



HAL
open science

Développement d'une nouvelle modélisation de la loi de choc dans les codes de transport neutronique multigroupes

Ansar Calloo

► **To cite this version:**

Ansar Calloo. Développement d'une nouvelle modélisation de la loi de choc dans les codes de transport neutronique multigroupes. Autre. Université de Grenoble, 2012. Français. NNT : 2012GRENI094 . tel-00909705

HAL Id: tel-00909705

<https://theses.hal.science/tel-00909705>

Submitted on 26 Nov 2013

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

Pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE GRENOBLE

Spécialité : **Mécanique des fluides, Énergétique, Procédés**

Arrêté ministériel : 7 août 2006

Présentée par

Ansar A. CALLOO

Thèse dirigée par **Dr. Gérard RIMPAULT**

et encadrée par **Dr. Jean-François VIDAL**

préparée au sein du **Laboratoire d'Études de Physique**
et de l'**École Doctorale I-MEP2 : Ingénierie - Matériaux, Mécanique, Environnement, Énergétique, Procédés, Production**

Développement d'une nouvelle modélisation de la loi de choc dans les codes de transport neutronique multigroupes

Thèse soutenue publiquement le **10 octobre 2012**,
devant le jury composé de :

Madame Elsa MERLE-LUCOTTE

Professeur à Grenoble-INP, Présidente

Monsieur Alain HÉBERT

Professeur à l'École Polytechnique de Montréal, Rapporteur

Monsieur Cheikh DIOP

Directeur de Recherche au CEA de Saclay, Rapporteur

Monsieur Gérard RIMPAULT

Expert International au CEA de Cadarache, Directeur de thèse

Monsieur Jean-François VIDAL

Expert Senior au CEA de Cadarache, Encadrant CEA

Monsieur Enrico GIRARDI

Ingénieur-Chercheur à SINETICS, EDF R&D à Clamart, Examineur

Monsieur Romain LE TELLIER

Ingénieur-Chercheur au CEA de Cadarache, Invité

Monsieur Adrien BIDAUD

Maître de Conférences à Grenoble-INP, Encadrant à l'I-MEP2, Invité



Développement d'une nouvelle modélisation de la loi de choc dans les codes de transport neutronique multigroupes.

Résumé

Dans le cadre de la conception des réacteurs, les schémas de calculs utilisant des codes de calculs neutroniques déterministes sont validés par rapport à un calcul stochastique de référence. Les biais résiduels sont dus aux approximations et modélisations (modèle d'autoprotection, développement en polynômes de Legendre des lois de choc) qui sont mises en oeuvre pour représenter les phénomènes physiques (absorption résonnante, anisotropie de diffusion respectivement).

Ce document se penche sur la question de la pertinence de la modélisation de la loi de choc sur une base polynômiale tronquée. Les polynômes de Legendre sont utilisés pour représenter la section de transfert multigroupe dans les codes déterministes or ces polynômes modélisent mal la forme très piquée de ces sections, surtout dans le cadre des maillages énergétiques fins et pour les noyaux légers. Par ailleurs, cette représentation introduit aussi des valeurs négatives qui n'ont pas de sens physique.

Dans ce travail, après une brève description des lois de chocs, les limites des méthodes actuelles sont démontrées. Une modélisation de la loi de choc par une fonction constante par morceaux qui pallie à ces insuffisances, a été retenue. Cette dernière nécessite une autre modélisation de la source de transfert, donc une modification de la méthode actuelle des ordonnées discrètes pour résoudre l'équation du transport.

La méthode de volumes finis en angle a donc été développée et implantée dans l'environnement du solveur S_n SNATCH, la plateforme PARIS. Il a été vérifié que ses performances étaient similaires à la méthode collocative habituelle pour des sections représentées par des polynômes de Legendre. Par rapport à cette dernière, elle offre l'avantage de traiter les deux représentations des sections de transferts multigroupes : polynômes de Legendre et fonctions constantes par morceaux.

Dans le cadre des calculs des réacteurs, cette méthode mixte a été validée sur différents motifs : des cellules en réseau infini, des motifs hétérogènes et un calcul de réflecteur. Les principaux résultats sont :

- un développement polynômial à l'ordre $P3$ est suffisant par rapport aux biais résiduels dus aux autres modélisations (autoprotection, méthode de résolution spatiale). Cette modélisation est convergée au sens de l'anisotropie du choc sur les cas représentatifs des réacteurs à eau légère.
- la correction de transport $P0c$ n'est pas adaptée, notamment sur les calculs d'absorbant B_4C .

Mots-clés : anisotropie, volumes finis, sections constantes par morceaux, code déterministe.

A new modelling of the multigroup scattering cross section in deterministic codes for neutron transport.

Abstract

In reactor physics, calculation schemes with deterministic codes are validated with respect to a reference Monte Carlo code. The remaining biases are attributed to the approximations and models induced by the multigroup theory (self-shielding models and expansion of the scattering law using Legendre polynomials) to represent physical phenomena (resonant absorption and scattering anisotropy respectively).

This work focuses on the relevance of a polynomial expansion to model the scattering law. Since the outset of reactor physics, the latter has been expanded on a truncated Legendre polynomial basis. However, the transfer cross sections are highly anisotropic, with non-zero values for a very small range of the cosine of the scattering angle. Besides, the finer the energy mesh and the lighter the scattering nucleus, the more exacerbated is the peaked shape of this cross section. As such, the Legendre expansion is less suited to represent the scattering law. Furthermore, this model induces negative values which are non-physical.

In this work, various scattering laws are briefly described and the limitations of the existing model are pointed out. Hence, piecewise-constant functions have been used to represent the multigroup scattering cross section. This representation requires a different model for the diffusion source. The discrete ordinates method which is widely employed to solve the transport equation has been adapted.

Thus, the finite volume method for angular discretisation has been developed and implemented in PARIS environment which hosts the S_n solver, SNATCH. The angular finite volume method has been compared to the collocation method with Legendre moments to ensure its proper performance. Moreover, unlike the latter, this method is adapted for both the Legendre moments and the piecewise-constant functions representations of the scattering cross section.

This hybrid-source method has been validated for different cases: fuel cell in infinite lattice, heterogeneous clusters and 1D core-reflector calculations. The main results are given below :

- a $P3$ expansion is sufficient to model the scattering law with respect to the biases due to the other approximations used for calculations (self-shielding, spatial resolution method). This order of expansion is converged for anisotropy representation in the modelling of light water reactors.
- the transport correction, $P0c$ is not suited for calculations, especially for B_4C absorbant.

Keywords: scattering anisotropy, finite volume method, piecewise-constant cross sections, deterministic code.

Remerciements

Cette thèse a été effectuée au Laboratoire d'Études de Physique du CEA Cadarache au sein du Service de Physique des Réacteurs et du Cycle. Je remercie M. Jean-Michel Ruggieri et M. Cyrille de Saint Jean, successivement chefs du LEPH, pour m'y avoir accueilli d'abord en tant que stagiaire puis thésard.

Je remercie les membres du jury, M. Alain Hébert, M. Cheikh Diop, Mme. Elsa Merle-Lucotte ainsi que M. Enrico Girardi pour leur intérêt pour mon travail. Je remercie aussi Adrien Bidaud pour sa disponibilité et son optimisme à toute épreuve. Cette thèse a été dirigée par M. Gérard Rimpault que je remercie pour ses nombreux conseils notamment lors de la rédaction du manuscrit et la préparation de la soutenance.

Je remercie chaleureusement Jean-François Vidal pour m'avoir encadré, soutenu et conseillé pendant ces trois années de thèse. Je remercie aussi Romain Le Tellier pour son aide lors de l'implémentation informatique dans PARIS et pour les nombreux *debuggages* (j'ai enfin compris, la sphère unité c'est $4\pi \dots$). Merci à tous les deux de m'avoir guidé dans le monde obscur des méthodes en neutronique.

Mes remerciements vont aussi aux membres de la qualif' (David Bernard, Pierre Leconte, et les néo-arrivants Bénédicte Roque et Jean-Marc Palau - « comrade » qui m'a supporté pendant ma rédaction en tant que co-bureau), à Gilles Noguère pour sa sagesse en données nucléaires, à Yannick Pénéliou et Olivier Litaize pour les nombreuses sessions de compilations de TRIPOLI4 en tout genre! Merci aussi aux anciens du labo : Patrick Blaise, Claire Vaglio-Gaudard et Christophe Suteau. Je remercie aussi Laurent Buiron du LEDC pour ses nombreux conseils pratiques et ses buironnades en tout genre.

J'aimerais aussi adresser mes remerciements à Sophie Brochard, notre responsable informatique pour toutes les fois où je l'ai embêtée pour avoir une machine capable de supporter mes calculs. Eh oui Vaness', je l'admets, j'ai bien plus squatté toutes les machines possibles au SPRC que toi. À ce titre, merci à filao22, filao36, orme, mezel, curie et platine qui ont joué un rôle crucial dans cette thèse.

Merci à toutes les personnes du LEPH et du SPRC que j'ai cotoyées durant ces trois années.

Un grand merci à tous les thésards du LEPH, anciens, actuels et nouveaux : le Hab' (le Père), Adrien (mon regretté co-bureau), Pascal (l'interro-sceptique), Damien (l'otarie), Simon (le spécialiste de la SNCF), David (le Master), Nico (mon coach sportif à qui je tiens à préciser que je fais de la physique), Claudia (l'Allemande), Cristian (le Silencieux) et Li (ma relève boltzmannienne). Bon courage à Florence, Léonie, Edwin, Guillaume et Pierre qui viennent

d'arriver. Merci à Pierre en passant de s'être dévoué pour que le pot de thèse ait pu se faire au Hameau.

Trois ans, c'est long et court à la fois et le support des proches est très important pour que l'aventure aille jusqu'au bout. Merci à mes deux coloc Vaness' et Oliv' pour ces trois années mémorables à Vinon. Merci au coloc assimilé Ju' pour son support et à Mél, Daniele, Alix, Nico (pas le même qu'avant), Kristine et Vincent, et tous les amis de St Paul, de Gréoux et de Rians. Bien sûr, je n'oublie pas mes amis de Grenoble, de Nice et de Maurice.

Merci à Sandra pour son soutien dans les moments de doute et pour avoir su me redonner confiance en moi.

Last but not the least, je ne remercierai jamais assez mes parents et mon frère pour leur support pendant toutes ces années, et sans qui je ne serai sûrement pas là.

À mes grands-parents

et à

mes parents.

Table des matières

Remerciements	iii
Liste des figures	xi
Liste des tables	xv
Introduction	1
I Rappels de neutronique	5
1 Notions de neutronique	7
1.1 Bases de la neutronique	7
1.1.1 Sections efficaces de réaction	7
1.1.2 Classification des sections efficaces	8
1.1.3 Aspect énergétique de la section efficace microscopique	9
1.2 L'équation du transport de Boltzmann	10
1.3 Équation stationnaire	12
2 Résolution de l'équation du transport	15
2.1 Méthodes stochastiques	15
2.1.1 Formalisme de la méthode de Monte Carlo	16
2.1.2 TRIPOLI4	19
2.2 Méthodes déterministes	19
2.2.1 Discrétisation énergétique et autoprotection	19
2.2.2 Discrétisations angulaire et spatiale	22
2.2.2.1 La méthode S_n	22
2.2.2.2 Discrétisations spatiales associées à la méthode S_n	23
2.2.2.3 La méthode P_n	26
2.2.2.4 L'équation intégrale et la méthode des probabilités de collision P_{ij}	26
2.2.3 Codes déterministes et schémas de calcul	27
2.2.3.1 APOLLO2	27
2.2.3.2 SNATCH	28
2.2.3.3 Schéma de calcul	28
2.3 Résumé	30

II	Anisotropie du choc	33
3	Présentation de la notion d'anisotropie dans les calculs de réacteurs	35
3.1	Description des chocs et distribution angulaire	35
3.1.1	Choc élastique	35
3.1.2	Choc élastique dans le domaine thermique	36
3.1.3	Choc inélastique	38
3.1.4	Choc inélastique dans le domaine thermique	39
3.2	Sources d'anisotropie	39
3.2.1	L'anisotropie dans le centre de masse	39
3.2.2	Cinématique et anisotropie par changement de référentiel	39
3.2.3	Anisotropie multigroupe	45
3.3	L'anisotropie de la mesure au calcul	46
4	État de l'art du traitement de l'anisotropie du choc	49
4.1	Le format ENDF pour les lois de choc	49
4.2	Traitement au sein des codes Monte Carlo ponctuels	50
4.3	Traitement au sein des codes déterministes multigroupes	51
4.3.1	Développement en polynômes de Legendre	52
4.3.1.1	Loi de choc multigroupe exacte en ralentissement et choc élastique	53
4.3.1.2	Effet d'anisotropie en fonction de A et de la largeur du maillage énergétique	54
4.3.1.3	Représentation polynômiale de la section de transfert exacte . . .	58
4.3.1.4	Impact de l'hydrogène sur l'anisotropie	60
4.3.2	Méthode exponentielle	63
4.3.3	Méthode de reconstruction par priorité	64
4.3.4	Méthode directe - <i>Exact Kernel Method</i>	65
4.3.5	Méthodes de transformation du noyau de diffusion	65
4.3.5.1	Méthode I_i	66
4.3.5.2	Méthode I^*	67
4.3.6	Représentation moyenne par volume	68
4.3.7	Section de transfert par morceaux	69
4.4	Conclusion	73
III	Développement et validation de méthodes	75
5	Méthode des volumes finis en angle	77
5.1	Analyse du support angulaire	77
5.2	Formulation volumes finis de l'équation de Boltzmann	79
5.2.1	Méthode	80
5.2.2	Comparaison ordonnées discrètes - volumes finis	80
5.2.3	Maillage de la sphère unité	82

