temps de simulation beaucoup plus élevé, mais elle n'effectue aucune discrétisation de l'équation de transport pour des problèmes stationnaires à température uniforme ⁶, ce qui en fait un instrument de référence pour toute méthode déterministe.

Par la suite, on décrira succinctement d'abord la discrétisation de l'équation de transport effectuée par les méthodes déterministes pour sa résolution ensuite on donne un aperçu de la méthode de Monte Carlo.

2.4.1 Calcul de valeur propre

La résolution conjointe du flux neutronique et de la valeur propre dans l'équation (2.5) se fait par itérations (dites externes ou de "puissance"). À l'itération n , le flux neutronique est calculé en utilisant le flux neutronique et les sources de fission issues de l'itération précédente $n - 1$:

$$L\psi^n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = H\psi^n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \frac{1}{k_{eff}^{n-1}} F\Phi^{n-1}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}). \quad (2.9)$$

En intégrant (2.5) et (2.9) sur le domaine d'énergie, d'angle et d'espace, on obtient les relations suivantes :

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty dE \int_{4\pi} d^2\Omega \int_0^\infty d^3r \left[L\psi^n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) - H\psi^n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \right] \\ &= \frac{1}{k_{eff}^n} \int_0^\infty dE \int_{4\pi} d^2\Omega \int_0^\infty d^3r F\Phi^n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \\ & \int_0^\infty dE \int_{4\pi} d^2\Omega \int_0^\infty d^3r \left[L\psi^n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) - H\psi^n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \right] \\ &= \frac{1}{k_{eff}^{n-1}} \int_0^\infty dE \int_{4\pi} d^2\Omega \int_0^\infty d^3r F\Phi^{n-1}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}), \end{aligned}$$

d'où on déduit la relation pour mettre à jour la valeur propre entre deux itérations :

$$k_{eff}^n = k_{eff}^{n-1} \frac{\int_0^\infty dE \int_{4\pi} d^2\Omega \int_0^\infty d^3r F\Phi^n(\vec{r}, E, \vec{\Omega})}{\int_0^\infty dE \int_{4\pi} d^2\Omega \int_0^\infty d^3r F\Phi^{n-1}(\vec{r}, E, \vec{\Omega})}. \quad (2.10)$$

⁶des discrétisations sont effectuées pour résoudre les équations de transport pour des problèmes d'évolution ou avec un champ de températures.

2.4.2 Discrétisation de la variable énergétique

La discrétisation de la variable énergétique conduit à l'approximation multigroupe, qui consiste à remplacer les fonctions continues en énergie (sections efficaces et flux neutronique), par des valeurs constantes dans chaque intervalle énergétique, appelé groupe. Le critère utile pour calculer ses grandeurs moyennes est le respect des taux de réactions dans chaque intervalle énergétique g [Sanchez, 2000] :

$$\sigma_\rho^g(\vec{r}) = \frac{\int_g dE \sigma_\rho(E) \Phi(\vec{r}, E)}{\int_g dE \Phi(\vec{r}, E)}.$$

Malheureusement, cette définition est purement formelle, car elle nécessite de connaître le flux neutronique qui est l'inconnue du problème. On aborde dans le chapitre 3 toutes les étapes de modélisation pour constituer l'ensemble des données discrétisées en énergie (bibliothèque multigroupe). On se souviendra qu'une des principales erreurs, non contrôlables par l'utilisateur du code de transport, vient de l'approximation multigroupe.

Le système d'équations qui découle de l'approximation multigroupe est caractérisé par une structure particulière, qu'on peut subdiviser en trois grandes régions : le domaine **rapide**, situé entre 300 keV et 20 MeV, le domaine **épithermique** situé entre la coupure thermique et 300 keV et le domaine de la **thermalisation**, situé entre 10^{-4} eV et la coupure thermique. La coupure thermique est l'énergie de seuil au-delà de laquelle la remontée en énergie des neutrons après choc est négligeable. Elle est fixée dans le code APOLLO2 à 4 eV. Les domaines rapide et épithermique sont donc caractérisés par une perte d'énergie du neutron après chaque choc. Le domaine rapide se distingue du domaine épithermique par l'apparition des neutrons issus de fissions. Aussi, le domaine épithermique est-il également appelé domaine du ralentissement. Dans ces deux zones énergétiques, le système d'équations est résolu en partant du groupe de plus haute énergie jusqu'à la coupure par une résolution en "cascade" du fait que le profil des matrices du système est triangulaire inférieur. Dans le domaine thermique, par contre, les collisions élastiques et inélastiques au sein du milieu cristallin ou moléculaire permettent aux neutrons incidents d'avoir un gain en énergie. Dans ce cas, le profil des matrices du système est plein et la résolution se fait par itérations successives avec un algorithme de Gauss-Seidel.

La forme de l'équation du transport résolue sur chaque groupe énergétique est donnée par :

$$L^g \psi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = (H\psi)^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \frac{1}{k_{eff}} (F\Phi)^g(\vec{r}) + Q_{ext}^g(\vec{r}, \vec{\Omega}), \quad (2.11)$$

où :

- $\psi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \int_g dE \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$ est le flux multigroupe,
- $L^g = \vec{\Omega} \cdot \nabla + \Sigma_g$ est l'opérateur de transport dans le groupe g ,
- $(H\psi)^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \sum_{g'} \sum_x \int_{4\pi} d^2\Omega' \Sigma_{s,x}^{g'}(\vec{r}) p_{s,x}^{g,g'}(\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \psi^{g'}(\vec{r}, \vec{\Omega}')$ est l'opérateur de transfert,
- $(F\Phi)^g(\vec{r}) = \sum_{x \in fiss} \sum_G \frac{\chi_{f,x}^{gG}}{4\pi} \sum_{g' \in G} \nu \Sigma_{f,x}^{g'}(\vec{r}) \Phi^{g'}(\vec{r})$ est la source de fission,
- Q_{ext}^g est la source externe.

2.4.3 Discrétisation des variables angulaires et spatiales

La discrétisation des variables angulaires et spatiales est effectuée en partitionnant le domaine spatiale D et la sphère unitaire des directions angulaires S^2 . Toutes les méthodes numériques recherchent la solution du flux neutronique sous une représentation discrète de

la forme :

$$\psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \sum_{\alpha, d} f_{\alpha}(\vec{r}) g_d(\vec{\Omega}) \psi_{\alpha, d} \quad \forall (\vec{r}, \vec{\Omega}) \in D \times S^2,$$

où $\psi(\vec{r}, \vec{\Omega})$ représente le flux dans un groupe g quelconque et où α et d sont respectivement les indices de la région spatiale et du domaine angulaire. Le schéma de résolution est basé sur un calcul itératif de la source de collision dans un groupe d'énergie (itérations internes) :

$$L\psi^n(\vec{r}, \vec{\Omega}) = U\psi^{n-1}(\vec{r}, \vec{\Omega}) + q^{n-1}(\vec{r}, \vec{\Omega}), \quad (2.12)$$

où n est l'indice des itérations dans le groupe, $U\psi$ sont les transferts dans le groupe et le terme $q(\vec{r}, \vec{\Omega})$ comprend la source de fission, le transfert des autres groupes et la source externe :

$$q^{n-1}(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{1}{k_{eff}} F\psi^{n-1}(\vec{r}, \vec{\Omega}) + M\psi^{n-1}(\vec{r}, \vec{\Omega}) + Q_{ext}(\vec{r}, \vec{\Omega}).$$

La variable angulaire

Négligeons pour l'instant la dépendance spatiale du flux angulaire et analysons la dépendance en angle du flux. La représentation angulaire, comme nous l'avons dit, est approchée par une série limitée de fonctions :

$$\begin{aligned} \psi(\vec{\Omega}) &= \sum_d g_d(\vec{\Omega}) \psi_d \quad \forall (\vec{\Omega}) \in S^2 \\ \psi_d &= \int_{4\pi} d^2\Omega \psi(\vec{\Omega}) g_d(\vec{\Omega}). \end{aligned}$$

Deux types de résolutions numériques sont utilisées : les méthodes P_N et S_N .

Dans la méthode P_N le flux angulaire est développé sur une série tronquée d'harmoniques sphériques [Lewis et Miller, 1984]. Le flux est projeté sur une base de fonctions et les grandeurs caractéristiques sont les moments angulaires du flux, composants du flux angulaire sur la base d'harmoniques sphériques. Le système d'équations à résoudre comprend un couplage local entre les moments du flux angulaire et un couplage spatial entre les régions voisines via les fuites $\vec{\Omega} \cdot \nabla \psi$.

La méthode S_N en revanche consiste à donner un ensemble discret de directions et de poids, correspondant à une formule de quadrature (par exemple Gauss-Legendre). L'équation est résolue pour chaque direction et la source de collision est reconstruite à partir des moments angulaires obtenus par projection sur les harmoniques sphériques. La méthode S_N est une méthode collocative, c'est-à-dire que le flux angulaire est représenté par une collection discrète de valeurs.

Nous pouvons donc distinguer les deux méthodes de la manière suivante :

$$g_d(\vec{\Omega}) = \begin{cases} A_d(\vec{\Omega}) & P_N \\ \delta(\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}_d) & S_N \end{cases}$$

avec :

- d indique à la fois l'indice des directions angulaires pour la méthode S_N ou l'ordre de l'harmonique sphérique pour la méthode P_N ,
- $A_d(\vec{\Omega}_d)$ est l'harmonique sphérique d'ordre d , où on suppose avoir ordonné les harmoniques sphériques de manière à substituer le double indice k, l par le seul indice d ,
- $\delta(\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}_d)$ est la fonction Delta de Placzek, $\int_{4\pi} \delta(\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}_d) \psi(\vec{\Omega}) = \psi(\vec{\Omega}_d)$
- $\vec{\Omega}_d$ est une direction angulaire.

La variable spatiale

Plusieurs méthodes de discrétisation spatiale existent. La plupart de ces méthodes sont de type projectif, i.e. le flux est développé dans des sous domaines homogènes, partitionnant le domaine D , sur une base de fonctions. Elles emploient une équation de bilan, qui sert à calculer le flux moyen (ou volumique) dans chaque domaine, et une équation de transmission pour propager le flux à travers les sous domaines. Le flux dans un sous domaine D_α et sur une surface Γ_α est discrétisé comme suit :

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{G_\alpha} f_\alpha^i(\vec{r}) \psi_\alpha^i \quad \forall r \in D_\alpha,$$

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{G_{S,\alpha}} f_{S,\alpha}^i(\vec{r}) \psi_{S,\alpha}^i \quad \forall r \in S_\alpha,$$

où l'indice α est l'indice du sous-domaine, G_α et $G_{S,\alpha}$ sont respectivement les nombres de degrés de liberté associés au sous-domaine D_α et à sa surface S_α . Les coefficients ψ_α^i et $\psi_{S,\alpha}^i$ sont les moments spatiaux du flux, qui sont donnés par :

$$\psi_\alpha^i = \int_{D_\alpha} d^3r f_\alpha^i(\vec{r}) \psi(\vec{r}),$$

$$\psi_{S,\alpha}^i = \int_{\Gamma_\alpha} d^2r f_{S,\alpha}^i(\vec{r}) \psi(\vec{r}),$$

si la base de développement est orthonormale. Ces deux opérateurs sont appelés opérateurs de projection de volume et de surface.

Le système d'équations est obtenu par projection des équations de bilan et de transmission sur cette base, via les opérateurs de projection de volume et de surface, et les moments obtenus sont les inconnues à calculer. À cette classe de méthodes appartient les méthodes nodales, les méthodes des caractéristiques sur des domaines structurés et non structurés et la méthode des probabilités de collision [Sanchez, 1979]. On trouve en annexe A la dérivation des équations de la méthode des probabilités de collision évoquée dans une partie du manuscrit (cf. 3.5).

2.4.4 Algorithme général

Pour récapituler, les grandes étapes de la résolution numérique de l'équation de Boltzmann sont :

1. boucle sur les groupes g d'énergie
 - (a) résolution itérative dans un groupe g de l'équation multigroupe (2.12) pour toutes directions angulaires $d \in S^2$ et régions α de l'espace D
 - (b) mise à jour de la source de collision dans le groupe g
2. mise à jour de la source de fission

On itère le processus jusqu'à convergence de la valeur propre.

2.4.5 La méthode de Monte Carlo

La méthode de Monte Carlo résout l'équation de transport intégrale (2.8) :

$$\Psi(P) = \int_M K(P' \rightarrow P) \Psi(P') dP' + S_1(P), \quad (2.13)$$

où P et P' représentent deux points dans l'espace de phase M union des domaines d'énergie, d'espace et d'angle du problème neutronique.

On montre que $\Psi(P)$ peut être exprimée par le développement en série de Neumann :

$$\Psi(P) = \sum_{n=0}^{\infty} \Psi_n(P), \quad (2.14)$$

avec :

$$\Psi_1(P) = S_1(P) \quad (2.15)$$

$$\Psi_2(P) = \int_M S_1(P) K(P_1 \rightarrow P) dP_1 \quad (2.16)$$

$$\Psi_n(P) = \int_M S_1(P) K(P_1 \rightarrow P_2) dP_1 \int_M K(P_2 \rightarrow P_3) dP_2 \dots \int_M K(P_{n-1} \rightarrow P) dP_{n-1}. \quad (2.17)$$

Chaque terme a l'interprétation physique suivante :

- $\Psi_1(P)$ est la contribution à $\Psi(P)$ des particules issues directement de la source S_1 ,
- $\Psi_2(P)$ est la contribution à $\Psi(P)$ des particules ayant subi une collision,
- $\Psi_n(P)$ est la contribution à $\Psi(P)$ des particules ayant subi $n - 1$ collisions.

Comme le processus de propagation des neutrons dans la matière est de type Markovien, l'état de la particule à une étape n ne dépend que de l'état à $n - 1$, ce qui rend le calcul des termes $\Psi_n(P)$ cumulatif.

La formulation (2.14) est à la base de la résolution par la méthode de Monte Carlo. Cette méthode reproduit l'histoire de N particules en traçant leurs trajectoires dans l'espace de phase de la naissance à la disparition. Grâce à ce processus, on cumule pour chaque particule n les points de collisions $\{P_{n,1} \dots P_{n,K(n)}\}$, où K est le nombre total de collision de l'éniesième particule.

Pour effectuer cette simulation, on associe à chaque événement une variable aléatoire et on choisit celui-ci selon des densités de probabilité, conformes aux caractéristiques physiques du problème à étudier (distribution spatiale, spectre en énergie, distribution angulaire) et aux lois physiques d'interaction neutron-matière. On répète l'histoire de N_b paquets de particules dits batches, chacun constitué de N_p particules. Les grandeurs physiques souhaitées ou réponses X sont déduites en moyennant sur N particules les estimateurs W :

$$X_N = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \sum_{k=1}^{K(n)} W(x_{n,k}), \quad (2.18)$$

et les variances associées à chacune de ces réponses $\sigma_{X_N}^2$ sont approchées par :

$$\sigma_{X_N}^2 \approx \frac{1}{N(N-1)} \sum_{n=1}^N \sum_{k=1}^{K(n)} [X(x_{n,k}) - X_N]^2. \quad (2.19)$$

Comme les trajectoires de chaque particule sont indépendantes, la loi des grands nombres nous garantit que :

$$\lim_{N \rightarrow \infty} X_N = X, \quad (2.20)$$

et le théorème central - limite permet d'affirmer que X_N suit une répartition gaussienne autour de la vraie valeur X , si la variance $\sigma_{X_N}^2$ associée est finie. On définit alors :

$$C = \text{probabilité} \{X - e \leq X_N \leq X + e\} \quad \text{avec} \quad e = \sigma_{X_N} \quad (2.21)$$

et en se basant sur les propriétés d'une distribution gaussienne, on peut conclure que pour une erreur $e = 3\sigma_{X_N}$ l'estimation X_N de X est faite avec une confiance C de 99,7 %.

On détaille par la suite comment est réalisé le processus statistique dans le code Monte Carlo TRIPOLI4 [Both *et al.*, 2003].

2.4.6 Construction du processus statistique dans le code TRIPOLI4

La construction du processus statistique dans le code Monte Carlo TRIPOLI4 est le résultat des phénomènes physiques suivants : choix d'un neutron source, choix du parcours dans la matière, choix du noyau, choix de l'interaction et choix des caractéristiques du neutron après collision.

Pour chacune de ces phases, on effectue un tirage d'un nombre aléatoire x selon une distribution $f(y)$. Ce calcul est réalisé en choisissant aléatoirement un nombre ξ uniformément dans l'intervalle $(0,1]$ et en renversant la primitive de $f(y)$:

$$F(x) = \int_a^x f(y)dy \quad (2.22)$$

$$x = F^{-1}(\xi). \quad (2.23)$$

Les sources dans le code TRIPOLI4 sont décrites d'une façon factorisée :

$$S(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = CS(\vec{r})S(\vec{\Omega})S(E), \quad (2.24)$$

dans laquelle les distributions spatiales $S(\vec{r})$, angulaires $S(\vec{\Omega})$ et énergétiques $S(E)$ sont choisies indépendamment et la constante C sert de normalisation.

Une fois placé un neutron dans l'espace de phase, on calcule la section totale macroscopique du milieu homogène $\Sigma_t(E)$ et on échantillonne le parcours l aléatoirement sur la distribution :

$$h(l)dl = \Sigma_t(E)exp(-\Sigma_t(E)l)dl, \quad (2.25)$$

correspondant à la probabilité d'avoir une interaction entre l et $l + dl$.

Selon la valeur du parcours obtenue après l'échantillonnage, on examine si le neutron a franchi l'interface du milieu, s'il dépasse la frontière du domaine de calcul ou s'il reste dans le milieu. Dans le premier cas, un nouveau parcours est échantillonné. Dans le deuxième cas, pour une condition au limite de fuite l'histoire du neutron est terminée, pour une condition au limite de réflexion une nouvelle direction et énergie sont attribuées au neutron et un nouveau parcours ensuite est échantillonné. Finalement, dans le dernier cas, on choisit le noyau de la nouvelle collision selon l'algorithme suivant. On calcule les probabilités pour la totalité des noyaux N_x :

$$p_x(E) = \frac{\Sigma_{t,x}}{\Sigma_t} \quad x = 1, N_x \quad (2.26)$$

et en tirant un nombre aléatoire ξ entre $(0,1]$ on discrimine les noyaux selon la règle :

- si $0 < \xi \leq p_1$ alors le neutron a une collision avec le noyau 1,
- si $p_1 < \xi \leq p_1 + p_2$ alors le neutron a une collision avec le noyau 2,
- si $p_1 + p_2 + \dots + p_{n-1} < \xi \leq p_1 + p_2 + \dots + p_n$ alors le neutron a une collision avec le noyau n .

Le type d'interaction est échantillonné selon la même règle sur la distribution :

$$q_{xi}(E) = \frac{\sigma_{xi}}{\sigma_{xt}}. \quad (2.27)$$

La dernière étape consiste à définir les caractéristiques du neutron après collision. Pour cela, pour un neutron d'énergie incidente E , on génère aléatoirement une nouvelle direction en échantillonnant sur les distributions angulaires de chaque réaction (cf. chapitre 3) et on déduit l'énergie du neutron après collision grâce aux lois de la cinématique ou aux corrélations tabulées angle-énergie.

Le tableau 2.1 donne un aperçu des estimateurs des différentes grandeurs physiques utilisées dans le code TRIPOLI4. La figure 2.1 résume les différentes étapes de la simulation de Monte Carlo. Un rectangle grisé symbolise le tirage d'une variable aléatoire, un cercle symbolise un aiguillage effectué selon le résultat du tirage et un rectangle blanc représente un calcul.

Estimateur	Flux	Taux de réaction	k_{eff}
corde	ωl	$\omega l \Sigma_{xi}$	$\omega l \sum_{x \in fiss} (v\Sigma)_{f,x}$
collision	$\frac{\omega}{\Sigma_t}$	$\frac{\omega \Sigma_{xi}}{\Sigma_t}$	$\frac{v\sigma_f}{\sigma_t}$

TAB. 2.1: Estimateurs du code TRIPOLI4 : ω est le poids de la particule, Σ_t est la section macroscopique totale et l est le parcours de la particule dans le volume considéré.

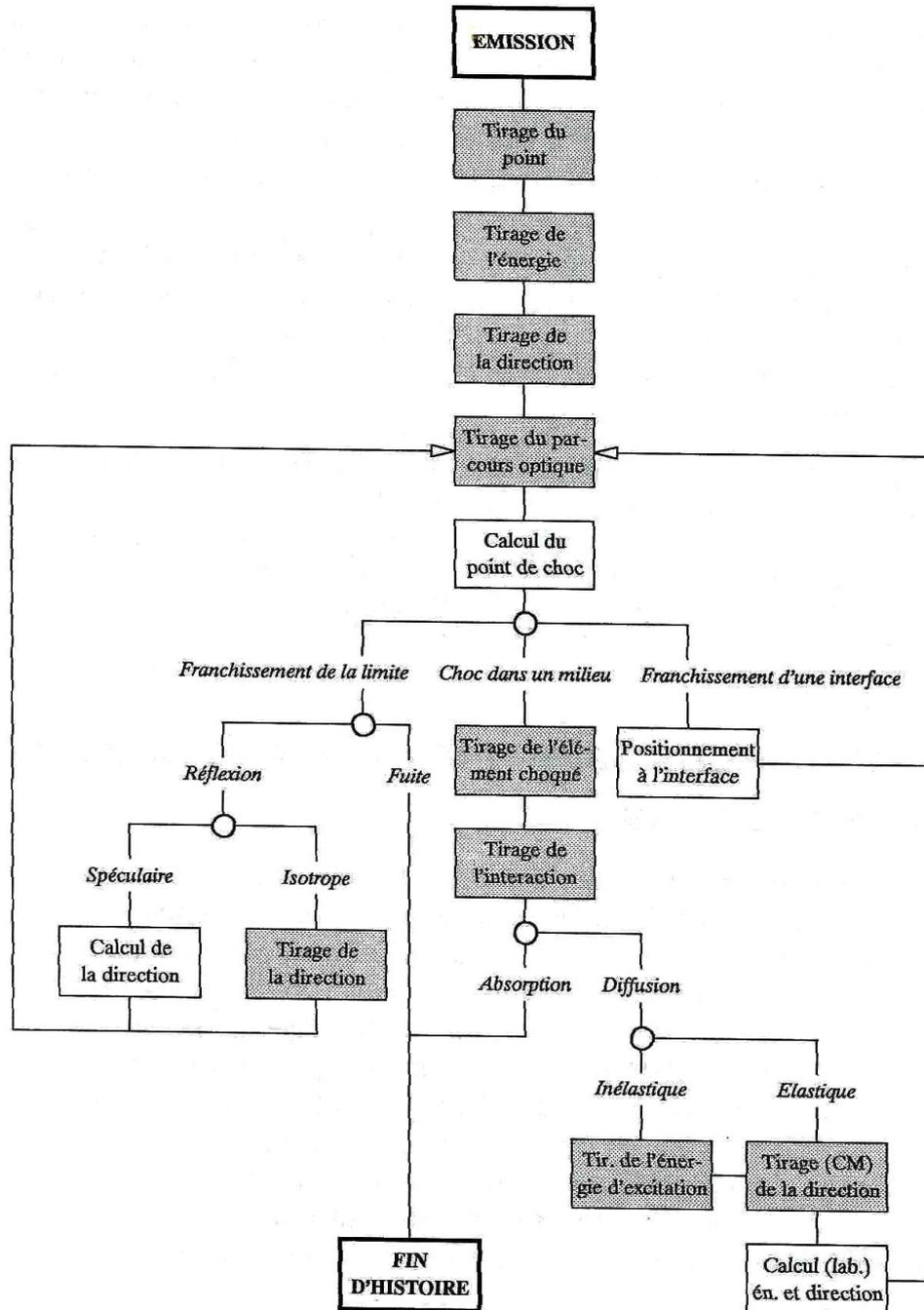


FIG. 2.1: Simulation de l'histoire d'un neutron par la méthode de Monte Carlo [Reuss, 2003].

Chapitre 3

État de l'art du traitement des données nucléaires pour la génération des bibliothèques multigroupes

On appelle "données nucléaires" toutes les grandeurs caractérisant les interactions élémentaires, c'est-à-dire les interactions entre les neutrons et les noyaux des atomes constituant le système auquel on s'intéresse. Ces données, comme on a vu au chapitre 1, sont, pour l'essentiel, des sections efficaces, mais également des rendements (nombre de neutrons secondaires issus d'une réaction, probabilité d'obtenir les divers fragments de fission ...), des données de décroissance radioactive.

L'ensemble de ces données nucléaires est regroupé dans une évaluation nucléaire ENDF, qui peut être considérée comme la "bibliothèque de base". Ces données de base ne sont pas directement utilisables pour la résolution numérique de l'équation de transport (cf. 2.4.2), elles doivent donc subir un traitement. C'est le rôle du code américain NJOY, du code français CALENDF et ensuite du module d'autoprotection de générer l'ensemble des constantes multigroupes (bibliothèque multigroupe) pour les solveurs déterministes de l'équation de transport.

Les codes NJOY et CALENDF font actuellement partie de la chaîne de traitement automatique GALILEE [Coste-Delclaux, 2008], dont la figure 3.1 fournit un aperçu des principales phases. Ce système emploie le programme PREPANJ99, pour générer les données pour les codes NJOY et CALENDF, et le code N2A2, pour rassembler les données dans une structure dite APOLIB dédiée au code de transport déterministe APOLLO2. L'ensemble du traitement est lancé par un script PERL.

Ce chapitre présente succinctement le contenu des évaluations nucléaires et l'ensemble des étapes nécessaires à la création d'une bibliothèque multigroupe du code APOLLO2.

3.1 Les données ENDF et les sections efficaces

L'élaboration de l'ensemble des données nucléaires s'appuie sur les mesures des sections efficaces microscopiques. Ces résultats sont évalués, c'est-à-dire, en simplifiant à l'extrême, obtenus en pondérant chaque mesure par son erreur expérimentale. L'ensemble de ces données a un format défini par la norme internationale ENDF (*Evaluated Nuclear Data Format*) [Herman, 2005]. Il associe à chaque élément (MAT) des informations générales (MF=1), des paramètres de résonances (MF=2), la valeur des sections ponctuelles (MF=3), les distributions angulaires (MF=4), énergétiques (MF=5) et combinées (MF=6) des particules émises et les données de thermalisation (MF=7). Chaque fichier (MF=3) peut être détaillé selon le type de réaction.

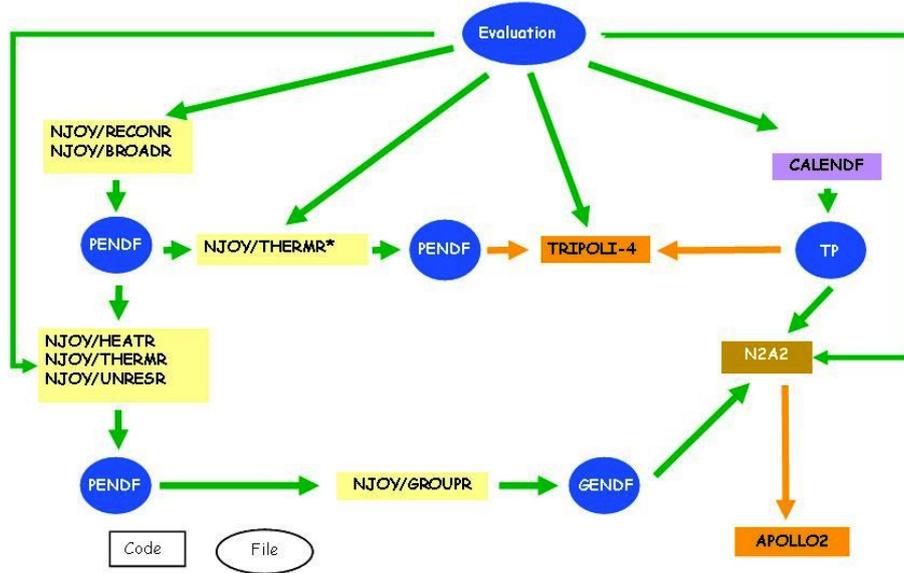


FIG. 3.1: Chaîne de traitement des données pour les codes déterministes (APOLLO2) et stochastiques (TRIPOLI4) GALILEE [Coste-Delclaux, 2008].

Grâce à ces données, les sections efficaces peuvent être évaluées à toute énergie en appliquant les différents formalismes nucléaires (cf 1.5). Ces représentations nécessitent des formules très coûteuses en termes de temps de calcul. Pour cela plusieurs sortes de représentations discrètes de ces sections sont utilisées en pratique :

- la représentation ponctuelle ou **PENDF** (*Pointwise Evaluated Nuclear Data Format*),
- la représentation multigroupe ou **GENDF** (*Groupwise Evaluated Nuclear Data Format*),
- la représentation par des **tables de probabilité**.

3.1.1 La représentation ponctuelle

La représentation ponctuelle consiste à décrire une section efficace par un ensemble de points associé à une loi d'interpolation (linéaire, cubique⁷). La représentation plus communément utilisée est linéaire par morceaux. Le nombre de points est fonction de la précision de reconstruction souhaitée (c.f. figure 3.2). Les bibliothèques ponctuelles peuvent être utilisées par des codes Monte Carlo comme TRIPOLI4 ou MCNP.

3.1.2 La représentation multigroupe

La méthode multigroupe pondère les sections efficaces ponctuelles sur une fonction définie de façon à préserver les taux de réaction. Pour tout isotope x , pour toute réaction ρ et tout groupe g du maillage énergétique, une section efficace multigroupe est donnée par :

$$\sigma_{x,\rho}^g(\vec{r}) = \frac{\int_g \sigma_{x,\rho}(E') \Phi(\vec{r}, E') dE'}{\Phi^g(\vec{r})} \quad (3.1)$$

où \vec{r} représente la variable espace et $\Phi^g(\vec{r})$ est le flux multigroupe. Les principales difficultés liées à la définition (3.1) sont :

- alors que les sections efficaces microscopiques ne dépendent que de l'énergie, les sections efficaces multigroupes dépendent de l'espace du fait du flux de pondération ;

⁷La première représentation est adoptée par le code NJOY, la deuxième par le code CALENDF.

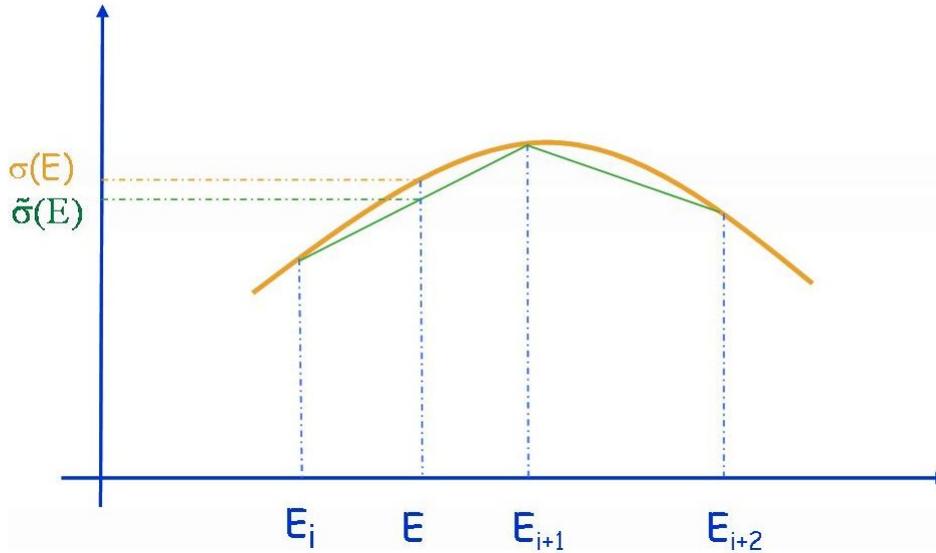


FIG. 3.2: Reconstruction linéaire d'une section efficace.

- le flux ponctuel $\Phi(\vec{r}, E')$ est inconnu ;
- le flux multigroupe est solution de l'équation dont on cherche les coefficients.

Pour des raisons d'efficacité et de coût, on souhaiterait pouvoir effectuer le calcul des sections efficaces multigroupes une fois pour toutes sur différents maillages énergétiques, mais cela n'est pas possible d'après la définition (3.1). Pour cela, on utilise une expression simplifiée dans laquelle on remplace le flux par une fonction $w(E)$ représentative du spectre régnant à l'intérieur du réacteur à traiter, ce qui conduit à la formulation suivante :

$$\sigma_{x,\rho}^g \approx \frac{\int_g \sigma_{x,\rho}(E') w(E') dE'}{\int_g w(E') dE'} \quad (3.2)$$

L'approximation (3.2) conduit à une erreur très faible si la section efficace est une fonction constante ou très lentement variable à l'intérieur du groupe g . Elle est donc acceptable pour les noyaux non résonnants ou pour les noyaux résonnants hors domaines des résonances (domaine du continuum ou à basse énergie où le comportement est en $1/v$).

Par contre, dans un groupe où la section efficace varie très rapidement, ce qui se manifeste généralement pour les isotopes résonnants si le maillage énergétique est grossier, l'emploi du spectre de pondération à la place du flux réel est inacceptable. En effet, à proximité d'une résonance, comme cela est montré sur la figure 3.3, le flux se creuse de façon d'autant plus accentuée que la section est grande tandis que le taux de réaction a des variations beaucoup plus lentes. Cette compensation, appelée **autoprotection**, se manifeste parmi les noyaux résonnants lourds et légers dans le domaine énergétique des résonances, où les neutrons, surtout sur les noyaux lourds, subissent un processus de ralentissement et varie spatialement dans les matériaux contenant des noyaux résonnants.

De ce fait, on recalcule, grâce au module d'autoprotection du code de transport, les sections efficaces des noyaux résonnants en utilisant le flux issu d'un problème de ralentissement sur la géométrie réelle. La résolution des équations des modèles d'autoprotection nécessite les données supplémentaires suivantes :

- les tables de probabilités et/ou les sections multigroupes sur un maillage fin (sections fines) pour l'obtention des points de quadratures nécessaires aux intégrations ;
- les taux effectifs, approximations des intégrales des taux ponctuels $\sigma_{x,\rho}(E') \Phi(\vec{r}, E')$.

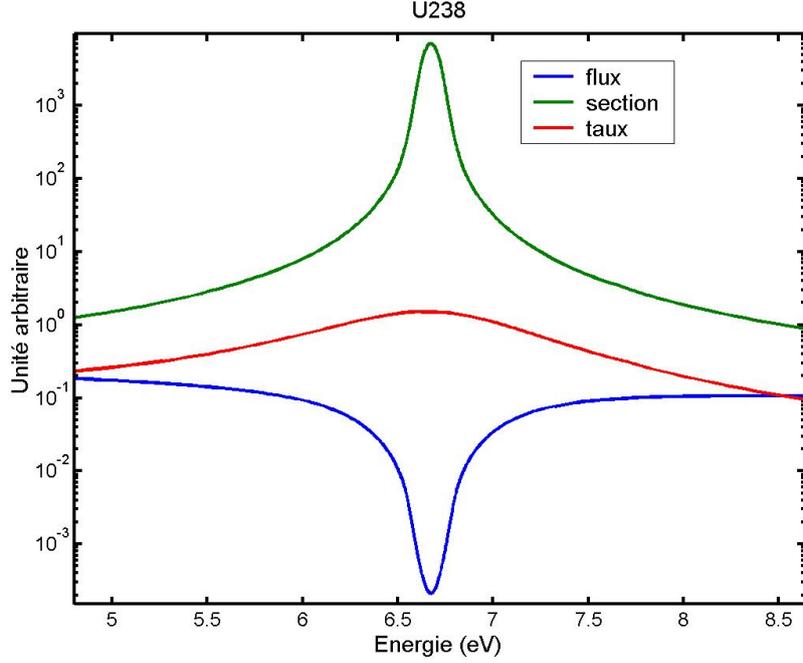


FIG. 3.3: Illustration du phénomène d'autoprotection autour de la principale résonance de l'uranium 238.

3.1.3 Les tables de probabilité

La description des variations de la section efficace par tables de probabilité est une idée relativement ancienne introduite d'abord par les Russes [Nicolaev et Khokhlov, 1969], [Nicolaev, 1970], puis par les Américains [Cullen, 1974], [Cullen et Pomraning, 1980] et enfin reprise par Pierre Ribon [Ribon et Maillard, 1986] qui l'a généralisée en se basant sur la théorie mathématique des moments et la quadrature de Gauss.

Une table de probabilité d'ordre N décrit les fluctuations des sections efficaces $\sigma(E)$ à l'intérieur d'un intervalle énergétique (cf. figure 3.4) par N couples $(p_i, \sigma_i)_{i=1, N}$ où les valeurs σ_i correspondent à des paliers atteints par la section efficace dans l'intervalle et p_i sont les probabilités associées :

$$p_i = \frac{1}{\Delta E} \int_{E_{inf}}^{E_{sup}} \theta_i[\sigma(E)] dE \quad \text{avec} \quad \theta_i[\sigma(E)] = \begin{cases} 1 & S_{i-1} \leq \sigma(E) \leq S_i \\ 0 & \text{sinon} \end{cases},$$

$$\text{d'où} \quad \sum_{i=1}^N p_i = 1.$$

Plusieurs définitions sont possibles pour σ_i , notamment la valeur médiane de l'intervalle $[S_{i-1}, S_i]$, la valeur moyenne définie par :

$$\sigma_i = \frac{1}{\Delta E} \int_{E_{inf}}^{E_{sup}} \sigma(E) \theta_i[\sigma(E)] dE,$$

ou encore des points de quadrature de Gauss pour intégrer correctement certaines fonctions.

On peut constater que :

- la représentation de la fluctuation de la section efficace est d'autant plus précise que le nombre N est grand ;

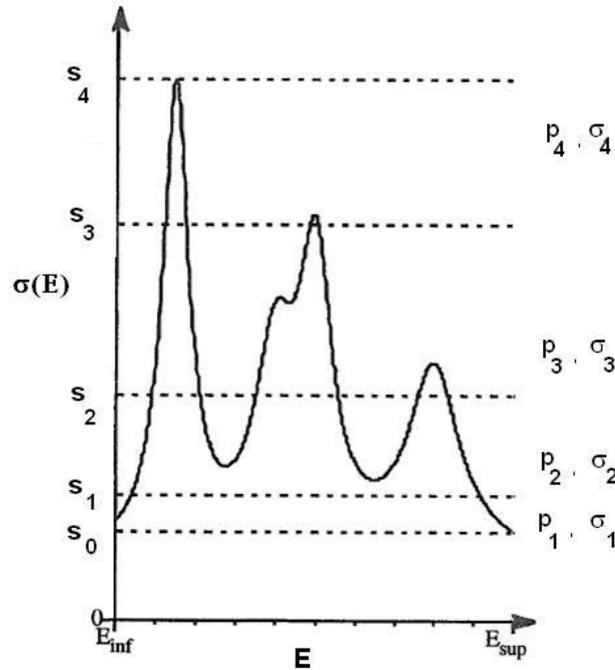


FIG. 3.4: Principe d'une table de probabilité.

- une table ayant un seul palier est identique à une section multigroupe ;
- toute information fine en énergie est perdue dans cette représentation ;
- une résonance symétrique à celle reproduite en figure 3.4 a la même table de probabilité. Pour cette raison, les tables de probabilité sont une représentation intéressante principalement pour les groupes dans lesquels une permutation des positions des résonances a peu d'influence sur le résultat cherché, comme, par exemple, dans le domaine non résolu, où précisément la distribution des résonances suit des lois statistiques en espacement et en largeur.

Il est aussi nécessaire de décrire les variations des différentes sections partielles σ_ρ d'un noyau. Pour cela on associe à chaque palier de la section totale $\sigma_{t,i}$, un correspondant pour la section partielle $\sigma_{\rho,i}$. Finalement, une table de probabilité d'ordre N sur un groupe g a la forme d'un n -uplet : $(p_i, \sigma_{t,i}, \sigma_{\rho_1,i}, \sigma_{\rho_2,i}, \dots, \sigma_{\rho_l,i})_{i=1,N}$.

3.2 Le code NJOY

Le code NJOY [MacFarlane *et al.*, 2000] est un ensemble de modules informatiques qui permettent, à partir des données nucléaires contenues dans une évaluation ENDF, de créer des bibliothèques ponctuelles en énergie et multigroupes pour les neutrons et les photons. Les principaux modules appelés pour créer une bibliothèque multigroupe sont : RECONR, BROADR, THERMR, UNRESR, GROUPE (pour les neutrons) et GAMINR (pour les photons).

Le module **RECONR** reconstruit par interpolation linéaire les données des évaluations ENDF à la précision souhaitée sur tout le domaine en énergie à une température de 0 K. À partir du fichier RECONR, le module **BROADR** effectue l'élargissement Doppler avec le modèle du gaz libre à une température donnée T . Le module **THERMR** génère les sections efficaces ponctuelles et les matrices de transfert de diffusion dans le domaine thermique avec le modèle du gaz libre ou en tenant compte des liaisons chimiques. Le module **UNRESR** calcule les sections efficaces moyennes pour différentes énergies E' dans le domaine non

résolu. Ces sections effectives sont calculées pour différentes sections de dilution⁸ σ_e :

$$\sigma_\rho(\sigma_e, E') = \frac{\int_{E_1}^{E_2} dE \frac{\sigma_\rho(E)}{(\sigma_t(E) + \sigma_e)E}}{\int_{E_1}^{E_2} dE \frac{1}{(\sigma_t(E) + \sigma_e)E}} \quad E_1 \leq E' \leq E_2,$$

où σ_ρ et σ_t sont des variables aléatoires représentant respectivement une section partielle et la section totale. Le choix du spectre de pondération est justifié au paragraphe 3.5.1 (cf. équation (3.48)). L'enchaînement des modules RECONR, BROADR, THERMR, UNRESR permet de créer un fichier PENDF des sections efficaces ponctuelles, linéairement interpolées en fonction de l'énergie.

Le module **GROUPR** permet de calculer les paramètres multigroupes suivants : sections efficaces partielles, taux de réaction effectifs tabulés par isotope en fonction de la dilution, matrices de transfert (diffusion élastique, inélastique, (n,2n), (n,3n) ...), nombre de neutrons émis par fission et matrices de fission. Tous ces paramètres sont stockés dans un fichier au format GENDF.

3.2.1 Sections efficaces

Les sections efficaces multigroupes pour une réaction ρ sont calculés de la façon suivante :

$$\sigma_\rho^g(\sigma_e) = \frac{\int_g \sigma_\rho(E) \Phi(E, \sigma_e) dE}{\int_g \Phi(E, \sigma_e) dE}, \quad (3.3)$$

où $\sigma_\rho(E)$ est une section efficace ponctuelle provenant du fichier PENDF et $\Phi(E, \sigma_e)$ est un flux de pondération. L'utilisateur peut choisir de déterminer $\Phi(E, \sigma_e)$ à l'aide de deux méthodes :

1. par la pondération Bondarenko,
2. par l'option du calculateur de flux.

La méthode Bondarenko pondère les sections efficaces sur le flux :

$$\Phi(E, \sigma_e) = \frac{w(E)}{\sigma_t(E) + \sigma_e}, \quad (3.4)$$

où $w(E)$ est la forme macroscopique du flux dans un réacteur donné. Pour un réacteur thermique cette fonction se compose d'un spectre de fission (pour des énergies supérieures à 1,3 MeV), un spectre de ralentissement pur en $1/E$ (pour des énergies comprises entre 1,3 MeV et 0,1 eV) et un spectre thermique Maxwellien (en dessous de 0,1 eV). Comme la fonction $\Phi(E, \sigma_e)$ tend vers le spectre macroscopique $w(E)$ pour $\sigma_e \gg \sigma_t$ (on prend généralement $\sigma_e = 10^{10}$), les sections pondérées sur le spectre macroscopique sont donc dites à dilution infinie et notées σ_ρ^g .

L'option du calculateur du flux permet de résoudre point par point l'équation de ralentissement pour un noyau résonnant :

$$(\sigma_t + \sigma_e)\Phi(E) = r_0\Phi(E) + \sigma_e w(E), \quad (3.5)$$

où $r_0\Phi(E)$ est l'opérateur de ralentissement élastique dans l'hypothèse de choc isotrope dans le centre de masse :

$$r_0\Phi(E) = \int_E^{\frac{E}{\alpha}} \frac{\sigma_s(E')}{E'(1-\alpha)} \Phi(E') dE', \quad (3.6)$$

⁸Ce paramètre, comme on verra par la suite, prend en compte les variations en espace du flux.

où $\alpha = \left(\frac{A-1}{A+1}\right)^2$, A est le rapport de la masse nucléaire du noyau à celle du neutron et σ_s est la section efficace élastique microscopique du noyau. Le flux solution de l'équation (3.5) est entâché d'un biais lié à la non prise en compte :

- des effets de mélange ([Williams, 1983] et cf. figure 3.5), qui ne sont pas liés qu'aux recouvrements des résonances de plusieurs noyaux à l'intérieur d'un groupe g ,
- d'autres réactions de diffusion (comme les réactions inélastiques discrètes) et de l'anisotropie du transfert dans le centre de masse à haute énergie.

Par conséquent, l'emploi du calculateur de flux est raisonnable :

- si les résonances des noyaux sont séparées dans les groupes,
- dans le domaine des résonances résolues, où on est loin des seuils des réactions inélastiques discrètes, et l'anisotropie du transfert des noyaux lourds est faible.

L'amélioration de la modélisation du transfert est un des problèmes traités en détail par la suite au cours de cette thèse.

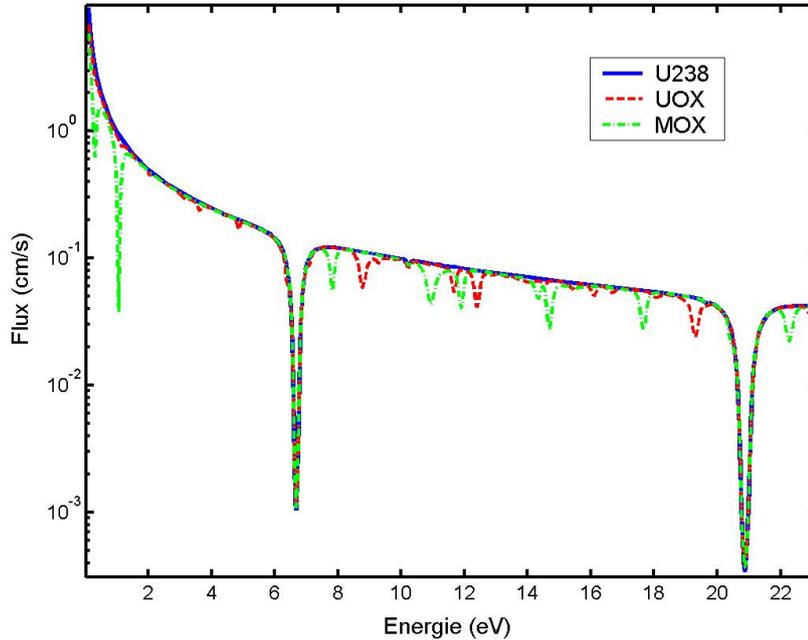


FIG. 3.5: Variation du flux par changement de la composition du mélange pour une dilution $\sigma_e = 50$ et une température de 293 K. U238, UOX : 0,05 U235 et 0,95 U238 et MOX : 0,04 Pu239, 0,01 Pu240 et 0,95 U238.

3.2.2 Matrice de transfert

Les matrices de transfert multigroupes sont calculées comme suit :

$$\sigma_{gg'}^l = \frac{\int_g F_{lg'}(E')\sigma(E')\Phi(E')dE'}{\int_{g'} \Phi(E')dE'}, \quad (3.7)$$

où la fonction $F_{lg}(E)$ est appelée "feed function". On détaille le calcul de cette fonction pour la diffusion à deux corps hors continuum, la diffusion inélastique dans le continuum et la diffusion à plusieurs corps.

Diffusion à deux corps hors continuum

Les réactions de diffusion à deux corps sont la diffusion élastique et inélastique discrète. Pour ces réactions la fonction $F_{lg}(E')$ vaut :

$$F_{lg}(E') = \int_g dE \int_{-1}^1 d\omega p(E' \rightarrow E, \omega) P_l(\mu(\omega)), \quad (3.8)$$

où $p(E' \rightarrow E, \omega)$ est la probabilité qu'un neutron soit transféré d'une énergie E' vers E à dE près et d'un angle dont le cosinus vaut ω à $d\omega$ près dans le système du centre de masse ; P_l est le polynôme de Legendre d'ordre l pour le cosinus μ de l'angle de diffusion exprimé dans le système du laboratoire. Le cosinus μ dans le système du laboratoire est lié au cosinus dans le système du centre de masse ω par la formule :

$$\mu = \frac{1 + R(E')\omega}{\sqrt{1 + R(E')^2 + 2R(E')\omega}}, \quad (3.9)$$

et le cosinus ω dépend de l'énergie E du neutron émis par la relation cinématique :

$$\omega(E', E) = \frac{[E(1 + A^2) - E'(1 + R(E')^2)]}{2R(E')E'}, \quad (3.10)$$

où le paramètre $R(E') = A\sqrt{1 - \frac{E_s}{E'}}$, défini pour $E' \geq E_s$, est fonction de l'énergie de seuil E_s ($E_s = 0$ dans le cas de la diffusion élastique).

En effectuant dans l'équation (3.8) l'intégration sur les énergies secondaires E , on a :

$$F_{lg}(E') = \int_{\omega_1}^{\omega_2} d\omega p(E', \omega) P_l(\mu(\omega)), \quad (3.11)$$

dans laquelle ω_1 et ω_2 sont déduites par la formule (3.10) pour les valeurs E égales aux énergies inférieure et supérieure du groupe g .

La probabilité de diffusion $p(E', \omega)$ est donnée par :

$$p(E', \omega) = \sum_{l=0}^{NL} p_l(E') P_l(\omega),$$

où les coefficients de Legendre $p_l(E')$ sont disponibles à partir des distributions angulaires tabulées (MF=4) de l'évaluation ENDF.

L'intégration de $F_{lg}(E')$ est réalisée par une méthode de Gauss-Legendre où l'ordre des quadratures N est fonction de l'ordre de développement ND , de l'ordre de Legendre désiré NL et de la masse A du corps considéré⁹ :

$$N = ND + NL + \ln \left(\frac{300}{A} \right).$$

Diffusion inélastique dans le continuum et à plusieurs corps

Pour les réactions de diffusion à plusieurs corps, tels que les réactions $(n,2n)$, $(n,n'\alpha)$ et la fission, GROUPE intègre la "feed function" suivante :

$$F_{lg}(E') = \int_{-1}^1 P_l(\mu) p(E', \mu) d\mu \int_g g(E', E) dE, \quad (3.12)$$

⁹Puisque l'hypothèse d'isotropie dans le système du laboratoire est d'autant mieux vérifiée que le noyau est lourd, on peut appliquer un ordre de quadratures plus réduit avec l'augmentation de A .

où $g(E', E)$ peut correspondre à une fonction prétabulée, un spectre d'évaporation, un spectre de Maxwell, un spectre de Watt, un spectre de Madland et un spectre de Nix [MacFarlane et Muir, 1994]. Pour les réactions de diffusion inélastique dans le continuum (n,n'cont) GROUPE peut soit intégrer la fonction (3.12) soit déduire la "feed function" de l'expression suivante :

$$F_{lg}(E') = \int_{-1}^1 P_l(\mu) d\mu \int_g g(E', \mu, E) dE. \quad (3.13)$$

3.3 Le code CALENDF

Le code CALENDF [Sublet *et al.*, 2006], développé au CEA par Pierre Ribon, est utilisé pour générer les tables de probabilité des sections efficaces à partir des évaluations nucléaires ENDF. Les tables sont obtenues, dans le domaine résolu, après reconstruction par interpolation cubique de la section efficace. Dans le domaine non résolu, le code permet soit de reconstruire une section ponctuelle sur tout le domaine (vérifiant les propriétés statistiques) soit de procéder par échantillonnage.

On détaille par la suite le principe d'obtention des probabilités, des paliers de la section totale et des tables de probabilité de plusieurs sections efficaces.

3.3.1 Calcul des probabilités et des paliers de la section totale

Considérons la valeur moyenne sur un groupe g , notée par $\langle \cdot \rangle^g$ et affectée du poids¹⁰ $w(E)$, d'une fonction quelconque F ne dépendant de l'énergie que par l'intermédiaire de la section totale $\sigma_t : E \rightarrow \sigma_t(E)$:

$$\langle F \rangle^g = \frac{1}{w^g} \int_g F[\sigma_t(E)] w(E) dE, \quad (3.14)$$

et notons le domaine de variation de la section σ_t sur le groupe g par :

$$D_g = [\min \sigma_t(E), E \in g, \max \sigma_t(E), E \in g].$$

Le changement de la variable d'intégration E en σ_t , transforme l'intégrale de Riemann (3.14) en une intégrale de Lebesgue :

$$\begin{aligned} \langle F \rangle^g &= \frac{1}{w^g} \int_g F[\sigma_t(E)] w(E) dE \int_{D_g} \delta(\sigma_t - \sigma_t(E)) d\sigma_t \\ &= \int_{D_g} F(\sigma_t) \left[\int_g \frac{\delta(\sigma_t - \sigma_t(E)) w(E) dE}{w^g} \right] d\sigma_t = \int_{D_g} F(\sigma_t) p(\sigma_t) d\sigma_t. \end{aligned} \quad (3.15)$$

$$(3.16)$$

Dans cette formulation $p(\sigma_t) d\sigma_t$ est la densité de probabilité, somme des poids élémentaires $w(E) dE$ où la section totale considérée est comprise entre σ_t et $\sigma_t + d\sigma_t$, rapportée à la valeur intégrale du poids sur le groupe $w_g = \int_g w(E) dE$.

La densité de probabilités $p(\sigma_t)$ peut être approchée par une somme finie de mesures de Dirac $\delta(\sigma_t - \sigma_{t,i})$ affectées par les poids p_i normalisés :

$$\sum_{i=1}^N p_i \delta(\sigma_t - \sigma_{t,i}) \quad \text{avec} \quad \sum_{i=1}^N p_i = 1. \quad (3.17)$$

¹⁰Le poids est cohérent à celui utilisé pour les sections GENDF.

La valeur moyenne $\langle F \rangle^g$ est alors donnée par :

$$\langle F \rangle^g \approx \int_{D_g} F(\sigma_t) \sum_{i=1}^N p_i \delta(\sigma_t - \sigma_{t,i}) d\sigma_t = \sum_{i=1}^N p_i \int_{D_g} F(\sigma_t) \delta(\sigma_t - \sigma_{t,i}) d\sigma_t = \sum_{i=1}^N p_i F(\sigma_{t,i}),$$

et on peut donc en déduire la formule de quadrature :

$$\langle F \rangle^g \approx \sum_{i=1}^N p_i F(\sigma_{t,i}). \quad (3.18)$$

L'approche CALENDF consiste à rechercher les poids p_i et les abscisses $\sigma_{t,i}$ correspondant à une formule de quadrature de Gauss qui intègre exactement $2N$ fonctions puissances de la section totale appelé moments :

$$\mathcal{M}_n = \frac{1}{w^g} \int_g \sigma_t^n(E) w(E) dE \quad 1 - N \leq n \leq N. \quad (3.19)$$

Cette intégration est faite en utilisant les sections ponctuelles $\sigma_t(E)$, reconstruites par CALENDF, et une méthode de Gauss-Legendre.

Les couples $(p_i, \sigma_{t,i})_{i=1,N}$ définissant la formule de quadrature sont obtenus en résolvant le système non linéaire à $2N$ inconnues :

$$\sum_{i=1}^N \sigma_{t,i}^n p_i = \mathcal{M}_n \quad 1 - N \leq n \leq N. \quad (3.20)$$

L'ordre n choisi des moments permet la normalisation des probabilités ($n = 0$), la conservation de la section totale moyenne ($n = 1$) et une évaluation précise des intégrales de la fonction¹¹ F . Pour une description détaillée de l'algorithme de résolution du système (3.20), je renvoie le lecteur intéressé au document [Coste-Delclaux, 2006].

Le nombre de paliers dans un groupe d'énergie est déterminé en effectuant les tests suivants :

$$\left| \ln \left(\frac{\mathcal{M}_{-N}}{M_{-N}} \right) \right| \leq \epsilon \quad \wedge \quad \left| \ln \left(\frac{\mathcal{M}_{N+1}}{M_{N+1}} \right) \right| \leq \epsilon, \quad (3.21)$$

où \mathcal{M} et M sont respectivement les moments exacts et approchés avec les tables de probabilité. Si les deux tests sont satisfaits, N est le nombre de paliers, sinon on ajoute un palier et on continue le test. On emploie couramment une précision de $\epsilon = 10^{-4}$ pour le calcul des tables de probabilité.

3.3.2 Plusieurs sections efficaces

Par souci de clarté, on effectue l'étude de deux sections résonnantes, la généralisation à un ensemble X de noyaux amène à calculer X intégrales de Lebesgue imbriquées. Considérons une fonction F dépendant des sections σ_1 et σ_2 qui varient avec l'énergie. D'une façon analogue au cas à une seule section, on peut écrire :

$$\frac{1}{w^g} \int_g F[\sigma_1(E), \sigma_2(E)] w(E) dE = \int_{D_{g,1}} \int_{D_{g,2}} F[\sigma_1, \sigma_2] q(\sigma_1, \sigma_2) d\sigma_2 d\sigma_1 \approx \sum_{i=1}^{N_1} \sum_{j=1}^{N_2} F[\sigma_{1,i}, \sigma_{2,j}] q_{ij},$$

où $D_{g,1}$ et $D_{g,2}$ sont le domaine de variation des deux sections considérées. Dans ce cas, $q(\sigma_1, \sigma_2) d\sigma_2 d\sigma_1$ correspond à la somme des poids élémentaires $w(E) dE$ où la section σ_1 est

¹¹Dans la plupart des modèles d'autoprotection, les fonctions F à intégrer dépendent de manière inversement proportionnelles à la somme de la section totale σ_t et de la dilution σ_e . Selon la valeur relative $\frac{\sigma_e}{\sigma_t}$, le développement limité de F peut contenir une suite de puissances à exposants positifs ou négatifs. D'où l'importance de choisir des moments positifs et négatifs.

comprise entre σ_1 et $\sigma_1 + d\sigma_1$ et la section σ_2 est comprise entre σ_2 et $\sigma_2 + d\sigma_2$, rapportée à la valeur intégrale du poids sur le groupe w_g . q_{ij} est la probabilité croisée pour que la première section soit représentée par $\sigma_{1,i}$ et la seconde par $\sigma_{2,j}$. Si on somme q_{ij} sur les indices j , respectivement i , on obtient les poids $p_{1,i}$ et $p_{2,j}$ vus précédemment :

$$p_{1,i} = \sum_j q_{ij} \quad p_{2,j} = \sum_i q_{ij}. \quad (3.22)$$

Les éléments de la table $(q_{ij}, \sigma_{1,i}, \sigma_{2,j})_{i=1, N_1, j=1, N_2}$ sont obtenus en résolvant les $N_1 * N_2$ équations des co-moments :

$$\frac{1}{w_g} \int_g \sigma_1^l(E) \sigma_2^k(E) w(E) dE = \sum_{l=1}^{N_1} \sum_{k=1}^{N_2} \sigma_{1,i}^l \sigma_{2,j}^k q_{ij} \quad \left\{ \begin{array}{l} - [N_1/2] - 1 \leq l \leq N_1 - [N_1/2] \\ - [N_2/2] - 1 \leq k \leq N_2 - [N_2/2] \end{array} \right. , \quad (3.23)$$

où $[.]$ représente la fonction partie entière.

On peut simplifier le calcul des probabilités croisées q_{ij} :

- dans le cas des sections partielles intervenants linéairement ;
- si les sections sont statistiquement indépendantes ou corrélées.

Sections partielles

La connaissance des paliers des sections partielles permet d'établir des formules de quadrature pour les fonctions F , produits d'une section partielle et d'une fonction quelconque de la section totale (comme les taux de réaction) :

$$\langle \sigma_\rho F \rangle^g = \frac{1}{w_g} \int_g \sigma_\rho(E) F(\sigma_t(E)) w(E) dE. \quad (3.24)$$

Une intégrale de ce type, après changement de variable et discrétisation, s'écrit comme :

$$\langle \sigma_\rho F \rangle^g = \int_{D_g} d\sigma_t F(\sigma_t) \int_{D_\rho^g} d\tilde{\sigma}_\rho \tilde{\sigma}_\rho q(\sigma_t, \tilde{\sigma}_\rho) \approx \sum_{j=1}^N F(\sigma_{t,j}) \sum_{i=1}^{N_\rho} q_{ij} \tilde{\sigma}_{\rho,i}. \quad (3.25)$$

En posant :

$$\sigma_{\rho,j} p_j = \sum_{i=1}^{N_\rho} q_{ij} \tilde{\sigma}_{\rho,i}, \quad (3.26)$$

la valeur $\langle \sigma_\rho F \rangle^g$ est alors donnée par :

$$\langle \sigma_\rho F \rangle^g \approx \sum_{j=1}^N \sigma_{\rho,j} F(\sigma_{t,j}) p_j, \quad (3.27)$$

où $\sigma_{\rho,j}$ correspond à la moyenne de $\tilde{\sigma}_{\rho,i}$ pour une section $\sigma_{t,j}$ fixée ¹². Cette définition permet de n'effectuer aucun calcul supplémentaire pour la détermination des probabilités des sections partielles.

Le calcul des paliers de la section partielle nécessite le calcul des moments :

$$P_{\rho,n} = \frac{1}{w_g} \int_g \sigma_\rho(E) \sigma_t^n(E) w(E) dE \quad - [N/2] - 1 \leq n \leq N - [N/2], \quad (3.28)$$

¹²En effet d'après (3.22) et (3.26) $\sigma_{\rho,j} = \frac{\sum_{i=1}^{N_\rho} q_{ij} \tilde{\sigma}_{\rho,i}}{\sum_{i=1}^{N_\rho} q_{ij}}$

et l'inversion du système linéaire à N inconnues :

$$\sum_{i=1}^N \sigma_{\rho,i} p_i \sigma_{i,i}^n = P_{\rho,n} \quad - [N/2] - 1 \leq n \leq N - [N/2]. \quad (3.29)$$

Le choix de l'ordre n garantit que pour chaque palier la somme des réactions partielles soit égale à la totale ($n = N - [N/2]$) et assure le respect de la section partielle moyenne ($n = 0$).

Sections statistiquement indépendantes et corrélées

Si les sections efficaces des deux noyaux sont indépendantes (hypothèse statistique), la probabilité croisée devient :

$$q_{ij} = p_{1i} p_{2j}. \quad (3.30)$$

Avec cette hypothèse, on néglige les interactions mutuelles entre les noyaux, ce qui est justifiable dans le domaine non résolu de deux noyaux.

Dans le domaine résolu, si le maillage énergétique est suffisamment fin pour considérer les sections efficaces linéaire dans l'intervalle :

$$\sigma_1(E) = a_1 + b_1 E \quad (3.31)$$

$$\sigma_2(E) = a_2 + b_2 E, \quad (3.32)$$

il existe une condition de corrélation complète entre les sections. En effet d'après (3.31) et (3.32), on peut établir une relation biunivoque entre les deux sections :

$$\begin{aligned} \sigma_2 &= a_2 + \frac{b_2}{b_1}(\sigma_1 - a_1) = c_1 + d_1 \sigma_1 = f_1(\sigma_1), \\ \sigma_1 &= a_1 + \frac{b_1}{b_2}(\sigma_2 - a_2) = c_2 + d_2 \sigma_2 = f_2(\sigma_2). \end{aligned}$$

Dans ce cas, les probabilités conditionnelles q_{ij} peuvent être déduites par recouvrement des paliers. Comme montré dans la figure 3.6, les probabilités conditionnelles d'une section 1 avec une table d'ordre 3 et d'une section 2 avec une table d'ordre 2 sont données par :

$$\left\{ \begin{array}{l} q_{11} = p_{11} \\ q_{12} = 0 \\ q_{21} = p_{21} - p_{11} \\ q_{22} = p_{12} - p_{21} + p_{11} \\ q_{31} = 0 \\ q_{32} = p_{22} - p_{12} + p_{21} - p_{11} \end{array} \right. \quad (3.33)$$

D'autre part, comme en raffinant le maillage énergétique l'ordre des tables tend vers l'unité, la probabilité conditionnelle q_{ij} se réduit au terme $q_{11} = 1$. Dans ce cas, cette grandeur peut être aussi déduite par la formulation (3.30) car les paliers $p_{1i} p_{2j}$ sont unitaires.

3.4 Bibliothèque multigroupe du code APOLLO2

La génération d'une bibliothèque multigroupe du code APOLLO2 est réalisée pour 300 à 400 noyaux, en calculant, avec le code NJOY, les sections efficaces multigroupes sur une grille de dilutions et de températures (actuellement 62 dilutions allant de 1 à 10^{10} barns et 10 températures de 300 à 2000 kelvins) et, avec le code CALENDF, les tables de probabilité sur la même grille de températures. On garde les sections multigroupes à dilution infinie et à la

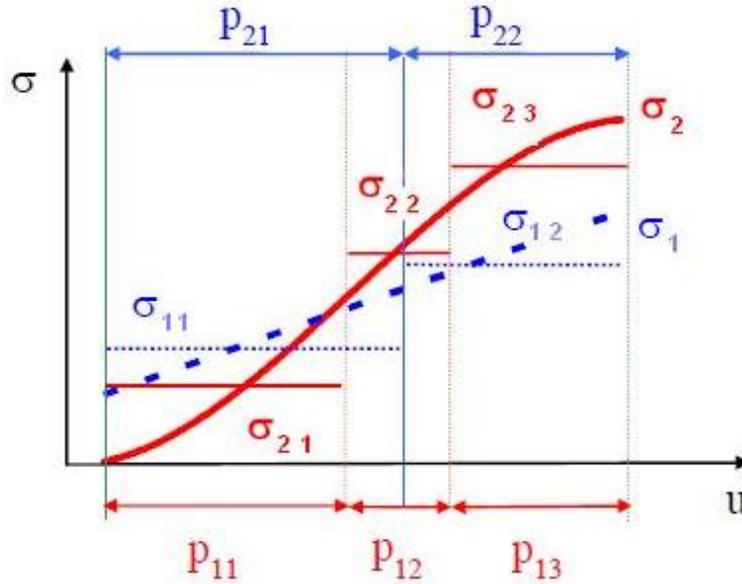


FIG. 3.6: Schéma illustrant le calcul des probabilités conditionnelles dans le cas des sections efficaces monotones.

première température et les sections dans le domaine thermique à toutes les températures. Les autres sont mises sous forme de taux de réactions et composent les tabulations des taux effectifs. Les matrices de transfert et de fission sont calculées uniquement à dilution infinie et à la première température de la grille, sauf en dessous de la coupure thermique pour les matrices de diffusion thermique, et pour un ordre de Legendre limité à 5. Pour les autres températures, les sections multigroupes sont déduites au moment du calcul à partir des tabulations des taux effectifs à dilution infinie (procédure appelée élargissement Doppler). Les matrices de transfert en revanche sont obtenues au moment de la simulation au-dessus de la coupure thermique en multipliant les probabilités de transfert, supposées indépendantes de la température, par les sections efficaces de diffusion à la température demandée. Ce choix résulte d'un compromis entre l'espace mémoire requis par la bibliothèque et la précision du calcul. On remarque que comme les matrices de transfert multigroupe sont calculées à dilution infinie, on utilise la même fonction de pondération pour tous les moments l de Legendre (comme suggéré dans l'article [Bell *et al.*, 1967]).

Le code N2A2 [Agger et Mounier, 2000] rassemble l'ensemble de toutes ces données multigroupes dans un format dédié à APOLLO2, dit APOLIB. Pendant cette phase, on restreint le nombre de voies de réactions aux données nécessaires au calcul du flux : absorption, diffusion, fission (cf. 1.2) et excès (cf. 2.1). On détaille par la suite les modifications apportées pour définir : la matrice de transfert, les sections de diffusion et le spectre de fission.

3.4.1 Sections de diffusion et matrices de transfert

Dans les calculs de flux en transport on n'a besoin que des sections totales de transfert. Pour cela, on définit la section totale de transfert comme la somme des sections de transfert pour toutes les réactions de transfert d'un noyau donné :

$$\sigma_s^{gg'} = \sum_{\rho \in s} \sigma_{\rho n}^{gg'}, \quad (3.34)$$

et par analogie, la section totale de diffusion est calculée comme somme des sections de diffusion pour toutes les réactions contribuant à la diffusion :

$$\sigma_s^g = \sum_{\rho \in s} \sigma_\rho^g. \quad (3.35)$$

En récupérant des fichiers GENDF le nombre moyen de neutrons produits par un transfert w_ρ d'une réaction, grandeur qui est unitaire pour un transfert élastique ou inélastique ou peut prendre les valeurs $w_\rho = k$ ($k = 2, 3, \dots$) pour les réactions de type $n \rightarrow kn$, on calcule le nombre moyen de neutrons produits par diffusion :

$$w_s^g = \sum_{\rho \in s} \frac{\sigma_\rho^g}{\sigma_s^g} w_\rho^g, \quad (3.36)$$

et on définit la section d'excès de neutrons :

$$\sigma_{exc}^g = \sigma_s^g [w_s^g - 1]. \quad (3.37)$$

3.4.2 Le spectre de fission

Le code NJOY décrit la réaction de fission par :

- une matrice de fission prompte à haute énergie $\sigma_{p,f}^{gg'}$, un spectre de fission prompte χ_p^g et un rendement prompte ν_p à basse énergie ;
- un rendement retardé ν_d , un poids normalisé $\alpha_i = \nu_{i,d}/\nu_d$ et un spectre de fission retardée $\chi_{d,i}^g$ pour chaque famille de précurseur i ;
- une section de fission σ_f^g .

À partir de ces données on constitue une section de production totale $\nu\sigma_f^{g'}$ et un spectre multigroupe χ_f^g comme suit :

$$\sigma_f^{gg'} = \sum_i \chi_{d,i}^g \alpha_i \nu_d \sigma_f^{g'} + \chi_p^g \nu_p \sigma_f^{g'} + \sigma_{p,f}^{gg'}$$

$$\nu\sigma_f^{g'} = \sum_g \sigma_f^{gg'}, \quad \chi_f^g = \frac{\sum_{g'} \sigma_{p,f}^{gg'} w^{g'}}{\sum_{g'} \nu\sigma_f^{g'} w^{g'}}.$$

De ce fait, la dépendance des groupes de l'énergie incidente, contenue dans la matrice de fission prompte, est perdue. On verra par la suite quels sont les biais produits par cette approximation dans les différentes applications neutroniques.

3.5 Le module d'autoprotection

L'emploi d'une fonction de pondération représentative du spectre du réacteur (comme le flux de l'équation (3.4)) pour les sections efficaces des noyaux résonnants est inacceptable, par exemple le k_{eff} d'une cellule UOX serait sous estimé d'environ 30000 pcm avec les sections multigroupes à dilution infinie, calculées sur le maillage énergétique XMAS à 172 groupes. Il est nécessaire d'employer le flux résultant de la solution de l'équation de transport sur un problème de ralentissement. Cette condition est assez contraignante parce qu'elle obligerait à créer une bibliothèque multigroupe dépendant de la géométrie. Pour des raisons d'efficacité, comme on a vu, on construit une bibliothèque multigroupe avec toutes les données nécessaires pour faire une mise en groupe des sections des noyaux résonnants avec le modèle de l'autoprotection.

Par la suite, les grandeurs neutroniques sont exprimées en fonction de la léthargie, définie comme le logarithme népérien du rapport d'une énergie de référence E_0 à l'énergie E , $u = \ln(E_0/E)$. Cette dépendance est prise en compte uniquement pour les noyaux résonnants, les autres sont traités dans l'approximation multigroupe (grandeur constante à l'intérieur d'un groupe).

Le module d'autoprotection calcule pour tout noyau résonnant x , pour toute réaction ρ ¹³, et pour tout groupe résonnant g du maillage multigroupe la section multigroupe suivante :

$$\sigma_{x,\rho}^g(\vec{r}) = \frac{\int_g \sigma_{x,\rho}(u') \Phi(\vec{r}, u') du'}{\Phi^g(\vec{r})}, \quad (3.38)$$

où \vec{r} représente la variable espace. Aujourd'hui deux méthodes sont utilisées dans APOLLO2 pour calculer les sections efficaces (3.38) :

1. l'autoprotection selon le formalisme **Livolant-Jeanpierre**, si le nombre de groupes est restreint ;
2. l'autoprotection en **sous-groupes** pour un nombre élevé de groupes.

3.5.1 Autoprotection selon le formalisme Livolant-Jeanpierre

L'autoprotection selon le formalisme Livolant-Jeanpierre a été exposée en détail à plusieurs reprises ([Sanchez et Mondot, 1984], [Sanchez *et al.*, 1990], [Sanchez, 1994], [Coste *et al.*, 1993], [Coste, 1994]), la thèse de M. Coste-Delclaux [Coste-Delclaux, 2006] en représente la description plus complète et récente.

Cette méthode d'autoprotection peut traiter un seul noyau résonnant à la fois (méthode dite **standard** ou à isotope isolé) ou un mélange de noyaux résonnants (traitement en **mélange**). Par la première méthode on peut également prendre en compte le profil de température à l'intérieur d'un crayon de combustible [Perruchot-Triboulet, 1996].

L'obtention des sections autoprotégées selon le formalisme Livolant-Jeanpierre nécessite la résolution exacte d'un problème de ralentissement en milieu homogène infini et une résolution avec des modèles de l'équation de ralentissement (NR, WR, TR, ST) en milieu hétérogène. On détaille donc d'abord les équations utilisées dans ces deux situations physiques et ensuite on donne un aperçu de l'algorithme de résolution.

Milieu homogène infini

On considère un mélange homogène dans un milieu infini comprenant des noyaux lourds (indiqués par 0) et des noyaux modérateurs (indiqués par 1). Comme le domaine énergétique des résonances des noyaux lourds est bien en dessous des sources de fission, on néglige ce terme et on résout l'équation de ralentissement suivante :

$$[\Sigma_{t0}(u) + \Sigma_{t1}(u)]\Phi(u) = \sum_x [R_{0,x}\Phi(u) + R_{1,x}\Phi(u)], \quad (3.39)$$

où $R_x\Phi(u) = N_x r_x \Phi(u)$ est le noyau de transfert dans l'hypothèse de choc élastique et isotrope dans le centre de masse :

$$r_x \Phi(u) = \int_{u-\epsilon_x}^u p_x(u' \rightarrow u) \sigma_{s,x}(u') \Phi(u') du' \quad \text{avec} \quad p_x(u' \rightarrow u) = \frac{1}{(1-\alpha_x)} \exp(u' - u). \quad (3.40)$$

¹³On autoprotège les sections de diffusion, d'absorption et de production.

Dans cette équation $\epsilon_x = -\ln(\alpha_x)$ est le gain maximal de léthargie, N_x représente le nombre de noyaux x par unité de volume et, pour les autres notations, on retrouve la convention de notation de l'équation (3.6).

On adopte le formalisme de Livolant-Jeanpierre [Livolant et Jeanpierre, 1974] qui définit la factorisation du flux $\Phi = \varphi\chi$, où le flux macroscopique est défini par :

$$\chi = \frac{R_1\Phi}{\Sigma_{s1}}, \quad (3.41)$$

avec $R_1\Phi = \sum_x R_{1,x}\Phi$ et où le facteur de **structure fine** φ est l'inconnue du problème. Le flux macroscopique est une fonction lentement variable, parce que :

- le noyau de ralentissement $R_1\Phi$ est un opérateur de lissage, en raison du grand gain maximum de léthargie des noyaux légers ;
- les sections de diffusion des noyaux légers varient lentement avec la léthargie.

Sous l'hypothèse que la portée d'intégration dans $R_0\Phi$ pour les noyaux lourds est très réduite on peut faire l'approximation¹⁴ :

$$R_0\chi\varphi(u) \approx \chi(u)R_0\varphi(u), \quad (3.42)$$

et simplifier l'équation (3.39) :

$$[\Sigma_{t0}(u) + \Sigma_{t1}(u)]\varphi(u) = \sum_x R_{0,x}\varphi(u) + \Sigma_{s1}(u). \quad (3.43)$$

Si on divise par la concentration du mélange de noyaux résonnants $N_0 = \sum_x N_{x,0}$ et on définit la dilution $\sigma_e = \Sigma_{t1}/N_0$, on obtient l'équation de structure fine :

$$[\tilde{\sigma}_{t0}(u) + \sigma_e]\varphi(u) = \tilde{r}_0\varphi(u) + \gamma_e\sigma_e, \quad (3.44)$$

où on utilise la convention $\tilde{f} = \sum_x f_x\delta_x$, $\delta_x = N_{x,0}/N_0$ est la proportion relative des noyaux résonnants et $\gamma_e = \Sigma_{s1}/\Sigma_1$ est le nombre de secondaires par collision dans le modérateur (quand le modérateur est purement diffusant γ_e vaut 1). On remarquera que l'on n'a pas noté la dépendance en léthargie pour la section de dilution. En effet, cette dépendance est extrêmement faible pour un noyau modérateur.

Cette équation est linéaire en γ_e , cela signifie que si $\varphi(\sigma_e, \gamma_e)$ est solution de (3.44), paramétrée par σ_e et γ_e , on a la relation :

$$\varphi(\sigma_e, \gamma_e) = \gamma_e\varphi(\sigma_e, 1) \quad (3.45)$$

dans laquelle $\varphi(\sigma_e, 1)$ est solution de (3.44), paramétrée par σ_e et 1. Cette relation permet de ne résoudre l'équation (3.44) que pour $\gamma_e = 1$.

Avec APOLLO2, le noyau de transfert d'un isotope résonnant $r_{0,x}\varphi(u)$ peut être approché par les modèles suivantes : **NR**, **WR**, **ST** et **TR**. Dans un souci de clarté, l'exposition de ces modèles est effectuée en ne supposant qu'un seul noyau résonnant.

Les premiers deux modèles sont obtenus par comparaison du gain de léthargie maximum par choc à la largeur des résonances. Dans le modèle NR, la résonance d'un noyau est supposée étroite vis à vis du gain de léthargie, on considère la section de diffusion égale à la section potentielle $\sigma_{p,x}$ et on prend le flux régnant hors de la résonance $\varphi(\sigma_{p,x})$:

$$r_{0,x}\varphi(u) \approx \sigma_{p,x}\varphi(\sigma_{p,x})\frac{1}{1-\alpha_x}\int_{u-\epsilon_x}^u \exp(u'-u)du' = \sigma_{p,x}\varphi(\sigma_{p,x}). \quad (3.46)$$

¹⁴On rediscutera de cette hypothèse à la section 6.4.

Dans le modèle WR en revanche, on admet que la largeur de la résonance est beaucoup plus grande que l'intervalle en léthargie sur lequel l'opérateur $r_{0,x}$ agit, ce qui correspond à évaluer $r_{0,x}\varphi(u)$ dans la limite de ϵ_x nulle :

$$\begin{aligned} & \lim_{\epsilon_x \rightarrow 0} \frac{1}{(1 - \exp(-\epsilon_x))} \int_{u-\epsilon_x}^u \exp(u' - u) \sigma_{s,x}(u') \varphi(u') du' \\ & = \lim_{\epsilon_x \rightarrow 0} \langle \sigma_{s,x}(u) \varphi(u) \exp(u' - u) \rangle^{\epsilon_x} \frac{\epsilon_x}{1 - \exp(-\epsilon_x)} = \sigma_{s,x}(u) \varphi(u). \end{aligned} \quad (3.47)$$

En substituant dans l'équation (3.44), on obtient pour le flux de structure fine avec le modèle NR, aussi appelé flux de Bondarenko :

$$\varphi^{NR}(u) = \frac{\gamma_e \sigma_e + \sigma_{p,x}}{\sigma_{t,x}(u) + \sigma_e} \quad (3.48)$$

et pour le modèle WR :

$$\varphi^{WR}(u) = \frac{\gamma_e \sigma_e}{\sigma_{a,x}(u) + \sigma_e}. \quad (3.49)$$

Le premier modèle est assez représentatif du ralentissement à haute énergie, pour cela, il est employé comme flux de mise en groupe par GROUPE dans le domaine non résolu (cf. 3.2.1). Le modèle WR du flux est assez réaliste à basse énergie ($E < 30$ eV), il est appliqué pour l'autoprotection de la première grande résonance de l'uranium 238 à 6.67 eV.