5.2.4	Intégration des harmoniques sphériques	83
5.3	Validation du solveur volumes finis en angle	86
5.3.1	Benchmark d'Hébert	87
5.3.2	Cas multigroupe : cellule UOX REP	90
5.4	Conclusion	92
6	Section efficace moyenne par morceaux	93
6.1	Forme volumes finis de la source de diffusion	93
6.2	Sections doublement différentielles multigroupes	95
6.3	Génération pour l'hydrogène et le fer	97
6.4	Validation des sections générées par GENXS	99
6.4.1	Validation par comparaison à NJOY	99
6.4.2	Validation via un calcul P_n	103
6.4.3	Validation du calcul de l'intégrale $h_k^{n' \rightarrow n}$	103
6.4.4	Validation du solveur volumes finis avec des sections continues par morceaux	106
6.4.5	Effet du nombre de discrétisations	106
6.5	Optimisation du solveur avec les sections discrètes	107
6.6	Conclusion	112
IV	Validation de la modélisation	113
7	Calculs de cellules en réseau infini	115
7.1	Présentation des cas d'études	115
7.2	Du combustible cylindrique au combustible carré	118
7.3	Analyse physique sur des cellules en réseau infini	123
7.3.1	Comparaisons des écarts $P_n - P_5$	124
7.3.2	Effets des sections discrètes	127
7.3.3	Comparaisons des écarts par rapport à TRIPOLI4	129
7.3.4	Taux de réactions	131
7.3.5	Flux et source angulaires	137
7.4	Conclusion	137
8	Calculs de motifs hétérogènes	141
8.1	Présentation de la géométrie du cluster	141
8.2	Convergence spatiale	142
8.3	Convergence angulaire	144
8.4	Effet du changement de géométrie et de l'hydrogène non-lié	145
8.5	Effet des sections discrètes	147
8.6	Comparaison avec TRIPOLI4	149
8.6.1	Décomposition en six facteurs	149
8.6.2	Taux d'absorption	150
8.7	Conclusion	152

9	Calculs de réflecteur	159
9.1	Présentation de la géométrie	159
9.2	Calcul avec la représentation discrète	161
9.2.1	Écart $P_n - P_5$	161
9.2.2	Effet des sections discrètes	163
9.2.3	Nappe de flux et taux de fission	163
9.3	Conclusion	167
	Conclusion Générale et Perspectives	169
	Annexes	173
A	Convergence du calcul en fonction du maillage spatial	175
B	Bilan phénoménologique : Formule des six facteurs	177
C	Développement de l'équation du transport sous la forme des ordonnées discrètes	179
D	Effets de quadrature sur les calculs cellules	181
D.1	Correction de transport	181
D.2	Effets de quadrature sur les calculs MOC en P_3 et P_0c	182
E	Principe de GENXS	197
F	Parallélisation du solveur FV	199
G	Biais dus à la coupure gaz libre	201
H	Erreurs énergie-angle	203
	Bibliographie	207

Liste des figures

Introduction	1
1 Section de transfert multigroupe de l'hydrogène pour $g = 20 \rightarrow g = 26$ du maillage SHEM (largeur en léthargie ~ 0.1) vs cosinus de l'angle de déviation. . .	3
1 Notions de neutronique	7
1.1 Représentation visuelle de la section efficace de quelques actinides à différentes énergies du spectre.	8
1.2 Section de capture de ^{238}U	10
2 Résolution de l'équation du transport	15
2.1 Simulation de l'histoire d'un neutron par la méthode Monte Carlo.	17
2.2 Section de capture de ^{238}U condensée sur le maillage SHEM à 281 groupes.	21
2.3 Formalisme d'intégration en MOC.	24
2.4 Les schémas SHEM-MOC et REL2005	29
2.5 Méthodes de résolution	31
3 Présentation de la notion d'anisotropie dans les calculs de réacteurs	35
3.1 Distributions angulaires élastiques de l'uranium 238, du fer 56 et de l'hydrogène à 200 keV et 2 MeV.	37
3.2 Choc dans le CM.	40
3.3 Choc dans le LAB.	40
3.4 Relation entre la vitesse dans le CM et dans le LAB.	42
3.5 μ_{LAB} vs μ_{CM}	44
3.6 Distribution angulaire dans le référentiel laboratoire, $p(\mu_{LAB})$, vs μ_{LAB} , en supposant que le choc est isotrope dans le CM, $p(\mu_{CM}) = \frac{1}{2}$	45
3.7 Chaîne de <i>processing</i> des données nucléaires.	48
4 État de l'art du traitement de l'anisotropie	49
4.1 Sections de transfert élastique pour ^{238}U pour le maillage SHEM, largeur en léthargie, $\Delta u = 0.2$	54
4.2 Sections de transfert élastique pour ^{238}U pour le maillage SHEM, largeur en léthargie, $\Delta u = 0.04$	55

4.3	Sections de transfert élastique pour ^{238}U pour le maillage ECCO, largeur en léthargie, $\Delta u = 0.0083$	55
4.4	Sections de transfert élastique pour ^{16}O pour le maillage SHEM, largeurs en léthargie, $\Delta u = 0.2$ en haut et $\Delta u = 0.04$ en bas.	56
4.5	Sections de transfert élastique pour ^1H pour le maillage SHEM, largeurs en léthargie, $\Delta u = 0.2$ en haut et $\Delta u = 0.04$ en bas.	57
4.6	Effet de la masse sur l'anisotropie pour les transferts $g \rightarrow g$ (en haut) et $g \rightarrow g+1$ (en bas), largeur en léthargie, $\Delta u = 0.2$	58
4.7	Section de transfert multigroupe de l'hydrogène pour $g = 20 \rightarrow g = 26$ du maillage SHEM (largeur en léthargie ~ 0.1) vs μ	59
4.8	Sections de transfert de l'H dans les domaines rapide $g = 1$ (haut gauche), en ralentissement $g = 20$ (haut droite) et en thermique $g = 230$ pour le maillage SHEM.	60
4.9	Maillage spatial utilisé.	61
4.10	Section de transfert de l'eau et comparaison des méthodes.	71
5	Méthode des volumes finis en angle	77
5.1	Définition de l'angle polaire et azimutal pour un angle solide Ω	77
5.2	Un octant de la sphère unité.	82
5.3	Hémisphères en géométries 2D : cylindrique à gauche, cartésienne à droite.	84
5.4	Maillage produit de la sphère unité.	84
5.5	Découpage du premier octant de la sphère unité en quadrature symétrique par niveau LS16 (à gauche) et en quadrature de type produit $N_\mu = 6, N_\varphi = 6$ - le nombre de directions par octant étant égal à 36 dans les deux cas.	85
5.6	Géométrie du benchmark anisotrope.	88
5.7	Convergence du k_{eff} en P1 vs no. de directions.	89
5.8	Géométrie de la cellule UOX.	90
6	Section efficace moyenne par morceaux	93
6.1	Moment d'ordre 0 de l'hydrogène avec NJOY et GENXS.	100
6.2	Moment d'ordre 1 de l'hydrogène avec NJOY et GENXS.	100
6.3	Erreur entre les sections de diffusion P0 NJOY et GENXS pour l'hydrogène.	101
6.4	Moment d'ordre 0 du ^{56}Fe avec NJOY et GENXS.	101
6.5	Moment d'ordre 1 du ^{56}Fe avec NJOY et GENXS.	102
6.6	Erreur entre les sections de diffusion P0 NJOY et GENXS pour le fer.	102
6.7	Convergence de $h_k^{1 \rightarrow 6}$	104
6.8	Convergence du k_∞ et du facteur antitrappe p en fonction de nombre de tirages et avec 144 directions dans l'hémisphère.	105
6.9	Sections discrètes pour l'hydrogène en 64, 16 et 8 paliers pour le transfert $20 \rightarrow 26$ dans le maillage SHEM, en comparaison avec les moments P0, P1 et P3.	107

6.10	Temps de calcul de la cellule UOX en fonction du nombre de directions dans la demi-sphère avec et sans optimisation et en comparant aux solveurs S_n avec le même schéma spatial.	110
6.11	Temps de calcul de la cellule UOX en fonction du nombre de directions dans la demi-sphère avec et sans optimisation.	111
7	Calculs de cellules en réseau infini	115
7.1	Spectre des différents cas.	117
7.2	Géométrie de la cellule carrée.	118
7.3	Résonances majeures dans le domaine thermique.	132
7.4	UOX : Flux angulaires et sources de diffusion dans les groupes 1 (rapide, premier à partir du haut), 10 (ralentissement, deuxième) et 13 (thermique, en bas)	138
7.5	V40 : Flux angulaires et sources de diffusion dans les groupes 1 (rapide, premier à partir du haut), 10 (ralentissement, deuxième) et 13 (thermique, en bas)	139
8	Calculs de motifs hétérogènes	141
8.1	Cluster Tube Guide.	141
8.2	Cluster Tube Guide avec maillage spatial « moulin à vent ».	143
9	Calculs de réflecteur	159
9.1	Géométrie de la traverse.	159
9.2	Passage de la géométrie XY à la géométrie 1D.	160
9.3	Flux angulaires sur la traverse	162
9.4	Flux rapide (en haut) et thermique (en bas) sur la traverse avec les erreurs en % dues aux méthodes et à la représentation de l'anisotropie.	164
9.5	Fission à 1 groupe sur la traverse avec les erreurs dues en % aux méthodes et à la représentation de l'anisotropie.	165
9.6	Les erreurs en % dues aux méthodes et à la représentation de l'anisotropie. . . .	166
A	Convergence du calcul en fonction du maillage spatial	175
A.1	Maillages spatiaux de la cellule	175
D	Effets de quadrature sur les calculs cellules	181
D.1	Ecarts de réactivité AP2-T4 pour du combustible UOX vs nombre d'angles azimuthaux, N_ϕ , N_μ valant 3, 4, et 6 - combustible carré en haut, cylindrique en bas.	184
D.2	Ecarts de réactivité AP2-T4 pour du combustible UOX vs nombre d'angles azimuthaux, N_ϕ , N_μ valant 12 - combustible carré en haut, cylindrique en bas. . . .	185

D.3	Ecarts de réactivité AP2-T4 pour du combustible MOX vs nombre d'angles azimuthaux, N_ϕ , N_μ valant 3, 4, et 6 - combustible carré en haut, cylindrique en bas.	186
D.4	Ecarts de réactivité AP2-T4 pour du combustible MOX vs nombre d'angles azimuthaux, N_ϕ , N_μ valant 12 - combustible carré en haut, cylindrique en bas.	187
D.5	Ecarts de réactivité AP2-T4 pour du combustible MOX V40 vs nombre d'angles azimuthaux, N_ϕ , N_μ valant 3, 4, et 6 - combustible carré en haut, cylindrique en bas.	188
D.6	Ecarts de réactivité AP2-T4 pour du combustible MOX V40 vs nombre d'angles azimuthaux, N_ϕ , N_μ valant 12 - combustible carré en haut, cylindrique en bas.	189
Parallélisation du solveur FV		199
F.1	Facteur de gain en fonction du nombre de processeurs.	200
H Erreurs énergie-angle		203
H.1	Erreurs avec la quadrature FVLS16 pour le premier octant dans chaque groupe, de haut en bas et de gauche à droite, 1 à 8.	205
H.2	Erreurs avec la quadrature FV6 pour le premier octant dans chaque groupe, de haut en bas et de gauche à droite, 1 à 8.	206

Liste des tables

4 État de l'art du traitement de l'anisotropie	49
4.1 L'impact de l'anisotropie de l'hydrogène sur quatre cas d'études, décomposé sur les six facteurs.	62
4.2 Modélisations de Kim pour la source et le flux scalaire.	64
5 Méthode des volumes finis en angle	77
5.1 Tableau résumant les propriétés des quadratures « level-symmetric ».	79
5.2 S_n vs. volumes finis.	81
5.3 Compositions des milieux	87
5.4 Résultats des calculs : k_∞	91
5.5 Comparaison des écarts entre les ordres de Legendre pour un solveur donné.	91
5.6 Comparaison des écarts entre les divers solveurs à un ordre donné.	91
6 Section efficace moyenne par morceaux	93
6.1 Valeurs des différents paramètres utilisés pour GENXS.	98
6.2 Ecart sur les six facteurs entre le calcul $P1$ et le calcul $P1Mod$	103
6.3 Comparaison entre un calcul « tout » $P0$ et un calcul mixte $P0$ et sections discrètes équivalentes au $P0$ pour l'hydrogène.	106
6.4 Sensibilité du calcul au nombre de discrétisations k de l'intervalle $[-1, +1]$	108
7 Calculs de cellules en réseau infini	115
7.1 Composition des milieux dans la cellule UOX.	115
7.2 Composition des milieux dans la cellule MOX à froid.	116
7.3 Composition du modérateur dans les cellules MOX à chaud et MOX vidangée à 40%.	116
7.4 Données géométriques pour la cellule à combustible cylindrique (gauche) et carrée (droite).	118
7.5 Ecart en pcm dus au changement de géométrie et à l'utilisation de l'hydrogène libre.	120
7.6 Ecart en pcm dus au changement de géométrie et à l'utilisation de l'hydrogène libre sur les effets $P_n - P_5$	122
7.7 UOX et MOX à froid : Ecart sur les six facteurs entre les ordres de Legendre.	125
7.8 MOX à chaud et MOX V40% : Ecart sur les six facteurs entre les ordres de Legendre.	126

7.9	Résultats avec les sections de transferts discrètes en FV 6 6.	127
7.10	Résultats avec les sections de transferts discrètes avec des quadratures FV 24 12.	128
7.11	UOX : Ecart par rapport au calcul TRIPOLI4.	129
7.12	MOX V40% : Ecart par rapport au calcul TRIPOLI4.	129
7.13	Macro-maillage à 13 groupes pour l'analyse des taux de réactions.	131
7.14	UOX : Taux d'absorption et de diffusion (en pcm) sur les isotopes d'uranium.	134
7.15	V40 : Taux d'absorption et de diffusion (en pcm) sur les isotopes de l'uranium.	135
7.16	V40 : Taux d'absorption et de diffusion (en pcm) sur les isotopes du plutonium.	136
8	Calculs de motifs hétérogènes	141
8.1	Effet de la convergence spatiale dans le schéma REL2005.	143
8.2	Convergence angulaire du $P3$ et du $P0c$ en MoC pour TG H ₂ O.	144
8.3	Convergence angulaire du $P3$ et du $P0c$ en MoC pour TG B ₄ C.	145
8.4	Quantification des effets dus à la géométrie et à l'hydrogène libre.	146
8.5	Quantification des écarts $Pn - P5$ dus à l'effet combiné de la géométrie et de l'hydrogène libre.	146
8.6	Ecart par rapport au calcul $P5$ en FV et en MoC.	147
8.7	Comparaison des écarts Pn par rapport aux sections discrètes.	148
8.8	Comparaison à TRIPOLI4, cluster TG H ₂ O.	149
8.9	Comparaison à TRIPOLI4, cluster TG B ₄ C.	150
8.10	Taux d'absorption sur les principaux isotopes du cluster TG H ₂ O FACE.	153
8.11	Taux d'absorption sur les principaux isotopes du cluster TG H ₂ O ANGLE.	154
8.12	TG H ₂ O : Comparaison des taux d'absorption sur les combustibles FACE et ANGLE.	155
8.13	Taux d'absorption sur les principaux isotopes du cluster TG B ₄ C FACE.	156
8.14	Taux d'absorption sur les principaux isotopes du cluster TG B ₄ C ANGLE.	157
8.15	TG B ₄ C : Comparaison des taux d'absorption sur les combustibles FACE et ANGLE, et sur le B ₄ C.	158
9	Calculs de réflecteur	159
9.1	Convergence du calcul par rapport à l'ordre $P5$	161
9.2	Comparaison au calcul TRIPOLI4 (écarts en pcm).	163
A	Convergence du calcul en fonction du maillage spatial	175
A.1	Nombre de mailles de combustible et de modérateur dans les divers maillages	175
A.2	UOX : Effets du maillage spatial sur les six facteurs	176
D	Effets de quadrature sur les calculs cellules	181
D.1	Effets des quadratures sur le calcul de la cellule UOX cylindrique.	190
D.2	Effets des quadratures sur le calcul de la cellule MOX cylindrique à froid.	191
D.3	Effets des quadratures sur le calcul de la cellule MOX cylindrique à chaud.	191