Les modèles ST et TR font l'hypothèse que, comme le gain de léthargie sur un noyau lourd est très petit, on peut remplacer, dans le noyau de transfert, l'exponentielle par une constante C_x qui, d'après la condition de normalisation, vaut :

$$\int_u^{u'+\epsilon_x} p_x(u' \rightarrow u) du = 1 \quad \Rightarrow \quad C_x = \frac{1 - \alpha_x}{\epsilon_x}. \quad (3.50)$$

Le noyau de ralentissement est donc représenté par :

$$r_{0,x}\varphi(u) \approx \frac{1}{\epsilon_x} \int_{u-\epsilon_x}^u \sigma_{s,x}(u') \varphi(u') du'. \quad (3.51)$$

Le modèle ST considère que les résonances sont étroites, statistiquement distribuées dans un groupe g et leur espacement est faible par rapport à ϵ_x . On remplace donc la moyenne sur l'intervalle $[u - \epsilon_x, u]$ par la moyenne sur le groupe g :

$$r^{ST}\varphi(u) \approx \frac{1}{\Delta u_g} \int_g \sigma_{s,x}(u') \varphi(u') du'. \quad (3.52)$$

En remplaçant cette définition dans l'équation de structure fine, on obtient l'expression du flux statistique :

$$\varphi(u)^{ST} = \frac{1}{1 - \frac{1}{\Delta u^g} \int_g \frac{\sigma_{s,x}(u')}{\sigma_{t,x}(u') + \sigma_e} du'} \frac{\gamma_e \sigma_e}{\sigma_{t,x}(u) + \sigma_e}. \quad (3.53)$$

Le modèle TR, en revanche, approxime l'intégrale (3.51) par la somme des taux de diffusion moyen par groupe, compris dans l'intervalle $[u - \epsilon_x, u]$:

$$\begin{aligned} r\varphi(u) \approx & \frac{1}{\epsilon_x} \left[(u_2(g') - u + \epsilon_x) \langle \sigma_{s,x}\varphi \rangle^{g'} + \right. \\ & \left. \sum_{g''=g'+1}^{g-1} \Delta u^{g''} \langle \sigma_{s,x}\varphi \rangle^{g''} + (u - u_1(g)) \langle \sigma_{s,x}\varphi \rangle^g \right]. \end{aligned} \quad (3.54)$$

En définissant la partition de chaque groupe g du maillage à l'aide des intervalles :

$$W(g', g) = \{u \in g \text{ tel que } : (u - \epsilon_x) \in g'\}, g' \leq g, \quad (3.55)$$

on peut réécrire le noyau de transfert par le modèle TR de la manière suivante :

$$r^{TR}\varphi(u) \approx \sum_{g' \leq g} \frac{\Delta W(g', g)}{\Delta u^g} \langle \sigma_{s,x} \varphi \rangle^{g'} = \sum_{g' \leq g} \text{prop}(g', g) \langle \sigma_{s,x} \varphi \rangle^{g'}, \quad (3.56)$$

où $\Delta W(g', g)$ exprime la largeur de l'intervalle $W(g', g)$. Le flux du modèle TR est alors donné par :

$$\varphi(u)^{TR} = \frac{1}{1 - \frac{\text{prop}(g, g)}{\Delta u^g} \int_g \frac{\sigma_{s,x}(u')}{\sigma_{t,x}(u') + \sigma_e} du'} \frac{k^g + \gamma_e \sigma_e}{\sigma_{t,x}(u) + \sigma_e}, \quad (3.57)$$

avec $k^g = \sum_{g' < g} \text{prop}(g', g) \langle \sigma_{s,x} \varphi \rangle^{g'}$.

On peut vérifier que :

- physiquement, le poids $\text{prop}(g', g)$ représente approximativement la probabilité qu'un neutron a d'être transféré du groupe g' dans le groupe g ;
- ce modèle tend vers le noyau de transfert (3.51) en raffinant le maillage énergétique.

Milieu hétérogène

On considère un problème de ralentissement élastique, i.e. sans source de fission, et sans fuites. On se place dans le cadre du formalisme des probabilités de collision avec flux plat et dans l'hypothèse de densité d'émission isotrope dans le référentiel du laboratoire. L'équation matricielle de ralentissement s'écrit :

$$\Sigma_t(u) V \Phi(u) = P(u) V [R_0 \Phi(u) + R_1 \Phi(u)], \quad (3.58)$$

où Σ_t est la matrice diagonale des sections efficaces totales, V est la matrice diagonale des volumes des régions de calcul, Φ le vecteur flux dans chaque région de calcul, P la matrice des probabilités de collision, R_0 les opérateurs de ralentissement par les noyaux lourds et R_1 les opérateurs de ralentissement par les noyaux légers.

On adopte le formalisme de Livolant-Jeanpierre et on suppose que χ est le même dans tous les points de l'espace :

$$r_0(\chi \varphi(u))_j \approx \chi_j(u) (r_0 \varphi(u))_j, \quad \chi_j(u) = \chi_i(u) \forall i, j, \quad (3.59)$$

l'équation (3.58) peut donc être mise sous la forme :

$$\Sigma_{ti}(u) V_i \varphi_i(u) = \sum_j P_{ij}(u) [V_j R_{0,j} \varphi_j(u) + \Sigma_{s1,j}(u)], \quad (3.60)$$

où Σ_{s1} est la section de diffusion des noyaux légers. On regroupe toutes les régions i dans une seule région d'autoprotection α , caractérisée par les mêmes mélanges résonnants. On note que le terme $R_{0,j}$ est nul en dehors des régions d'autoprotection β et on remplace le flux de structure fine par un flux moyen de la région φ_α . L'équation (3.61) devient :

$$\left[\sum_{i \in \alpha} \Sigma_{ti}(u) \right] V_i \varphi_\alpha(u) = \sum_\beta \left[\sum_{i \in \alpha} \sum_{j \in \beta} P_{ij}(u) V_j N_{0,j} \right] \tilde{r}_{0,\beta} \varphi_\beta(u) + \sum_{i \in \alpha} \sum_j P_{ij} V_j \Sigma_{s1,j}(u), \quad (3.61)$$

où la notation $\tilde{\cdot}$ correspond à une pondération sur la proportion relative des noyaux résonnants dans une région d'autoprotection pour le traitement en mélange ou au même opérateur construit avec la section microscopique de l'isotope résonnant considéré pour la méthode standard.

Si on définit la matrice $C(u)$ et le vecteur $\vec{S}(u)$ respectivement par :

$$C_{\alpha,\beta}(u) = \frac{\sum_{i \in \alpha} \sum_{j \in \beta} P_{ij}(u) V_j N_{0,j}}{\sum_{i \in \alpha} \sum_{t,i} (u) V_i}, \quad S_{\alpha}(u) = \frac{\sum_{i \in \alpha} \sum_j P_{ij}(u) V_j \Sigma_{s1,j}(u)}{\sum_{i \in \alpha} \sum_{t,i} (u) V_i}, \quad (3.62)$$

on peut réécrire la relation (3.61) sous la forme :

$$\varphi_{\alpha}(u) = \sum_{\beta} C_{\alpha,\beta}(u) \tilde{r}_{0,\beta} \varphi(u) + S_{\alpha}(u). \quad (3.63)$$

Cette équation présente un couplage énergétique et spatial. Le premier est approché par les modèles, expliqués auparavant : NR, WR, ST ou TR. Le deuxième est traité par la méthode **PIC** ou la méthode directe **MD**.

La méthode PIC effectue artificiellement la diagonalisation de la matrice C en supposant que :

$$\forall \beta \neq \alpha \quad r_{0,\alpha} \approx r_{0,\beta}. \quad (3.64)$$

La méthode directe calcule par un simple produit "matrice - vecteur" le flux en substituant dans (3.63), le noyau approché \tilde{r}_{β}^g des différentes modèles NR, WR, ST, TR :

$$\forall u \in g \quad \varphi_{\alpha}(u) = \sum_{\beta} C_{\alpha,\beta}(u) \tilde{r}_{\beta}^g + S_{\alpha}(u). \quad (3.65)$$

On signale que Paul Reuss a introduit une méthode intitulée "Méthode de la Matrice de Dilution" [Reuss, 1986], qui permet de traiter le couplage spatial. Cette méthode effectue la diagonalisation de la matrice C , en calculant ses valeurs propres. Puisque cette recherche devient un problème numériquement difficile à résoudre et instable pour les matrices de grande taille, on préfère utiliser la méthode directe.

Algorithme de résolution

L'autoprotection standard ou en mélange calcule les sections efficaces multigroupes selon un algorithme en deux étapes : l'**homogénéisation** et l'**équivalence multigroupe**.

Dans l'homogénéisation, on cherche la dilution σ_e à employer pour le calcul des taux de référence en milieu homogène infini, en effectuant une équivalence des taux approchés multigroupes¹⁵ en hétérogène $T_{x,i}^{g,*}$ et en homogène $T_{x,hom}^{g,*}(\sigma_e)$. Le flux utilisé résulte de la résolution de l'équation de structure fine (3.63) et (3.44), où les sections sont évaluées à la même température et où on emploie la même modélisation de l'opérateur de ralentissement $\tilde{r}_0 \varphi$ (modèle NR, WR, ST ou TR). Ces choix évitent d'ajouter des biais supplémentaires dans le calcul de la dilution. Cette équivalence est faite en traitant un noyau à la fois et tous les autres comme modérateurs (méthode standard) ou en écrivant les équations (3.63) et (3.44) pour un mélange de noyaux résonnants (traitement en mélange) et en cherchant une dilution $\sigma_{e,m,x}$ pour chaque noyau x du mélange m .

Avec la méthode standard, une fois la dilution connue, on évalue, pour chaque isotope, par interpolation des tabulations des taux effectifs de référence le taux de réaction exact à la température et à la dilution correspondante. Avec la deuxième méthode, on résout en ligne dans APOLLO2 l'équation (3.44), en approximant l'opérateur de ralentissement élastique par le modèle TR sur un maillage énergétique très fin (maillage universel à 11276 groupes) et, à l'aide de cette solution, on calcule les taux de réaction exacts pour chaque dilution $\sigma_{e,m,x}$.

Une synthèse de la procédure du calcul de l'homogénéisation est donnée dans la figure 3.7.

¹⁵Dans la méthode standard, l'équivalence est faite sur le taux d'absorption, pour le traitement en mélange on peut chercher une dilution différente pour le taux de diffusion et d'absorption.

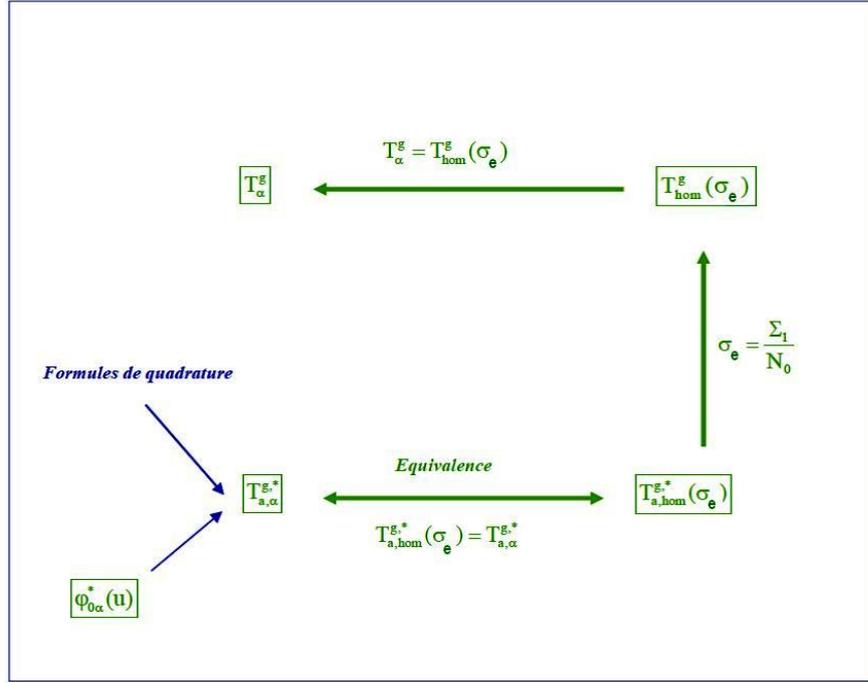


FIG. 3.7: Principe de l'homogénéisation dans le code APOLLO2 [Coste-Delclaux, 2006]

Les taux ainsi obtenus définissent le numérateur de la section multigroupe (3.38). La détermination du flux multigroupe concerne l'étape d'équivalence multigroupe. Dans cette phase, on cherche à calculer, pour toutes les réactions ρ et les régions d'autoprotection α , les sections multigroupes $\sigma_{\rho,x,\alpha}^g$ garantissant le respect des taux de réaction exacts :

$$\Delta u^g \sigma_{\rho,x,\alpha}^g \varphi_{\alpha}^g = T_{\rho,x,\alpha}^g \quad (3.66)$$

où φ_{α}^g est le flux multigroupe de structure fine.

Le flux multigroupe dépend des sections efficaces totales dans toutes les régions d'autoprotection, mais, comme les sections des noyaux non résonnants sont connues, on ne considère que celles des noyaux résonnants. De ce fait, on peut résoudre l'équation (3.66) que pour la réaction totale :

$$\Delta u^g \sigma_{t,x,\alpha}^g \varphi_{\alpha}^g(\vec{\Sigma}_t^g) = T_{t,x,\alpha}^g \quad (3.67)$$

et grâce au flux ainsi déterminé, calculer les sections efficaces pour toutes les autres réactions ρ :

$$\sigma_{\rho,x,\alpha}^g = \frac{T_{\rho,x,\alpha}^g}{\Delta u^g \varphi_{\alpha}^g} \quad (3.68)$$

où $\vec{\Sigma}_t^g = \sum_x \vec{\Sigma}_{t,0,x}^g + \vec{\Sigma}_{t,1}^g$ indique la section macroscopique totale dans les différentes régions d'autoprotection en notation vectorielle.

Le flux multigroupe φ_{α}^g dans l'équation (3.67) est solution de l'équation de structure fine (3.63), intégrée sur un groupe g , en géométrie hétérogène :

$$\varphi_{\alpha}^g(\vec{\Sigma}_t^g) = \frac{1}{\Delta u^g} \sum_{\beta} C_{\alpha,\beta}^g(\vec{\Sigma}_t^g) \sum_{x \in \beta} \sum_{g' \leq g} \delta_x p_x^{gg'} T_{s,x,\beta}^{g'} + S_{\alpha}^g(\vec{\Sigma}_t^g). \quad (3.69)$$

Dans cette équation, $T_{s,x,\beta}^{g'}$ représente le taux de diffusion exact et on a utilisé la définition de

probabilité de transfert multigroupe suivante :

$$p_{x,\beta}^{g,g'} = \frac{\int_g du \int_{g'} du' \sigma_{s,x}(u) p_x(u' \rightarrow u) \varphi_\beta(u')}{\int_{g'} du' \sigma_{s,x}(u') \varphi_\beta(u')}. \quad (3.70)$$

Pour évaluer ce terme, soit on utilise le flux de structure fine continu (autoprotection des taux de transfert) soit on prend les valeurs à dilution infinie $p_{x,\beta,\infty}^{g,g'}$ contenues dans la bibliothèque multigroupe.

Finalement, les sections totales autoprotégées et le flux multigroupe sont obtenus selon le schéma itératif suivant :

$$\begin{cases} \varphi_\alpha^{g,n} = \frac{1}{\Delta u^g} \sum_\beta C_{\alpha,\beta}^g (\bar{\Sigma}_t^{g,n-1}) \sum_{x \in \beta} \sum_{g' \leq g} \delta_x p_x^{g,g'} T_{s,x,\beta'}^{g'} + S_\alpha^g (\bar{\Sigma}_t^{g,n-1}) \\ \sigma_{t,x,\alpha}^{g,n} = \frac{T_{\rho,x,\alpha}^g}{\Delta u^g \varphi_\alpha^{g,n}} \\ \Sigma_{t,\alpha}^{g,n} = \sum_{x \in \alpha} N_x \sigma_{t,x,\alpha}^{g,n} + \Sigma_{t,1}^g \end{cases}$$

où n est l'indice des itérations. Ce processus est initialisé avec un flux plat sur toutes les régions et est arrêté quand la convergence sur les taux totaux est atteinte.

3.5.2 Autoprotection en sous-groupes

On expose au cours des paragraphes suivants les hypothèses de la méthode des sous-groupes et la façon de calculer les sections autoprotégées dans le code APOLLO2. Cette méthode a été formalisée par M. Coste-Delclaux [Coste-Delclaux et Mengelle, 1996] et puis introduite et validée au cours de la thèse de S. Mengelle [Mengelle, 1995]. On signale aussi que des méthodes différentes d'autoprotection ont pu être désignées avec le même nom, comme par exemple dans le code de transport multigroupe ERANOS [Rimpault, 1995].

Les hypothèses

La méthode des sous-groupes est basée sur la propriété d'égalité entre la moyenne sur un groupe g du produit de deux fonctions et le produit des moyennes sur ce groupe. On peut donc écrire pour toute fonction F ne dépendant de la léthargie u que par l'intermédiaire de la section microscopique totale d'un isotope résonnant $\sigma(u)$ et pour la densité de collision $\tau(\sigma)$:

$$\langle F(\sigma_t) \tau(\sigma_t) \rangle^g = \langle F(\sigma_t) \rangle^g \langle \tau(\sigma_t) \rangle^g, \quad (3.71)$$

$$\langle \sigma_x F(\sigma_t) \tau(\sigma_t) \rangle^g = \langle \sigma_x F(\sigma_t) \rangle^g \langle \tau(\sigma_t) \rangle^g. \quad (3.72)$$

Ces hypothèses sont correctes dans deux cas :

1. lorsque les structures résonnantes des sections efficaces ne sont pas corrélées aux sources ;
2. si le maillage multigroupe est suffisamment fin, de façon à pouvoir considérer la densité de collision constante sur le groupe.

La première approximation est *a priori* vérifiée dans le domaine non résolu, lorsque le gain moyen de léthargie dû au choc est grand devant la largeur des résonances, ce qui permet de supposer la non corrélation des sources et des sections. La deuxième condition permet d'appliquer la méthode dans le domaine résolu des sections efficaces. On verra par la suite quel est le critère pour évaluer la finesse d'un maillage (cf. 5.1.2).

Calcul des sections autoprotégées

La méthode des sous-groupes calcule les sections multigroupes autoprotégées avec le flux, solution d'un problème de ralentissement sans fuites à source externe. Puisque la méthode est appliquée sur des maillages énergétiques très fins, on suppose que le flux multigroupe diffère peu de l'intégrale du flux continu :

$$\Phi^g(\vec{r}) \approx \int_g \Phi(\vec{r}, u') du',$$

ce qui revient à ne pas faire l'équivalence multigroupe.

Pour l'instant la méthode développée dans le code APOLLO2 ne traite qu'un seul noyau résonnant à la fois avec une distribution de température uniforme. Elle a l'avantage de ne faire aucune hypothèse sur la physique du ralentissement des noyaux à autoprotéger, elle est donc adaptée à traiter n'importe quel type de noyaux résonnants et les domaines du ralentissement inélastique.

Prenons l'expression matricielle de la forme intégrale de l'équation de ralentissement et écrivons-la composante par composante :

$$\Sigma_{t,i}(u) V_i \Phi_i(u) = \sum_j P_{ij}(u) V_j [R \Phi_j(u) + S_j(u)], \quad (3.73)$$

où on retrouve les notations de l'équation (3.58), R est la matrice diagonale des opérateurs de ralentissement (élastique et inélastique) par le noyau résonnant x et les noyaux modérateurs et S indique une source externe. Cette source est différente de celle du problème de transport à résoudre. Elle a été choisie uniforme en espace, située dans le premier groupe à autoprotéger et valant 1.

Si on définit la densité de collision dans la région j par l'expression :

$$\tau_j = R_{0x} \Phi_j + R_{1j} \Phi_j + S_j, \quad (3.74)$$

le flux dans la région i est donné par :

$$\Phi_i(u) = \frac{\sum_j P_{ij}(u) V_j \tau_j(u)}{\Sigma_i(u) V_i} \quad (3.75)$$

En calculant maintenant, sous les hypothèses (3.71) et (3.72), le flux moyen $\langle \Phi_i \rangle^g$ et le taux moyen $\langle \sigma_{\rho,x} \Phi_i \rangle^g$, on obtient les expressions suivantes :

$$\langle \Phi \rangle^g = \sum_j \frac{V_j}{V_i} \langle \frac{P_{ij}}{\Sigma_i} \rangle^g \langle \tau_j \rangle^g \quad \langle \sigma_{\rho,x} \Phi_i \rangle^g = \sum_j \frac{V_j}{V_i} \langle \frac{\sigma_{\rho,x} P_{ij}}{\Sigma_i} \rangle^g \langle \tau_j \rangle^g. \quad (3.76)$$

La section multigroupe autoprotégée de la réaction partielle ρ dans la région i et le groupe g est donc donnée par :

$$\sigma_{i,x,\rho}^g = \frac{\langle \sigma_{\rho,x} \Phi_i \rangle^g}{\langle \Phi_i \rangle^g} = \frac{\sum_j \frac{V_j}{V_i} \langle \frac{\sigma_{\rho,x} P_{ij}}{\Sigma_i} \rangle^g \langle \tau_j \rangle^g}{\sum_j \frac{V_j}{V_i} \langle \frac{P_{ij}}{\Sigma_i} \rangle^g \langle \tau_j \rangle^g}, \quad (3.77)$$

où les termes $\langle \frac{P_{ij}}{\Sigma_i} \rangle^g$ et $\langle \frac{\sigma_{\rho,x} P_{ij}}{\Sigma_i} \rangle^g$ sont calculés grâce aux formules des quadratures décrites aux paragraphes 3.3.1 et 3.3.2 et la densité de collision moyen $\langle \tau_j \rangle^g$ est l'inconnue de la méthode.

Calcul des valeurs moyennes des densités de collision

La densité moyenne de collision, d'après la définition (3.74), est donnée par :

$$\langle \tau_j \rangle^g = \frac{1}{\Delta u^g} \int_g R_{0x} \Phi_j(u) du + \frac{1}{\Delta u^g} \int_g R_{1j} \Phi_j(u) du + \langle S_j \rangle^g. \quad (3.78)$$

L'opérateur de ralentissement résonnant multigroupe vaut :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta u^g} \int_g R_{0x} \Phi_j(u) du &= \frac{1}{\Delta u^g} \int_g du \int_0^\infty du' p_x(u' \rightarrow u)_{\Sigma_{s,x,0}(u')} \Phi_j(u') \\ &= \frac{1}{\Delta u^g} \sum_{g' \leq g} \int_g du \int_{g'} du' p_x(u' \rightarrow u)_{\Sigma_{s,x,0}(u')} \Phi_j(u'), \end{aligned}$$

et comme on utilise des maillages énergétiques très fins, on approxime la probabilité de transfert des noyaux lourd par celle calculée à dilution infinie :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta u^g} \int_g R_{0x} \Phi_j(u) du &\approx \frac{1}{\Delta u^g} \sum_{g' \leq g} p_{x,\infty}^{gg'} \int_{g'} \Sigma_{s,x,0}(u') \Phi_j(u') du' \\ &= \frac{1}{\Delta u^g} \sum_{g' \leq g} N_x p_{x,\infty}^{gg'} \langle \sigma_{s,x,0} \Phi_j \rangle^{g'} \Delta u^{g'}. \end{aligned} \quad (3.79)$$

Par analogie à l'opérateur de ralentissement résonnant multigroupe, on écrit pour les noyaux non résonnants :

$$\frac{1}{\Delta u^g} \int_g R_{1j} \Phi_j(u) du = \frac{1}{\Delta u^g} \sum_{g' \leq g} p_{1,\infty}^{gg'} \int_{g'} \Sigma_{s,1,j}(u') \Phi_j(u') du'.$$

Puisque la section de diffusion d'un modérateur peut être considérée comme constante, on peut simplifier l'expression :

$$\frac{1}{\Delta u^g} \int_g R_{1j} \Phi_j(u) du = \frac{1}{\Delta u^g} \sum_{g' \leq g} \Sigma_1^{gg'} \int_{g'} \Phi_j(u') du' = \frac{1}{\Delta u^g} \sum_{g' \leq g} \Sigma_1^{gg'} \langle \Phi_j \rangle^{g'} \Delta u^{g'}, \quad (3.80)$$

où $\Sigma_1^{gg'}$ est la section de transfert multigroupe à dilution infinie des noyaux modérateurs.

Le système à résoudre est donc :

$$\langle \tau_j \rangle^g = \sum_{g' \leq g} N_x p_{x,\infty}^{gg'} \langle \sigma_{s,x,0} \Phi_j \rangle^{g'} \frac{\Delta u^{g'}}{\Delta u^g} + \sum_{g' \leq g} \Sigma_1^{gg'} \langle \Phi_j \rangle^{g'} \frac{\Delta u^{g'}}{\Delta u^g} + \langle S_j \rangle^g, \quad (3.81)$$

mais d'après les définitions (3.76), on peut réécrire :

$$\langle \tau_i \rangle^g = \sum_{g' \leq g} N_x p_{x,\infty}^{gg'} \sum_j \frac{V_j}{V_i} \langle \frac{\sigma_{s,x} P_{ij}}{\Sigma_i} \rangle^{g'} \langle \tau_j \rangle^{g'} \frac{\Delta u^{g'}}{\Delta u^g} + \sum_{g' \leq g} \Sigma_1^{gg'} \sum_j \frac{V_j}{V_i} \langle \frac{P_{ij}}{\Sigma_i} \rangle^{g'} \langle \tau_j \rangle^{g'} \frac{\Delta u^{g'}}{\Delta u^g} + \langle S_i \rangle^g. \quad (3.82)$$

La densité de collision moyenne est donc obtenue par inversion dans chaque groupe g , du système (3.82), qui est triangulaire en énergie et linéaire en espace.

3.5.3 Limites des méthodes d'autoprotection

Les deux modèles d'autoprotection exposés présentent des limites différentes.

Pour la méthode Livolant-Jeanpierre, d'une part, l'hypothèse sur l'opérateur de ralentissement $R_0\Phi$ rend cette méthode adaptée uniquement aux mélanges contenant un noyau léger très diffusant non résonnant et des noyaux lourds résonnants, d'autre part, la non prise en compte des réactions inélastiques discrètes et de l'anisotropie du transfert en limite le domaine énergétique d'application.

Pour la méthode des sous-groupes, il faut considérer la non prise en compte du profil de température et des effets de mélange de noyaux résonnants. Ce dernier défaut n'a pas trop d'influence, parce que le maillage employé avec cette méthode est aussi fin (12000 groupes) que le recouvrement des résonances entre isotopes est faible. L'adoption de maillages plus grossiers pourrait rendre nécessaire un traitement en mélange.

Dans ces deux méthodes d'autoprotection, toutes les intégrations en léthargie sont faites par la méthode de Gauss en utilisant les tables de probabilité. Cette méthode a l'avantage d'évaluer les intégrales plus précisément qu'une intégration par rectangle ou trapèze à égalité de nombre de points [Cullen et Pomraning, 1980]. Par contre elle est pénalisée par la complexité factorielle dans l'obtention des probabilités croisées. De ce fait, on est amené à réduire le nombre de paramètres (nombre de noyau résonnants dans un mélange, profil de température ...) nécessaires à la modélisation du phénomène d'autoprotection.

Deuxième partie

Développements théoriques

Le travail original, effectué au cours de cette thèse, est abordé dans cette partie.

On commence en donnant un aperçu sur le principe du mailleur adaptatif (cf. chapitre 4).

La méthodologie choisie traite le problème en multigroupe et elle est constituée de deux étapes : la définition d'une solution multigroupe de référence sur un maillage énergétique fin et la condensation optimale de celui-ci sur des structures plus grossières, en prenant en compte les modèles d'autoprotection.

On explique donc d'abord la façon de construire la solution de référence multigroupe (cf. chapitre 5).

On décrit ensuite les modèles d'autoprotection développés dans la phase de la condensation et la méthode de recherche du maillage optimisé (cf. chapitre 6).

Chapitre 4

Principes du mailleur adaptatif

En regardant le panorama actuel, les problèmes neutroniques à résoudre sont divers et variés (réacteurs existants, de transition et de génération IV). Bien que les méthodes développées ici permettent en principe de créer une bibliothèque adaptée à tout l'ensemble, cela ne semble pas une bonne option. En effet, une telle bibliothèque multigroupe nécessiterait un nombre élevé de groupes (environ 12000 groupes) et présenterait les inconvénients suivants :

- un espace mémoire excessif [Mengelle, 1995] ;
- un temps de calcul très pénalisant, vu que l'on serait obligé de faire des condensations et des reconstructions des matrices de transfert [Aggerly, 1999] pour traiter des problèmes usuels de neutronique ;
- une précision limitée à cause d'une discrétisation spatiale insuffisante ou d'une description trop restreinte de la géométrie.

En pratique, l'idée de bon sens, instruite de l'expérience, est de restreindre autant que possible le domaine d'application pour avoir un nombre acceptable de groupes et un calcul le plus efficace par la suite. Pour l'instant, le temps de construction d'une bibliothèque multigroupe, pour des raisons d'efficacité, ne permet pas d'en créer une pour chaque type d'application de l'utilisateur, il faut donc au moins prévoir d'adapter le maillage énergétique sur une famille de problèmes hétérogènes représentative de la problématique à traiter. Pour chacun de ceux-ci, comme détaillé au paragraphe 4.1.1, il est possible d'associer un ensemble de problèmes homogènes spectralement analogues. Les paramètres pour effectuer cette équivalence sont : la température des différents milieux, les mélanges des noyaux (caractérisés chacun par sa composition et les concentrations des noyaux), les dilutions et les sources externes (modélisées ou déduites par un précédent calcul APOLLO2).

L'optimisation d'un maillage énergétique garantissant une précision donnée implique l'usage d'une solution de référence pour mesurer la valeur des diverses solutions approchées recherchées. Comme cela sera discuté à la section 4.1, une résolution multigroupe constitue le meilleur choix pour explorer la plus large famille de maillages sans avoir des contraintes de validité relative au domaine énergétique à traiter.

Doté d'une solution de référence multigroupe, normalement sur un maillage assez fin, on cherche la condensation optimale de celui-ci minimisant, pour un nombre fixé de groupes, les erreurs sur les taux de réactions. Pendant cette étape, les données multigroupes sont calculées grâce aux différents modèles de mise en groupe (Livolant-Jeanpierre, sous-groupes pour les noyaux résonnants et le spectre macroscopique du réacteur pour les noyaux non résonnants) du processus actuel de calcul des sections multigroupes (cf. chapitre 3).

Il s'ensuit que le mailleur énergétique, outil qu'on a appelé AEMC (*Adaptive Energy Mesh Constructor*), doit permettre de :

- résoudre des problèmes de transport ;
- calculer les données multigroupes avec les différents flux de mise en groupe sur les

maillages énergétiques étudiés pendant l'optimisation ;

- modifier le maillage énergétique afin de minimiser les erreurs obtenues avec les solutions approchées et de référence.

On enchaîne ce processus de calcul en situation homogène, en utilisant les données multigroupes calculées par les codes NJOY et CALENDF. Vu que le passage hétérogène-homogène fait perdre la notion d'angle et d'espace, il est nécessaire de vérifier *a posteriori* l'adéquation du maillage énergétique sur des problèmes réels, dépendant de toutes ces variables. Ce passage requiert donc de tester la précision du maillage énergétique par comparaison des codes probabiliste TRIPOLI4 et déterministe APOLLO2.

Si les contraintes ne sont pas satisfaites, on peut enrichir la base de cas homogènes à partir des résultats du code APOLLO2 (**bootstrap**) et réitérer le processus de création du maillage. Le système sera d'autant plus performant que le nombre d'itérations sera bas. En conséquence, il est préférable d'utiliser une base de cas homogènes initiaux aussi vaste et complète que possible.

Nous pouvons résumer la chaîne de calcul du maillage énergétique optimisé dans les étapes suivantes :

1. analyse de la filière ou des problématiques neutroniques à traiter et déduction de la base de cas homogènes les plus représentatifs ;
2. création du maillage fin pour disposer d'une solution multigroupe de référence pour l'ensemble des cas homogènes (cf. chapitre 5) ;
3. déduction du maillage optimisé pour l'ensemble des cas homogènes par minimisation de la fonctionnelle construite avec les taux de réaction issus des solutions multigroupes de référence et approchées (cf. chapitre 6) ;
4. test de la précision du maillage optimisé sur des problèmes hétérogènes avec TRIPOLI4 et APOLLO2, si les contraintes, définies par l'utilisateur, ne sont pas satisfaites, on enrichit la base de cas homogènes initiaux et on reprend du point 2.

La création du maillage fin de référence et sa condensation optimisée peuvent être réalisées en appelant des fonctions différentes du code AEMC, qui, à l'heure actuelle, ne font pas partie d'un système complètement automatisé. Le choix des cas homogènes est du ressort de l'utilisateur et il dérive de considérations neutroniques. Les différentes sections efficaces (tables de probabilité, sections ponctuelles et multigroupes), dont on doit disposer pendant l'optimisation du maillage énergétique, sont obtenues grâce à la chaîne de traitement automatique GALILEE à partir des données au format ENDF.

Avant de détailler ces deux phases de l'adaptation du maillage énergétique (points 2 et 3 ci-dessus), on expose, dans les paragraphes suivants, les choix effectués pour définir la solution de référence de l'équation de transport et pour optimiser le maillage énergétique.

4.1 Type d'équation pour la solution de référence

La résolution de l'équation continue stationnaire de transport (2.1) peut être réalisée par des solveurs probabilistes Monte Carlo ou déterministes. Les premiers ne semblent pas adaptés pour évaluer dynamiquement le flux neutronique, les taux de réaction et les variances associées sur des bornes énergétiques déplacées d'une façon presque continue. Parallèlement, la résolution par un solveur déterministe n'est pas praticable avec les sections efficaces continues en énergie dans le format PENDF, parce que le support énergétique, sur lequel elles sont définies, comprend plusieurs centaines de milliers de points pour les noyaux lourds principaux avec des précisions acceptables de reconstruction. Il est donc nécessaire de faire des hypothèses simplificatrices sans négliger les effets neutroniques les

plus importants pour la mise en groupe. On va discuter par la suite quelles sont les simplifications les plus pertinentes de l'équation (2.1) vis-à-vis de la construction d'un maillage énergétique et d'une bibliothèque multigroupe.

4.1.1 La dépendance en espace

L'optimisation simultanée des maillages énergétique et spatial donne *a priori* des résultats différents par rapport à une optimisation en séquence de la seule variable énergétique puis de la discrétisation spatiale. Toutefois la première stratégie oblige à changer de maillage énergétique et à produire une nouvelle bibliothèque chaque fois qu'on doit résoudre un nouveau problème. Pour des raisons d'efficacité, on veut s'en dispenser et donc on adapte la discrétisation énergétique pour répondre aux besoins des utilisateurs sur un ensemble de problèmes cibles simplifiés.

Nous utilisons des problèmes à source et à valeur propre pour caractériser à la fois le ralentissement dans des milieux non multiplicateurs (par exemple le réflecteur d'un réacteur) ou multiplicateurs (par exemple un barreau de combustible). Comme la variété des configurations géométriques est très vaste et diversifiée, nous essayons de simplifier le problème en étudiant la possibilité d'effectuer une transposition hétérogène-homogène. En s'appuyant sur le principe d'homogénéisation de l'autoprotection Livolant-Jeanpierre (cf. paragraphe 3.5.1), on sait qu'il est possible d'associer à chaque région d'une géométrie un milieu équivalent, caractérisé par une dilution spécifique, ayant les mêmes taux de réaction. Cette grandeur reproduit en effet le creusement du flux à la fois énergétique autour des résonances et spatial d'une région à une autre du réacteur. Sa paramétrisation nous permet donc de recréer en homogène une variété étendue de spectres neutroniques, appartenant à différents types de configurations (réseaux sous-modérés, taux de vidange variables). À titre d'exemple la figure 4.1 montre la modification du spectre neutronique en fonction de la dilution sur un problème à valeur propre avec du MOX enrichi à 5 %.

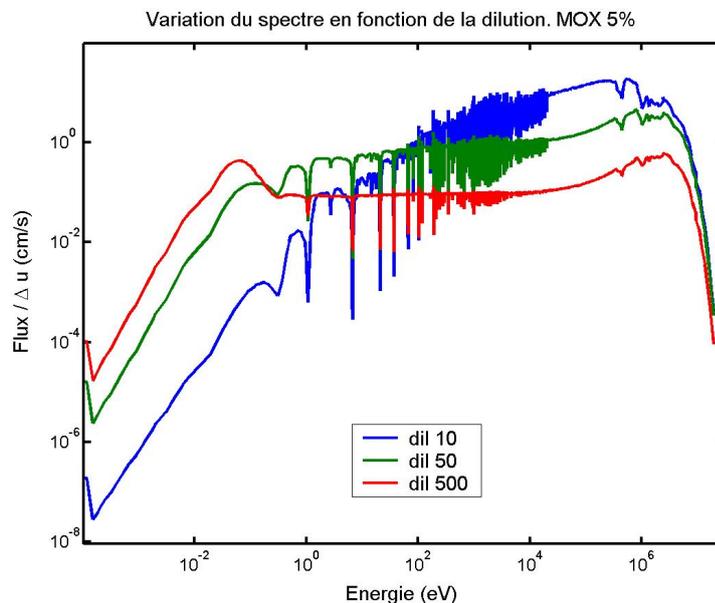


FIG. 4.1: Illustration de la modification du spectre avec la dilution.

En plus de la dilution on utilise pour effectuer la transposition homogène-hétérogène les paramètres suivants : la composition des noyaux et la température. Le premier est utile pour évaluer les modifications spectrales du flux liées au changement du type de combustible ou de la composition au cours de l'irradiation. Le deuxième permet de rendre compte des effets

induits par l'élargissement Doppler des sections efficaces.

4.1.2 La dépendance en angle

Trois points concernent le traitement du noyau de transfert : la prise en compte de la corrélation angle-énergie, la dépendance angulaire du flux et la faisabilité d'un calcul exact de cet opérateur dans un solveur de transport.

Pour les deux premiers points, le modèle du milieu homogène infini choisi reproduit les effets de l'hétérogénéité grâce au paramètre de la dilution ou d'une source externe ¹, mais il ne prend pas en compte la corrélation angle-énergie du transfert et la dépendance angulaire du flux. Ces effets sont donc négligés pendant la phase d'optimisation du maillage énergétique et sont réintroduits dans l'étape de vérification du maillage sur des problèmes hétérogènes où le flux est anisotrope. C'est dans cette phase qu'on adapte l'ordre du développement en polynôme de Legendre au maillage énergétique optimisé.

Pour le dernier point, la résolution continue de l'équation de transport avec l'opérateur de transfert exact est faite pour les réactions élastiques et inélastiques sous l'hypothèse d'isotropie du choc dans le centre de masse [Williams, 2000]. Ces approximations ne sont justifiées que dans le domaine des résonances résolues où on est loin des seuils de diffusion inélastique (supérieurs à 45 keV pour les noyaux lourds et 1 MeV pour les noyaux légers). À plus haute énergie ces hypothèses ne sont plus valables et le calcul du noyau de transfert exact est très complexe si on veut prendre en compte l'anisotropie dans le centre de masse et les réactions de diffusion à plusieurs corps. Dans le domaine thermique, à l'heure actuelle, il n'existe aucun solveur déterministe de transport qui utilise directement le noyau continu de transfert, pour résoudre l'équation de transport. Pour ces raisons, au moins dans le domaine thermique et à haute énergie, on résout l'équation de transport avec les données multigroupes issues des modules GROUPE et UNRESR de NJOY (cf. 3.2) et les tables de probabilité produites par CALENDF dans le domaine non résolu (cf. 3.3).

4.2 L'approche pour l'optimisation du maillage énergétique

La méthode, que nous avons adoptée pour optimiser le maillage énergétique, prévoit de définir un maillage fin garantissant une solution de référence équivalente au Monte Carlo et ensuite de dégrader celle-ci en étudiant plusieurs maillages avec un nombre de groupes différent. Elle présente l'avantage de pouvoir reconstituer toutes les données par condensation de données fines, calculées une fois pour toutes, sur le maillage fin.

Jusqu'à présent, les maillages énergétiques étaient obtenus en raffinant à pas constant de léthargie par macro-domaines énergétiques. La largeur des groupes était adaptée en fonction de considérations physiques sur le transfert des neutrons et de la localisation des résonances de certains noyaux. Un algorithme plus générique a ensuite été proposé pour la construction du maillage énergétique SHEM. Cette méthode, adaptée au domaine des résonances résolues, définit le découpage multigroupe en bornant l'erreur sur les taux de réaction issus d'un flux modélisé. En s'appuyant sur ces travaux, nous avons généralisé et automatisé la méthode de construction des maillages. On applique dans AEMC un critère :

- local qui permet de raffiner le maillage notamment dans le domaine des résonances, en bornant l'erreur entre un flux modélisé de référence et un flux modélisé multigroupe (critère du flux) ;
- agissant en pratique globalement pour garantir une description précise du transfert des neutrons (critère du transfert) et qui est nécessaire dans la perspective d'un calcul d'autoprotection avec la méthode des sous-groupes.

¹On peut en théorie associer à chaque région d'un calcul un problème homogène infini ayant une source externe spécifique, spectralement équivalente à celle du problème réel.

On explicitera mieux, aux paragraphes 5.1.1 et 5.1.2, les équations et l'algorithmique de cette méthode. En tout cas il faut remarquer que la génération d'un maillage de référence nécessite de trouver la meilleure combinaison entre ces deux critères. On réserve la discussion de ce point au paragraphe 8.3.2, dédié à la création du maillage multigroupe de référence pour la filière des réacteurs rapides au sodium.

Une fois le maillage fin défini, on dispose d'une solution de référence et on passe à une étape de condensation optimale du maillage énergétique. Dans cette phase, le nombre de groupes est fixé par l'utilisateur et l'objectif est de chercher les "meilleures" bornes énergétiques pour minimiser les erreurs sur les taux de réactions, étant choisis au préalable un modèle ou une combinaison de modèles d'autoprotection (méthode des sous-groupes ou modèle de Livolant Jeanpierre). Ce choix n'est pas anodin car il conditionne la qualité de la solution approchée.

Le problème d'optimisation qui en découle, consistant à choisir des bornes parmi un grand nombre, est de type combinatoire. Pour les applications qui nous concernent, il présente des espaces de recherche tellement vastes que l'analyse de toutes les solutions est illusoire. De ce fait, on s'est orienté vers des algorithmes d'optimisation génériques de type stochastique, qui ont l'avantage de fournir des solutions numériquement acceptables en n'explorant qu'une portion de l'espace de recherche. Au chapitre 6 on discutera plus en détail des étapes nécessaires pour condenser les données multigroupes et de la méthode d'optimisation du maillage énergétique.

À la place de ce schéma de calcul exposé aux points 2 et 3 au début du chapitre 4, on aurait pu concevoir une méthode basée sur un raffinement successif d'un maillage grossier de départ tant que les erreurs sur les taux de réactions excèdent une valeur donnée. Cette approche a été écartée parce que l'appel dynamique des programmes actuels de calcul des données multigroupes (CALENDF et NJOY), nécessaire à la méthode, est pour l'instant trop complexe à mettre en œuvre.

La première étude d'optimisation du maillage énergétique pour des réacteurs RNR-sodium selon les principes décrits ci-dessus a été présenté à la conférence de PHYSOR2008 [Mosca et Mounier, 2008].

Chapitre 5

Solution multigroupe de référence

Ce chapitre traite de la construction d'une solution multigroupe de référence de l'équation de transport. On montre d'abord les étapes nécessaires pour définir le maillage énergétique de référence. On décrit ensuite la modélisation multigroupe à l'intérieur du solveur homogène de AEMC. La dernière section traite de la résolution de l'équation de ralentissement ponctuelle en énergie dans le solveur ponctuel de AEMC et les extensions apportées pour prendre en compte les réactions inélastiques discrètes hors continuum. Les solutions de ce solveur ponctuel constituent une alternative à la référence Monte Carlo dans certains domaines énergétiques pour la construction du maillage de référence, c'est pourquoi sa description est donnée dans ce chapitre.

5.1 Construction du maillage de référence

La recherche d'une solution de référence multigroupe consiste à définir le maillage énergétique et la fonction de mise en groupe associée pour garantir le respect des taux de réaction sur un maillage donné, qui n'est pas forcément le maillage de calcul. Supposons, pour l'instant, que nous disposons d'une solution de référence ; on reviendra sur ce point à la section 5.4 où on discute des différentes façons d'obtenir une telle solution.

Doté d'une solution de référence, un processus de raffinement du maillage par essai-erreur peut être enchaîné moyennant une construction des données et un calcul des taux. Le point crucial pour être précis et rapide réside dans le principe de déduction du maillage. Analysons donc par la suite les algorithmes de construction des maillages.

5.1.1 Critères portant sur les taux et sur le flux

La première méthode développée s'inspire de l'algorithme conçu pour la création du maillage SHEM [Hfaiedh et Santamarina, 2005]. Elle consiste à déterminer le découpage énergétique de manière à borner l'erreur absolue $R_{\rho,x}^g$ entre :

- un taux de réaction de référence issu de la résolution de l'équation du ralentissement avec un modèle de ralentissement NR ou WR, pour chaque noyau x , réaction ρ et groupe g :

$$T_{\rho,x}^g = \int_g \sigma_{\rho,x}(E) \phi(E') dE', \quad (5.1)$$

- un taux approché calculé avec la section multigroupe $\sigma_{\rho,x}^g$ résultant de la mise en groupe avec une fonction de pondération donnée et un flux multigroupe ϕ^g obtenu par condensation multigroupe du flux $\phi(E)$ sur le groupe g :

$$\hat{T}_{\rho,x}^g = \sigma_{\rho,x}^g \phi^g. \quad (5.2)$$

On trouve dans l'annexe B une description détaillée de la méthode et des différents critères de précision applicables.

Le principal défaut de cette approche provient du fait que si la section est non résonnante mais que le flux présente des gradients, aucune discrétisation n'est effectuée car :

$$\text{si } \sigma_{\rho,x}(E) \approx \text{const} \quad \text{alors } R_{\rho,x}^g = \text{const} \left| \int_g \Phi(E') dE' - \Phi^g \right| = 0. \quad (5.3)$$

Ces gradients proviennent des couplages énergétiques, négligés par ces modèles, en premier lieu avec la source de fission et en deuxième avec le transfert.

Afin d'améliorer le modèle, on a décidé d'employer un flux plus représentatif de la problématique à résoudre. On calcule avec une bibliothèque multigroupe déjà disponible, qui ne correspond pas nécessairement à un maillage fin, la densité de collision pour chaque problème homogène i de la filière. À partir de ces données, on reconstruit le flux modèle suivant :

$$\phi_i(E) = \frac{\tau_i(E)}{\Sigma_{t,i}(E)}, \quad (5.4)$$

où $\Sigma_{t,i}(E)$ est la section macroscopique totale continue. La densité de collision $\tau_i(E)$ est obtenue par interpolation linéaire entre les points milieux du maillage multigroupe. La figure 5.1 donne un exemple de ce type de reconstruction. Le niveau de flux est fourni par la densité de collision, alors que ses fluctuations dérivent principalement de fortes variations de la section totale ponctuelle à proximité des résonances.

On rappelle qu'il est également possible d'initier le processus de construction du maillage en imposant une densité de collision unitaire $\tau_i(E) = 1$ ou donnée par une fonction analytique $w(E)$, quand on n'a aucune connaissance *a priori* de la solution des problèmes neutroniques.

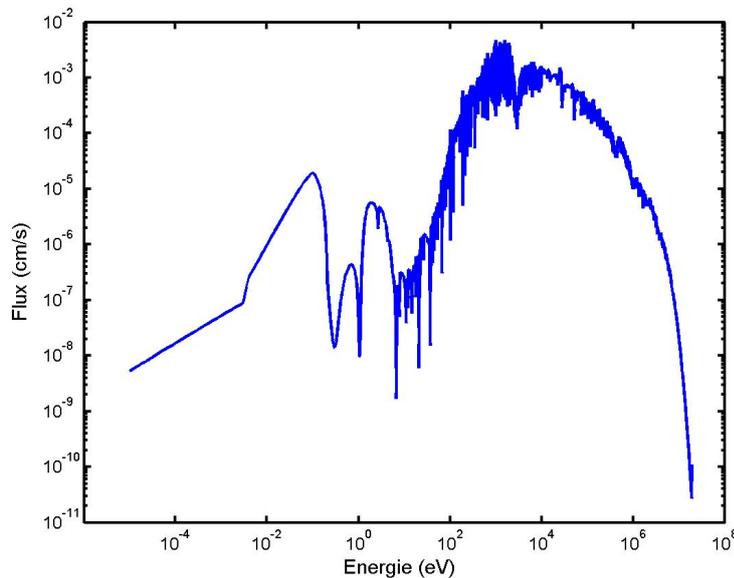


FIG. 5.1: Reconstruction du flux modèle.

Le découpage énergétique est déduit en bornant l'erreur entre le flux modèle et sa valeur moyenne. L'erreur maximale imposée est une fonction constante par morceaux sur un maillage énergétique \mathcal{M}_b incluant une liste de bornes E_b . Ces dernières correspondent aux bornes extrêmes du domaine énergétique et aux bornes imposées par l'utilisateur (coupure

thermique ou bornes d'un maillage existant). Dans un macrogroupe donné G_b , on impose

$$\max_{E \in g} \left| \frac{\phi_i(E)}{\phi_i^g} - 1 \right| \leq \epsilon_{f,i}^g, \quad \forall i, \forall g \in G_b, \quad (5.5)$$

où ϕ_i^g est l'intégrale du flux $\phi_i(E)$ sur un groupe g . Ce critère raffine le maillage aux énergies où les gradients du flux sont les plus importants et les sections efficaces sont résonnantes (cf. figure 5.2).

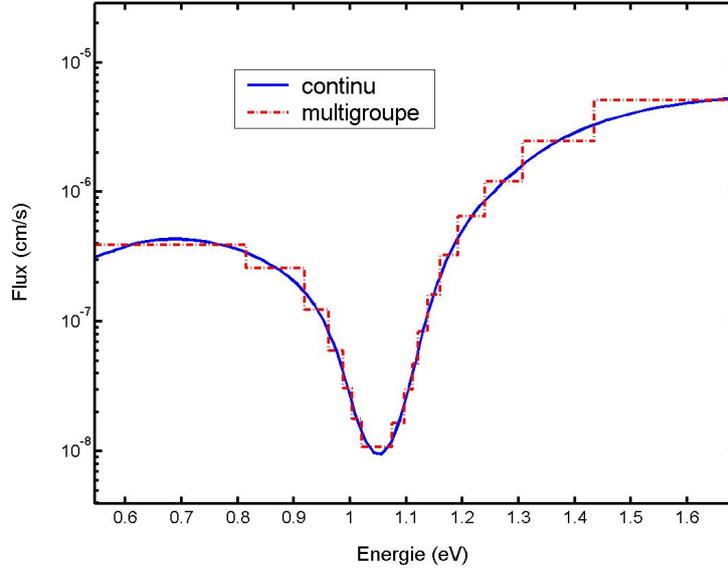


FIG. 5.2: Construction du maillage par application du critère sur le flux.

Définissons pour la suite la grille $\{E_f\}$, réunion des supports énergétiques $\{E_j\}$, sur lesquelles les sections efficaces totales des noyaux du mélange et la densité de collision sont représentées.

Comme la densité de collision $\tau_i(E)$ et la section macroscopique $\Sigma_{t,i}(E)$ sont des fonctions linéaires par morceaux, le flux continu $\phi_i(E)$ et sa dérivée d'ordre 1 sont donc donnés par :

$$\phi_i(E) = \frac{a_j E + b_j}{c_j E + d_j} \quad (5.6)$$

$$\phi_i'(E) = \frac{a_j d_j - b_j c_j}{(c_j E + d_j)^2}, \quad (5.7)$$

avec a_j, b_j, c_j, d_j constantes dans l'intervalle $[E_j, E_{j+1}]$ de la grille $\{E_f\}$.

Il s'ensuit que le flux continu $\phi_i(E)$ est monotone dans chaque intervalle de la grille $\{E_f\}$ et donc que, pour respecter le critère (5.5) sur tout le groupe, il suffit de vérifier celui-ci sur tous les points inclus dans le support fusion $\{E_f\}$. On peut imposer une précision sur le flux $\epsilon_{f,i}^b$, soit constante sur tout le domaine énergétique à traiter, soit variable en raison du poids de l'absorption du macro-domaine énergétique G_b . Comme les taux de réaction peuvent varier de plusieurs décades d'un domaine énergétique à l'autre et qu'ils dépendent du problème neutronique i considéré, on affecte la précision fixée sur le flux par le facteur :

$$\epsilon_{f,i}^b = -\epsilon_f \log \left[\frac{T_{a,i}/T_{a,i}^b}{\max_g (T_{a,i}/T_{a,i}^b)} \right], \quad (5.8)$$

où $T_{a,i}$ et $T_{a,i}^b$ sont respectivement les taux macroscopiques d'absorption globaux et détaillés sur un découpage fixé. Ces données sont disponibles à partir du calcul multigroupe utilisé pour définir la densité de collision. Cette modulation permet d'affiner le maillage dans les domaines énergétiques avec un taux d'absorption élevé.

La grille de base $\{E_f\}$ satisfait dans chacun de ses intervalles le critère (5.5), mais ce maillage contient trop de groupes pour effectuer l'étape de la condensation optimale (cf. 6) d'une façon efficace. C'est pourquoi on cherche à construire un maillage énergétique plus large \mathcal{M}_f à partir de la grille de base $\{E_f\}$.

L'obtention de ce maillage fin est issue d'une procédure séquentielle en déplaçant la variable énergétique E dans un intervalle $\{E_b, E_{b-1}\}$ selon l'algorithme suivant :

1. Parcourir par valeur décroissante $E \in \{E_f\}$ à partir de E_{g-1} tant que le critère (5.5) et la condition $E \geq E_b$ sont remplis, où E_{g-1} est la borne de la bande énergétique précédemment fixée ;
2. Puis découper par dichotomie l'intervalle entre la valeur énergétique E trouvée et la borne supérieure du support fin $\{E_f\}$ jusqu'à ce que la condition (5.5) soit satisfaite et passer en 3 ;
3. Poser $E_g = E$ et reprendre en 1.

Cet algorithme est appliqué sur le domaine énergétique complet d'intérêt et toutes les intégrations sont réalisées par la méthode de Romberg [Müller et Uhlig, 1996].

Cette approche a été testée pour obtenir des maillages adaptés à la problématique RNR-sodium ou au réflecteur lourd de l'EPR. Dans les deux cas, on est en mesure de construire une famille de maillages permettant des solutions multigroupes sans autoprotection qui convergent lentement vers la solution de référence Monte Carlo (cf. 8.3.2).

Ce fait nous a conduit à envisager une autoprotection en sous-groupes. C'est l'objet de la section suivante de discuter des conditions de validité de cette approche.

5.1.2 Critère portant sur le transfert

Pour réduire le nombre de groupes du maillage de référence et pour prendre en compte les fluctuations des sections dans le domaine non résolu des noyaux avec les tables de probabilité, on applique une autoprotection par la méthode des sous-groupes. Cette méthode suppose² de pouvoir négliger la corrélation entre les sections σ_ρ et les sources de ralentissement τ et donc de pouvoir affirmer que :

$$\langle \sigma_\rho \tau \rangle^g = \langle \sigma_\rho \rangle^g \langle \tau \rangle^g \left[1 + \frac{\langle \delta \sigma_\rho \delta \tau \rangle^g}{\langle \sigma_\rho \rangle^g \langle \tau \rangle^g} \right] \quad \text{avec} \quad \left| \frac{\langle \delta \sigma_\rho \delta \tau \rangle^g}{\langle \sigma_\rho \rangle^g \langle \tau \rangle^g} \right| \ll 1, \quad (5.9)$$

où $\langle \cdot \rangle^g$ représente la moyenne sur un groupe g et on a utilisé la définition :

$$f(E) = \langle f \rangle^g + \delta f(E), \quad \text{avec} \quad \langle \delta f \rangle^g = 0, \quad \forall E \in g. \quad (5.10)$$

Si les sections ne sont pas corrélées à la source de ralentissement, comme dans le domaine non résolu d'un noyau, alors on a :

$$\left| \frac{\langle \delta \sigma_\rho \delta \tau \rangle^g}{\langle \sigma_\rho \rangle^g \langle \tau \rangle^g} \right| = \left| \left\langle \frac{\delta \sigma_\rho}{\langle \sigma_\rho \rangle^g} \right\rangle^g \right| \left| \left\langle \frac{\delta \tau}{\langle \tau \rangle^g} \right\rangle^g \right| = 0, \quad (5.11)$$

par définition de la moyenne.

²Les considérations qui suivent sont les résultats d'une discussion avec Richard Sanchez et elles ont été présentées par lui même à l'occasion du séminaire sur l'autoprotection du 21 février 2008 au CEA de Saclay [Sanchez, 2008].

Dans le cas contraire, il faut déterminer les conditions pour négliger les variations de la source de ralentissement sur un groupe g . Définissons l'énergie E_Q comme suit :

$$\tau(E) > 0 \rightarrow \exists E_Q \in g : \tau(E_Q) = \langle \tau \rangle^g, \quad (5.12)$$

et développons en série de Taylor la densité de collision autour de l'énergie E_Q :

$$\delta\tau(E) = \sum_{n \geq 1} \frac{(E - E_Q)^n}{n!} \tau^{(n)}(E_Q) = h\tau'(E_Q) + O(h^2) \quad \text{avec } h = E - E_Q. \quad (5.13)$$

Sous l'hypothèse de ralentissement élastique et isotrope dans le centre de masse et en considérant un seul noyau, on peut déduire que :

$$\tau(E) = \int_E^{E/\alpha_x} \frac{T_{s,x}(E')}{(1 - \alpha_x)E'} dE' \rightarrow \tau'(E) = \frac{T_{s,x}(E/\alpha) - T_{s,x}(E)}{(1 - \alpha_x)E}, \quad (5.14)$$

et donc réécrire l'équation (5.13) sous la forme :

$$\delta\tau(E) = \frac{h}{(1 - \alpha_x)E_Q} [T_{s,x}(E_Q/\alpha) - T_{s,x}(E_Q)] + O(h^2) \approx O(\Delta E_g) \quad \text{avec } \Delta E_g = E_{g-1} - E_g. \quad (5.15)$$

Puisque le domaine de variation de la source de ralentissement est au moins de l'ordre de $[E_{g-1}, E_g/\alpha_x]$ (cf. figure 5.3), on peut négliger les fluctuations $\delta\tau$ si :

$$\Delta E_g \ll \frac{E_g}{\alpha_x} - E_{g-1} \rightarrow \Delta E_g \ll E_{g-1} \frac{1 - \alpha_x}{1 + \alpha_x} \rightarrow \Delta E_g \ll E \frac{1 - \alpha_x}{1 + \alpha_x}. \quad (5.16)$$

En définissant la perte moyenne d'énergie par choc élastique :

$$\overline{\Delta E} = E - \frac{(E + \alpha_x E)}{2} = \frac{E(1 - \alpha_x)}{2}, \quad (5.17)$$

la condition (5.16) devient :

$$\Delta E_g \ll \frac{2}{1 + \alpha_x} \overline{\Delta E}, \quad (5.18)$$

ce qui correspond à borner la largeur des groupes par rapport à une fraction de la perte moyenne d'énergie par choc élastique. Cette condition explique pourquoi le maillage 1968 ECCO, caractérisé par un espacement des groupes à léthargie constant ($\Delta u = \frac{2}{A_{Pu240}} = 0.008$), donne des résultats satisfaisants avec une autoprotection en sous-groupes.

Écrivons, sous hypothèse de choc isotrope dans le centre de masse, la probabilité de transfert d'une énergie E' à une énergie E à travers le cosinus de déviation μ dans le système du laboratoire [Williams, 1966, chap. 8] :

$$p(E' \rightarrow E, \mu) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{2} T_l(E', E) P_l(\mu). \quad (5.19)$$

Dans cette équation $P_l(\mu)$ est le polynôme de Legendre d'ordre l et $T_l(E', E) = \frac{1}{2} \frac{d\omega}{dE} P_l(\omega(E', E))$

est fonction du cosinus dans le centre de masse ω et du Jacobien $\frac{d\omega}{dE}$ correspondant à la transformation de variable $\omega \rightarrow E$. Le cosinus dans le centre de masse est lié à l'énergie secondaire E par la relation cinématique :

$$\omega(E', E) = \frac{E(1 + A)^2 - E' [1 + R(E')^2]}{2R(E')E'}, \quad (5.20)$$

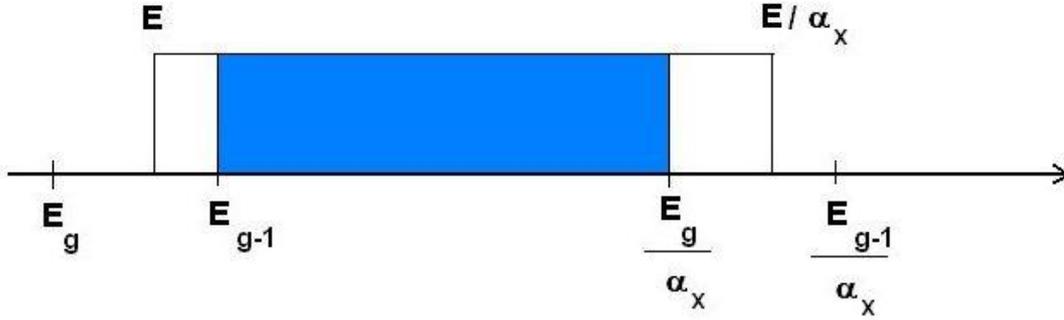


FIG. 5.3: Domaine de variation de la source de ralentissement [Sanchez, 2008].

où le paramètre $R(E') = A\sqrt{1 - \frac{E_s}{E'}}$ dépend de l'énergie de seuil inélastique E_s dans le système du laboratoire et du rapport des masses du noyau et du neutron $A = \frac{M}{M_n}$. Cette relation correspond à la diffusion élastique avec $E_s = 0$.

Pour généraliser la condition (5.18), écrivons la probabilité de transfert pour un milieu homogène infini, en se limitant par conséquent au premier moment de Legendre ($l = 0$) :

$$p(E' \rightarrow E, \mu) = \frac{(1 + A)^2}{4R(E')E'} \quad (5.21)$$

Cette équation nous montre que pour une énergie fixée de départ E' , la distribution des énergies secondaires est constante. Les extrêmes de l'intervalle sont obtenus en posant $\omega = \pm 1$ dans la relation cinématique (5.20).

La perte moyenne d'énergie est donc donnée par :

$$\overline{\Delta E} = \left[1 - \frac{[1 + R(E')]^2}{[1 + A]^2} \right] E' \quad (5.22)$$

relation qui peut être généralisée à un mélange de noyaux, en utilisant la définition suivante de perte moyenne d'énergie du mélange :

$$\overline{\Delta E} = \frac{\sum_x \overline{\Delta E}_x \Sigma_{sx}(E')}{\sum_x \Sigma_{sx}(E')} \quad (5.23)$$

Dans cette formulation, $\Sigma_{sx}(E)$ est la section macroscopique de diffusion du noyau x , son affectation permet de discriminer les noyaux avec le plus grand pouvoir de modération.

À partir de la relation (5.23), on vérifie que la largeur des groupes ne dépasse pas une fraction f de la perte moyenne d'énergie du mélange (critère du transfert ou *ESLF Energy Scattering Loss Fraction*).

5.2 Sections efficaces pour le calcul de référence

Les traitements des sections efficaces dans AEMC visent à reproduire, de la façon la plus fidèle possible, ceux des codes Monte Carlo dans l'optique de l'obtention d'une solution

de référence. Les données disponibles sont les sections continues en énergie PENDF et les tables de probabilité TP, qui sont, dans le domaine non résolu, une représentation statistique des sections efficaces. Le n-uplet $\left\{ p_i, \sigma_i, \sigma_{\rho_1, i}, \dots, \sigma_{\rho_l, i}, \dots, \sigma_{\rho_l, i} \right\}_{i=1, N}$ définit la probabilité p_i que la section totale et les sections partielles correspondantes aient respectivement les valeurs σ_i et $\sigma_{\rho_j, i}$ pour $j = 1, \dots, l$.

On décrit par la suite le traitement des données pendant la simulation du code Monte Carlo TRIPOLI4 et du solveur homogène de AEMC.

5.2.1 Utilisation des sections et des distributions angulaires dans le code TRIPOLI4

Dans le code Monte Carlo TRIPOLI4, le choix du type de sections (PENDF ou TP) est fait au moment du calcul du parcours du neutron à une énergie donnée (cf. 2.4.6). Dans cette phase, si l'option TABPROB est demandée, on évalue, à l'énergie du neutron, la section totale macroscopique en utilisant les sections continues PENDF hors domaine non-résolu des noyaux. Dans les domaines non résolus, on fait un échantillonnage, sur les distributions contenues dans les tables de probabilité, pour connaître le palier $\sigma_i^{(x)}$. On associe donc au noyau deux indices, un correspondant à l'énergie de la particule et un deuxième au palier. Ces deux données sont ensuite utilisées pour choisir les sections à utiliser dans les étapes suivantes de la simulation. Puisque les tables de probabilité fournissent seulement quelques réactions partielles (absorption sans fission, fission, diffusion élastique totale, inélastique totale et excès), celles non incluses sont calculées comme suit :

$$\Sigma_{\rho, x}(E_k) = \frac{\Sigma_{\rho, x}(E_k) \sigma_{\rho_t, i}^{(x)}}{\sigma_{\rho_t, x}(E_k)}, \quad (5.24)$$

où E_k est l'énergie du neutron, i le palier échantillonné et ρ est la réaction incluse dans la réaction agrégée ρ_t (par exemple pour la capture (n, γ) on utilise l'absorption).

En revanche si on utilise l'option NJOY, TRIPOLI4 utilise uniquement les sections continues PENDF.

Pour définir l'énergie du neutron après collision, le code TRIPOLI4 échantillonne sur les distributions angulaires des différentes réactions. Comme ces distributions peuvent ne pas être normalisées, elles sont renormalisées à l'initialisation de la simulation.

5.2.2 Les sections et les matrices de transfert multigroupes dans AEMC

Nous décrivons ici les mises en groupe dans AEMC les plus précises. Le choix d'autoprotéger un noyau dépend de l'utilisateur. Il est donc possible autoprotéger un noyau que l'on qualifie usuellement de non résonnant.

La section efficace multigroupe $\sigma_{\rho, x}^g$ pour un noyau non résonnant x est donnée par :

$$\sigma_{\rho, x}^g = \frac{\int_g \sigma_{\rho, x}(E) w(E) dE}{w_g}, \quad (5.25)$$

où $w(E)$ est le spectre approché du réacteur et w_g est sa valeur intégrée dans le groupe. Ces sections sont calculées par le code NJOY en utilisant le module GROUPE et les sections continues PENDF.

Les sections des noyaux résonnants sont autoprotégées par la méthode des sous-groupes. Cette méthode, comme on a vu au paragraphe 3.5.2, pondère les sections efficaces sur le flux solution d'un problème à source. En utilisant les propriétés (3.71) et (3.72) pour un milieu

homogène, la section efficace multigroupe autoprotégée en sous-groupes d'un noyau résonnant x est donnée par :

$$\tilde{\sigma}_{\rho,x}^g = \frac{\langle \frac{\sigma_{\rho,x}}{\Sigma_t} \rangle^g}{\langle \frac{1}{\Sigma_t} \rangle^g} = \frac{\int_g \frac{\sigma_{\rho,x}(E)w(E)}{\Sigma(E) + \Sigma_d} dE}{\int_g \frac{w(E)}{\Sigma(E) + \Sigma_d} dE}, \quad (5.26)$$

où Σ_d est la section de dilution hétérogène, grandeur fixé par l'utilisateur et indépendante de l'énergie.

Dans le domaine résolu de chaque noyau, l'intégration de (5.26) est effectuée en utilisant les sections PENDF et la méthode d'intégration de Romberg. Dans le domaine non résolu, on passe d'une intégration de Riemann à une intégration de Lebesgue. Les sections $\tilde{\sigma}_{\rho,x}^g$ sont alors calculées de la façon suivante :

$$\tilde{\sigma}_{\rho,x}^g = \frac{\sum_i \sum_j \dots \sum_k \frac{\sigma_{\rho,i}^{(x)} p_i^{(x)} p_j^{(y)} \dots p_k^{(z)}}{c_x \sigma_i^{(x)} + c_y \sigma_j^{(y)} + \dots + c_z \sigma_k^{(z)} + \Sigma_d}}{\sum_i \sum_j \dots \sum_k \frac{p_i^{(x)} p_j^{(y)} \dots p_k^{(z)}}{c_x \sigma_i^{(x)} + c_y \sigma_j^{(y)} + \dots + c_z \sigma_k^{(z)} + \Sigma_d}}, \quad (5.27)$$

où c_x est la concentration du noyau x et $\{p_i^{(x)}, \sigma_i^{(x)}, \sigma_{\rho,i}^{(x)}\}_{i=1,N}^{j=1,M}$ est la table de probabilité du noyau x . La factorisation des probabilités $p_i^{(x)} p_j^{(y)} \dots p_k^{(z)}$ est rigoureuse pour les noyaux du mélange dans un groupe g du domaine non résolu (propriété statistique). Dans le domaine résolu, elle correspond à la probabilité conditionnelle si le maillage est assez fin de façon à avoir des tables d'ordre unitaire. L'emploi des probabilités $p_i^{(x)}$ et des paliers $\sigma_i^{(x)}$ correspond aux échantillonnages effectués dans le code TRIPOLI4 pour calculer la section totale macroscopique.

En réalité, une transposition stricte du traitement du code TRIPOLI4 obligerait à utiliser des données PENDF dans le domaine résolu et les tables de probabilité dans le domaine non résolu. On devrait ensuite effectuer l'intégration de Romberg sur chaque élément en sommation. Cette méthode a été écartée pour l'instant, parce qu'elle est trop chère en coût de calcul. En contrepartie, l'approche choisie oblige à changer la représentation des toutes les sections efficaces, même si un seul noyau a une représentation statistique dans le groupe.

Dans chaque groupe g , la complexité du calcul croit comme $(NI)^N$, où NI est le nombre d'isotope et N est l'ordre moyen des tables. En conséquence, on limite le nombre d'isotopes résonnants à traiter simultanément en considérant les sections des autres comme constantes, ce qui amène à la formulation suivante de la section autoprotégée en sous-groupes :

$$\tilde{\sigma}_{\rho,x}^g \approx \frac{\sum_i \sum_j \dots \sum_k \frac{\sigma_{\rho,i}^{(x)} p_i^{(x)} p_j^{(y)} \dots p_k^{(z)}}{c_x \sigma_i^{(x)} + c_y \sigma_j^{(y)} + \dots + c_z \sigma_k^{(z)} + \Sigma_e}}{\sum_i \sum_j \dots \sum_k \frac{p_i^{(x)} p_j^{(y)} \dots p_k^{(z)}}{c_x \sigma_i^{(x)} + c_y \sigma_j^{(y)} + \dots + c_z \sigma_k^{(z)} + \Sigma_e}}, \quad (5.28)$$

où $\Sigma_e = \Sigma_d + \sum_m c_m \sigma_{t,m}^g$ est la somme des sections efficaces totales des noyaux considérés non résonnants.

Pour calculer les sections efficaces résonnantes, on rassemble d'abord les isotopes par paquets de noyaux résonnants, puis on itère sur la liste ordonnée des paquets pour assurer la convergence des sections efficaces. Le nombre de noyaux résonnants dans un paquet est défini par l'utilisateur et le choix des noyaux formant un paquet est fait automatiquement

dans le code AEMC en rassemblant les noyaux par ordre décroissant de taux d'absorption dans chaque groupe. La hiérarchisation est faite avec les taux d'absorption calculés à l'aide du flux modèle des sous-groupes et les sections PENDF. Cette méthode a été appelée autoprotection en **sous-groupes mélange itérative**. Les cas limites de cette méthode sont le traitement d'un seul noyau résonnant par paquet, ce qui amène à l'approximation d'isotope isolé, ou le traitement de l'ensemble des noyaux résonnants dans un seul paquet. Dans les situations intermédiaires, l'ordre des noyaux dans chaque groupe garantit la prise en compte du recouvrement des noyaux ayant les sections efficaces les plus élevées. Dans la pratique pour garantir un temps de calcul acceptable, on définit des paquets de 6 ou 7 noyaux.

Pour se comparer à une simulation TRIPOLI4 avec l'utilisation des tables de probabilité dans le non résolu (option TABPROB), on subdivise l'axe énergétique dans un domaine où tous les noyaux sont résolus (domaine résolu du mélange) et un domaine où au moins un noyau est non résolu (domaine non résolu du mélange). On utilise la relation (5.26) pour calculer les sections résonnantes dans le domaine résolu du mélange et l'équation (5.28) dans le domaine non résolu du mélange. En revanche si l'option NJOY du code TRIPOLI4 est utilisée, les sections autoprotégées sont calculées à l'aide de l'équation (5.26).

Dans le domaine non résolu du mélange, il est également possible de définir la section autoprotégée comme le produit de la section à dilution infinie (5.25) et du facteur d'autoprotection. Ce dernier est calculé comme rapport entre la section autoprotégée (5.28) et la section à dilution infinie, déduite à l'aide des tables de probabilité comme suit :

$$\sigma_{\rho,x}^g = \sum_i \sigma_{\rho,i}^{(x)} p_i^{(x)}. \quad (5.29)$$

En effet, pour certains noyaux, les sections efficaces à dilution infinie (5.25) et (5.29) peuvent différer, à cause des différences de formalisme de reconstruction des sections, dans le domaine non résolu, entre les codes CALENDF et NJOY (module UNRESR). Cette approche permet donc de ne prendre en compte que la fluctuation des sections dans le domaine non résolu, tout en gardant le niveau de section efficace des données multigroupes obtenus par NJOY. Elle peut être adoptée si on veut comparer AEMC aux simulations d'autres codes Monte Carlo, comme MCNP, qui utilisent les tables de probabilité issues du code NJOY.

Les matrices partielles de transfert multigroupes sont souvent incohérentes par rapport à la section de production correspondante. Pour cela, on applique une renormalisation sur chaque matrice partielle $\bar{\sigma}_{\rho,s,x}^{g g'}$ de la manière suivante :

$$\sigma_{\rho,s,x}^{g g'} = \bar{\sigma}_{\rho,s,x}^{g g'} \frac{w_\rho \sigma_{\rho,s,x}^g}{\sum_g \bar{\sigma}_{\rho,s,x}^{g g'}}, \quad (5.30)$$

où w_ρ est la multiplicité associée à la réaction ρ .

Cette correction reproduit en multigroupe la renormalisation apportée sur les distributions angulaires par le code TRIPOLI4.

5.3 Résolution multigroupe de l'équation de transport

Le solveur du code AEMC résout l'équation multigroupe de transport dans un milieu homogène infini. Il peut traiter des problèmes neutroniques : à source externe avec et sans fission, de structure fine et à valeur propre. Toutes ces problématiques sont réductibles à la résolution d'un problème à source de la forme :

$$\Sigma^g \Phi^g = (H\Phi)^g + \frac{1}{\lambda} S^g, \quad (5.31)$$

où $(H\Phi)^g$ est l'opérateur de transfert, S^g et λ représentent respectivement la source et son facteur de normalisation. L'opérateur de transfert s'écrit :

$$(H\Phi)^g = \sum_x [c_{0x}(h_{0,x}\Phi)^g + c_{1x}(h_{1,x}\Phi)^g] \quad (5.32)$$

$$(h_{0,x}\Phi)^g = \sum_{g'} p_{x,\infty}^{gg'} \tilde{\sigma}_{s,x}^{g'} \Phi^{g'} \quad (h_{1,x}\Phi)^g = \sum_{g'} \sigma_{s,x}^{gg'} \Phi^{g'},$$

où les indices 0 et 1 indiquent les noyaux résonnants et non résonnants, et $p_{x,\infty}^{gg'} = \sigma_x^{gg'} / \sigma_{s,x}^{g'}$ est la probabilité de transfert. Les matrices de transfert $\sigma_x^{gg'}$ peuvent être calculées en négligeant ou en prenant en compte l'upscattering des neutrons dans le domaine thermique. Pour les problèmes à source externe ($S^g = S_{ext}^g$), on normalise S^g de façon à donner une intégrale globale unitaire. Pour les problèmes à structure fine, la source vaut $S^g = \sum_e \tau w_{g'} \lambda$ est unitaire et la section totale contient également la section de dilution macroscopique Σ_e . Finalement, pour les problèmes à valeur propre ($S^g = S_f^g$) et à source externe avec fission ($S^g = S_f^g + S_{ext}^g$), le terme S_f^g est donné par :

$$S_f^g = \sum_{x \in fiss} c_x \sum_{G_f} \lambda_x^{gG_f} \sum_{g' \in G_f} (\tilde{\nu}\sigma)_{f,x}^{g'} \Phi^{g'}, \quad (5.33)$$

dans laquelle le spectre de fission vaut :

$$\lambda_x^{gG_f} = \frac{\sum_{g' \in G_f} \sigma_{f,x}^{gg'} w^{g'}}{\sum_g \sum_{g' \in G_f} \sigma_{f,x}^{gg'} w^{g'}} \quad (5.34)$$

$(\tilde{\nu}\sigma)_{f,x}^{g'}$ est la section de production et l'indice G_f se réfère au maillage choisi pour la représentation du spectre de fission. Cette modélisation permet, en pratique, d'effectuer un calcul de la source de fission aussi précis qu'avec la matrice de fission (cf. 7.1).

On autoprotège les sections de diffusion, de fission, de production et d'absorption. Toutes les autres sections sont obtenues par l'équation (5.25). Dans le domaine non résolu, on ne peut pas autoprotéger la section de production, parce qu'on ne dispose que des points de quadrature de la section de fission. Pour cela, on remplace dans (5.33) la multiplicité neutronique par fission $\nu_x(E)$ par sa valeur multigroupe et on utilise la section de fission autoprotégée. La section totale est obtenue comme somme des sections autoprotégées d'absorption et de diffusion.

L'équation (5.31) est résolue par inversion directe dans le domaine du ralentissement et selon la méthode itérative de Gauss-Seidel, accélérée par rebalancing [Lewis et Miller, 1984], dans le domaine thermique. Cette accélération, pour un problème en milieu homogène infini, applique au flux non accéléré $\hat{\Phi}^g$ le facteur r suivant :

$$\Phi^g = \hat{\Phi}^g r \quad r = \frac{\sum_g S^g}{\lambda \sum_g [\Sigma^g \Phi^g - (H\Phi)^g]}. \quad (5.35)$$

Cette correction revient à forcer le bilan global à chaque itération.

Pour les problèmes à valeur propre ou à source externe avec fission, la résolution du flux est incluse dans un cycle d'itérations externes pour converger la source de fission. Dans le premier cas, on converge la valeur propre selon l'algorithme des puissances :

$$\lambda^{(n)} = \lambda^{(n-1)} \frac{S_f^{(n)}}{S_f^{(n-1)}}, \quad (5.36)$$

dans laquelle $S_f^{(n)} = \sum_g S_f^{(n),g}$ est la source globale de fission à l'énième itération et λ est le coefficient de multiplication.

On initialise le processus avec un flux constant dans chaque groupe et le coefficient de multiplication est déterminé par le rapport entre le taux de production et le taux d'absorption et d'excès, correspondant au flux d'initialisation. À la convergence, le flux est renormalisé de façon à garantir un taux de production global égal au coefficient de multiplication. Dans le deuxième cas, on itère sur la source de fission en normalisant celle-ci à chaque itération par sa valeur globale.