D.4	Effets des quadratures sur le calcul de la cellule MOX cylindrique à chaud vidangée à 40%.	192
D.5	Convergence du calcul en FV - P3	193
D.6	Taux d'absorption sur les isotopes d'uranium pour l'UOX, le MOX et le V40. . .	194
D.7	Taux d'absorption sur les isotopes du Pu pour le MOX à froid et V40.	195
G	Biais dus à la coupure gaz libre	201
G.1	Ecart en pcm dus à l'utilisation de l'hydrogène libre dans TRIPOLI4 avec la coupure du modèle de gaz libre à $1000kT/A$	201
H	Erreurs énergie-angle	203

Introduction

La découverte du neutron en 1932 par J. Chadwick vient compléter la connaissance de l'époque sur la structure interne de l'atome. L'existence d'une particule neutre est une vraie manne pour les physiciens qui disposent ainsi d'un projectile qui n'est pas repoussé par le noyau, permettant donc de l'atteindre pour le sonder. L'ère de la physique nucléaire vient de commencer. E. Fermi met en évidence en 1934 le phénomène du ralentissement des neutrons dans la paraffine et démontre que les neutrons ralentis sont efficaces pour produire des isotopes radioactifs, travail pour lequel il reçoit le prix Nobel de physique en 1935. En 1938, L. Heitner et O. Hahn découvrent la fission et un peu plus tard, F. Joliot, F. Perrin, L. Kowarski et H. Halban prouvent que les réactions en chaîne sont possibles par la fission. C'est le début de la physique des réacteurs, marqué en 1942 par la divergence du premier réacteur nucléaire¹, *Chicago Pile 1*, sous les commandes de Fermi.

Aujourd'hui, la production d'énergie électrique en France repose fortement sur le nucléaire, avec une part de plus de 75%. Forte d'un parc de 58 réacteurs, constitué uniquement de réacteurs à eau légère pressurisée (REP), la France est un des leaders incontestés de l'industrie nucléaire mondiale grâce à un constructeur reconnu - AREVA - et un exploitant fiable - EDF. Par ailleurs, sa recherche intensive en physique des réacteurs ainsi que son retour d'expérience sont aussi des atouts importants. Afin de maintenir cette compétitivité, l'amélioration des rendements des centrales de production est primordiale tout en répondant aux exigences de sûreté accrues. Face à de tels enjeux, les outils de simulation numérique sont incontournables pour la conception et l'étude de systèmes innovants.

La physique des réacteurs fait intervenir plusieurs branches de la physique dont les principales sont la neutronique, la thermohydraulique, la thermo-mécanique et les sciences des matériaux. La nécessité d'avoir des outils correspondants à chaque domaine est essentielle pour les études. L'enchaînement des simulations à travers ces outils est très complexe d'autant que les concepts de réacteurs sont nombreux. Malgré l'importance des divers domaines, la neutronique, branche de la physique spécifique à la physique des réacteurs, est incontournable. Elle permet de traduire le comportement global de la population neutronique dans un réacteur et de ce fait, de calculer la puissance volumique qui est un paramètre d'importance en fonctionnement nominal ou dans des cas incidentels, voire accidentels.

L'utilisation des outils de simulation numérique en neutronique vise à calculer le flux neutronique, qui a la dimension d'une quantité de particules par unité de surface et de temps, dans le réacteur. Ce flux est caractérisé par l'équation du transport de Boltzmann qui est résolue sous

1. Construit par l'homme. En effet, à Oklo au Gabon, les conditions naturelles étaient réunies pour maintenir une réaction en chaîne, formant ainsi un réacteur « naturel » découvert en 1972 par F. Perrin.

sa forme stationnaire par deux grandes familles de méthodes : les méthodes stochastiques basées sur les tirages aléatoires d'un très grand nombre de particules afin de simuler leur histoire, et les méthodes déterministes qui traitent la population neutronique comme un continuum et s'intéressent aux phénomènes globaux mis en jeu via des approximations.

Dans une logique d'offrir aux industriels un outil fiable pour leurs études, les codes déterministes sont validés numériquement par rapport aux codes stochastiques de référence et expérimentalement par rapport à leur capacité à reproduire des paramètres fondamentaux mesurés dans des réacteurs maquettes. Cependant, le coût en temps et en ressources nécessaires pour mener des calculs de réacteur très fins étant très cher pour les industriels, la mise en place de schémas de calcul est primordial. À ce titre, le calcul en physique des réacteurs se fait en deux phases :

- le calcul de réseau ou assemblage. Ce dernier permet d'obtenir des paramètres caractéristiques du problème de réacteur étudié, qui seront utilisés dans l'étape suivante. Ce calcul est mené sur une géométrie représentative d'un élément du calcul de réacteur en discrétisant finement les variables d'énergie, d'angle et d'espace. Cette géométrie est une cellule élémentaire de combustible ou un assemblage de cellules en réseau infini. L'approximation de réseau infini est corrigée en prenant en compte un modèle de fuites qui permet ainsi d'effectuer un calcul en mode fondamental.
- le calcul de cœur. Ce dernier utilise les données obtenues du calcul de réseau pour simuler le cœur en entier. Les discrétisations des variables sont plus relâchées par comparaison au calcul de réseau.

La validation du schéma APOLLO2.8 [1]/REL2005 [2] pour le calcul de réseau des réacteurs à eau légère (REL) a mis en évidence les biais résiduels des calculs en méthodes des caractéristiques (MOC) [3] avec traitement de l'anisotropie du choc sur le bilan neutronique des cellules et assemblages REP UOX et MOX (comparaisons avec le code Monte Carlo étalon TRIPOLI4 [4]), la sous-estimation du k_∞ allant de 150 à 400 pcm.

La majorité des paramètres du calcul est maîtrisé de nos jours - calcul du flux avec la méthode des caractéristiques, maillage spatial qui modélise le plus fidèlement possible la géométrie calculée, options de discrétisations des variables spatiales et angulaires flexibles. Les biais résiduels du schéma sont dus à la discrétisation en énergie, aussi connue comme l'approximation multigroupe, qui nécessite une modélisation de l'absorption résonnante (autoprotection) et de l'anisotropie du choc (développement tronqué sur une base de polynômes de Legendre).

L'anisotropie du choc est caractérisée en neutronique par la diffusion des neutrons dans l'espace des phases énergie-angle. Cette loi de choc est prise en compte dans l'équation du transport par une probabilité d'interaction que l'on nomme section efficace de transfert. Depuis plus d'une cinquantaine d'années, en effet, les polynômes de Legendre sont utilisés pour représenter la section de transfert multigroupe dans les codes déterministes. Comme il sera démontré au cours de ce document, ces sections de transfert multigroupes ont une forme très piquée en fonction de cosinus de l'angle de déviation entre les directions avant et après choc.

Des polynômes de degré faible modélisent mal la forme très piquée que prennent ces sections surtout dans le cadre des maillages énergétiques fins et pour les noyaux légers. D'autre part, les sections de transfert multigroupes sont non-nulles sur un intervalle très faible du cosinus de l'angle de déviation $[-1, +1]$. Par ailleurs, cette représentation introduit aussi des valeurs négatives qui n'ont pas de sens physique.

Dans la Fig. 1, la courbe de gauche montre la modélisation de la section de transfert du groupe 20 au groupe 26 dans le maillage SHEM [5] à travers des polynômes de Legendre de degré ≤ 20 . Ceux-ci ne sont pas suffisants pour appréhender le pic. La figure de droite donne la représentation avec des polynômes jusqu'à des ordres très élevés qui atténuent les oscillations négatives sans toutefois les supprimer complètement. Augmenter l'ordre ne semble pas être une solution viable pour modéliser fidèlement la loi de choc.

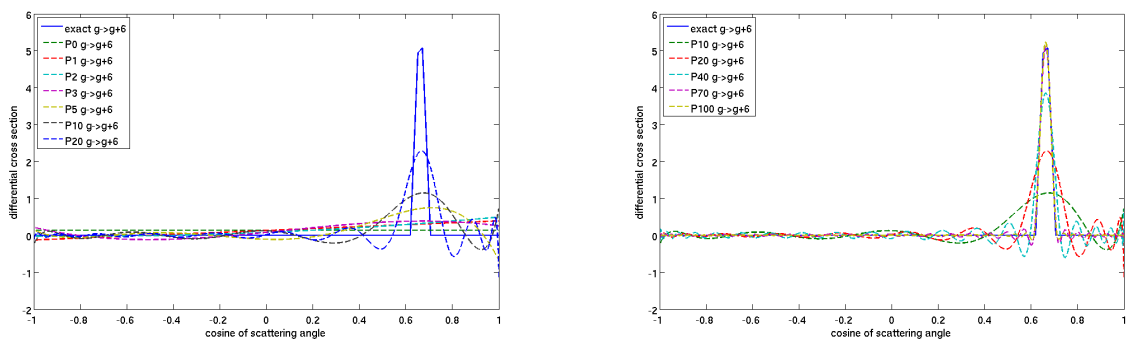


FIG. 1 – Section de transfert multigroupe de l'hydrogène pour $g = 20 \rightarrow g = 26$ du maillage SHEM (largeur en léthargie ~ 0.1) vs cosinus de l'angle de déviation.

Dans le cadre de la modélisation avancée en neutronique des cœurs (MACOE) au sein du projet SINET (Simulation Neutronique) au Commissariat à l'Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives, ce travail se penche sur les biais dus à la loi de choc et pose la question de la pertinence de la modélisation de celle-ci sur une base polynômiale tronquée.

C'est dans ce cadre qu'une nouvelle méthode pour modéliser les sections de transfert multigroupes sera testée afin d'évaluer et de quantifier les biais qui sont dus au développement tronqué sur les polynômes de Legendre.

Plan du document

Ce document est découpé en quatre parties. La première partie s'articule autour de rappels de neutronique. On rappelle le formalisme des sections efficaces de réactions et les terminologies qui seront utilisées tout le long de ce document. Ensuite, l'équation du transport est présentée, les différents termes explicités et les méthodes de résolution décrites brièvement avec une attention particulière à celles qui seront pertinentes pour nos études.

La deuxième partie s'intéressera quant à elle à l'anisotropie du choc. On y décrit d'abord la notion de l'anisotropie du choc dans le cadre de la physique des réacteurs. Puis, on se penchera sur le traitement de l'anisotropie du choc dans les méthodes stochastiques et plus particulièrement dans les codes déterministes. Un état de l'art sur ce dernier aspect, amenant à un choix critique d'un formalisme qui s'affranchit des développements polynômiaux, sera présenté.

Les troisième et quatrième parties constituent le cœur de ces travaux de thèse. Elles mettent en évidence les développements qui ont été menés, leurs motivations et l'implémentation concrète au sein du code `SNATCH`. Ces développements sont ensuite utilisés pour l'étude de l'effet de la modélisation de l'anisotropie du choc sur les calculs de cellule en réseau infini, de motifs hétérogènes et de traverse avec réflecteur. Le choix de ces diverses géométries est justifié par le fait que ce sont des problèmes qui sont rencontrés couramment en neutronique où les effets dus à l'anisotropie du choc ne sont pas négligeables.

Nous concluons finalement ce document en rappelant les principaux résultats obtenus et les perspectives d'études pour le futur.

Première partie

Rappels de neutronique

Notions de neutronique

Ce chapitre présente les notions essentielles de la neutronique en rappelant la définition de la section efficace de réaction et les phénomènes physiques qui y sont associés. Puis, l'équation du transport sera développée comme une équation de bilan et les divers termes qui la composent seront explicités.

1.1 Bases de la neutronique

La physique des réacteurs s'intéresse à l'étude des interactions entre les neutrons et la matière présente dans un réacteur nucléaire. Ce dernier fonctionne sur la base d'une réaction nucléaire en chaîne contrôlée, la fission. Les neutrons interagissent avec les matériaux par le biais de collisions qui sont caractérisées par le noyau cible et les modèles physiques qui décrivent ces interactions en fonction de l'énergie du neutron incident. La neutronique est l'étude de ces interactions neutron-noyau et des réactions qui en découlent. Elle se fonde sur une description statistique de la population de particules dans le réacteur en fonction de leurs distributions en énergie, position et direction à un instant donné. De ce fait, la neutronique relie les phénomènes qui interviennent à un niveau microscopique (à l'échelle du noyau, de l'ordre du femtomètre) aux effets macroscopiques observables.

1.1.1 Sections efficaces de réaction

Les interactions neutron-noyau sont décrites en physique nucléaire par l'intermédiaire des *sections efficaces de réaction*. Une section efficace est définie comme la probabilité d'interaction entre deux particules pour une réaction spécifique [6,7]. La section efficace neutronique à laquelle on s'intéressera tout le long de ce document se restreint aux interactions neutron-noyau. Cette définition correspond à celle de la section efficace dite *microscopique*, notée σ_x , x étant la réaction induite. La section efficace microscopique correspond à la « section droite » qu'aurait le noyau cible vu par le neutron (*cf* Fig. 1.1). Elle est mesurée en *barns* (1 barn = 10^{-24} cm²).

Les probabilités d'interactions, donc les sections efficaces, dépendent de plusieurs paramètres tels que l'énergie du neutron incident, le noyau cible, la température et les réactions prises en compte.