5.4 Algorithme d'obtention de la solution multigroupe de référence

Pour résumer, la création d'une solution multigroupe de référence est le résultat de deux processus différents : la génération d'un maillage énergétique et l'évaluation de sa précision vis à vis d'une référence.

Dans notre algorithme, la réalisation de la première étape, exposée au paragraphe 5.1.1 et 5.1.2, nécessite de choisir le critère du transfert des neutrons ESLF, pour appliquer une autoprotection par la méthode des sous-groupes, et le critère de reconstruction du flux ϵ_f , pour raffiner le maillage autour des résonances.

Dans la deuxième étape, on évalue la précision des solutions multigroupes avec le maillage généré et une autoprotection par la méthode des sous-groupes en mélange (cf. 5.2.2). Plusieurs alternatives sont possibles dans le choix de la référence.

La première possibilité, sans restriction sur le domaine énergétique d'application, consiste à chercher une solution Monte Carlo sur un découpage fixe commun à l'ensemble des maillages générés. Cette structure multigroupe grossière doit être choisie de sorte qu'elle donne une bonne mesure de l'erreur associée au maillage généré. La convergence est atteinte quand les solutions multigroupes rentrent dans les barres d'erreur à trois écarts-types de la simulation Monte Carlo.

Une autre possibilité comporte l'utilisation de l'équation de ralentissement ponctuel en énergie. Ce choix, à la différence du précédent, permet d'évaluer l'erreur dans tous les groupes du maillage énergétique, car le flux est une grandeur connue à toute valeur de l'énergie. D'autre part, à l'heure actuelle, il n'est applicable que dans certain domaine d'énergie (zone du ralentissement élastique et inélastique discret hors continuum).

La dernière alternative est l'emploi d'une procédure itérative de convergence multigroupe. Le processus est arrêté quand l'écart des taux de réaction entre une solution plus grossière et une solution plus raffinée, condensée sur le maillage grossier, est inférieur à une valeur minimale prédéfinie.

5.5 Solveur ponctuel en énergie

Le solveur ponctuel en énergie de AEMC résout les équations de ralentissement suivantes :

$$\Sigma_t(E)\Phi(E) = H\Phi(E) + S(E) \quad (5.37)$$

et

$$[\Sigma_e + \Sigma_t(E)]\Phi(E) = H\Phi(E) + \Sigma_e w(E), \quad (5.38)$$

où l'opérateur de transfert est donné par :

$$H\Phi(E) = \sum_x H_x(E) = \sum_x \int_E^\infty \Sigma_s(E')\Phi(E')p_x(E' \rightarrow E)dE'. \quad (5.39)$$

$S(E)$ est une source externe décrite analytiquement (Dirac, Heaviside, spectre Maxwellien, fonction $1/E$) ou interpolée linéairement. Comme les équations (5.37) et (5.38) sont intrinsèquement équivalentes, on ne traite que le problème de ralentissement à source (5.37) sans le terme de dilution Σ_e .

La probabilité de transfert $p_x(E' \rightarrow E)$ dépend de la distribution angulaire dans le centre de masse $p_x(\omega)$ par la relation :

$$p_x(E' \rightarrow E) = p_x(\omega(E', E)) \frac{d\omega}{dE}, \quad (5.40)$$

où ω représente le cosinus dans le système du centre de masse. En utilisant la relation cinématique (5.20), la probabilité de transfert en énergie peut se réécrire comme suit :

$$p_x(E' \rightarrow E) = p_x(\omega(E', E)) \frac{(1 + A_x)^2}{2R_x(E')E'}. \quad (5.41)$$

Si la diffusion est isotrope dans le système du centre de masse $p_x(\omega(E', E)) = 1/2$ pour toute énergie E' , on a alors :

$$p_x(E' \rightarrow E) = \frac{(1 + A_x)^2}{4R_x(E')E'} = \frac{1}{(1 - \alpha_x)E' \sqrt{1 - E_s/E'}}. \quad (5.42)$$

Cette approximation est licite³ pour les noyaux lourds aux énergies $E \leq 45$ keV et pour les noyaux légers et de masse intermédiaire aux énergies $E \leq 1$ MeV.

La résolution de l'équation (5.37) s'inspire de la méthode développée dans le calculateur de flux du code NJOY, mais elle est généralisée aux réactions de diffusion inélastiques discrètes hors continuum et aux mélanges de plusieurs noyaux. Le calcul est réalisé en énergie sur un découpage énergétique obtenu en fusionnant les maillages des sections PENDF des noyaux du mélange. Ce découpage peut également être raffiné au besoin pour mieux converger la solution dans certains domaines énergétiques.

Subdivisons la densité d'arrivée au point E_i dans la somme des contributions de chaque intervalle $[E_j, E_{j+1}]$ d'énergie $E_j \geq E_i$:

$$H_x \Phi(E_i) = \sum_j R_{j \rightarrow i, x}(T_x). \quad (5.43)$$

Par la suite, T_x représente le taux de diffusion et la notation $R_{j \rightarrow i, x}(g)$ indique l'opérateur :

$$R_{j \rightarrow i, x}(g) = \int_{G(E_j, E_i)}^{G(E_{j+1}, E_i)} dE' p_x(E' \rightarrow E) g(E'), \quad (5.44)$$

où les bornes d'intégration $G(E_{j+1}, E_i)$, $G(E_j, E_i)$ dépendent de la réaction de transfert considérée et g est une fonction générique.

Supposons que le taux de diffusion soit continu et linéaire par morceaux et donc exprimable par la combinaison des fonctions linéaires $a_j(E)$ et $b_j(E)$:

$$T_x(E) = a_j(E)T_j + b_j(E)T_{j+1} \quad \text{pour } E \in [E_j, E_{j+1}], \quad (5.45)$$

où on a employé la convention $T_j = T_x(E_j)$. Les fonctions de base $a_j(E)$ et $b_j(E)$ sont données par :

$$a_j(E) = 1 - \frac{E - E_j}{\Delta E_j}, \quad (5.46)$$

$$b_j(E) = \frac{E - E_j}{\Delta E_j}, \quad (5.47)$$

³communication privée de Claude Mounier.

avec $\Delta E_j = E_{j+1} - E_j$ et elles satisfont les relations suivantes :

$$a_j(E) + b_j(E) = 1, \quad (5.48)$$

$$E_j a_j(E) + E_{j+1} b_j(E) = E. \quad (5.49)$$

D'après l'expression (5.45), le terme $R_{j \rightarrow i, x}(T_x)$ peut s'exprimer comme suit :

$$R_{j \rightarrow i, x}(T_x) = \hat{a}_j(E_i) T_j + \hat{b}_j(E_i) T_{j+1}, \quad (5.50)$$

où les coefficients $\hat{a}_j(E_i)$ et $\hat{b}_j(E_i)$ sont solutions du système suivant d'équations :

$$\begin{cases} \hat{a}_j(E_i) + \hat{b}_j(E_i) = R_{j \rightarrow i, x}(1) \\ \hat{a}_j(E_i) E_j + \hat{b}_j(E_i) E_{j+1} = R_{j \rightarrow i, x}(E) \end{cases} \quad (5.51)$$

et ils s'écrivent :

$$\hat{a}_j(E_i) = \frac{E_{j+1} R_{j \rightarrow i, x}(1) - R_{j \rightarrow i, x}(E)}{\Delta E_j}, \quad (5.52)$$

$$\hat{b}_j(E_i) = \frac{R_{j \rightarrow i, x}(E) - E_j R_{j \rightarrow i, x}(1)}{\Delta E_j}. \quad (5.53)$$

On a également calculé les coefficients $\hat{a}_j(E_i)$ et $\hat{b}_j(E_i)$ en supposant que le taux de diffusion s'exprime par une combinaison de fonctions en $1/E$. Cette hypothèse s'explique par le mode linéaire en énergie de la représentation des sections efficaces et de la forme asymptotique du flux ($\approx 1/E$). Des tests numériques ont montré une faible influence de la représentation du taux de diffusion sur le résultat (cf. 7.3.2), car le nombre de points en énergie employé dans la résolution est très élevé.

Voyons maintenant le calcul du terme $R_{j \rightarrow i, x}(g)$ dans le cas des transferts élastique, inélastique et isotrope dans le système du centre de masse. Une façon de prendre en compte l'anisotropie dans le système du centre de masse est ensuite présentée, mais elle n'a pas encore été développée dans le solveur ponctuel de AEMC.

5.5.1 Transfert élastique et isotrope dans le centre de masse

Dans l'hypothèse de transfert élastique et isotrope dans le centre de masse, le terme $R_{j \rightarrow i, x}(g)$ à calculer vaut :

$$R_{j \rightarrow i, x}^{el}(g) = \int_{E_j}^{E_\rho} \frac{g(E)}{(1 - \alpha_x) E} dE, \quad (5.54)$$

avec :

$$\begin{cases} E_j \leq E_i / \alpha_x \\ E_\rho = \min [E_i / \alpha_x, E_{j+1}]. \end{cases}$$

Les termes $R_{j \rightarrow i, x}^{el}(1)$ et $R_{j \rightarrow i, x}^{el}(E)$ sont donc donnés par :

$$R_{j \rightarrow i, x}^{el}(1) = \int_{E_j}^{E_\rho} \frac{1}{(1 - \alpha_x) E} dE = \frac{1}{1 - \alpha_x} \ln \left(\frac{E_\rho}{E_j} \right), \quad (5.55)$$

$$R_{j \rightarrow i, x}^{el}(E) = \int_{E_j}^{E_\rho} \frac{1}{(1 - \alpha_x) E} dE = \frac{E_\rho - E_j}{1 - \alpha_x}. \quad (5.56)$$

Reportons les expressions (5.55) et (5.56) dans les relations (5.52) et (5.53), on peut donc définir les coefficients $\hat{a}_{j, x}(E_i)$ et $\hat{b}_{j, x}(E_i)$:

$$\hat{a}_{j, x}(E_i) = \frac{1}{(1 - \alpha_x) \Delta E_j} \left[E_{j+1} \ln \left(\frac{E_\rho}{E_j} \right) - (E_\rho - E_j) \right], \quad (5.57)$$

$$\hat{b}_{j, x}(E_i) = \frac{1}{(1 - \alpha_x) \Delta E_j} \left[(E_\rho - E_j) - E_j \ln \left(\frac{E_\rho}{E_j} \right) \right], \quad (5.58)$$

si on se trouve à une énergie $E_i/\alpha_x \geq E_{j+1}$, on pose $E_\rho = E_{j+1}$ et on obtient :

$$\hat{a}_{j,x}(E_i) = \frac{1}{(1-\alpha_x)} \left[\frac{E_{j+1}}{\Delta E_j} \ln \left(\frac{E_{j+1}}{E_j} \right) - 1 \right], \quad (5.59)$$

$$\hat{b}_{j,x}(E_i) = \frac{1}{(1-\alpha_x)} \left[1 - \frac{E_j}{\Delta E_j} \ln \left(\frac{E_{j+1}}{E_j} \right) \right]. \quad (5.60)$$

5.5.2 Transfert inélastique et isotrope dans le centre de masse

Dans le cas du transfert inélastique et isotrope dans le centre de masse, le terme $R_{j \rightarrow i,x}(g)$ est donné par :

$$R_{j \rightarrow i,x,l}^{inel}(g) = \int_{E_\beta}^{E_\rho} \frac{g(E)}{(1-\alpha_x)\sqrt{E^2 - EE_{s,l,x}}} dE \quad \text{pour } E > E_{s,l,x} \quad (5.61)$$

avec :

$$\begin{cases} E_\rho = \min [E_H(E_i), E_{j+1}] \\ E_\beta = \max [E_L(E_i), E_j], \end{cases}$$

où $E_{s,l,x}$ est l'énergie de seuil du niveau inélastique discret l . Le domaine $[E_L(E), E_H(E)]$ définit l'intervalle d'énergie de départ correspondant à une énergie d'arrivée E . Les valeurs $E_L(E)$ et $E_H(E)$ sont obtenues en renversant la relation cinématique (5.20) et valent :

$$\begin{cases} E_H(E) = \left[\frac{A_x \zeta(E) + 1}{A_x - 1} \right]^2 E \\ E_L(E) = \left[\frac{A_x \zeta(E) - 1}{A_x - 1} \right]^2 E \\ \zeta(E) = \left[1 + \frac{(A_x - 1)E_{s,l,x}}{(A_x + 1)E} \right]^{1/2} \end{cases}. \quad (5.62)$$

On observe que pour $E_{s,l,x} = 0$, on obtient une formulation du transfert identique à l'élastique et que pour $E = E_{s,l,x}/(1 + A_x)^2$, la borne inférieure correspond à l'énergie de seuil de la réaction $E_L = E_{s,l,x}$. L'énergie minimale atteinte par transfert inélastique vaut $E_{s,l,x}/(1 + A_x)^2$.

Les termes $R_{j \rightarrow i,x,l}^{inel}(1)$ et $R_{j \rightarrow i,x,l}^{inel}(E)$ dérivent des intégrations suivantes :

$$R_{j \rightarrow i,x,l}^{inel}(1) = \int_{E_\beta}^{E_\rho} \frac{1}{(1-\alpha_x)\sqrt{E^2 - EE_{s,l,x}}} dE = \frac{2}{1-\alpha_x} \ln \left(\frac{\sqrt{E_\rho} + \sqrt{E_\rho - E_{s,l,x}}}{\sqrt{E_\beta} + \sqrt{E_\beta - E_{s,l,x}}} \right) \quad (5.63)$$

$$\begin{aligned} R_{j \rightarrow i,x,l}^{inel}(E) &= \int_{E_\beta}^{E_\rho} \frac{E}{(1-\alpha_x)\sqrt{E^2 - EE_{s,l,x}}} dE = \int_{E_\beta}^{E_\rho} \frac{E - E_{s,l,x}/2 + E_{s,l,x}/2}{(1-\alpha_x)\sqrt{E^2 - EE_{s,l,x}}} dE = \\ &= \frac{1}{1-\alpha_x} \left(\sqrt{E_\rho^2 - E_\rho E_{s,l,x}} - \sqrt{E_\beta^2 - E_\beta E_{s,l,x}} \right) + \frac{E_{s,l,x}}{2} R_{j \rightarrow i,x,l}^{inel}(1). \end{aligned} \quad (5.64)$$

Reportons les expressions (5.63) et (5.64) dans les relations (5.52) et (5.53), on peut introduire les coefficients $\hat{a}_{j,x,l}(E_i)$ et $\hat{b}_{j,x,l}(E_i)$ suivants :

$$\begin{cases} \hat{a}_{j,x,l}(E_i) = \frac{1}{(1-\alpha_x)\Delta E_j} [E_{j+1}e_j(E_i) - f_j(E_i)] \\ \hat{b}_{j,x,l}(E_i) = \frac{1}{(1-\alpha_x)\Delta E_j} [f_j(E_i) - E_j e_j(E_i)] \\ e_j(E_i) = 2 \ln \left(\frac{\sqrt{E_\rho} + \sqrt{E_\rho - E_{s,l,x}}}{\sqrt{E_\beta} + \sqrt{E_\beta - E_{s,l,x}}} \right) \\ f_j(E_i) = E_\rho \sqrt{1 - E_{s,l,x}/E_\rho} - E_\beta \sqrt{1 - E_{s,l,x}/E_\beta} + \frac{E_{s,l,x}}{2} e_j(E_i) \end{cases}. \quad (5.65)$$

On définit finalement le terme global $R_{j,x}^{inel}(T_{s,x}^{inel})$, en sommant les contributions de toutes les réactions inélastiques discrètes d'un noyau, par :

$$R_{j \rightarrow i,x}^{inel}(T_x^{inel}) = \sum_l R_{j \rightarrow i,x,l}^{inel}(T_{x,l}^{inel}). \quad (5.66)$$

5.5.3 Prise en compte de l'anisotropie dans le système du centre de masse

L'expression du terme $R_{j \rightarrow i,x}(g)$ en prenant en compte l'anisotropie du transfert est donnée par :

$$R_{j \rightarrow i,x}(g) = \int_{E_\beta}^{E_\rho} p_x(\omega(E, E_i)) \frac{g(E)}{(1 - \alpha_x) \sqrt{E^2 - EE_s}} dE, \quad (5.67)$$

où ω dépend de l'énergie E par la relation cinématique (5.20).

Supposons la distribution angulaire décrite par une combinaison linéaire de fonctions constantes par morceaux :

$$p_x(\omega) = \sum_k p_{x,k} H(\omega - \omega_k) H(\omega_{k+1} - \omega) \quad \text{avec } \omega \in [-1, 1] \quad (5.68)$$

où $H(\omega)$ représente la fonction d'Heaviside.

La définition 5.67 pourrait donc s'exprimer comme :

$$R_{j \rightarrow i,x}(g) = \sum_{k=1}^N p_{x,k} \int_{E_k}^{E_{k+1}} \frac{g(E)}{(1 - \alpha_x) \sqrt{E^2 - EE_s}} dE, \quad \text{avec } E_1 = E_\beta, E_N = E_\rho \quad (5.69)$$

où les E_k correspondent aux énergies d'arrivée pour un cosinus de déviation ω_k (cf. figure 5.4). On peut observer que l'intégrale 5.67 peut s'obtenir par sommation d'une série d'intégrales analogues au cas isotrope dans le centre de masse.

Actuellement le code TRIPOLI4 génère une distribution du type (5.68) pour représenter la distribution angulaire des réactions décrites avec un développement en polynômes de Legendre, pour éviter d'échantillonner sur une distribution non strictement positive. Une mise en œuvre dans le solveur ponctuelle de AEMC demanderait de disposer de cette représentation sur n'importe quel type de réaction.

5.5.4 Calcul du flux

L'équation de ralentissement s'écrit donc au point E_j :

$$\Sigma_t(E_j) \Phi(E_j) = \sum_x \left[R_{j \rightarrow j,x}^{el}(T_x^{el}) + R_{j \rightarrow j,x}^{inel}(T_x^{inel}) \right] + S_r(E_j), \quad (5.70)$$

où :

- $R_{j \rightarrow j,x}^{el}(T_x^{el}) + R_{j \rightarrow j,x}^{inel}(T_x^{inel})$ est le terme de source de ralentissement en E_j dû aux neutrons d'énergies comprises entre E_j et E_{j+1} ;
- $S_r(E_j) = \sum_{k>j} \left[R_{k \rightarrow j,x}^{el}(T_x^{el}) + R_{k \rightarrow j,x}^{inel}(T_x^{inel}) \right] + S(E_j)$ est la source de ralentissement des neutrons d'énergie supérieure à E_{j+1} à laquelle on ajoute la source externe $S(E)$.

D'après l'équation (5.50) on a :

$$R_{j \rightarrow j,x}^{el}(T_x^{el}) = \hat{a}_{j,x}(E_j) \Sigma_{se,x}(E_j) \Phi(E_j) + \hat{b}_{j,x}(E_j) \Sigma_{se,x}(E_{j+1}) \Phi(E_{j+1}), \quad (5.71)$$

$$R_{j \rightarrow j,x}^{inel}(T_x^{inel}) = \sum_l \left[\hat{a}_{j,x,l}(E_j) \Sigma_{si,x,l}(E_j) \Phi(E_j) + \hat{b}_{j,x,l}(E_j) \Sigma_{si,x,l}(E_{j+1}) \Phi(E_{j+1}) \right], \quad (5.72)$$

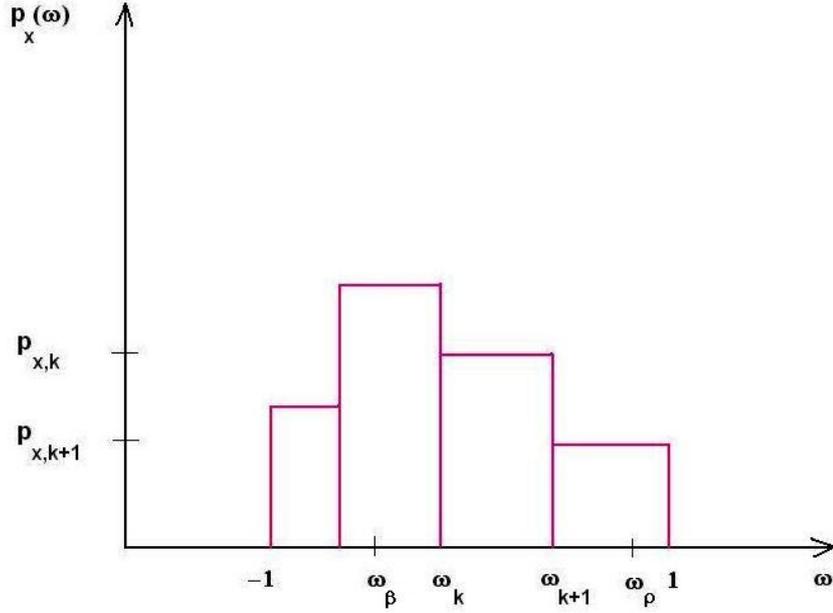


FIG. 5.4: Distribution angulaire décrite par combinaison linéaire de fonction d'Heaviside pour une énergie de départ E_i . La notation ω_k indique le cosinus angulaire correspondant au transfert de l'énergie E_i à l'énergie E_k .

où $\Sigma_{se,x}$ et $\Sigma_{si,x,l}$ sont respectivement la section macroscopique continue de diffusion élastique et de diffusion inélastique du niveau discret l . Si on suppose $S_r(E_j)$ et $\Phi(E_{j+1})$ connus, on peut déduire le flux à l'énergie E_j :

$$\Phi(E_j) = \frac{S_r(E_j) + \sum_x \left[\hat{b}_{j,x}(E_j) \Sigma_{se,x}(E_{j+1}) + \sum_l \hat{b}_{j,x,l}(E_j) \Sigma_{si,x,l}(E_{j+1}) \right] \Phi(E_{j+1})}{\Sigma_t(E_j) - \sum_x \left[\hat{a}_{j,x}(E_j) \Sigma_{se,x}(E_j) - \sum_l \hat{a}_{j,x,l}(E_j) \Sigma_{si,x,l}(E_j) \right]}. \quad (5.73)$$

On trouve en annexe C le détail de l'algorithme de résolution.

Pour un problème à source de Dirac $S\delta(E - E_1)$, la solution est discontinue à l'énergie de la source, on résout donc l'équation de ralentissement correspondant à la source de premier choc :

$$S \sum_x \left[\frac{\Sigma_{se,x}(E_1)}{\Sigma_t(E_1)} p_{se,x}(E_1 \rightarrow E) + \sum_l \frac{\Sigma_{si,x,l}(E_1)}{\Sigma_t(E_1)} p_{si,x,l}(E_1 \rightarrow E) \right], \quad (5.74)$$

où $p_{se,x}(E_1 \rightarrow E)$ et $p_{si,x,l}(E_1 \rightarrow E)$ sont les probabilités de transfert par chocs élastique, inélastique et isotrope dans le centre de masse.

Le solveur ponctuel en énergie utilise exclusivement les sections PENDF issues du code NJOY, c'est pourquoi il est équivalent au code TRIPOLI4 avec l'option NJOY sous réserve, pour l'instant, d'isotropie de la collision dans le système du centre de masse. Pour prendre en compte les fluctuations du domaine non résolu, on pourrait utiliser les sections pseudo-ponctuelles PENDF générées par le code CALENDF.

Chapitre 6

Condensation optimale du maillage de référence

La condensation du maillage de référence sur un nombre fixé de groupes NG consiste à rechercher les NG valeurs du support fin garantissant une résolution de l'équation multi-groupe du transport avec des erreurs minimales. On va donc indiquer pour la suite avec les indices g et G respectivement les bornes du maillage fin et du maillage grossier. Dans cette phase il faut :

1. calculer dynamiquement les données multigroupes sur le maillage grossier sans ou avec autoprotection ;
2. évaluer une fonctionnelle, représentative du but préfixé, et la minimiser.

On décrit dans les paragraphes qui suivent ces deux phases.

6.1 Données multigroupes condensées

La section multigroupe condensée sur un groupe G pour un noyau non résonnant est donnée par :

$$\sigma_{\rho,x}^G = \frac{\sum_{g \in G} \sigma_{\rho,x}^g w_g}{\sum_{g \in G} w_g}, \quad (6.1)$$

où w_g est le spectre multigroupe approché du réacteur. Les matrices de transfert des noyaux non résonnants sont calculées sans renormalisation de la section de production comme suit :

$$\sigma_{s,x}^{GG'} = \frac{\sum_{g \in G} \sum_{g' \in G'} \sigma_{s,x}^{g,g'} w_{g'}}{\sum_{g' \in G'} w_{g'}}, \quad (6.2)$$

puisque l'incohérence entre la matrice de transfert et la section de production est déjà prise en compte pendant le calcul fin. Le même traitement est prévu pour la matrice de fission grossière $\sigma_{f,x}^{G,G''}$, en utilisant un maillage, noté par G'' , spécifié par l'utilisateur. Ce maillage est invariant au cours de l'optimisation et relève d'une modélisation préalable de la source de fission. Le spectre de fission grossier $\chi_x^{G,G''}$ est déduit par normalisation de la matrice de fission grossière sur le domaine des énergies d'arrivée :

$$\chi_x^{G,G''} = \frac{\sigma_{f,x}^{G,G''}}{\sum_G \sigma_{f,x}^{G,G''}}. \quad (6.3)$$

Les tables de probabilité sont le deuxième type de données condensées sur le maillage grossier. Pour effectuer ce passage, on recalcule les moments de la section totale et des sections partielles grâce aux tables de probabilités calculées sur le maillage de référence :

$$M_n = \frac{1}{w^G} \sum_{g \in G} w_g \sum_{i=1}^{N_g} \sigma_{t,i}^n p_i \quad (6.4)$$

$$P_n = \frac{1}{w^G} \sum_{g \in G} w_g \sum_{i=1}^{N_g} \sigma_{\rho,i} \sigma_{t,i}^n p_i \quad (6.5)$$

et avec ces derniers, on résout les systèmes d'équations (3.20) et (3.29) par l'algorithme du code CALENDF.

AEMC emploie des tables de probabilité construites avec une fonction de pondération générique, pour garantir la création d'une bibliothèque multigroupe cohérente, i.e. dans laquelle toutes les données multigroupes sont calculées avec la même fonction de pondération. On a également apporté des modifications dans le code APOLLO2, pour permettre l'emploi de ces tables de probabilité. En effet la version standard du code APOLLO2 impose d'utiliser des tables de probabilité calculées avec une fonction de poids unique en $1/E$, différente de celle employée dans la génération des sections multigroupes (spectre thermique Maxwellien, $1/E$ et spectre de fission, cf. chapitre 3.2).

Les sections autoprotégées condensées peuvent être calculées par les méthodes :

- des sous-groupes ;
- de Livolant-Jeanpierre standard en isotope isolé ou avec les options du mélange et d'autoprotection des taux de transferts ;
- de Livolant-Jeanpierre généralisée à un problème à source avec les mêmes options que la méthode précédente.

Ci-après on détaille ces différentes modélisations dans le cadre de la résolution de l'équation du transport en milieu homogène infini.

6.2 Autoprotection en sous-groupes

La section autoprotégée en sous-groupes dans un mélange de noyaux résonnants est donnée par :

$$\tilde{\sigma}_{\rho,x}^G = \frac{\sum_i \sum_j \dots \sum_k \frac{\sigma_{\rho,i}^{(x)} p_i^{(x)} p_j^{(y)} \dots p_k^{(z)}}{c_x \sigma_i^{(x)} + c_y \sigma_j^{(y)} + \dots + c_z \sigma_k^{(z)} + \Sigma_e}}{\sum_i \sum_j \dots \sum_k \frac{p_i^{(x)} p_j^{(y)} \dots p_k^{(z)}}{c_x \sigma_i^{(x)} + c_y \sigma_j^{(y)} + \dots + c_z \sigma_k^{(z)} + \Sigma_e}}, \quad (6.6)$$

où $\Sigma_e = \Sigma_d + \sum_y c_y \sigma_{t,y}^G$ rassemble les sections totales multigroupes grossières des noyaux considérés non résonnants et $\left\{ p_i^{(x)}, \sigma_i^{(x)}, \sigma_{\rho,i}^{(x)} \right\}_{i=1,N}^{j=1,l}$ est la table de probabilité condensée d'ordre N du noyau x . À la différence du calcul de référence, l'ensemble des noyaux résonnants est fixé par l'utilisateur.

Si on considère un seul noyau résonnant dans le paquet, on obtient la formulation de la

section efficace autoprotégée par la méthode des sous-groupes à isotope isolé :

$$\tilde{\sigma}_{\rho,x}^G = \frac{\sum_j \frac{\sigma_{\rho,x,j} p_j^{(x)}}{c_x \sigma_{t,x,j} + \Sigma_e}}{\sum_j \frac{p_j^{(x)}}{c_x \sigma_{t,x,j} + \Sigma_e}}. \quad (6.7)$$

6.3 Autoprotection selon le formalisme de Livolant-Jeanpierre

La section autoprotégée selon le formalisme de Livolant-Jeanpierre est calculée comme suit :

$$\tilde{\sigma}_{\rho,x}^G = \frac{T_{\rho,x}^G}{\varphi^G}, \quad (6.8)$$

où le taux de réaction $T_{\rho,x}^G$ est calculé avec le flux continu, solution du problème de structure fine et φ^G est le flux multigroupe. Cette méthode effectue l'autoprotection des sections efficaces selon un processus en deux étapes :

- l'homogénéisation, qui consiste à trouver la dilution Σ_e d'un milieu homogène ayant les mêmes taux de réaction (absorption ou diffusion) que le milieu hétérogène de façon à pouvoir calculer le plus exactement possible les taux de réaction ;
- l'équivalence multigroupe, qui définit le flux multigroupe garantissant le respect des taux de réaction de référence.

Comme on s'est placé en milieu homogène infini, la première étape n'est pas nécessaire et la dilution Σ_e est définie analytiquement par :

$$\Sigma_e = \Sigma_d + \sum_y c_y \sigma_{t,y}^G, \quad (6.9)$$

où Σ_d est la section de dilution hétérogène et la somme porte sur tous les noyaux y considérés non résonnants. Cette grandeur varie par groupe et module localement le creusement du flux dû aux résonances (cf. figure 3.3).

Par la suite, on peut considérer soit un seul isotope résonnant dans un mélange de noyaux modérateurs (autoprotection standard) soit un mélange de noyaux résonnants (autoprotection Livolant-Jeanpierre en mélange). Le calcul des taux de référence $T_{\rho,x}^G$ et l'équivalence continu-multigroupe sont abordés dans les deux paragraphes suivants.

6.3.1 Équation pour les tabulations des taux de référence

Reprenons l'équation continue de structure fine du formalisme d'autoprotection Livolant-Jeanpierre :

$$\left(\sum_x c_x \sigma_{t,x,0}(u) + \Sigma_e \right) \varphi(u) = \sum_x c_x r_{x,0} \varphi(u) + \Sigma_e, \quad (6.10)$$

La résolution de l'équation (6.10) est actuellement effectuée soit avec les données ponctuelles PENDF via le calculateur du flux NJOY, soit dynamiquement à l'intérieur du code APOLLO2 avec le modèle Toute Résonance de l'opérateur $r_0 \varphi$ et les données multigroupes (tables de probabilité calculées sur le maillage universel).

Au niveau du mailleur énergétique l'emploi d'un solveur ponctuel en énergie est envisageable uniquement au moment du calcul de la solution de référence pour des raisons de temps de calcul et d'espace mémoire requis. Pour cela, la solution de l'équation (6.10) dans l'approximation multigroupe est effectuée en utilisant les sections autoprotégées par

la méthode des sous-groupes sur le maillage fin de référence pour les noyaux résonnants. De cette manière, on est en mesure de résoudre l'équation de structure fine soit au début du calcul d'optimisation soit pendant l'optimisation, parce que l'on dispose toujours des données multigroupes et des tables de probabilité sur le maillage fin. Les erreurs induites par cette approximation sont négligeables. En effet la phase de construction du maillage de référence permet l'obtention d'un binôme maillage fin - autoprotection en sous-groupes donnant d'aussi bons résultats que le solveur ponctuel en énergie dans son domaine de validité⁴.

Le noyau de transfert d'un isotope résonnant x est donc approximé par :

$$r_{x,0}\varphi^g \approx \sum_{g'} p_{x,\infty}^{gg'} \tilde{\sigma}_{s,x}^{g'} \varphi^{g'}, \quad (6.11)$$

et l'équation de structure fine résolue est de la forme suivante :

$$\left(\sum_x c_x \tilde{\sigma}_{t,x,0}^g + \Sigma_e \right) \varphi^g = \sum_x c_x r_{x,0} \varphi^g + \Sigma_e w^g, \quad (6.12)$$

où $p_{x,\infty}^{gg'} = \sigma_x^{gg'} / \sigma_{s,x}^{g'}$ est la probabilité de transfert du noyau résonnant et les sections autoprotégées sont calculées par la formule (6.6) à la dilution Σ_e .

Avec cette approche, on dispose d'un noyau de transfert générique et aussi précis que l'on veut par le procédé de construction du maillage de référence. En effet, les phénomènes de réactions inélastiques discrètes, d'anisotropie dans le système du centre de masse et les modèles du transfert dans le domaine thermique sont tous pris en compte par GROUPE au moment du calcul des matrices de transfert à dilution infinie. De ce fait, on n'a pas de limites au domaine de validité de la méthode Livolant-Jeanpierre concernant l'évaluation des taux de référence.

La résolution de l'équation (6.12) peut être effectuée soit à l'initialisation du calcul sur une plage de dilutions, en vue d'un calcul des taux de référence par interpolation, soit pendant l'optimisation pour une dilution spécifique. La première approche a été écartée, d'une part pour éviter l'introduction d'autres approximations liées à l'interpolation des taux de référence au moment de l'optimisation, d'autre part pour se dispenser des problèmes du choix des dilutions pour créer les tabulations préalables à l'interpolation. En effet, comme au cours de l'optimisation la largeur des groupes change, on ne peut vérifier qu'*a posteriori* si le choix des dilutions et de la fonction d'interpolation est correct.

De ce fait, une résolution de l'équation (6.12) pour chaque dilution est adoptée. Le problème rencontré avec cette approche réside dans la définition de l'énergie à laquelle on démarre la résolution pour garantir un flux à caractère asymptotique dans le groupe à autoprotéger et un temps de calcul non excessif. Dans ce but, on a effectué des tests numériques pour étudier l'influence de la position de la source. On a constaté qu'en dessous des premiers seuils inélastiques, la résolution de l'équation de structure fine à partir d'une énergie, située à une dizaine de transitoires de Placzek en amont, donne des résultats dont l'écart est de moins de 0.1 % par rapport à une résolution du premier groupe autoprotégé.

Pour appliquer ce principe, on recherche donc l'énergie minimale parmi les seuils inélastiques des noyaux résonnants du mélange $E_{s,min} = \min_{s,l,x} E_{s,l,x}$. La résolution de l'équation (6.12) est réalisée par le solveur multigroupe homogène de l'équation de structure fine de AEMC (cf. 5.3) en démarrant :

- si le groupe à autoprotéger est à une énergie supérieure à $E_{s,min}$, du premier groupe autoprotégé ;
- autrement à partir d'une énergie $E = E_g \cdot \exp(n\epsilon_{max})$, où ϵ_{max} est le gain maximal en léthargie du noyau le plus diffusant dans le mélange et n est un nombre entier fixé par l'utilisateur.

⁴domaine du ralentissement élastique et isotrope dans le centre de masse.

Une fois le flux de structure fine φ^g connu, on déduit les taux de réaction de référence :

$$T_{\rho,x}^G = \sum_{g \in G} \tilde{\sigma}_{\rho,x}^g \varphi^g, \quad (6.13)$$

et, si l'option d'autoprotection des taux de transfert est demandée, on calcule les taux de transfert :

$$T_{s,x}^{GG'} = \sum_{g \in G} \sum_{g' \in G'} p_{x,\infty}^{gg'} \tilde{\sigma}_{s,x}^{g'} \varphi^{g'}. \quad (6.14)$$

6.3.2 Équivalence continu-multigroupe

Cette étape définit le jeu de sections efficaces multigroupes autoprotégées $\tilde{\sigma}_{\rho,x}^G$ préservant les taux de référence. À ce stade pour la dilution Σ_e on dispose des taux de référence de diffusion $T_{s,x}^G(\Sigma_e)$, d'absorption $T_{a,x}^G(\Sigma_e)$, du taux total par agrégation $T_{t,x}^G = T_{s,x}^G + T_{a,x}^G$ et éventuellement des taux de transfert $T_{s,x}^{GG'}$.

Comme on a vu au paragraphe 3.5.1, dans cette phase on calcule le flux multigroupe de structure fine φ^G en résolvant pour la réaction totale l'équation :

$$\tilde{\sigma}_{t,x}^G \varphi^G = T_{t,x}^G, \quad (6.15)$$

et ensuite on en déduit les sections efficaces autoprotégées des autres réactions ρ par :

$$\tilde{\sigma}_{\rho,x}^G = \frac{T_{\rho,x}^G}{\varphi^G}. \quad (6.16)$$

Le flux multigroupe de structure fine est solution de l'équation :

$$\left(\Sigma_e + \sum_x c_x \tilde{\sigma}_{t,x}^G \right) \varphi^G = \tau^G, \quad (6.17)$$

où τ^G représente la densité d'arrivée. Cette grandeur peut être déterminée soit en utilisant les probabilités de transfert à dilution infinie condensées sur le maillage grossier (méthode standard) :

$$\tau^G = \sum_{G'} \sum_x c_x p_{x,\infty}^{GG'} T_{s,x}^{G'} + \Sigma_e w^G, \quad (6.18)$$

soit à partir des taux de transfert autoprotégés $T_{s,x}^{GG'}$:

$$\tau^G = \sum_{G'} \sum_x c_x T_{s,x}^{GG'} + \Sigma_e w^G. \quad (6.19)$$

Le flux multigroupe φ^G est obtenu en résolvant par itérations le système d'équations suivant :

$$\begin{cases} \tilde{\Sigma}_t^{G,n} = \frac{\bar{T}_t^G}{\varphi^{G,n-1}} \\ \varphi^{G,n} = \frac{\tau^G}{\Sigma_e + \tilde{\Sigma}_t^{G,n}} \end{cases} \quad (6.20)$$

où n représente l'indice des itérations, \bar{T}_t^G et $\tilde{\Sigma}_t^G$ sont respectivement le taux et la section macroscopique totale. Le processus de résolution est initialisé avec le flux de structure fine intégré et il est arrêté quand la convergence sur le taux total est atteinte.

6.4 Extension de l'approche Livolant-Jeanpierre à un problème à source

Les améliorations décrites au paragraphe 6.3.1 permettent d'appliquer la méthode Livolant-Jeanpierre sur tout le domaine énergétique, mais elles n'enlèvent pas l'approximation faite sur l'opérateur de ralentissement des noyaux résonnants :

$$R_0\Phi(u) \approx \chi(u)R_0\varphi(u). \quad (6.21)$$

Cette simplification peut entraîner des erreurs significatives si le noyau modérateur :

- est résonnant, car le flux macroscopique $\chi(u)$ n'est plus une fonction lentement variable dans les groupes où il est résonnant ;
- a des sections constantes avec une portée de ralentissement très faible, parce que $R_1\Phi(u)$ n'est plus un opérateur de lissage.

Ces deux situations peuvent se présenter dans le cadre d'un calcul de transport sur un réacteur rapide surtout à haute énergie (supérieure à 300 keV) où les noyaux légers sont résonnants (sodium 23, oxygène 16, fer 56, ...) et les seuls isotopes présentant des sections à peu près constantes en énergie sont les noyaux lourds (uranium 238, plutonium 239, ...).

De plus, à la différence des réacteurs à neutrons thermiques où le spectre du flux neutronique peut être représenté par une combinaison de fonctions simples (une maxwellienne autour de l'énergie de 2 MeV et une fonction $1/E$ dans le domaine du ralentissement), le spectre d'un réacteur rapide se déforme de manière continue avec l'énergie. Il n'est donc plus possible supposer un découplage entre un domaine d'énergie auquel les neutrons naissent et un domaine de ralentissement. L'autoprotection doit prendre en compte ce fait y compris avec une méthode des sous-groupes ⁵.

À partir de ces considérations, nous avons étudié une extension de la méthode Livolant-Jeanpierre, principalement pour en analyser les limites. La nouvelle méthode est basée sur la résolution d'un problème à source, pour conserver la distinction entre le calcul d'autoprotection et le calcul du flux. On garde la distinction entre noyaux résonnants, caractérisés par une variation rapide des sections efficaces dans le groupe, et noyaux modérateurs, ayant une section constante dans le groupe. On modélise l'opérateur de transfert d'un noyau modérateur x de la façon suivante :

$$r_{x,1}\Phi^g \approx \sum_{G'} \sigma_{s,x}^{G'} \sum_{g'=g_f(G')}^{g_l(G')} p_{x,\infty}^{gg'} \Phi^{g'} \quad \forall g \in G, \quad (6.22)$$

où $g_f(G)$ et $g_l(G)$ représentent le premier et le dernier groupes fins contenus dans un groupe grossier G .

Nous utilisons l'expression (6.22) pour résoudre l'équation de ralentissement à source externe normalisée suivante :

$$\left[\sum_x c_x (\tilde{\sigma}_{t,x,0}^g + \sigma_{t,x,1}^G) \right] \Phi^g = \sum_x c_x (r_{x,0}\Phi^g + r_{x,1}\Phi^g) + \frac{1}{\lambda} S^g \quad \forall g \in G, \quad (6.23)$$

dans laquelle les sections et les noyaux de transfert des isotopes résonnants sont calculés comme dans l'équation (6.12) et les termes S^g et λ dénotent respectivement la source externe et son facteur de normalisation. La source correspond soit à la source externe du problème de transport à résoudre, soit elle est donnée par :

$$S^g = \sum_{x \in fiss} \chi_{f,x}^g \quad (6.24)$$

⁵C'est la raison pour laquelle, dans le code de transport ERANOS dédié aux réacteurs rapides, le module d'autoprotection a été intégrée dans le calcul du flux.

pour des problèmes à valeur propre ou à source de fission. Cette formulation revient à supposer que le domaine d'intégration de l'opérateur de fission "lisse" les variations locales en énergie du taux de production, de sorte que celui-ci apparaît comme une simple intensité de la source de fission.

La résolution de l'équation (6.23) est réalisée sur tous les groupes fins compris dans le domaine énergétique autoprotégé. Pour disposer d'un flux asymptotique, dans le premier groupe énergétique la source externe comptabilise également la densité d'arrivée résultant du ralentissement des neutrons à plus haute énergie.

Une fois le flux Φ^g connu, les étapes de calcul des sections autoprotégées restent les mêmes que celle de la méthode Livolant-Jeanpierre. On déduit d'abord les taux de réactions de référence $T_{\rho,x}^G$ et, si l'option d'autoprotection des taux de transfert est demandée, on calcule les taux de transfert $T_{s,x}^{GG'}$. Ensuite, le flux multigroupe Φ^G est obtenu par une procédure d'équivalence continu-multigroupe. Dans ce but, si on intègre l'équation (6.23) sur un groupe G on parvient à la formulation suivante :

$$\left[\sum_x c_x (\tilde{\sigma}_{t,x,0}^G + \sigma_{t,x,1}^G) \right] \Phi^G = \tau_0^G + \tau_1^G, \quad (6.25)$$

où τ_0^G représente la source de ralentissement des noyaux résonnants et τ_1^G contient la contribution de la source externe et du ralentissement des noyaux modérateurs. On peut constater que, si les taux de transfert sont autoprotégés, Φ^G n'est rien d'autre que l'intégrale du flux de référence $\Phi^G = \sum_{g \in G} \Phi^g$. En revanche, si le taux de transfert est approché par le produit des probabilités de transfert à dilution infinie et du taux de diffusion $T_{s,x}^{GG'} = P_{s,\infty}^{GG'} T_{s,x}^{G'}$, une équivalence continu-multigroupe est nécessaire. Dans ce cas, on résout un système d'équations analogue à (6.20), dans lequel le terme $\Sigma_e w^G$ est remplacé par la source de ralentissement τ_1^G pour définir τ^G .

Cette nouvelle approche enlève toutes les hypothèses de la méthode Livolant-Jeanpierre. Il est probable que cette voie poussée à son terme corresponde à l'emploi d'un opérateur transport sous-groupes de référence adossé à une équivalence. Cela suppose de pouvoir faire des calculs d'autoprotection très détaillés en énergie sur des motifs géométriques simplifiés. Les sections multigroupes, issues de l'équivalence sur des maillages énergétiques grossiers, sont ensuite utilisées pour résoudre l'équation de transport sur la géométrie complète.

6.5 Définition et minimisation de la fonctionnelle

Pour résumer, nous avons à disposition une solution multigroupe de référence, calculée sur un maillage énergétique fin et adaptée à l'autoprotection par la méthode des sous-groupes avec un traitement en mélange, dont la procédure d'obtention a été explicitée à la section 5.4. Nous allons maintenant évaluer l'erreur commise en résolvant l'équation du transport sur un maillage plus grossier, avec des sections autoprotégées par les méthodes décrites aux sections 6.2, 6.3 et 6.4 et avec une modélisation de la source de fission plus ou moins dégradée (par exemple réduite à un seul macrogroupe).

Les différences entre ces deux solutions multigroupes dérivent des erreurs sur les taux d'absorption et de diffusion et sur la source de fission (si on traite un problème à valeur propre ou avec source de fission). Dans AEMC, on peut calculer soit les erreurs sur l'opérateur de fission, générées par une mauvaise représentation du spectre de fission, soit les erreurs sur les taux de production. Il est préférable de détecter ces dernières, car les taux de production constituent la partie résonnante de cet opérateur.

Suite à ces considérations, on va définir une fonctionnelle dépendant du maillage grossier \mathcal{M}_c de NG intervalles :

$$F(\mathcal{M}_c) = \sum_{n=1}^N \alpha_n [F_n(\mathcal{M}_c)]^2 \quad (\text{norm } L_2), \quad (6.26)$$

où $N = NC \times NI \times \overline{NG} \times NR$ est le nombre de composantes, NC est le nombre de problèmes neutroniques sur lesquels l'optimisation est effectuée, NI est le nombre d'isotopes, \overline{NG} est le nombre de groupes utilisé pour l'optimisation et NR est le nombre de réactions ($NR = 3$ correspondant à l'absorption, à la diffusion et à la fission).

Chaque composante de la fonctionnelle $F_n(\mathcal{M}_c)$ représente le désaccord entre le taux de réaction exact $T_{\rho,x,i}^{r,G}(\mathcal{M}_c)$ et le taux approché $T_{\rho,x,i}^{a,G}(\mathcal{M}_c)$:

$$F_n(\mathcal{M}_c) = \left[\frac{T_{\rho,x,i}^{r,G}(\mathcal{M}_c)}{T_{\rho,x,i}^r(\mathcal{M}_c)} - \frac{T_{\rho,x,i}^{a,G}(\mathcal{M}_c)}{T_{\rho,x,i}^a(\mathcal{M}_c)} \right], \quad (6.27)$$

$x = 1, NI, i = 1, NC, G = 1, \overline{NG}, \rho = 1, NR,$

où $T_{\rho,x,i}^r(\mathcal{M}_c)$ et $T_{\rho,x,i}^a(\mathcal{M}_c)$ sont les taux de réaction isotopiques de référence et approché. Les poids α_n dans (6.26) sont calculés comme suit :

$$\alpha_n = \frac{T_{\rho,x,i}^r(\mathcal{M}_c)}{T_{\rho,i}^r(\mathcal{M}_c)} \quad \text{avec} \quad T_{\rho,i}^r(\mathcal{M}_c) = \sum_x T_{\rho,x,i}^r(\mathcal{M}_c), \quad (6.28)$$

dans laquelle $T_{\rho,i}^r$ est le taux global. Ce poids réduit l'impact des isotopes avec un faible taux sur la fonctionnelle. De la même manière, l'emploi d'une erreur absolue au lieu d'une erreur relative réduit l'impact des domaines énergétiques où les taux sont peu élevés. Comme il existe presque un facteur 100 entre les valeurs des taux d'absorption et de diffusion, la normalisation par rapport au taux global du noyau évite que la fonctionnelle soit dominée par les réactions donnant les taux plus importants.

Dans la recherche du maillage \mathcal{M}_c , le nombre total de groupes NG est imposé par l'utilisateur et les bornes énergétiques sont recherchées parmi celles du maillage de référence \mathcal{M}_f en pouvant fixer certaines du maillage \mathcal{M}_b , défini par l'utilisateur (cf. 5.1.1). Il s'en suit le respect des conditions suivantes :

$$\mathcal{M}_b \subset \mathcal{M}_c \subset \mathcal{M}_f. \quad (6.29)$$

Notons respectivement par N_b le nombre de groupes du maillage grossier et par n_b le nombre de groupes du maillage de référence dans un macrogroupe G_b . Dans ce cas, les conditions suivantes doivent être respectées :

$$1 \leq N_b \leq n_b, \quad (6.30)$$

$$\sum_b N_b = NG. \quad (6.31)$$

Dans notre implémentation, l'utilisateur peut également définir un maillage $\mathcal{M}_B \in \mathcal{M}_b$ et associer à chaque macrogroupe G_B de \mathcal{M}_B un nombre de groupes $N_B \geq 1$ tel que :

$$\sum_b N_b = N_B, \quad (6.32)$$

$$\sum_B N_B = NG. \quad (6.33)$$

Les taux de réaction exacts et approchés sont calculés soit sur le maillage à optimiser ($\overline{NG} = NG$) soit sur le découpage fixé ($\overline{NG} = N_b$). Ce dernier choix paraît plus pertinent

lorsque le maillage de référence a été validé en comparant les taux multigroupes du solveur AEMC à ceux issus du Monte Carlo calculés sur le maillage \mathcal{M}_b .

L'optimisation du maillage est posée comme un problème de minimisation monocritère combinatoire. Il s'agit de trouver le maillage \mathcal{M}_{opt} à NG intervalles tel que :

$$F : Q \rightarrow \mathbb{R}_+ \quad (6.34)$$

$$F(\mathcal{M}_{opt}) = \min F(\mathcal{M}) \quad (6.35)$$

où \mathbb{R}_+ est l'ensemble des réels positifs et Q est l'ensemble des maillages à $NG + 1$ énergies qu'on peut former à partir des $ng - N_c$ bornes libres du maillage de référence. Pour des raisons de simplicité, la recherche est effectuée sur l'ensemble des indices du maillage fin plutôt que sur les énergies. Le cardinal de l'ensemble Q est :

$$\prod_b C_{n_b-1}^{N_b-1} \quad (6.36)$$

où $C_{n_i}^{N_i} = n_i! / [N_i!(n_i - N_i)!]$ est le coefficient binomial. Pour nous faire une idée de la taille de l'espace Q , considérons un maillage fin composé de 201 intervalles et un maillage grossier comprenant 41 intervalles et imposons seulement les extrêmes du domaine énergétique ($N_b = N_B = 1$). Pour ce type de problème, le nombre d'éléments de l'ensemble Q vaut approximativement $2 \cdot 10^{42}$.

Cet exemple nous démontre qu'une exploration complète de l'espace Q est illusoire. Cela nous a orienté vers des algorithmes adaptés à ce genre de problématiques, connus sous le nom de métaheuristiques. Elles permettent de trouver des solutions voisines de l'optimum en n'explorant qu'une partie de l'espace de recherche et donc nécessitant un temps de calcul raisonnable.

Les métaheuristiques sont basées sur des concepts assez généraux, souvent inspirées par des phénomènes naturels, applicables à une large gamme de problèmes d'optimisation. Elles s'appuient sur deux principes fondamentaux : l'exploration et l'exploitation. Le premier point assure une recherche étendue et aléatoire de l'espace de recherche, le deuxième combine, parmi les différentes solutions explorées, les meilleures par rapport au critère de recherche défini.

On classe dans ces méthodes les algorithmes génétiques, le recuit simulé, la recherche Tabou, les essaims particuliers etc. On trouvera dans l'article [Hao *et al.*, 1999] une revue des principes et des méthodes de ces algorithmes.

Pour l'optimisation du maillage énergétique, on a étudié deux métaheuristiques différentes : les algorithmes génétiques et les essaims particuliers. Les paragraphes suivants décrivent le principe et l'algorithmique de ces deux méthodes.

6.5.1 Les algorithmes génétiques

Les algorithmes génétiques utilisent la métaphore biologique de l'évolution des espèces de Darwin (évolution d'un ensemble d'individus par sélection naturelle et reproduction) pour résoudre un problème d'optimisation donné. Le point-clé est de faire évoluer stochastiquement un ensemble de solutions potentielles du problème en sélectionnant les plus performantes pour, en les combinant entre elles, construire un nouvel ensemble de solutions. Génération après génération, la population "s'adapte" et le meilleur individu est une "bonne" solution du problème donné.

Les deux grands types d'opérateurs d'évolution, permettant de créer de nouveaux individus, sont le croisement et la mutation. Le premier combine les solutions (pour nous des maillages) associés à deux individus appelés parents pour en trouver de nouvelles. Le

deuxième altère arbitrairement une partie de la solution associée à un individu. Elle permet d'éviter une convergence prématurée en assurant que tous les points de l'espace de recherche ont une probabilité non nulle d'être atteints. Pour améliorer la rapidité de la convergence, on utilise souvent une stratégie élitiste conservant intacts, d'une génération à l'autre, les individus les plus performants.

L'algorithme présenté est celui implémenté dans le code VIZIR, outil d'optimisation développé au service SFME du CEA de Saclay. Un individu est représenté par deux chromosomes constitués de gènes. Chaque chromosome représente une solution du problème à résoudre. On appelle génotype le patrimoine génétique de l'individu et le phénotype la représentation de l'individu dans l'espace de recherche. Le phénotype est le résultat d'une sélection des gènes du génotype et il sert à calculer la valeur de la fonctionnelle.

La dynamique d'évolution est reproduite par l'algorithme suivant. On crée d'abord une population de N_{el} individus en tirant aléatoirement les composantes du génotype et on évalue la fonctionnelle F_i pour chacun des nouveaux individus. À chaque pas d'évolution :

1. on classe la population selon les valeurs F_i par ordre croissant ;
2. si $|F_{N_{el}} - F_1| \leq \epsilon$ pour un ϵ fixé par l'utilisateur, on s'arrête. Dans le cas contraire on constitue une nouvelle génération en passant par une phase de sélection et une phase de naissance ;
3. dans la phase de sélection, on applique une stratégie élitiste en conservant avec un taux de survie T_s les s meilleurs individus ($s = [N_{el} \cdot T_s]$, où $[.]$ indique la partie entière) tels que : $F_i \leq F_s$;
4. dans la phase de naissance, on crée une nouvelle génération d'individus par croisement (cf. 6.5.3) des chromosomes des deux parents parmi les s survivants suivi éventuellement d'une mutation. Un descendant sera rejeté si sa fonctionnelle $F_d > F_s$ ou si la solution trouvée n'appartient pas à l'espace de recherche. La phase de naissance est itérée jusqu'à ce que la population contienne N_{el} individus formant une nouvelle génération ;
5. on boucle en 1.

Le lecteur intéressé peut se référer au document [Dumas, 2002] et à l'article [F.Gaudier et Dumas, 2006] pour analyser plus en détail les caractéristiques de ce type d'algorithme.

6.5.2 Les essais particuliers

Les essais particuliers [Clerc, 2005] s'inspirent du comportement coopératif d'un groupe N_{el} de particules. Chaque particule en communiquant à d'autres la qualité et la position du meilleur site trouvé (qualité que l'on peut interpréter comme la valeur de la fonctionnelle) conduit le groupe vers la position (solution) optimale. À chaque particule est associée :

- une position, correspondant à la solution de l'itération courante i ;
- une mémoire locale et une mémoire globale, qui contiennent respectivement les solutions des meilleures évaluations de la fonctionnelle par la particule elle-même et sa meilleure informatrice.

Le déplacement d'une particule résulte de la combinaison entre la position de la meilleure solution explorée par elle-même et de la meilleure solution transmise par ses informatrices. Cette combinaison est réalisée par l'opérateur de croisement, décrit au paragraphe suivant.

Dans notre implémentation, chaque particule est en communication avec deux autres. L'envoi de l'information est effectué uniquement lorsque la particule trouve une meilleure solution pour éviter d'envoyer des informations inutiles.

Le réseau de communication est fermé, ainsi toute particule reçoit les informations des autres particules, même sans lien direct (cf. figure 6.1). Sa structure rectangulaire très allongée (cf. figure 6.1), fixée au départ de la simulation, assure une relative indépendance dans

l'exploration des particules tandis que les communications indirectes via ce réseau permet un rassemblement dès qu'un optimum global pour l'essaim est trouvé.

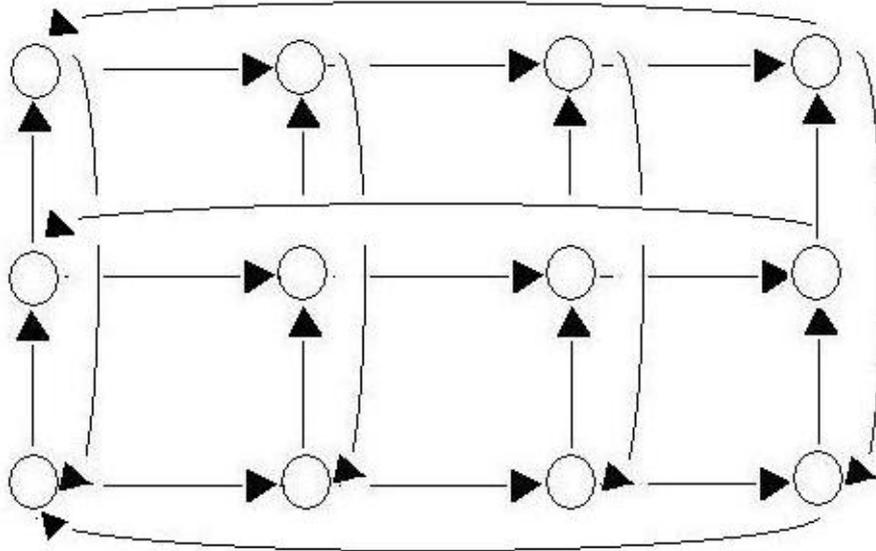


FIG. 6.1: Topologie de communication de l'essaim particulaire. La flèche indique le lien de communication, le cercle représente la particule.

En général, la dynamique d'un essaim se caractérise d'abord par une recherche aléatoire, et au fur et à mesure que les particules explorent l'espace de recherche les bonnes solutions trouvées sont communiquées. Les particules profitent de l'information transmise pour les déplacements suivants. Lorsqu'aucune meilleure solution n'est trouvée, l'information se propage progressivement parmi toutes les particules et l'essaim se rassemble autour du minimum trouvé.

L'implémentation de cette dynamique est reproduite par l'algorithme suivant. On crée un ensemble de N_{el} particules en leur donnant une position. À chaque itération i :

1. chaque particule évalue la fonctionnelle F_k à l'endroit où elle se trouve. On met à jour la mémoire locale et la mémoire globale de chaque particule et on sélectionne la meilleure performance globale F_b de l'essaim ;
2. on s'arrête si plus de 50 % des valeurs de la fonctionnelle, pour un ϵ fixé par l'utilisateur, satisfait la condition $|F_k - F_b| \leq \epsilon F_b$, parce qu'un minimum global acceptable est atteint et on veut éviter d'attendre que toutes les particules de l'essaim se rassemblent autour de F_b ;
3. autrement une nouvelle position est trouvée en combinant les solutions contenues dans la mémoire locale et dans la mémoire globale ;
4. on boucle en 1.

6.5.3 Croisement des maillages

Pour notre problématique, un chromosome d'un individu ou une particule représente un élément dans l'espace Q et donc un maillage. Les algorithmes génétiques et les essaims particuliers adoptent la même méthodologie de déplacement vers l'optimum : le croisement des maillages. Cet opérateur, que nous allons définir, agit sur deux maillages selon les principes décrits ci-dessous.

Avant de définir cet opérateur, il nous faut considérer deux situations d'optimisation différentes suivant que la condensation du maillage de référence s'effectue sur des structures gardant plus ou moins de la moitié des bornes. Dans le premier cas, l'espacement moyen des bornes est peu différent de celui du maillage de référence, dans l'autre cas, les bornes peuvent s'éloigner beaucoup entre elles. Pour cela, si on garde plus de la moitié des groupes, on fait une simple distinction entre borne présente, représentée avec un disque, ou de borne absente, représentée avec un trait, du maillage de référence (cf. figure 6.3). Dans l'autre cas en revanche, comme représenté sur la figure 6.4, il est utile de cataloguer les bornes des deux maillages à combiner en : égales, proches et éloignées. La figure 6.2 montre les différentes conditions pour que les bornes de deux intervalles soient proches. Toutes ces possibilités reviennent à vérifier qu'entre deux intervalles, notés par j et k de deux maillages énergétiques $\mathcal{M}^{(1)}$ et $\mathcal{M}^{(2)}$, une des conditions suivantes est respectée :

- si $E_{j-1}^{(1)} = E_{k-1}^{(2)}$ alors $E_j^{(1)} > E_k^{(2)}$ ou $E_j^{(1)} < E_k^{(2)}$,
- si $E_j^{(1)} < E_k^{(2)}$ alors $2 \cdot E_k^{(2)} < E_j^{(1)} + E_{j-1}^{(1)}$ ou $E_{j-1}^{(1)} > E_{k-1}^{(2)}$,
- si $E_j^{(1)} > E_k^{(2)}$ alors $2 \cdot E_j^{(1)} < E_k^{(2)} + E_{k-1}^{(2)}$ ou $E_{k-1}^{(2)} > E_{j-1}^{(1)}$.

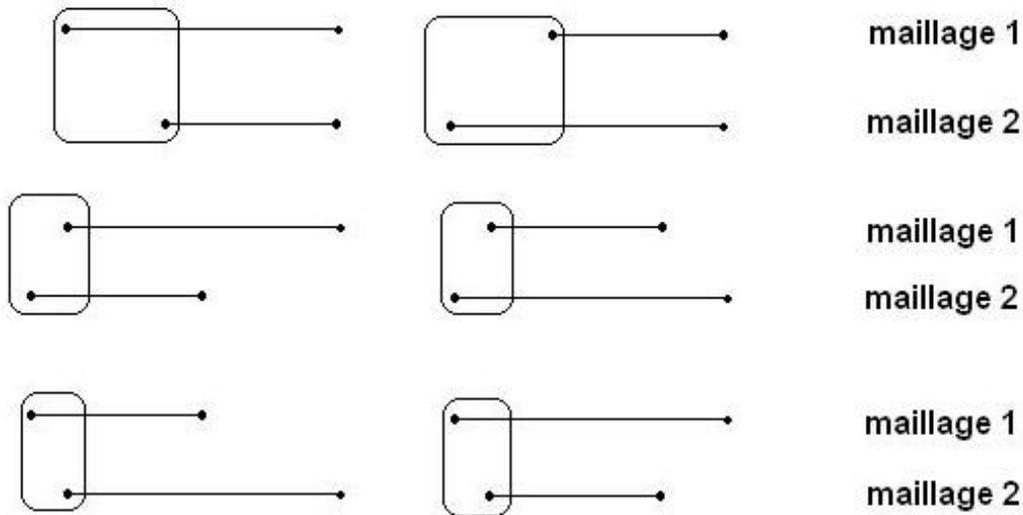


FIG. 6.2: Liste des possibilités pour considérer deux bornes proches. Les points représentent les bornes d'un maillage.

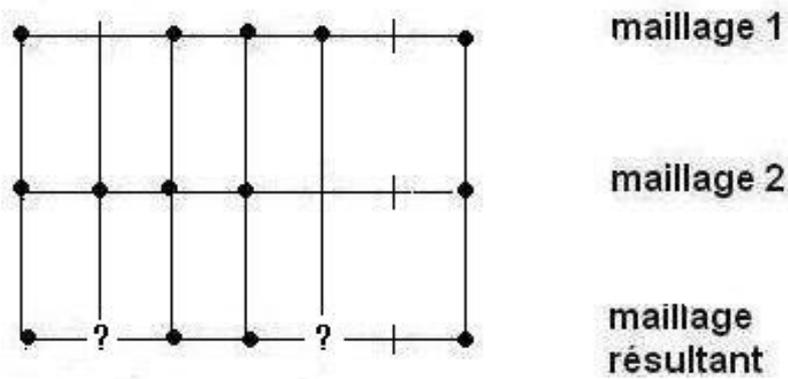


FIG. 6.3: Schéma de croisement de deux maillages gardant plus de la moitié des bornes du maillage de référence. Les points représentent les bornes du maillage grossier, les traits sont les bornes du maillage de référence et le point d'interrogation signifie qu'un tirage aléatoire est effectué pour décider si on garde ou on enlève la borne.

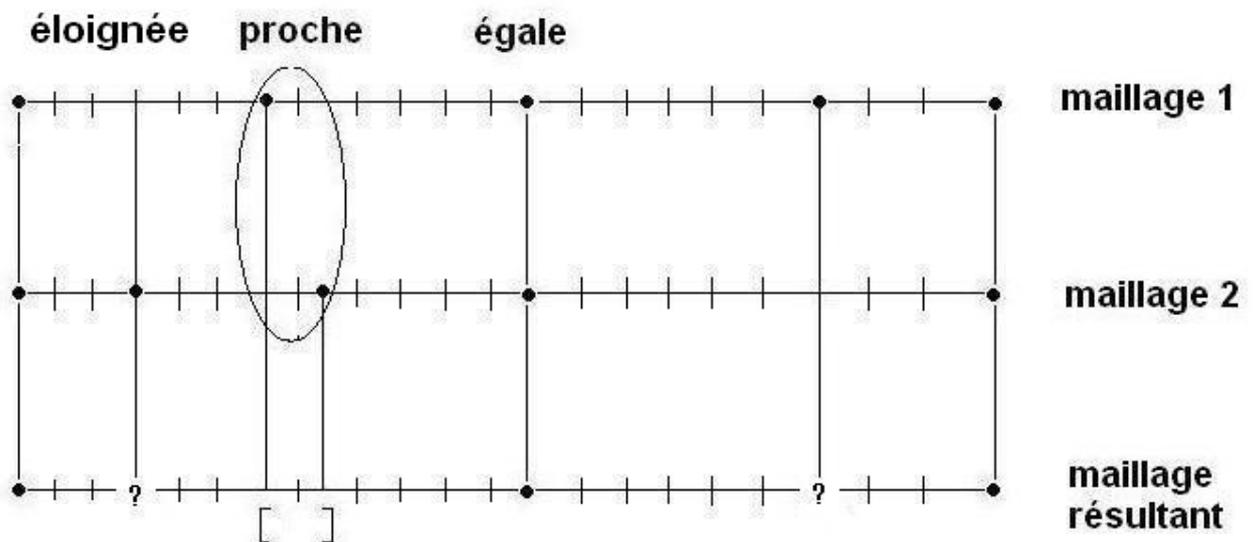


FIG. 6.4: Schéma de croisement de deux maillages gardant moins de la moitié des bornes du maillage de référence. Les points représentent les bornes du maillage grossier, les traits sont les bornes du maillage de référence, les crochets indiquent la position probable des nouvelles bornes et le point d'interrogation signifie qu'un tirage aléatoire est effectué pour décider si on garde ou on enlève la borne.

La création d'un nouveau maillage en combinant deux précédents est le résultat de l'algorithme suivant (cf. figures 6.3 et 6.4) :

1. on recopie les énergies communes, ainsi les bornes imposées sont gardées et, en se rapprochant de la solution optimale, les bornes appartenant à des minima locaux sont conservées ;
2. si le nombre de bornes $NG + 1 > (ng + 1)/2$
 - (a) on complète les bornes manquantes du nouveau maillage en choisissant aléatoirement parmi les bornes restantes des deux maillages ;
3. si le nombre de bornes $NG + 1 \leq (ng + 1)/2$
 - (a) on échantillonne dans les intervalles des points proches ;
 - (b) on complète les bornes manquantes du nouveau maillage en choisissant aléatoirement parmi toutes les bornes du maillage de référence avec une probabilité s et parmi les bornes éloignées des deux maillages avec une probabilité $1 - s$.

La stratégie de croisement pour $NG + 1 > (ng + 1)/2$ permet de rechercher la solution d'une façon optimale parce que progressivement le nombre de bornes communes augmente et les bornes en excès du maillage de référence sont ignorées.

Les algorithmes génétiques échantillonnent toujours les nouvelles bornes selon une distribution uniforme. Les essais particuliers, en revanche, adoptent une stratégie plus complexe. Si aucun meilleur maillage n'est trouvé ou si le nombre de bornes est strictement supérieur à $(ng + 1)/2$, on croise un maillage de la mémoire locale et un maillage de la mémoire globale selon une distribution uniforme (méthode Pivot). Si un meilleur maillage est trouvé et si le nombre de bornes est inférieur ou égal à $(ng + 1)/2$, on croise d'abord un maillage de la mémoire globale et un maillage de la mémoire locale en échantillonnant par la méthode Pivot. Ensuite le maillage résultant est recombinaison avec le maillage de la mémoire locale en adoptant une distribution biaisée vers le deuxième maillage, car il contient une meilleure solution. L'adoption de ce type de procédure est conseillée dans le manuel [Clerc, 2005] pour augmenter l'efficacité dans la recherche de l'optimum.

La méthode exposée plus haut ne permettait pas de converger vers un minimum global unique lors des condensations à faible nombre de groupes ($NG + 1 \leq (ng + 1)/2$). En effet, dans ces conditions, le raffinement dans certains domaines énergétiques conduit à une dégradation assez importante de la solution dans les autres. L'allure de la fonctionnelle au cours de l'optimisation est donc assez bruitée et en croisant deux maillages quelconques, les solutions trouvées oscillent autour du minimum sans s'en rapprocher.

Pour pallier cet inconvénient, on a donc apporté les modifications suivantes. Chaque particule garde dans sa mémoire locale les n_{mem} meilleures solutions et au moment du croisement avec le maillage de la mémoire globale, on choisit parmi tous ces maillages celui le plus proche en fonction de la règle adoptée dans le croisement. Dans ce but, on introduit la notion suivante de distance d entre deux maillages $\mathcal{M}^{(1)}$ et $\mathcal{M}^{(2)}$:

- si le nombre de bornes $NG + 1 > (ng + 1)/2$

$$d = \sum_{j=1}^{NG+1} \theta_1(E_j^{(1)}) + \theta_1(E_k^{(2)}) \quad (6.37)$$

$$\theta_1(E_j^{(1)}) = \begin{cases} 1 & \text{si } E_j^{(1)} \notin \mathcal{M}^{(2)} \\ 0 & \text{autrement} \end{cases} .$$

– si le nombre de bornes $NG + 1 \leq (ng + 1)/2$

$$d = \sum_{j,k=1}^{NG+1} \theta_2(E_j^{(1)}, E_k^{(2)}) \quad (6.38)$$

$$\theta_2(E_j^{(1)}, E_k^{(2)}) = \begin{cases} 0 & \text{si } E_j^{(1)} = E_k^{(2)} \\ 0.2 & \text{si proches} \\ 1 & \text{autrement} \end{cases} .$$

Avec cette nouvelle stratégie, on contraint une particule ou un individu à bouger par petit pas et globalement l'essaim ou la population à se déplacer vers l'optimum en minimisant localement la fonctionnelle. De cette manière, en augmentant le nombre d'itérations, les solutions trouvées se rapprochent d'un minimum global acceptable.

Les solutions trouvées par les essais particulaires et les algorithmes génétiques sont semblables. Toutefois, expérimentalement, en imposant des contraintes sur le nombre maximal d'évaluations, on a constaté que les essais particulaires étaient plus efficaces. De ce fait, au cours de cette thèse, l'optimisation du maillage énergétique est effectuée avec les essais particulaires.

Pour réduire le temps de calcul, la simulation des essais particulaires a été parallélisée. Au lieu de faire évaluer la fonctionnelle par chaque particule en mode séquentiel, on distribue les particules sur un nombre N de processeurs. Après N_{el} évaluations de la fonctionnelle, le processeur maître interroge les mémoires des différentes particules et vérifie le test d'arrêt. En général, une simulation en parallèle comporte plus d'itérations qu'une simulation séquentielle, parce qu'on ne bénéficie pas des informations en cours d'évaluation qui pourraient nous guider vers de meilleures solutions. Des tests numériques nous ont montré que cette pénalisation reste limitée. On gagne un facteur légèrement inférieur au nombre N de processeurs entre les temps de simulation parallèle et séquentielle.

Troisième partie

Résultats

Les résultats numériques des développements théoriques sont abordés dans cette partie du manuscrit.

Dans le chapitre 7 on montre les tests pour valider l'approche d'optimisation du maillage énergétique dans les trois étapes suivantes : création de la solution de référence, application des méthodes d'autoprotection et optimisation du maillage énergétique.

Les chapitres 8 et 9 sont consacrés à la création du maillage de référence et des maillages optimisés pour les réacteurs rapides refroidis au sodium.

Au cours de ces chapitres, on utilise les notions d'écart relatifs et absolus du calcul C par rapport à la référence R.

Les écarts relatifs sont exprimés en pour-cent et sont calculés de la façon suivante :

$$100 \cdot \frac{R - C}{R},$$

en revanche, les écarts absolus sont exprimés en pour cent mille et déduits par l'expression :

$$10^5 \cdot (R - C).$$

L'unité physique pour exprimer les taux par unité de volume intégrés en léthargie est un nombre de réactions par cm^3 et par seconde. Par convention, on prendra le "pcm" (pour cent mille) comme unité de taux sur les courbes et dans les tableaux.

Par la suite, les calculs à valeur propre sont normalisés de façon à donner un taux de production égal au coefficient de multiplication et les problèmes à source présentent une source intégrale unitaire.

Chapitre 7

Test de validation de la méthode

La méthode d'optimisation s'appuie sur les solveurs de AEMC, c'est pourquoi ce chapitre présente d'abord les résultats de modélisation du spectre de fission et une analyse poussée des résultats dans le domaine non résolu entre les solutions Monte Carlo et les solutions déterministes du code APOLLO2 et du solveur multigroupe de AEMC.

Ensuite, on montrera des études effectuées sur le solveur ponctuel en énergie, d'une part pour valider la prise en compte des réactions à seuil et d'autre part pour en étudier la précision dans la résolution numérique.

Les deux derniers paragraphes concernent l'optimisation. Le premier montre l'équivalence entre les solutions d'APOLLO2 et de AEMC dans un calcul approché, si la même méthode d'autoprotection est appliquée. Le deuxième montre une étude de l'influence de la largeur des groupes sur l'autoprotection Livolant-Jeanpierre et les résultats d'optimisation du maillage énergétique sur un problème de structure fine à différentes dilutions.

Pour effectuer tous ces tests, on a utilisé les maillages énergétiques existants suivants : le maillage XMAS à 172 groupes [C.J. Dean, R. J. Perry, 1990], le maillage SHEM à 281 groupes [Hfaiedh et Santamarina, 2005], le maillage ECCO à 1968 groupes [Rimpault, 1995], le maillage universel à 11276 groupes [Mengelle, 1995] et le maillage UNIVSH à 11513 groupes, réunion du maillage universel et du maillage SHEM.

7.1 Modélisation du spectre de fission

Cette étude a comme objectif d'évaluer l'impact de la représentation du spectre de fission dans différentes conditions neutroniques. Dans ce but, on a considéré les trois compositions suivantes :

1. un mélange non modéré de noyaux d'uranium, obtenu par homogénéisation volumique du problème sphérique de Godiva [Nuclear Science Comitee, 2001, ICSBEP] ;
2. un mélange non modéré de noyaux de plutonium, obtenu par homogénéisation volumique du problème sphérique de Jezabel [Nuclear Science Comitee, 2001, ICSBEP] ;
3. un mélange d'un UOX neuf, avec une teneur du 3 % en uranium 235, modéré avec de l'hydrogène, avec une concentration équivalente à une dilution de 50 barns.

Le tableau 7.1 fournit les valeurs des compositions isotopiques. Les données utilisées sont issues de l'évaluation JEFF31.

On a effectué trois calculs à valeurs propres à la température de 900 K avec le solveur multigroupe homogène de AEMC. Les sections multigroupes ont été calculées sur le maillage ECCO à 1968 groupes et ensuite autoprotégées par la méthode des sous-groupes avec traitement en mélange sans tables de probabilité. Pour évaluer l'impact de la modélisation de la source de fission, on a considéré pour la représentation du domaine d'énergie incidente les structures suivantes :

Cas	Noyau	Concentration $at / (barn\ cm) * 10^{24}$
Uranium non modéré	U234	$4.92 \cdot 10^{-4}$
	U235	$4.5 \cdot 10^{-2}$
	U238	$2.498 \cdot 10^{-3}$
Plutonium non modéré	Pu239	$3.7047 \cdot 10^{-2}$
	Pu240	$1.7512 \cdot 10^{-3}$
	Pu241	$1.1674 \cdot 10^{-4}$
Uranium modéré	U235	0.03
	U238	0.97
	H1	2.5

TAB. 7.1: Compositions pour l'étude sur l'influence du spectre de fission.

Spectre	Uranium non modéré	Plutonium non modéré	Uranium modéré
1g	2.25518	2.96837	1.26022
33g	2.25917	2.97447	1.26026
1968g	2.25917	2.97447	1.26026

TAB. 7.2: Valeur propres calculées dans différents spectres neutroniques.

- un seul macrogroupe, ce qui correspond à l'hypothèse adoptée par le code APOLLO2 ;
- 33 macrogroupes, correspondant au découpage énergétique des calculs des cœurs rapides ;
- 1968 groupes, i.e. un calcul avec la matrice de fission, issue de GROUPE.

Le tableau 7.2 montre les valeurs propres de ces trois simulations. Pour les deux problèmes à spectre rapide, le système est surcritique puisque on ne considère pas les fuites. On peut observer que les calculs avec un spectre à 33 macrogroupes et avec la matrice de fission sont en accord dans les trois cas. La représentation à un seul macrogroupe est en accord avec les deux autres seulement si le système est modéré.

Les figures 7.1, 7.2 et 7.3 comparent les taux de production sur les noyaux les plus importants (U235, Pu239) en utilisant le flux du problème et la fonction de pondération NJOY. Il faut remarquer que cette deuxième grandeur est utilisée pour le calcul du spectre de fission à un et 33 macrogroupes (cf. 5.3 et l'équation (5.34)).

Ces graphiques montrent que le biais induit, dans les spectres rapides, par un calcul à un seul macrogroupe dérive du fait que la fonction de pondération NJOY surestime le taux de production à basse énergie.

On a aussi effectué des tests supplémentaires sur des cellules RNR-sodium à différents taux de vidange. Le biais induit par une description à un seul macrogroupe est inférieur à une centaine de pcm.

Il faudrait également étudier l'emploi d'une fonction de pondération plus représentative des spectres rapides que celle disponible dans le code NJOY. Cette étude n'a pas encore été menée à terme en raison des problèmes rencontrés dans la génération des données multi-groupes via le code NJOY en modifiant la fonction de pondération standard.

Par la suite, les calculs de référence à valeurs propres sont effectués avec une description à 33 macrogroupes pour le spectre de fission.

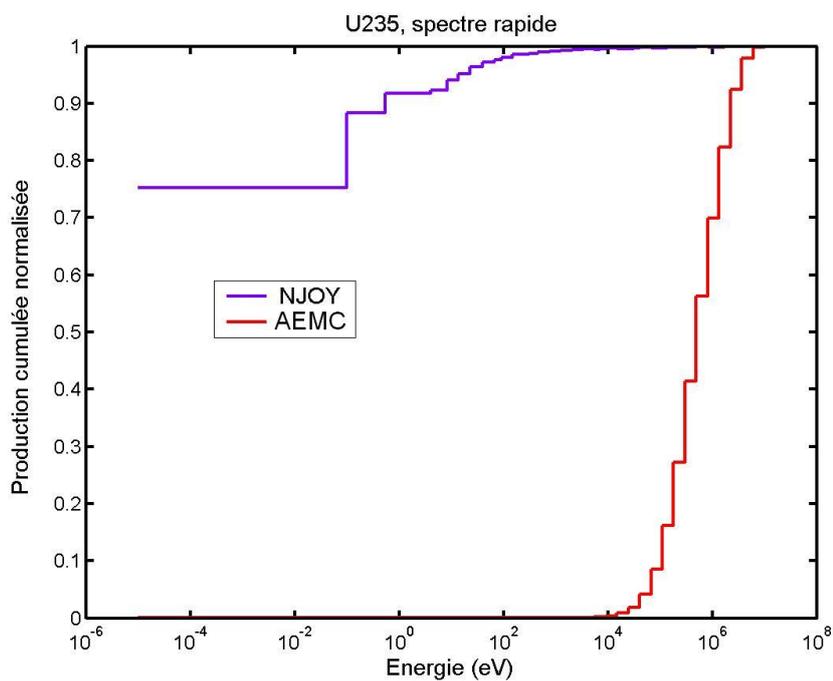


FIG. 7.1: Distribution cumulée du taux de production de l'U235 pour la composition de Godiva.

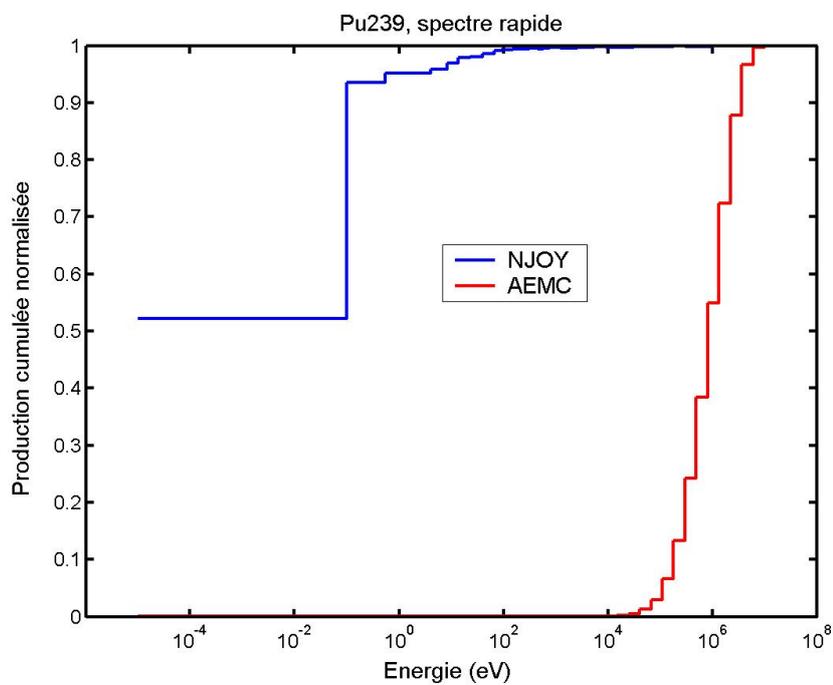


FIG. 7.2: Distribution cumulée du taux de production du Pu239 pour la composition de Jezebel.

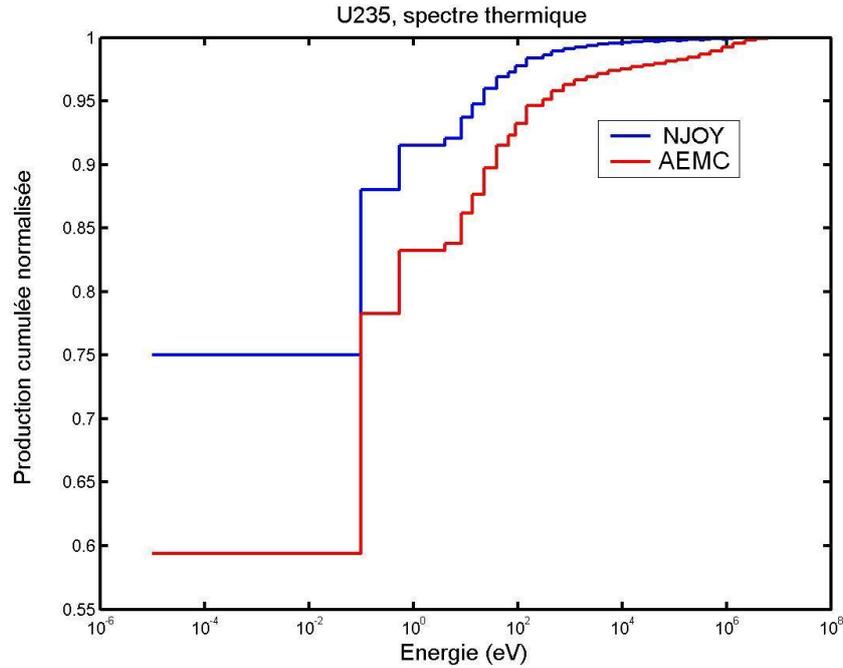


FIG. 7.3: Distribution cumulée du taux de production de l'U235 dans un spectre thermique.

7.2 Comparaison des solveurs dans le domaine non résolu

Cette section montre les tests effectués sur des problèmes à source et à valeur propre, inhérents à la filière des réacteurs à spectre rapide RNR-sodium. Ces tests ont été menés, après avoir observé des incohérences entre les résultats de AEMC et de TRIPOLI4 en utilisant les tables de probabilité dans le domaine non résolu (option TABPROB, cf. 5.2.1) sur des calculs à valeur propre avec des mélanges de 36 noyaux, typiques d'un combustible dans un réacteur RNR. Puisque ces calculs semblent relativement complexes, on a décidé d'effectuer des tests plus simples à source avec un seul noyau et à valeur propre sur un mélange réduit à 5 noyaux. Dans cette étude, on adopte les maillages suivants : 1968 groupes ECCO, 2212 et 4898 groupes et le maillage universel à 11276 groupes.

Le maillage ECCO a été choisi parce qu'il est bien validé pour les calculs sur les réacteurs à spectre rapide. Il permet d'évaluer l'efficacité de AEMC dans la création des maillages.

Les structures à 2212 et 4898 groupes ont été obtenues par AEMC. Nous avons considéré trois problèmes différents, composés de 36 isotopes chacun, correspondant aux taux de vide 0 %, 50 % et 100 %. Les densités d'émission ont été obtenues par un calcul à valeur propre non autoprotégé avec la bibliothèque JEFF30 de sections efficaces à 1968 groupes ECCO. AEMC a déterminé ces structures multigroupes en imposant : un critère sur le flux ϵ_f^s (cf. 5.1.1) variable entre 25 %, pour les énergies à forte d'absorption, et 200 %, pour les zones à absorption très faible, et un critère sur le transfert ESLF (cf. 5.1.2) respectivement égal à 1/8 et 1/20.

Enfin, on a choisi le maillage à 11276 groupes pour deux raisons différentes. D'une part il est considéré comme un maillage de référence quand on applique l'autoprotection en sous-groupes dans le code APOLLO2. D'autre part, c'est le maillage utilisé pour calculer les tables de probabilité, employées par le code TRIPOLI4 dans le domaine non résolu des noyaux.

Tous ces maillages ont en commun un support à 33 groupes, qu'on utilise pour comparer des taux de réactions.

Les bibliothèques des sections efficaces produites sont issues de JEFF30 et sont obtenues en imposant, dans GROUPE, la précision la plus élevée pour le calcul des matrices

de transfert. En effet par défaut dans GROUPE, si l'ordre de Legendre demandé est faible, l'intégration est moins précise qu'avec des ordres élevés de Legendre. En général, les effets sont d'autant plus manifestes, dans un calcul multigroupe, que le maillage est grossier.

7.2.1 Problèmes à source

Le premier test est un problème de ralentissement dans l'uranium 238. L'objectif est de vérifier que le transfert des neutrons soit bien représenté dans AEMC, sans ajouter les erreurs d'un traitement imprécis de la fission. La source est uniforme en énergie, placée dans l'intervalle ΔE_G [0,8-1,3] MeV et a une intensité dans chaque groupe g de $\frac{\Delta E_g}{\Delta E_G}$. Cette condition garantit d'avoir une source externe multigroupe équivalente à celle continue, échantillonnée par le code TRIPOLI4. Ensuite, on va comparer les résultats des calculs homogènes multigroupes de AEMC et continus de TRIPOLI4, sans et avec l'emploi des tables de probabilité dans le domaine non résolu (respectivement options NJOY et TABPROB). Les simulations TRIPOLI4 ont été effectuées avec 10 millions d'histoires de neutrons avec une source externe uniforme, isotrope et stationnaire.

Calcul dans l'option NJOY

Sur la figure 7.4 on compare les écarts sur les taux d'absorption des différentes bibliothèques multigroupes, en utilisant les résultats d'une simulation TRIPOLI4 avec l'option NJOY. Tous les maillages donnent des résultats dans les barres d'erreur à trois écarts-types de la simulation TRIPOLI4. On pourrait donc conclure qu'avec un maillage à 2000 groupes environ :

- les calculs multigroupes convergent ;
- la probabilité de transfert est bien représentée.

Cette dernière condition est préservée dans un calcul TABPROB aussi, parce que les tables de probabilité ne contiennent aucune information sur la probabilité de transfert.

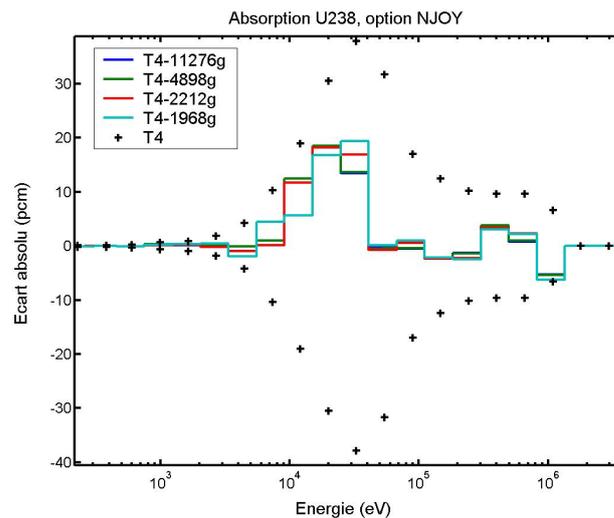


FIG. 7.4: Écart absolu sur le taux d'absorption pour l'U238. Les calculs multigroupes sont obtenus par AEMC avec une autoprotection en sous-groupes en utilisant les sections ponctuelles. Les valeurs de référence, obtenues par un calcul TRIPOLI4 sans tables de probabilité, sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

Calcul dans l'option TABPROB

Sur les figures 7.5 et 7.6 on compare les écarts absolus et relatifs sur les taux d'absorption des différentes bibliothèques multigroupes, en utilisant les résultats d'une simulation TRIPOLI4 avec l'option TABPROB. Tous les résultats multigroupes sortent des barres d'erreur TRIPOLI4 dans le domaine non résolu de l'uranium 238 (10 à 300 keV). Le cas plus manifeste est celui du maillage universel, où AEMC et TRIPOLI4 utilisent les mêmes tables de probabilité. Puisque le noyau traité est fissile dans la zone non résolue et présente des seuils inélastiques, nous avons voulu simplifier l'étude, de façon à comprendre si l'erreur venait des réactions inélastiques ou de la fission. Pour cela, on a choisi le molybdène 92, qui est un noyau non fissile et qui présente le premier seuil inélastique à 1,5 MeV. La simulation TRIPOLI4 et le calcul de AEMC ont été refaits en gardant la source du problème précédent. Dans les figures 7.7 et 7.8, on montre les écarts absolu et relatif sur les taux d'absorption des différentes bibliothèques multigroupes limitées au domaine [10 keV - 1 MeV]. Les résultats de AEMC sortent des barres d'erreur dans la zone non résolue du molybdène 92 [50 - 100] keV et quelques groupes en dessous. Cet écart est toutefois relativement faible et de l'ordre de 1 %. Des tests similaires ont été menés pour observer si l'on modélise correctement le transfert inélastique dans l'uranium 238. On a donc choisi un problème de ralentissement en fixant la source en dessous du premier seuil inélastique (45 keV) et du deuxième seuil inélastique (149 keV). Dans les deux cas, on trouve un désaccord.

Pour exclure une erreur de modélisation du non résolu, on a comparé AEMC et APOLLO2 avec la bibliothèque à 11276 groupes. Le test effectué est le problème de ralentissement dans l'uranium 238. Dans le calcul APOLLO2, les sections de l'uranium 238 ont été autoprotégées par la méthode des sous-groupes. La figure 7.9 montre que AEMC et APOLLO2 sont en accord dans le domaine non résolu, mais dépassent les barres d'erreur TRIPOLI4. La figure 7.10 montre que cet écart reste inférieur à 1 % dans les deux simulations déterministes.

Les différences observées ne provient pas des erreurs de factorisation (5.9), expliquée au paragraphe 5.1.2, parce que la même approximation est faite pour le test avec l'option NJOY de TRIPOLI4. Par ailleurs, les simplifications dans l'autoprotection du domaine non résolu pour un mélange, expliqué au paragraphe 5.2.2, ne peuvent pas être la cause du désaccord, car on traite un problème avec un seul isotope. On peut donc conclure que dans les codes AEMC, APOLLO2 et TRIPOLI4 réside une erreur de modélisation.

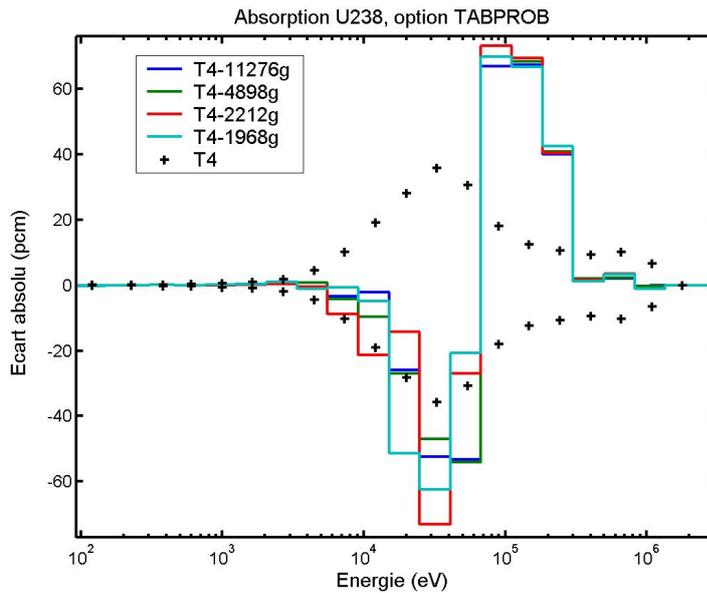


FIG. 7.5: Écart absolu sur le taux d'absorption pour l'U238. Les calculs multigroupes sont obtenus par AEMC avec une autoprotection en sous-groupes en utilisant les sections ponctuelles et les tables de probabilité dans le domaine non résolu. Les valeurs de référence, obtenues par un calcul TRIPOLI4 avec tables de probabilité, sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

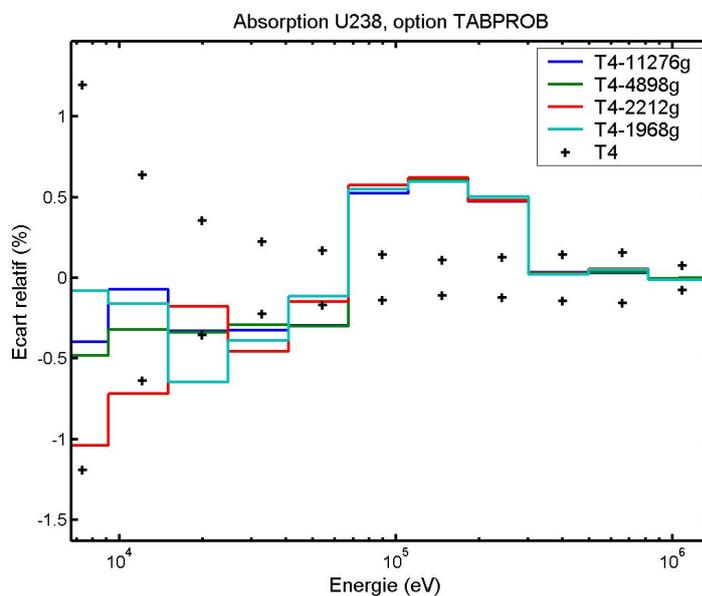


FIG. 7.6: Écart relatif sur le taux d'absorption pour l'U238. Les calculs multigroupes sont obtenus par AEMC avec une autoprotection en sous-groupes en utilisant les sections ponctuelles et les tables de probabilité dans le domaine non résolu. Les valeurs de référence, obtenues par un calcul TRIPOLI4 avec tables de probabilité, sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

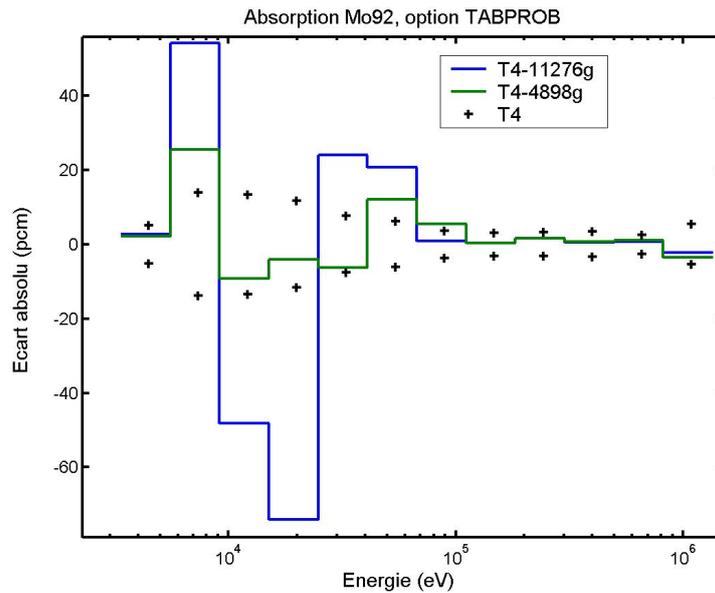


FIG. 7.7: Écart absolu sur le taux d'absorption pour le Mo92. Les calculs multigroupes sont obtenus par AEMC avec une autoprotection en sous-groupes en utilisant les sections ponctuelles et les tables de probabilité dans le domaine non résolu. Les valeurs de référence, obtenues par un calcul TRIPOLI4 avec tables de probabilité, sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

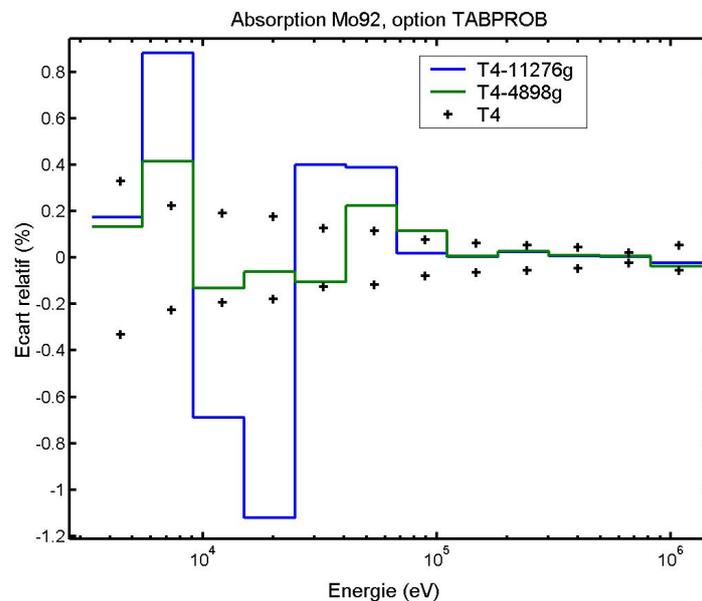


FIG. 7.8: Écart relatif sur le taux d'absorption pour le Mo92. Les calculs multigroupes sont obtenus par AEMC avec une autoprotection en sous-groupes en utilisant les sections ponctuelles et les tables de probabilité dans le domaine non résolu. Les valeurs de référence, obtenues par un calcul TRIPOLI4 avec tables de probabilité, sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

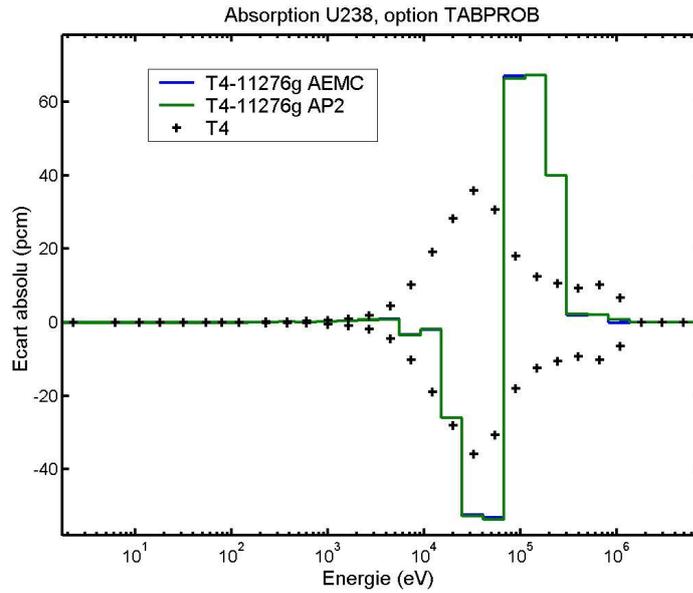


FIG. 7.9: Écart absolu sur le taux d'absorption pour l'U238. Les calculs multigroupes sont obtenus par AEMC et APOLLO2 avec la bibliothèque à 11276 groupes. Les valeurs de référence, obtenues par un calcul TRIPOLI4 avec tables de probabilité, sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

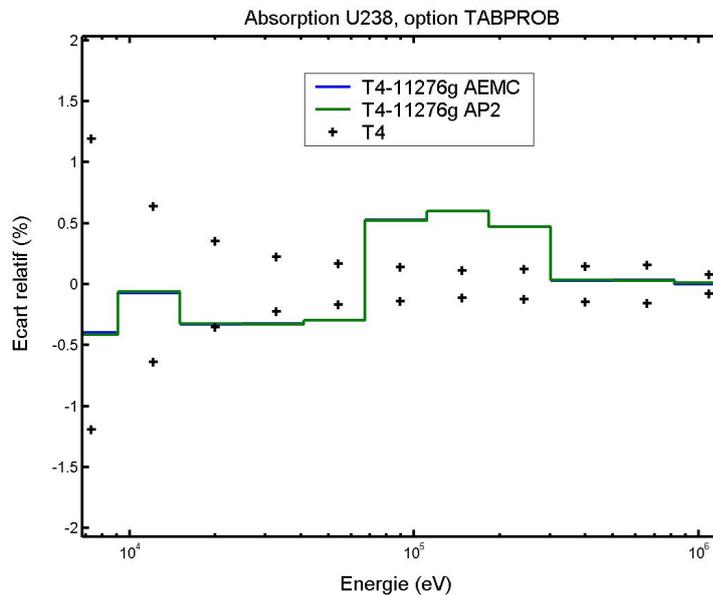


FIG. 7.10: Écart relatif sur le taux d'absorption pour l'U238. Les calculs multigroupes sont obtenus par AEMC et APOLLO2 avec la bibliothèque à 11276 groupes. Les valeurs de référence, obtenues par un calcul TRIPOLI4 avec tables de probabilité, sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

7.2.2 Problème à valeur propre

Malgré les désaccords sur les problèmes de ralentissement, on a effectué aussi un test sur un problème à valeur propre. Le tableau 7.3 montre les concentrations des 5 noyaux du mélange. Pour ce test on a réalisé une simulation TRIPOLI4 de 5 millions d'histoires avec les tables de probabilité dans le domaine non résolu. On a effectué deux calculs multigroupes avec les codes APOLLO2 et AEMC en utilisant la bibliothèque à 1968 groupes ECCO. Pour enlever le biais du spectre de fission avec 1 macrogroupe, on a itéré le calcul APOLLO2 pour utiliser un spectre de fission dépendant du problème neutronique [Mounier et Normand, 2008]. Les 5 noyaux ont été autoprotégés par la méthode des sous-groupes, qui, pour l'instant dans le code APOLLO2, considère un seul isotope résonnant à la fois et itère sur l'ensemble. Ce nombre d'itérations a été fixé à 5. Dans AEMC, on a considéré un paquet de 5 noyaux résonnants (cf. 5.2.2), pour traiter le domaine non résolu du mélange. De cette manière, aucune approximation n'est effectuée dans l'autoprotection.

Le tableau 7.4 montre le coefficient de multiplication effectif k_{eff} calculé par TRIPOLI4 et les codes AEMC, APOLLO2 et ERANOS [Rimpault, 1995]. Ce dernier a été choisi parce qu'il a été développé notamment pour modéliser les réacteurs rapides. APOLLO2, ERANOS et AEMC donnent des résultats dans les barres d'erreur à trois écarts-types du calcul TRIPOLI4. Sur les figures 7.11, 7.12, 7.13 et 7.14 on montre les écarts absolus et relatifs entre les résultats multigroupes des codes APOLLO2, AEMC et TRIPOLI4 sur le taux d'absorption du plutonium 239. Les désaccords entre AEMC et TRIPOLI4, comme attendus, se trouvent dans la zone non résolue du mélange [2,5 - 30] keV et sont les mêmes entre les codes APOLLO2, ERANOS et TRIPOLI4. Dans le domaine résolu du mélange, les résultats du code AEMC rentrent dans les barres d'erreur du code TRIPOLI4, contrairement à ceux des codes APOLLO2 et ERANOS. Cette différence vient du fait qu'AEMC, dans ce domaine, autoprotège les sections des noyaux résonnants par une intégration de Romberg à partir des données continues en énergie. De ce fait, la précision du calcul est meilleure, même si le maillage utilisé est relativement grossier.

Noyau	Concentration
U238	$0,82085 \cdot 10^{-2}$
Pu239	$0,12144 \cdot 10^{-2}$
Fe56	$0,80992 \cdot 10^{-2}$
016	$1,9920 \cdot 10^{-2}$
Na23	$0,82056 \cdot 10^{-2}$

TAB. 7.3: Composition du mélange à 5 noyaux du calcul à valeur propre.

Calcul	k_{eff}
AEMC	$1.31492 (-119 \cdot 10^{-5})$
APOLLO2	$1.31565 (-46 \cdot 10^{-5})$
ERANOS	$1.31484 (-127 \cdot 10^{-5})$
TRIPOLI4	$1,31611 \pm 49 \cdot 10^{-5}$

TAB. 7.4: Comparaison des coefficients de multiplication calculés par APOLLO2, ERANOS, AEMC et TRIPOLI4. Entre parenthèses on montre l'écart absolu.

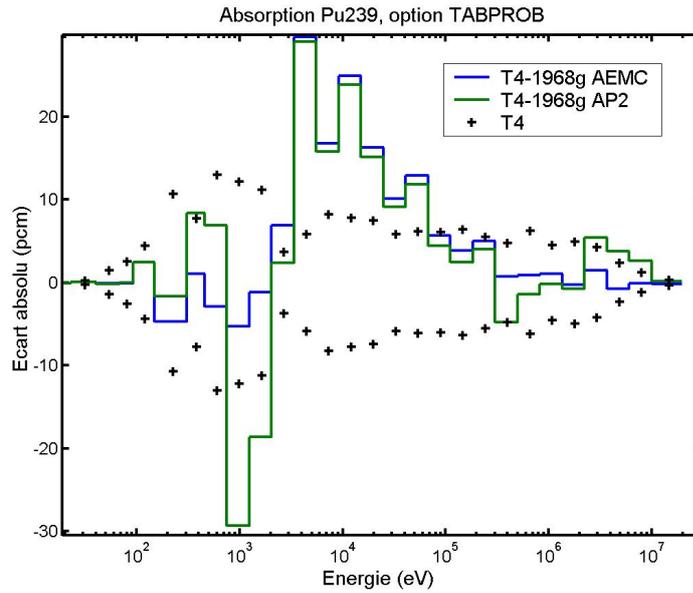


FIG. 7.11: Écart absolu sur le taux d'absorption pour le Pu239. Les calculs multigroupes sont obtenus par AEMC et APOLLO2 avec la bibliothèque ECCO à 1968 groupes. Les valeurs de référence, obtenues par un calcul TRIPOLI4 avec les tables de probabilité, sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

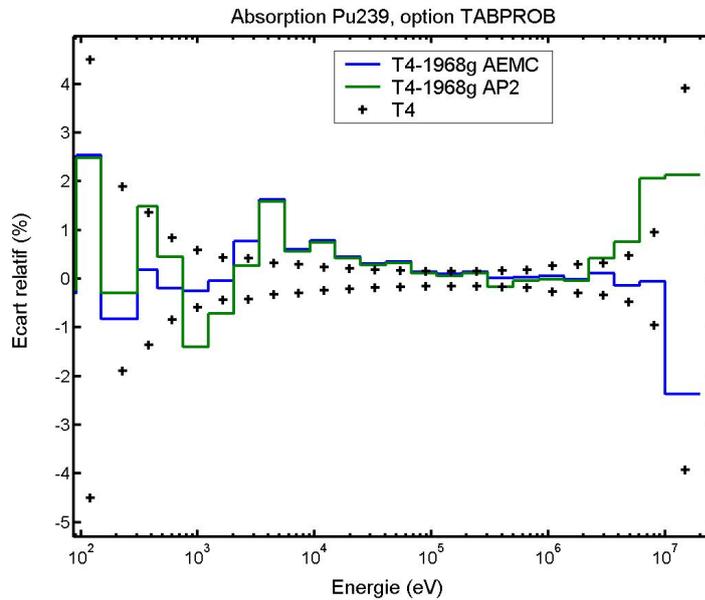


FIG. 7.12: Écart relatif sur le taux d'absorption pour le Pu239. Les calculs multigroupes sont obtenus par AEMC et APOLLO2 avec la bibliothèque ECCO à 1968 groupes. Les valeurs de référence, obtenues par un calcul TRIPOLI4 avec les tables de probabilité, sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

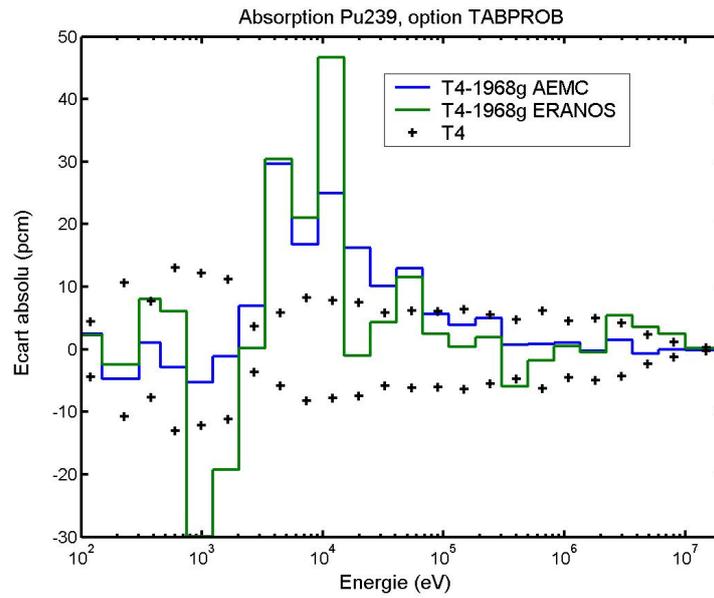


FIG. 7.13: Écart absolu sur le taux d'absorption pour le Pu239. Les calculs multigroupes sont obtenus par AEMC et ERANOS avec la bibliothèque ECCO à 1968 groupes. Les valeurs de référence, obtenues par un calcul TRIPOLI4 avec les tables de probabilité, sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

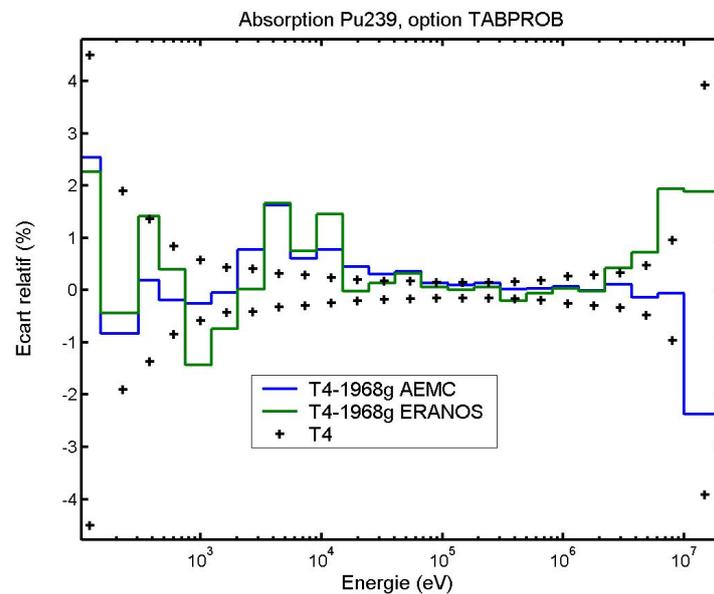


FIG. 7.14: Écart relatif sur le taux d'absorption pour le Pu239. Les calculs multigroupes sont obtenus par AEMC et ERANOS avec la bibliothèque ECCO à 1968 groupes. Les valeurs de référence, obtenues par un calcul TRIPOLI4 avec les tables de probabilité, sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

7.2.3 Conclusion

Pour cette étude, on a utilisé la version 4.4 du code TRIPOLI4, des tests supplémentaires ont été menés avec les versions 4.5 et 4.6, et les données issues de JEFF31, mais les mêmes problèmes ont été rencontrés. À cause de ce désaccord, on a poursuivi les études en se comparant aux simulations TRIPOLI4 sans l'emploi des tables de probabilité. On a choisi par la suite la version 4.6, celle-ci étant la version la plus récente et à un état du développement le plus avancé.

7.3 Solveur ponctuel

Cette section traite deux problèmes différents concernant le solveur ponctuel en énergie. Le premier consiste à observer l'amélioration apportée en prenant en compte les réactions inélastiques discrètes. Le second vise à évaluer la précision de la solution du solveur ponctuel par rapport à une simulation Monte Carlo très précise et l'impact de la précision des sections ponctuelles PENDF sur le résultat du solveur.

7.3.1 Prise en compte des réactions inélastiques dans le noyau de transfert

La validation des réactions inélastiques discrètes hors continuum dans le solveur ponctuel de AEMC est faite par comparaison avec les solutions du solveur multigroupe. Toutes les données sont issues de l'évaluation JEFF30 et sont calculées à une température de 874 K. Les sections PENDF sont calculées avec une précision de reconstruction de 0.1 % et les données multigroupes sont calculées sur le maillage à 1968 groupes ECCO.

On a traité d'abord un problème de ralentissement à source sur l'uranium 238. On a choisi une source constante et unitaire entre les énergies 149.9558 et 151.2106 keV, valeurs comprises entre le deuxième et le troisième niveau inélastique de l'uranium 238. Pour cette comparaison, on a généré une bibliothèque multigroupe spécifique, dite isotrope, parce qu'on a rendu les distributions angulaires de l'uranium 238 isotropes dans le centre de masse. Les sections multigroupes sont autoprotégées par la méthode des sous-groupes en mélange avec les sections ponctuelles, par cohérence avec la solution du solveur ponctuel, qui utilise uniquement des sections PENDF du code NJOY.

Le tableau 7.5 et les figures 7.15 et 7.16 montrent l'accord entre les taux de réaction de l'uranium 238 des solveurs ponctuels et multigroupes, avec la bibliothèque multigroupe modifiée isotrope.

Réaction	Ponctuel	Multigroupe isotrope
Absorption	$0.99993 \cdot 10^5$	10^5
Diffusion	$4.588431 \cdot 10^6$	$4.588856 \cdot 10^6$

TAB. 7.5: Comparaison des taux de réactions globaux de l'U238 entre le solveur ponctuel et le solveur multigroupe avec une bibliothèque à 1968 groupes ECCO modifiée isotrope.

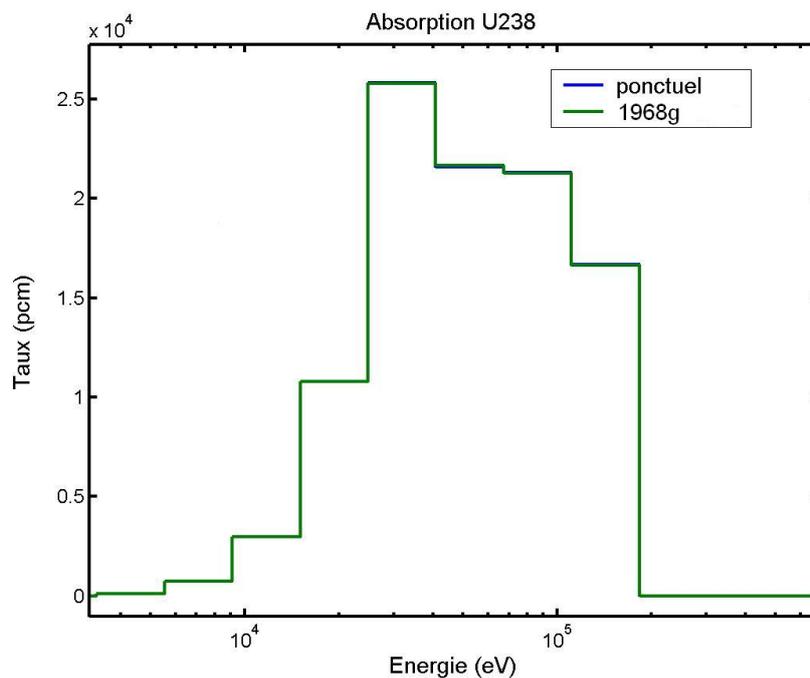


FIG. 7.15: Comparaison du taux d'absorption de l'U238 entre le solveur ponctuel et le solveur multigroupe avec une bibliothèque à 1968 groupes ECCO modifiée isotrope.

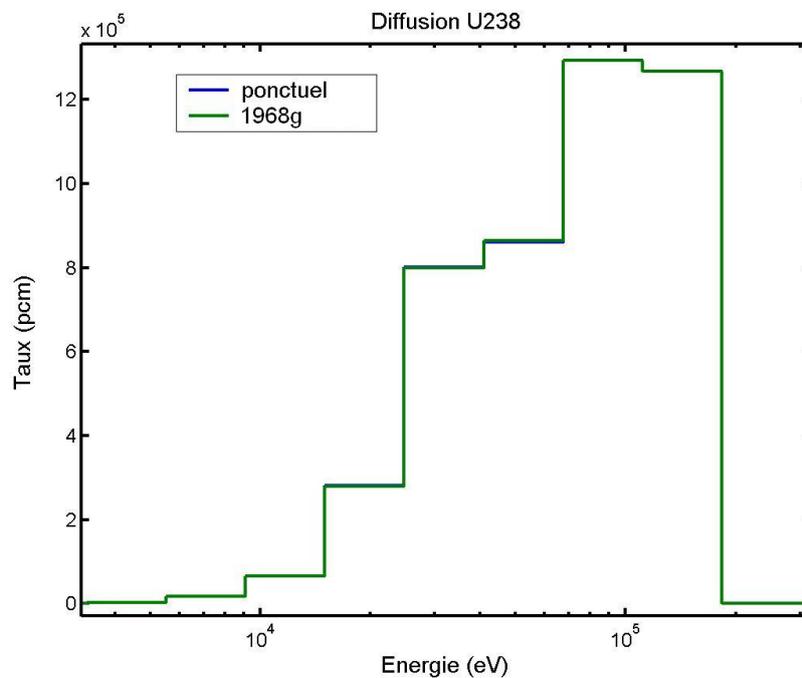


FIG. 7.16: Comparaison du taux de diffusion de l'U238 entre le solveur ponctuel et le solveur multigroupe avec une bibliothèque multigroupe modifiée isotrope.

Le deuxième test vise à chiffrer l'impact de l'anisotropie dans le centre de masse. Dans ce but on a effectué un deuxième calcul de ralentissement avec une source constante, unitaire et placée entre 0.8 et 1.3 MeV. Cette fois la bibliothèque multigroupe a été générée avec les vraies distributions angulaires de l'évaluation JEFF30. Le tableau 7.6 et les figures 7.17 et 7.18 montrent que globalement les taux de diffusion de l'uranium 238 du solveur ponctuel sont sous-estimés par rapport à ceux du solveur multigroupe. Si on regarde le détail en énergie, les taux sont sous-estimés à haute énergie et surestimés à basse énergie, ce qui sous-entend que la distribution angulaire soit plutôt piquée vers l'avant à haute énergie. Finalement, la figure 7.19 compare les flux issus de l'équation de ralentissement élastique pur et avec le noyau de transfert inélastique. On peut constater que la solution élastique est erronée et avec des valeurs beaucoup plus faibles que celle avec le noyau de transfert inélastique. Ce résultat s'explique par le fait que négliger les réactions inélastiques revient à considérer celles-ci comme une absorption.

Réaction	Ponctuel	Multigroupe
Absorption	10^5	10^5
Diffusion	$5.192454 \cdot 10^6$	$5.224423 \cdot 10^6$

TAB. 7.6: Comparaison des taux de réactions globaux de l'U238 entre le solveur ponctuel et le solveur multigroupe avec une bibliothèque à 1968 groupes ECCO.

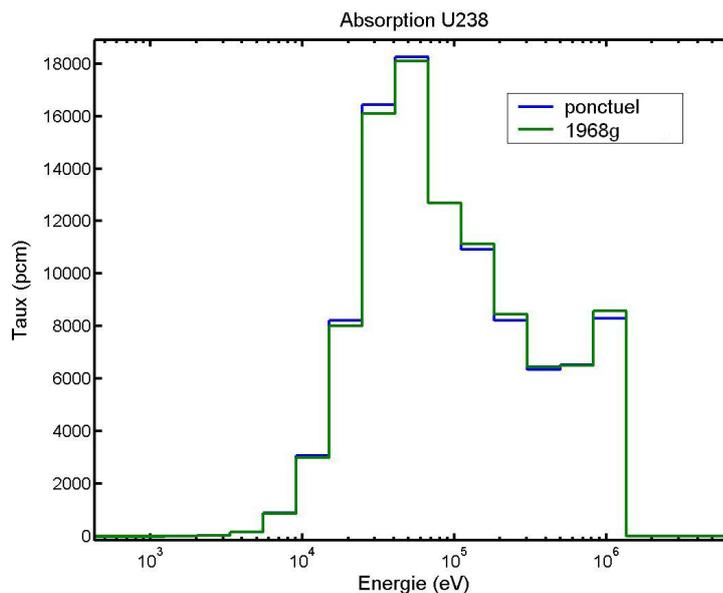


FIG. 7.17: Comparaison du taux d'absorption de l'U238 entre le solveur ponctuel et le solveur multigroupe avec une bibliothèque à 1968 groupes ECCO.

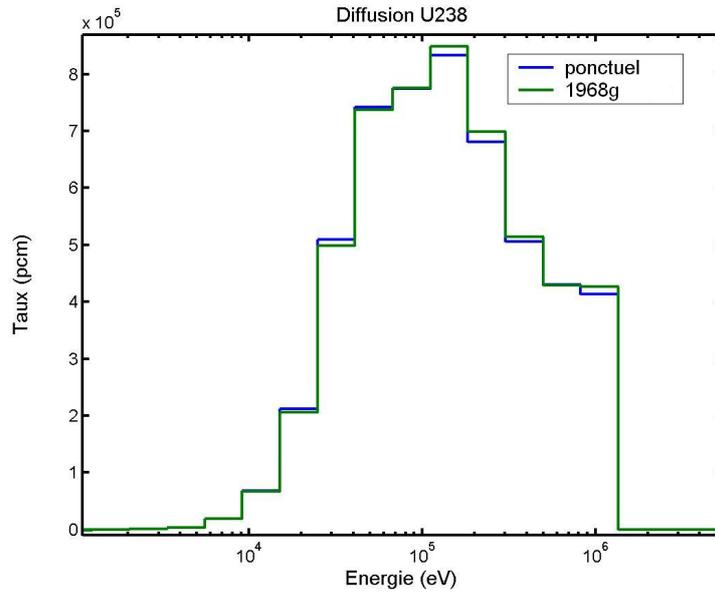


FIG. 7.18: Comparaison du taux de diffusion de l'U238 entre le solveur ponctuel et le solveur multigroupe avec une bibliothèque à 1968 groupes ECCO modifiée isotrope.

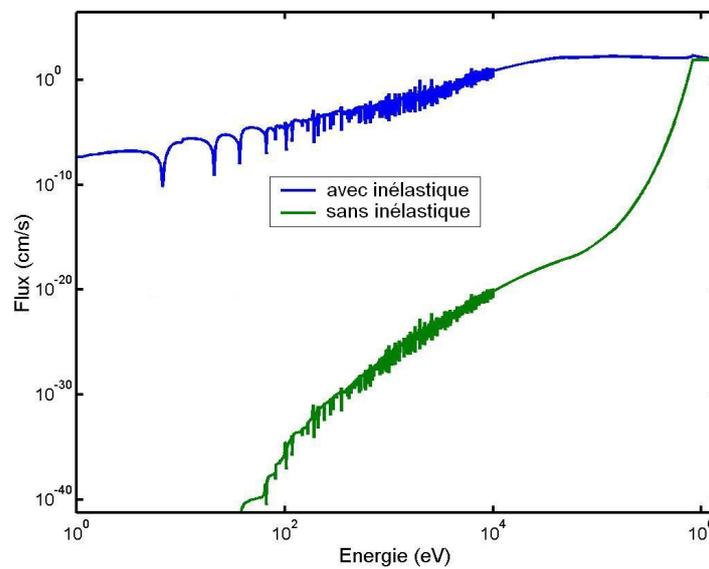


FIG. 7.19: Comparaison du flux sans et avec prise en compte du transfert inélastique dans le solveur ponctuel.

7.3.2 Contrôle de la précision du solveur ponctuel

Le contrôle de la précision du solveur ponctuel a été effectué sur un problème de ralentissement dans un mélange UOX, avec une teneur du 3 % en U235, modéré avec de l'hydrogène à des concentrations correspondant aux dilutions de 10, 100, 1000 barns. La source a été placée entre 198 et 242 eV et le domaine de la simulation Monte Carlo a été limité entre 5 et 242 eV, car aux énergies inférieures le code TRIPOLI4 prend en compte l'"upscattering" des neutrons. Les calculs Monte Carlo ont été convergés jusqu'à atteindre des barres d'erreurs inférieures à 0.1 % par groupe et 0.01 % en intégrale, pour pouvoir en négliger l'incertitude.

Le tableau 7.7 montre les écarts maximaux sur les taux de réactions globaux et l'estimateur (6.26) en utilisant des sections efficaces reconstruites à 0.1 % et 1 % et une représentation linéaire ou en $1/E$ du taux de diffusion. On peut observer que le type de représentation a une influence faible, par contre la précision de reconstruction a un impact plus important sur les noyaux résonnants. Les figures de 7.20 à 7.23 donnent la distribution des erreurs par groupe sur le taux d'absorption et de diffusion de l'uranium 238, sorties sur le maillage SHEM à 281 groupes, pour la composition donnant les erreurs plus grandes intégrales. On peut constater que l'imprécision du solveur ponctuel ne dépasse pas 0.7 % et que les erreurs absolues n'excèdent pas 2 pcm par groupe.

Calcul	Absorption U238 [%]	Diffusion U238 [%]	Diffusion H1 [%]	Estimateur [%]
linéaire et sections à 0.1 %	0.10484	0.02184	0.08075	0.0012432
linéaire et sections à 1 %	-0.14538	-0.05986	0.093	0.0017212
$1/E$ et sections à 0.1 %	0.10484	0.02185	0.08076	0.0012431
$1/E$ et sections à 1 %	-0.14538	-0.05986	0.09275	0.0017211

TAB. 7.7: Erreurs maximales en fonction des différentes représentations du taux de diffusion et de la précision de reconstruction des sections PENDF avec le solveur ponctuel sur une composition UOX modérée avec de l'hydrogène. La référence est une simulation TRIPOLI4 avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types inférieur à 0,01 % en intégrale.

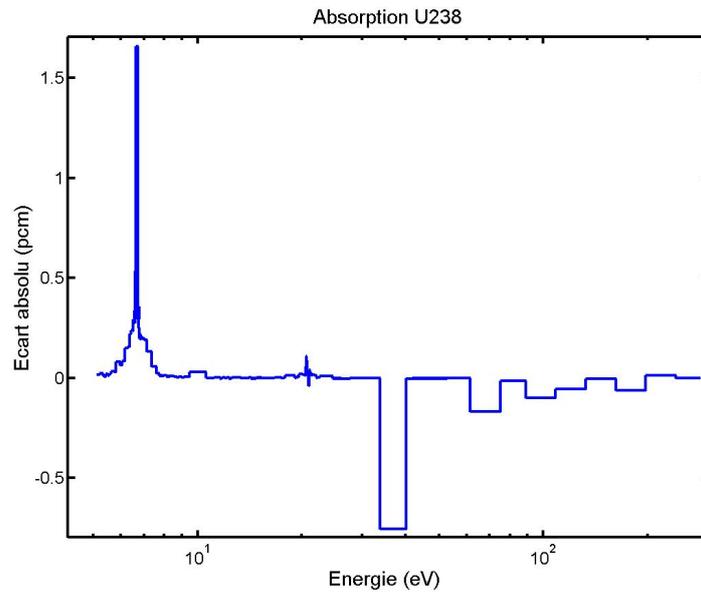


FIG. 7.20: Écart absolu sur le taux d'absorption de l'uranium 238 entre le solveur ponctuel de AEMC et le code TRIPOLI4. La référence est une simulation TRIPOLI4 avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types inférieur à 0,1 %.

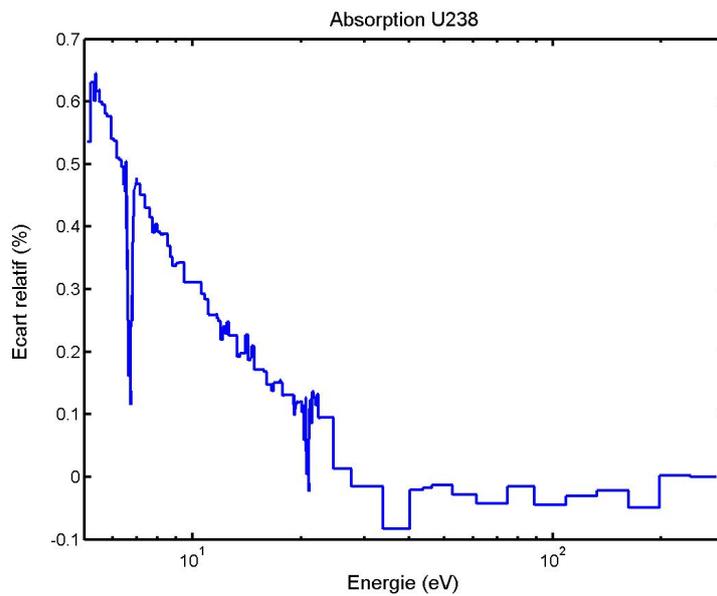


FIG. 7.21: Écart sur le taux d'absorption de l'uranium 238 entre le solveur ponctuel de AEMC et le code TRIPOLI4. La référence est une simulation TRIPOLI4 avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types inférieur à 0,1 %.

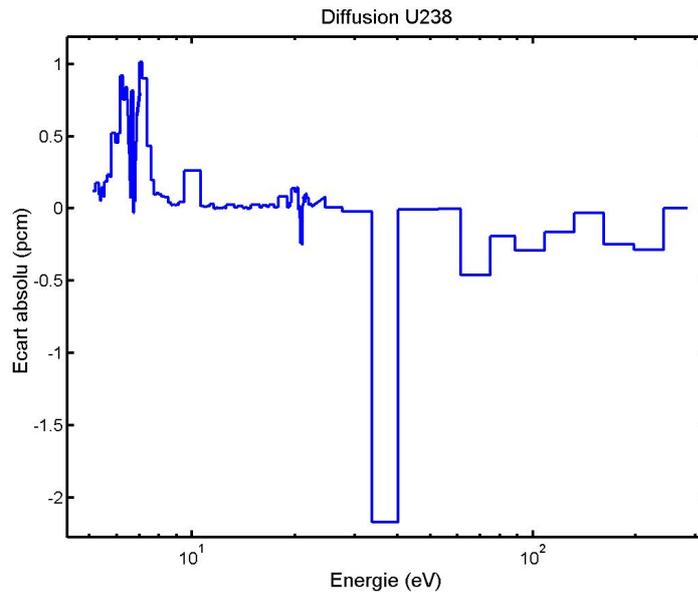


FIG. 7.22: Écart absolu sur le taux de diffusion de l'uranium 238 entre le solveur ponctuel de AEMC et le code TRIPOLI4. La référence est une simulation TRIPOLI4 avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types inférieur à 0,1 %.

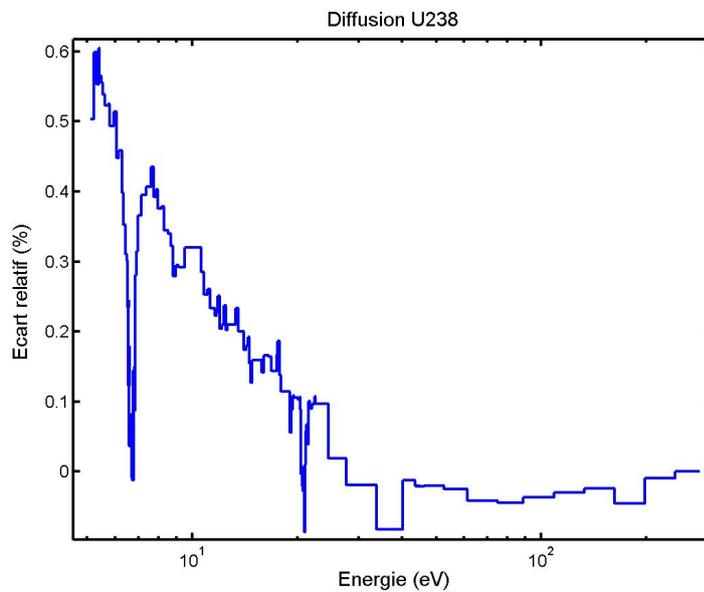


FIG. 7.23: Écart relatif sur le taux de diffusion de l'uranium 238 entre le solveur ponctuel de AEMC et le code TRIPOLI4. La référence est une simulation TRIPOLI4 avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types inférieur à 0,1 %.

7.4 Comparaison entre AEMC et APOLLO2

7.4.1 Méthode des sous-groupes

Ce test compare les solutions de AEMC et d'APOLLO2 en utilisant la méthode des sous-groupes à isotope isolé. On a considéré le même problème à valeur propre qu'au paragraphe 7.2.2. Les sections multigroupes sont issues de l'évaluation JEFF30 et sont calculées sur le maillage ECCO à 1968 groupes. On a choisi dans AEMC un seul macrogroupe pour représenter le domaine des énergies incidentes du spectre de fission. L'autoprotection en sous-groupes est effectuée sur le domaine énergétique compris entre 0.1 eV et 20 MeV pour les 5 noyaux.

Le tableau 7.8 montre les valeurs propres calculées par AEMC et par APOLLO2 et les figures 7.24 et 7.25 comparent les taux d'absorptions de l'uranium 238 et du plutonium 239. On peut conclure que les solutions de ces deux programmes sont parfaitement en accord.

Calcul	k_{eff}
AEMC	1,31491
APOLLO2	1.31484

TAB. 7.8: Comparaison des coefficients de multiplication calculés par APOLLO2 et AEMC avec la méthode d'autoprotection des sous-groupes à isotope isolé.

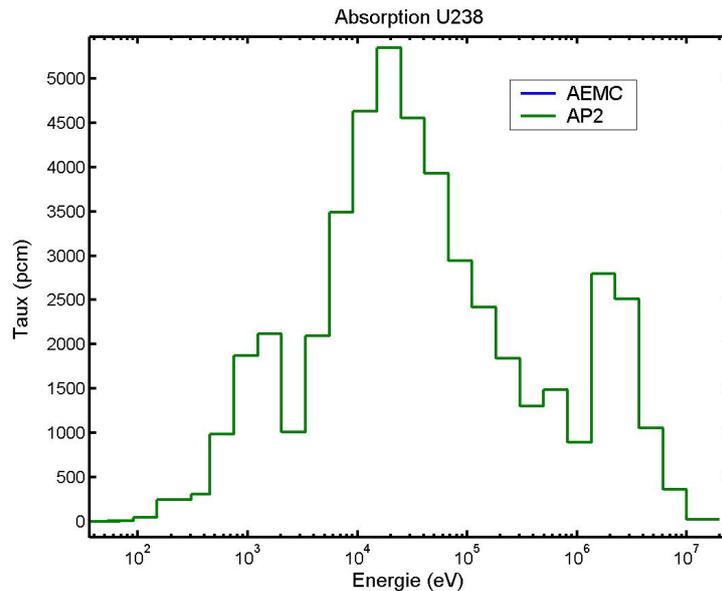


FIG. 7.24: Comparaison du taux d'absorption de l'uranium 238 entre AEMC et APOLLO2 avec la méthode d'autoprotection des sous-groupes à isotope isolé.

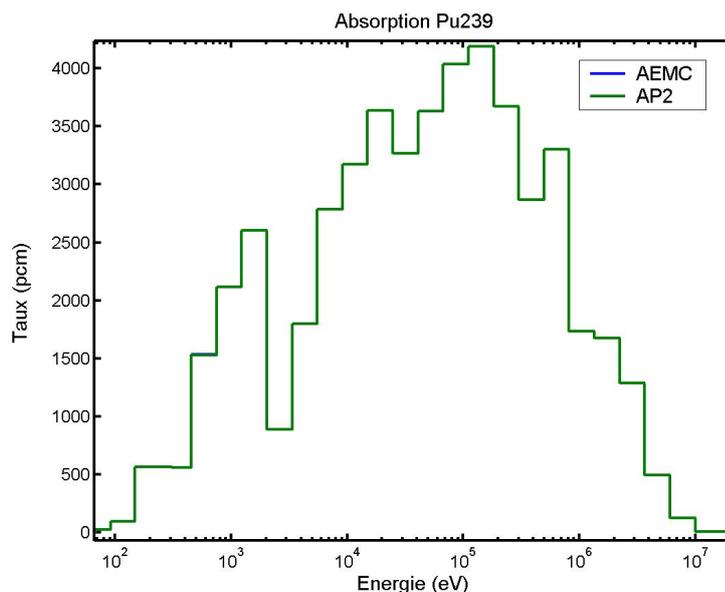


FIG. 7.25: Comparaison du taux d'absorption du plutonium 239 entre AEMC et APOLLO2 avec la méthode d'autoprotection des sous-groupes à isotope isolé.

7.4.2 Méthode Livolant-Jeanpierre

Ce deuxième test a comme objectif de vérifier l'équivalence entre les solutions de AEMC et d'APOLLO2 avec l'autoprotection standard Livolant-Jeanpierre. Dans ce but, on a traité deux problématiques différentes : un problème à source et le problème à valeur propre du paragraphe 7.2.2. Pour ces deux cas, les données employées sont issues de l'évaluation JEFF31. Les simulations d'APOLLO2 sont effectuées avec les sections multigroupes, les taux effectifs, calculés sur le maillage XMAS à 172 groupes, et les tables de probabilité, obtenues par condensation de celles calculées sur le maillage UNIVSH à 11513 groupes. Pour les simulations de AEMC les sections multigroupes et les tables de probabilité sont obtenues par condensation des données calculées sur le maillage UNIVSH à 11513 groupes.

Le premier problème traite un mélange d'uranium 238 et d'hydrogène à la concentration correspondant à une dilution de 50 barns. La source est constante, unitaire et placée entre 1,002588 et 1,108032 MeV. Dans ce calcul, les sections multigroupes de l'uranium 238 sont autoprotégées par la méthode Livolant-Jeanpierre standard entre 4 eV et 20 keV. La figure 7.26 et son zoom 7.27 entre 6 eV et 1 MeV montrent l'accord entre les taux d'absorption calculés par les codes APOLLO2 et AEMC sans l'option Placzek¹ (cf. 6.3.1).

¹Tabulation des taux de référence en partant du premier groupe autoprotégé.

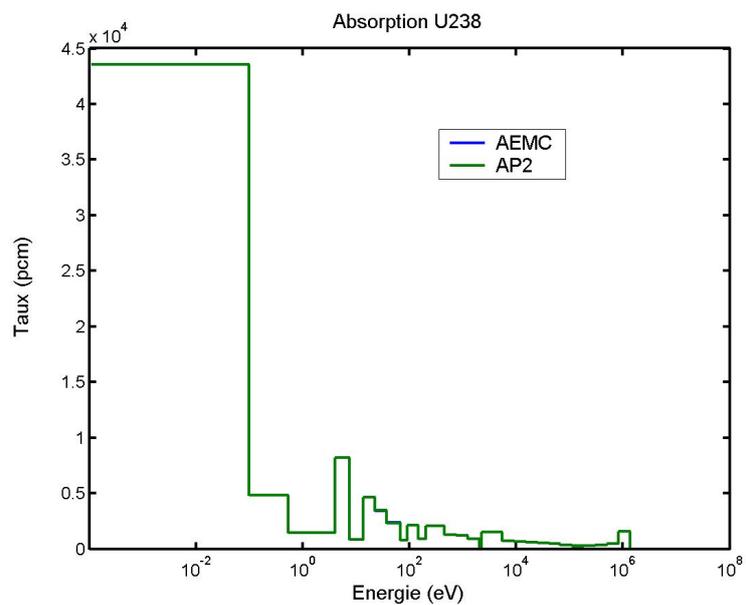


FIG. 7.26: Comparaison du taux d'absorption de l'uranium 238 entre AEMC et APOLLO2 avec la méthode d'autoprotection Livolant-Jeanpierre standard.

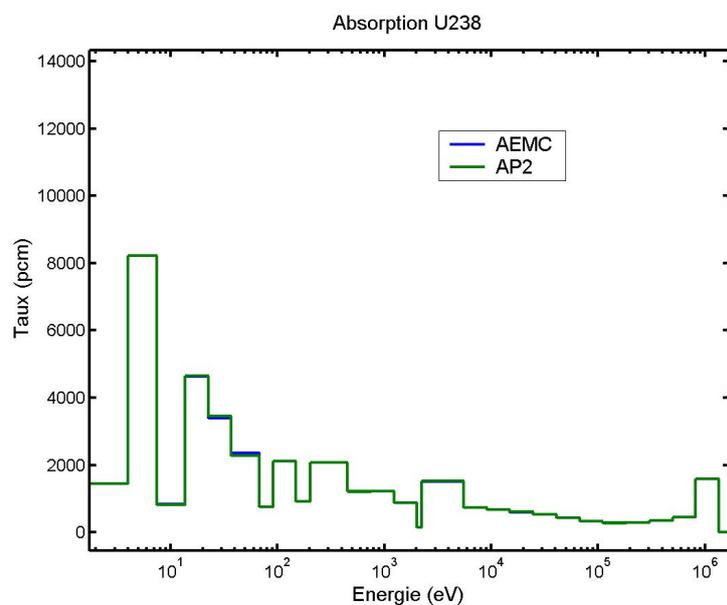


FIG. 7.27: Comparaison du taux d'absorption de l'uranium 238 entre AEMC et APOLLO2 avec la méthode d'autoprotection Livolant-Jeanpierre standard.

La stratégie d'autoprotection, adoptée dans les calculs APOLLO2 et AEMC pour traiter le problème à valeur propre, est résumée dans le tableau 7.9. Comme les tabulations des taux effectifs, utilisées par le code APOLLO2, sont effectuées avec le calculateur du flux NJOY sous l'hypothèse de ralentissement élastique et isotrope dans le centre de masse, on a appliqué la méthode Livolant-Jeanpierre standard uniquement dans le domaine énergétique où cette hypothèse est licite. Ailleurs (domaine non résolu d'un noyau, s'il existe, ou domaine du ralentissement inélastique ou élastique anisotrope) on a employé la méthode des sous-groupes à isotope isolé. Le tableau 7.10 compare les coefficients de multiplication k_{eff} obtenus par APOLLO2 et AEMC, avec ou sans l'option Placzek (nombre de transitoires égal à 10). On peut constater que l'écart entre les trois calculs ne dépasse pas 16 pcm et que la différence entre les calculs avec et sans option Placzek est très faible. Les figures 7.28 et 7.29 montrent que les taux de réactions d'absorption de l'uranium 238 et du plutonium 239, calculés par APOLLO2 et AEMC, avec l'option Placzek, se chevauchent parfaitement.

Noyau	SG	LJS
U238	20 keV - 20 MeV	45.51 eV - 20 keV
Pu239	2.5 keV - 20 MeV	45.51 eV - 2.5 keV
O16	200 keV - 20 MeV	-
Na23	100 keV - 20 MeV	748.518 eV - 100 keV
Fe56	820,85 keV - 20 MeV	914.242 eV - 820,85 keV

TAB. 7.9: Stratégie d'autoprotection dans la comparaison AEMC et APOLLO2, SG = Sous-Groupes et LJS= Livolant-Jeanpierre Standard.

Calcul	k_{eff}
AEMC SPL	1.32551
AEMC PL	1.32552
APOLLO2	1.32568

TAB. 7.10: Comparaison des coefficients de multiplication calculés par APOLLO2 et AEMC avec la méthode d'autoprotection mixte Livolant-Jeanpierre standard et sous-groupes à isotope isolé, SPL= Sans Placzek et PL = Placzek.

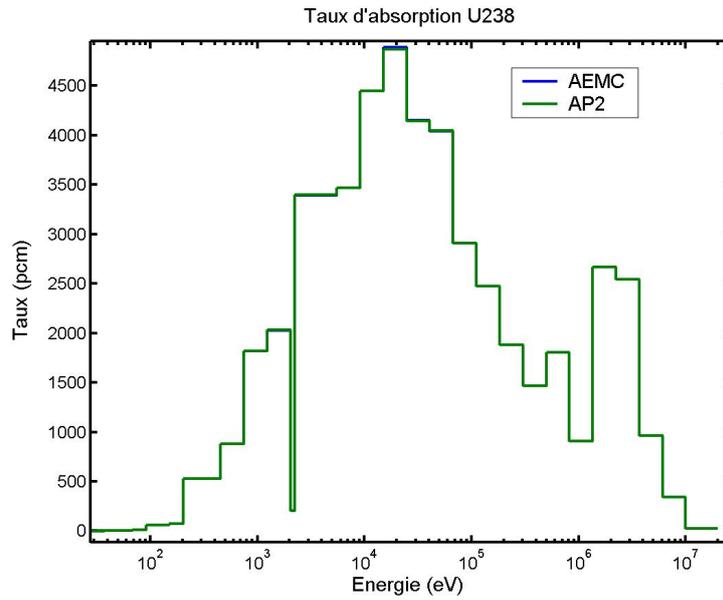


FIG. 7.28: Comparaison du taux d'absorption de l'uranium 238 entre AEMC et APOLLO2 avec la méthode d'autoprotection mixte Livolant-Jeanpierre standard et sous-groupes à isotope isolé.

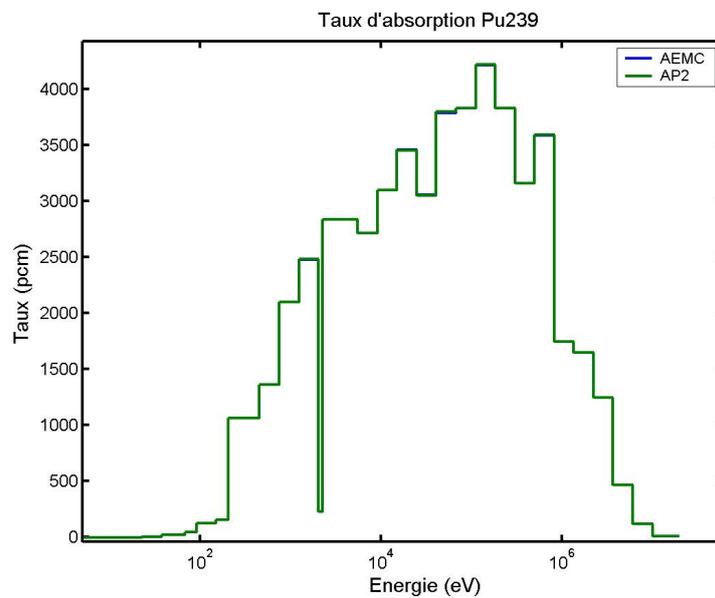


FIG. 7.29: Comparaison du taux d'absorption du plutonium 239 entre AEMC et APOLLO2 avec la méthode d'autoprotection mixte Livolant-Jeanpierre standard et sous-groupes à isotope isolé.

7.5 Optimisation

Cette section traite de l'optimisation du maillage énergétique pour la méthode d'autoprotection selon le formalisme Livolant-Jeanpierre. Le premier paragraphe analyse l'influence de la position des bornes énergétiques dans l'autoprotection des sections efficaces, le deuxième vérifie la capacité de l'algorithme de minimisation à rechercher le maillage énergétique optimal.

7.5.1 Influence du maillage pour l'autoprotection Livolant Jeanpierre

On a considéré trois problèmes de structure fine avec l'uranium 238 entre 4.0 eV et 136 keV sur la liste suivante de dilutions : 10, 100 et 1000 barns. L'exercice considéré consiste à résoudre l'équation de structure fine d'abord avec les sections multigroupes, calculées sur le maillage UNIVSH à 11513 groupes et autoprotégées par la méthode des sous-groupes, puis avec les données condensées sur une structure à 172 groupes.

Le tableau 7.11 montre l'estimateur (6.26) pour les calculs suivants :

- condensation sur le maillage XMAS à 172 groupes sans autoprotection des taux de transferts (noté XMAS);
- condensation sur le maillage XMAS à 172 groupes avec autoprotection des taux de transferts (noté XMAS TRANS);
- condensation sur un maillage à 172 groupes, modifié en remontant les bornes inférieures encadrant les trois premières résonances de l'uranium 238, sans autoprotection des taux de transferts (noté 172g);
- condensation sur un maillage à 172 groupes, modifié en remontant les bornes inférieures encadrant les trois premières résonances de l'uranium 238, avec autoprotection des taux de transferts (noté 172g TRANS).

On peut observer que l'autoprotection des taux de transferts a une incidence assez limitée sur le maillage XMAS mais est plus importante sur le maillage modifié. La raison, comme montré dans les figures 7.30 et 7.31, vient du fait que l'espacement des bornes du maillage XMAS à 172 groupes est suffisamment large pour que le transfert soit majoritairement dans le groupe de départ. Dans ces conditions, l'influence de la fonction de pondération est faible. Cet effet est plus présent sur les noyaux lourds que sur les noyaux légers à cause de la plus faible perte d'énergie moyenne par choc des premiers par rapport aux secondes. Dans ce cas pour obtenir une fonction de même ordre de grandeur il faut soit modifier les bornes du maillage soit autoprotéger les taux de transfert.

Calcul	$F(E)$ [%]
XMAS	0.049
XMAS TRANS	0.048
172g	0.07
172g TRANS	0.048

TAB. 7.11: Effet de la position des bornes du maillage sur l'autoprotection Livolant-Jeanpierre.

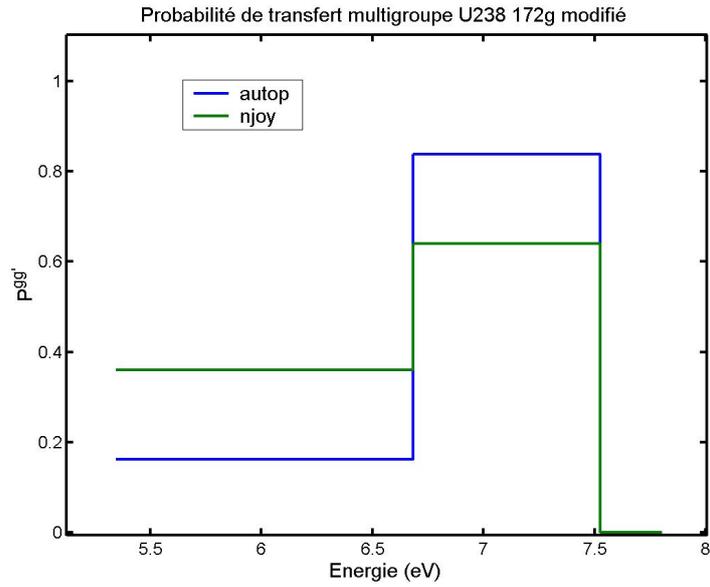


FIG. 7.30: Probabilités de transfert multigroupe de l'U238 autoprotégées par la méthode Livolant-Jeanpierre et calculées par NJOY sur le maillage modifié à 172 groupes.

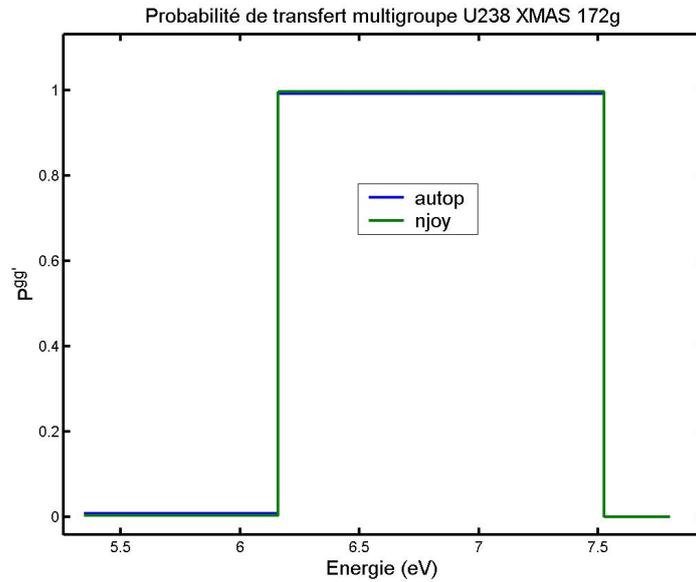


FIG. 7.31: Probabilités de transfert multigroupe de l'U238 autoprotégées par la méthode Livolant-Jeanpierre et calculées par NJOY sur le maillage XMAS à 172 groupes.

7.5.2 Optimisation du maillage pour l'autoprotection Livolant-Jeanpierre

On a montré que le choix des bornes du maillage XMAS à 172 groupes est optimal pour l'autoprotection Livolant-Jeanpierre dans un problème de structure fine sur l'uranium 238. Pour tester l'algorithme de condensation, on a donc effectué une simulation avec AEMC, visant à définir, sur le problème de structure fine décrit au paragraphe 7.5.1, un nouveau maillage à 172 groupes optimisé entre 4 et 134 eV et gardant les mêmes bornes du maillage XMAS à 172 groupes ailleurs. La recherche a été effectuée en utilisant le maillage UNIVSH à 11513 groupes comme référence.

On peut observer dans le tableau 7.12 que le maillage XMAS et le nouveau maillage optimisé donnent des résultats presque équivalents. La figure 7.32 montre la distribution énergétique des erreurs absolues en utilisant comme référence la solution multigroupe calculée sur le maillage UNIVSH. Le nouveau maillage est plus précis à haute énergie que le maillage XMAS et équivalent à ce dernier autour des autres résonances. Finalement, en regardant la figure 7.33, qui compare les sections d'absorption multigroupes des deux maillages, on peut voir que les groupes ne sont pas placés de la même manière et que les intervalles du maillage optimisé sont centrés autour des résonances.

Calcul	$F(E)$ [%]
XMAS	0.049
172g OPT	0.048

TAB. 7.12: Estimateur des calculs avec le maillage XMAS et optimisé à 172 groupes.

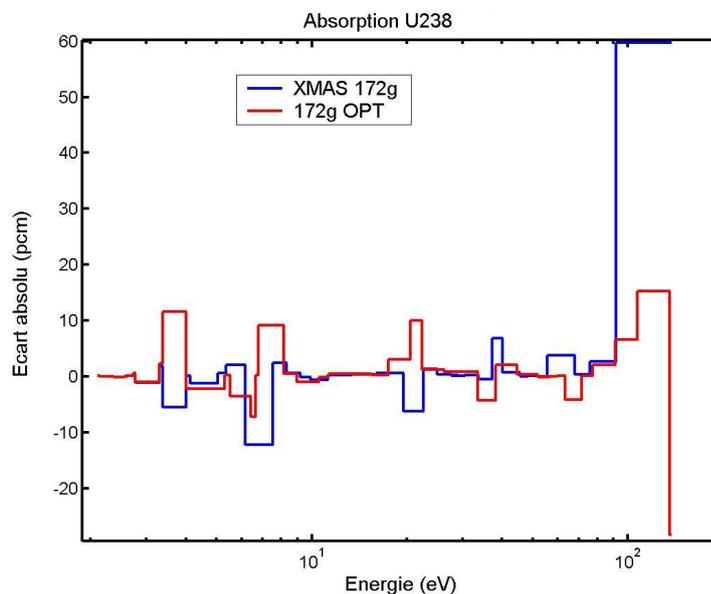


FIG. 7.32: Écart absolu sur le taux d'absorption de l'uranium 238 entre les solutions à 172 groupes XMAS et optimisé.

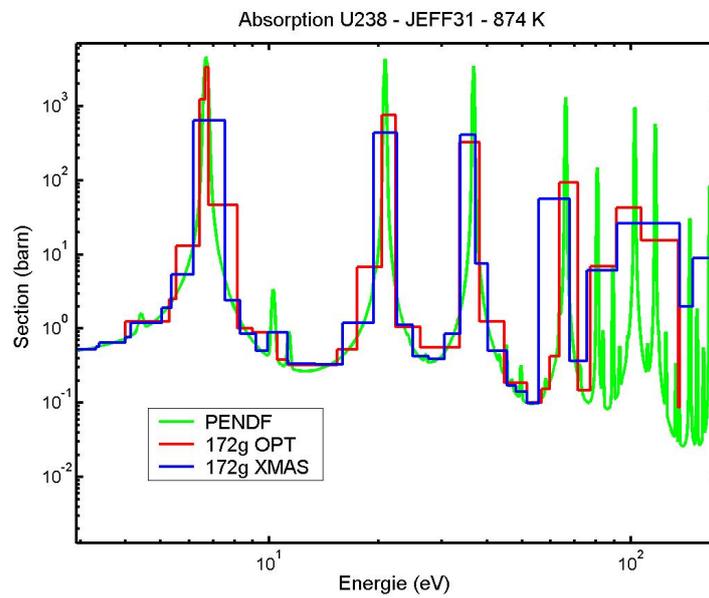


FIG. 7.33: Comparaison des sections d'absorption multigroupes calculées sur les maillages XMAS et à 172 groupes optimisé.

Chapitre 8

Construction du maillage de référence pour la filière RNR-sodium

L'étude de la génération d'un maillage énergétique optimisé pour la filière rapide est abordée dans ce chapitre. La première section traite du choix de la base de cas pour l'optimisation du maillage énergétique. On montre ensuite une étude de sensibilité aux paramètres d'entrée de AEMC. On termine par l'étude complète concernant la génération du maillage énergétique de référence pour la filière RNR.

8.1 Définition de la base de cas

L'utilisation de AEMC suppose une analyse préalable de la filière ou de la classe de problèmes à résoudre. AEMC n'est pas utile s'il s'agit de faire un calcul unique ne se rattachant pas à une classe de problèmes, car il serait plus judicieux d'effectuer un calcul Monte Carlo, si toutefois le problème peut être ainsi résolu. On se place donc dans le cadre de la réalisation d'une ou plusieurs bibliothèques permettant d'atteindre un objectif en termes de précision pour traiter une problématique de physique des réacteurs.

Vis à vis de cet objectif, il semble pertinent de rassembler dans une classe d'application des problèmes neutroniques spectralement homogènes, de façon à pouvoir raffiner les maillages énergétiques dans les mêmes domaines. De ce point de vu, on peut classifier le panorama des réacteurs en fonctionnement et à l'étude en :

- réacteurs rapides, si la plupart des fissions se produisent à des énergies supérieures à 100 keV et si la densité neutronique est négligeable en dessous de 100 eV,
- réacteurs thermiques, si la plupart des fissions se produisent à des énergies inférieures à 0.6 eV et si le phénomène de la thermalisation est non négligeable,
- réacteurs à spectre intermédiaire, dans les cas restants.