FIG. 1.1 – Représentation visuelle de la section efficace de quelques actinides à différentes énergies du spectre.

La grandeur physique souvent utilisée en physique des réacteurs est la section efficace *macroscopique*, Σ , qui est le produit de la section efficace microscopique et de la densité atomique des noyaux cibles. Cette section est additive. Elle a pour dimension physique l'inverse d'une longueur et correspond à l'« aire totale effective » de tous les noyaux cibles par unité de volume.

1.1.2 Classification des sections efficaces

On appellera *réactions neutroniques* les interactions neutron-matière. La réaction neutronique la plus simple est la *diffusion potentielle*. Dans ce cas, l'onde associée au neutron est diffusée par la barrière de potentiel du noyau cible et le neutron est diffusé de manière élastique (conservation de l'énergie cinétique et de la quantité de mouvement du système neutron-noyau) ; la cinématique est régie par les lois de type *boules de billard*.

Les autres réactions neutroniques se font par la formation d'un *noyau composé*, mécanisme proposé par N. Bohr [8]. Le neutron est absorbé par le noyau qui change de nature (le nombre de nucléons est en effet incrémenté de un, c'est-à-dire ${}^A_Z X + {}^1_0 n \rightarrow {}^{A+1}_Z X$). L'énergie du neutron absorbé est transmise aux autres nucléons et le noyau est élevé à un état dit *excité*, devenant ainsi instable. Il se désexcite par différentes voies décrites ci-dessous pour retomber à son état fondamental :

1. pour les noyaux lourds, la *fission*, où le noyau se fracture en deux fragments avec l'émission de $\nu(E)$ neutrons en moyenne, notée, (n, f)
2. en l'absence de fission, émission d'une ou plusieurs particules :
 - i. la *capture* radiative par émission de rayonnement γ , notée (n, γ)

ii. la *diffusion résonnante* :

- a. *élastique*, émission d'un neutron avec la conservation de l'énergie cinétique et de la quantité de mouvement, notée (n, n)
 - b. *inélastique*, émission d'un neutron avec conservation de la quantité de mouvement uniquement, le noyau reste dans un état excité notée (n, n')
- iii. émission de plusieurs neutrons à haute énergie, notée (n, Xn) , X étant le nombre de neutrons émis
- iv. émission de particules chargées : proton (n, p) , alpha (n, α) , *etc.*

Les réactions importantes de la neutronique sont principalement classées en deux types : la diffusion (notée s et incluant les réactions potentielle, résonnante élastique et inélastique) et l'absorption (notée a et incluant la capture radiative, la fission, l'émission de plusieurs neutrons et l'émission de particules chargées). Elles constituent la réaction totale, telle que :

$$\sigma_{total}(E) = \sigma_s(E) + \sigma_a(E), \quad E \text{ étant l'énergie du neutron incident} \quad (1.1)$$

Remarque : Dans ce document, on distinguera les notions de *section de diffusion*, $\sigma(E)$ et *section de transfert*, $\sigma(E' \rightarrow E)$. Cette dernière désigne toutes les réactions de transfert où un neutron d'énergie incidente E' arrive à l'énergie E tandis que la section de diffusion est l'intégrale de la section de transfert sur toute la gamme des énergies d'arrivée E .

1.1.3 Aspect énergétique de la section efficace microscopique

Lors de la formation d'un noyau composé (*cf* la partie ci-dessus), l'énergie cinétique apportée par le neutron incident e_n dans le centre de masse est distribuée parmi tous les nucléons dans le noyau composé. Si e_n est proche de e_i - l'énergie de l'état propre virtuel, une condition de résonance existe et la section efficace croît rapidement en forme de pic, appelé *résonance*, au voisinage de l'énergie e_i [6]. Pour les noyaux lourds, le domaine énergétique est séparé en :

- *domaine thermique* en dessous de l'eV avec une variation de la section efficace en $\sim \frac{1}{v}$ (v étant la vitesse du neutron incident),
- *domaine des résonances résolues* entre l'eV et quelques dizaines de keV avec des résonances décrites de manière « bien séparée » [9],
- *domaine des résonances non-résolues* jusqu'à des centaines de keV avec des résonances qui se chevauchent et sont décrites de manière statistique,
- *domaine du continuum* où les résonances deviennent monotones et varient lentement.

La Fig. 1.2 illustre ces divers domaines avec la section de capture de l'uranium-238 dont la première résonance se situe à 6.67 eV.

Les résonances sont décrites via plusieurs modèles physiques suivant le domaine énergétique :

- dans le domaine résolu avec la théorie de la matrice-R [10] et ses diverses approximations
 - o Single-Level Breit-Wigner (SLBW) [11]
 - o Multi-Level Breit-Wigner (MLBW)

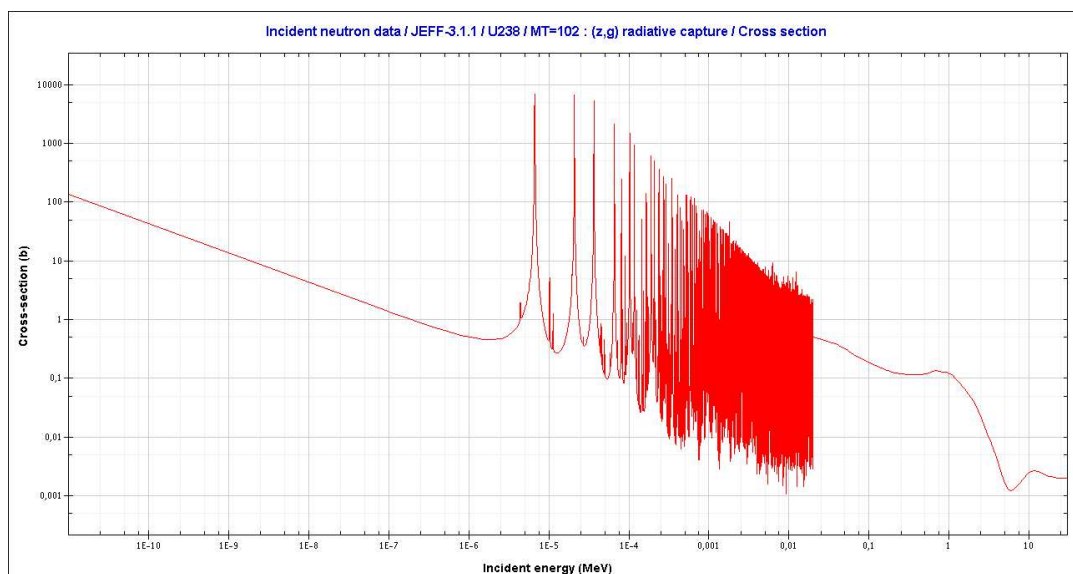


FIG. 1.2 – Section de capture de ^{238}U .

o Reich-Moore [12]

- dans le domaine du continuum avec le modèle optique [13,14]

1.2 L'équation du transport de Boltzmann

Dans le cadre de la physique des réacteurs, l'équation du transport, aussi connue comme l'équation de Boltzmann, décrit le comportement d'une population de neutrons. Cette équation a été dérivée par L. Boltzmann vers la fin du XIX-ème siècle pour la théorie cinétique des gaz sous certaines hypothèses [9] :

- Toute force autre que celles qui causent les chocs sera négligée ; les neutrons ont une trajectoire rectiligne entre deux chocs.
- Tout effet relativiste sera négligé car l'énergie des neutrons dans un réacteur nucléaire est relativement faible et ne nécessite pas de prendre en compte la correction de Lorentz.
- Les collisions entre neutrons seront négligées car la concentration de neutrons par rapport aux noyaux des milieux présents est très faible. On considère que la population neutronique dans un réacteur s'apparente à un gaz peu dense.
- La radioactivité du neutron sera négligée en supposant que la durée de vie moyenne d'un neutron dans un réacteur est très petite devant la demi-vie de la désintégration du neutron par une réaction β^- .

Flux angulaire, équation de bilan et flux scalaire

La distribution de neutrons en un point \mathbf{r} de l'espace à $d^3\mathbf{r}$ près, à une vitesse \mathbf{v} à $d^3\mathbf{v}$ près à un instant t est la densité neutronique $n(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$. Dans la physique des réacteurs, la grandeur d'intérêt pour le physicien est le taux de réaction qui est une grandeur « observable » : nombre de réactions par unité de temps. Dans un volume \mathcal{V} , le taux de réaction \mathcal{R} s'écrit :

$$\mathcal{R} = \int_{\mathcal{V}} n(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) v \Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3r \quad (1.2)$$

De ce fait, le neutronicien travaille plus naturellement avec le *flux angulaire* : $\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = v n(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$, v étant la norme de \mathbf{v} . Il a pour dimension un nombre de particules par unité de surface et de temps.

L'équation du transport exprime un bilan de particules dans l'espace des phases en prenant en compte les « créations » (sources) et disparitions de neutrons à l'intérieur d'un volume de contrôle, C . Nous distinguons les deux natures de ce bilan : un premier bilan d'entrée-sortie des particules qui est pris en compte comme un terme de convection via l'opérateur de divergence et un bilan de production-absorption dans le volume élémentaire.

En neutronique, la variable \mathbf{v} est exprimée usuellement sous forme d'énergie et de direction de propagation, $(E, \boldsymbol{\Omega})$ où $\boldsymbol{\Omega} = \mathbf{v}/v$. Le bilan des particules dans le volume de contrôle peut s'écrire comme :

variation du nombre de neutrons dans un intervalle de temps $\Delta t = -$ (bilan net d'entrée-sortie de C) - absorption + production

Nous écrivons ainsi ci-dessous l'équation du transport de Boltzmann sous sa forme dépendante du temps [15] :

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) = & - \underbrace{\operatorname{div}(\boldsymbol{\Omega} \Psi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t))}_{\text{fuites}} - \underbrace{\Sigma_t(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) \Psi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t)}_{\text{chocs}} \\ & + \underbrace{\int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d^2\boldsymbol{\Omega}' \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}, t) \Psi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}', t)}_{\text{transferts}} + \underbrace{Q(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t)}_{\text{sources}} \end{aligned} \quad (1.3)$$

- $\Psi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t)$: le flux angulaire en un point \mathbf{r} de l'espace, à une énergie E , et dans une direction $\boldsymbol{\Omega}$ à un instant t .
- $\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t)$: le taux de croissance du nombre de particules dans le volume de contrôle C à l'instant t .
- $\operatorname{div}(\boldsymbol{\Omega} \Psi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t))$: terme de convection qui prend en compte les particules qui sortent du volume de contrôle C dans un intervalle de temps δt . S'obtient en intégrant le courant sur la surface δC de C .
- $\Sigma_t(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) \Psi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t)$: terme qui prend en compte les chocs dans le volume C .

- $\int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d^2\Omega' \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, \Omega' \rightarrow \Omega, t) \Psi(\mathbf{r}, E, \Omega, t)$: le terme de transfert des particules qui diffusent d'une énergie E' à l'énergie E et d'une direction Ω' vers Ω .
- $Q(\mathbf{r}, E, \Omega, t)$: une densité de source qui prend en compte la création de particules dans C (exemple : par fission).

Les neutrons produits par fission ne sont pas comptés dans le terme de collision mais dans le terme source. Le terme de fission est supposé isotrope et indépendant de l'énergie incidente du neutron. Pour chaque isotope fissile i , l'énergie des neutrons émis est obtenue selon une distribution donnée par le spectre de fission, $\chi_i(E)$. Si on suppose qu'il n'y a pas de source externe, le terme de fission s'écrit :

$$Q(\mathbf{r}, E, \Omega, t) = \frac{1}{4\pi} \sum_i \chi_i(E) \int_0^\infty dE' \nu_f \Sigma_f(\mathbf{r}, E', \Omega, t) \int_{4\pi} d^2\Omega' \Psi(\mathbf{r}, E', \Omega', t) \quad (1.4)$$

Flux scalaire : Dans l'équation précédente, l'intégrale du flux angulaire sur toutes les directions apparaît. Cette grandeur est appelée *flux scalaire* et définit le moment d'ordre zéro du flux par rapport à Ω :

$$\Phi(\mathbf{r}, E, t) = \int_{4\pi} d^2\Omega \Psi(\mathbf{r}, E, \Omega, t) \quad (1.5)$$

1.3 Équation stationnaire

Dans le cadre de la simulation numérique du transport, une solution stationnaire de l'équation de Boltzmann est généralement recherchée (ce qui correspond à un régime de fonctionnement critique du réacteur). Une telle solution ne peut cependant exister que si à chaque instant la production de neutrons par fission compense exactement les pertes de neutrons par absorption ou fuite au bord du domaine. Le *facteur de multiplication effectif*, k_{eff} , qui permet de rétablir l'équilibre entre les sources et les disparitions de neutrons dans l'équation indépendante du temps est introduit. C'est l'équation aux valeurs propres suivante qui est finalement résolue :

$$\mathbf{\Omega} \cdot \nabla \phi(\mathbf{r}, E, \Omega) + \Sigma_i(\mathbf{r}, E) \phi(\mathbf{r}, E, \Omega) = \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d^2\Omega' \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, \Omega' \rightarrow \Omega) \phi(\mathbf{r}, E, \Omega') + \frac{1}{k_{eff}} Q(\mathbf{r}, E, \Omega) \quad (1.6)$$

$\phi(\mathbf{r}, E, \Omega)$ étant le flux angulaire indépendant du temps. Les sections efficaces de réaction sont supposées indépendantes du temps car la durée de vie des neutrons dans le réacteur est très courte (de l'ordre de la microseconde) devant les changements (température, composition des milieux) qui interviennent dans le réacteur.

On posera par la suite $q(\mathbf{r}, E, \Omega) = \frac{1}{k_{eff}} Q(\mathbf{r}, E, \Omega)$ la source de fission. En supposant que les milieux sont isotropes, la section de transfert ne dépend que de l'angle entre les directions

incidentes et réfléchies et peut s'écrire ainsi :

$$\Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}) = \frac{1}{2\pi} \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, \boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega}) \quad (1.7)$$

et les sections efficaces totale et de fission ne dépendent plus de la direction :

$$\Sigma_i(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) \doteq \Sigma_i(\mathbf{r}, E), \quad i = \text{total, fission} \quad (1.8)$$

Le k_{eff} (i.e. l'inverse de la valeur propre du système) et le flux (i.e. le vecteur propre associé) sont conjointement recherchés lors de la résolution. Physiquement, le facteur de multiplication effectif k_{eff} est le nombre par lequel il faudrait diviser la source de fission pour rendre le réacteur *critique*, c'est-à-dire que le nombre de neutrons qui disparaissent par fission soit égal au nombre de neutrons qui naissent par fission. Lorsque k_{eff} est strictement inférieur à 1, le réacteur est sous-critique ; lorsque k_{eff} est strictement supérieur à 1, le réacteur est sur-critique.