Une fois cette première subdivision réalisée, dans le cadre d'une étude sur une cellule ou un assemblage, on définit des vecteurs :

- de dilutions correspondant aux différentes configurations géométriques ou taux de vide prévus,
- de températures typiques du domaine de fonctionnement,
- de concentrations correspondant aux différentes compositions des milieux.

Dans cette étude, on se concentre sur la génération d'une famille de maillages optimisés pour la filière rapide. On a choisi d'adapter le maillage énergétique pour mieux traiter les problématiques neutroniques inhérentes aux réacteurs RNR refroidis au sodium et aux maquettes critiques Godiva et Jezabel.

Comme l'opacité des systèmes rapides varie peu d'une région à l'autre du réacteur, on a déduit les vecteurs isotopiques par homogénéisation volumique des compositions des

cellules correspondantes. Cela dit, si l'hétérogénéité du problème à traiter est importante, on peut la reproduire en définissant des concentrations du modérateur équivalentes à la plage en dilutions du système physique. Le combustible de la cellule RNR-sodium correspond à un MOX avec une charge en plutonium de 14 % et évolué à puissance nulle jusqu'à l'année 2040, date présumée d'entrée en fonctionnement du parc rapide. Par la suite, il est appelé MOX 2040.

Pour reproduire les conditions neutroniques à l'intérieur des crayons combustibles, on a résolu des problèmes à valeur propre pour :

- un mélange non modéré de noyaux d'uranium, correspondant au problème sphérique de Godiva [Nuclear Science Comitee, 2001, ICSBEP],
- un mélange non modéré de noyaux de plutonium, correspondant au problème sphérique de Jezabel [Nuclear Science Comitee, 2001, ICSBEP],
- trois mélanges, obtenus par homogénéisation volumique de la cellule RNR-sodium chargée en MOX 2040 à temps zéro et correspondant à des conditions de 0, 50 et 100 % de taux de vide,
- un mélange homogénéisé des noyaux contribuant à 95 % de l'absorption totale dans une cellule RNR-sodium chargée en MOX 2040, évoluée jusqu'à 60 GWj/t.

La modulation en taux de vide et l'ajout d'une composition évoluée servent à modéliser les variations spectrales du flux suite à la perte de réfrigérant et à l'évolution du combustible. Pour simuler le ralentissement des neutrons dans les barres de contrôle et dans les couvertures fertiles en périphérie des assemblages, on a résolu des problèmes à source sur :

- un mélange correspondant à une barre de contrôle en B4C,
- un mélange obtenu par homogénéisation volumique de la cellule RNR-sodium chargée en uranium appauvri.

Dans un souci de prudence, on a placé la source entre 10 et 20 MeV, même si cela est loin de la physique du problème, pour s'assurer d'une bonne modélisation des réactions à seuils, (n, xn) , ainsi que les réactions de fission de deuxième et troisième chance.

On a préféré prendre en compte la composition d'un combustible évolué MOX, plutôt que celle de l'uranium appauvri puisqu'elle est plus riche en noyaux.

Les températures considérées sont de 294, 574 et 900 K et correspondent aux températures moyennes d'un réacteur à froid et en puissance respectivement dans le réfrigérant et dans le combustible. Les problèmes de Godiva et Jezabel ont été résolus uniquement à la température de 294 K, parce qu'il s'agit de maquettes critiques à température ambiante. Le problème de ralentissement dans la barre de contrôle a été traité à la seule température de 574 K, puisque l'effet Doppler n'est pas crucial sur les noyaux légers (cf. 1.6). Le cas du combustible évolué a été traité à la seule température de 900 K, pour reproduire des conditions thermodynamiques réalistes dans la création du maillage. Finalement, les problèmes restants ont été résolus aux températures de 294 K et 900 K, pour rendre compte du phénomène d'élargissement Doppler. Tous ces choix répondent à l'exigence de réduire le temps nécessaire à l'optimisation et l'espace mémoire requis par les données multigroupes. Les tableaux 8.1, 8.2 et 8.3 montrent les compositions de référence.

Cas	Noyau	Concentration $at/(barns\ cm) * 10^{24}$
Godiva	U234	$4.92 \cdot 10^{-4}$
	U235	$4.5 \cdot 10^{-2}$
	U238	$2.498 \cdot 10^{-3}$
Jezabel	Pu239	$3.7047 \cdot 10^{-2}$
	Pu240	$1.7512 \cdot 10^{-3}$
	Pu241	$1.1674 \cdot 10^{-4}$
Barre de contrôle B4C	B10	$1.5608 \cdot 10^{-2}$
	B11	$6.2432 \cdot 10^{-2}$
	C	$1.951 \cdot 10^{-2}$
Couverture fertile	O16	$1.8543 \cdot 10^{-2}$
	U235	$2.3413 \cdot 10^{-5}$
	U238	$9.3416 \cdot 10^{-3}$
	Mo95	$1.98303 \cdot 10^{-5}$
	Mo96	$2.0777 \cdot 10^{-5}$
	Mo97	$1.18957 \cdot 10^{-5}$
	Mo98	$3.00569 \cdot 10^{-5}$
	Mo100	$1.19953 \cdot 10^{-5}$
	Fe54	$5.43977 \cdot 10^{-4}$
	Fe56	$1.73669 \cdot 10^{-2}$
	Fe57	$2.06336 \cdot 10^{-4}$
	Fe58	$2.6261 \cdot 10^{-5}$
	Cr50	$9.64153 \cdot 10^{-5}$
	Cr52	$1.86188 \cdot 10^{-3}$
	Cr53	$2.10825 \cdot 10^{-4}$
	Cr54	$5.24286 \cdot 10^{-5}$
	Ni58	$1.43637 \cdot 10^{-3}$
	Ni60	$5.49132 \cdot 10^{-4}$
	Ni61	$2.37747 \cdot 10^{-5}$
	Ni62	$7.5532 \cdot 10^{-5}$
	Ni64	$1.9146 \cdot 10^{-5}$
	Mo92	$1.8485 \cdot 10^{-5}$
	Mo94	$1.1522 \cdot 10^{-5}$
	Mn55	$2.24757 \cdot 10^{-4}$
	Ti47	$5.26253 \cdot 10^{-6}$
	Ti48	$5.3202 \cdot 10^{-5}$
	Ti49	$3.96492 \cdot 10^{-6}$
Ti50	$3.89283 \cdot 10^{-6}$	
Si28	$2.22354 \cdot 10^{-4}$	
Si29	$1.12588 \cdot 10^{-5}$	
Si30	$7.47369 \cdot 10^{-6}$	
Na23	$1.01024 \cdot 10^{-2}$	

TAB. 8.1: Premier tableau des compositions pour l'optimisation du maillage énergétique pour la filière rapide.

Cas	Noyau	Concentration $at / (barns\ cm) * 10^{24}$
Région combustible	Pu238	$5.51564 \cdot 10^{-5}$
	Pu239	$7.31892 \cdot 10^{-4}$
	Pu240	$4.58102 \cdot 10^{-4}$
	Pu241	$1.27133 \cdot 10^{-4}$
	Pu242	$1.60264 \cdot 10^{-4}$
	Am241	$1.20322 \cdot 10^{-5}$
	O16	$1.8136 \cdot 10^{-2}$
	U235	$1.89985 \cdot 10^{-5}$
	U238	$7.58041 \cdot 10^{-3}$
	Mo95	$1.98303 \cdot 10^{-5}$
	Mo96	$2.0777 \cdot 10^{-5}$
	Mo97	$1.18957 \cdot 10^{-5}$
	Mo98	$3.00569 \cdot 10^{-5}$
	Mo100	$1.19953 \cdot 10^{-5}$
	Fe54	$5.43977 \cdot 10^{-4}$
	Fe56	$1.73669 \cdot 10^{-2}$
	Fe57	$2.06336 \cdot 10^{-4}$
	Fe58	$2.6261 \cdot 10^{-5}$
	Cr50	$9.64153 \cdot 10^{-5}$
	Cr52	$1.86188 \cdot 10^{-3}$
	Cr53	$2.10825 \cdot 10^{-4}$
	Cr54	$5.24286 \cdot 10^{-5}$
	Ni58	$1.43637 \cdot 10^{-3}$
	Ni60	$5.49132 \cdot 10^{-4}$
	Ni61	$2.37747 \cdot 10^{-5}$
	Ni62	$7.5532 \cdot 10^{-5}$
	Ni64	$1.9146 \cdot 10^{-5}$
	Mo92	$1.8485 \cdot 10^{-5}$
	Mo94	$1.1522 \cdot 10^{-5}$
	Mn55	$2.24757 \cdot 10^{-4}$
	Ti47	$5.26253 \cdot 10^{-6}$
	Ti48	$5.3202 \cdot 10^{-5}$
	Ti49	$3.96492 \cdot 10^{-6}$
	Ti50	$3.89283 \cdot 10^{-6}$
	Si28	$2.22354 \cdot 10^{-4}$
	Si29	$1.12588 \cdot 10^{-5}$
	Si30	$7.47369 \cdot 10^{-6}$
	Na23	$1.01024 \cdot 10^{-2}$

TAB. 8.2: Deuxième tableau des compositions pour l'optimisation du maillage énergétique pour la filière rapide.

Cas	Noyau	Concentration $at / (barns\ cm) * 10^{24}$
Combustible évolué à 60 GWj/t	U238	$6.93478 \cdot 10^{-3}$
	Pu239	$8.47809 \cdot 10^{-4}$
	Pu240	$4.70144 \cdot 10^{-4}$
	Pu241	$9.36942 \cdot 10^{-5}$
	Fe56	$1.73669 \cdot 10^{-2}$
	Pu242	$1.4629 \cdot 10^{-4}$
	Pu238	$3.78637 \cdot 10^{-5}$
	Ni58	$1.43637 \cdot 10^{-3}$
	Am241	$1.57736 \cdot 10^{-5}$
	Am243	$1.57902 \cdot 10^{-5}$
	U235	$1.01115 \cdot 10^{-5}$
	Pd105	$2.72994 \cdot 10^{-5}$
	Ru101	$3.3707 \cdot 10^{-5}$
	Rh103	$3.13717 \cdot 10^{-5}$
	Tc99	$2.95805 \cdot 10^{-5}$
	Pd107	$1.66469 \cdot 10^{-5}$
	Cs133	$3.63698 \cdot 10^{-5}$
	Na23	$1.01024 \cdot 10^{-2}$
	Cr52	$1.86188 \cdot 10^{-3}$
	O16	$1.8136 \cdot 10^{-2}$
	Fe54	$5.43977 \cdot 10^{-4}$
	Mo97	$3.94449 \cdot 10^{-5}$
	Mo95	$4.04607 \cdot 10^{-5}$
	Sm149	$6.03123 \cdot 10^{-6}$
	Mn55	$2.24757 \cdot 10^{-4}$
	Ni60	$5.49132 \cdot 10^{-4}$
	Sm151	$3.21443 \cdot 10^{-6}$
	Pm147	$7.78942 \cdot 10^{-6}$
	Nd145	$1.68626 \cdot 10^{-5}$
	Cs135	$4.01307 \cdot 10^{-5}$
	Nd143	$2.33089 \cdot 10^{-5}$
	Cr53	$2.10825 \cdot 10^{-4}$
	Mo98	$6.17046 \cdot 10^{-5}$
	Ru102	$3.87629 \cdot 10^{-5}$
	Ag109	$7.58693 \cdot 10^{-6}$
	Np239	$2.28598 \cdot 10^{-6}$
	Ru104	$3.54776 \cdot 10^{-5}$
	Fe57	$2.06336 \cdot 10^{-4}$
	Eu153	$1.85515 \cdot 10^{-6}$
	Mo100	$4.8191 \cdot 10^{-5}$
	Xe131	$1.55698 \cdot 10^{-5}$
	Cm244	$3.24159 \cdot 10^{-6}$
Cr50	$9.64153 \cdot 10^{-5}$	
Np237	$1.99677 \cdot 10^{-6}$	
Pr141	$2.63158 \cdot 10^{-5}$	
Sm147	$2.25362 \cdot 10^{-6}$	
Pd106	$1.42898 \cdot 10^{-5}$	
Zr93	$2.21288 \cdot 10^{-5}$	

TAB. 8.3: Troisième tableau des compositions pour l'optimisation du maillage énergétique pour la filière rapide.

8.2 Sensibilité aux paramètres d'entrée

On se propose tout d'abord d'évaluer la sensibilité de la création du maillage de référence aux paramètres d'entrée. On a donc étudié l'impact de l'évaluation et des températures. Rappelons que la construction du maillage de référence s'effectue au moyen de deux critères (cf. 5.1.1 et 5.1.2) l'un portant sur la reconstruction du flux et l'autre sur le transfert.

8.2.1 Effet de l'évaluation

On a considéré pour ce type d'étude :

- les compositions correspondant à la cellule rapide chargée en MOX 2040 à temps zéro à trois taux de vide et à celle de la couverture fertile,
- les évaluations JEF2 et JEFF31, parce qu'elles contiennent des modifications importantes dans la description des noyaux des matériaux de structure et des noyaux lourds,
- une température de 294 K, un critère sur le flux (cf. 5.1.1) constant de 10 % et un contrôle du transfert (cf. 5.1.2) entre 100 eV et 20 MeV de 1/8.

Pour ce test deux calculs multigroupes avec les bibliothèques issues de JEF2 et JEFF31 à 1968 groupes ont été effectués pour disposer des densités d'émission.

Le tableau 8.4 montre qu'il y a une différence d'environ un millier de groupes entre les solutions réalisées avec les données issues de l'évaluation JEF2 et JEFF31. Les figures 8.1, 8.2 et 8.3 donnent la largeur en léthargie des deux maillages respectivement sur tout le domaine énergétique et dans les zones entre 10 et 20 keV et 1 et 20 MeV. On peut constater que les domaines sur lesquels les différences sont les plus importantes sont situés entre 10 et 20 keV et 1 et 20 MeV. Cet effet est dû au fait qu'en passant de l'évaluation JEF2 à l'évaluation JEFF31 le domaine résolu de l'uranium 238 a été étendu jusqu'à 20 keV et on a décrit plus finement plusieurs résonances des noyaux légers.

En conclusion, en toute rigueur, un maillage optimisé n'a pas de sens qu'en rapport avec le choix des évaluations des noyaux faisant partie des cas neutroniques.

En pratique, vu le stade de convergence des évaluations actuelles au niveau mondial, il n'est sans doute pas nécessaire d'aller vers la création de maillages ciblés sur chaque évaluation.

Évaluation	nombre de groupes
JEF2	11428
JEFF31	12647

TAB. 8.4: Étude sur l'influence de l'évaluation dans la génération du maillage de référence, nombre de groupes.

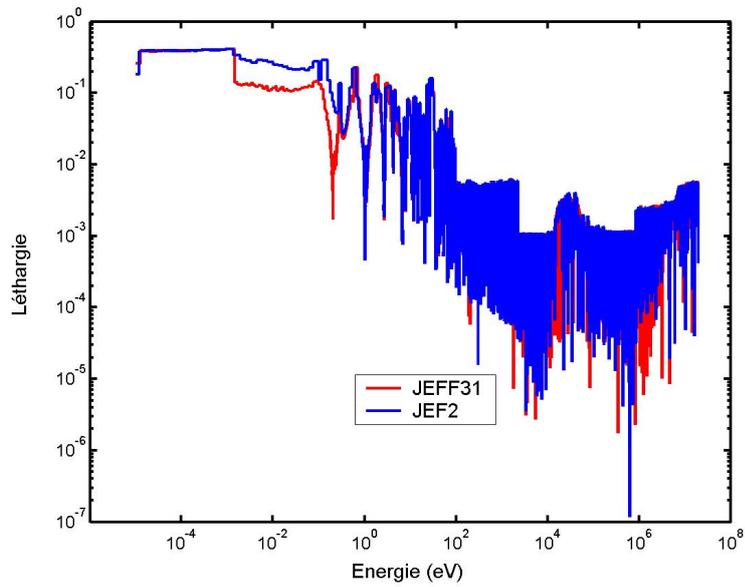


FIG. 8.1: Largeur en léthargie des maillages dans l'étude sur l'influence de l'évaluation.

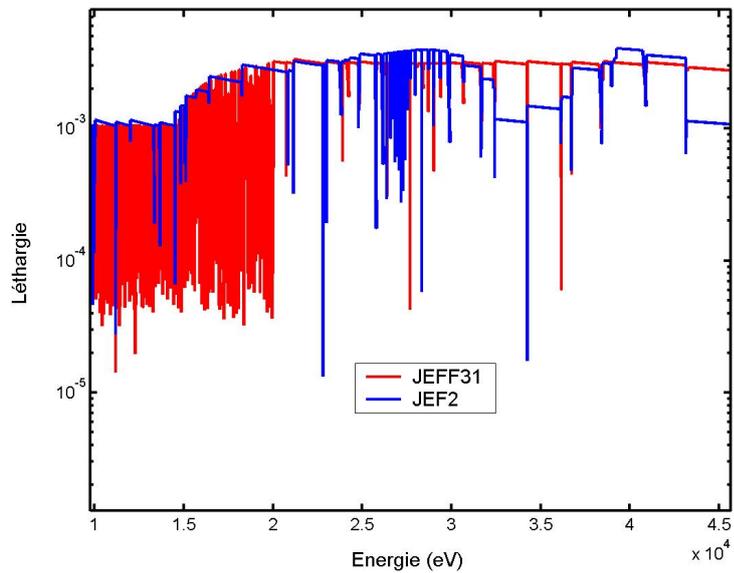


FIG. 8.2: Largeur en léthargie des maillages dans l'étude sur l'influence de l'évaluation, zoom entre 10 et 40 keV.

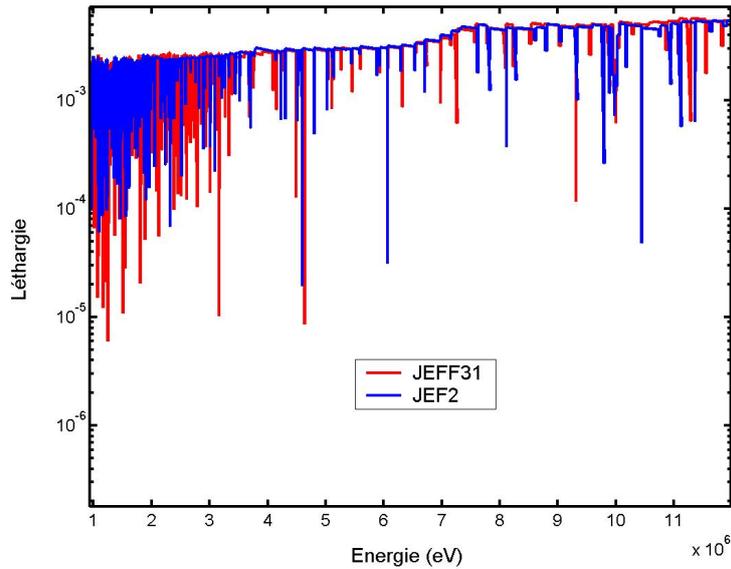


FIG. 8.3: Largeur en léthargie des maillages dans l'étude sur l'influence de l'évaluation, zoom entre 1 et 20 MeV.

8.2.2 Effet de la température

Pour cette étude on a pris :

- les compositions décrites à la section 8.2.1 et les données issues de l'évaluation JEFF31,
- un critère sur le flux modulé par groupe inférieur à 100 % et un contrôle du transfert entre 100 eV et 20 MeV de 1/8.

On a d'abord généré deux maillages pour des températures respectivement de 294 K et 900 K, puis un maillage couvrant les deux températures. Le tableau 8.5 montre que le nombre de groupes est plus élevé à faible qu'à haute température, parce que les sections efficaces ont des gradients plus forts. Il met également en évidence que prendre simultanément en compte deux températures amène à ajouter des groupes, puisque les gradients des flux sont modifiés d'une température à l'autre (cf. fig 8.4). Finalement, dans le tableau 8.6 on présente les maillages obtenus avec un critère sur le flux élevé égal à $\epsilon_f = 5000\%$ et donc selon une construction pilotée par le critère du transfert. On constate une très faible influence de la température, car les probabilités de transfert sont indépendantes de la température.

Température	nombre de groupes
294 K	8739
900 K	7806
294 - 900 K	9044

TAB. 8.5: Influence de la température dans la génération du maillage de référence, $\epsilon_f = 1$ et $SELF = 1/8$.

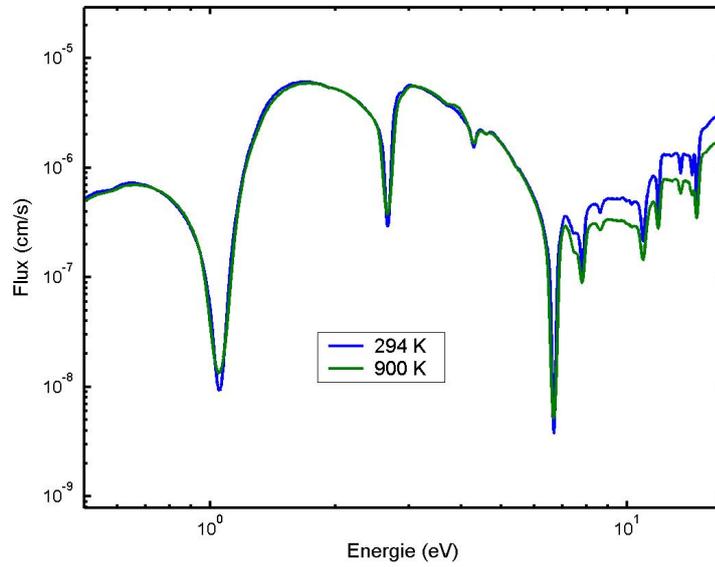


FIG. 8.4: Flux modèles aux températures de 294 K et 900 K.

Température	nombre de groupes
294 K	4971
900 K	4968

TAB. 8.6: Influence de la température dans la génération du maillage de référence, avec un critère du flux de $\epsilon_f = 5000\%$ et un critère du transfert $SELF = 1/8$.

8.3 Obtention du maillage de référence RNR-sodium

Le nombre de problèmes à traiter est assez étendu et une simulation Monte Carlo pour chacun de ceux-ci conduit à un grand nombre de calculs. Pour cela, on a mis en œuvre la stratégie de calcul suivante. Tout d'abord nous avons effectué une étude de convergence multigroupe pour mettre en évidence les problèmes neutroniques plus complexes. Sur ces problèmes, on a cherché le maillage de référence garantissant une solution multigroupe :

- dans les barres d'erreur à trois écarts-types de la simulation Monte Carlo ;
- équivalente à celle du solveur ponctuel de structure fine dans son domaine de validité, i.e. où le ralentissement est élastique et isotrope dans le centre de masse.

Finalement en se servant des maillages de référence ainsi déterminés, la convergence multigroupe a été vérifiée sur tous les problèmes qui n'ont pas été considérés au moment de la comparaison avec les solutions Monte Carlo.

Tous les maillages générés conservent les bornes du maillage ECCO à 33 groupes pour pouvoir définir une précision sur le flux variable par plage énergétique.

Tous les calculs multigroupes de la base de cas sont effectués avec une autoprotection des sous-groupes avec traitement en mélange en utilisant les sections ponctuelles. Pour les calculs à valeurs propres on a utilisé un spectre de fission décrit avec 33 groupes dans le domaine des énergies incidentes. Pour les autres calculs, la source est uniforme en énergie, émise dans l'intervalle ΔE_G [10 - 20] MeV et elle a une intensité dans chaque groupe g de $\frac{\Delta E_g}{\Delta E_G}$, pour cohérence à celle échantillonnée par le code TRIPOLI4.

Le test avec le solveur ponctuel de structure fine valide le calcul multigroupe en ligne, à l'intérieur du code AEMC, des taux effectifs pour la méthode Livolant-Jeanpierre. Dans ce cas, les calculs multigroupes sont effectués avec des sections multigroupes autoprotégées par la méthode des sous-groupes à isotope isolé avec l'utilisation des tables de probabilité.

Comme l'erreur dans les mesures expérimentales est de l'ordre du pour cent sur les taux de réaction intégraux et que l'on veut être sûr que le désaccord avec ces données ne soit pas affecté par l'erreur numérique, on fixe les contraintes suivantes dans la construction du maillage par rapport à la référence :

- une erreur sur les taux intégraux inférieur à 0,1 %,
- une erreur sur les taux de réaction dans chaque groupe inférieur à 1 %.

8.3.1 Convergence multigroupe pour l'individuation des cas complexes

Pour chaque cas décrit à la section 8.1, on a effectué des calculs multigroupes sans autoprotection pour définir les densités d'arrivée avec la bibliothèque ECCO à 1968 groupes, issue de JEFF31. Au préalable, on a vérifié que ces grandeurs, calculées avec une autoprotection des sous-groupes, ne modifient pas le maillage énergétique construit. En effet, c'est la section macroscopique totale qui produit les structures résonnantes du flux neutronique, la source de ralentissement modulant uniquement l'intensité du flux. Comme la densité de ralentissement diffère dans chaque groupe par un facteur multiplicatif, il n'a pas d'effet prépondérant sur la construction du maillage.

En utilisant ces données, on a calculé grâce à AEMC trois maillages avec un critère sur le flux modulé par groupe et valant respectivement 100, 150 et 300, et un critère du transfert de 1. Les structures multigroupes ainsi obtenues contiennent 1852, 3472 et 5487 groupes (cf. première ligne du tableau 8.10). Les tableaux 8.7, 8.8 et 8.9 montrent respectivement les valeurs propres, les taux d'absorption et de diffusion des problèmes à source. On peut observer que les problèmes à valeur propre du cas Godiva, Jezabel et du ralentissement dans la composition en B4C ont déjà atteint la convergence à partir de 1852 groupes, alors que les problèmes à source et à valeur propre présentent encore des écarts importants. Les résultats des calculs à 3472 et 5487 groupes sont analogues à 294 K et à 900 K et ils présentent des

erreurs inférieures à une dizaine de pcm sur les valeurs propres et les taux d'absorption et de 400 pcm ou 0.1 % sur les taux de diffusion.

Suite à ce premier test, on a décidé de valider avec la simulation Monte Carlo :

- un problème à valeur propre avec un taux de vide 100 % à 900 K,
- un problème à source dans la couverture fertile à 900 K.

Comme il n'y a *a priori* aucune difficulté pour faire converger un problème à valeur propre. La résolution d'un problème avec un taux de vide 100 % présente un spectre neutronique dur et est donc plus difficile à traiter. Le problème à source choisi est celui présentant l'erreur la plus significative sur le taux de diffusion.

Cas	Calcul		
	1852g	3472g	5487g
Godiva	2.25917	2.25917	2.25917
Jezabel	2.97447	2.97447	2.97447
MOX 2040 à 294 K et TV = 0 %	1.14388	1.14427	1.14423
MOX 2040 à 294 K et TV = 50 %	1.16960	1.16970	1.16974
MOX 2040 à 294 K et TV = 100 %	1.20231	1.20232	1.20225
MOX 2040 à 900 K et TV = 0 %	1.12576	1.12586	1.12578
MOX 2040 à 900 K et TV = 50 %	1.15369	1.15369	1.15362
MOX 2040 à 900 K et TV = 100 %	1.18918	1.18910	1.18903
MOX 2040 évolué à 900 K	1.13825	1.13821	1.13815

TAB. 8.7: Valeurs propres des cas neutroniques pour différentes structures multigroupes. TV = taux de vide.

Cas	Calcul		
	1852g	3472g	5487g
Couverture fertile à 294 K	$1.36731 \cdot 10^5$	$1.36735 \cdot 10^5$	$1.36733 \cdot 10^5$
Couverture fertile à 900 K	$1.36731 \cdot 10^5$	$1.36735 \cdot 10^5$	$1.36734 \cdot 10^5$
Barre de contrôle B4C	$1.02268 \cdot 10^5$	$1.02268 \cdot 10^5$	$1.02268 \cdot 10^5$

TAB. 8.8: Taux d'absorption des cas neutroniques à source pour différentes structures multigroupes.

Cas	Calcul		
	1852g	3472g	5487g
Couverture fertile à 294 K	$89.64062 \cdot 10^5$	$89.54711 \cdot 10^5$	$89.54515 \cdot 10^5$
Couverture fertile à 900 K	$87.66161 \cdot 10^5$	$87.59691 \cdot 10^5$	$87.59234 \cdot 10^5$
Barre de contrôle B4C	$18.05379 \cdot 10^5$	$18.05380 \cdot 10^5$	$18.05383 \cdot 10^5$

TAB. 8.9: Taux de diffusion des cas neutroniques à source pour différentes structures multigroupes.

8.3.2 Comparaison avec le code de référence TRIPOLI4

Cette étape vise à définir le maillage énergétique qui fournit une solution multigroupe équivalente au code Monte Carlo TRIPOLI4. Pour cette étude, on a effectué deux simulations Monte Carlo l'une sur un problème à valeur propre et l'autre sur un problème à source. Pour le premier calcul, on a réalisé une simulation TRIPOLI4 de 8 millions d'histoires. La deuxième simulation est un problème à source réalisé avec 5 millions d'histoires de neutrons et une source uniforme entre 10 et 20 MeV, isotrope et stationnaire. L'ensemble de l'étude nécessitera des comparaisons entre les solutions du code TRIPOLI4 et AEMC avec les différents maillages multigroupes. Les comparaisons par groupe sont présentées en condensant les solutions sur le maillage à 33 groupes ECCO, commun à l'ensemble des maillages générés.

Comme on l'a vu précédemment, pour générer le maillage de référence on emploie un critère sur le flux et sur le transfert. Chacun de ces deux paramètres permet d'affiner différemment les maillages énergétiques : le premier localement autour des résonances et le deuxième globalement en bornant la largeur des groupes. Comme il faut se fixer un seuil maximal de groupes à cause des contraintes sur l'espace mémoire et également sur la finesse du maillage tolérable par les codes de génération des données, il faut trouver la bonne combinaison de ces deux critères pour disposer d'un maillage correctement affiné.

Dans cette optique, on a exploré différentes combinaisons des critères du flux et du transfert, en balayant le critère du transfert SELF entre 1 et 1/8 et le critère du flux ϵ_f entre 50 et 300 %. Ces dernières valeurs correspondent aux erreurs maximales, mais grâce à la modulation, dans les domaines à grande importance du taux, elles sont divisées par un facteur allant de 3 à 8. On s'est également fixé un seuil maximal de 13000 groupes, qui correspond à une valeur compatible avec les ressources informatiques actuelles. Par ailleurs, il a été vérifié qu'une largeur en léthargie minimale de 10^{-6} constitue une limite pour la qualité du traitement des données nucléaires. En effet, si le maillage énergétique a une largeur inférieure à cette valeur, le code CALENDF ne génère pas les tables de probabilité et le code NJOY produit des matrices multigroupes de transfert anormales, privées du "self scattering".

Le tableau 8.10 donne un aperçu du nombre de groupes des maillages et de l'estimateur $F(E)$, calculé en utilisant la référence TRIPOLI4. En général, les erreurs se réduisent en modifiant un critère à la fois, parce que la densité de bornes dans le même domaine énergétique augmente et les sections multigroupes correspondantes vont mieux reproduire les fluctuations des sections efficaces ponctuelles. On peut également observer que la construction d'un maillage piloté par le contrôle du transfert, donc donnant des maillages à pas constant en léthargie, est moins performante qu'une combinaison des deux critères. Pour $\epsilon_f = 100\%$ et SELF = 1/6 un maillage à 11895 groupes a été aussi générée. Dans ce cas, l'estimateur $F(E)$ vaut 0.366, ce qui nous permet de conclure que l'asymptote de précision est située entre 12000 et 13000 groupes avec un bon choix des deux paramètres. Les meilleurs résultats sont atteints avec les maillages à 7456, 9207, 11895 et 12965 groupes.

		NG / F(E) [%]			
		ϵ_f [%]			
SELF		50	100	150	300
1		11762/0.383	5487/0.397	3472/0.406	1852/0.589
1/4			9207/0.37	7456/0.373	5940/0.56
1/8				12965/0.365	11447/0.543

TAB. 8.10: Nombre de groupes NG et estimateur F(E) en fonction du critère sur le flux ϵ_f et sur le transfert SELF. Les rectangles non remplis correspondent à des maillages dépassant le seuil de 13000 groupes.

Validation du cas MOX 2040 à taux de vide 100 %

Le tableau 8.11 montre les valeurs propres sur le combustible MOX 2040 à taux de vide 100 % pour une température de 900 K. On peut constater que tous les calculs autoprotégés rentrent dans les barres d'erreur à deux écarts-types de la simulation Monte Carlo. Le calcul à 12965 groupes sans autoprotection a été mis à titre d'exemple pour montrer l'impact de l'autoprotection même sur des maillages assez raffinés. Nous observons que sans autoprotection la valeur propre est en dehors des barres d'erreur à trois écarts-types et elle est sous-estimée de 186 pcm. Ce résultat justifie une approche avec autoprotection en sous-groupes afin de disposer d'une solution multigroupe de référence avec un maillage dont le nombre de groupes est compatible avec les ressources informatiques actuelles et dont la largeur des groupes reste tolérable pour les codes actuels de génération de données.

Le tableau 8.12 montre les taux de réactions des noyaux contribuant pour plus de 90 % à l'absorption et à la diffusion sur le problème à valeur propre du combustible MOX 2040 à taux de vide 100 %. On constate déjà qu'avec le maillage à 7456 groupes les solutions multigroupes rentrent dans les barres d'erreur à deux écarts-types de la simulation Monte Carlo.

Calcul	keff
7456g	1.18919 ($-50 \cdot 10^{-5}$)
9207g	1.18916 ($-53 \cdot 10^{-5}$)
11895g	1.18916 ($-53 \cdot 10^{-5}$)
12965g	1.18917 ($-52 \cdot 10^{-5}$)
12965g sans auto	1.18683 ($-186 \cdot 10^{-5}$)
TRIPOLI4	1.18869 $\pm 35 \cdot 10^{-5}$

TAB. 8.11: Coefficients de multiplication effectifs de TRIPOLI4 et de AEMC. Les valeurs de référence sont présentées avec un intervalle de confiance d'un écart-type. Entre parenthèses on montre l'écart absolu.

Réaction	Calcul				
	TRIPOLI4	7456g	9207g	11895g	12965g
Absorption U238	45057 ±17	45062 (-0.29)	45063 (-0.35)	45063 (-0.35)	45063 (-0.35)
Absorption Pu239	30740 ±11	30752 (-1.09)	30751 (-1.0)	30751 (-1.0)	30751 (-1.0)
Diffusion U238	1567561 ±474	1567874 (-0.66)	1567890 (-0.69)	1567918 (-0.75)	1567920 (-0.76)
Diffusion Fe56	1257452 ±401	1257731 (-0.69)	1257721 (-0.67)	1257707 (-0.63)	125769 (-0.79)
Diffusion O16	1245428 ±359	1245868 (-1.22)	1245863 (-1.21)	1245902 (-1.32)	1245916 (-1.36)
Production Pu239	70197 ±22	70223 (-1.18)	70221 (-1.09)	70222 (-1.14)	70224 (-1.23)
Production U238	14040 ±7	14044 (-0.57)	14043 (-0.42)	14042 (-0.28)	14041 (-0.14)
Production Pu241	17731 ±6	17735 (-0.67)	17735 (-0.67)	17735 (-0.67)	17735 (-0.67)

TAB. 8.12: Taux globaux de réactions de TRIPOLI4 et de AEMC. Les valeurs de référence sont présentées avec un intervalle de confiance d'un écart-type. Entre parenthèses on note l'erreur en unité d'écart-type.

On regarde ensuite la distribution des erreurs par groupe. Les figures de 8.5 à 8.14 montrent les écarts absolus et relatifs des taux d'absorption et de diffusion de l'uranium 238, d'absorption du plutonium 239, de diffusion du fer 56 et de l'oxygène 16 sur le cas MOX 2040 à taux de vide 100 % pour une température de 900 K. Les deux maillages donnent des solutions en accord avec la solution Monte Carlo, sauf autour de 1 MeV. Cet écart ne disparaît pas même avec les structures multigroupes plus raffinés à 11895 et 12965 groupes. Il est de toute manière assez faible, inférieur à 0.5 % en relatif et rentrant dans les critères imposés de 1 % par groupe.

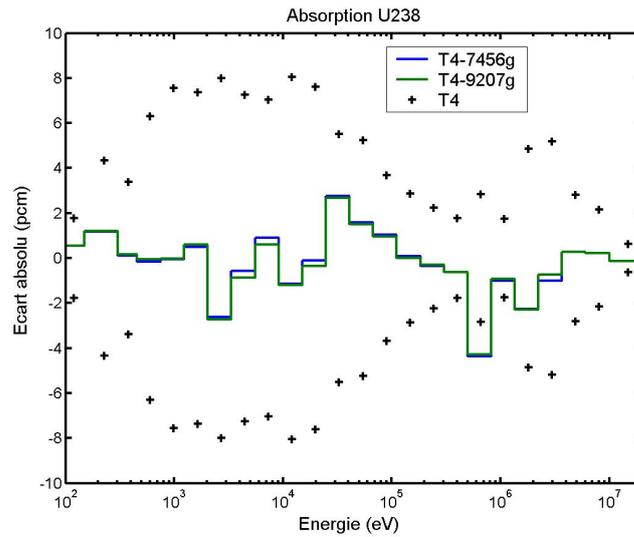


FIG. 8.5: Écart absolu sur le taux d'absorption pour l'U238. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

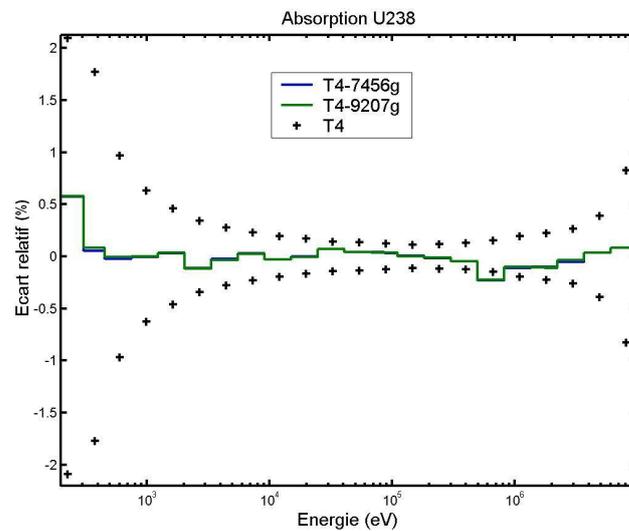


FIG. 8.6: Écart relatif sur le taux d'absorption pour l'U238. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

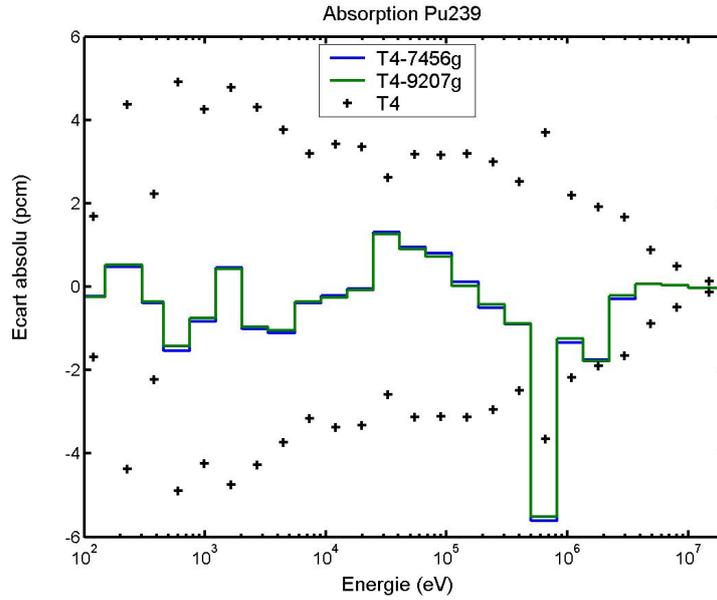


FIG. 8.7: Écart absolu sur le taux d'absorption pour le Pu239. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

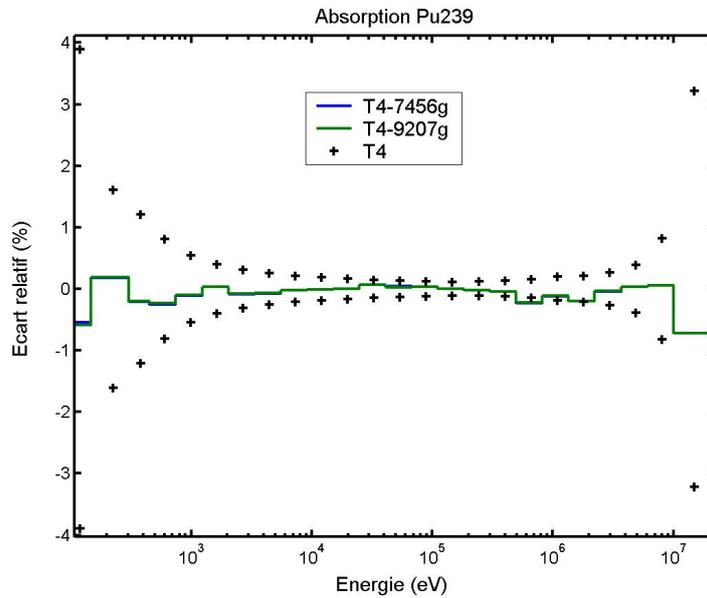


FIG. 8.8: Écart relatif sur le taux d'absorption pour le Pu239. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

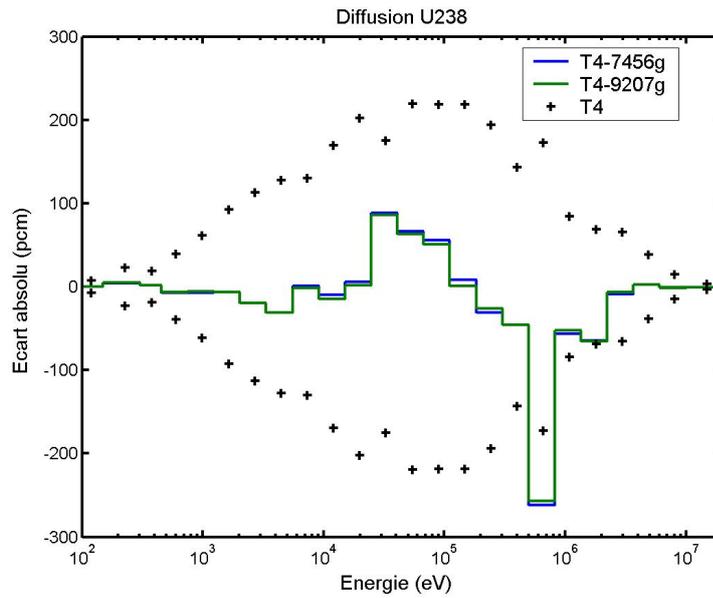


FIG. 8.9: Écart absolu sur le taux de diffusion pour l'U238. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

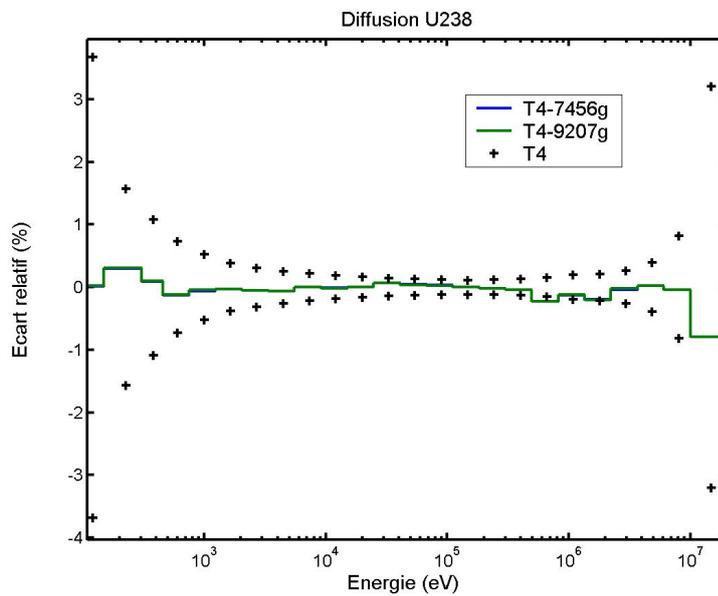


FIG. 8.10: Écart relatif sur le taux de diffusion pour l'U238. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

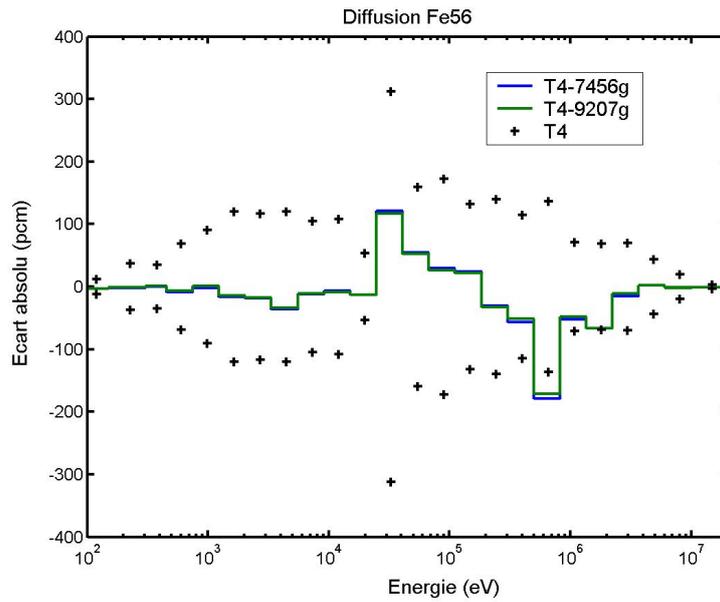


FIG. 8.11: Écart absolu sur le taux de diffusion pour le Fe56. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

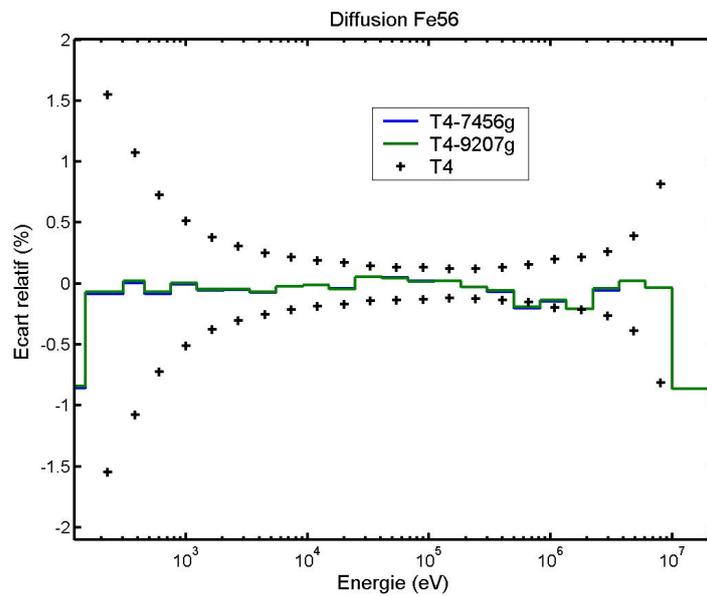


FIG. 8.12: Écart relatif sur le taux de diffusion pour le Fe56. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

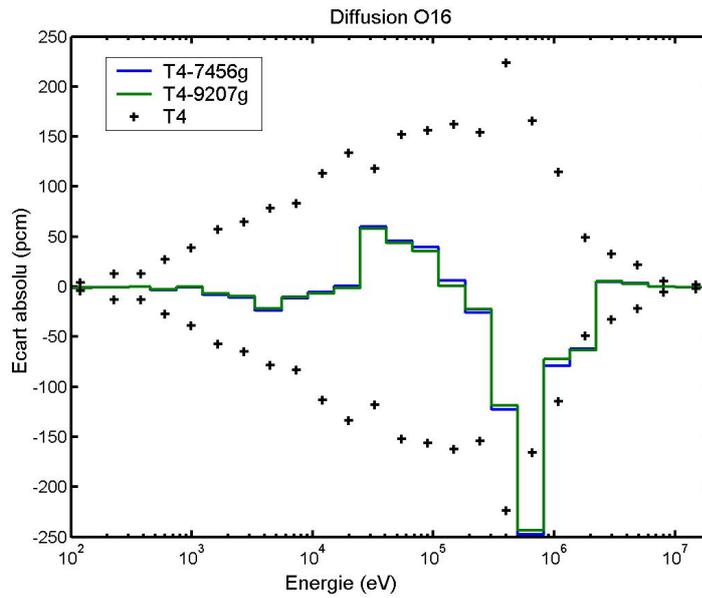


FIG. 8.13: Écart absolu sur le taux de diffusion pour l'O16. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

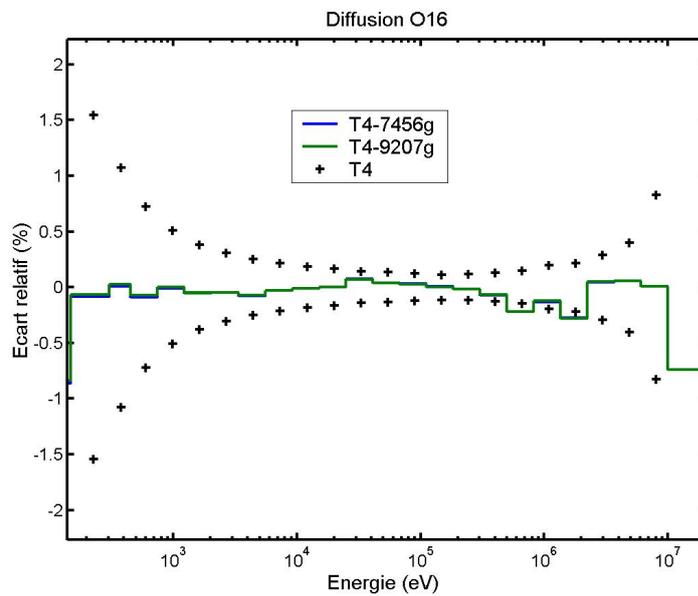


FIG. 8.14: Écart relatif sur le taux de diffusion pour l'O16. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

Validation de la couverture fertile

Le tableau 8.13 montre les taux de réactions globaux sur le problème de la couverture fertile à la température de 900 K. On constate déjà qu'avec le maillage à 7456 groupes les solutions multigroupes rentrent dans les barres d'erreur à deux écarts-types de la simulation Monte Carlo.

Réaction	Calcul				
	TRIPOLI4	7456g	9207g	11895g	12965g
Absorption U238	112240 ±43	112170 (1.67)	112176 (1.43)	112179 (1.42)	112173 (1.56)
Diffusion U238	2620367 ±870	2620814 (-0.51)	2620776 (-0.47)	2620856 (-0.56)	2620899 (-0.61)
Diffusion Fe56	1933429 ±692	1933469 (-0.06)	1933313 (0.17)	1933331 (0.14)	1933419 (0.01)
Diffusion O16	1657842 ±550	1658434 (0.74)	1658370 (0.86)	1658434 (0.74)	1658485 (0.65)
Diffusion Na23	1288125 ±460	1288072 (0.11)	1288029 (0.21)	1288073 (0.11)	1288099 (0.06)

TAB. 8.13: Taux de réactions globaux de TRIPOLI4 et de AEMC. Les valeurs de référence sont présentées avec un intervalle de confiance d'un écart-type. Entre parenthèses on note l'erreur en unité d'écart-type.

Voyons ensuite les distributions des erreurs sur les problèmes à source dans la couverture fertile pour la température de 900 K. Les figures de 8.15 à 8.18 montrent les écarts absolus et relatifs sur les taux d'absorption et de diffusion de l'uranium 238. On peut observer qu'avec les quatre maillages définis les calculs ne rentrent pas dans les barres d'erreurs TRIPOLI4 au-dessus du MeV et entre 10 et 100 eV. Mais ces erreurs sont plus faibles avec les maillages à 9207 et 11895 qu'avec les maillages à 7456 et 12965 groupes. L'amélioration de la précision du calcul entre 10 et 100 eV s'explique par le fait que les maillages à 9207 et 11895 groupes sont obtenus en imposant une précision supérieure sur le flux, ils sont donc plus raffinés autour des résonances de l'uranium 238 dans ce domaine.

Les figures de 8.19 à 8.24 montrent les distributions des erreurs relatives et absolues sur les taux de diffusion des noyaux du fer 56, de l'oxygène 16 et du sodium 23. Toutes les solutions multigroupes dépassent les barres d'erreurs dans les groupes en proximité de la source, mais ce désaccord reste faible et inférieur au critère d'un pour cent.

Ce point, qui n'en remet pas en cause les résultats obtenus, mériterait une investigation approfondie.

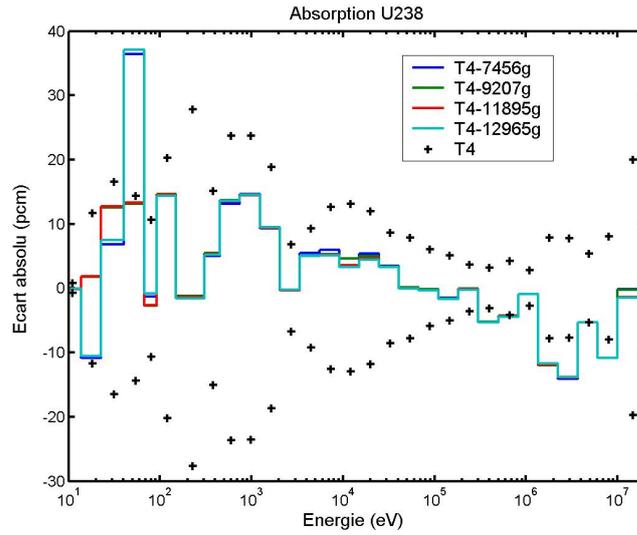


FIG. 8.15: Écart absolu sur le taux d'absorption pour l'U238. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

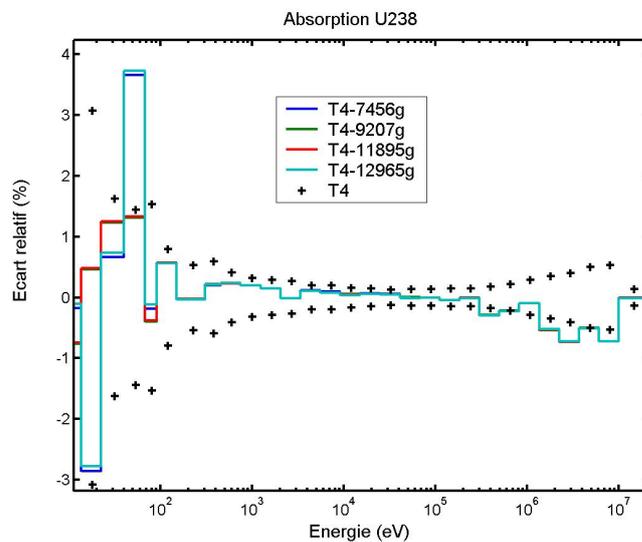


FIG. 8.16: Écart relatif sur le taux d'absorption pour l'U238. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

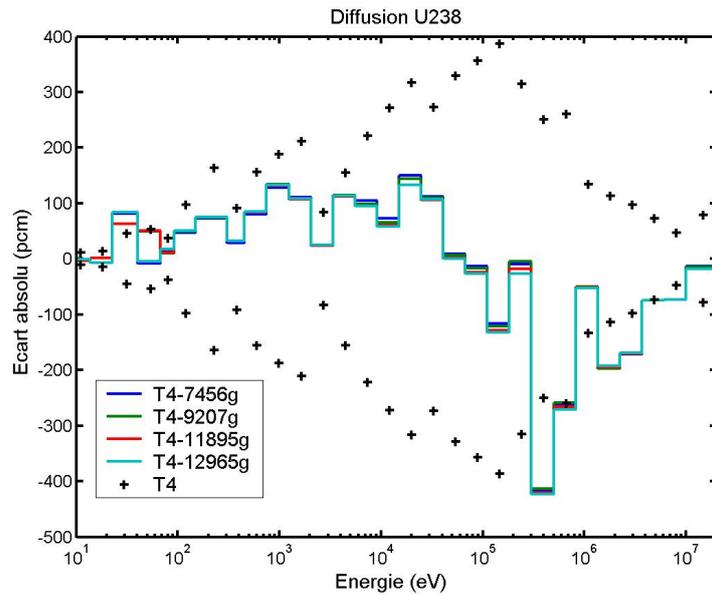


FIG. 8.17: Écart absolu sur le taux de diffusion pour l'U238. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

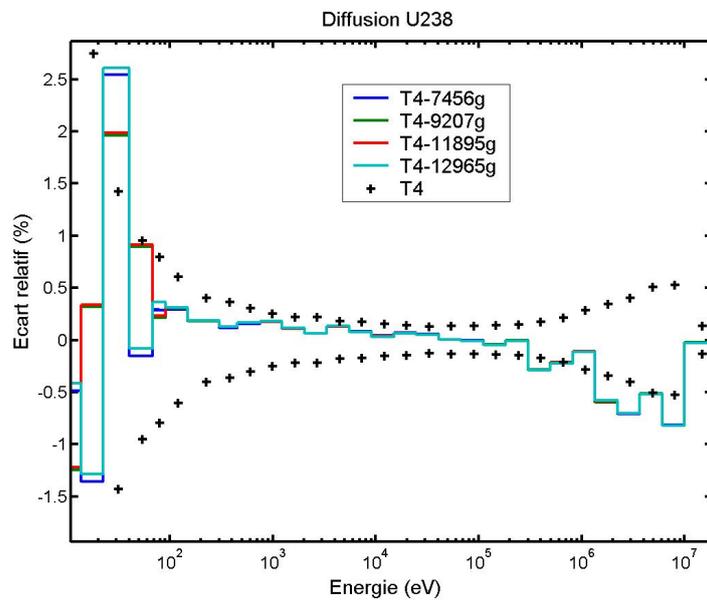


FIG. 8.18: Écart relatif sur le taux de diffusion pour l'U238. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

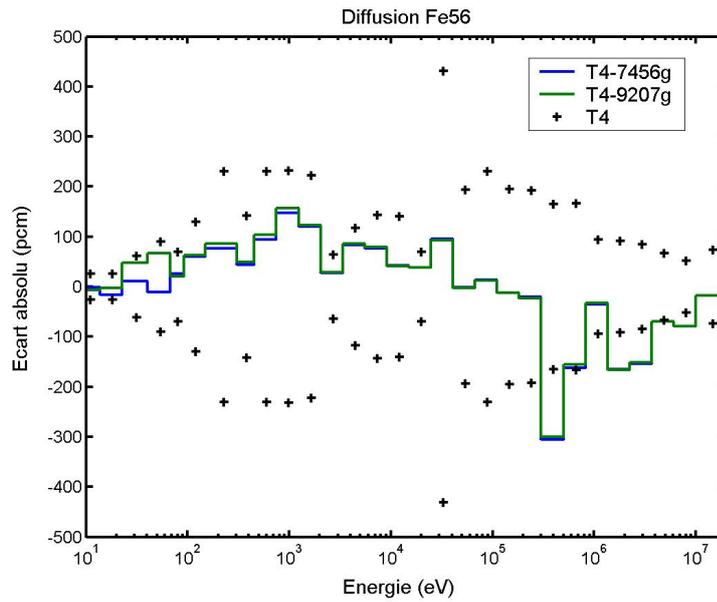


FIG. 8.19: Écart absolu sur le taux de diffusion pour le Fe56. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

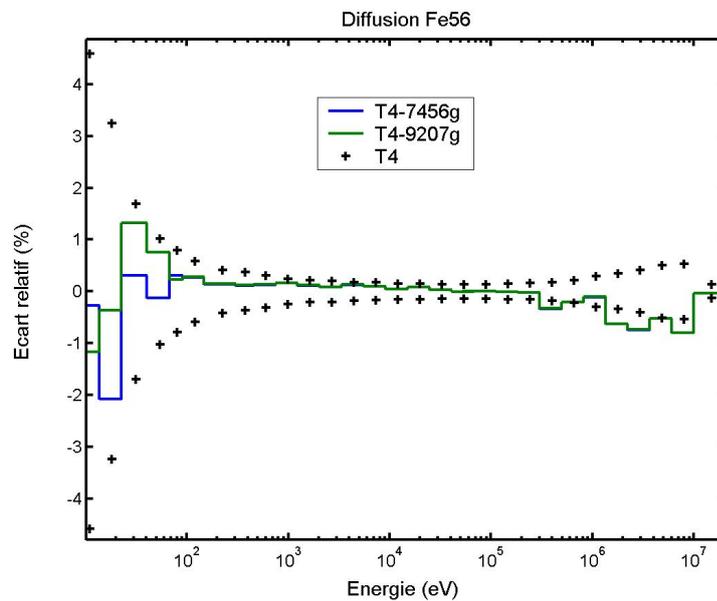


FIG. 8.20: Écart relatif sur le taux de diffusion pour le Fe56. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

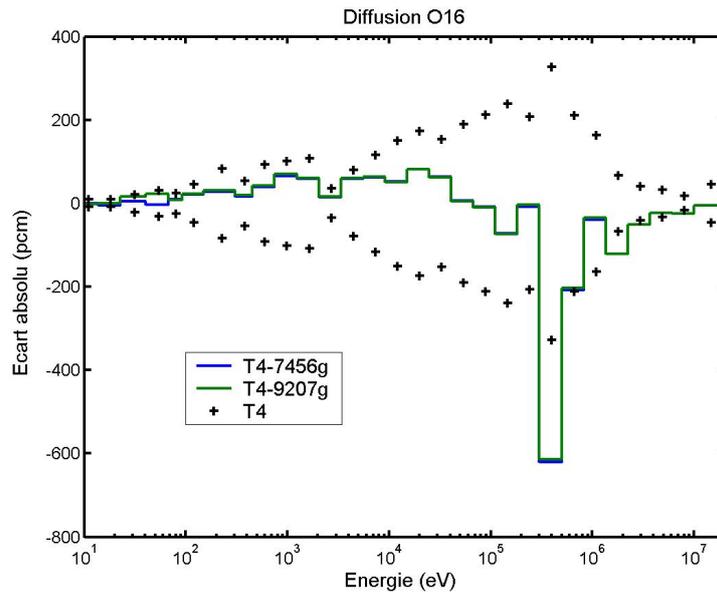


FIG. 8.21: Écart absolu sur le taux de diffusion pour l'O16. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

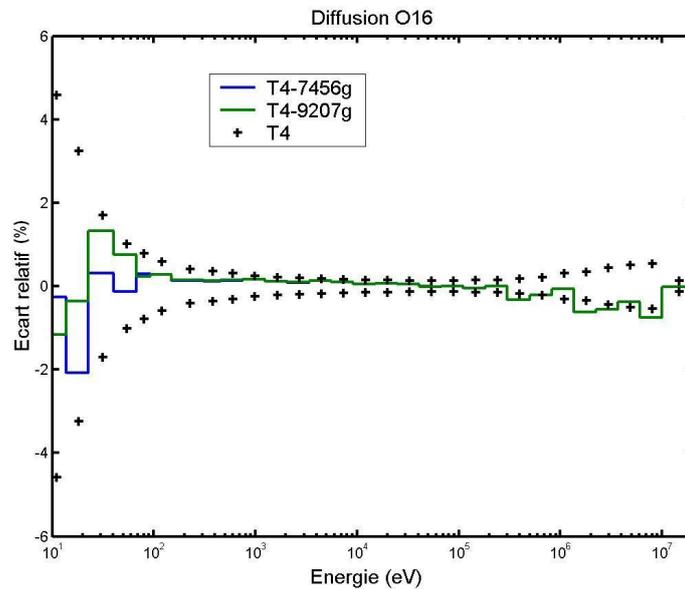


FIG. 8.22: Écart relatif sur le taux de diffusion pour l'O16. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

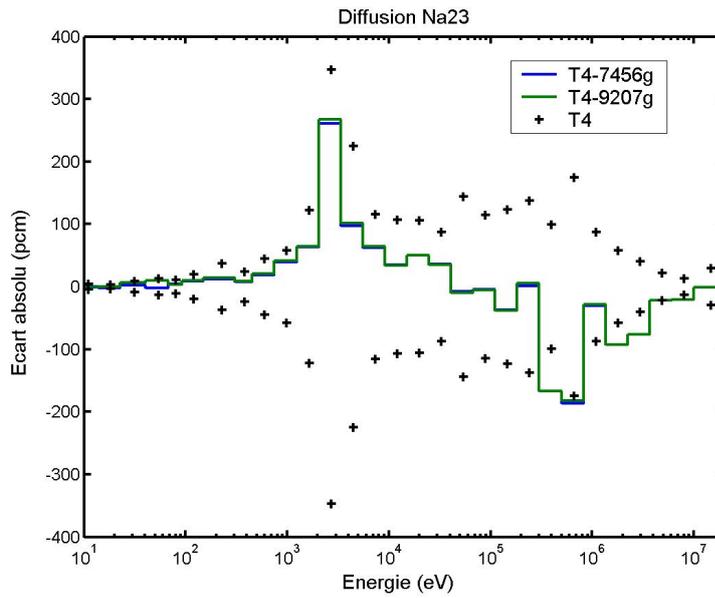


FIG. 8.23: Écart absolu sur le taux de diffusion pour le Na23. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

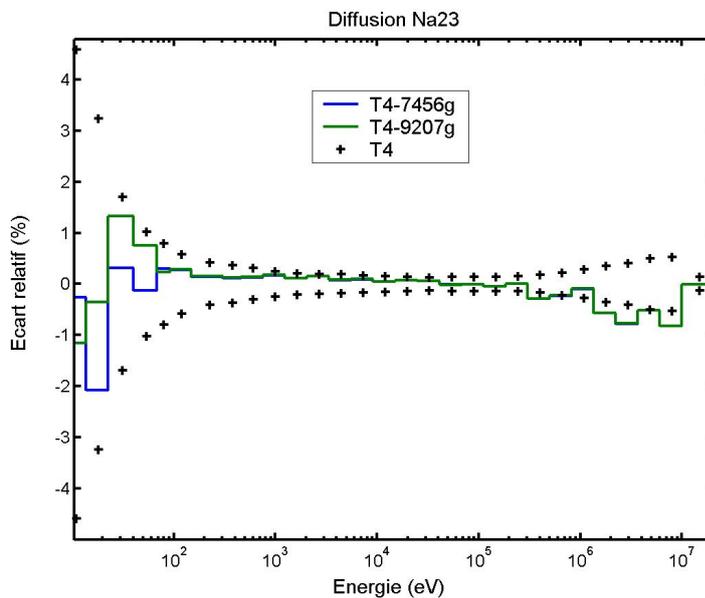


FIG. 8.24: Écart relatif sur le taux de diffusion pour le Na23. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

8.3.3 Comparaison avec le solveur ponctuel

Les tests effectués visent à choisir le maillage multigroupe fin permettant une résolution de l'équation de structure fine dans les critères définies à la section 8.3. Les références sont des calculs de structure fine à une température de 900 K avec le solveur ponctuel de AEMC en utilisant les sections ponctuelles, issues de JEFF31, reconstruites à une précision de 0.1 % et une représentation linéaire du taux de diffusion.

Les figures 8.25 et 8.26 montrent l'écart relatif sur les taux d'absorption et de diffusion de l'uranium 238 sur une plage de dilutions allant de 10 à 10^7 barns. On peut observer que seul le maillage à 9207 groupes permet une erreur inférieure à 0,1 % pour toutes dilutions et le maximum se présente autour de 100 barns pour les deux maillages. Les figures 8.27 et 8.28 donnent la distribution des erreurs par groupe de ces deux maillages aux dilutions de 100 barns pour l'absorption et de 10 barns pour la diffusion. On constate que seul le maillage à 9207 groupes ne dépasse le seuil d'erreur de 1 %.

Les figures 8.29 et 8.30 montrent le même genre d'étude sur le taux d'absorption du plutonium 239. De même, pour ce cas, avec le maillage à 9207 groupes, on garantit une résolution multigroupe de l'équation de structure fine à mieux de 0,1 % en intégrale et de 1 % par groupe.

Finalement, les figures de 8.31 à 8.34 montrent les écarts globaux et par groupes sur le taux de diffusion du fer 56 et du sodium 23. Les erreurs les plus grandes sont atteintes respectivement aux dilutions de 10 et 100 barns et sont inférieures à 0.1 % pour les deux maillages. Les erreurs par groupe pour ces deux dilutions sont inférieures à 0.3 %, les valeurs maximales étant atteintes dans le domaine des résonances de ces noyaux. On peut constater que les deux calculs multigroupes remplissent le critère de précision donné autour de la grande résonance du fer 56 à 20 keV et du sodium 23 à 2 keV.

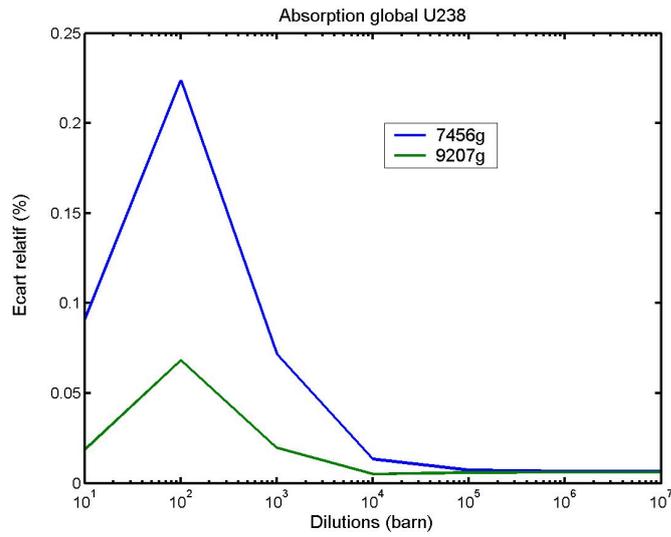


FIG. 8.25: Écart relatif sur le taux d'absorption global de l'U238 sur des problèmes de structure fine à différentes dilutions.

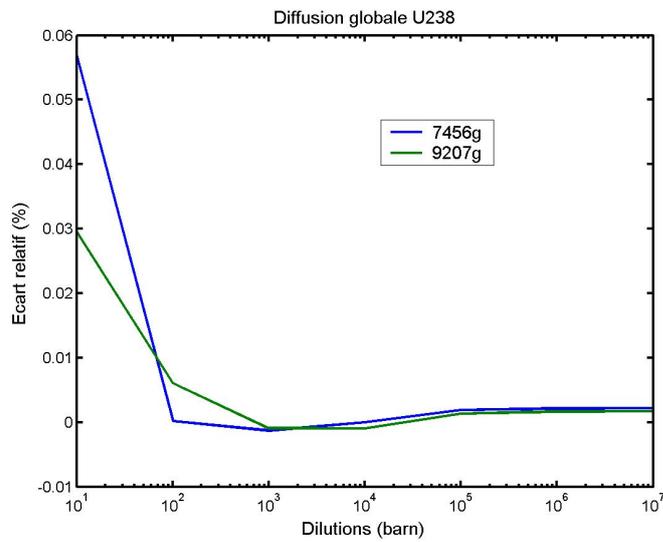


FIG. 8.26: Écart relatif sur le taux de diffusion globale de l'U238 sur des problèmes de structure fine à différentes dilutions.

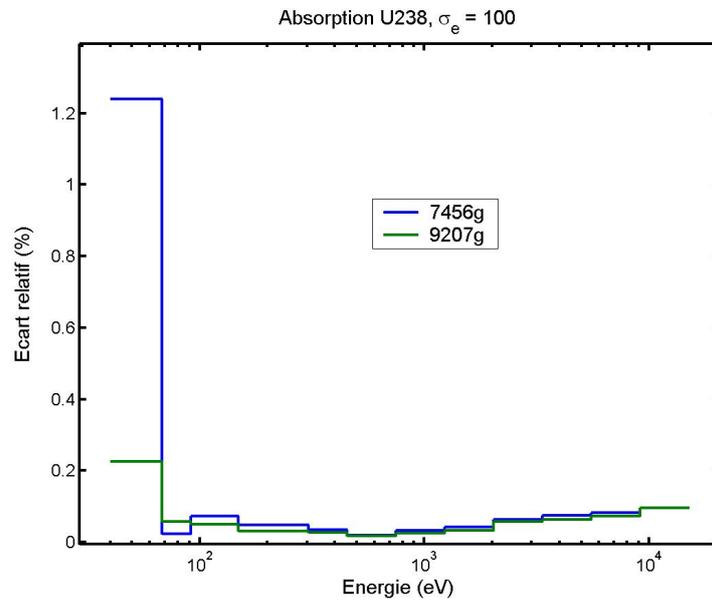


FIG. 8.27: Écart relatif sur le taux d'absorption de l'U238 sur un problème de structure fine à la dilution de 100 barns.

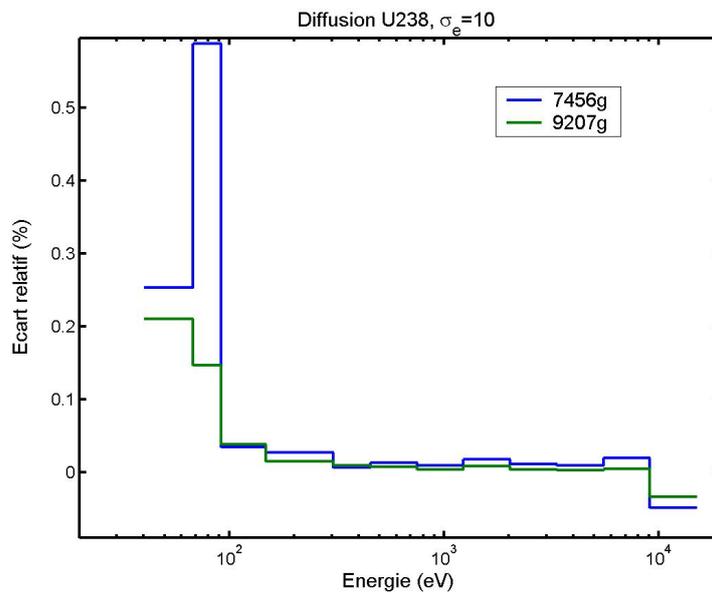


FIG. 8.28: Écart relatif sur le taux de diffusion de l'U238 sur un problème de structure fine à la dilution de 10 barns.

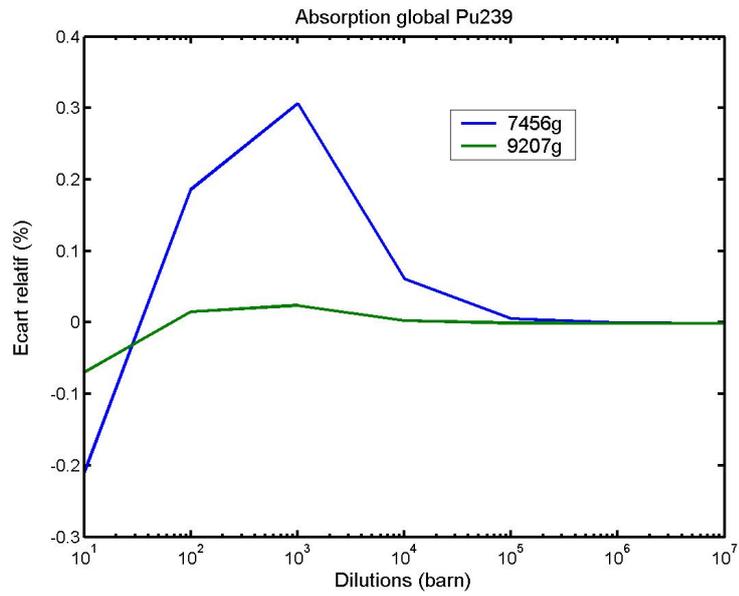


FIG. 8.29: Écart relatif sur le taux global d'absorption du Pu239 sur des problèmes de structure fine à différentes dilutions.

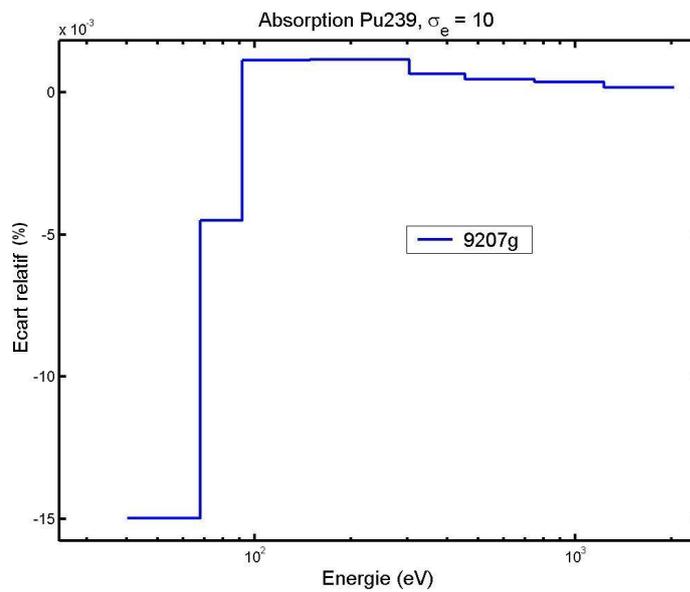


FIG. 8.30: Écart relatif sur le taux d'absorption du Pu239 sur un problème de structure fine à la dilution de 10 barns.

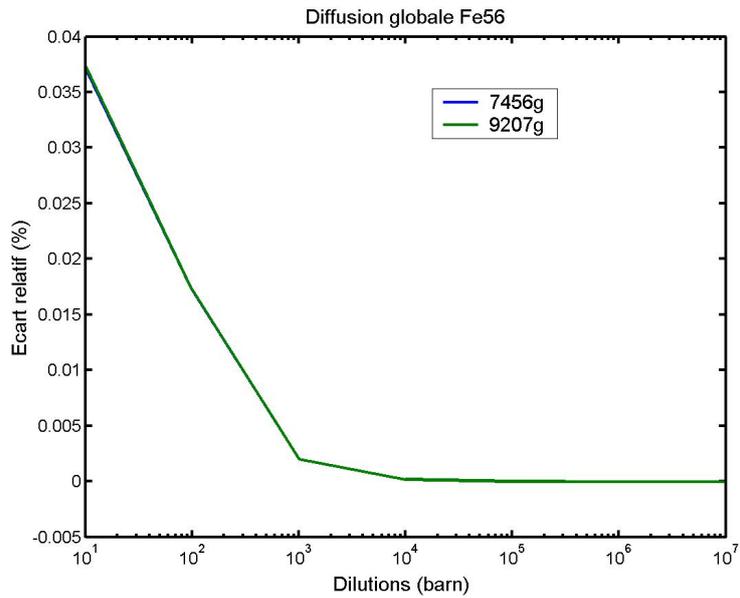


FIG. 8.31: Écart relatif sur le taux de diffusion du Fe56 sur des problèmes de structure fine à différentes dilutions.

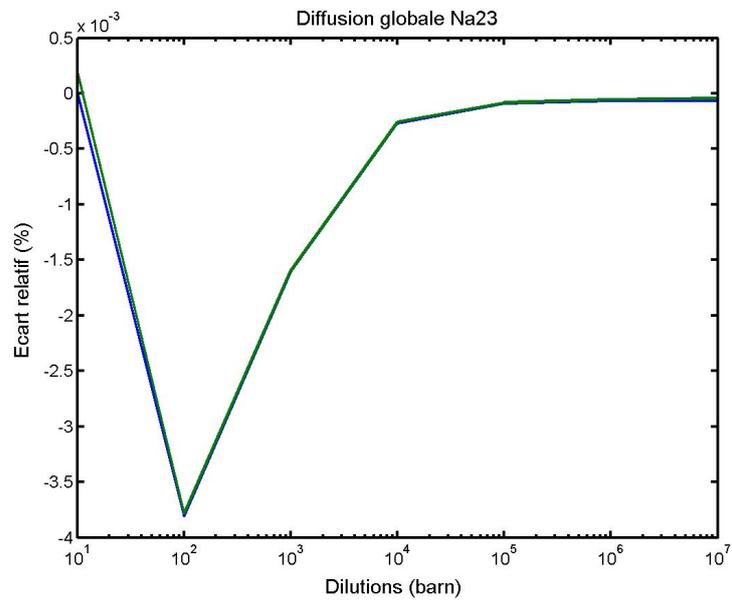


FIG. 8.32: Écart relatif sur le taux de diffusion du Na23 sur des problèmes de structure fine à différentes dilutions.