L'équation de Boltzmann n'est pas soluble analytiquement et on doit faire appel à des méthodes numériques pour la résoudre.

Résolution de l'équation du transport

Le neutronicien bénéficie d'un avantage considérable par rapport à ses autres collègues qui étudient les problèmes de transport car l'équation de Boltzmann est linéaire (en négligeant les interactions neutron-neutron). Cependant, elle ne peut être résolue analytiquement. Diverses méthodes numériques ont été conçues pour sa résolution. Ces méthodes sont implémentées informatiquement au sein d'une architecture organisée que l'on nomme *code de calcul*.

Ce chapitre présentera les méthodes de résolution que nous avons à notre disposition et les codes utilisés pour notre travail. On peut les classer en deux types :

- les méthodes *stochastiques*, aussi appelées Monte Carlo, qui simulent de manière statistique l'histoire de millions de particules à travers leurs probabilités d'interaction.
- les méthodes *déterministes* qui, à travers l'hypothèse du continu, s'intéresse à la densité neutronique en ignorant toute fluctuation. Elles font appel à des discrétisations des différentes variables et utilisent pour la résolution un ensemble de méthodes numériques.

Ce chapitre présente de manière assez générale les différentes méthodes ; plus de détails sont disponibles dans les références suivantes : [7, 9, 16].

2.1 Méthodes stochastiques

Elles ont été développées pendant la deuxième guerre mondiale au sein du projet Manhattan [17, 18]. Les méthodes stochastiques nécessitent la simulation d'un très grand nombre d'événements et avaient été abandonnées auparavant de par le caractère excessif en ressources informatiques qu'exigent ces calculs. Cependant, grâce à la puissance de calcul des premiers ordinateurs qui ont commencé à voir le jour vers le début des années 1940, S. Ulam les reprit et les redéveloppa pour les calculs de propagation de neutrons. Elles sont aussi connues sous le nom de méthodes de *Monte Carlo* (l'oncle d'Ulam avait pour habitude de jouer au casino dans ce quartier de Monaco...).

2.1.1 Formalisme de la méthode de Monte Carlo

La vie d'une particule depuis sa naissance jusqu'à sa mort¹ est gouvernée par des processus de nature aléatoire. Par exemple, la naissance d'un neutron dans un intervalle de temps donné est en soi aléatoire avec une probabilité d'occurrence. Ses caractéristiques physiques : sa position \mathbf{r} , sa direction $\mathbf{\Omega}$ et son énergie E sont des variables aléatoires. En somme, toute l'histoire d'un neutron est un ensemble d'événements aléatoires : son parcours optique jusqu'à la prochaine interaction et le type d'interaction sont déterminés par le tirage aléatoire de valeurs de distributions - des densités de probabilité - qui proviennent des données nucléaires (sections efficaces par exemple).

Initialement, une position, une direction et une énergie d'une particule parmi N particules sources sont tirées pour sa naissance à un état donné. Ensuite, son parcours optique jusqu'au « site » d'interaction est déterminé. A cet endroit, le noyau du matériau présent est sélectionné par le biais de probabilité de présence des divers noyaux (via les concentrations). Puis, le type d'interaction est choisi : si c'est une absorption, elle « meurt » et son histoire s'arrête ; sinon une nouvelle direction et une nouvelle énergie sont déterminées et la particule continue. Par exemple, si c'est un choc élastique, la direction est tirée via les distributions des angles de diffusion possibles et, conséquemment, l'énergie de sortie de la particule est calculée par les lois de la cinématique. Si des particules secondaires sont créées, leurs caractéristiques physiques sont stockées.

Ces tirages continuent pour la première particule jusqu'à ce qu'elle :

- soit absorbée,
- sorte de l'espace des phases qui concerne le problème étudié ; son énergie passe en dessous d'une certaine valeur limite ou alors elle est en dehors de la zone spatiale d'intérêt.

À la mort de la première particule, si des particules secondaires ont été générées, leurs histoires sont simulées jusqu'à ce qu'elles meurent elles aussi. Une nouvelle histoire est alors simulée à partir des $N - 1$ particules restantes. La contribution provenant de chaque particule source est appelée le *score* et la moyenne des scores est l'estimation stochastique d'une grandeur physique d'intérêt, un flux par exemple.

Fig. 2.1 résume le principe de la méthode de Monte Carlo pour une particule [7].

Formellement, la méthode de Monte Carlo résout l'équation du transport exacte écrite sous sa forme *intégrale*, c'est-à-dire l'équation intégrée sur une trajectoire² d'un point \mathbf{r}' à un point

1. L'histoire d'une particule constitue l'ensemble des événements : collisions, fuites ou absorption, subis par une particule depuis sa naissance par fission.

2. Celle-ci s'apparente à une équation de Fredholm de deuxième espèce.

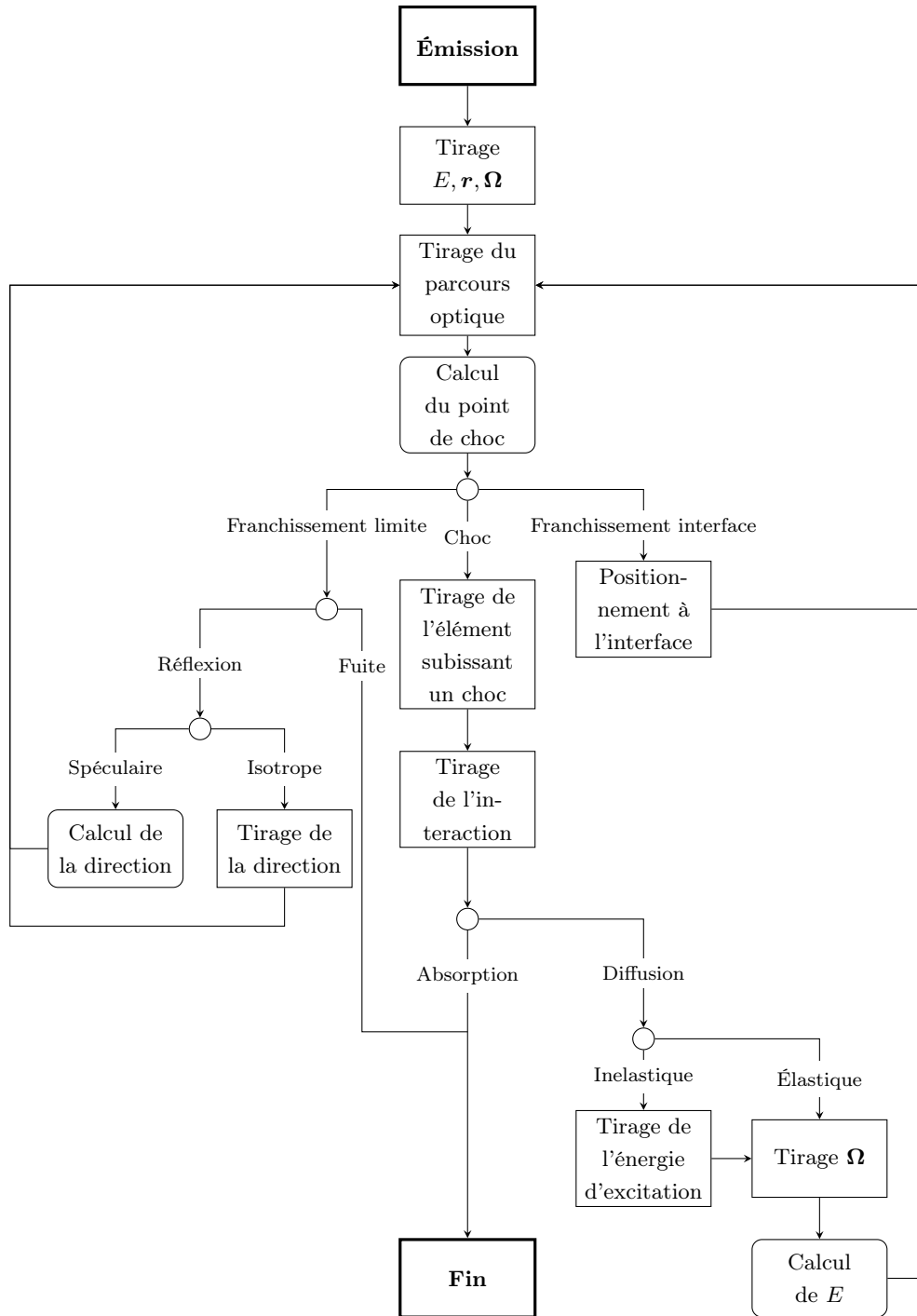


FIG. 2.1 – Simulation de l'histoire d'un neutron par la méthode Monte Carlo.

$\mathbf{r} = \mathbf{r}' - s\boldsymbol{\Omega}$:

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) &= \int_0^\infty ds \exp\left(-\int_0^s ds' \Sigma_t(\mathbf{r} - s'\boldsymbol{\Omega}, E)\right) q(\mathbf{r} - s\boldsymbol{\Omega}, E, \boldsymbol{\Omega}) + \\ &\int_0^\infty ds \exp\left(-\int_0^s ds' \Sigma_t(\mathbf{r} - s'\boldsymbol{\Omega}, E)\right) \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\boldsymbol{\Omega}' \Sigma_s(\mathbf{r} - s\boldsymbol{\Omega}, E' \rightarrow E, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}) \phi(\mathbf{r} - s\boldsymbol{\Omega}, E', \boldsymbol{\Omega}') \end{aligned} \quad (2.1)$$

On définit les noyaux de transport et de collision, \mathcal{T} et \mathcal{C} respectivement :

$$\mathcal{T}(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) = \Sigma_t(\mathbf{r}, E) \exp\left(-\int_0^s ds' \Sigma_t(\mathbf{r}' - s'\boldsymbol{\Omega}, E)\right) \quad (2.2)$$

$$\mathcal{C}(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}) = \sum_j \underbrace{\frac{\Sigma_{tj}(\mathbf{r}, E')}{\Sigma_t(\mathbf{r}, E')}}_{\text{noyau } j} \sum_i \overbrace{\frac{\sigma_{sj}(E')}{\sigma_{ij}(E')}}^{\text{survie}} \underbrace{\frac{\sigma_{ij}(E')}{\sigma_{sj}(E')}}_{\text{interaction } i} \underbrace{\nu_{ij}}_{\text{secondaires}} \underbrace{P_{ij}(E' \rightarrow E, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega})}_{\text{angle et énergie}} \quad (2.3)$$

ainsi que les densités de collision et d'émission, Ψ et χ respectivement :

$$\Psi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) = \Sigma_t(\mathbf{r}, E) \phi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) \quad (2.4)$$

$$\Psi = \mathcal{T}[q + \mathcal{C}\Psi] \quad (2.5)$$

$$\chi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) = q(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) + \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\boldsymbol{\Omega}' \Sigma_s(\mathbf{r}', E' \rightarrow E, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}) \phi(\mathbf{r}', E', \boldsymbol{\Omega}') \quad (2.6)$$

$$\chi = q + \mathcal{C}\mathcal{T}\chi \quad (2.7)$$

Physiquement, l'équation (2.5) revient à faire « collisionner » les particules au point \mathbf{r}' , puis transporter les sources et neutrons « collisionnés » au point \mathbf{r} avec une atténuation exponentielle. D'un autre côté, avec l'équation (2.7), les particules sont d'abord transportées de \mathbf{r}' en \mathbf{r} avec le noyau de transport \mathcal{T} . Puis, toutes les directions $\boldsymbol{\Omega}'$ sont considérées en ce point et les collisions sont effectuées avec le noyau de collision \mathcal{C} .

Dans un problème de criticité, l'équation à résoudre est (en posant $P = (\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega})$) :

$$\chi(P) = \int dP' \mathcal{L}\chi(P') \quad (2.8)$$

$$= \int dP' \left[\underbrace{\mathcal{L}_s(P' \rightarrow P)}_{\text{diffusion}} + \underbrace{\mathcal{L}_f(P' \rightarrow P)}_{\text{fission}} \right] \chi(P') \quad (2.9)$$

où

$$\mathcal{L}_s(P' \rightarrow P) = \mathcal{C}_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}) \mathcal{T}(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) \quad (2.10)$$

$$= \frac{\Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega})}{\Sigma_t(\mathbf{r}, E)} \mathcal{T}(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) \quad (2.11)$$

$$\mathcal{L}_f(P' \rightarrow P) = \mathcal{C}_f(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}) \mathcal{T}(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) \quad (2.12)$$

$$= \frac{f(E)}{4\pi} \nu_f \frac{\Sigma_f(\mathbf{r}, E')}{\Sigma_t(\mathbf{r}, E')} \mathcal{T}(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) \quad (2.13)$$

2.1.2 TRIPOLI4

La méthode de Monte Carlo est notamment implémentée dans un code développé par le CEA, TRIPOLI4 [4]. Ce dernier utilise entre autres les bibliothèques de données nucléaires issue de l'évaluation européenne *JEFF 3.1.1 (Joint Evaluated Fission and Fusion)* [19] pour résoudre l'équation du transport. TRIPOLI4 permet le transport couplé de particules telles que le neutron, le photon, l'électron et le positron.

La résolution se fait par la simulation d'un certain nombre de particules qui sont réparties en paquets appelés *batches*. Trois estimateurs du k_{eff} y sont disponibles pour les calculs de criticité :

- KSTEP qui correspond au rapport du poids des neutrons de fission du batch n qui serviront de source au batch $n + 1$ et celui des neutrons sources du batch n ,
- KCOLL qui à chaque collision avec un noyau i encaisse $\frac{\nu\sigma_f^i}{\sigma_t}$ neutrons de fission,
- KTRACK qui sur une trajectoire de longueur l compte les neutrons produits par fission, $\nu\Sigma_f l$.

Ce code nous servira de calcul étalon par rapport aux calculs déterministes que nous effectuerons car la résolution est considérée comme exacte contrairement à ces derniers qui font intervenir des approximations qui seront détaillées dans la prochaine section. Dans les codes de Monte Carlo, en effet, les sections sont ponctuelles en énergie et les lois de choc sont traitées exactement.