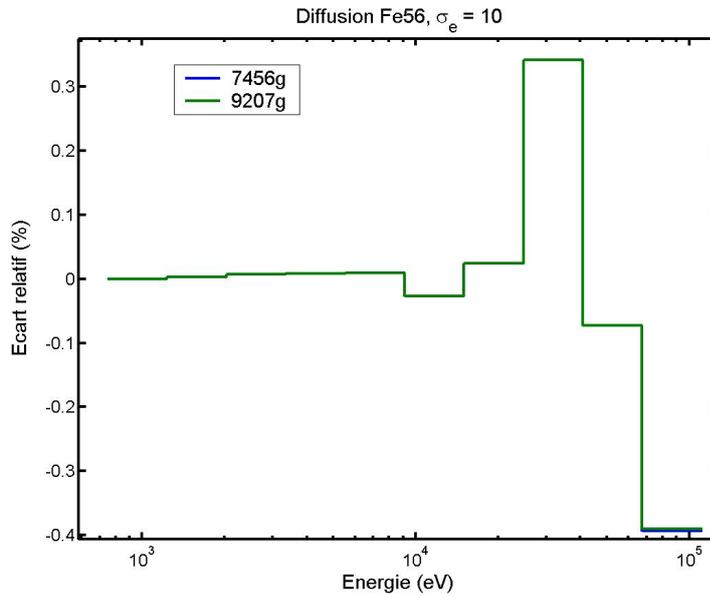


FIG. 8.33: Écart relatif sur le taux de diffusion du Fe56 sur un problème de structure fine à la dilution de 10 barns.

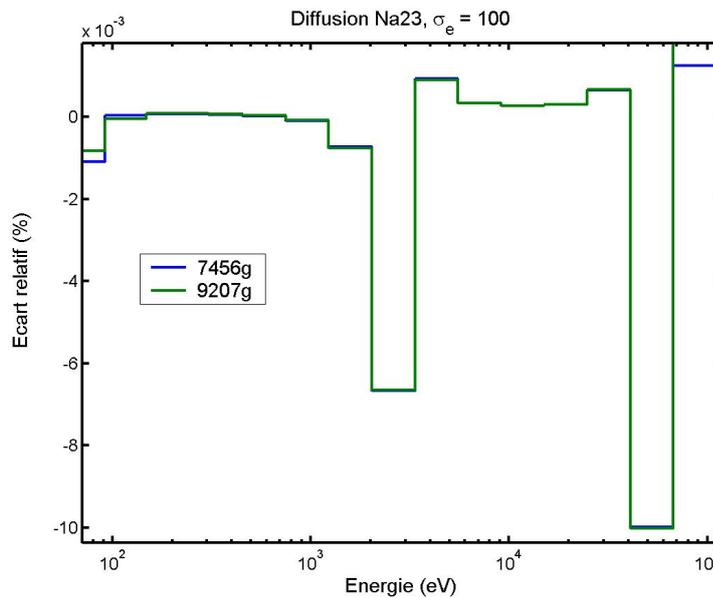


FIG. 8.34: Écart relatif sur le taux de diffusion du Na23 sur un problème de structure fine à la dilution de 100 barns.

8.3.4 Vérification finale de convergence multigroupe

D'après les études menées aux paragraphes 8.3.2 et 8.3.3 on peut conclure que le calcul multigroupe à 9207 groupes avec une autoprotection des sous-groupes garantit une précision équivalente au Monte Carlo ou solveur ponctuel de structure fine. Cette dernière étude vise à s'assurer que la précision des calculs est garantie pour tous les autres problèmes de la base de cas. Pour cela, une étude de convergence multigroupe est effectuée en utilisant comme référence les solutions multigroupes obtenues avec le maillage à 11895 groupes.

Les tableaux 8.14, 8.15 et 8.16 comparent les valeurs propres et les taux d'absorptions et de diffusion. On peut constater qu'avec le maillage à 9207 groupes les valeurs propres et les taux d'absorption ne s'écartent pas de la référence à 11895 groupes respectivement de plus de 1 pcm et 5 pcm. Les taux de diffusion présentent des écarts très faibles inférieurs à 0,003 %. On peut donc conclure que le maillage à 9207 groupes donne accès à une solution multigroupe de référence.

Cas	Calcul		
	5487g	9207g	11895g
Godiva	2.25917	2.25918	2.25918
Jezabel	2.97447	2.97447	2.97447
MOX 2040 à 294 K et TV = 0 %	1.14423	1.14430	1.14431
MOX 2040 à 294 K et TV = 50 %	1.16974	1.16983	1.16984
MOX 2040 à 294 K et TV = 100 %	1.20225	1.20237	1.20238
MOX 2040 à 900 K et TV = 0 %	1.12578	1.12588	1.12588
MOX 2040 à 900 K et TV = 50 %	1.15362	1.15373	1.15373
MOX 2040 à 900 K et TV = 100 %	1.18903	1.18916	1.18916
MOX 2040 évolué à 900 K	1.13815	1.13825	1.13825

TAB. 8.14: Valeurs propres des cas neutroniques pour différentes structures multigroupes. TV = taux de vide.

Cas	Calcul		
	5487g	9207g	11895g
Couverture fertile à 294 K	$1.36733 \cdot 10^5$	$1.36762 \cdot 10^5$	$1.36765 \cdot 10^5$
Couverture fertile à 900 K	$1.36734 \cdot 10^5$	$1.36762 \cdot 10^5$	$1.36765 \cdot 10^5$
Barre de contrôle B4C	$1.02268 \cdot 10^5$	$1.02270 \cdot 10^5$	$1.02270 \cdot 10^5$

TAB. 8.15: Taux d'absorption des cas neutroniques à source pour différentes structures multigroupes.

Cas	Calcul		
	5487g	9207g	11895g
Couverture fertile à 294 K	$89.54515 \cdot 10^5$	$89.56935 \cdot 10^5$	$89.57261 \cdot 10^5$
Couverture fertile à 900 K	$87.59234 \cdot 10^5$	$87.61764 \cdot 10^5$	$87.62023 \cdot 10^5$
Barre de contrôle B4C	$18.05383 \cdot 10^5$	$18.05417 \cdot 10^5$	$18.05418 \cdot 10^5$

TAB. 8.16: Taux de diffusion des cas neutroniques à source pour différentes structures multigroupes.

Chapitre 9

Optimisation et validation des maillages énergétiques

Dans ce chapitre nous abordons le problème de l'optimisation du maillage énergétique pour les méthodes d'autoprotection des sous-groupes et de Livolant-Jeanpierre. L'optimisation est réalisée en s'appuyant sur les résultats du chapitre 8, où on a établi que, grâce à un maillage à 9207 groupes et une autoprotection en sous-groupes, on dispose d'une solution multigroupe de référence équivalente au Monte Carlo.

Pour chaque méthode d'autoprotection, on présente d'abord une étude dans laquelle on choisit les caractéristiques des calculs d'autoprotection pour les problèmes à traiter, et ensuite la courbe de "performance", c'est à dire de la précision en fonction du nombre de groupes.

Comme l'optimisation du maillage énergétique est réalisée en milieu homogène infini, il est nécessaire de vérifier la précision du maillage sur des problèmes réels hétérogènes où le flux est anisotrope. Pour cela, un problème à valeur propre et un problème à source sont résolus avec APOLLO2. Ces deux tests permettront de juger l'approche adoptée pour l'optimisation du maillage énergétique.

9.1 Optimisation

L'optimisation du maillage énergétique est strictement liée au type d'opérateur de mise en groupe choisi. Pour le traitement des réacteurs rapides, on a effectué deux types d'études. La première emploie la même méthode des sous-groupes que le code APOLLO2 (traitement à isotope isolé), pour nous permettre par la suite de vérifier le binôme maillage optimisé - méthode d'autoprotection sur des problèmes hétérogènes et anisotropes réels. La deuxième analyse, en revanche, vise à définir la méthode d'autoprotection garantissant le meilleur ratio nombre de groupes - précision pour des applications à spectre rapide. Dans ce but, les méthodes suivantes ont été considérées :

- méthode des sous-groupes avec traitement en isotope isolé ou en mélange ;
- méthode Livolant-Jeanpierre, résolvant un problème de structure fine ou un problème à source, avec les options d'autoprotection des taux de transfert et du traitement en isotope isolé ou en mélange.

Chacune de ces deux études est constituée des étapes suivantes : la dégradation de l'opérateur de mise en groupe par rapport au calcul de référence et l'optimisation de différents maillages énergétiques pour analyser le ratio nombre de groupes - précision.

Dans la première phase, on définit la liste des noyaux, les domaines énergétiques et le type de modèle d'autoprotection. Comme les calculs d'autoprotection dans le code de transport sont assez coûteux, on essaye de réduire le plus possible à la fois le nombre de noyaux

à traiter et les domaines énergétiques d'application de la méthode.

Une fois défini l'opérateur approché de mise en groupe, dans la deuxième phase, on optimise différents maillages énergétiques pour tracer la courbe précision du calcul en fonction du nombre de groupes. Pour cette étude, on a procédé du maillage le plus grossier vers le maillage le plus fin en fixant les bornes du maillage grossier précédemment optimisé. De cette manière, les maillages résultant s'emboîtent les uns dans les autres, caractéristique qui peut s'avérer utile pour des calculs multigroupes à plusieurs niveaux.

L'intérêt de l'optimisation réside dans la minimisation du nombre de groupes afin de disposer de bibliothèques multigroupes peu coûteuses en espace mémoire permettant des calculs multigroupes de transport performants.

L'ensemble des structures multigroupes générées pourra trouver des applications différentes. Les maillages énergétiques les plus grossiers pourront être employés pour des calculs industriels de production, la rapidité d'exécution de la simulation étant prioritaire devant la précision, car le nombre de calculs neutroniques à effectuer est élevé. En revanche les autres pourront être utilisés lors des calculs plus spécifiques, exigeant une discrétisation énergétique fine, et pourront être couplés aux maillages plus grossiers dans un schéma à plusieurs niveaux.

L'ensemble de cette étude nécessitera des comparaisons entre les solutions du code TRI-POLI4 et AEMC avec les différents maillages multigroupes. Les comparaisons par groupe sont présentées en condensant les solutions avec le maillage à 33 groupes ECCO, commun à l'ensemble des maillages générés.

9.1.1 Opérateur approché de transport avec l'autoprotection en sous-groupes à isotope isolé

Modèle de mise en groupe

Cette première étude vise à définir les conditions d'application de la méthode des sous-groupes à isotope isolé. Les noyaux autoprotégés correspondent à ceux qui contribuent à plus de 95 % au taux d'absorption et de diffusion dans chaque composition de la base de cas. On a autoprotégé ces noyaux sur tout l'axe énergétique, hors domaine non résolu si nécessaire, de façon à effectuer des calculs multigroupes cohérents avec les simulations TRI-POLI4 sans tables de probabilité. Le spectre de fission est décrit avec un seul macrogroupe pour les énergies incidentes du neutron.

Avec cette modélisation, on a rencontré des désaccords entre les solutions multigroupes et Monte Carlo, surtout pour les noyaux légers comme le sodium 23 et le fer 56, même s'ils ne présentent pas de domaine non résolu. Pour comprendre l'origine du problème, on a analysé les facteurs d'autoprotection (rapport entre la section autoprotégée et la section moyenne dans le groupe) du nouveau calcul et celui de référence. Ces deux simulations diffèrent d'une part par le traitement des noyaux résonnants, qui est itérative dans le premier cas et en mélange dans le deuxième, d'autre part pour le type de données utilisées, qui sont les tables de probabilité pour le premier et les sections ponctuelles NJOY pour le deuxième. Comme les facteurs d'autoprotection étaient analogues et proches de l'unité, l'origine de l'incohérence provenait d'une section moyenne différente. Pour corriger on a procédé à une renormalisation des tables de probabilité de façon à garantir une moyenne égale à la section multigroupe NJOY quand l'écart est supérieur à 0,1 %. Les figures 9.1, 9.2 et 9.3 montrent la modification des écarts absolus sur le taux de diffusion du sodium 23, du fer 56 et de l'oxygène 16 avec et sans la renormalisation des tables de probabilité.

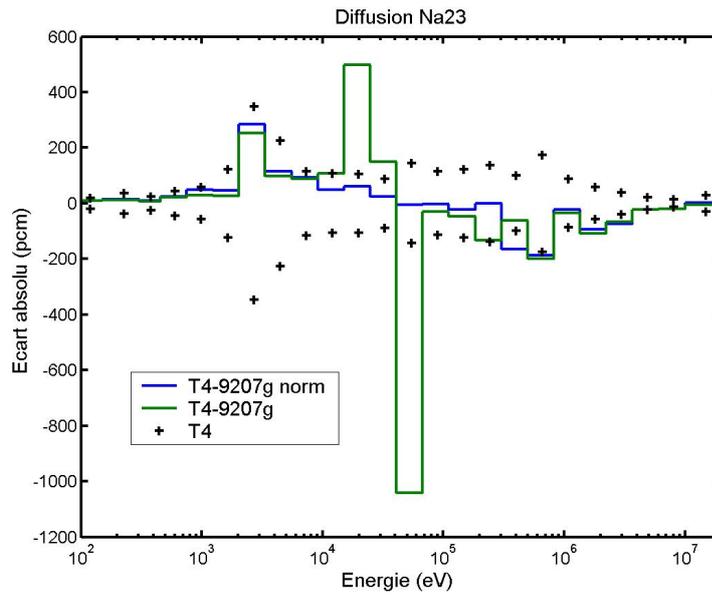


FIG. 9.1: Écart absolu sur le taux de diffusion pour le Na23. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC dans le cas de la couverture fertile à une température de 900 K. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

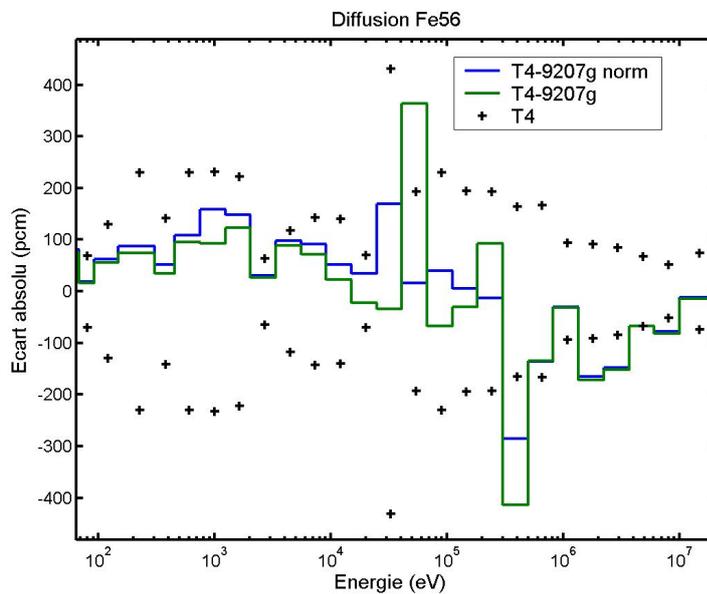


FIG. 9.2: Écart sur le taux de diffusion pour le Fe56. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC dans le cas de la couverture fertile à une température de 900 K. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

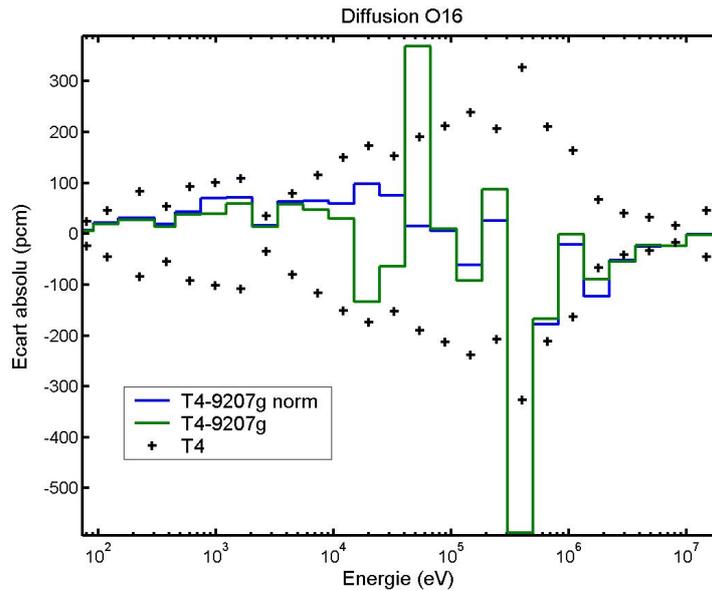


FIG. 9.3: Écart absolu sur le taux de diffusion pour l'O16. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC dans le cas de la couverture fertile à une température de 900 K. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

Spectre de fission

La deuxième approximation apportée dans la modélisation concerne la description du spectre de fission avec un seul groupe d'énergies incidentes. Les figures 9.4 et 9.5 montrent l'impact de cette approximation sur le taux de production du plutonium 239 et de l'uranium 238. Cette modélisation approchée amène dans ce cas à sous-estimer les taux de production, surtout à haute énergie où les taux des réactions à seuil seront *a priori* les plus affectés. Ainsi la figure 9.6 montre que cette approximation induit des écarts importants dans les mêmes domaines énergétiques sur les taux de réaction d'autres noyaux, comme le taux de diffusion du fer 56. Comme dans le code APOLLO2 il n'y est pas possible d'améliorer la description du spectre de fission, hormis le calcul itératif du spectre [Mounier et Normand, 2008], on ne peut que s'adapter à cette approximation.

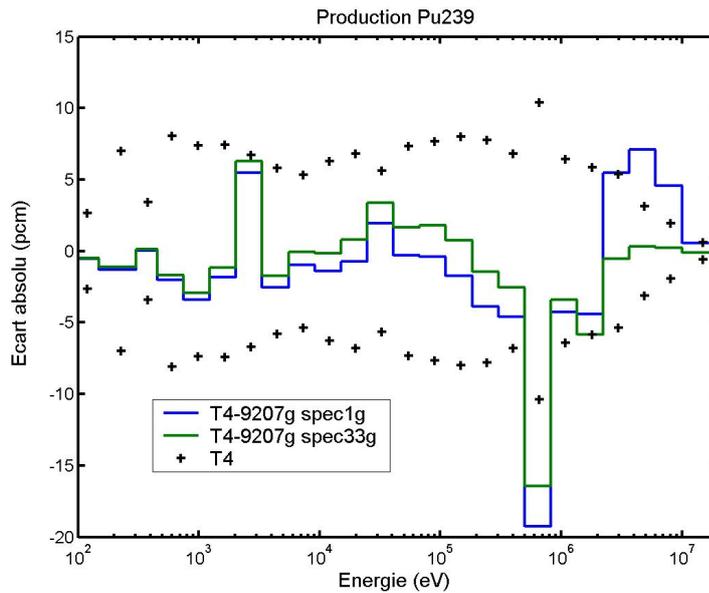


FIG. 9.4: Écart absolu sur le taux de production pour le Pu239. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC avec une représentation du spectre de fission à 1 et 33 macrogroupes pour le cas MOX 2040 à taux de vide 100 % et une température de 900 K. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

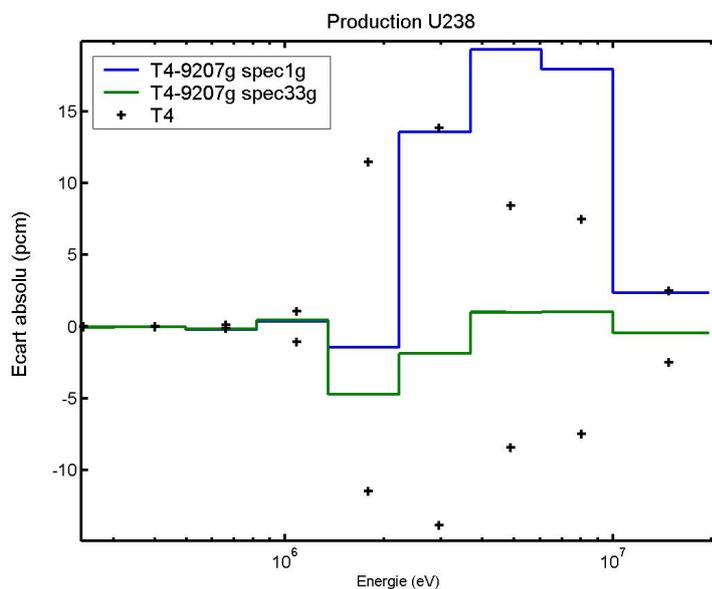


FIG. 9.5: Écart absolu sur le taux de production pour l'U238. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC avec une représentation du spectre de fission à 1 et 33 macrogroupes pour le cas MOX 2040 à taux de vide 100 % et une température de 900 K. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

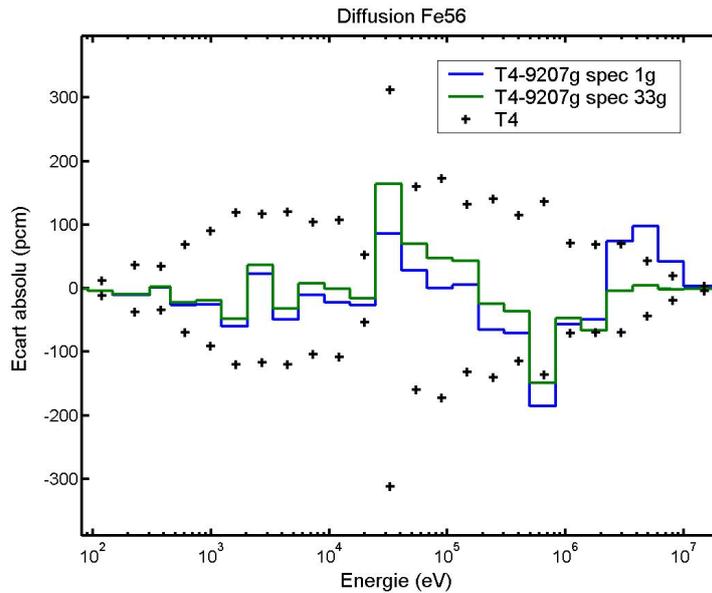


FIG. 9.6: Écart absolu sur le taux de diffusion pour le Fe56. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC avec une représentation du spectre de fission à 1 et 33 macro-groupes pour le cas MOX 2040 à taux de vide 100 % et une température de 900 K. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

9.1.2 Étude de la courbe de performance précision-nombre de groupes pour la méthode des sous-groupes à isotope isolé

On a étudié la variation de la précision en fonction du nombre de groupes pour la méthode des sous-groupes à isotope isolé. Pour chaque maillage énergétique étudié, une optimisation avec AEMC a été effectuée en utilisant les conditions du calcul multigroupe décrites au paragraphe 9.1.1. La figure 9.7 montre que l'asymptote de la courbe est atteinte entre 1200 et 2000 groupes. On a donc décidé de comparer les taux de réaction des maillages à 1200 et 1550 groupes par rapport aux solutions Monte Carlo. Les raisons de ce choix viennent du fait que c'est à partir de ces structures multigroupes que les conditions pour appliquer la méthode des sous-groupes deviennent en pratique vérifiées. En effet, pour une largeur moyenne en léthargie des groupes d'environ $1/120$ entre 100 eV et 3 MeV il faut 1229 groupes et entre 100 eV et 20 MeV 1525 groupes.

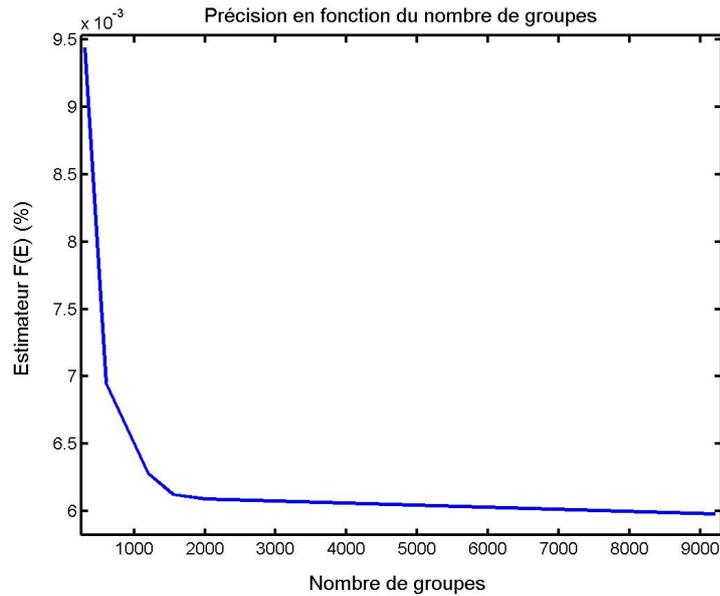


FIG. 9.7: Courbe de performance de la méthode des sous-groupes à isotope isolé : précision en fonction du nombre de groupes.

Validation du cas MOX 2040 à taux de vide 100 %

Les tableaux 9.1 et 9.2 montrent les valeurs propres et les taux intégraux de l'uranium 238, du plutonium 239, du fer 56, du sodium 23 et de l'oxygène 16 pour le cas MOX 2040 à taux vide 100 % et pour une température de 900 K. Ces noyaux ont été choisis parce qu'ils contribuent pour plus de 90 % à l'absorption et à la diffusion. On peut observer que les valeurs propres et les taux de réaction globaux de la plupart des noyaux rentrent dans les barres d'erreur à trois écarts-types de la simulation Monte Carlo. La seule exception est le taux de production de l'uranium 238 qui sort des barres à trois écarts-types à cause de la mauvaise représentation du spectre de fission (cf. 9.1.1).

Calcul	keff
1200g	1.18833 ($-36 \cdot 10^{-5}$)
1500g	1.18830 ($-39 \cdot 10^{-5}$)
TRIPOLI4	1.18869 $\pm 35 \cdot 10^{-5}$

TAB. 9.1: Coefficients de multiplications effectifs de TRIPOLI4 et de AEMC. Les valeurs de référence sont présentées avec un intervalle de confiance d'un écart-type. Entre parenthèses on montre l'écart absolu.

Réaction	Calcul		
	TRIPOLI4	1200g	1550g
Absorption U238	45057 ±17	45059 (-0.12)	45066 (-0.53)
Absorption Pu239	30740 ±11	30746 (-0.54)	30745 (-0.45)
Diffusion U238	1567561 ±474	1567130 (0.72)	1567446 (0.29)
Diffusion Fe56	1257452 ±401	1258697 (-3.1)	1258632 (-2.94)
Diffusion O16	1245428 ±359	1245459 (-0.09)	1245863 (-1.21)
Production Pu239	70197 ±22	70208 (-0.5)	70205 (-0.36)
Production U238	14040 ±7	13990 (7.14)	13989 (7)
Production Pu241	17731 ±6	17734 (-0.5)	17735 (-0.67)

TAB. 9.2: Taux de réactions globaux de TRIPOLI4 et de AEMC. Les valeurs de référence sont présentées avec un intervalle de confiance d'un écart-type. Entre parenthèses on note l'erreur en unité d'écart-type.

Les figures de 9.8 à 9.17 montrent la distribution en énergie des écarts absolus et relatifs d'absorption et de diffusion de l'uranium 238, d'absorption du plutonium 239, de diffusion de l'oxygène 16 et de diffusion du fer 56 pour le cas MOX 2040 à un taux vide 100 % et une température de 900 K. Les résultats sont en accord avec la simulation Monte Carlo, sauf au-dessus de 3 MeV à cause de la mauvaise représentation du spectre de fission et autour de 1 MeV, zone dans laquelle la solution de référence était déjà en désaccord avec la simulation Monte Carlo (cf. 8.3.2). En général, le maillage à 1200 groupes présente des erreurs à la limite des barres d'erreur de la solution de référence Monte Carlo.

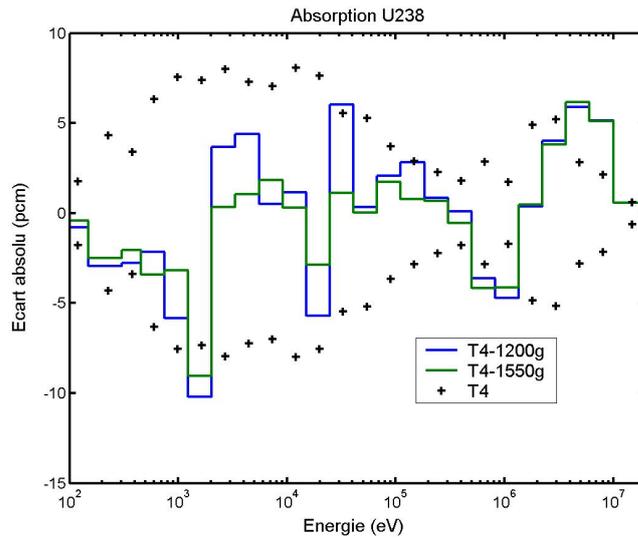


FIG. 9.8: Écart absolu sur le taux d'absorption pour l'U238. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

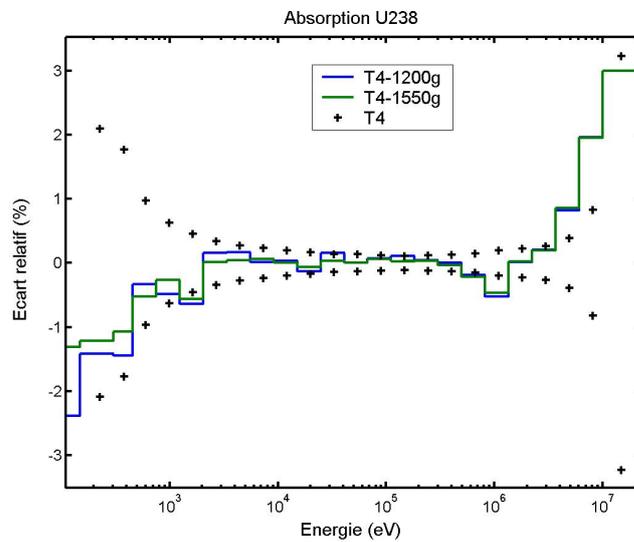


FIG. 9.9: Écart relatif sur le taux d'absorption pour l'U238. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

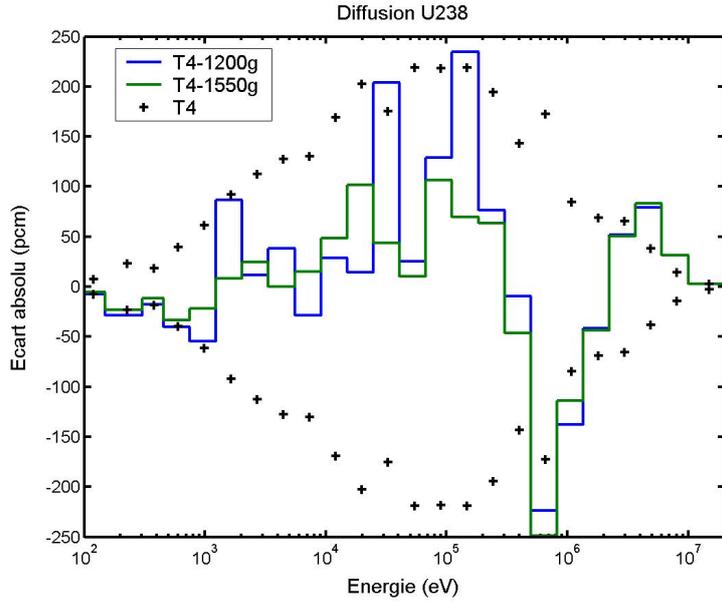


FIG. 9.10: Écart absolu sur le taux de diffusion pour l'U238. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

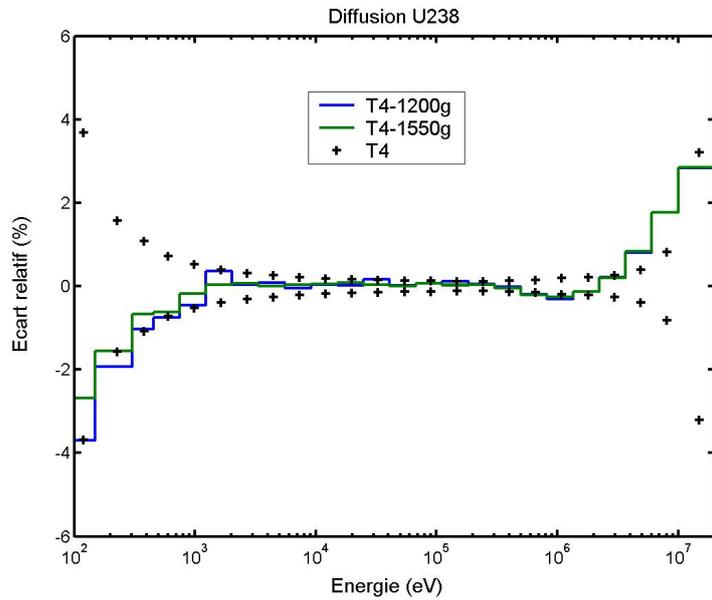


FIG. 9.11: Écart relatif sur le taux de diffusion pour l'U238. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

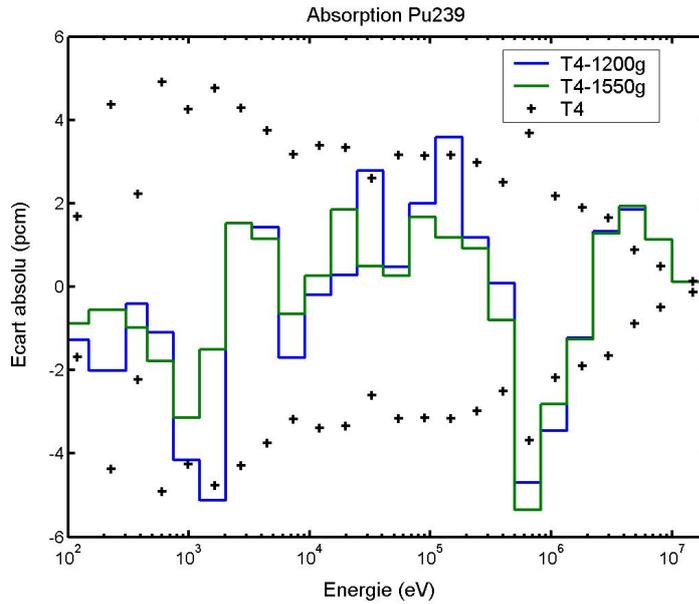


FIG. 9.12: Écart absolu sur le taux d'absorption pour le Pu239. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

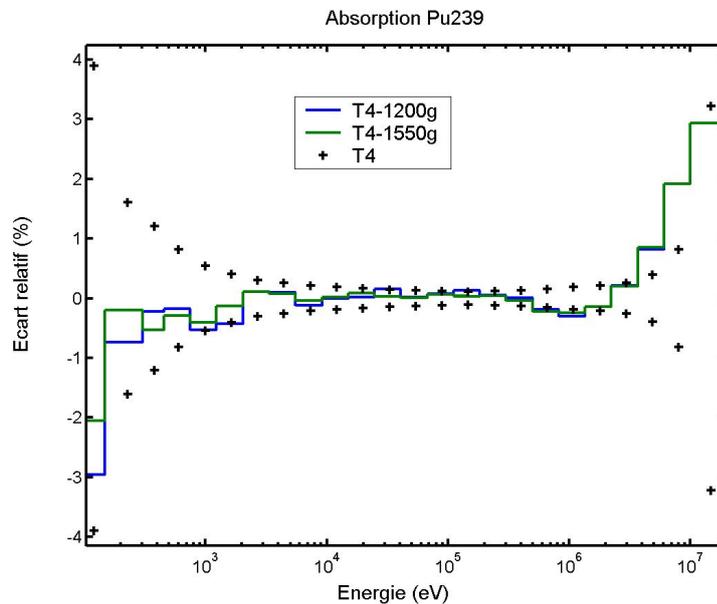


FIG. 9.13: Écart relatif sur le taux d'absorption pour le Pu239. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

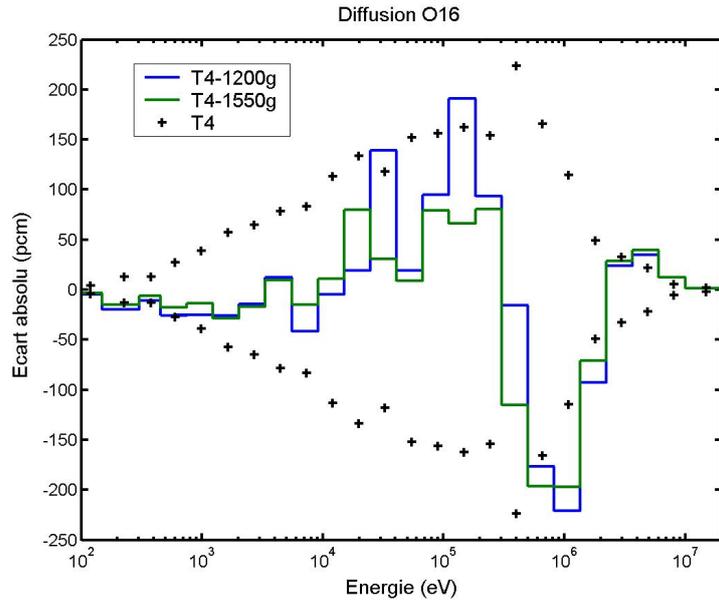


FIG. 9.14: Écart absolu sur le taux de diffusion pour l'O16. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

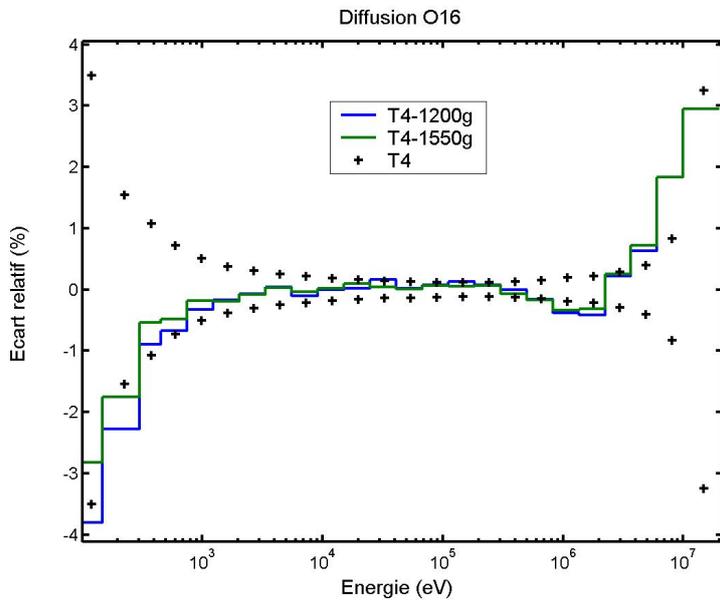


FIG. 9.15: Écart relatif sur le taux de diffusion pour l'O16. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

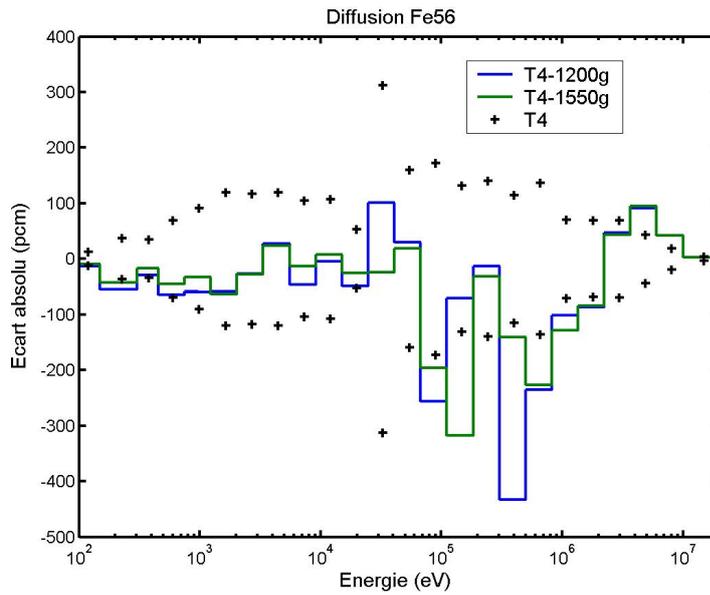


FIG. 9.16: Écart absolu sur le taux de diffusion pour le Fe56. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

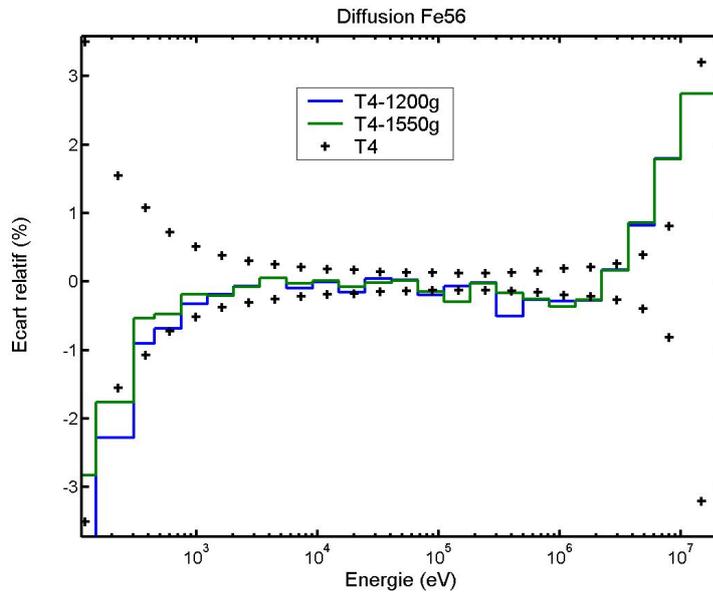


FIG. 9.17: Écart relatif sur le taux de diffusion pour le Fe56. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

Validation de la couverture fertile

Le tableau 9.3 montre pour la température de 900 K les taux intégraux d'absorption et de diffusion pour l'uranium 238, de diffusion pour l'oxygène 16, pour le fer 56 et pour le sodium 23 sur le problème de ralentissement dans la couverture fertile. Ces noyaux ont été choisis parce qu'ils contribuent à plus de 90 % de l'absorption et de la diffusion. On observe que les solutions à 1200 groupes rentrent dans les barres d'erreur à deux écarts-types de la référence Monte Carlo, alors que les solutions à 1550 groupes ne s'écartent pas de plus d'un écart-type.

Réaction	Calcul		
	TRIPOLI4	1200g	1550g
Absorption U238	112240 ±43	112157 (1.93)	112225 (0.34)
Diffusion U238	2620367 ±870	2618784 (1.82)	2620693 (-0.37)
Diffusion Fe56	1933429 ±692	1933652 (-0.32)	1933770 (-0.49)
Diffusion O16	1657842 ±550	1657330 (0.93)	1658284 (-0.8)
Diffusion Na23	1288125 ±460	1287325 (1.73)	1288119 (0.01)

TAB. 9.3: Taux de réactions globaux de TRIPOLI4 et de AEMC. Les valeurs de référence sont présentées avec un intervalle de confiance d'un écart-type. Entre parenthèses on note l'erreur en unité d'écart-type.

Les figures de 9.18 à 9.27 montrent les écarts absolus et relatifs par groupe sur les taux d'absorption et de diffusion de l'uranium 238, de diffusion de l'oxygène 16, de diffusion du fer 56 et de diffusion du sodium 23. L'accord avec la solution Monte Carlo est meilleur avec le maillage à 1550 groupes qu'avec celui à 1200 groupes, mais les deux solutions multigroupes ne s'écartent pas plus de 1 % de la solution Monte Carlo.

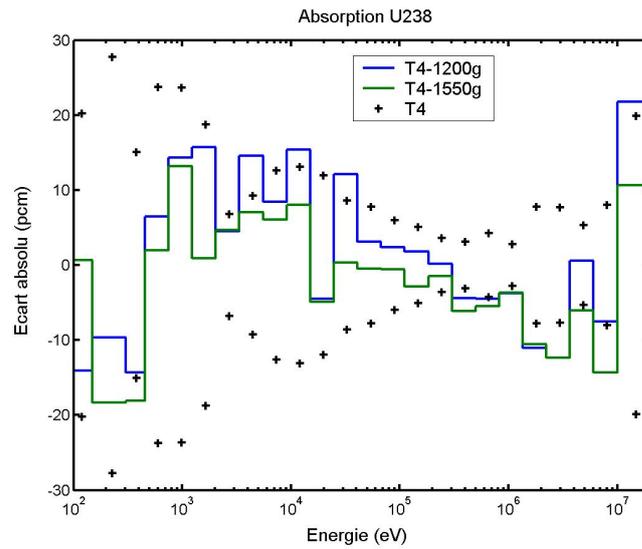


FIG. 9.18: Écart absolu sur le taux d'absorption pour l'U238. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

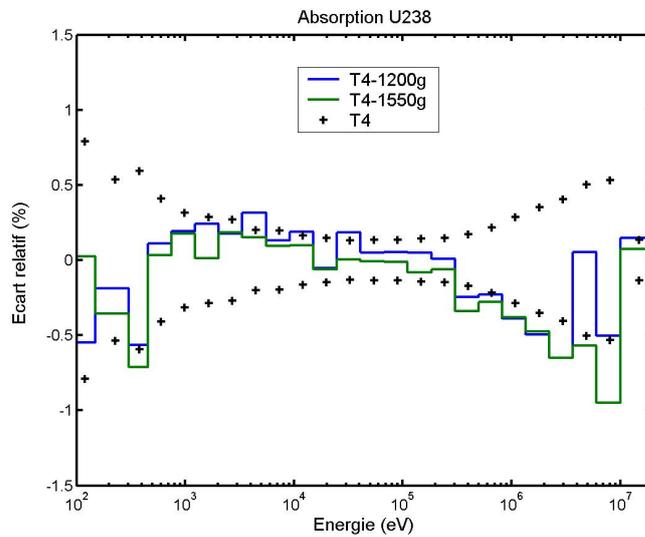


FIG. 9.19: Écart relatif sur le taux d'absorption pour l'U238. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

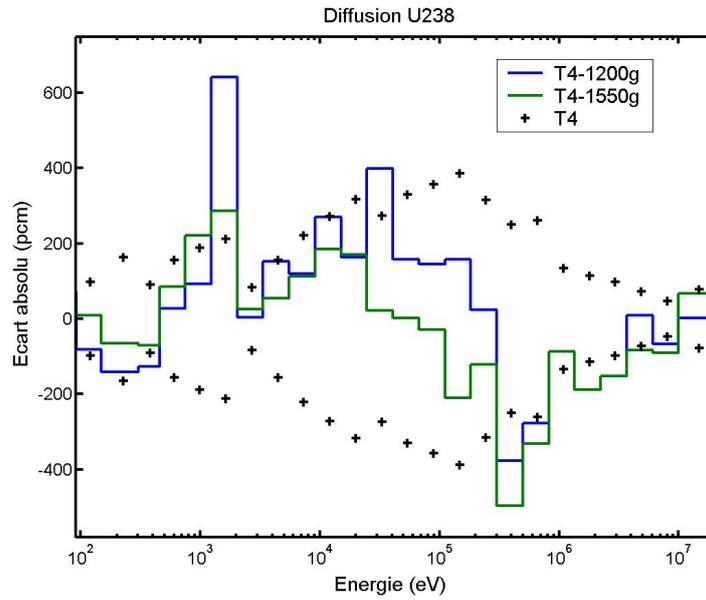


FIG. 9.20: Écart absolu sur le taux de diffusion pour l'U238. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

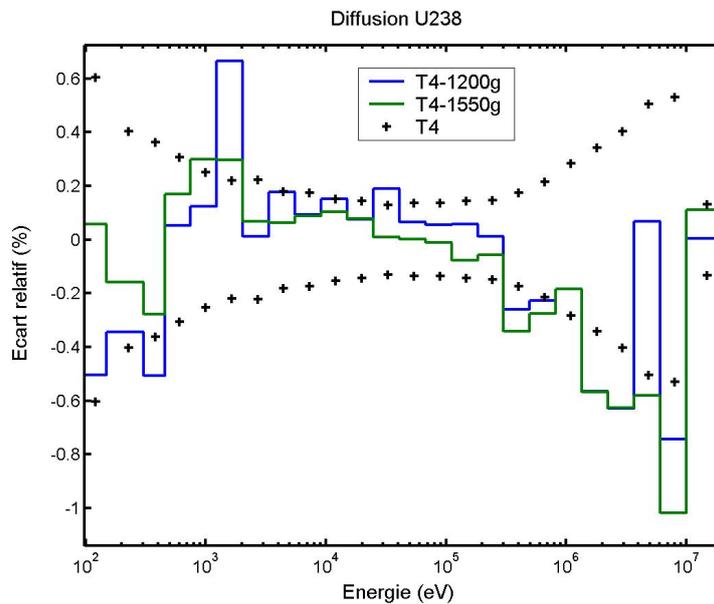


FIG. 9.21: Écart relatif sur le taux de diffusion pour l'U238. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

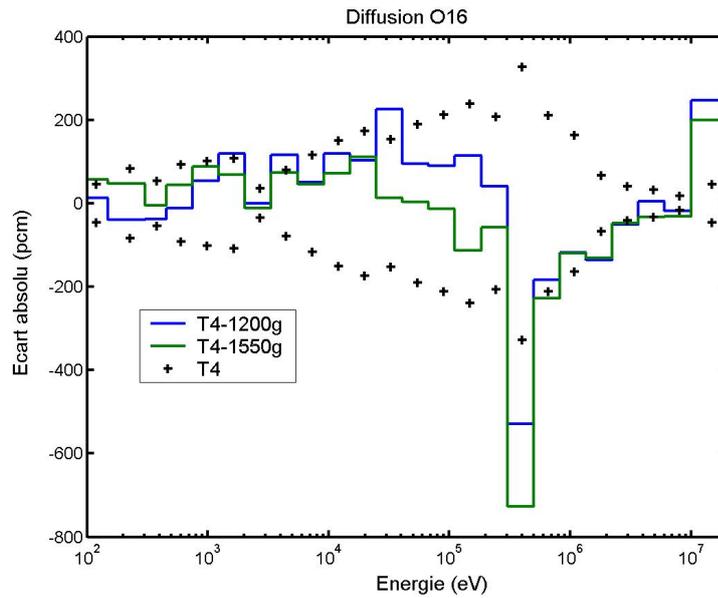


FIG. 9.22: Écart absolu sur le taux de diffusion pour l'O16. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

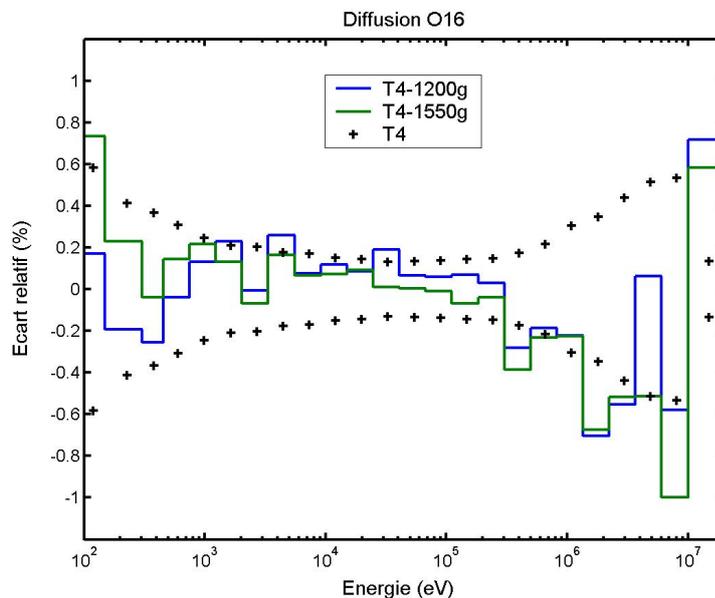


FIG. 9.23: Écart relatif sur le taux de diffusion pour l'O16. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

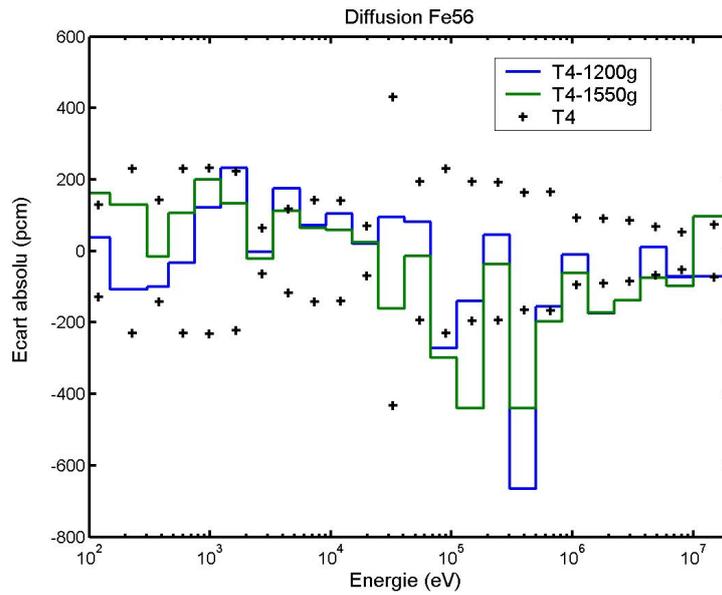


FIG. 9.24: Écart absolu sur le taux de diffusion pour le Fe56. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

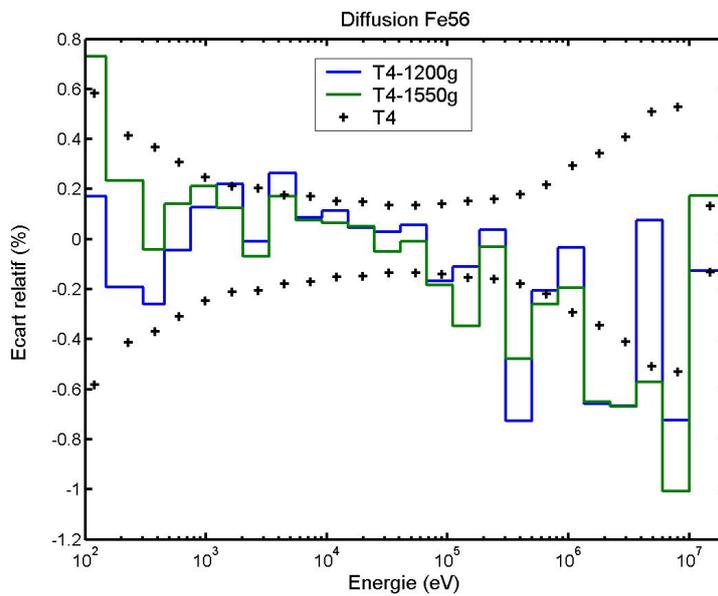


FIG. 9.25: Écart relatif sur le taux de diffusion pour le Fe56. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

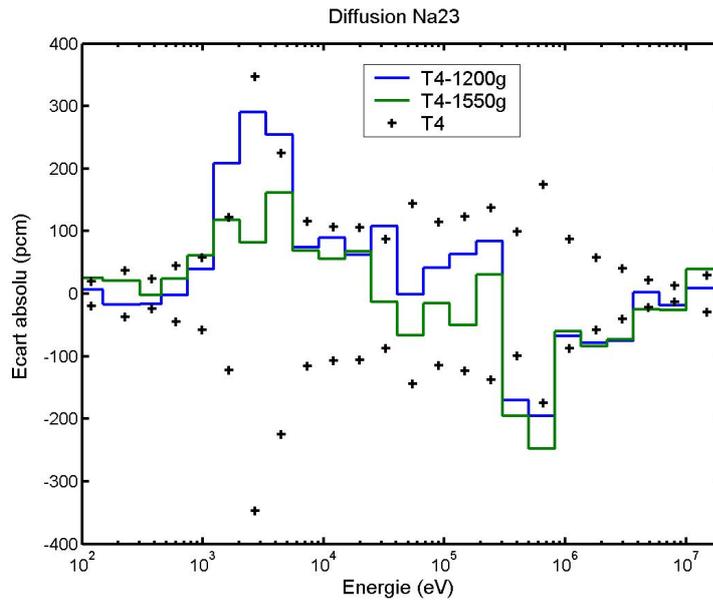


FIG. 9.26: Écart absolu sur le taux de diffusion pour le Na23. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

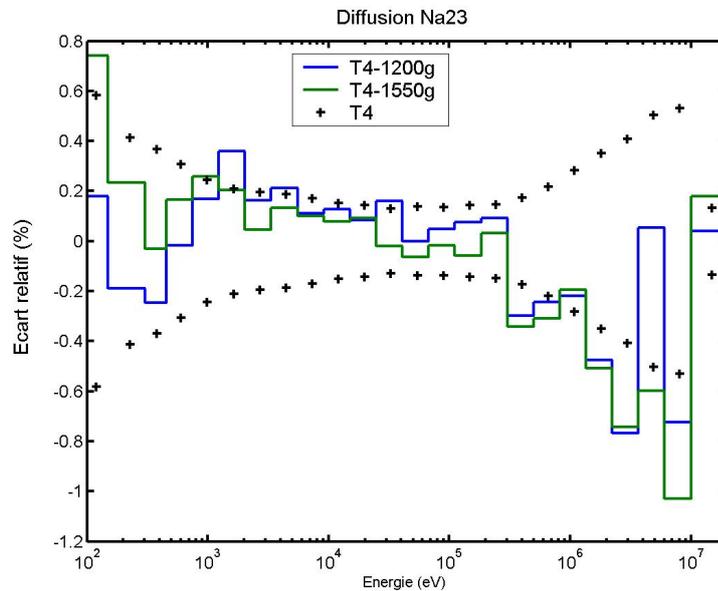


FIG. 9.27: Écart relatif sur le taux de diffusion pour le Na23. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

9.1.3 Choix de la méthode optimale d'autoprotection

Première étude

Les deux études suivantes visent à définir la stratégie optimale d'autoprotection pour la problématique des réacteurs RNR-sodium. Pour cela une première étude est effectuée sur une série de problèmes de ralentissement dans différents mélanges binaires de noyaux. La source est uniforme et unitaire dans l'intervalle compris entre 273 et 302 keV. Les compositions choisies, sauf la dernière, présentent un noyau résonnant et un noyau non résonnant dans le domaine énergétique traité. Les concentrations du modérateur correspondent aux dilutions de 100, 1000 et 10^4 barns. Les calculs sont effectués sur le maillage à 172 groupes XMAS avec les méthodes :

- de Livolant-Jeanpierre à isotope isolé, en résolvant l'équation de structure fine et avec l'option d'autoprotection des taux de transfert,
- de Livolant-Jeanpierre à isotope isolé, en résolvant un problème à source et avec l'option d'autoprotection des taux de transfert,
- des sous-groupes à isotope isolé.

Ces trois calculs d'autoprotection sont réalisés avec trois itérations. Pour évaluer l'erreur de calcul entre ces trois méthodes, on utilise un calcul de référence avec le maillage UNIVSH à 11513 groupes et une autoprotection en sous-groupes à isotope isolé.

Le tableau 9.4 montre les estimateurs de ces différentes simulations. On constate que la méthode Livolant-Jeanpierre, résolvant un problème de structure fine, donne les meilleurs résultats sur les mélanges U238-H1 et U238-O16. Ce test confirme le bon ratio nombre de groupes - précision de cette méthode pour les situations neutroniques de réacteur thermique, où le gain par rapport à une méthode des sous-groupes est de l'ordre d'un facteur² 100. L'emploi de l'autoprotection des taux de transfert garantit le même gain en permettant un choix plus arbitraire des bornes du maillage énergétique (cf. 7.5.1).

Les calculs avec la méthode des sous-groupes sont moins précis sur les mélanges avec un noyau résonnant lourd que sur les mélanges avec un noyau résonnant léger. Ce résultat s'explique par le fait que l'augmentation de la perte moyenne d'énergie par choc, en passant d'un noyau lourd à un noyau léger, permet de satisfaire les hypothèses des sous-groupes (cf. 5.1.2) sur des maillages de plus en plus grossiers.

Finalement, on analyse les résultats de la nouvelle méthode Livolant-Jeanpierre, basée sur la résolution d'un problème à source. Ce nouveau modèle d'autoprotection a été conçu pour pallier aux insuffisances de la méthode Livolant-Jeanpierre employant en situation RNR des taux de référence, issus d'un problème de structure fine, incluant même l'autoprotection des taux de transfert (cf. 6.4). Cette nouvelle méthode donne des résultats aussi précis que la méthode Livolant-Jeanpierre résolvant un problème de structure fine, si le modérateur présente une section lentement variable (hydrogène ou oxygène) et des résultats plus précis si le modérateur est résonnant (sodium 23). Cet effet est le résultat d'une meilleure modélisation du noyau du transfert des isotopes modérateurs.

²Dans une cellule UOX modérée à eau, un calcul à 11276 groupes avec une autoprotection en sous-groupes et un calcul à 172 groupes avec une autoprotection Livolant-Jeanpierre présentent des écarts inférieurs au pour cent sur les taux de réaction.

Mélange	$F(E)$ [%]		
	LJ STF	LJ SRC	SG
U238 - H1	0.0006	0.0014	0.0239
U238 - O16	0.0168	0.0261	0.0736
Fe56 - O16	0.00547	0.00547	0.00549
Fe56 - Na23	0.2212	0.0035	0.2257

TAB. 9.4: Estimateurs $F(E)$ appliqués sur des calculs à source avec différents mélanges binaires de noyaux. On utilise la convention suivante : LJ STF = méthode Livolant-Jeanpierre résolvant un problème de structure fine, LJ SRC = méthode Livolant-Jeanpierre résolvant un problème à source et SG = méthode des sous-groupes. Pour toutes ces méthodes l'approximation isotope isolé est faite.

Deuxième étude

Pour le deuxième test, on a considéré, à une température de 900 K, le problème critique avec le MOX 2040 à taux de vide 100 % et le problème à source dans la couverture fertile. Le spectre de fission est décrit avec un seul macrogroupe d'énergies incidentes. La liste des noyaux autoprotégés et la modélisation de la source de fission sont les mêmes qu'au paragraphe 9.1.1, tandis que les méthodes d'autoprotection considérées sont : sous-groupes et Livolant-Jeanpierre résolvant un problème de structure fine ou un problème à source avec l'option d'autoprotection des taux de transfert.

Les noyaux résonnants sont traités soit en mélange soit par itérations. Dans le premier cas, on a regroupé les noyaux par ordre d'importance du taux d'absorption et de diffusion dans des ensembles ne contenant pas plus de sept noyaux pour des raisons de temps de calcul. On trouve dans le tableau 9.5 pour chaque domaine énergétique les différents regroupements de noyaux. Dans le deuxième cas, les noyaux sont traités par ordre décroissant du taux d'absorption et de diffusion, le nombre d'itérations est égal à trois et les intervalles énergétiques d'autoprotection correspondent aux domaines résolus des noyaux. Pour chacune de ces options d'autoprotection, un maillage énergétique à 300 groupes a été optimisé avec AEMC.

Le tableau 9.6 montre l'estimateur de ces différentes simulations évalué par rapport aux calculs de référence à 9207 groupes (cf. 8.3.2). On constate que les calculs les plus précis sont obtenus avec la nouvelle méthode d'autoprotection. Les trois méthodes donnent des résultats de précision comparable avec un traitement à isotope isolé. Le traitement en mélange n'apporte pas d'améliorations pour la méthode de Livolant-Jeanpierre, résolvant un problème de structure fine, et pour la méthode des sous-groupes, alors qu'une augmentation de la précision est obtenue avec la méthode de Livolant-Jeanpierre, résolvant un problème à source. De ces tests numériques on peut donc tirer les conclusions suivantes :

- pour la méthode Livolant-Jeanpierre résolvant un problème de structure fine, l'approximation sur le noyau de transfert des isotopes modérateurs est plus importante que la non-prise en compte du recouvrement des résonances ;
- pour la méthode des sous-groupes, les tables de probabilité sont calculées sur un maillage trop grossier pour les rendre d'ordre unitaire et donc de permettre le calcul des probabilités conditionnelles équivalentes à l'hypothèse statistique (cf. 3.3.2).

La méthode Livolant-Jeanpierre résolvant un problème à source permet donc des calculs plus précis car elle prend en compte la contribution du transfert des noyaux modérateurs et utilise des tables de probabilité calculées sur le maillage fin de référence.

Cas	Mélange	Domaine énergétique
Problème à valeur propre TV = 100 %	Fe56, O16, Ni58, Cr52, Ni60, Fe54	20 keV - 8 MeV
	Cr53, Mn55	20 keV - 8 MeV
	U238, Fe56, Ni58	5.7 keV - 20 keV
	U238, Pu240, Fe56, Ni58	2.5 keV - 5,7 keV
	U238, Pu239, Pu240, Fe56, Ni58	1.15 keV - 2.5 keV
	U238, Pu239, Pu240, Ni58, Pu242	0.5 keV - 1.15 keV
	U238, Pu239, Pu240, Pu238, Ni58, Pu242	0.3 keV - 0.5 keV
	U238, Pu239, Pu240, Pu238, Pu241, Ni58, Pu242	0.1 keV - 0.3 keV
	Cr52, Ni60, Fe54, Cr53, Mn55	0.1 keV - 20 keV
Couverture fertile	Fe56, O16, Na23, Ni58, Cr52, Ni60	20 keV - 8 MeV
	Fe54, Cr53, Mn55	20 keV - 8 MeV
	U238, Fe56, Na23, Ni58, Cr52, Ni60	20 eV - 20 keV
	Fe54, Cr53, Mn55	20 eV - 20 keV

TAB. 9.5: Domaine et regroupement des noyaux pour les méthodes d'autoprotection avec l'option du mélange.

$F(E)$ [%]					
LJ STF		LJ SRC		SG	
ISI	MIX	ISI	MIX	ISI	MIX
0.0057	0.0071	0.0052	0.0028	0.0061	0.0064

TAB. 9.6: Estimateurs $F(E)$ relatifs au calcul à valeur propre du cas MOX 2040 avec TV=100 % et au calcul à source dans la couverture fertile, les deux à la température de 900 K. On utilise la convention suivante : LJ STF = méthode Livolant-Jeanpierre résolvant un problème de structure fine, LJ SRC = méthode Livolant-Jeanpierre résolvant un problème à source, SG = méthode des sous-groupes, ISI = isotope isolé et MIX = mélange.

9.1.4 Étude de la courbe de performance nombre de groupes - précision avec la méthode Livolant-Jeanpierre résolvant un problème à source

Suite aux études sur les différentes méthodes d'autoprotection du paragraphe précédent, nous avons optimisé différents maillages énergétiques avec AEMC pour la méthode Livolant-Jeanpierre, résolvant un problème à source, avec les options des mélanges et des taux de transfert autoprotégés. Les conditions du calcul multigroupe pour toutes les optimisations correspondent à celles décrites au paragraphe 9.1.3.

La figure 9.28 compare les courbes de performance nombre de groupes - précision pour la méthode de Livolant-Jeanpierre, notée LJ SRC MIX TR, résolvant un problème à source, avec les options des mélanges et des taux de transfert autoprotégés, et la méthode des sous-groupes à isotope isolé, notée SG ISI.

On peut noter que cette dernière méthode est moins sensible à la discrétisation énergétique que la méthode des sous-groupes à isotope isolé, car l'approximation sur le noyau de transfert des isotopes modérateurs est moins contraignante que l'hypothèse de non corrélation des sources et des sections de la méthode des sous-groupes.

On peut aussi observer qu'à **précision fixée cette nouvelle méthode nécessite deux fois moins de groupes que la méthode des sous-groupes à isotope isolé**. Comme à partir des maillages à 1200 et à 1550 groupes les erreurs sur les taux de réactions rentrent dans les barres d'erreur des simulations Monte Carlo (cf. 9.1.2), on a vérifié que les mêmes résultats peuvent être atteints avec les maillages à 600 et 800 groupes grâce à cette nouvelle méthode d'autoprotection.

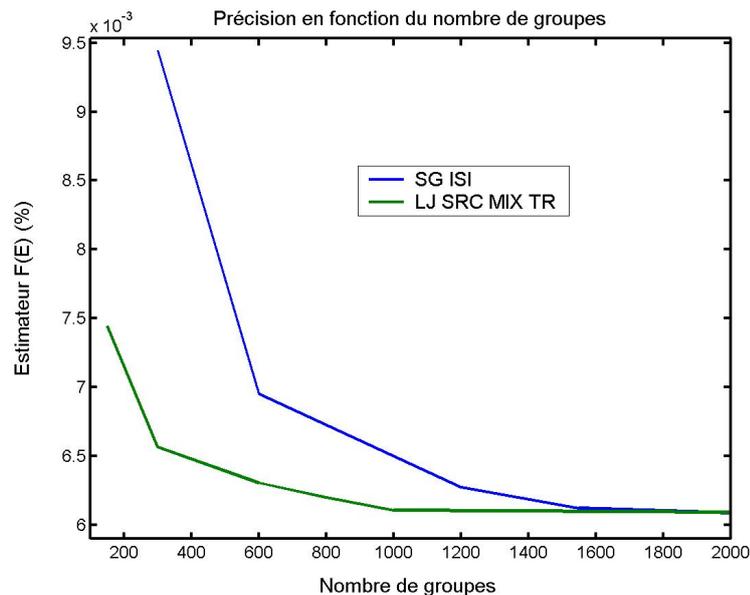


FIG. 9.28: Comparaison des courbes de performance de la méthode des sous-groupes à isotope isolé (SG ISI) et de la méthode Livolant-Jeanpierre résolvant un problème à source avec les options des mélanges et des taux de transfert autoprotégés (LJ SRC MIX TR).

Validation du cas MOX 2040 à taux de vide 100 %

Les tableaux 9.7 et 9.8 montrent les valeurs propres et les taux intégraux d'absorption et de diffusion de l'uranium 238, d'absorption du plutonium 239, de diffusion de l'oxygène 16 et du fer 56 pour une température de 900 K sur le cas MOX 2040 à taux de vide 100 %. Les noyaux choisis contribuent pour plus de 90 % à l'absorption et à la diffusion. On observe que les solutions présentent des erreurs non supérieures à un écart-type de la référence Monte Carlo. Les seules exceptions sont le taux de diffusion du fer 56 pour le maillage à 600 groupes et le taux de production de l'uranium 238. Le premier présente des erreurs correspondant à 2 écarts-types et le deuxième sort des barres d'erreur à trois écarts-types à cause de la mauvaise modélisation de la source de fission.

Calcul	keff
600g	1.18827 ($-42 \cdot 10^{-5}$)
800g	1.18830 ($-39 \cdot 10^{-5}$)
TRIPOLI4	1.18869 $\pm 35 \cdot 10^{-5}$

TAB. 9.7: Coefficients de multiplications effectifs de TRIPOLI4 et de AEMC. Les valeurs de référence sont présentées avec un intervalle de confiance d'un écart-type. Entre parenthèses on montre l'écart absolu.

Réaction	Calcul		
	TRIPOLI4	600g	800g
Absorption U238	45057 ± 17	45057 (0.0)	45058 (-0.06)
Absorption Pu239	30740 ± 11	30758 (-1.64)	30757 (-1.54)
Diffusion U238	1567561 ± 474	1567629 (-0.14)	1567782 (-0.47)
Diffusion Fe56	1257452 ± 401	1258241 (-1.97)	1257776 (-0.81)
Diffusion O16	1245428 ± 359	1245599 (-0.48)	1245770 (-0.95)
Production Pu239	70197 ± 22	70207 (-0.45)	70210 (-0.59)
Production U238	14040 ± 7	13985 (7.85)	13983 (8.14)
Production Pu241	17731 ± 6	17737 (-1.0)	17737 (-1.0)

TAB. 9.8: Taux de réactions globaux de TRIPOLI4 et de AEMC. Les valeurs de référence sont présentées avec un intervalle de confiance d'un écart-type. Entre parenthèses on montre l'erreur en unité d'écart-type.

Les figures de 9.29 à 9.38 montrent la distribution en énergie des écarts absolus et relatifs sur les taux d'absorption et de diffusion de l'uranium 238, de diffusion de l'oxygène 16 et de diffusion du fer 56 pour une température de 900 K sur le cas MOX 2040 à taux vide 100 %. On observe qu'en général les solutions multigroupes rentrent dans les barres d'erreur à trois écarts-types de la simulation Monte Carlo, sauf au-dessus de 3 MeV, à cause de la mauvaise modélisation de la source de fission, et autour de 1 MeV, zone dans laquelle la solution de référence était déjà en désaccord avec la simulation Monte Carlo (cf. 8.3.2).

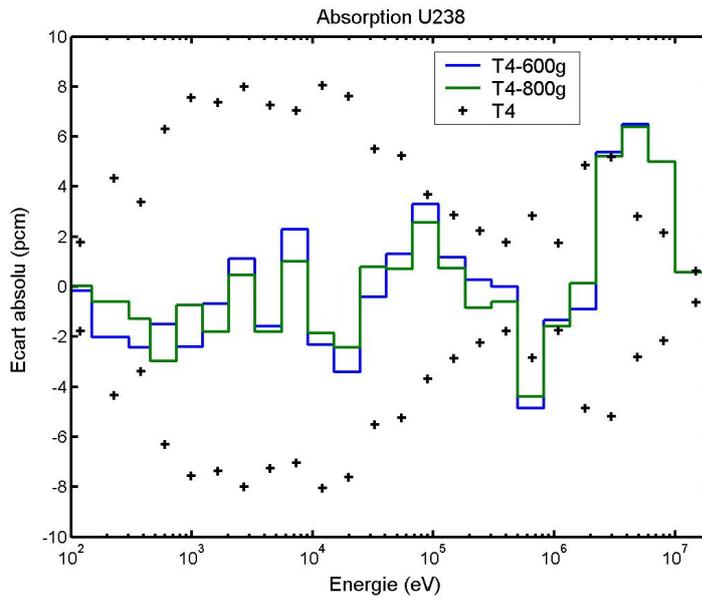


FIG. 9.29: Écart absolu sur le taux d'absorption pour l'U238. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

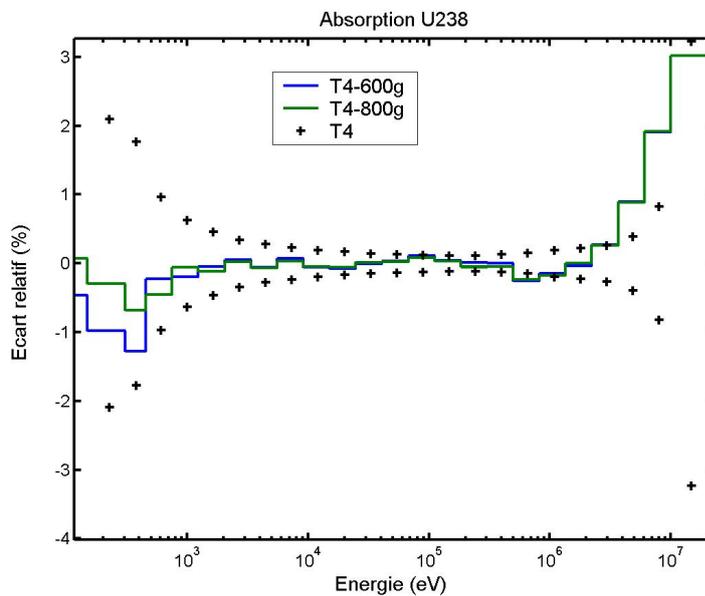


FIG. 9.30: Écart relatif sur le taux d'absorption pour l'U238. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

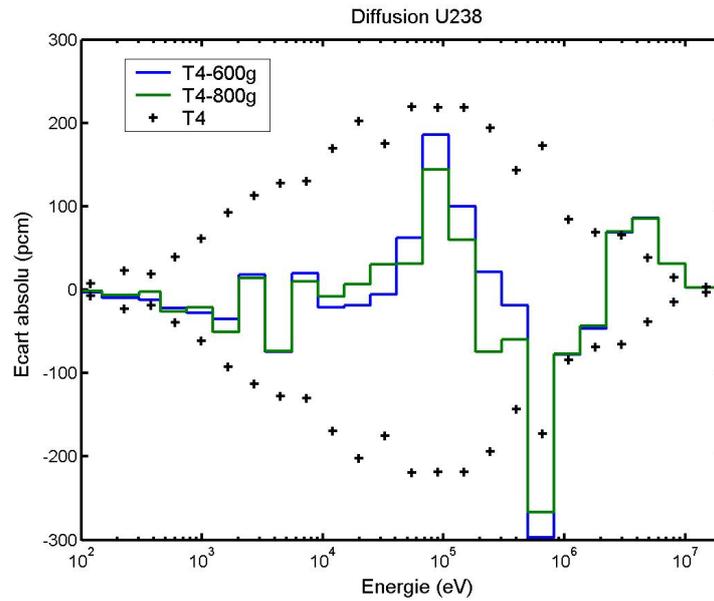


FIG. 9.31: Écart absolu sur le taux de diffusion pour l'U238. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

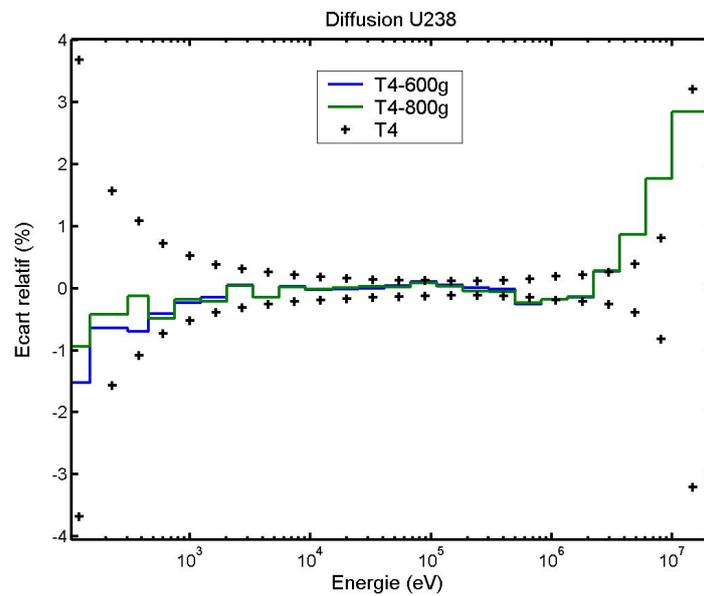


FIG. 9.32: Écart relatif sur le taux de diffusion pour l'U238. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

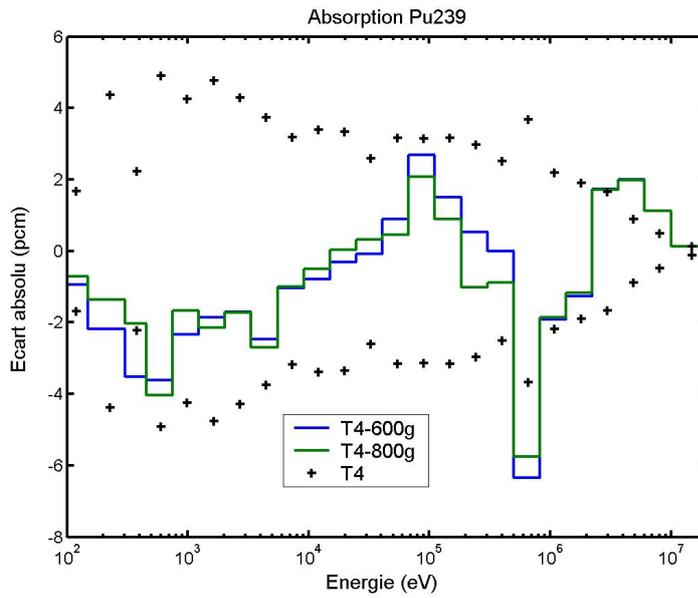


FIG. 9.33: Écart absolu sur le taux d'absorption du Pu239. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

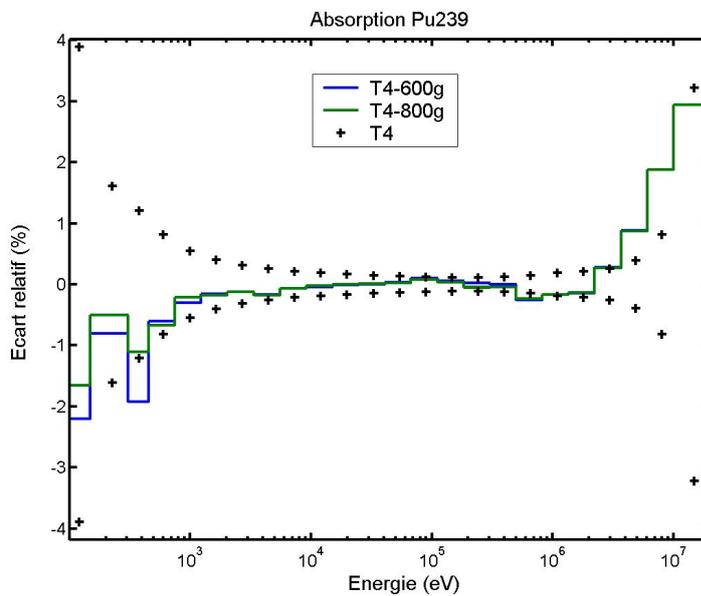


FIG. 9.34: Écart relatif sur le taux d'absorption du Pu239. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

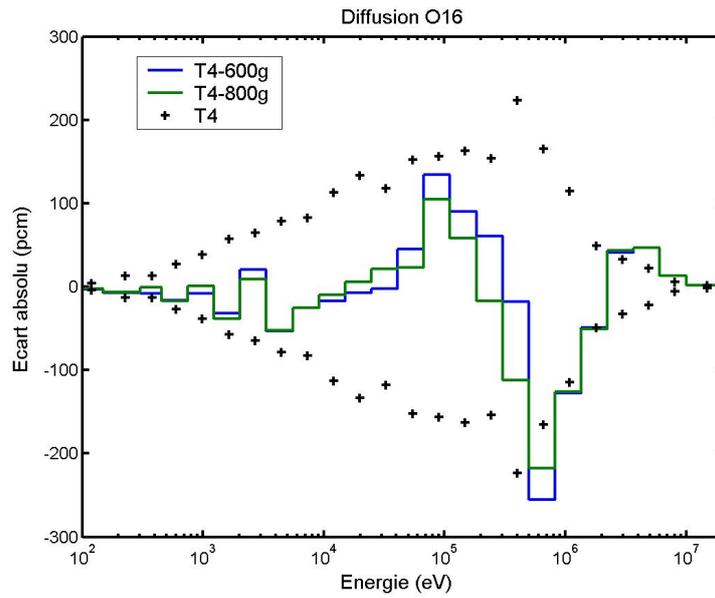


FIG. 9.35: Écart absolu sur le taux de diffusion pour l'O16. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

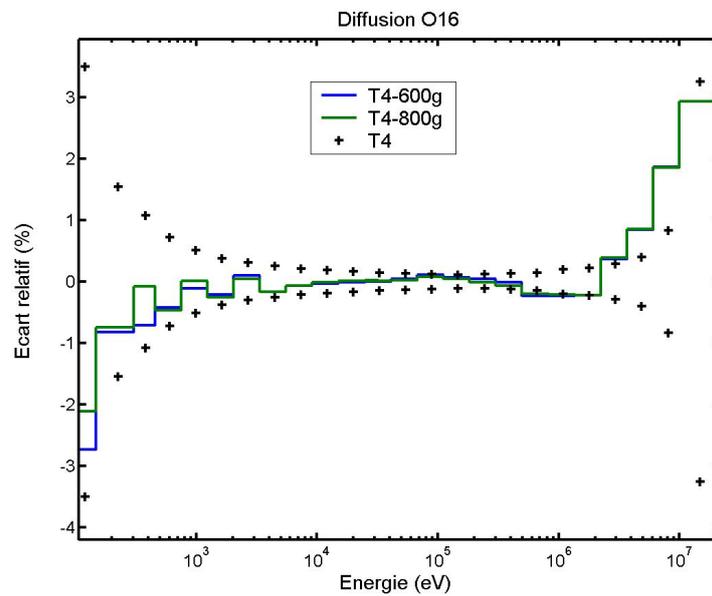


FIG. 9.36: Écart relatif sur le taux de diffusion pour l'O16. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

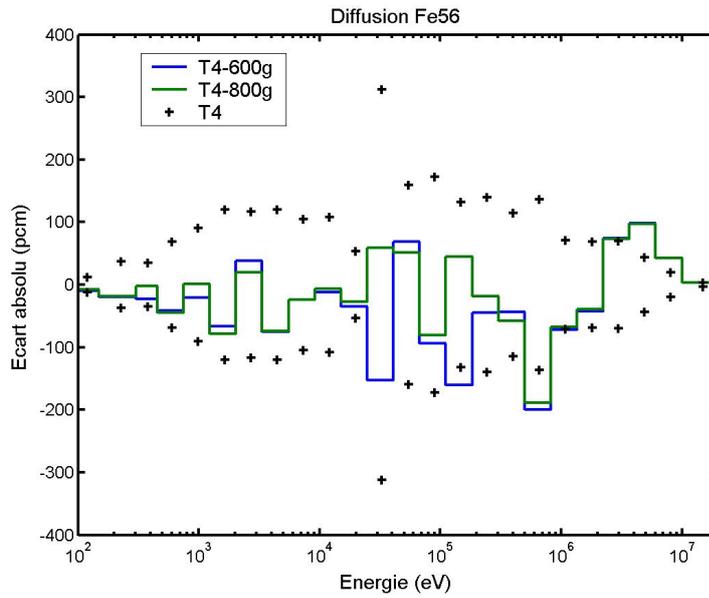


FIG. 9.37: Écart absolu sur le taux de diffusion pour le Fe56. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

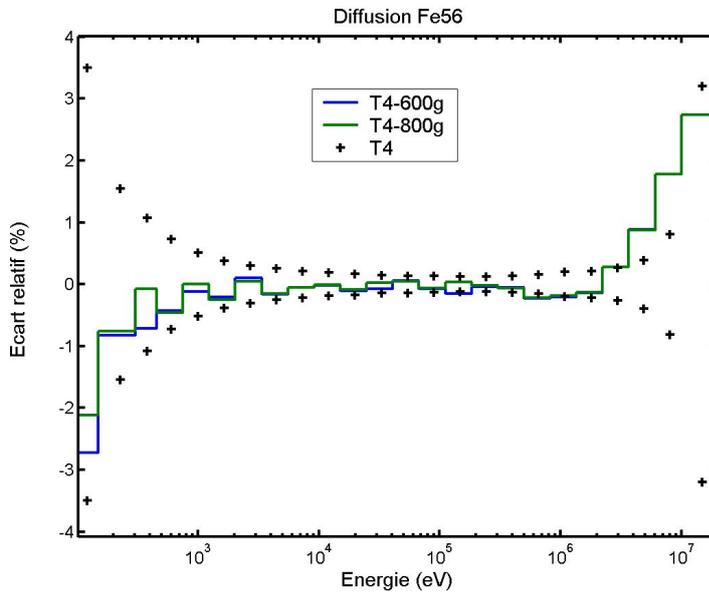


FIG. 9.38: Écart relatif sur le taux de diffusion pour le Fe56. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

Validation de la couverture fertile

Le tableau 9.9 montre les taux intégraux d'absorption et de diffusion de l'uranium 238, de diffusion de l'oxygène 16, du fer 56 et du sodium 23 pour la température de 900 K sur le problème de ralentissement dans la couverture fertile. Ces noyaux ont été choisis parce qu'ils contribuent à plus de 90 % de l'absorption et de la diffusion. Les solutions rentrent dans les barres d'erreur à 3 écarts-types de la référence Monte Carlo.

Réaction	Calcul		
	TRIPOLI4	600g	800g
Absorption U238	112240 ±43	112232 (0.19)	112240 (0.0)
Diffusion U238	2620367 ±870	2621566 (-1.38)	2621998 (-1.87)
Diffusion Fe56	1933429 ±692	1934734 (-1.88)	1934206 (-1.12)
Diffusion O16	1657842 ±550	1658907 (-1.94)	1659217 (-2.5)
Diffusion Na23	1288125 ±460	1288519 (-0.86)	1288857 (-1.59)

TAB. 9.9: Taux de réactions globaux de TRIPOLI4 et de AEMC. Les valeurs de référence sont présentées avec un intervalle de confiance d'un écart-type. Entre parenthèses on montre l'erreur en unité d'écart-type.

Les figures de 9.39 à 9.48 montrent les écarts absolus et relatifs par groupe sur les taux d'absorption et de diffusion de l'uranium 238, de diffusion de l'oxygène 16, de diffusion du fer 56 et de diffusion du sodium 23. Les deux solutions multigroupes ne s'écartent pas plus de 1 % de la solution Monte Carlo.

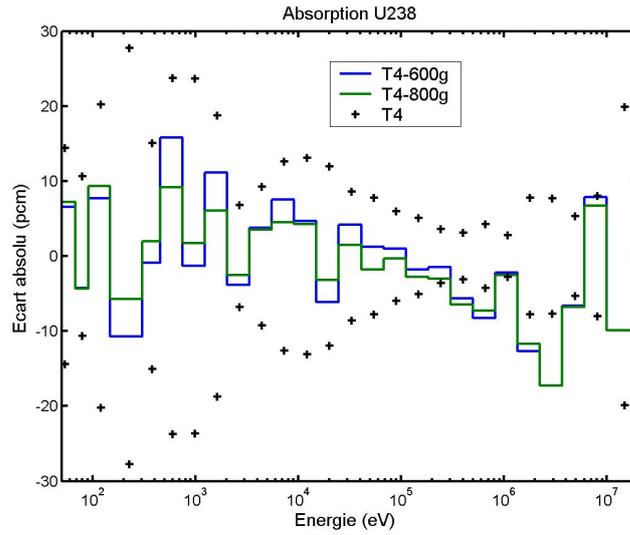


FIG. 9.39: Écart absolu sur le taux d'absorption pour l'U238. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

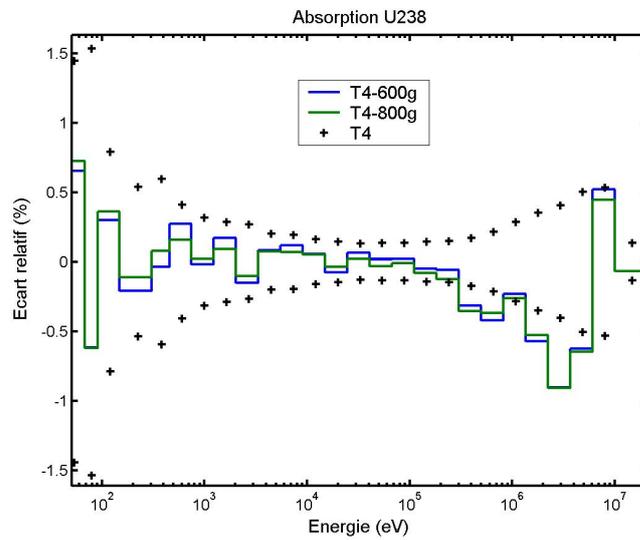


FIG. 9.40: Écart relatif sur le taux d'absorption pour l'U238. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

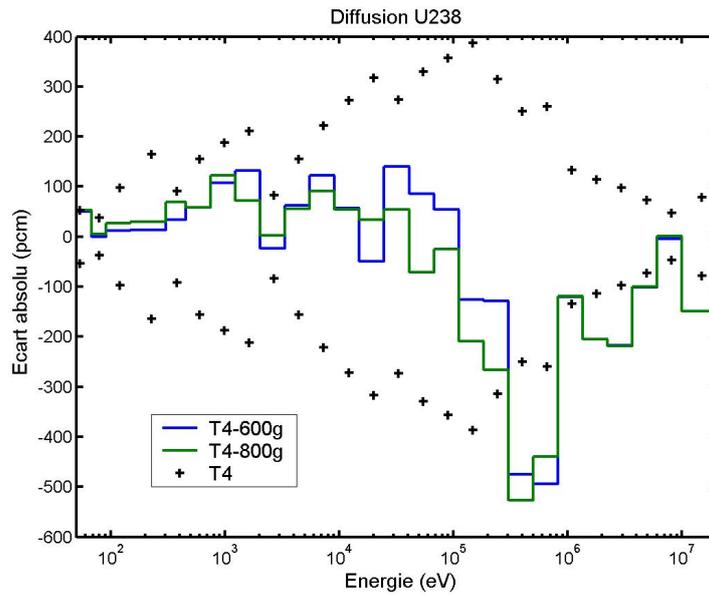


FIG. 9.41: Écart absolu sur le taux de diffusion pour l'U238. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

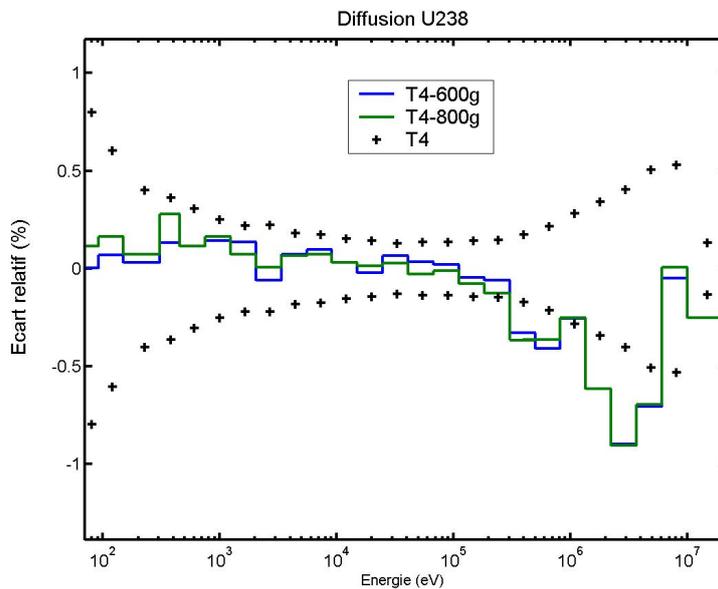


FIG. 9.42: Écart relatif sur le taux de diffusion pour l'U238. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

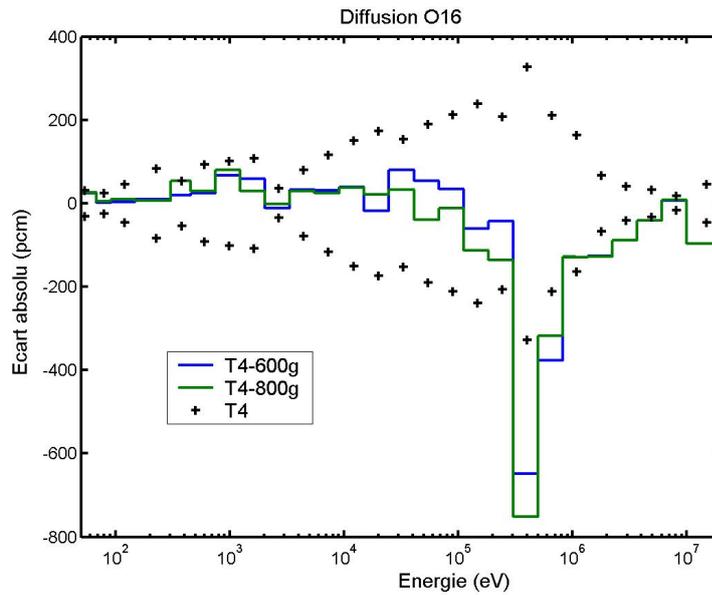


FIG. 9.43: Écart absolu sur le taux de diffusion pour l'O16. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

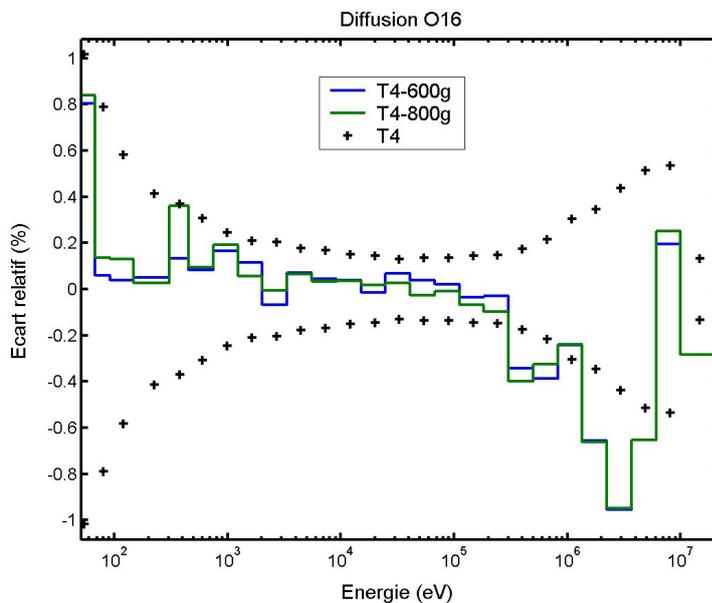


FIG. 9.44: Écart relatif sur le taux de diffusion pour l'O16. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

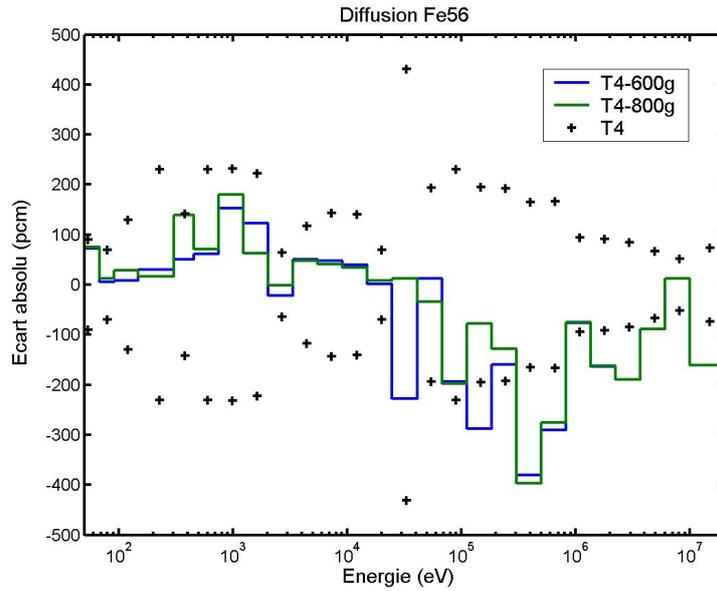


FIG. 9.45: Écart absolu sur le taux de diffusion pour le Fe56. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

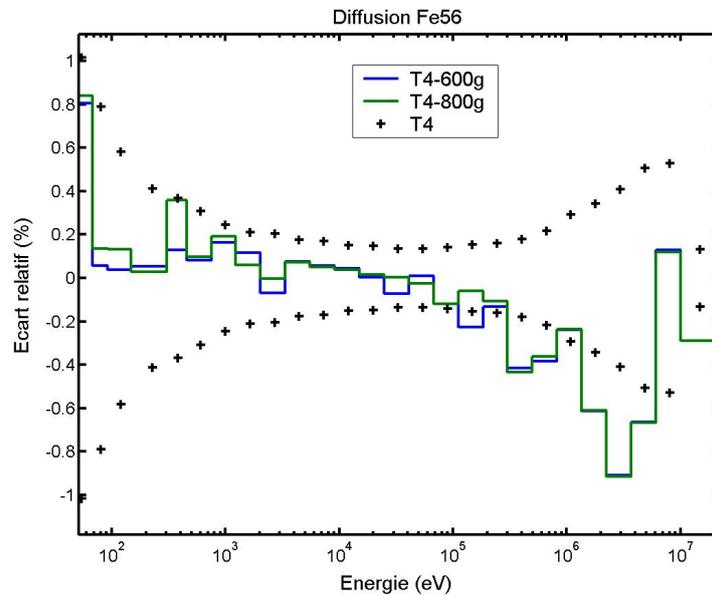


FIG. 9.46: Écart relatif sur le taux de diffusion pour le Fe56. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

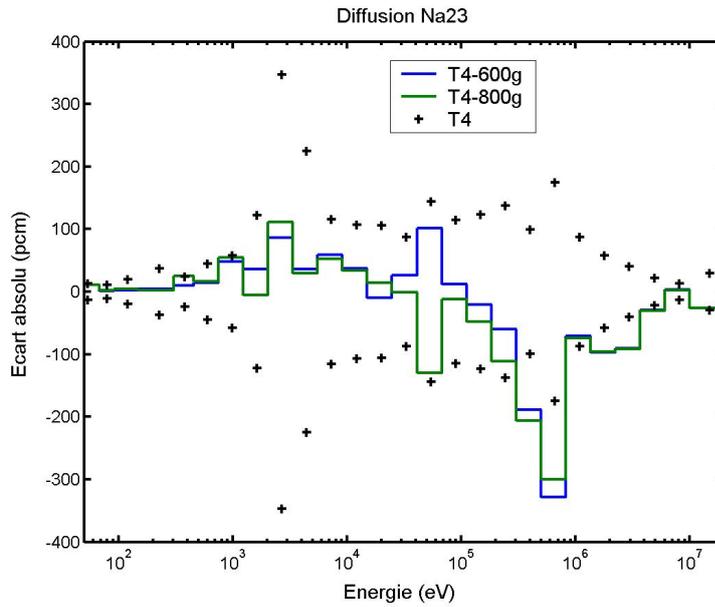


FIG. 9.47: Écart absolu sur le taux de diffusion pour le Na23. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

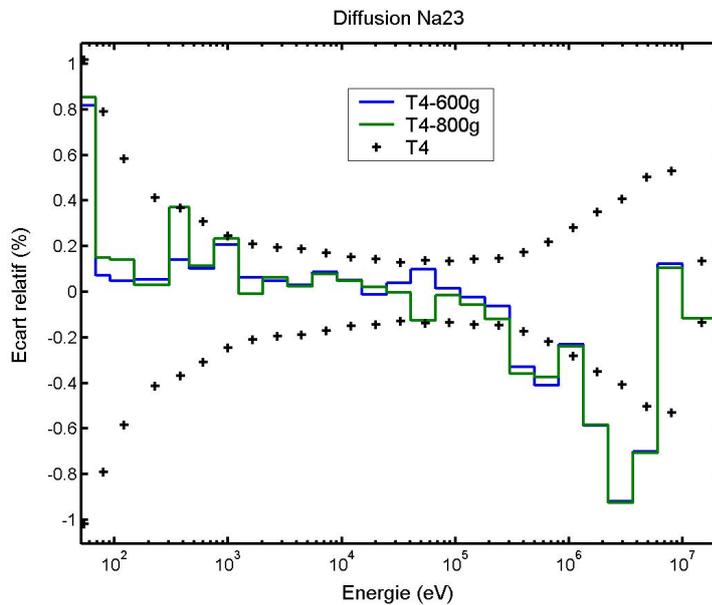


FIG. 9.48: Écart relatif sur le taux de diffusion pour le Na23. Les solutions multigroupes sont obtenues par AEMC. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

9.1.5 Coût du calcul de transport et espace mémoire de la bibliothèque multi-groupe

Après l'analyse de la courbe de performance nombre de groupes - précision pour la méthode des sous-groupes à isotope isolé et pour la méthode Livolant-Jeanpierre résolvant un problème à source, on se propose maintenant d'estimer le coût du calcul issu de ces deux méthodes.

Dans la méthode des sous-groupes et dans la méthode Livolant-Jeanpierre la fonction de mise en groupe est solution d'un problème de ralentissement. Admettons la densité d'émission isotrope et adoptons la méthode des probabilités de collision pour résoudre l'équation de ralentissement. Supposons qu'un seul noyau soit autoprotégé, que le nombre de régions N_R nécessaires aux deux méthodes d'autoprotection soit identique et notons avec G le nombre de groupes.

Le calcul du flux peut être réalisé par différents solveurs. Supposons l'utilisation de la méthode des probabilités de collision.

Normalement on peut employer pour le calcul d'autoprotection une discrétisation spatiale moins détaillée et simplifiée que celle utilisée pour le calcul du flux. Dans un souci de clarté, on suppose qu'on utilise le même nombre de régions pour le calcul d'autoprotection et pour le calcul de flux.

La partie coûteuse d'un calcul avec la méthode des probabilités de collision concerne l'évaluation des probabilités géométriques P_{ij} . On estime donc le coût de la résolution multigroupe en fonction du nombre de calcul P_{ij} à effectuer. Cette valeur dépend linéairement du nombre de valeurs de la section totale N et croît en fonction du nombre de régions comme N_R^q avec $q \geq 2$. Le nombre de calcul P_{ij} est donc proportionnel à NN_R^q .

Notons ensuite par G_L et n_L le nombre de groupes et l'ordre moyen des points de quadrature (sections fines ou tables de probabilité) de la méthode Livolant-Jeanpierre et par G_S et n_S le nombre de groupes et l'ordre moyen des tables de probabilité de la méthode des sous-groupes. Le nombre total de calculs P_{ij} pour la méthode des sous-groupes est proportionnel à :

$$(n_S + 1)G_S N_R^q,$$

tandis que, pour la méthode Livolant-Jeanpierre, il croit comme :

$$[n_L g_L + G_L(1 + n_i)] N_R^q,$$

où n_i est le nombre moyen d'itérations nécessaire pendant l'équivalence continu-multigroupe et g_L indique le nombre de groupes du maillage fin utilisé pour les tabulations des taux de référence. Avec la méthode Livolant-Jeanpierre standard, ces données sont calculées en amont sur une plage de dilutions et stockées dans la bibliothèque multigroupe. Pendant le calcul de transport, on résout le problème hétérogène de ralentissement avec le modèle TR sur le maillage à G_L groupes pour en déduire les dilutions. En conséquence, le nombre de calculs P_{ij} d'autoprotection est réduit à $n'_L G_L N_R^q$.

Le nombre de calcul P_{ij} avec l'autoprotection Livolant-Jeanpierre est inférieur à celle avec l'autoprotection en sous-groupes si :

$$n_L g_L + G_L(1 + n_i) \leq (n_S + 1)G_S. \quad (9.1)$$

En appliquant la méthode Livolant-Jeanpierre standard, la condition (9.1) devient :

$$G_L \leq G_S \frac{(n_S + 1)}{(n'_L + 1 + n_i)}.$$

Pour une problématique de réacteur à spectre thermique, le maillage universel actuellement employé avec une autoprotection en sous-groupes présente dans le domaine compris

entre 10^{-5} eV et 2 keV 6900 groupes. L'ordre moyen des tables de probabilité calculées avec ce maillage est unitaire. Supposons pour la méthode Livolant-Jeanpierre que l'ordre moyen des tables de probabilité soit $n'_L \approx 10$ et que le nombre moyen d'itérations soit égal à trois. Ces valeurs sont celles typiques des calculs d'autoprotection Livolant-Jeanpierre avec les maillages XMAS à 172 groupes et SHEM à 281 groupes. Avec ces valeurs la condition (9.1) impose, pour une utilisation optimale de la méthode Livolant-Jeanpierre, un maillage avec un nombre de groupes respectant la condition $G_L \leq 986$. Cela montre qu'il serait possible effectuer des calculs d'autoprotection Livolant-Jeanpierre avec des maillages plus raffinés sur des problèmes neutroniques à spectre thermique.

Si on considère en revanche la méthode Livolant-Jeanpierre, résolvant un problème à source, d'après l'étude menée sur les réacteurs rapides au paragraphe 9.1.4, on peut supposer que $G_S \approx 2 \cdot G_L$ et ainsi déduire la condition suivante :

$$g_L \leq G_L \frac{(2n_S + 1 - n_i)}{n_L}.$$

Pour les compositions considérées spécifiques aux applications à neutrons rapides, on a vérifié que l'ordre moyen des tables pour la méthode des sous-groupes sur le maillage à 1200 groupes est deux et sur le maillage de référence à 9207 groupes est unitaire. De ce fait, la condition (9.1) implique l'utilisation d'un maillage fin avec un nombre de groupes $g_L \leq (5 - n_i)G_L$.

Il s'ensuit que, pour un maillage grossier à 600 groupes, il faut résoudre l'équation de ralentissement pour les tabulations de référence sur un maillage n'excédant pas 3000 groupes. Actuellement le calcul est réalisé sur le maillage de référence à 9207 groupes et il n'est pas donc optimal pratiquement. En effet, d'après la courbe de performance, analysé au paragraphe 9.1.2, on a constaté qu'à partir des maillages à 1200 groupes le gain en précision avec une méthode des sous-groupes est faible. Comme cette méthode applique une autoprotection en sous-groupes pour les tabulations des taux de référence, il serait donc possible de réaliser ce calcul sur des structures multigroupes plus larges afin d'en réduire le coût sans pourtant avoir une grosse perte de précision.

Un autre aspect important dans le choix d'une méthode d'autoprotection est l'espace mémoire occupé par la bibliothèque multigroupe après autoprotection. En effet, comme les ressources mémoire des ordinateurs sont limitées, l'emploi de données multigroupes calculées sur un maillage très fin peut ne pas permettre une discrétisation spatiale et angulaire suffisante et donc conduire à une erreur de modélisation. Dans ce sens, la possibilité de disposer d'une méthode d'autoprotection conduisant à peu de groupes, mais impliquant un coût du calcul supérieur à d'autres, présente encore des avantages.

Pour cela, un calcul en ligne des tabulations de référence sur le maillage fin restera intéressant tant que la quantité de données nécessaire au calcul est limitée. Actuellement, la méthode Livolant-Jeanpierre avec traitement en mélange, développée dans le code APOLLO2, se situe dans ce contexte. Elle effectue un calcul en ligne des tabulations de référence sur un maillage énergétique très fin en utilisant un nombre réduit de données (les tables de probabilité sur le maillage fin).

La généralisation de la méthode Livolant-Jeanpierre sur un problème à source utilise actuellement les matrices de transfert calculées sur le maillage énergétique fin. La quantité de données d'autoprotection à mémoriser est par conséquent très élevée. Pour en réduire l'impact, il sera sans doute utile de prévoir la possibilité d'un calcul analytique du noyau de transfert dans certains domaines énergétiques (comme par exemple la zone du ralentissement élastique et isotrope).

Avec cette généralisation le modèle d'autoprotection tend vers la résolution du problème réel de transport. Sachant que l'autoprotection peut être faite avec une bonne approximation sur des motifs élémentaires de la géométrie de calcul du flux, il devient concevable de faire

l'autoprotection avec les flux des problèmes réels des différents motifs géométriques. Ainsi nous aurions un schéma à deux niveaux. Dans la première étape, on calcule les taux de référence en résolvant le problème réel avec une autoprotection en sous-groupes utilisant une description des données sur un maillage fin. Dans la deuxième étape, on définit un jeu de sections efficaces multigroupes pour un maillage énergétique grossier grâce à une équivalence sur les taux de réaction.

9.2 Tests de validation avec APOLLO2 et TRIPOLI4

Nous avons analysé, dans cette section, les performances des maillages optimisés à 300, 600, 1200 et 1550 groupes par rapport au maillage existant ECCO à 1968 groupes, sur une cellule chargée en MOX 2040 et refroidie au sodium, et sur un problème à source en géométrie plane représentatif des couvertures fertiles en périphérie des assemblages des réacteurs RNR-sodium. L'objectif est la sélection parmi ces différentes structures multigroupes d'un maillage grossier adapté aux calculs industriels de production et d'un maillage plus fin pour des calculs multigroupes de référence.

Si la convergence des simulations Monte Carlo peut apparaître parfois excessive, un tel choix a été effectué pour disposer des solutions de référence entachées d'une incertitude négligeable et donc permettant d'évaluer de la manière la plus précise possible l'erreur numérique des solutions multigroupes.

Pour chacun de ces maillages, des bibliothèques externes APOLLO2 ont été produites avec la chaîne automatique GALILEE. Ces bibliothèques sont spécifiques à ces calculs de validation et elles ne contiennent ni données d'évolution ni données pour les calculs d'autoprotection Livolant-Jeanpierre. Elles contiennent des matrices de transfert pour un ordre de Legendre limité à 9 pour bien calculer le flux sur des problèmes avec une forte anisotropie. Des tables de probabilité ont été produites pour effectuer l'autoprotection en sous-groupes des noyaux présents dans ces deux problèmes. Ces données ont été générées avec AEMC à partir des tables de probabilité renormalisées à la moyenne NJOY et calculées sur le maillage de référence à 9207 groupes.

L'ensemble de cette étude nécessitera des comparaisons entre les solutions du code TRIPOLI4 et APOLLO2 avec ces différents maillages multigroupes. Les comparaisons par groupe sont présentées en condensant les solutions avec le maillage à 33 groupes ECCO, commun à l'ensemble des maillages.

9.2.1 Caractéristiques du test sur la cellule RNR-sodium

La géométrie de la cellule RNR chargée en MOX 2040 et refroidie au sodium est décrite dans le tableau 9.10. Le combustible a été découpé en trois zones de mêmes volumes, la gaine et le caloporteur ont été subdivisés en deux régions de volumes égales. La composition est présentée dans le tableau 9.11. La cellule est à une température uniforme de 294 K.

Zone	Milieu	Rayon <i>cm</i>
1	combustible	0.16285
2	combustible	0.357
3	combustible	0.391
4	gaine	0.425
5	gaine	0.4717
6	caloporteur	0.51843
7	caloporteur	0.56517

TAB. 9.10: Description de la géométrie discrétisée de la cellule RNR-sodium.

Le calcul de référence est une simulation TRIPOLI4 version 4.6 dans laquelle l'histoire de 8 millions de neutrons a été simulée. Nous avons utilisé pour ce calcul une description ponctuelle des sections efficaces.

Les calculs APOLLO2 sont effectués en appliquant l'autoprotection des sous-groupes à isotope isolé avec une seule itération (traitement séquentiel) sur la même liste de noyaux et les mêmes domaines d'énergie que pour l'optimisation. Le tableau 9.12 résume la liste des

Noyau	Milieu	Concentration $at / (barns\ cm) * 10^{24}$
Pu238	combustible	$1.3823 \cdot 10^{-4}$
Pu239	combustible	$1.8343 \cdot 10^{-3}$
Pu240	combustible	$1.1481 \cdot 10^{-3}$
Pu241	combustible	$3.1863 \cdot 10^{-4}$
Pu242	combustible	$4.0166 \cdot 10^{-4}$
Am241	combustible	$3.01555 \cdot 10^{-5}$
O16	combustible	$4.5453 \cdot 10^{-2}$
U235	combustible	$4.7615 \cdot 10^{-5}$
U238	combustible	$1.8998 \cdot 10^{-2}$
Fe54	gaine	$3.2676 \cdot 10^{-3}$
Fe56	gaine	$5.1672 \cdot 10^{-2}$
Fe57	gaine	$1.2394 \cdot 10^{-3}$
Fe58	gaine	$1.5774 \cdot 10^{-4}$
Cr50	gaine	$5.7915 \cdot 10^{-4}$
Cr52	gaine	$1.1184 \cdot 10^{-2}$
Cr53	gaine	$1.26643 \cdot 10^{-3}$
Cr54	gaine	$3.1493 \cdot 10^{-4}$
Ni58	gaine	$8.6280 \cdot 10^{-3}$
Ni60	gaine	$3.2985 \cdot 10^{-3}$
Ni61	gaine	$1.4281 \cdot 10^{-4}$
Ni62	gaine	$4.5370 \cdot 10^{-4}$
Ni64	gaine	$1.1501 \cdot 10^{-4}$
Mo92	gaine	$1.1104 \cdot 10^{-4}$
Mo94	gaine	$6.9210 \cdot 10^{-5}$
Mo95	gaine	$1.1912 \cdot 10^{-4}$
Mo96	gaine	$1.2480 \cdot 10^{-4}$
Mo97	gaine	$7.1455 \cdot 10^{-5}$
Mo98	gaine	$1.80554 \cdot 10^{-4}$
Mo100	gaine	$7.2053 \cdot 10^{-5}$
Mn55	gaine	$1.3501 \cdot 10^{-3}$
Ti47	gaine	$3.1611 \cdot 10^{-5}$
Ti48	gaine	$3.1957 \cdot 10^{-4}$
Ti49	gaine	$2.3816 \cdot 10^{-5}$
Ti50	gaine	$2.3383 \cdot 10^{-5}$
Si28	gaine	$1.3356 \cdot 10^{-3}$
Si29	gaine	$6.7629 \cdot 10^{-5}$
Si30	gaine	$4.4893 \cdot 10^{-5}$
Na23	caloporteur	$2.325 \cdot 10^{-2}$
Fe56	caloporteur	$2.0171 \cdot 10^{-2}$

TAB. 9.11: Composition de la cellule RNR-sodium.

noyaux et les domaines d'énergie autoprotégés. L'ordre d'apparition des noyaux correspond à celui adopté dans le calcul d'autoprotection. Nous avons utilisé la même géométrie pour les calculs du flux et d'autoprotection. Le calcul de flux est effectué avec la méthode SN sur une géométrie cylindrique à une dimension. Une étude sur la discrétisation angulaire et l'ordre d'anisotropie nous a montré que l'approximation S16 P1 suffit à converger les calculs.

Noyau	Domaine énergétique
U238	10^{-5} eV - 20 keV, 300 keV - 20 MeV
Pu239	10^{-5} eV - 2.5 keV, 30 keV - 20 MeV
Pu240	10^{-5} eV - 5.7 keV, 40 keV - 20 MeV
Pu241	10^{-5} eV - 300 eV, 30 keV - 20 MeV
Fe56	10^{-5} eV - 20 MeV
Pu242	10^{-5} eV - 1.15 keV, 40 keV - 20 MeV
Pu238	10^{-5} eV - 500 eV, 150 keV - 20 MeV
O16	10^{-5} eV - 20 MeV
Na23	10^{-5} eV - 20 MeV
Ni58	10^{-5} eV - 20 MeV
Cr52	10^{-5} eV - 20 MeV
Ni60	10^{-5} eV - 20 MeV
Fe54	10^{-5} eV - 20 MeV
Cr53	10^{-5} eV - 20 MeV

TAB. 9.12: Liste des noyaux et domaine d'énergie autoprotégés.

9.2.2 Comparaison TRIPOLI4 et APOLLO2 sur la cellule RNR-sodium

Le tableau 9.13 compare à la référence TRIPOLI4 les coefficients de multiplication effectifs obtenus avec les maillages énergétiques optimisés à 300, 600, 1200 et 1550 groupes et avec le maillage ECCO à 1968 groupes. On peut observer que tous les calculs rentrent dans la barre d'erreur à trois écarts-types de la référence Monte Carlo. L'estimateur $F(E)$ de ces différents calculs multigroupes montre que les solutions à 1200 et 1550 groupes sont plus précises que la solution à 1968 groupes.

Calcul	keff	F(E) [%]
300g	1.15120 ($77 \cdot 10^{-5}$)	0.0094
600g	1.14897 ($-46 \cdot 10^{-5}$)	0.0051
1200g	1.15016 ($-27 \cdot 10^{-5}$)	0.0038
1550g	1.15014 ($-25 \cdot 10^{-5}$)	0.0036
1968g	1.15080 ($37 \cdot 10^{-5}$)	0.0044
TRIPOLI4	1.15043 $\pm 34 \cdot 10^{-5}$	

TAB. 9.13: Coefficients de multiplications effectifs et estimateurs calculés grâce à TRIPOLI4 et APOLLO2. Les valeurs de référence sont présentées avec un intervalle de confiance d'un écart-type. Entre parenthèses on montre l'écart absolu.

Dans le tableau 9.14 on compare à la référence Monte Carlo les taux globaux de réaction des noyaux qui contribuent pour plus de 90 % à l'absorption, à la diffusion et à la production. Les maillages à 600, 1200 et 1968 groupes donnent des résultats dans les trois écarts-types de la référence TRIPOLI4 sur l'absorption et la diffusion de l'uranium 238, sur la diffusion de l'oxygène 16, du sodium 23 et du fer 56 et sur la production du plutonium 241.

Le maillage à 300 groupes en revanche dépasse les barres d'erreur à trois écarts-types sur l'absorption et la diffusion de l'uranium 238, sur la diffusion du fer 56 et de l'oxygène 16. Ces écarts correspondent respectivement à des erreurs relatives de 0.2 %, 0.1 %, 0.5 % et 0.1 %.

L'absorption et la production du plutonium 239 rentrent dans les barres d'erreur à deux écarts-types avec les maillages à 300, 600 et 1200 groupes, tandis qu'elles présentent des erreurs plus significatives avec le maillage à 1968 groupes. En particulier, le taux de production du plutonium 239 dépasse la barre d'erreur à trois écarts-types de la référence Monte Carlo.

Le taux de production de l'uranium 238 sort des barres d'erreur à trois écarts-types avec la plupart des maillages, comme déjà observé sur les problèmes homogènes d'optimisation, à cause de la mauvaise modélisation de la source de fission. La seule exception concerne le maillage à 300 groupes qui présente des compensations entre groupes.

Réaction	Calcul				
	TRIPOLI4	300g	600g	1200g	1968g
Absorption U238	43374 ±16	43287 (5.43)	43346 (1.75)	43364 (0.625)	43331 (2.69)
Absorption Pu239	31433 ±12	31456 (-1.92)	31424 (0.75)	31430 (0.25)	31464 (-2.58)
Diffusion U238	1428698 ±396	1427346 (3.41)	1428146 (-1.39)	1428512 (0.47)	1428677 (0.05)
Diffusion Fe56	603675 ±182	606083 (13.23)	604079 (-2.22)	603872 (-1.08)	603688 (-0.07)
Diffusion O16	1136111 ±303	1134880 (4.06)	1135626 (1.6)	1136244 (-0.44)	1136475 (-1.2)
Diffusion Na23	858043 ±270	857692 (1.3)	857556 (1.80)	857893 (0.55)	858174 (-0.48)
Production Pu239	68782 ±23	68871 (0.04)	68776 (0.26)	68801 (-0.83)	68874 (-4.0)
Production U238	12862 ±6	12846 (2.67)	12833 (4.83)	12820 (7.0)	12817 (7.17)
Production Pu241	18023 ±7	18029 (-1.0)	18023 (0.0)	18026 (-0.43)	18027 (-0.57)

TAB. 9.14: Taux de réactions globaux de TRIPOLI4 et d'APOLLO2. Les valeurs de référence sont présentées avec un intervalle de confiance d'un écart-type. Entre parenthèses on montre l'erreur en unité d'écart-type.

On analyse par la suite les erreurs par groupe pour les maillages optimisés à 600 et 1200 groupes et le maillage ECCO à 1968 groupes. Les figures de 9.49 à 9.60 montrent la distribution en énergie des écarts absolus et relatifs sur les taux d'absorption et de diffusion de l'uranium 238, d'absorption du plutonium 239, de diffusion de l'oxygène 16, de diffusion du fer 56 et de diffusion du sodium 23.

Les erreurs avec les maillages à 1200 et 1968 groupes sont comparables sur les taux d'absorption et de diffusion de l'uranium 238, sur le taux de diffusion de l'oxygène 16, du sodium 23 et du fer 56, sauf en dessous de 300 eV. Comme ce domaine énergétique présente des taux de réaction faibles, il a un impact neutronique assez réduit. Pour la même liste de noyaux les erreurs deviennent plus élevées avec le maillage à 600 groupes sans franchir le seuil de 1 %, sauf en dessous de 300 eV.

Le taux d'absorption du plutonium 239 ne présente des écarts inférieurs à 1 % qu'avec le maillage à 1200 groupes.

D'une manière générale, on retrouve les écarts observés au moment de l'optimisation au-dessus de 3 MeV et autour de 1 MeV (cf. par exemple les figures 9.8 et 9.49).

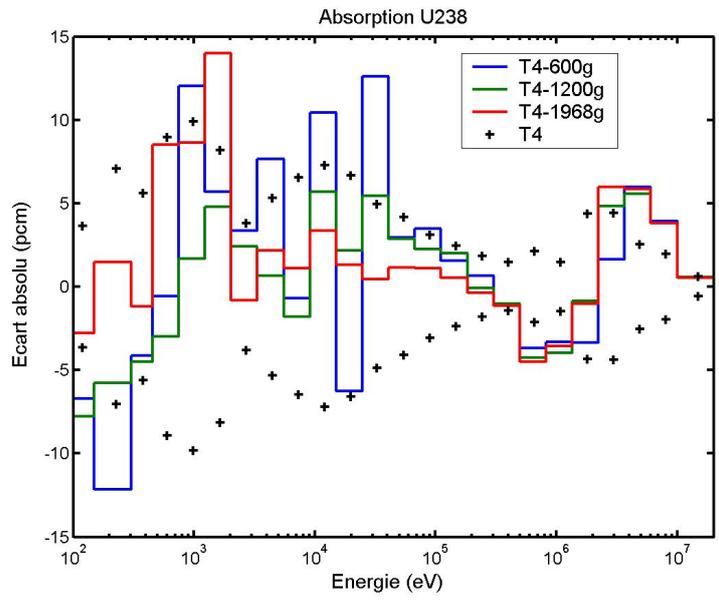


FIG. 9.49: Écart absolu sur le taux d'absorption pour l'U238. Les solutions multigroupes sont obtenues par APOLLO2. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

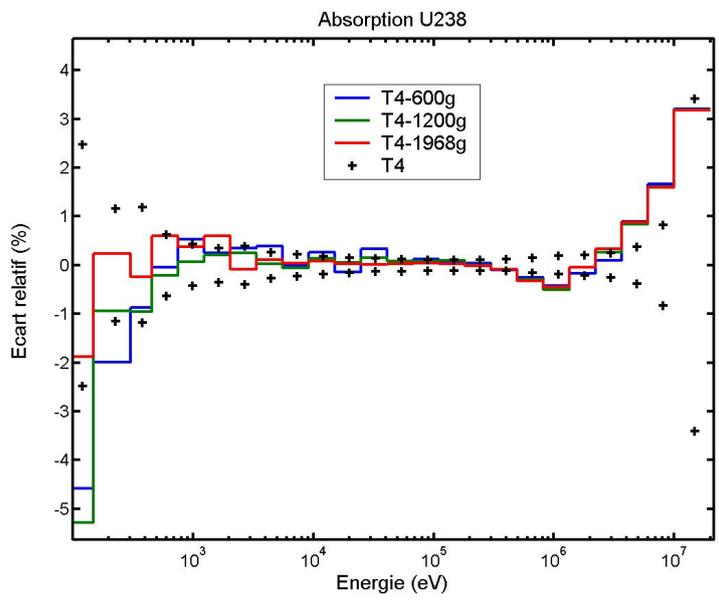


FIG. 9.50: Écart relatif sur le taux d'absorption pour l'U238. Les solutions multigroupes sont obtenues par APOLLO2. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

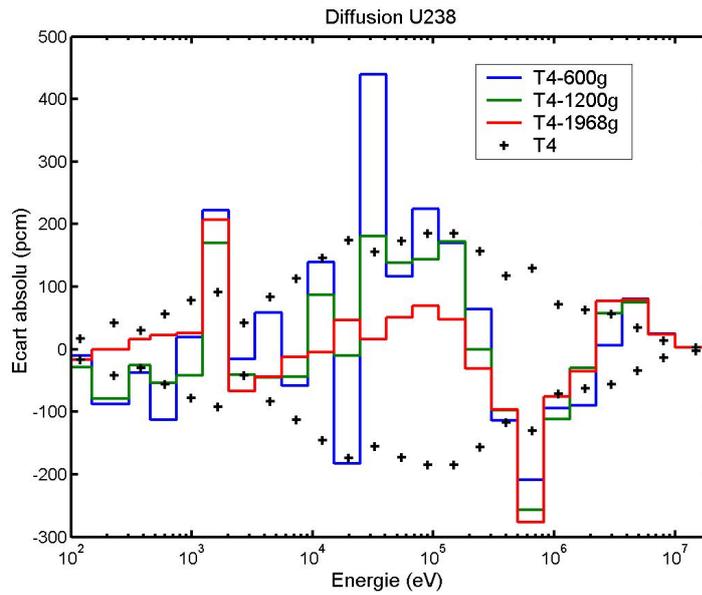


FIG. 9.51: Écart absolu sur le taux de diffusion pour l'U238. Les solutions multigroupes sont obtenues par APOLLO2. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

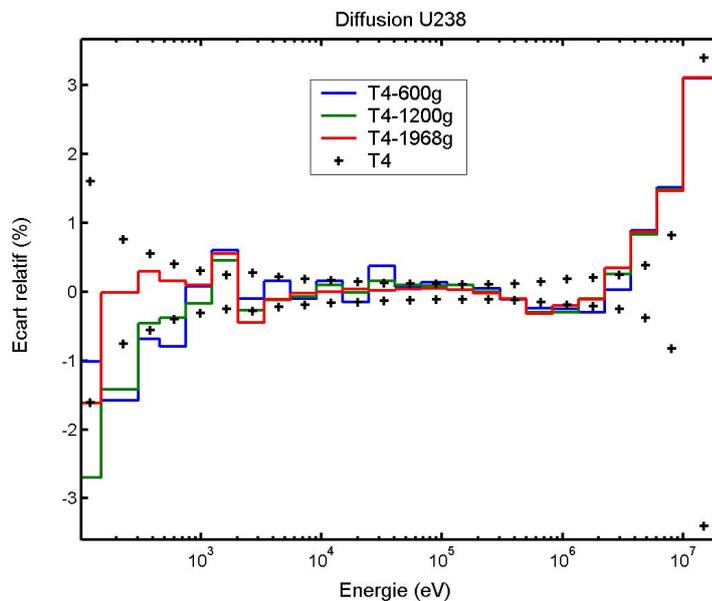


FIG. 9.52: Écart relatif sur le taux de diffusion pour l'U238. Les solutions multigroupes sont obtenues par APOLLO2. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

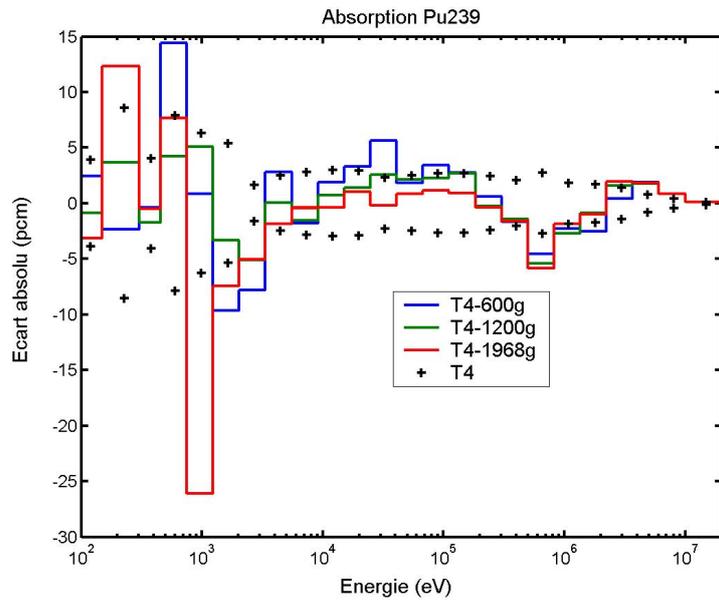


FIG. 9.53: Écart absolu sur le taux d'absorption pour le Pu239. Les solutions multigroupes sont obtenues par APOLLO2. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

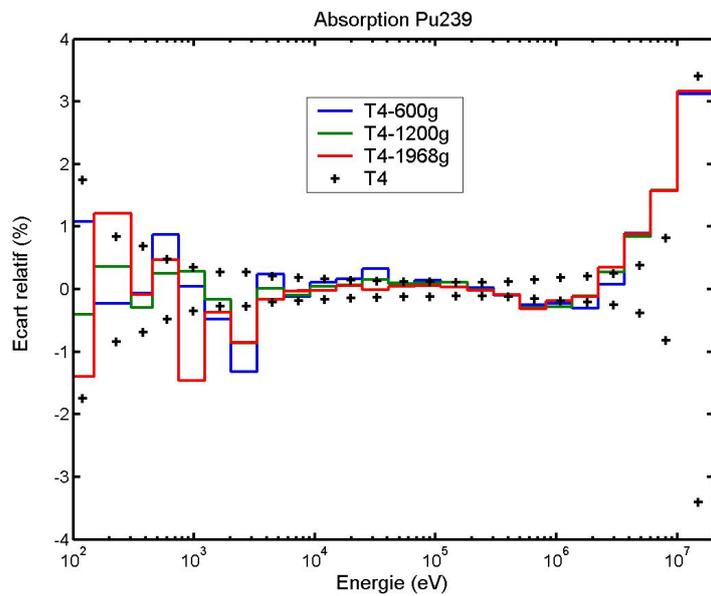


FIG. 9.54: Écart relatif sur le taux d'absorption pour le Pu239. Les solutions multigroupes sont obtenues par APOLLO2. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

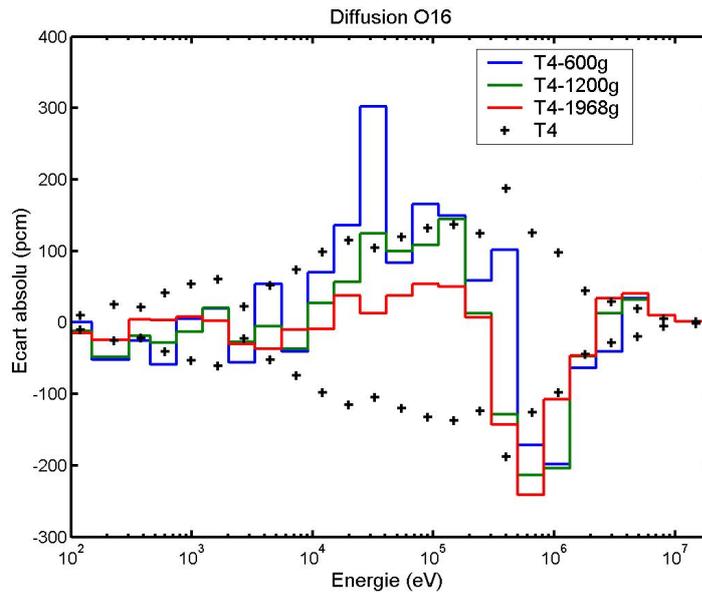


FIG. 9.55: Écart absolu sur le taux de diffusion pour l'O16. Les solutions multigroupes sont obtenues par APOLLO2. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

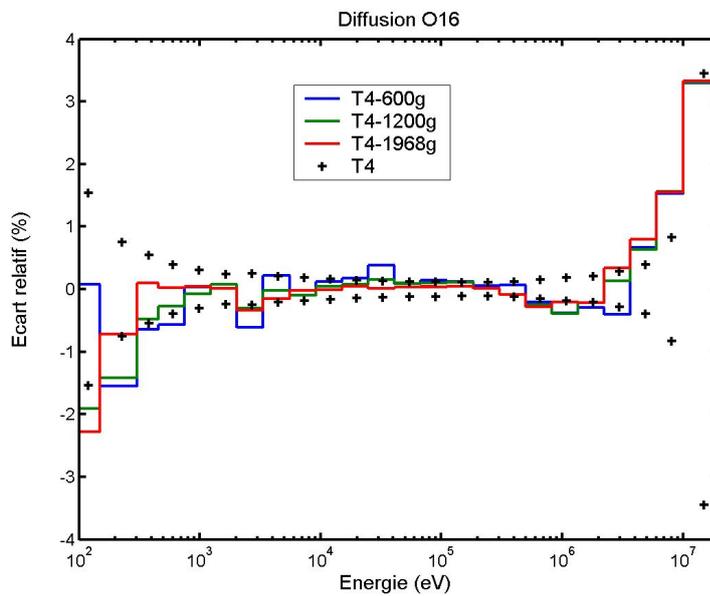


FIG. 9.56: Écart relatif sur le taux de diffusion pour l'O16. Les solutions multigroupes sont obtenues par APOLLO2. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

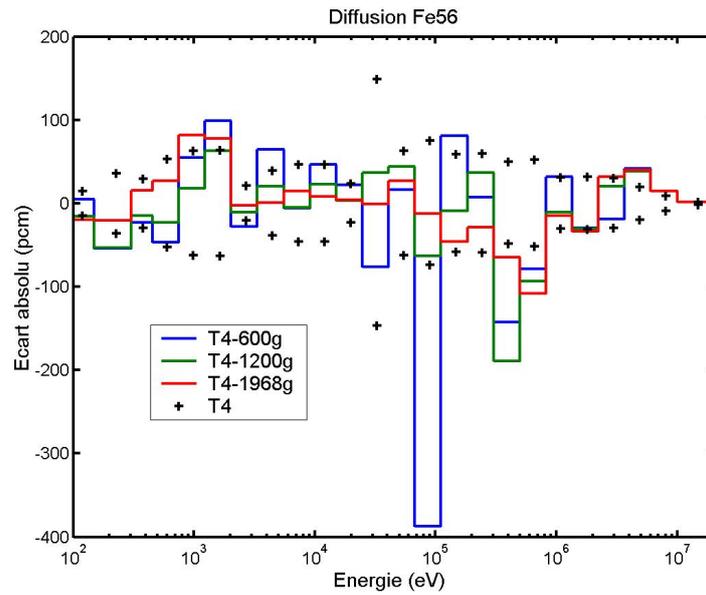


FIG. 9.57: Écart absolu sur le taux de diffusion pour le Fe56. Les solutions multigroupes sont obtenues par APOLLO2. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

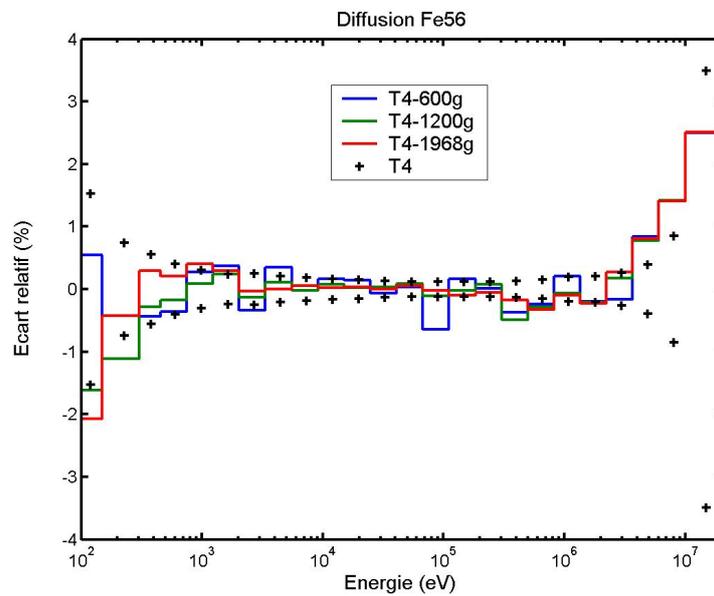


FIG. 9.58: Écart relatif sur le taux de diffusion pour le Fe56. Les solutions multigroupes sont obtenues par APOLLO2. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

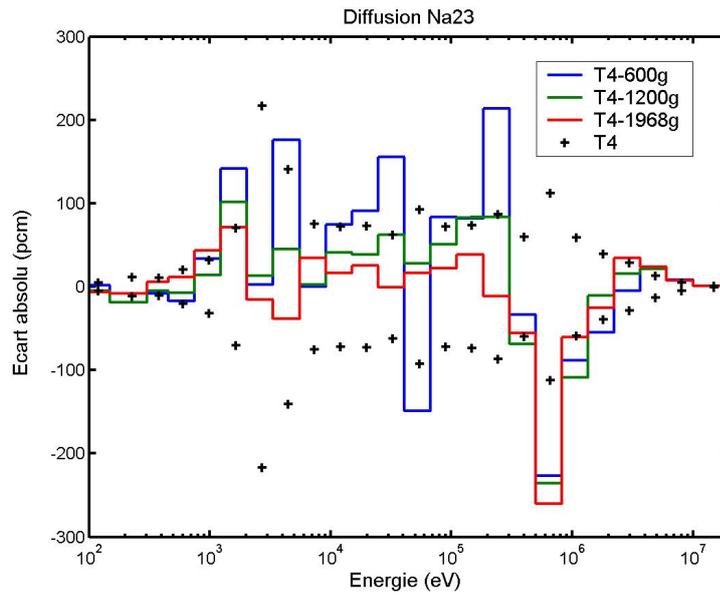


FIG. 9.59: Écart absolu sur le taux de diffusion pour le Na23. Les solutions multigroupes sont obtenues par APOLLO2. Les valeurs de référence, obtenues par un calcul TRIPOLI4, sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

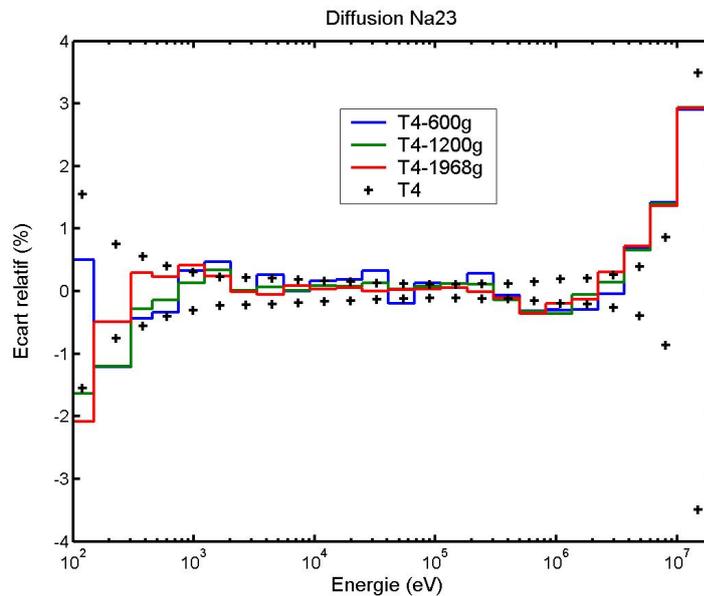


FIG. 9.60: Écart relatif sur le taux de diffusion pour le Na23. Les solutions multigroupes sont obtenues par APOLLO2. Les valeurs de référence, obtenues par un calcul TRIPOLI4, sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

Le tableau 9.15 montre l'espace mémoire et les temps de calcul avec les maillages énergétiques à 600, 1200 et 1968 groupes sur une machine OSF1 (alpha V5.1). Avec le maillage à 1200 groupes par rapport au maillage ECCO à 1968 groupes, l'espace mémoire est réduit à 35 %, les temps de calcul du module d'autoprotection et du solveur de flux sont diminués respectivement à 32 % et 44 %.

Calcul	Espace mémoire de la bibliothèque multigroupe [GB]	Temps de calcul d'autoprotection	Temps de calcul du solveur de flux
600	0.47 [12 %]	95,8 s [7,8 %]	17,4 [19 %]
1200	1.33 [35 %]	394.1 s [32 %]	40.5 s [44 %]
1968	3.76 [100 %]	1221 s [100 %]	92 s [100 %]

TAB. 9.15: Temps de calcul et espace mémoire pour le problème de la cellule RNR-sodium.

Ce premier test a montré que le passage de l'homogène à l'hétérogène ne dégrade pas la précision associée aux maillages optimisés telle qu'elle est évaluée en situation homogène.

De plus, le nouveau maillage optimisé à 1200 groupes permet d'effectuer des calculs pour la filière RNR-sodium aussi précis, voir parfois meilleurs sur certains noyaux (plutonium 239), que le maillage ECCO à 1968 groupes mais avec 40 % de groupes en moins. Ce gain assez élevé est dû au fait que le maillage à 1968 groupes ECCO a été conçu pour effectuer des calculs multigroupes à la fois sur les réacteurs rapides et thermiques. Pour répondre à cette contrainte, il a été raffiné avec 500 groupes en dessous de 100 eV. Les maillages optimisés en revanche sont beaucoup moins raffinés en dessous de 100 eV, parce que pour les problématiques à spectre rapide le flux neutronique est négligeable en dessous de cette énergie.

Une comparaison stricte entre ces deux maillages nécessiterait donc la création de nouveaux maillages optimisés communs aux deux filières. On pense qu'une des façons plus économe en terme de nombre de groupes pour générer un tel maillage serait l'emploi d'une autoprotection mixte sous-groupes et Livolant-Jeanpierre. On pourrait appliquer la méthode de Livolant-Jeanpierre résolvant un problème de structure fine en dessous de 1 keV, où le ralentissement est élastique et isotrope, et la méthode des sous-groupes au-dessus. En s'appuyant sur les résultats obtenus avec les maillages optimisés à 1200 et 1550 groupes et les maillages habituellement employés pour la filière thermique, comme le maillage SHEM à 281 groupes, on peut supposer que cette combinaison de méthodes devrait nécessiter entre 1000 et 1200 groupes au-dessus de 1 keV et autour de 300 groupes en dessous, ce qui amènerait à un maillage présentant au total entre 1300 et 1500 groupes.

9.2.3 Caractéristiques du test sur la couverture fertile

Le problème initial du traitement des couvertures fertiles est réduit à un problème plan à source externe ce qui permet *a priori* de prendre en compte l'essentiel du problème de transport d'un point de vue de la variable énergétique, c'est-à-dire d'avoir des flux réalistes dans les différentes zones de la couverture fertile.

La composition, présentée dans le tableau 9.16, est obtenue par homogénéisation volumique d'une cellule équivalente à celle du paragraphe 9.2.1, mais chargée cette fois-ci avec de l'uranium appauvri. L'épaisseur de la plaque est de 50 cm.

La source est isotrope et uniforme dans l'intervalle compris entre [1.35-3.678] MeV. Elle est placée sur la face gauche du motif plan, en utilisant l'artifice d'un très petit volume quasi vide pour modéliser une source de surface avec le code TRIPOLI4.

Noyau	Milieu	Concentration $at / (barns\ cm) * 10^{24}$
O16	fertile	$1.8543 \cdot 10^{-2}$
U235	fertile	$2.3413 \cdot 10^{-5}$
U238	fertile	$9.3416 \cdot 10^{-3}$
Mo95	fertile	$1.98303 \cdot 10^{-5}$
Mo96	fertile	$2.0777 \cdot 10^{-5}$
Mo97	fertile	$1.18957 \cdot 10^{-5}$
Mo98	fertile	$3.00569 \cdot 10^{-5}$
Mo100	fertile	$1.19953 \cdot 10^{-5}$
Fe54	fertile	$5.43977 \cdot 10^{-4}$
Fe56	fertile	$1.73669 \cdot 10^{-2}$
Fe57	fertile	$2.06336 \cdot 10^{-4}$
Fe58	fertile	$2.6261 \cdot 10^{-5}$
Cr50	fertile	$9.64153 \cdot 10^{-5}$
Cr52	fertile	$1.86188 \cdot 10^{-3}$
Cr53	fertile	$2.10825 \cdot 10^{-4}$
Cr54	fertile	$5.24286 \cdot 10^{-5}$
Ni58	fertile	$1.43637 \cdot 10^{-3}$
Ni60	fertile	$5.49132 \cdot 10^{-4}$
Ni61	fertile	$2.37747 \cdot 10^{-5}$
Ni62	fertile	$7.5532 \cdot 10^{-5}$
Ni64	fertile	$1.9146 \cdot 10^{-5}$
Mo92	fertile	$1.8485 \cdot 10^{-5}$
Mo94	fertile	$1.1522 \cdot 10^{-5}$
Mn55	fertile	$2.24757 \cdot 10^{-4}$
Ti47	fertile	$5.26253 \cdot 10^{-6}$
Ti48	fertile	$5.3202 \cdot 10^{-5}$
Ti49	fertile	$3.96492 \cdot 10^{-6}$
Ti50	fertile	$3.89283 \cdot 10^{-6}$
Si28	fertile	$2.22354 \cdot 10^{-4}$
Si29	fertile	$1.12588 \cdot 10^{-5}$
Si30	fertile	$7.47369 \cdot 10^{-6}$
Na23	fertile	$1.01024 \cdot 10^{-2}$

TAB. 9.16: Composition de la couverture fertile.

Le calcul de référence est une simulation TRIPOLI4 version 4.6 dans laquelle l'histoire de 225 millions de neutrons a été simulée, pour bien converger les valeurs du courant sortant par la face opposée à la source. Nous avons utilisé pour ce calcul une description ponctuelle

des sections efficaces.

Les calculs APOLLO2 sont effectués en appliquant l'autoprotection des sous-groupes à isotope isolé avec une seule itération (traitement séquentiel) sur la même liste de noyaux et les mêmes domaines d'énergie utilisés dans l'optimisation. Le tableau 9.17 résume la liste des noyaux et les domaines d'énergie autoprotégés. L'ordre d'apparition des noyaux correspond à celui adopté dans le calcul d'autoprotection.

Nous avons discrétisé la plaque en deux régions de même volume pour l'autoprotection, subdivisé chaque région d'autoprotection en 32 régions d'égal volume pour le calcul du flux et utilisé une discrétisation angulaire S64. Ces discrétisations spatiales et angulaires sont issues d'une étude de convergence pour des ordres d'anisotropie de P1 à P5 et pour les maillages énergétiques à 300, 600, 1200 et 1968 groupes.

Noyau	Domaine énergétique
U238	10^{-5} eV - 20 keV, 300 keV - 20 MeV
Fe56	10^{-5} eV - 20 MeV
O16	10^{-5} eV - 20 MeV
Na23	10^{-5} eV - 20 MeV
U235	10^{-5} eV - 2.25 keV, 25 keV - 20 MeV
Ni58	10^{-5} eV - 20 MeV
Cr52	10^{-5} eV - 20 MeV
Ni60	10^{-5} eV - 20 MeV
Fe54	10^{-5} eV - 20 MeV
Mn55	10^{-5} eV - 20 MeV

TAB. 9.17: Liste des noyaux et domaine d'énergie autoprotégés.

9.2.4 Comparaison TRIPOLI4 et APOLLO2 sur le problème plan à source dans la couverture fertile

La figure 9.61 montre l'estimateur $F(E)$, évalué sur les taux de réaction, en fonction de différents ordres d'anisotropie par rapport à la référence Monte Carlo. On peut observer que :

- pour chaque maillage énergétique la convergence des solutions est monotone ;
- la hiérarchie en terme de précision des différents maillages optimisés n'est pas affectée par l'ordre d'anisotropie ;
- le maillage à 1200 groupes est aussi précis que le maillage à 1968 groupes ;
- les écarts les plus faibles sont obtenus avec le maillage optimisé à 1550 groupes ;
- à partir de l'ordre P3 les solutions multigroupes convergent ;
- la sensibilité à l'ordre d'anisotropie de la solution multigroupe croît avec la finesse du maillage à cause de la corrélation angle-énergie³.

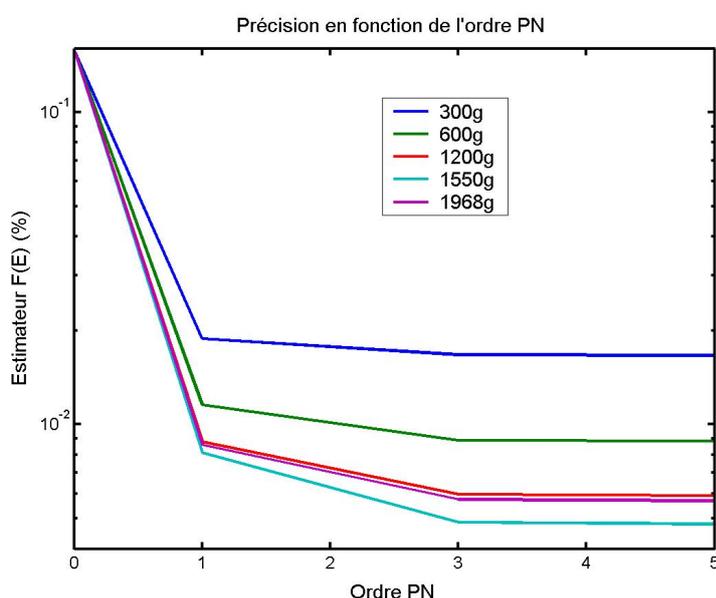


FIG. 9.61: Estimateur en fonction de l'ordre d'anisotropie pour le problème sur la couverture fertile.

Le tableau 9.18 compare à la référence TRIPOLI4 les courants intégraux de retour et sortant calculés sur différents maillages. On constate que le courant de retour est calculé à mieux que 0.1 % avec tous les maillages, mais que seuls les maillages à 1200, 1550 et 1968 groupes garantissent un courant sortant dans les barres d'erreur à trois écarts-types de la simulation Monte Carlo. En revanche, avec tous les maillages le courant sortant est sous-estimé et est en dehors des barres d'erreur de la simulation TRIPOLI4. L'erreur la plus faible est obtenue avec le maillage ECCO à 1968 groupes, toutefois le gain en précision en passant de 1200 à 1968 groupes est assez faible.

Les figures 9.62 et 9.63 montrent que la distribution énergétique du courant de retour et du courant sortant est bien reproduite par un calcul APOLLO2 avec le maillage à 1200 groupes.

Les figures de 9.64 à 9.67 donnent la distribution énergétique des erreurs absolues et relatives pour les courants de retour et sortant obtenus avec les maillages à 600, 1200 et 1968 groupes.

³En réduisant la largeur des groupes la distribution angulaire est définie sur un domaine au fur et à mesure plus étroit. Pour bien la représenter, il faut augmenter l'ordre du développement en polynômes de Legendre.

Grandeur	Calcul					
	TRIPOLI4	300g	600g	1200g	1550g	1968g
Courant de retour	35315 \pm 3	35279 (0.1)	35292 (0.06)	35306 (0.02)	35308 (0.02)	35307 (0.02)
Courant sortant	1644 \pm 1	1607 (2.25)	1615 (1.76)	1625 (1.1)	1627 (1.03)	1628 (0.97)

TAB. 9.18: Courants de retour et sortants de TRIPOLI4 et d'APOLLO2. Les valeurs de référence sont présentées avec un intervalle de confiance d'un écart-type. Entre parenthèses on montre l'erreur en pour cent.

Les erreurs relatives sur le courant de retour sont inférieures à 1 % pour le seul maillage à 1200 groupes. Avec les autres maillages, en revanche, des erreurs relatives plus élevées sont commises mais dans des intervalles énergétiques où les courants sont faibles.

Le courant sortant dépasse le critère de 1 % avec tous les maillages, les résultats plus précis étant obtenus avec le maillage à 1200 groupes. Les écarts absolus maximaux sont en tout cas assez réduits et valent 4.8, 2.5 et 2 pcm respectivement pour le maillage à 600, 1200 et 1968 groupes.

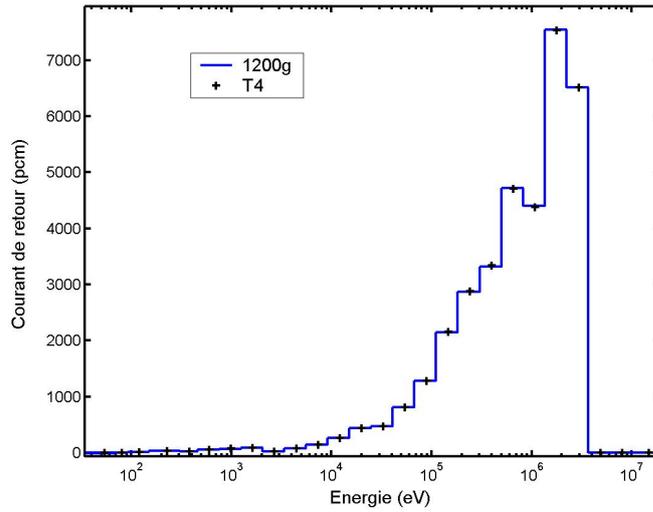


FIG. 9.62: Spectre en énergie du courant de retour. La solution multigroupe est obtenue par APOLLO2. Les valeurs de référence sont obtenues par un calcul TRIPOLI4.

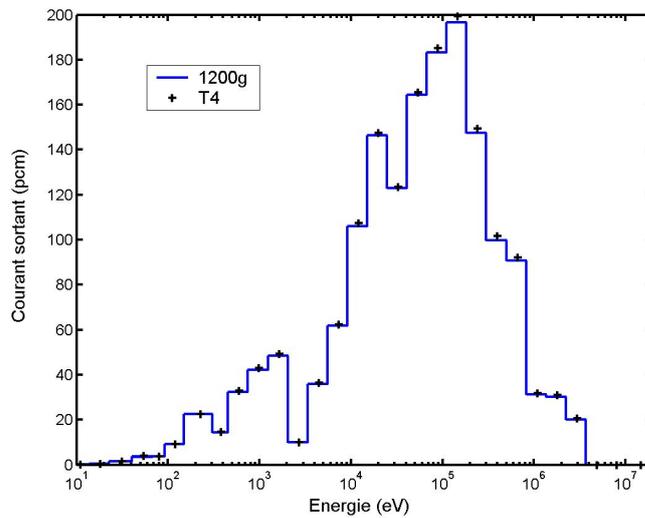


FIG. 9.63: Spectre en énergie du courant sortant. La solution multigroupe est obtenue par APOLLO2. Les valeurs de référence sont obtenues par un calcul TRIPOLI4.

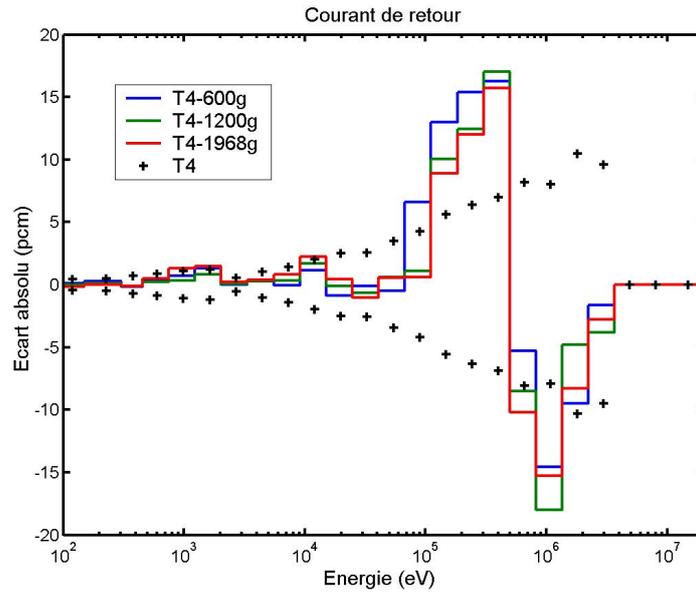


FIG. 9.64: Écart absolu sur le courant de retour. Les solutions multigroupes sont obtenues par APOLLO2. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

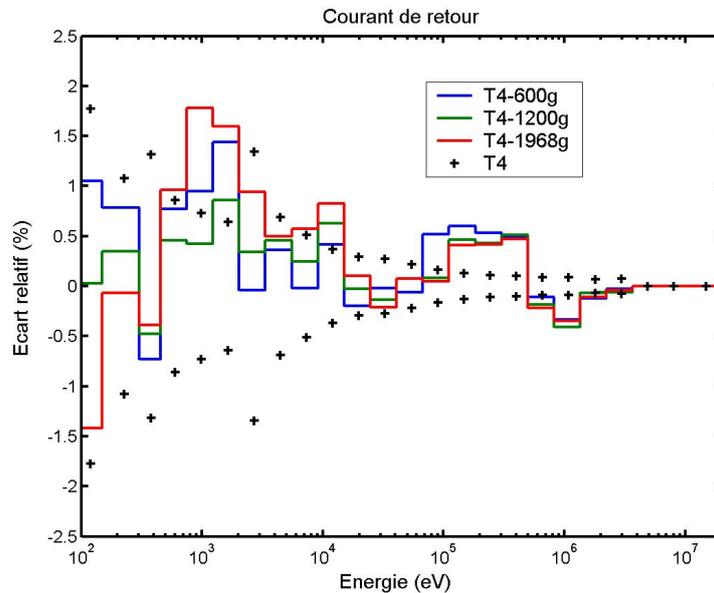


FIG. 9.65: Écart relatif sur le courant de retour. Les solutions multigroupes sont obtenues par APOLLO2. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

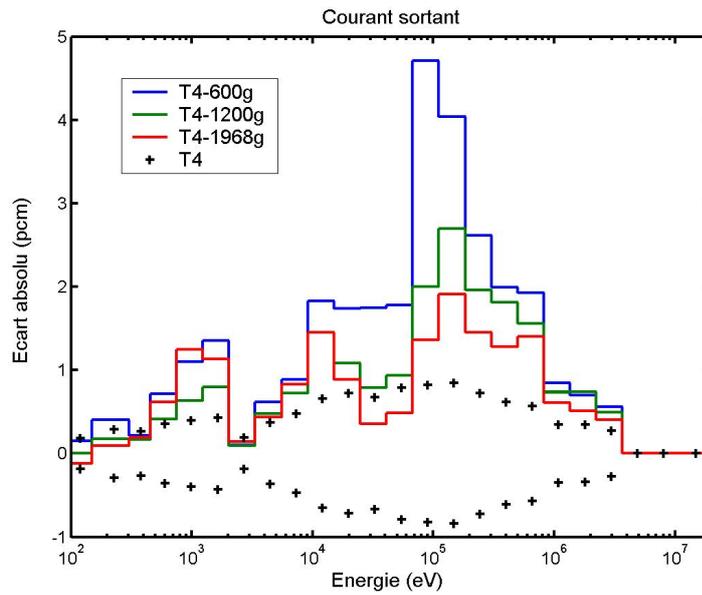


FIG. 9.66: Écart absolu sur le courant sortant. Les solutions multigroupes sont obtenues par APOLLO2. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

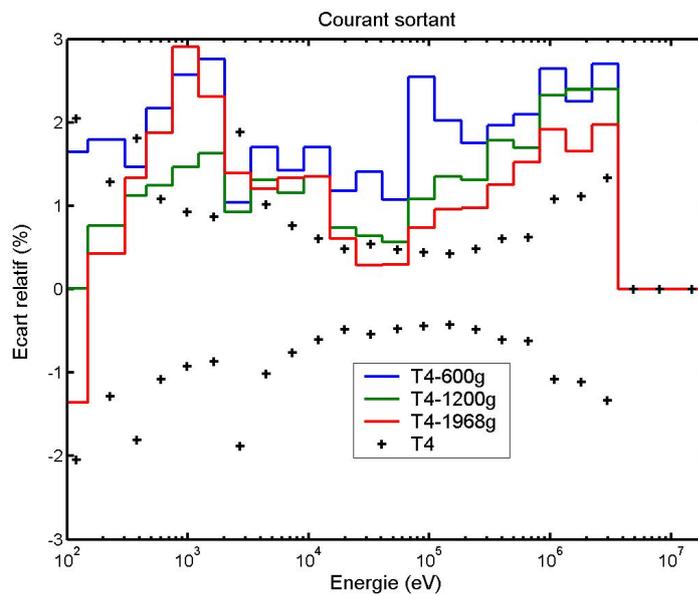


FIG. 9.67: Écart relatif sur le courant de retour. Les solutions multigroupes sont obtenues par APOLLO2. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

On va maintenant analyser les erreurs sur les taux de réaction dans les deux régions d'autoprotection. La première région, dite interne, est celle la plus proche de la source alors que la seconde est située dans la zone périphérique de la plaque.