2.2 Méthodes déterministes

Elles sont basées sur la résolution numérique de l'équation de Boltzmann. La résolution déterministe de cette dernière nécessite une discrétisation des variables décrivant l'espace des phases où évoluent les neutrons : la position, la direction de propagation (l'angle), l'énergie et le temps. Dans le cadre des études qui nous préoccupent, nous nous restreindrons à l'équation de Boltzmann sous sa forme stationnaire (*cf* l'équation (1.6)). Dans la suite, nous décrirons succinctement chaque étape dans la discrétisation de l'espace des phases de cette équation.

2.2.1 Discrétisation énergétique et autoprotection

Une des principales différences entre les méthodes de Monte Carlo et les méthodes déterministes réside dans le traitement de la variable énergétique. En Monte Carlo, celle-ci est continue. Pour la résolution déterministe, l'équation du transport est discrétisée en G équations mono-cinétiques couplées en intégrant (1.6) sur le sous-intervalle $[E_{g-1}, E_g]$ de $[0, 20 \text{ MeV}]$ ³. Chaque sous-intervalle est appelé *groupe* et la discrétisation énergétique donne lieu au formalisme *mul-*

3. Pour les calculs de réacteurs, la borne maximale pour l'énergie des neutrons est supposée $\sim 20 \text{ MeV}$.

tigroupe. L'équation du transport stationnaire multigroupe s'écrit :

$$\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \phi^g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) + \Sigma_t^g(\mathbf{r}) \phi^g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \frac{1}{2\pi} \sum_{g'=1}^G \int_{4\pi} d^2\boldsymbol{\Omega}' \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', \boldsymbol{\Omega}) \phi^g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}') + q^g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) \quad (2.14)$$

La solution de cette équation est le flux multigroupe :

$$\phi^g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \int_{E_{g+1}}^{E_g} \phi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) dE \quad (2.15)$$

Les sections efficaces multigroupes Σ^g sont calculées dans un code de « processing » des données nucléaires comme NJOY [20]. Ces sections multigroupes sont obtenues en pondérant les sections ponctuelles par le flux angulaire :

$$\sigma^g(\mathbf{r}) = \frac{\int_{E_{g+1}}^{E_g} \mathcal{F}(E) \sigma(E) \phi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) dE}{\int_{E_{g+1}}^{E_g} \phi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) dE} \quad (2.16)$$

La fonction $\mathcal{F}(E)$ est une fonction de pondération⁴. Pour calculer la moyenne d'une section, comme la section totale multigroupe par exemple, $\mathcal{F}(E)$ vaut 1.

A priori, le flux angulaire n'est pas connu pour le calcul des sections multigroupes (c'est la solution que l'on recherche pour l'équation de Boltzmann). De plus, on ne souhaite pas que les sections multigroupes dépendent de la direction. La mise en groupe est donc effectuée par un flux scalaire de pondération proche du problème étudié, un flux de type REP par exemple avec un spectre de Cranberg à haute énergie, un spectre en $1/E$ en ralentissement et un spectre maxwellien dans le domaine thermique. La Fig. 2.2 montre un exemple de la mise en groupe de la section ponctuelle de capture de l'²³⁸U condensée sur le maillage SHEM [5] à 281 groupes.

Cependant, l'utilisation de ce flux théorique pour la mise en groupe des sections efficaces ponctuelles n'est valable que dans les cas où ces dernières varient régulièrement en énergie, ce qui n'est pas le cas des noyaux résonnants. Dans le domaine des résonances, la variation rapide de la section efficace en énergie entraîne l'effondrement du flux de manière presque inversement proportionnelle autour du pic de la résonance. Ce phénomène est connu comme l'*autoprotection*. Le taux de réaction n'augmente pas de manière aussi significative que la variation de la section efficace autour de la résonance pourrait le laisser penser.

L'autoprotection existe sous deux formes : l'autoprotection énergétique qui vient d'être décrite et l'autoprotection spatiale. Dans un réacteur à neutrons thermiques, les noyaux légers apportent une contribution majeure au ralentissement mais ne capturent pas ; les noyaux lourds quant à eux contribuent à l'absorption mais très peu au ralentissement. L'autoprotection spatiale est la conséquence de la séparation géographique entre noyaux absorbants et noyaux modérateurs. Les neutrons sont principalement ralentis dans le modérateur. Aux énergies $\lesssim 10keV$, ce dernier constitue la principale source de neutrons, externe au combustible. L'atténuation spatiale du flux est alors très forte de la périphérie vers le centre du combustible aux énergies des premières résonances des noyaux lourds.

4. *cf feed function* : dans le descriptif du module GROUPE dans [20].

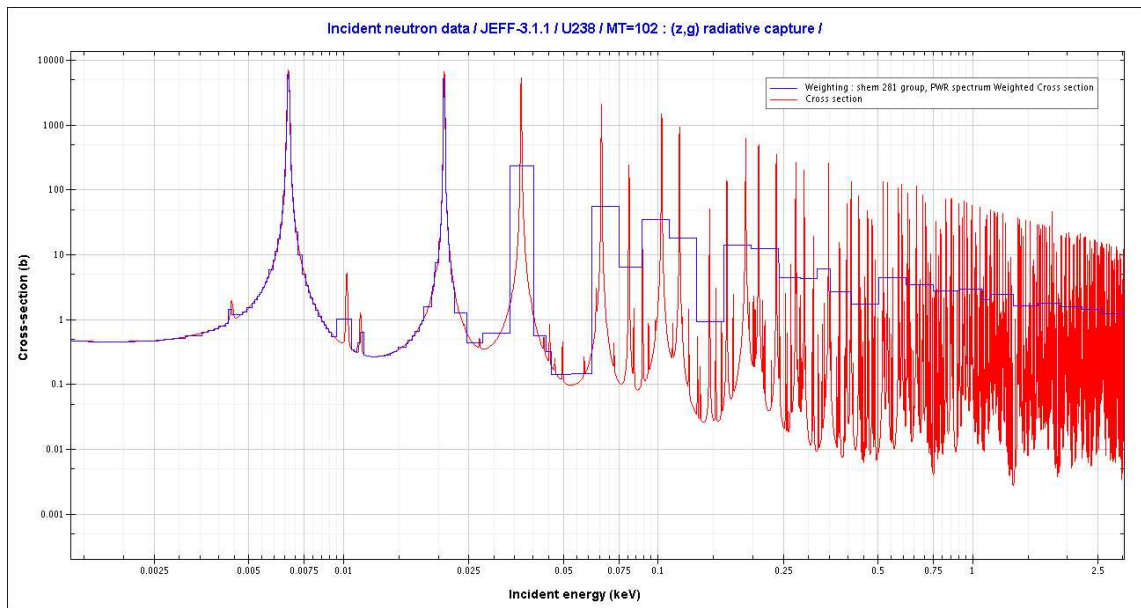


FIG. 2.2 – Section de capture de ^{238}U condensée sur le maillage SHEM à 281 groupes.

En pratique, divers maillages énergétiques prédéterminés, optimisés selon le type de réacteurs et les problèmes à traiter ont été mis en place. En neutronique, deux niveaux de calcul sont distingués : des calculs de cellules ou d'assemblages, et des calculs de cœurs⁵.

Dans le cadre des calculs de réseau, pour l'autoprotection des résonances, des maillages avec des centaines, voire des milliers, de groupes sont utilisés.

Pour le calcul des réacteurs à eau légère (REL), le maillage SHEM [5] à 281 groupes a été développé dans le but de permettre un calcul plus précis de l'absorption résonnante. C'est un maillage très fin jusqu'à 22,5 eV qui décrit fidèlement les résonances des noyaux neutroniquement significatif. Ceci affranchit l'utilisateur d'un calcul d'autoprotection en dessous des 22,5 eV. SHEM améliore aussi le calcul du ralentissement dans le domaine rapide par la prise en compte des résonances des matériaux caloporteurs et de structure et un maillage fin qui décrit les réactions à seuil de ^{238}U .

Pour les réacteurs à neutrons rapides, un maillage énergétique à 1968 groupes a été développé pour le code ECCO [21]. La largeur en léthargie est de 1/120 qui correspond au gain moyen en léthargie pour un neutron subissant un choc sur un noyau d'uranium 238. Ce découpage énergétique permet de calculer la source de ralentissement de manière précise.

Pour les calculs de cœur, un maillage plus relâché est utilisé pour des raisons de temps de calcul et de taille mémoire. Des études ont été menées par P. Mosca sur la possibilité d'optimiser les maillages énergétiques afin d'obtenir le meilleur rapport précision / coût du calcul [22].

5. cf plus loin la notion de schéma de calcul.

2.2.2 Discrétisations angulaire et spatiale

La discrétisation angulaire de l'équation du transport multigroupe se fera selon la forme de celle-ci. Trois formes sont généralement distinguées :

- l'équation *intégré-différentielle*, différentielle en espace et intégrale selon les transferts, dont l'inconnue est le flux angulaire multigroupe. C'est l'équation (2.14).
- l'équation *du second ordre en flux pair*. L'équation (2.14) est décomposée en une partie paire et impaire selon l'angle pour obtenir des équations de second ordre en espace semblables à une équation de diffusion, l'inconnue étant la partie paire du flux angulaire multigroupe.
- l'équation *intégrale* où l'équation (2.14) est intégrée sur tous les angles et l'inconnue est le flux scalaire multigroupe. L'anisotropie du choc est traitée de façon approximative dans cette méthode.

La discrétisation de la variable angulaire se fait généralement par deux méthodes : la méthode des ordonnées discrètes S_n pour la forme intégré-différentielle et une méthode de décomposition sur la base des harmoniques sphériques P_n ou SP_n pour la forme de second ordre en flux pair. Dans ce document, nous expliciterons la méthode S_n et les discrétisations spatiales associées. La méthode P_n sera brièvement décrite ainsi que la forme intégrale.

2.2.2.1 La méthode S_n

Elle a été utilisée la première fois dans le domaine des transferts radiatifs et a été mise au point formellement par S. Chandrasekar [23], puis reprise par B. Carlson [24] dans le cadre de la physique des réacteurs pour le calcul de transport des particules. C'est une méthode collocative⁶ où l'équation du transport multigroupe est discrétisée selon un ensemble de N directions discrètes $\mathbf{\Omega}_n$ qui constituent des nœuds sur la sphère des directions ou sphère unité (*cf* l'équation (2.18)). La résolution de cette équation discrétisée angulairement donne le flux angulaire dans chaque direction considérée. À chaque direction $\mathbf{\Omega}_n$ est associé un poids ω_n qui est le rapport de la surface de la portion de sphère unité associée à $\mathbf{\Omega}_n$ à la surface totale de la sphère. De ce fait, les intégrales sur la variable angulaire sont approchées par une formule de quadrature :

$$\int_{4\pi} d\mathbf{\Omega} f(\mathbf{\Omega}) \doteq \sum_{n=1}^N \omega_n f(\mathbf{\Omega}_n) \quad (2.17)$$

Chaque ensemble de couples $\{\mathbf{\Omega}_n, \omega_n\}$ constitue une quadrature angulaire. L'équation du transport sous sa forme S_n s'écrit de la manière suivante :

$$\mathbf{\Omega}_n \cdot \nabla \phi_n^g(\mathbf{r}) + \Sigma_t^g(\mathbf{r}) \phi_n^g(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi} \sum_{g'=1}^G \sum_{n'=1}^N \omega_{n'} \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}_{n'} \cdot \mathbf{\Omega}_n) \phi_{n'}^{g'}(\mathbf{r}) + q_n^g(\mathbf{r}) \quad (2.18)$$

où $\phi_n^g(\mathbf{r}) = \phi^g(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}_n)$ et $q_n^g(\mathbf{r}) = q^g(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}_n)$.

⁶. Une classe de méthode numérique pour résoudre des équations différentielles et intégrales en considérant un nombre fini de points dans le domaine d'intérêt

Le nombre de directions de la discrétisation S_n et leur répartition sur la sphère unité dépendent du type de quadrature : « level-symétric » (LS) - symétrique par niveau ou produit (*cf* Fig. 5.5 au Chapitre 5) sont les plus utilisées même si d'autres quadratures ont été conçues [25, 26]. Cette méthode de discrétisation présente plusieurs avantages : relativement simple à mettre en œuvre, traitement exact des conditions limites (vide ou imposé, réflexion ou périodique) et son extension à des géométries en trois dimensions est aisée.

Le défaut principal de cette méthode est l'*effet de raie* qui intervient dans les problèmes de propagation où la source est localisée. Dans ce cas, si des quadratures trop faibles sont utilisées, le nombre de directions est insuffisante et certaines régions spatiales ne sont pas « éclairées » par le flux de neutrons (car ces derniers se propagent selon les ordonnées discrètes) [27]. Dans les problèmes de physique des réacteurs, l'effet de raie n'intervient pas car les neutrons sont distribués dans tout l'espace.

2.2.2.2 Discrétisations spatiales associées à la méthode S_n

Maintenant que l'équation du transport a été discrétisée énergétiquement et angulairement (sous la forme S_n), nous nous intéresserons dans cette section aux différentes méthodes pour la résoudre spatialement. Parmi les diverses discrétisations possibles, nous décrirons les 3 méthodes suivantes :

- différences finies
- méthode des caractéristiques
- éléments finis discontinus

Méthode aux différences finies Cette méthode consiste à intégrer l'équation discrétisée sur une géométrie structurée avec des mailles homogènes : 1D (plan, cylindrique, sphérique) , 2D (XY, R θ , RZ) , 3D (XYZ, Hexagonal-Z, R $\theta\varphi$). En posant $\mathbf{\Omega}_n = (\mu_n, \eta_n, \xi_n)$, l'équation de bilan s'écrit pour une maille à deux dimensions cartésiennes :

$$\frac{|\mu_n|}{\Delta x} (\phi_n^{g,x,out} - \phi_n^{g,x,in}) - \frac{|\eta_n|}{\Delta y} (\phi_n^{g,y,out} - \phi_n^{g,y,in}) + \Sigma_t \phi_n^g = q_n \quad (2.19)$$

où $\phi_n^{g,i,out}(\phi_n^{g,i,in})$ est le flux sortant (entrant) perpendiculairement à la surface orientée par le vecteur \mathbf{e}_i , $i = x, y$, ϕ_n^g est le flux moyen en n et q_n^g la source de diffusion et d'émission en n . À cette équation, il faut rajouter les équations de propagation à l'intérieur de la maille :

$$\phi_n^g = \alpha \phi_n^{g,i,out} + (1 - \alpha) \phi_n^{g,i,in}, \quad 0 < \alpha \leq 1. \quad (2.20)$$

Celle-ci se nomme « schéma diamant pondéré » et revient à traiter la variable sous forme de volumes finis. Généralement, $\alpha = 1/2$ ou alors $\alpha = 1$ (schéma step ou volumes finis « upwind »). La résolution se fait en balayant le maillage spatial sur les directions de la quadrature angulaire choisie et commence par un endroit où les flux entrants sont connus grâce à des conditions

limites. Les flux moyens sont déterminés et ensuite, les flux sortants. Ces derniers constituent les flux entrants pour les mailles suivantes dans la direction de propagation.

Cette méthode relativement simple est très répandue car elle permet de faire des gros calculs en 2D rapidement. Son inconvénient principal réside sur le type de géométrie qu'elle peut traiter - une géométrie structurée.

Méthode des Caractéristiques (MOC) Cette méthode a été mise au point pour des géométries très simples dans les années 50 par Vladimirov [28] et étendue plus tard par Askew [29]. La méthode des caractéristiques consiste à résoudre l'équation discrétisée angulairement sur un domaine \mathcal{D} de frontière $\partial\mathcal{D}$:

$$\begin{aligned} (\mathbf{\Omega}_n \cdot \nabla + \Sigma_t) \phi_n^g(\mathbf{r}) &= q_n^g(\mathbf{r}) \\ \phi_n^g(\mathbf{r}) &= \phi_n^g(\mathbf{r}_{in}) \end{aligned} \quad (2.21)$$

où $\phi_n^g(\mathbf{r}_{in})$ est le flux entrant sur le domaine \mathcal{D} , n étant une direction fixée dans la quadrature.

Des lignes d'intégration ou *caractéristiques* sont générées par une procédure dite de tracking. L'intersection d'une droite avec le domaine \mathcal{D} constitue une *trajectoire*, τ , définie par son orientation $\mathbf{\Omega}$ et son point de départ \mathbf{p} . Les caractéristiques peuvent être *cycliques* ou *non-cycliques*. Un tracking cyclique définit un ensemble de caractéristiques tel qu'en partant d'un point sur la frontière du domaine, la trajectoire est refermée en respectant les conditions limites. Un tracking non-cyclique est composé d'une seule trajectoire.

Le formalisme du tracking permet de transformer l'intégrale d'une quantité $f(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}_n)$ sur une région i de volume V_i par un changement de variables (cf Fig. 2.3⁷) :

$$F_{n,i} = \int_{V_i} d^3r f(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}_n) = \int_{\cup \tau(\mathbf{\Omega}_n)} d^2p \sum_{k=1}^K \delta_{i,N_k} \int_{s_{k-1}}^{s_k} ds f(s, \tau) \quad (2.22)$$

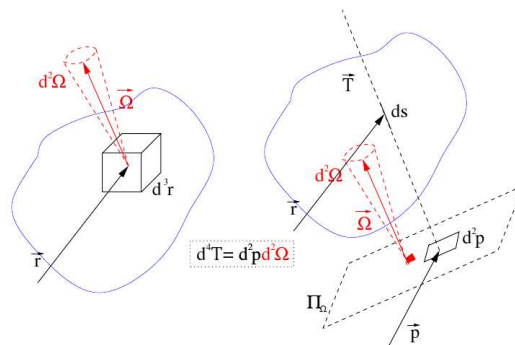


FIG. 2.3 – Formalisme d'intégration en MOC.

7. Cette figure provient de [30])

L'équation du transport est intégrée selon les trajectoires. En notant s la coordonnée locale le long de la caractéristique, l'équation se simplifie avec ($\boldsymbol{\Omega}_n \cdot \nabla \rightarrow \frac{d}{ds}$) :

$$\frac{d}{ds} \phi_n^g(\mathbf{r}) + \Sigma_i \phi_n^g(\mathbf{r}) = q_n^g(\mathbf{r}) \quad (2.23)$$

\mathbf{r} appartenant à la caractéristique. Le domaine est discrétisée en N régions spatiales homogènes.

Sur une trajectoire qui intersecte une région homogène $N_k = i$ sur une longueur $l_{k,\tau}$, l'intégration de l'équation du transport résulte en :

- une équation de propagation (avec l'hypothèse de source constante) :

$$\phi_{n,k}^{g,out}(\boldsymbol{\tau}) = \phi_{n,k}^{g,in}(\boldsymbol{\tau}) e^{-\Sigma_{t_i} l_{k,\tau}} + \frac{1 - e^{-\Sigma_{t_i} l_{k,\tau}}}{\Sigma_{t_i}} q_{n,i}^g \quad (2.24)$$

- une équation de bilan :

$$\phi_{n,k}^g(\boldsymbol{\tau}) = \frac{q_{n,i}^g}{\Sigma_{t_i}} + \frac{\phi_{n,k}^{g,in}(\boldsymbol{\tau}) - \phi_{n,k}^{g,out}(\boldsymbol{\tau})}{\Sigma_{t_i} l_{k,\tau}} \quad (2.25)$$

$\phi_k^g(\boldsymbol{\tau})$ est le flux moyen le long de $\boldsymbol{\tau}$ sur $l_{k,\tau}$.

Le flux angulaire moyen $\phi_{n,i}^g$ est déterminé en considérant plusieurs trajectoires $\boldsymbol{\tau}$ comme suit :

$$\phi_i^g = \frac{1}{V_i} \int_{V_i} d^3r \phi^g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}_n) = \frac{1}{V_i} \int_{\cup \boldsymbol{\tau}(\boldsymbol{\Omega}_n)} d^2p \sum_{k=1}^K \delta_{i,N_k} l_{k,\tau} \phi_k^g(\boldsymbol{\tau}) \quad (2.26)$$

Cette intégrale est calculée numériquement par le biais d'une quadrature obtenue en considérant plusieurs trajectoires. La densité de trajectoires est un paramètre ajustable dans la définition des paramètres de tracking. Les autres paramètres importants étant la discrétisation angulaire : N_μ et N_φ pour les angles polaires et azimutaux respectivement dans le cas d'une quadrature produit de la sphère unité.

Contrairement aux différences finies, le MOC permet de traiter des géométries quelconques. L'inconvénient principal de la méthode réside surtout dans le tracking des différentes trajectoires. [30] explique de manière plus exhaustive la méthode et les accélérations associées.

Méthode aux éléments finis discontinus Cette méthode est appliquée à l'équation intégrodifférentielle discrétisée dans sa formulation faible. Tout d'abord, la géométrie spatiale est raffinée en un certain nombre de mailles. Cette méthode consiste ensuite à se donner un ensemble de fonctions de base et à décomposer le flux dans chaque maille sur celles-ci en supposant que la solution recherchée peut être approchée par ces fonctions. Ces fonctions sont des polynômes d'ordre p . Dans une maille i en deux dimensions cartésiennes avec L nœuds, le flux angulaire multigroupe peut s'écrire :

$$\phi_n^g(x, y) = \sum_{j=0}^p \sum_{k=0}^p a_{jk}^i x^j y^k \quad (2.27)$$

2.2.2.3 La méthode P_n

C'est une autre méthode pour discrétiser angulairement l'équation du transport multigroupe. Elle peut être considérée comme une méthode de Galerkin vis-à-vis de la variable angulaire et consiste à décomposer le flux angulaire sur une base de fonctions orthogonales : les harmoniques sphériques. Cette décomposition peut s'écrire comme suit :

$$\phi^g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \sum_{l=0}^L \sum_{m=-l}^{+l} \Phi_{lm}^g(\mathbf{r}) R_{lm}(\boldsymbol{\Omega}) \quad (2.28)$$

où

- $\Phi_{lm}^g(\mathbf{r}) = \int_{4\pi} \phi^g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) R_{lm}(\boldsymbol{\Omega}) d^2\boldsymbol{\Omega}$ désigne les *moments angulaires* du flux.
- $R_{lm}(\boldsymbol{\Omega})$ sont les harmoniques sphériques réelles.

L'ordre de la méthode P_n est imposé par celui des harmoniques sphériques. Contrairement à la méthode S_n , il n'y pas d'effet de raie. Cependant, la représentation de certaines conditions limites (de vide) est approximative de par la nature même de la méthode (les discontinuités du flux ne sont pas bien modélisées avec les harmoniques sphériques). Par ailleurs, le temps de convergence peut être très long en augmentant l'ordre.

Cette méthode est surtout utilisée pour discrétiser angulairement l'équation du transport sous sa forme de flux pair [16]. Celle-ci est écrite dans sa formulation faible et les discrétisations spatiales associées à la méthode P_n sont de type éléments finis spectraux.

Une méthode de transport simplifiée qui découle directement de celle-ci a été mise au point de manière heuristique et se nomme SP_n (Simplified P_n). Elle consiste à étendre la méthode P_n de la géométrie monodimensionnelle à une géométrie multidimensionnelle en remplaçant le terme de convection par un opérateur de diffusion [31]. Le SP_n a l'avantage d'être plus précis que la diffusion tout en étant moins coûteux qu'une méthode de transport en temps de calcul. Néanmoins, elle ne converge pas vers la solution de cette dernière en augmentant l'ordre.

2.2.2.4 L'équation intégrale et la méthode des probabilités de collision P_{ij}

L'équation intégrale est obtenue en intégrant l'équation du transport intégral-différentielle en angle et en espace sur des caractéristiques comme pour le MOC. La méthode des probabilités de collision est formellement équivalente au MOC. En injectant Eq. (2.25) dans Eq. (2.26) et en intégrant sur l'angle, on peut écrire, en supposant la source isotrope et pour des conditions de vide aux frontières :

$$\phi_i^g = \frac{1}{V_i} \int d^2\boldsymbol{\Omega} \int_{V_i} d^3r \phi^g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \sum_j P_{ij}^g q_j^g \quad (2.29)$$

où $P_{ij}^g \Sigma_{t,j}^g$ est la probabilité qu'un neutron qui est émis de manière uniforme et isotrope dans une maille i (de volume V_i) subit sa première collision dans la maille j . Le détail des équations est explicité dans [15, 16]. Les P_{ij} étant des matrices, le stockage et la résolution est coûteux quand le nombre de régions augmente.

D'autre part, ce formalisme s'étend au cas où la source n'est plus supposé isotrope [32]. Cependant, l'utilisation des probabilités de collision « orientées » est peu pratique car le coût est encore alourdi avec le stockage des $P_{ij}^{g,(l',m')\rightarrow(l,m)}$. Dans le code ECCO, il est néanmoins possible d'utiliser un formalisme de $P1$ « approché » [21, 33].

Pour réduire le coût de cette méthode, on fait l'approximation des courants d'interface. Par un procédé de décomposition de domaine, l'assemblage est traité comme des cellules qui ne se recouvrent pas et les P_{ij} sont calculées pour chaque cellule. Parmi les différentes approximations des courants aux interfaces, une classe importante est le « P_{ij} multicellule ». Les courants sont supposés uniformes et isotropes ($UP0$) ou linéairement anisotrope ($UP1$).

2.2.3 Codes déterministes et schémas de calcul

La résolution de l'équation de Boltzmann se fait par les méthodes qui ont été décrites précédemment. Elle est conduite selon trois niveaux d'itérations⁸ [16, 30] :

- les itérations *externes* où les sources de fission sont mises à jour afin d'assurer la convergence des fuites ou du k_{eff} .
- les itérations *multigroupes* pour le calcul de diffusion des neutrons de différents groupes dans le groupe considéré, $g' \rightarrow g$ par le terme de la source de diffusion.
- les itérations *internes* qui concerne la résolution et la convergence spatiale⁹.

Nous présentons maintenant les deux codes déterministes qui ont été utilisés pour les travaux réalisés : APOLLO2 et SNATCH ainsi que la notion de *schéma de calcul*.

2.2.3.1 APOLLO2

APOLLO2 est un code modulaire qui résout l'équation du transport de Boltzmann multi-groupe. La modularité permet à l'utilisateur d'enchaîner les calculs et de maîtriser les paramètres d'entrées d'un module à l'autre. C'est un code de calcul de réseau pour les géométries à une ou deux dimensions, en représentation cartésienne, à symétrie cylindrique (RZ) ou en géométrie générale pour le MOC pour modéliser les réseaux à pas carré ou hexagonal [1, 34].

APOLLO2 permet différents formalismes pour l'autoprotection et plusieurs solveurs de flux y sont implémentés : probabilités de collision P_{ij} exact et multicellule ou transport S_n en différences finies, méthodes nodales et MOC [3].

La version du code qui sera utilisée dans ce travail est APOLLO2.8-2. Les données d'entrées d'APOLLO2 sont les sections efficaces microscopiques multigroupes qui proviennent de la librairie CEA2005V4.1 basée sur l'évaluation européenne *JEFF3.1.1* et le maillage énergétique à 281 groupes SHEM.

8. selon le type de solveur utilisé.

9. Cette étape n'intervient pas dans la méthode des probabilités de collision.

2.2.3.2 SNATCH

SNATCH est un code qui se présente sous la forme de bibliothèques *java* au sein de la plateforme PARIS [35] développée dans le cadre du système de codes ERANOS [36,37].

SNATCH est un solveur S_n qui traite les géométries à une, deux ou trois dimensions en cartésien ou hexagonal avec des schémas spatiaux en différences finies ou avec des éléments finis discontinus (*Discontinuous Galerkin*). Les données d'entrée du solveur sont les bibliothèques de sections efficaces macroscopiques sous un format *XML* qui ont été préalablement conditionnées - autoprotection, condensation énergétique, équivalence - par un code de calcul de réseau tel que APOLLO2 ou ECCO.

2.2.3.3 Schéma de calcul

Les codes de calcul déterministes ne sont jamais utilisés seuls ; ils sont associés à des bibliothèques de données nucléaires et des options de calcul selon le type d'application que l'utilisateur souhaite réaliser. L'ensemble code-options constitue un schéma de calcul.

Un schéma de calcul est un ensemble d'étapes et d'options de calcul qu'il faut mettre en œuvre pour mener à bien un calcul de neutronique sur un cœur de réacteur. L'idée phare d'un schéma de calcul est de traiter le cœur de manière relativement « grossière » en simplifiant les équations et en utilisant des discrétisations énergétiques à peu de groupes ($\lesssim 30$) et spatiales appropriées (assemblage, quart d'assemblage, ... etc.). Les caractéristiques « grossières » utilisées pour le calcul de cœur sont obtenues à partir de calculs précis (cellules, assemblages ... etc) afin de prendre en compte les phénomènes physiques fins mis en jeu. Ceci est possible car il existe un découplage relatif entre les phénomènes intervenant à l'échelle du cœur et ceux qui surviennent au niveau de l'assemblage voire de la cellule. En effet, la durée de vie de quelques millisecondes des neutrons et leurs déplacements sur des « petites » distances expliquent leur influence locale.