Région interne

Le tableau 9.19 compare à la référence TRIPOLI4 les taux intégraux, d'absorption et de diffusion de l'uranium 238, de diffusion du fer 56, de l'oxygène 16 et du sodium 23 pour les calculs à 600, 1200 et 1968 groupes dans la région interne. Aucun calcul multigroupe ne rentre dans les barres d'erreur à trois écarts-types de la référence Monte Carlo. Les meilleurs résultats sont obtenus avec le maillage à 1968 groupes et correspondent à une erreur relative entre 0.2 et 0.3 %. On constate aussi que le gain en précision en passant de 1200 à 1968 groupes est assez réduit.

Ces désaccords numériques sont assez significatifs, mais ils restent acceptables d'un point de vue physique. Une possible explication de leur origine est donnée à la page 219.

Réaction	Calcul			
	TRIPOLI4	600g	1200g	1968g
Absorption U238	8954 ±1	8994 (-0.45)	8980 (-0.3)	8975 (-0.24)
Diffusion U238	254025 ±39	254942 (-0.37)	254589 (-0.22)	254528 (-0.2)
Diffusion Fe56	181124 ±29	182040 (-0.5)	181654 (-0.29)	181607 (-0.27)
Diffusion O16	170987 ±26	171551 (-0.3)	171423 (-0.25)	171361 (-0.22)
Diffusion Na23	120185 ±19	120690 (-0.42)	120531 (-0.29)	120506 (-0.27)

TAB. 9.19: Taux de réactions globaux de TRIPOLI4 et d'APOLLO2 pour le problème de la couverture fertile dans la région interne. Les valeurs de référence sont présentées avec un intervalle de confiance d'un écart-type. Entre parenthèses on montre l'erreur en pour cent.

Si on analyse les figures de 9.68 à 9.77, donnant la distribution en énergie des écarts absolus et relatifs sur les taux de réaction dans la région interne, on constate que :

- tous les calculs multigroupes surestiment les résultats TRIPOLI4 ;
- les solutions à 1200 et 1968 groupes présentent des erreurs inférieures à 1 %, sauf en dessous de 300 eV, domaine où les taux de réaction sont faibles ;

On peut donc conclure que même si les solutions à 1200 et 1968 groupes ne remplissent pas le critère de précision intégral de 0.1 %, les taux dans chaque groupe sont calculés d'une façon satisfaisante.

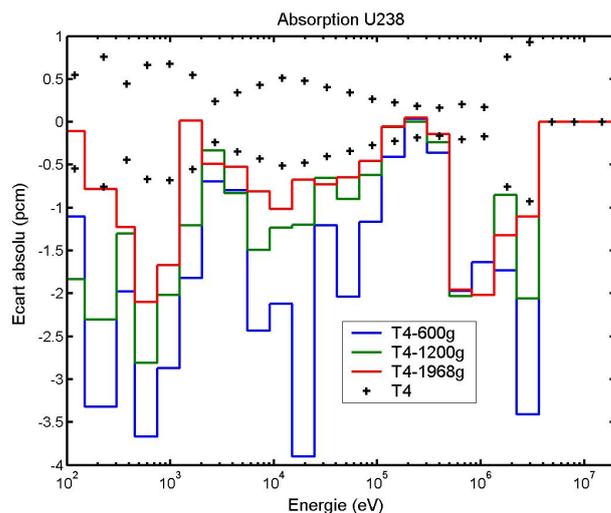


FIG. 9.68: Écart absolu sur le taux d'absorption de l'U238 dans la région interne de la couverture fertile. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

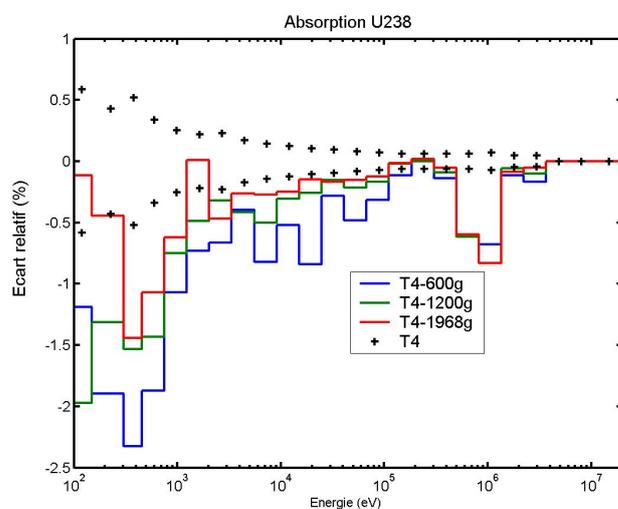


FIG. 9.69: Écart relatif sur le taux d'absorption de l'U238 dans la région interne de la couverture fertile. Les solutions multigroupes sont obtenues par APOLLO2. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

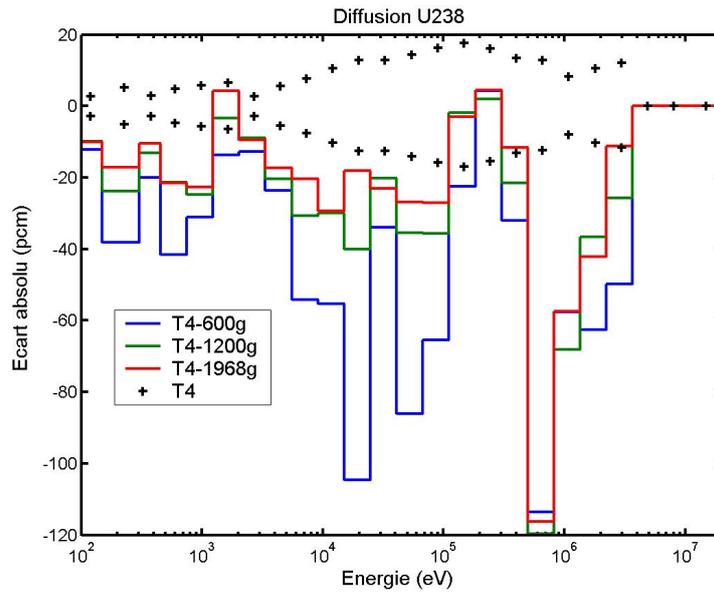


FIG. 9.70: Écart absolu sur le taux de diffusion de l'U238 dans la région interne de la couverture fertile. Les solutions multigroupes sont obtenues par APOLLO2. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

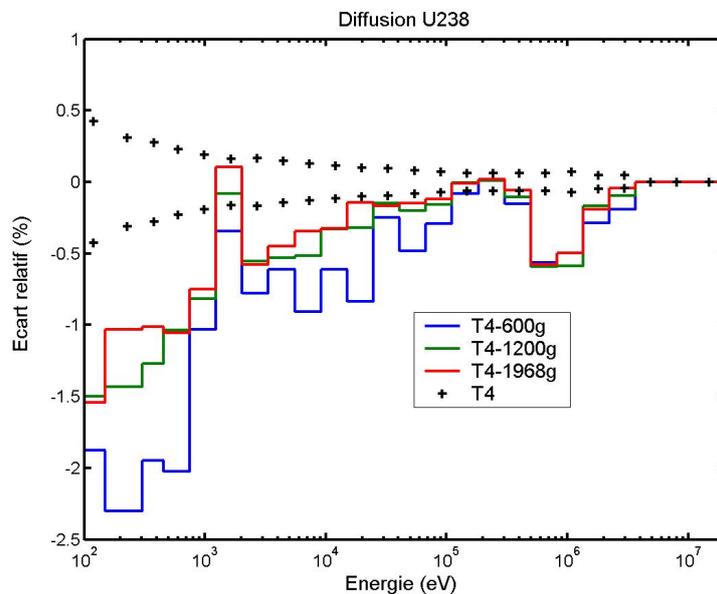


FIG. 9.71: Écart relatif sur le taux de diffusion de l'U238 dans la région interne de la couverture fertile. Les solutions multigroupes sont obtenues par APOLLO2. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

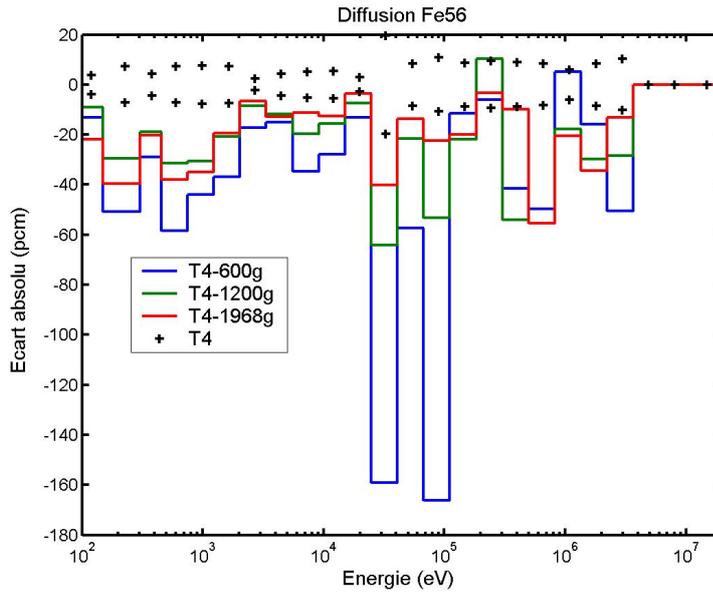


FIG. 9.72: Écart absolu sur le taux de diffusion du Fe56 dans la région interne de la couverture fertile. Les solutions multigroupes sont obtenues par APOLLO2. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

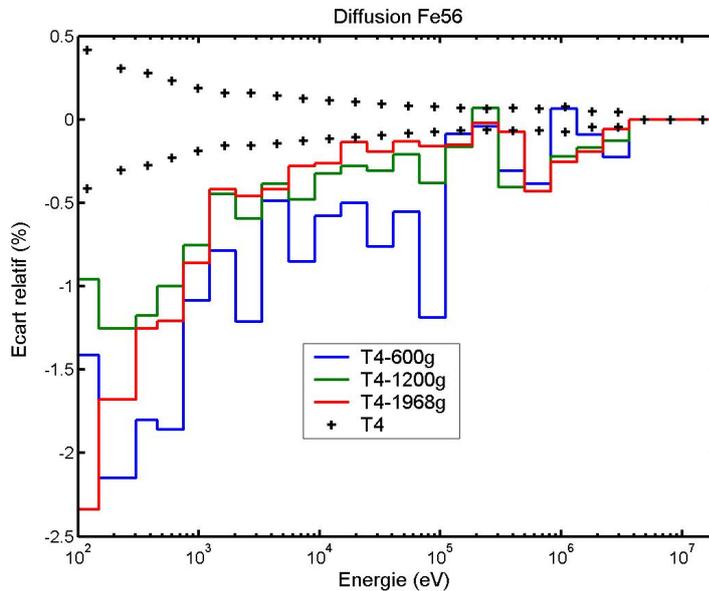


FIG. 9.73: Écart relatif sur le taux de diffusion du Fe56 dans la région interne de la couverture fertile. Les solutions multigroupes sont obtenues par APOLLO2. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

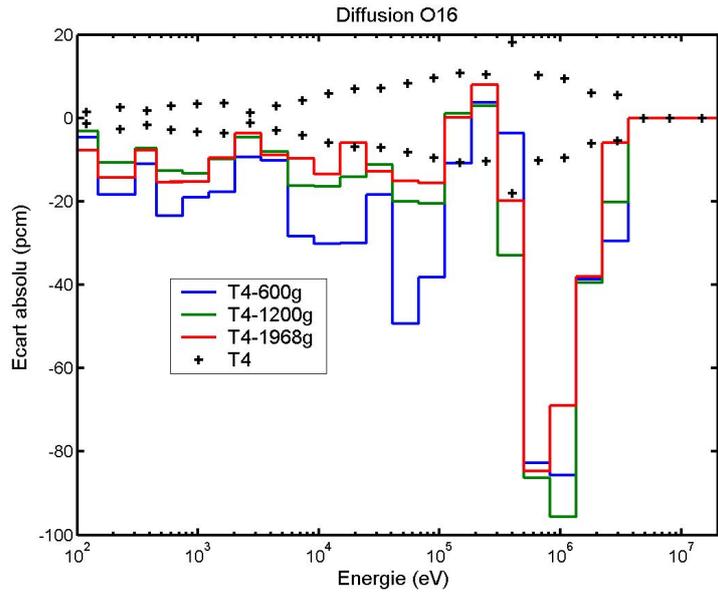


FIG. 9.74: Écart absolu sur le taux de diffusion de l'O16 dans la région interne de la couverture fertile. Les solutions multigroupes sont obtenues par APOLLO2. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

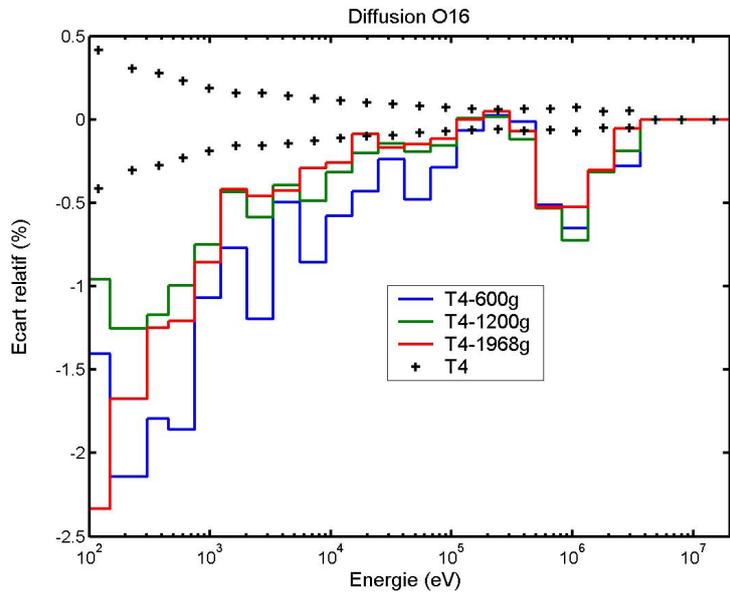


FIG. 9.75: Écart relatif sur le taux de diffusion de l'O16 pour le problème de la couverture fertile dans la région interne. Les solutions multigroupes sont obtenues par APOLLO2. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

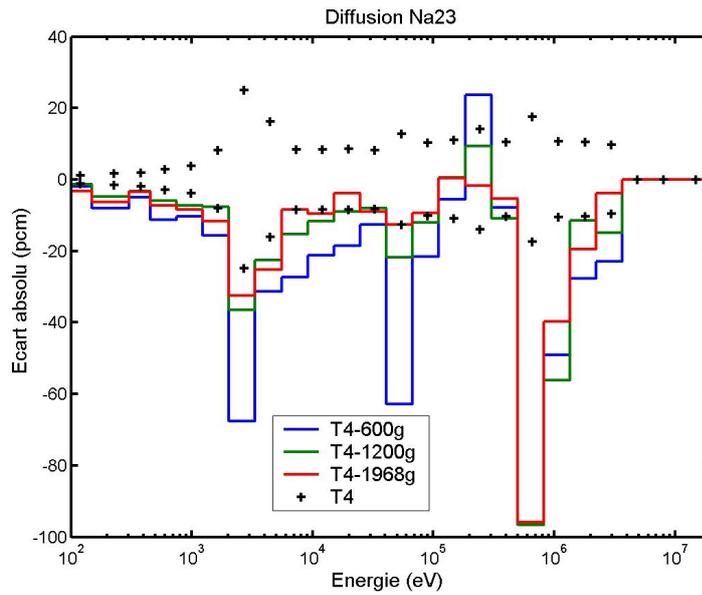


FIG. 9.76: Écart absolu sur le taux de diffusion du Na23 dans la région interne de la couverture fertile. Les solutions multigroupes sont obtenues par APOLLO2. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

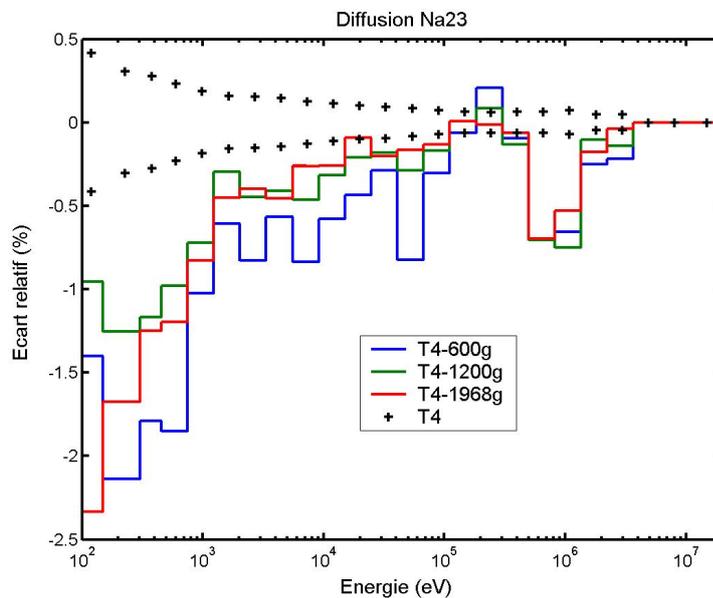


FIG. 9.77: Écart relatif sur le taux de diffusion du Na23 dans la région interne de la couverture fertile. Les solutions multigroupes sont obtenues par APOLLO2. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

Région périphérique

Le tableau 9.20 compare à la référence TRIPOLI4 les taux intégraux, d'absorption et de diffusion de l'uranium 238, de diffusion du fer 56, de l'oxygène 16 et du sodium 23 pour les calculs à 600, 1200 et 1968 groupes dans la région périphérique. Les meilleurs résultats sont obtenus avec le maillage à 1968 groupes et correspondent à une erreur relative entre 0.002 et 0.2 %. Le critère de précision intégrale de 0.1 % n'est rempli qu'avec les maillages à 1200 et 1968 groupes.

Réaction	Calcul			
	TRIPOLI4	600g	1200g	1968g
Absorption U238	2837 ±1	2841 (-0.12)	2841 (-0.12)	2839 (-0.08)
Diffusion U238	78375 ±23	78276 (0.12)	78269 (0.13)	78339 (0.04)
Diffusion Fe56	58536 ±19	58728 (-0.32)	58594 (-0.1)	58646 (-0.19)
Diffusion O16	49263 ±14	49182 (0.16)	49193 (-0.14)	49243 (0.04)
Diffusion Na23	38942 ±12	38915 (0.07)	38909 (0.08)	38943 (-0.002)

TAB. 9.20: Taux de réactions globaux de TRIPOLI4 et d'APOLLO2 pour le problème de la couverture fertile dans la région périphérique. Les valeurs de référence sont présentées avec un intervalle de confiance d'un écart-type. Entre parenthèses on montre l'erreur en pour cent.

Analysons ensuite grâce aux figures de 9.78 à 9.87 la distribution des écarts absolus et relatifs sur les taux de réaction, condensés sur la structure à 33 groupes commune aux différents maillages, dans la région en périphérie.

Les solutions à 1200 et 1968 groupes donnent des erreurs acceptables, inférieures à 1 % par groupe, sauf en dessous de 300 eV, domaine où les taux de réaction sont faibles.

Dans cette région, contrairement à la précédente, les solutions par rapport à la référence Monte Carlo montrent des erreurs par excès et par défaut. Les différences des résultats dans les deux régions d'autoprotection pourraient être produites par la représentation de la source externe dans le module d'autoprotection du code APOLLO2. Actuellement, elle est choisie uniforme en espace et située dans le premier groupe à autoprotéger et elle est donc différente de celle du problème de transport à résoudre. L'emploi d'une source plus proche du problème réel pourrait donc éliminer ce biais et probablement améliorer la précision des calculs notamment dans les régions où les solutions sont plus influencées par la source externe.

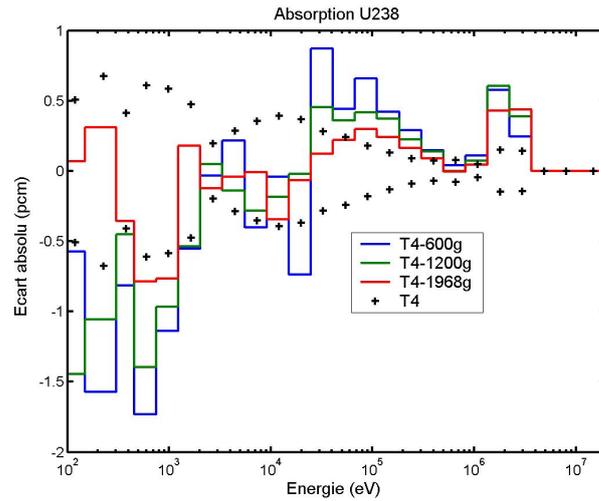


FIG. 9.78: Écart absolu sur le taux d'absorption de l'U238 dans la région périphérique de la couverture fertile. Les solutions multigroupes sont obtenues par APOLLO2. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

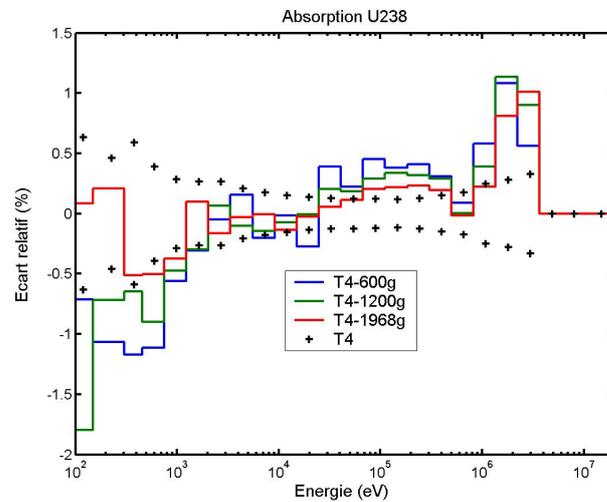


FIG. 9.79: Écart relatif sur le taux d'absorption de l'U238 dans la région périphérique de la couverture fertile. Les solutions multigroupes sont obtenues par APOLLO2. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

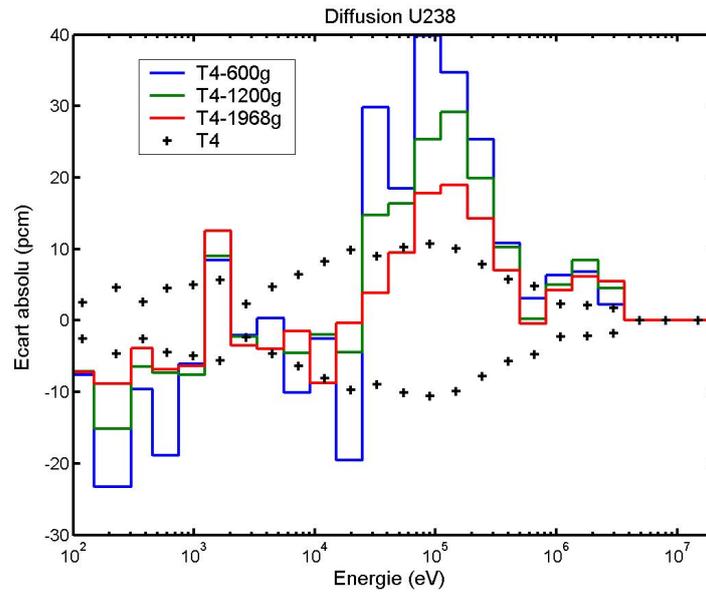


FIG. 9.80: Écart absolu sur le taux de diffusion de l'U238 dans la région périphérique de la couverture fertile. Les solutions multigroupes sont obtenues par APOLLO2. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

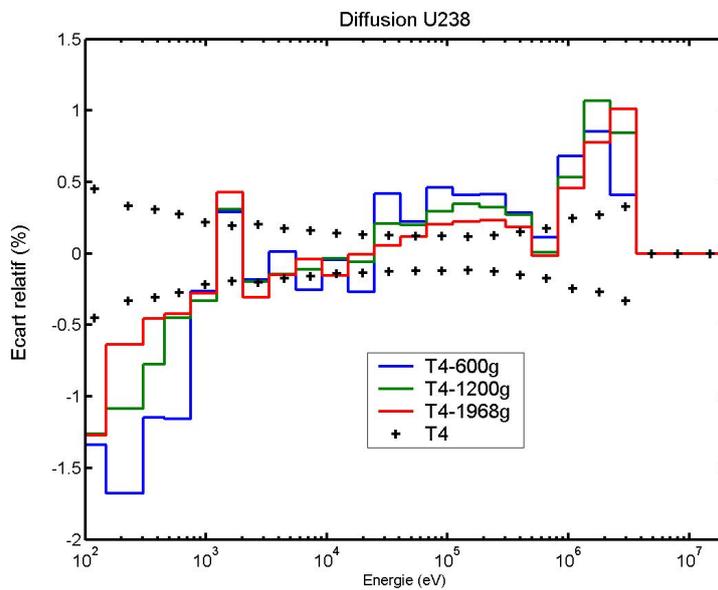


FIG. 9.81: Écart relatif sur le taux de diffusion de l'U238 dans la région périphérique de la couverture fertile. Les solutions multigroupes sont obtenues par APOLLO2. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

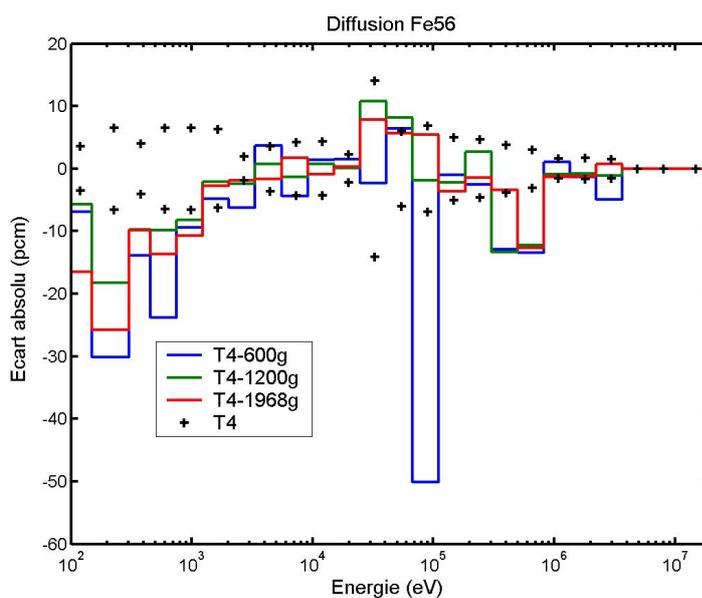


FIG. 9.82: Écart absolu sur le taux de diffusion du Fe56 dans la région périphérique de la couverture fertile. Les solutions multigroupes sont obtenues par APOLLO2. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

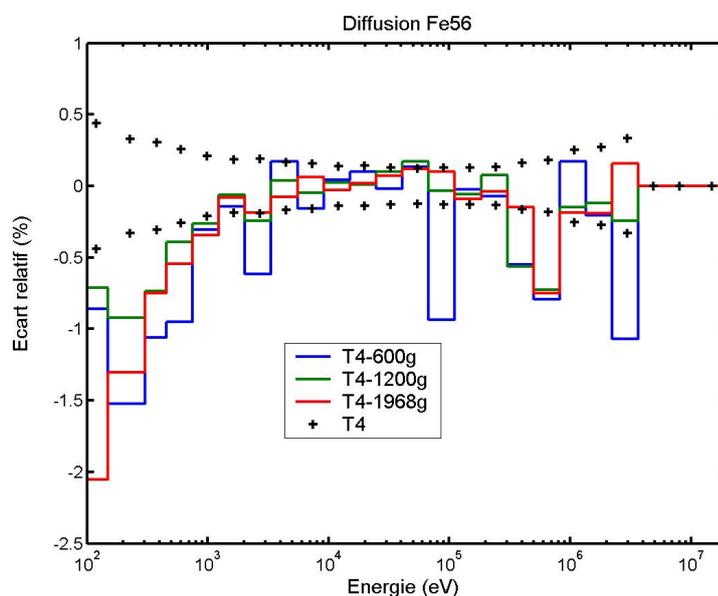


FIG. 9.83: Écart relatif sur le taux de diffusion du Fe56 dans la région périphérique de la couverture fertile. Les solutions multigroupes sont obtenues par APOLLO2. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

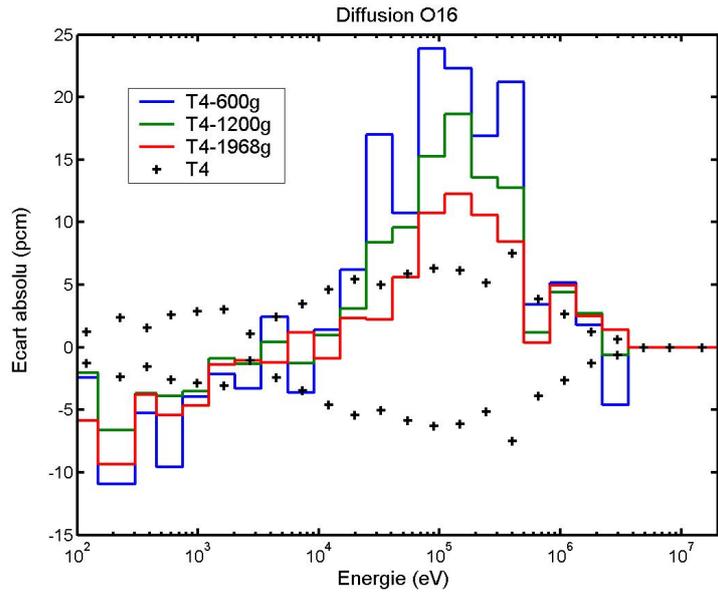


FIG. 9.84: Écart absolu sur le taux de diffusion de l'O16 dans la région périphérique de la couverture fertile. Les solutions multigroupes sont obtenues par APOLLO2. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

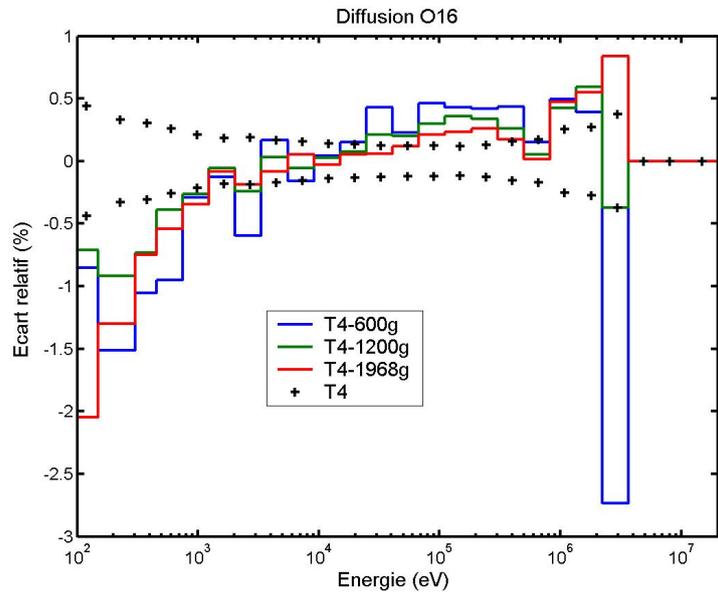


FIG. 9.85: Écart relatif sur le taux de diffusion de l'O16 dans la région périphérique de la couverture fertile. Les solutions multigroupes sont obtenues par APOLLO2. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

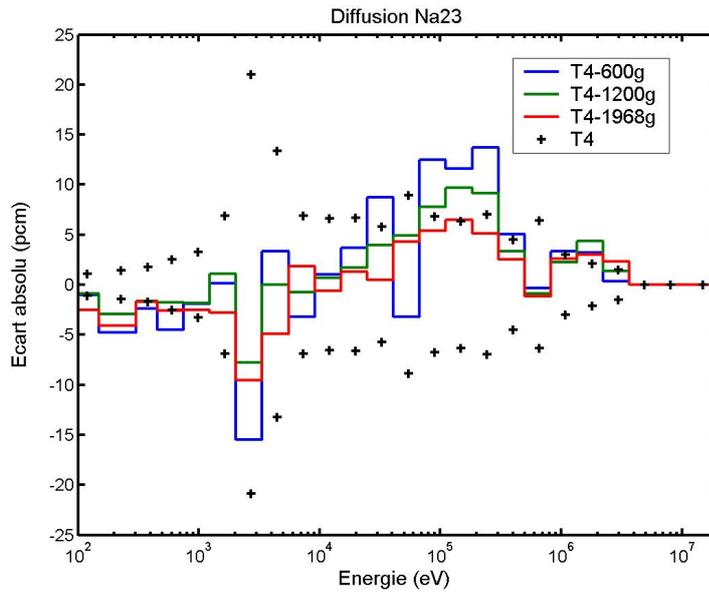


FIG. 9.86: Écart absolu sur le taux de diffusion du Na23 dans la région périphérique de la couverture fertile. Les solutions multigroupes sont obtenues par APOLLO2. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

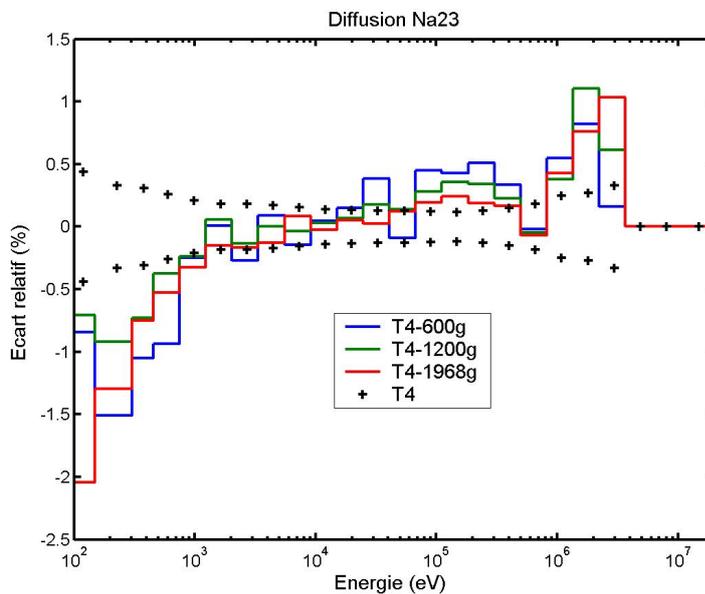


FIG. 9.87: Écart relatif sur le taux de diffusion du Na23 dans la région périphérique de la couverture fertile. Les solutions multigroupes sont obtenues par APOLLO2. Les valeurs de référence TRIPOLI4 sont présentées avec un intervalle de confiance de 3 écarts-types.

Ce deuxième test nous a montré qu'avec le maillage à 600 groupes le courant sortant est déjà bien calculé, ce qui rend cette structure multigroupe adaptée à l'évaluation de l'albédo du réflecteur.

De plus, on a vérifié qu'avec le maillage à 1200 groupes les taux de réactions dans les deux régions d'autoprotection présentent des erreurs inférieures à 1 % par groupe. De ce fait, avec ce maillage on pourrait effectuer des calculs précis d'évolution dans les différentes régions d'une couverture.

Par ailleurs, nous avons montré qu'avec le maillage à 1200 groupes les spectres du courant sortant sont bien reproduits, ce qui permettrait l'emploi de ce maillage lors des calculs de propagation profonde pour évaluer des doses ou l'endommagement de la cuve d'un réacteur RNR-sodium.

De manière plus générale, ces résultats constituent une preuve empirique de la validité de l'approche choisie pour l'optimisation du maillage énergétique. **On peut optimiser un maillage énergétique en milieu homogène infini, en négligeant les effets de l'anisotropie du flux et de la corrélation angle-énergie. Au moment du calcul on est en mesure d'adapter au maillage énergétique optimisé l'ordre du développement en polynômes de Legendre pour converger vers la solution de référence.**

9.2.5 Conclusion des tests de validation

Les tests de validation discutés aux paragraphes précédents nous ont montré que, sur une cellule type RNR-sodium, le maillage à 1200 groupes donne des résultats dans les barres d'erreur de la simulation Monte Carlo. Le problème de transport dans la couverture fertile, en revanche, révèle des erreurs de calcul plus importantes surtout dans les régions en proximité de la source, mais on constate qu'à partir des structures multigroupes à 1200 groupes, les erreurs rentrent dans les critères de 1 % par groupe. **Ces résultats justifient l'usage du maillage à 1200 groupes comme maillage de référence pour la filière RNR-sodium.**

Le maillage à 600 groupes présente sur une cellule type RNR-sodium des erreurs intégrales dans les barres d'erreur à trois écarts-types de la simulation Monte Carlo et des erreurs par groupes inférieurs à 1,5 %. Les solutions sur le problème de transport dans la couverture fertile sont acceptables, pour calculer le courant de retour, mais approximatives sur les autres grandeurs neutroniques. Ces caractéristiques rendent **le maillage à 600 groupes adapté aux calculs industriels de production sur des assemblages à spectre rapide ou des calculs d'albédo d'un réflecteur.**

Conclusions et perspectives

Bilan L'objectif de la thèse, à savoir, concevoir et réaliser des méthodes permettant de générer des maillages énergétiques optimisés pour lesquels la précision et le coût sont contrôlés en amont des codes de transport, est en grande partie atteint. Les développements ont, en effet, abouti à un nouveau code appelé AEMC (*Adaptive Energy Mesh Constructor*), qui permet cette optimisation, sous réserve que les problèmes neutroniques réels puissent être représentés par des milieux homogènes infinis choisis de manière pertinente. L'optimisation est réalisée selon un processus en deux étapes : la génération du maillage de référence fournissant une solution multigroupe équivalente au Monte Carlo (contrainte de la précision) et la condensation de celui-ci sur une structure avec un nombre de groupes fixé par l'utilisateur (contrainte sur le coût) pour un modèle d'autoprotection choisi. À la fin de ce processus, la validation sur des problèmes hétérogènes est nécessaire pour vérifier que la hiérarchie établie des maillages optimisés en terme de précision avec les calculs homogènes se retrouve en situation hétérogène. L'usage de cas neutroniques présentant une assez forte anisotropie du flux angulaire est recommandé, car le maillage est optimisé en milieu homogène infini et, de ce fait, l'anisotropie du flux n'est pas prise en compte. Cette correspondance entre les hiérarchies en homogène et hétérogène doit beaucoup à la qualité de la transposition hétérogène-homogène, partie du processus qui est de l'entière responsabilité de l'utilisateur.

AEMC a été testé en générant de nouveaux maillages énergétiques optimisés pour la filière des réacteurs à neutrons rapides refroidis au sodium. Nous avons montré que, pour la filière telle que nous l'avons définie, des calculs multigroupes aussi précis que ceux réalisés aujourd'hui avec 1968 groupes sont possibles avec un maillage de 1200 groupes et une autoprotection en sous-groupes à isotope isolé. Précisons que le maillage à 1968 groupes est en mesure de calculer des réacteurs thermiques ce qui n'est pas le cas du maillage à 1200 groupes. De plus, un maillage à 600 groupes avec une autoprotection en sous-groupes à isotope isolé offre un bon compromis coût - précision. Il pourrait donc être utilisé lors des calculs de pré-dimensionnement. Enfin, un maillage à 300 groupes permettrait des calculs que l'on pourrait qualifier d'"exploratoire au dimensionnement".

Les études effectuées pour l'optimisation du maillage énergétique nous ont conduit à revoir et améliorer certaines étapes du traitement des données multigroupes. On a repris et étendu aux mélanges et aux réactions inélastiques discrètes hors continuum la méthode de résolution de l'équation de ralentissement ponctuelle en énergie. Ce travail doit encore être complété avec la prise en compte de l'anisotropie dans le système du centre de masse. Pour cela, on a proposé une description des distributions angulaires constante par morceaux, comme celles employées par le code Monte Carlo TRIPOLI4. Les résultats de ce travail permettront de disposer d'un solveur de référence dans certains domaines énergétiques pour résoudre des problèmes à source en milieu homogène infini. Son emploi sera utile au moment de la construction du maillage de référence avec AEMC ou également pour calculer les taux effectifs contenus dans les bibliothèques multigroupes du code de transport APOLLO2.

Pendant le développement de AEMC, les méthodes d'autoprotection actuellement disponibles dans APOLLO2 ont été étudiées, reprises et améliorées. La méthode des sous-groupes a été étendue en traitant le mélange des noyaux avec les sections ponctuelles au

lieu des tables de probabilités. Ces choix permettent de réaliser un calcul multigroupe de référence de meilleure qualité. Par ailleurs, l'analyse des hypothèses sur lesquelles cette méthode est basée a montré que la largeur des groupes du maillage énergétique ne doit pas dépasser une fraction de la perte moyenne d'énergie des neutrons par transfert.

Des extensions de la méthode Livolant-Jeanpierre ont été développées pour en améliorer la précision. Par exemple, étant en mesure de construire une solution de référence multigroupe, nous pouvons l'utiliser pour la résolution multigroupe de l'équation de structure fine et ainsi permettre d'étendre le calcul des taux de réactions de référence à tout l'axe énergétique sans restriction. Une autre extension plus conséquente concerne la résolution d'un problème à source externe pour les tabulations des taux de référence. Ce choix permet de lever les approximations, inhérentes à l'équation de structure fine, relatives au découplage de la source de fission et de la modélisation des opérateurs de ralentissement. La distribution énergétique de la source de fission est introduite dans la source externe, l'approximation sur le ralentissement des noyaux résonnants est enlevée et la contribution des noyaux modérateurs est prise en compte. Les tests réalisés avec cette nouvelle méthode sur des problèmes en milieu homogène infini montrent que le gain en terme de nombre de groupes récupérable par rapport à une méthode en sous-groupes à isotope isolé est d'un facteur deux. Ce développement s'est imposé face au constat que l'autoprotection Livolant-Jeanpierre pour les problématiques RNR-sodium, y compris avec tabulations des taux de transfert, ne permettait pas d'obtenir une réduction du nombre de groupes conséquente par rapport à une méthode des sous-groupes à isotope isolé.

L'introduction de cette nouvelle méthode dans le code APOLLO2 nécessitera la résolution d'une équation à source en milieu hétérogène, par exemple, avec la méthode des probabilités de collision. D'autre part, un calcul analytique du noyau de transfert sera nécessaire, au moins dans certains domaines énergétiques, pour se dispenser du stockage des matrices de transfert multigroupes calculées sur un maillage énergétique fin. Probablement, cette voie poussée à son terme revient à un calcul d'autoprotection avec une équivalence entre deux opérateurs de transport, opérant respectivement sur un maillage énergétique fin et un maillage énergétique grossier, sur des motifs géométriques plus simples que le problème global à résoudre.

Perspectives de recherche Suite aux travaux menés, on peut envisager deux axes de recherche : un premier plutôt à dominante étude et un deuxième orienté vers le développement.

Côté étude, la première piste à poursuivre est l'emploi de AEMC pour générer de nouveaux maillages optimisés à la filière thermique. Ce travail pourra s'appuyer sur l'étude effectuée pendant cette thèse dans le cadre de l'optimisation des maillages énergétiques pour la filière RNR-sodium, mais il introduira des difficultés supplémentaires. D'une part, étant donné les ressources informatiques limitées et la variété des combustibles, des modérateurs et des configurations géométriques appartenant à cette filière, il sera nécessaire de faire une analyse, non triviale, des compositions et des problèmes (valeur propre, source ou structure fine) les plus pertinents pour l'optimisation du maillage énergétique. D'autre part, la forte dépendance en espace des grandeurs neutroniques dans ces systèmes rend l'étape d'homogénéisation plus complexe. L'emploi d'une paramétrisation en dilution devrait permettre assurément de bien reproduire les conditions spectrales dans ces systèmes. De manière générale, cette étude sera l'occasion d'analyser en détail les règles avec lesquelles on effectue la meilleure transposition du problème neutronique hétérogène initial au problème homogène utilisé dans l'optimisation.

À partir des résultats de ce travail et de l'étude sur la filière RNR-sodium, on sera en mesure de discuter de la pertinence de l'emploi de bibliothèques multifilières. En effet, rien ne nous interdit de considérer d'une part comme filière une collection de problèmes neu-

troniques incluant des cas thermiques et des cas RNR-sodium et d'autre part d'utiliser une autoprotection combinée avec la méthode Livolant-Jeanpierre pour les zones thermique et épithermique et la méthode des sous-groupes pour la zone rapide. L'autoprotection combinée pourrait être une condition pour construire des bibliothèques multifilières optimisées.

La possibilité de construire des solutions multigroupes aussi précises que l'on souhaite nous a amené à faire des simulations Monte Carlo avec des précisions statistiques poussées. C'est alors que nous avons constaté des écarts faibles pour le neutronicien mais systématiques, donc probablement signes d'un biais de modèle. Ils ne remettent pas en cause les résultats obtenus mais cela nous suggère une étude et/ou un développement. Ce travail viserait à éclaircir le désaccord dans le domaine non résolu entre les codes déterministes AEMC, APOLLO2 et ERANOS d'une part et le code TRIPOLI4 d'autre part. Les travaux réalisés par Laurence Luneville sur la résolution multibande de l'équation de transport [Luneville, 1998] restent à notre connaissance la seule piste à explorer pour résoudre ce désaccord.

Au niveau de AEMC, l'optimisation du maillage énergétique est effectuée en traitant simultanément un ensemble de problèmes homogènes. Cette approche peut montrer ses limites en termes d'espace mémoire requis et de temps de calcul, si on veut traiter des problèmes à grande échelle. Pour cela, il y a intérêt à étudier une méthode progressive. L'ensemble des problèmes homogènes est divisé en sous-ensembles et l'optimisation est effectuée par étapes successives. À chaque pas on optimise le maillage énergétique en utilisant les problèmes du sous-ensemble courant et une fonction, préalablement paramétrée, qui reproduit les réponses des sous-ensembles déjà analysés. La création d'une telle fonction pourra être achevée grâce à la plate-forme URANIE [Gaudier, 2008], développée au laboratoire SFME du CEA de Saclay.

Au niveau du traitement des données multigroupes, d'après les études menées pendant cette thèse certaines anomalies ont été détectées notamment sur les matrices multigroupes de transfert générées par le code NJOY pour des maillages supérieurs à 13000 groupes. Pour étudier la convergence des solutions de référence sur la plus vaste gamme possible de maillages énergétiques, il pourrait être utile d'analyser les méthodes numériques d'intégration et, s'il s'avère nécessaire, une amélioration de celles-ci. Ce travail sera également l'occasion pour étudier des représentations de l'anisotropie du transfert alternatives au développement en polynômes de Legendre [Vidal, 2008] et [Sanchez, 2008].

Ces travaux pourraient permettre des avancées dans la description des distributions angulaires des codes de transport. La question d'une optimisation conjointe de la discrétisation énergétique et de la représentation de l'anisotropie du transfert reste encore ouverte. Ce travail de thèse n'a pu pour l'instant que donner une réponse de type empirique à cette question en adaptant l'ordre de Legendre une fois le maillage optimisé.

Annexe A

La méthode des probabilités de collision

Prenons l'équation intégrale de transport monocinétique (2.6) et intégrons celle-ci sur un domaine de l'espace D entouré par la surface S . En plaçant le point \vec{r}_s sur la surface S et en intégrant ensuite sur $\vec{\Omega}$, on obtient l'équation pour le flux scalaire :

$$\Phi(\vec{r}) = \int_S \Phi(\vec{r}_s, \vec{\Omega}) \frac{\exp^{-\tau(\vec{r}_s)}}{R_s^2} \vec{\Omega} \cdot \vec{n}_- dS + \int_D q(\vec{r}') \frac{\exp^{-\tau(\vec{r}')}}{4\pi R^2} d\vec{r}',$$

où nous avons employé les relations :

$$\begin{aligned} - dS &= R_s^2 \frac{d\vec{\Omega}}{\vec{\Omega} \cdot \vec{n}_-}, \\ - d\vec{r}' &= R^2 dR d\vec{\Omega}, \\ - \vec{R}_s &= \vec{r} - \vec{r}_s \text{ et } \vec{R} = \vec{r} - \vec{r}'. \end{aligned}$$

On ajoute à cette équation, les conditions aux bords pour le flux scalaire :

$$\Phi_-(\vec{r}_s, \vec{\Omega}) = \Phi_0(\vec{r}_s, \vec{\Omega}) + \int_S \Phi_+(\vec{r}_s, \vec{\Omega}') t(\vec{r}_s, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) d\vec{\Omega}',$$

où $t(\vec{r}_s, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega})$ est le facteur d'albédo et les indices $-$, $+$ représentent les directions entrantes et sortantes du domaine.

Pour résoudre ce système d'équations, on partitionne le domaine D en sous domaine D_i et les surfaces S en éléments S_α , on adopte une représentation constante par morceaux pour le flux scalaire et le flux angulaire sur la surface :

$$\begin{aligned} \Phi(\vec{r}) &\approx \sum_i \Phi_i^0 \varphi_i^0(\vec{r}) & \forall \vec{r} \in D \\ \Phi_-(\vec{r}_s, \vec{\Omega}) &\approx \sum_\alpha J_{\pm, \alpha}^0 \psi_{\pm, \alpha}^0(\vec{r}_s, \vec{\Omega}) & \forall \vec{r}_s \in S \\ \varphi_i^0(\vec{r}) &= \begin{cases} 1 & \forall \vec{r} \in D_i \\ 0 & \forall \vec{r} \notin D_i \end{cases} \\ \psi_{\pm, \alpha}^0(\vec{r}_s, \vec{\Omega}) &= \begin{cases} \frac{1}{\pi S_\alpha} & \forall \vec{r} \in S_\alpha \\ 0 & \forall \vec{r} \notin S_\alpha \end{cases} \end{aligned}$$

Dans cette formulation, Φ_i^0 représente le flux scalaire moyen dans la zone i et $J_{\pm, \alpha}^0$ correspond au courant total sortant (+) ou rentrant (-) de neutrons par la surface α .

En utilisant cette représentation, le système d'équations qui en découle est :

$$\begin{cases} \Phi_i^0 = \sum_\alpha \tilde{P}_{iS_\alpha}^{00} J_{-, \alpha}^0 + \sum_j \tilde{P}_{ij}^{00} q_j^0 \\ J_{+, \alpha}^0 = \sum_\beta \tilde{P}_{S_\alpha S_\beta}^{00} J_{-, \beta}^0 + \sum_i \tilde{P}_{S_\alpha i}^{00} q_i^0 \\ J_{-, \alpha}^0 = J_{0, \alpha}^0 + \sum_\beta A_{\alpha, \beta}^{00} J_{+, \beta}^0 \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

dans lesquelles les définitions suivantes sont appliquées :

$$\begin{aligned}
- \tilde{P}_{ij}^{00} &= \frac{1}{V_i} \int_{D_i} d^3r \int_{D_j} d^3r' \frac{e^{-\tau}}{4\pi R^2} \\
- \tilde{P}_{iS_\alpha}^{00} &= \frac{1}{V_i} \int_{D_i} d^3r \int_{S_\alpha} d^2r \left| \vec{\Omega} \cdot \vec{n}_- \right| \psi_{-, \alpha}^0(\vec{r}_s, \vec{\Omega}) \frac{e^{-\tau}}{R^2} \\
- \tilde{P}_{S_\alpha i}^{00} &= \pi S_\alpha \int_{S_\alpha} d^2r \int_{D_i} d^3r \left| \vec{\Omega} \cdot \vec{n}_+ \right| \psi_{+, \alpha}^0(\vec{r}_s, \vec{\Omega}) \frac{e^{-\tau}}{R^2} \\
- \tilde{P}_{S_\alpha S_\beta}^{00} &= \pi S_\alpha \int_{S_\alpha} d^2r \int_{S_\beta} d^2r \left| \vec{\Omega} \cdot \vec{n}_+ \right| \left| \vec{\Omega} \cdot \vec{n}_- \right| \psi_{-, \beta}^0(\vec{r}_s, \vec{\Omega}) \psi_{+, \alpha}^0(\vec{r}_s, \vec{\Omega}) \frac{e^{-\tau}}{R^2} \\
- A_{\alpha, \beta}^{00} &= \pi S_\alpha \int_{S_\alpha} d^2r \int_{S_-} d^2\Omega \left| \vec{\Omega} \cdot \vec{n}_- \right| \psi_{-, \alpha}^0(\vec{r}_s, \vec{\Omega}) \int_{S_+} d^2\Omega' \psi_{+, \beta}^0(\vec{r}_s, \vec{\Omega}') t(\vec{r}_s, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}).
\end{aligned}$$

Si on multiplie la première des équation du système (A.1) par $V_i \Sigma_i$ et que l'on définit les termes :

$$P_{ij}^{00} = \frac{V_i \Sigma_i}{V_j} \tilde{P}_{ij}^{00} \quad P_{iS_\alpha}^{00} = V_i \Sigma_i \tilde{P}_{iS_\alpha}^{00}$$

on obtient le système d'équations de la méthode des **probabilités de collision** :

$$\begin{cases} \Sigma_i V_i \Phi_i^0 = \Sigma_\alpha P_{iS_\alpha}^{00} J_{-, \alpha}^0 + \Sigma_j P_{ij}^{00} V_j q_j^0 \\ J_{+, \alpha}^0 = \Sigma_\beta \tilde{P}_{S_\alpha S_\beta}^{00} J_{-, \beta}^0 + \Sigma_i \tilde{P}_{S_\alpha i}^{00} q_i^0 \\ J_{-, \alpha}^0 = J_{0, \alpha}^0 + \Sigma_\beta A_{\alpha, \beta}^{00} J_{+, \beta}^0 \end{cases} \quad (A.2)$$

Le terme P_{ij}^{00} est appelé probabilité de collision, il représente, dans l'hypothèse de source de collision isotrope, la probabilité pour un neutron né dans la région j de produire une collision dans la région i .

Annexe B

Mailleur sur les taux de réaction

Le mailleur sur les taux de réaction est conçu pour créer des maillages énergétiques satisfaisant un critère de précision donné pour une certaine classe d'applications ou un ensemble de cas. Ces derniers, choisis par l'utilisateur selon le genre de calcul qu'il est amené à faire, définissent les champs de variations des paramètres d'entrée du mailleur.

Les étapes pour la création du maillage énergétique sont les suivantes :

– *Calcul des taux de référence*

Pour chaque noyau x , réaction ρ , groupe g et mélange ν , on calcule le taux de réaction de référence :

$$T_{\rho,x}^{g,\nu} = \int_g \sigma_{x,\rho}(E') \Phi^\nu(E') dE';$$

– *Équivalence multigroupe*

Pour chaque noyau x , réaction ρ , groupe g et mélange ν , on calcule les sections efficaces en choisissant les bornes du maillage énergétique de façon à respecter un critère de précision $R_{\rho,x,s}^{g,\nu}$ donné *a priori* sur les taux :

$$|\sigma_{\rho,x}^g \Phi^{g,\nu} - T_{\rho,x}^{g,\nu}| = R_{\rho,x,s}^{g,\nu},$$

où $\Phi^{g,\nu}$ est le flux multigroupe du mélange ν et $\sigma_{\rho,x}^g$ la section multigroupe résultant de la mise en groupe avec une fonction de pondération donnée.

On voit tout de suite les principales caractéristiques de ces deux phases.

B.1 Calcul des taux de référence

Les taux de référence sont calculés à partir d'un flux continu en énergie, résultant de la résolution approchée de l'équation de ralentissement en milieu homogène infini :

$$(\tilde{\sigma}_{t0} + \sigma_e) \Phi(E) = \tilde{r}_0 \Phi(E) + \gamma_e \sigma_e \chi(E), \quad (\text{B.1})$$

où est valable la convention traditionnelle et où $\chi(E)$ représente le spectre macroscopique du problème à traiter. L'approximation faite consiste à modéliser l'opérateur de ralentissement $r_{0,x} \Phi(E)$ selon les modèles de résonance large WR ou étroite NR pour chaque noyau x . Avec cette hypothèse on peut expliciter dans la formule (B.1) le flux :

$$\Phi_M^\nu(E) = \frac{[\tilde{\sigma}_p + \sigma_e]}{[\tilde{\sigma}_a(E) + \tilde{\sigma}_t(E) + \sigma_e]} \chi(E), \quad (\text{B.2})$$

avec les notations suivantes :

$$\tilde{\sigma}_a = \sum_{x \in WR} \delta_x \sigma_{ax}, \tilde{\sigma}_t = \sum_{x \in NR} \delta_x \sigma_{tx}, \tilde{\sigma}_p = \sum_{x \in NR} \delta_x \sigma_{px},$$

où δ_x représente l'abondance du noyau x et les indices a, t, p se réfèrent aux réactions d'absorption, totale et potentielle. Ce flux est utilisé pour évaluer les taux de référence multigroupes $T_{\rho,x}^{g,\nu}$ pour chaque réaction ρ , élément x et mélange ν comme :

$$T_{\rho,x}^{g,\nu} = \int_g \sigma_{\rho,x}(E) \Phi_M^\nu(E) dE, \quad (\text{B.3})$$

où $\sigma_{\rho,x}$ est la section ponctuelle en énergie.

B.2 Équivalence continu-multigroupe

Cette section traite de la deuxième étape du calcul du maillage lorsque les taux de réaction de référence sont calculés avec le modèle de flux. Pour chaque noyau x du mélange ν et pour toutes les réactions ρ nous cherchons à déterminer la largeur du groupe énergétique g de façon à obtenir des taux multigroupes proches des taux de référence avec une erreur contrôlée *a priori*. Dans ce but le résiduel $R_{\rho,x}^{g,\nu}$ du groupe g est défini comme :

$$R_{\rho,x}^{g,\nu} = |\sigma_{\rho,x}^g \Phi_M^{g,\nu} - T_{\rho,x}^{g,\nu}|, \quad (\text{B.4})$$

où $T_{\rho,x}^{g,\nu}$ est le taux de réaction de référence du groupe, $\sigma_{\rho,x}^g$ est la section efficace multigroupe et $\Phi_M^{g,\nu}$ est le flux multigroupe.

Les sections multigroupes $\sigma_{\rho,x}^g$ sont calculées avec le spectre $\chi(E)$:

$$\sigma_{\rho,x}^g = \frac{\int_g \sigma_{\rho,x}(E) \chi(E) dE}{\int_g \chi(E) dE}. \quad (\text{B.5})$$

Le flux multigroupe $\Phi_M^{g,\nu}$ est calculé à partir de la forme multigroupe de l'équation (B.1) dans laquelle on emploie les mêmes modèles approchés des opérateurs de ralentissement que ceux adoptés dans l'étape d'homogénéisation. Il vaut :

$$\Phi_M^{g,\nu} = \frac{(\tilde{\sigma}_p + \sigma_e)}{(\tilde{\sigma}_a^g + \tilde{\sigma}_t^g + \sigma_e)} \chi^g, \quad (\text{B.6})$$

où $\chi^g = \int_g \chi(E) dE$ est le spectre macroscopique multigroupe et l'on utilise la convention de notation usuelle.

Par commodité, on substituera par la suite aux indices x, ρ, ν la lettre i . Chaque borne énergétique g , qui appartient au domaine énergétique $\{E_b, E_{b-1}\}$, est choisie de façon à respecter la condition :

$$\forall i R_i^g \leq R_{is}^g, \quad (\text{B.7})$$

où R_{is}^g est l'erreur correspondant au niveau de précision souhaitée et peut être calculée de deux façons différentes. La première dépend de l'erreur relative ϵ_r et de l'erreur absolue ϵ_a , évaluée comme fraction du taux de réaction global sur tout l'intervalle $\{E_{inf}, E_{sup}\}$. Elle vaut :

$$R_{is}^g = \epsilon_r T_i^g + \epsilon_a. \quad (\text{B.8})$$

La deuxième façon définit une erreur qui varie en fonction de l'énergie,

$$R_{is}^g = \int_g \epsilon_i(E) T_i(E) dE$$

$$\epsilon_i(E) = \frac{\epsilon_r}{NG NISO} \frac{T_i}{T_i^G} \quad \text{si } E_{G+1} \leq E \leq E_G, \quad (\text{B.9})$$

où T_i est le taux global, G se réfère à un maillage initial ou à une subdivision correspondant au fractile (décile, centile, etc) du taux global, NG est le nombre correspondant de groupes

et $NISO$ est le nombre de noyau dans le mélange ν . À la section B.3 on montre comment déduire cette formulation de l'erreur R_{is}^g . L'idée à la base est de raffiner le maillage dans les zones énergétiques où la contribution du noyau x sur le taux global est importante.

La méthode d'établissement des bornes est presque la même que celle décrite au paragraphe 5.1.1, mais dans un souci de clarté, on en répète les principales phases. Une fois évalué le maillage $\{E_f\}$ réunion des grilles $\{E_i\}$ sur lesquelles les sections efficaces totales des noyaux du mélange sont représentées, on l'emploie comme support pour la recherche des bornes des groupes g . Celle-ci est faite d'une façon séquentielle en déplaçant la variable énergétique E dans un intervalle $\{E_b, E_{b-1}\}$ selon l'algorithme suivant :

1. Parcourir par valeur décroissante $E \in \{E_f\}$ à partir de E_{g-1} tant que $\forall i R_{i,x}^g \leq R_{i,x}^{g,s}$ et $E \geq E_b$, où E_{g-1} est la borne de la bande énergétique précédente
2. Démarrer une recherche du zéro E_z par dichotomie entre E_g et l'énergie supérieure la plus proche de la grille $\{E_f\}$, quand $R_{i,x}^g$ dépasse la valeur $R_{i,x}^{g,s}$
3. Poser $E_g = E_z$ et reprendre de 1.

Cet algorithme a été étendu pour déterminer le maillage énergétique respectant la condition sur les taux globaux multigroupes \vec{T}^{mg} et de référence \vec{T} :

$$\begin{aligned} \frac{|T_i^{mg}(\epsilon_r) - T_i|}{T_i} &= \epsilon_c \quad \exists i \in \{i = 1, NCAS\} \\ \frac{|T_j^{mg}(\epsilon_r) - T_j|}{T_j} &< \epsilon_c \quad \forall j \neq i, \end{aligned} \quad (B.10)$$

où ϵ_c est la précision souhaitée. Cette condition est obtenue en cherchant par la méthode de *regula falsi* le zéro de la fonctionnelle :

$$F(\epsilon_r) = \epsilon_c - \max_i \left[\frac{|T_i^{mg}(\epsilon_r) - T_i|}{T_i} \right], \quad (B.11)$$

où ϵ_r est la variable qui détermine le découpage multigroupe satisfaisant la contrainte (B.10) en modifiant à chaque itération l'erreur R_{is}^g .

B.3 Calcul d'une erreur variable par plage énergétique et noyau

Le but de la création d'un maillage énergétique adaptatif est de garantir une précision préétablie ϵ_c , qu'on appellera cible, entre les taux de réaction multigroupe T_ρ^{mg} et les taux de référence T_ρ^c :

$$\epsilon_c = \frac{|T_\rho^{mg} - T_\rho^c|}{T_\rho^c}. \quad (B.12)$$

En utilisant les relations d'inégalité triangulaire on peut maximiser la relation B.12 par :

$$\epsilon_c = \frac{|\sum_x (T_{x,\rho}^{mg} - T_{x,\rho}^c)|}{T_\rho^c} \leq \sum_x \frac{|T_{x,\rho}^{mg} - T_{x,\rho}^c|}{T_{x,\rho}^c} \frac{T_{x,\rho}^c}{T_\rho^c} \leq \sum_x \sum_g \frac{|T_{x,\rho}^g - T_{x,\rho}^{cg}|}{T_{x,\rho}^{cg}} \frac{T_{x,\rho}^{cg}}{T_{x,\rho}^c} \frac{T_{x,\rho}^c}{T_\rho^c},$$

où g le groupe d'un maillage prédéfini ou issu d'un découpage en fractile du taux global de référence. En posant que :

$$\sum_x \sum_g \frac{|T_{x,\rho}^g - T_{x,\rho}^{cg}|}{T_{x,\rho}^{cg}} \frac{T_{x,\rho}^{cg}}{T_{x,\rho}^c} \frac{T_{x,\rho}^c}{T_\rho^c} = \epsilon_r = \sum_x \sum_g \frac{\epsilon_r}{NG NISO},$$

on obtient la condition suivante dans chaque groupe g et pour tout noyau x :

$$\frac{|T_{x,\rho}^g - T_{x,\rho}^{c^g}|}{T_{x,\rho}^{c^g}} = \frac{\epsilon_r}{NG NISO} \frac{T_\rho^c}{T_{x,\rho}^{c^g}} = \epsilon_{x,\rho}^g. \quad (\text{B.13})$$

Si on adopte une subdivision multigroupe par fractile du taux, la relation (B.13) se simplifie en :

$$\epsilon_{x,\rho}^g = \frac{\epsilon_r}{NISO} \frac{T_\rho^{c^g}}{T_{x,\rho}^{c^g}}. \quad (\text{B.14})$$

Cette équation montre que l'erreur relative imposée pour la construction du maillage mesure l'importance du noyau x par rapport au taux moyen dans le groupe g .

Annexe C

Algorithme de résolution du solveur ponctuel

La résolution de l'équation de ralentissement ponctuel en énergie (5.70) est effectuée en balayant les énergies par valeurs décroissantes et elle est composée des étapes suivantes :

1. initialisation de la densité de ralentissement à la valeur de la source externe à tous les points et calcul du flux au dernier point E_N
2. boucle sur les énergies $E_j < E_N$
 - Calcul du flux en E_j
 - (a) calcul de $\hat{a}_{j,x}(E_j)$ et $\hat{b}_{j,x}(E_j)$ avec $E_\rho = E_{j+1}$
 - (b) boucle sur tous les noyaux $x = 1, NI$
 - calcul de $\hat{a}_{j,x}(E_j)$ et $\hat{b}_{j,x}(E_j)$ si $E_j/\alpha_x < E_{j+1}$
 - boucle sur les niveaux inélastiques
 - calcul des bornes d'intégration E_ρ, E_β si $E_j > E_{s,l,x}/(1 + A_x)^2$ autrement aller au point c
 - calcul de $\hat{a}_{j,x,l}(E_j)$ et $\hat{b}_{j,x}(E_j)$ si $E_{j+1} > E_\beta$ autrement aller au point c
 - (c) calcul de $\Phi(E_j)$
 - Mise à jour de la source de ralentissement pour toutes les énergies $E_i < E_j$
 - (a) boucle sur tous les noyaux $x = 1, NI$ tant que $E_i/\alpha_x > E_j$ ou $[E_\rho, E_\beta] \cap [E_j, E_{j+1}] \neq 0$
 - calcul de $\hat{a}_{j,x}(E_i)$ et $\hat{b}_{j,x}(E_i)$ si $E_i/\alpha_x < E_{j+1}$
 - mise à jour de $R_{j \rightarrow i,x}^{el}(T_x^{el})$
 - si $E_j > \min_{s,l,x} E_{s,l,x}$ boucle sur les niveaux inélastiques autrement passage au noyau suivant
 - calcul des bornes d'intégration E_ρ, E_β si $E_j > E_{s,l,x}$ autrement passage au niveau suivant
 - calcul de $\hat{a}_{j,x,l}(E_i)$ et $\hat{b}_{j,x,l}(E_i)$
 - mise à jour de $R_{j \rightarrow i,x}^{inel}(T_x^{inel})$ si $[E_\rho, E_\beta] \cap [E_j, E_{j+1}] \neq 0$

Bibliographie

- A. AGGERY : *Calculs de référence avec un maillage multigroupe fin sur des assemblages critiques par APOLLO2*. Note CEA-N-2848, 1999.
- A. AGGERY et C. MOUNIER : *Spécification de l'interface N2A2 créant les bibliothèques du code APOLLO2*. CEA, Rapport SERMA00-2736B, 2000.
- G.I. BELL, G.E. HANSEN et H.A. SANDMEIER : Multitable Treatments of Anisotropic Scattering in S_N Multigroup Transport Calculations. *Nuclear Science and Engineering*, 28:376–383, 1967.
- P. BLAISE et E. FORT : *Théorie de la matrice R et formalismes des sections efficaces dans le domaine des résonances résolues*. Note technique CEA NT/SPEX/LPE/98-013 - 1999.
- D. BLANC : *Physique nucléaires*. Masson, deuxième édition, 2000.
- J.P. BOTH, Y.K. LEE, A. MAZZOLO, Y. PENELIAU, O. PETIT, B. ROESSLINGER et M. SOLDEVILA : *A Three-Dimensional Polykinetic Particle Transport Monte-Carlo Code*, 2003.
- J. BUSSAC et P. REUSS : *Traité de neutronique*. HERMANN, deuxième édition, 1985.
- C.J. DEAN, R. J. PERRY : *Weighting spectra for the XMAS group scheme*, 1990.
- M. CLERC : *L'optimisation par essais particuliers*. Hermès Science, 2005.
- M. COSTE : *Absorption résonnante des noyaux lourds dans les réseaux hétérogènes I - Formalismes du module d'autoprotection d'APOLLO2*. Note CEA-N-2765, 1994.
- M. COSTE, H. TELLIER, C. RAEPSAET et C. Van Der GUCHT : New improvements in the self-shielding formalism of the APOLLO2 code. *In Joint International Conference on the Mathematical Methods and Supercomputing in Nuclear Applications*, volume 1, Karlsruhe, Germany, 1993.
- M. COSTE-DELCLAUX : *Modélisation du phénomène d'autoprotection dans le code de transport multigroupe APOLLO2*. CEA-R-6114, 2006.
- M. COSTE-DELCLAUX : GALILEE : A nuclear data processing system for transport, depletion and shielding codes. *In International Conference on the Physics of Reactors*, Interlaken, Switzerland, 2008.
- M. COSTE-DELCLAUX et S. MENGELLE : Implementation of a subgroup method for self-shielding calculations in APOLLO2 code. *In International Conference on the Physics of Reactors*, Mito, Ibaraki, Japan, 1996.
- D. E. CULLEN : Application of the probability table method to multigroup calculations of neutron transport. *Nuclear Science and Engineering*, 55:387–400, 1974.

- D. E. CULLEN et G. C. POMRANING : The multiband method in radiative transfer calculations. *Journal of Quantum Spectroscopie Radiative Transfer*, 24:97–117, 1980.
- M. DUMAS : *Optimisation multicritère par algorithmes génétiques*. Rapport interne CEA, DM2S/SFME/LETR/RT/02-027/A, 2002.
- F. GAUDIER et M. DUMAS : Uncertainties analysis by genetic algorithms : Application to wall friction model. In *Eleventh International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics*, Avignon, France, 2006.
- F. GAUDIER : *Manuel Utilisateur d'Uranie Version v1*. Rapport interne Cea DM2S/SFME/LGLS/RT/08-003/A, 2008.
- M. C. GLASSTONE et EDLUND : *The elements of Nuclear Reactor Theory*. D. Van Nostrand Company, INC., 1952.
- Jin-Kao HAO, Philippe GALLINIER et Michel HABIB : Méthaheuristiques pour l'optimisation combinatoire et l'affectation sous contraintes. *Revue d'Intelligence Artificielle*, 13:283–324, 1999.
- A. HÉBERT : *Neutronique*. École Polytechnique de Montréal, 1983.
- A. HÉBERT : Development of the subgroup projection method for resonance self-shielding calculations. *Nuclear Science and Engineering*, 162:56–75, 2009.
- A. HÉBERT et A. SANTAMARINA : Refinement of the Santamarina-Hfaiedh energy mesh between 22.5 ev and 11.4 kev. In *International Conference on the Physics of Reactors*, Interlaken, Switzerland, 2008.
- M. HERMAN : *ENDF-6 Data formats and procedures for the evaluated nuclear data file*. Cross Section Evaluation Working Group, 2005.
- N. HFAIEDH : *Nouvelle Méthodologie de Calcul de l'Absorption Résonnante*. Thèse de doctorat, Université Louis Pasteur Strasbourg, 2006.
- N. HFAIEDH et A. SANTAMARINA : Determination of the optimised SHEM mesh for neutron transport calculation. In *American Nuclear Society Topical Meeting in Mathematics and Computations, Supercomputing, Reactor Physics and Nuclear and Biological Applications*, Avignon, France, 2005.
- H. HURIA et M. OUISLOUMEN : An optimized ultra-fine energy group structure for neutron transport calculations. In *International Conference on the Physics of Reactors*, Interlaken, Switzerland, 2008.
- E. E. LEWIS et W. F. Jr. MILLER : *Computational Method of Neutron Transport*. John Wiley and Sons, second édition, 1984.
- M. LIVOLANT et F. JEANPIERRE : *Autoprotection des résonances dans les réacteurs nucléaires*, 1974.
- L. LUNEVILLE : *Méthode multibande aux ordonnées discrètes. Formalisme et résultats*. CEA-N-2832, 1998.
- J. E. LYNN : *The theory of Neutron Resonance Reactions*. Clarendon Press, Oxford, 1968.
- R. E. MACFARLANE et D.W. MUIR : *The NJOY Nuclear Data Processing System*. LA-12740-M, October 1994.

- R. E. MACFARLANE, D.W. MUIR et D.C. GEORGE : *NJOY99.0 : Code System for Producing Pointwise and Multigroup Neutron and Photon Cross Section from ENDF/B Data*. PSR-480/NJOY99.0, March 2000.
- S. MENGELLE : *APOLLO2 : Calcul de référence utilisant un maillage énergétique fin*. Thèse de doctorat, Université Paris XI Orsay, 1995.
- P. MOSCA et C. MOUNIER : Adaptive energy mesh constructor for multigroup libraries of the deterministic transport code APOLLO2. *In International Conference on the Physics of Reactors*, Interlaken, Switzerland, 2008.
- C. MOUNIER et B. NORMAND : Fission source calculations and its influence in criticality applications. *In International Conference on the Physics of Reactors*, Interlaken, Switzerland, 2008.
- G. E. MÜLLER et F. UHLIG : *Numerical Algorithms with Fortran*. Springer, first édition, 1996.
- M. N. NICOLAEV : *Méthode des sous-groupes pour la prise en compte de la structure résonnante des sections efficaces dans les calculs neutroniques (1ère partie)*. Atomnaia Energia, 1970.
- M. N. NICOLAEV et V. F. KHOKHLOV : *Systèmes des constantes en sous-groupes*. INDC (CCP) 4/G, 1969.
- NUCLEAR SCIENCE COMITEE : *International Handbook Of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments*. September 2001.
- S. PERRUCHOT-TRIBOULET : *Validation et extension du module d'autoprotection du code de transport neutronique multigroupe APOLLO2*. Rapport DMT/96-631 SERMA/LENR/2000, 1996.
- P. REUSS : Generalization of the Livolant-Jeanpierre theory for resonant absorption calculation. *Nuclear Science and Enginering*, 92:261, 1986.
- P. REUSS : *Précis de neutronique*. EDP SCIENCES, première édition, 2003.
- P. RIBON et J.M. MAILLARD : *Les tables de probabilité : Application au traitement des sections efficaces pour la neutronique*. Note CEA-N-2485, 1986.
- G. RIMPAULT : Algorithmic features of the ECCO cell code for treating heterogeneous fast reactor assemblies. *In International Conference on Mathematics and Computations, Reactor Physics and Environmental Analysis*, Portland, Oregon, USA, 1995.
- R. SANCHEZ : *Schémas approchés de résolution de l'équation du transport à deux dimensions*. Thèse de doctorat, Faculté des Sciences d'Orsay, 1979.
- R. SANCHEZ : *Module d'autoprotection du code APOLLO2*. Note CEA-N-2765, 1994.
- R. SANCHEZ : *Notes de cours DEA Thermique et Systèmes Énergétiques*, 2000.
- R. SANCHEZ : *Commentaires sur le traitement de l'anisotropie dans les calculs multigroupes*. Rapport interne SERMA/LTSD/09-4634/A, 2008.
- R. SANCHEZ : Selfshielding SERMA seminar. Saclay, France, 2008.
- R. SANCHEZ, M. COSTE, Z. STANKOVSKI et C. Van Der GUCHT : Models for multigroup self-shielded cross sections calculations in the code APOLLO2. *In Conférence Internationale sur la Physique des réacteurs et l'Exploitation, PHYSOR-90*, volume 3, page 149, Paris, France, 1990.

- R. SANCHEZ et J. MONDOT : A model for calculating multigroup self-shielded cross sections for a mixture of resonance absorbers in heterogeneous media. *In International Conference on Reactor Physics and Shielding*, volume 1, page 110, Chicago, Illinois, 1984.
- J.C. SUBLET, P. RIBON et M. COSTE-DELCLAUX : *CALENDF-2005 : USER MANUAL*. CEA-R-6131, 2006.
- H. TELLIER : *Réactions Nucléaires induites par les neutrons*. INSTN-CEA, 1989.
- J. F. VIDAL : *Limites du traitement de l'anisotropie du choc dans les codes déterministes du CEA. Suggestions pour une nouvelle méthodologie dans APOLLO2*. Note technique DER/SPRC/LEPH 08-200, 2008.
- M. L. WILLIAMS : Correction of multigroup cross section for resolved resonance interference in mixed absorbers. *Nuclear Science and Engineering*, 83:37–49, 1983.
- M. L. WILLIAMS : Submoment expansion of neutron-scattering sources. *Nuclear Science and Engineering*, 134:218–226, 2000.
- M.M.R. WILLIAMS : *The Slowing down and thermalization of neutrons*. North-Holland Publishing Company, 1966.