Le but du schéma de calcul est de définir un calcul « robuste » qui équilibre la finesse de la modélisation pour la précision des résultats et le temps de calcul pour des applications spécifiques : REL2005 [2] pour le calcul des réacteurs à eau légère, HORUS3D/N [38] pour le calcul du réacteur Jules Horowitz ou NARVAL pour la propulsion navale. Un schéma de calcul se traduit par : une mise en groupe des sections ponctuelles de la base de données nucléaires et l'autoprotection de ces sections sur un calcul d'assemblage incluant des étapes de condensation, d'homogénéisation, et d'équivalence si nécessaire pour générer une bibliothèque de sections efficaces qui servira d'entrée à un code de calcul de cœur 2D ou 3D.

Nous détaillons dans Fig. 2.4 le schéma de calcul de référence SHEM-MOC et sa version optimisée et industrielle REL2005.

Le schéma de calcul de référence déterministe SHEM-MOC fait intervenir des options de

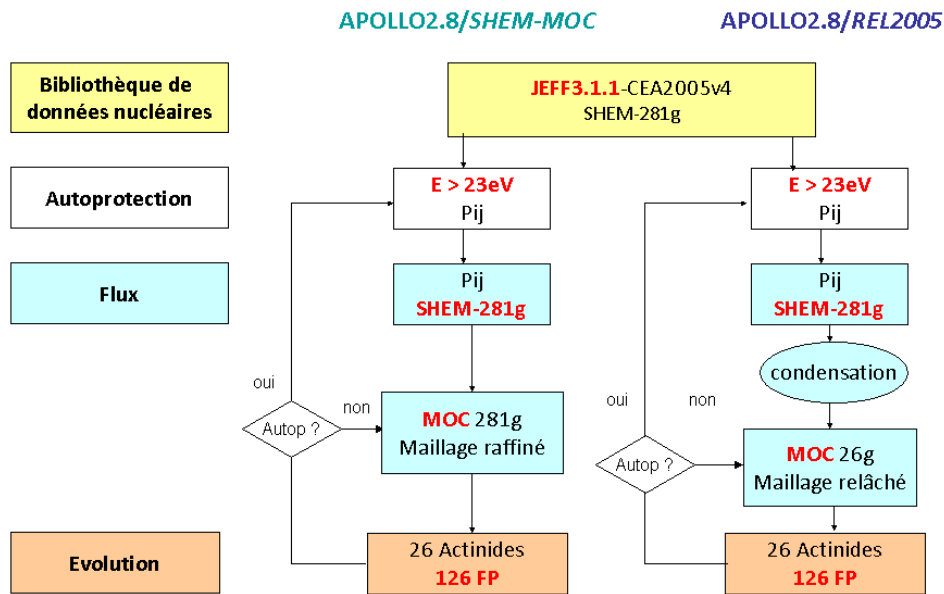


FIG. 2.4 – Les schémas SHERM-MOC et REL2005

calcul très fines. Dans ce schéma, on ne fait pas de condensation énergétique ; le maillage énergétique à 281 groupes SHERM est utilisé tout au long du processus de calcul de cœur en 2D. De ce fait, on élimine les biais supplémentaires dans le calcul dû à la condensation et à l'équivalence¹⁰. Par ailleurs, on utilise un maillage spatial raffiné.

En REL2005 (schéma optimisé qui sera utilisé par EDF à partir de 2012), le calcul de flux se fait à 26 groupes. Le maillage spatial est plus simple au niveau du découpage que pour SHERM-MOC (cf maillage moulin à vent Annexe A) et les paramètres de tracking sont légèrement relâchés. Ce schéma est de type double niveau. Le calcul de flux est d'abord fait avec un solveur P_{ij} approché comme pour l'autoprotection (flux qui sera utilisé pour la condensation et l'équivalence). Puis, les sections efficaces autoprotégées-condensées-équivalentes sont utilisées pour un calcul de deuxième niveau avec un solveur MOC plus performant pour rattraper les erreurs sur les échanges neutroniques inter-cellules du calcul de premier niveau.

En effet dans un schéma de double niveau, il est possible de regrouper dans le calcul de premier niveau des cellules qui ont le même environnement et la même composition car l'autoprotection est essentiellement sensible à ces paramètres, ces regroupements définissant autant de jeux de sections efficaces qui seront distribués sur les différents crayons après condensation à 26 groupes.

10. tel qu'il existe dans APOLLO2 ; il est absent dans le code ECCO.

2.3 Résumé

La Fig. 2.5 résume les différentes méthodes pour résoudre l'équation de Boltzmann stationnaire. Les différentes discrétisations qui sont mises en œuvre dans le formalisme déterministe y sont incluses.

Par ailleurs, toutes ces méthodes doivent modéliser un phénomène physique très important pour la simulation numérique en physique des réacteurs : la loi de choc que nous décrirons dans la prochaine partie.

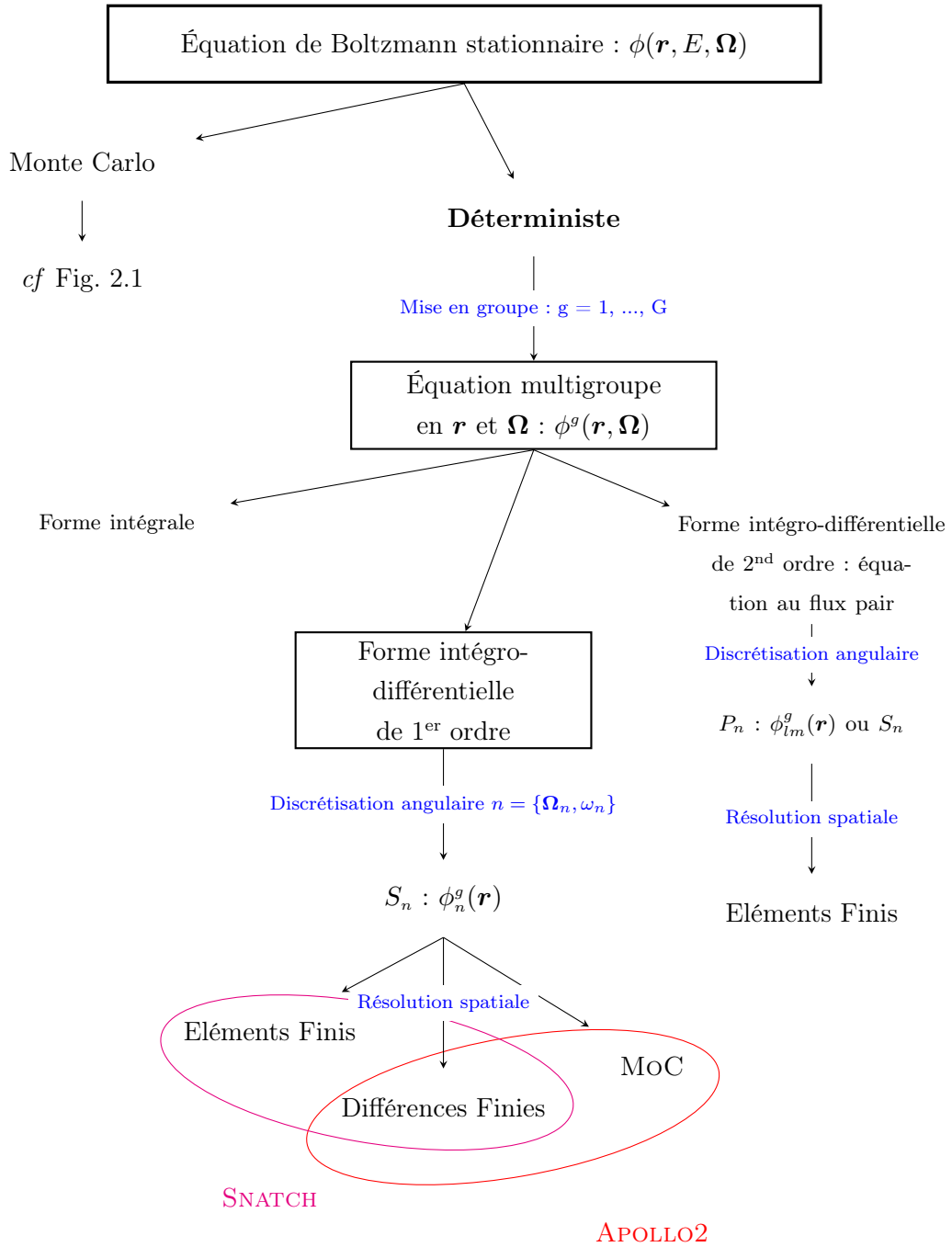


FIG. 2.5 – Méthodes de résolution

Deuxième partie

Anisotropie du choc

Présentation de la notion d'anisotropie dans les calculs de réacteurs

Dans le premier chapitre, nous avons décrit les différents types de réactions que peut subir le neutron qui traverse la matière. Ces interactions sont complexes et dépendent de l'énergie cinétique du neutron, du noyau, de la structure de la matière (liaisons moléculaires, cristallines) que constitue le noyau cible. Les codes de calcul reproduisent au mieux ces différents phénomènes à travers les données d'entrée telles que les sections efficaces ou les lois de choc. Des modèles spécifiques ont été mis au point pour la description de ces interactions et font intervenir la température et la structure du milieu (modèle du gaz libre pour la thermalisation, quelques thermaliseurs possédant un modèle de $S(\alpha, \beta)$ traitant les liaisons moléculaires [39]).

Dans le cas d'une réaction de diffusion, les différentes grandeurs physiques telles que les énergies avant et après choc, E' et E respectivement, le cosinus de l'angle de diffusion dans le centre de masse (CM) et dans le référentiel du laboratoire (LAB), μ_{CM} et μ_{LAB} respectivement, sont liées. Ils peuvent s'exprimer par des lois cinématiques dans certains cas (choc élastique ou inélastique discret) et sont données par des corrélations autrement (choc inélastique continu par exemple).

Dans ce chapitre, les différents types de choc seront décrits brièvement. Nous présenterons ensuite la notion d'anisotropie et ses différentes origines dans le cadre de la neutronique.

3.1 Description des chocs et distribution angulaire

3.1.1 Choc élastique

Dans un choc élastique, il n'y a pas de changement de l'énergie interne du noyau. Comme le noyau reste dans son état fondamental (il n'y a pas de changement d'énergie), on doit seulement se préoccuper de la distribution angulaire de la section efficace de transfert. La probabilité d'observer un neutron d'énergie E dans un intervalle $d\mu_{CM}$ autour de μ_{CM} (le cosinus de l'angle de déviation dans le système du centre de masse - CM) est donnée par $f(\mu_{CM}, E)$:

$$f(\mu_{CM}, E) = \frac{1}{2} [1 + 3g_1(E)P_1(\mu_{CM}) + 5g_2(E)P_2(\mu_{CM}) + \dots] \quad (3.1)$$

où $P_1(\mu_{CM})$, $P_2(\mu_{CM})$ sont des polynômes de Legendre¹, et $g_1(E)$, $g_2(E)$ sont des distributions d'énergie.

Le comportement de la distribution angulaire peut s'expliquer par la théorie du modèle optique :

- à faible énergie, le choc est isotrope dans le centre de masse sauf si l'énergie du neutron est très proche d'une résonance de moment angulaire $l > 0$. Dans ce cas, seule l'onde s (équivalent à $l = 0$) du neutron incident entre en collision avec le noyau. L'onde s étant isotrope, le choc l'est aussi.
- à énergie élevée, le choc se fera vers l'avant avec l valant 1, 2, 3 ... etc.
- proche des résonances isolées dans le domaine à basse énergie, la section efficace différentielle définie par le modèle optique est :

$$\sigma_s(\mu_{CM}) = \frac{\lambda}{4} \left\| \sum_{l=0}^L (2l+1) e^{2i\Delta_l} (A_{pe}^l + A_{re}^l) P_l(\mu_{CM}) \right\|^2 \quad (3.2)$$

où σ_s est la section différentielle du choc élastique, λ la longueur d'onde réduite du neutron, Δ_l le changement de phase de l'onde l , A_{pe}^l l'amplitude de la diffusion élastique potentielle, et A_{re}^l celle de la diffusion élastique résonante.

Une étude plus complète montre que pour une résonance isolée, le choc est anisotrope vers l'avant aux énergies supérieures à celle de la résonance, anisotrope vers l'arrière pour les énergies inférieures à celle de la résonance et presque symétrique par rapport à $\mu = 0$ pour des énergies au milieu de la résonance. Pour les noyaux les plus lourds, le choc élastique est presque isotrope dans le CM pour un neutron incident d'énergie $< 250\text{keV}$; au-dessus, ce n'est plus le cas. Pour les noyaux légers, cette limite est plus élevée. De ce fait, la loi de choc peut être représentée par un polynôme de Legendre d'ordre relativement bas dans le CM pour les chocs élastiques induits par des neutrons épithermiques et intermédiaires ($E < \text{quelques MeV}$) (*cf* Fig. 3.1).

3.1.2 Choc élastique dans le domaine thermique

Pour un neutron qui est ralenti en dessous de quelques eV, l'énergie d'agitation thermique du noyau devient comparable à l'énergie cinétique du neutron et, de ce fait, le neutron peut perdre ou gagner de l'énergie après choc. Pour décrire le choc élastique dans ce cas, on applique un modèle dit de « gaz libre ».

Dans la cas d'un cristal ou d'une molécules, chaque atome équivaut à un centre de diffusion avec une longueur de diffusion b_i . Cette dernière varie d'un atome à un autre suivant l'isotopie ou le spin. La corrélation entre les positions d'un même noyau à différents instants et celle entre les positions de différents noyaux à divers instants engendre des interférences, ce qui donne lieu à la diffusion cohérente. Si le choc est déterminé par la corrélation entre les positions d'un même noyau à plusieurs instants uniquement, il n'y a pas d'interférences et le choc est qualifié d'incohérent. Physiquement, la diffusion cohérente est la diffusion qui résulterait si tous les

1. Ils proviennent de la résolution de l'équation de Schrödinger sur sa variable angulaire [6]

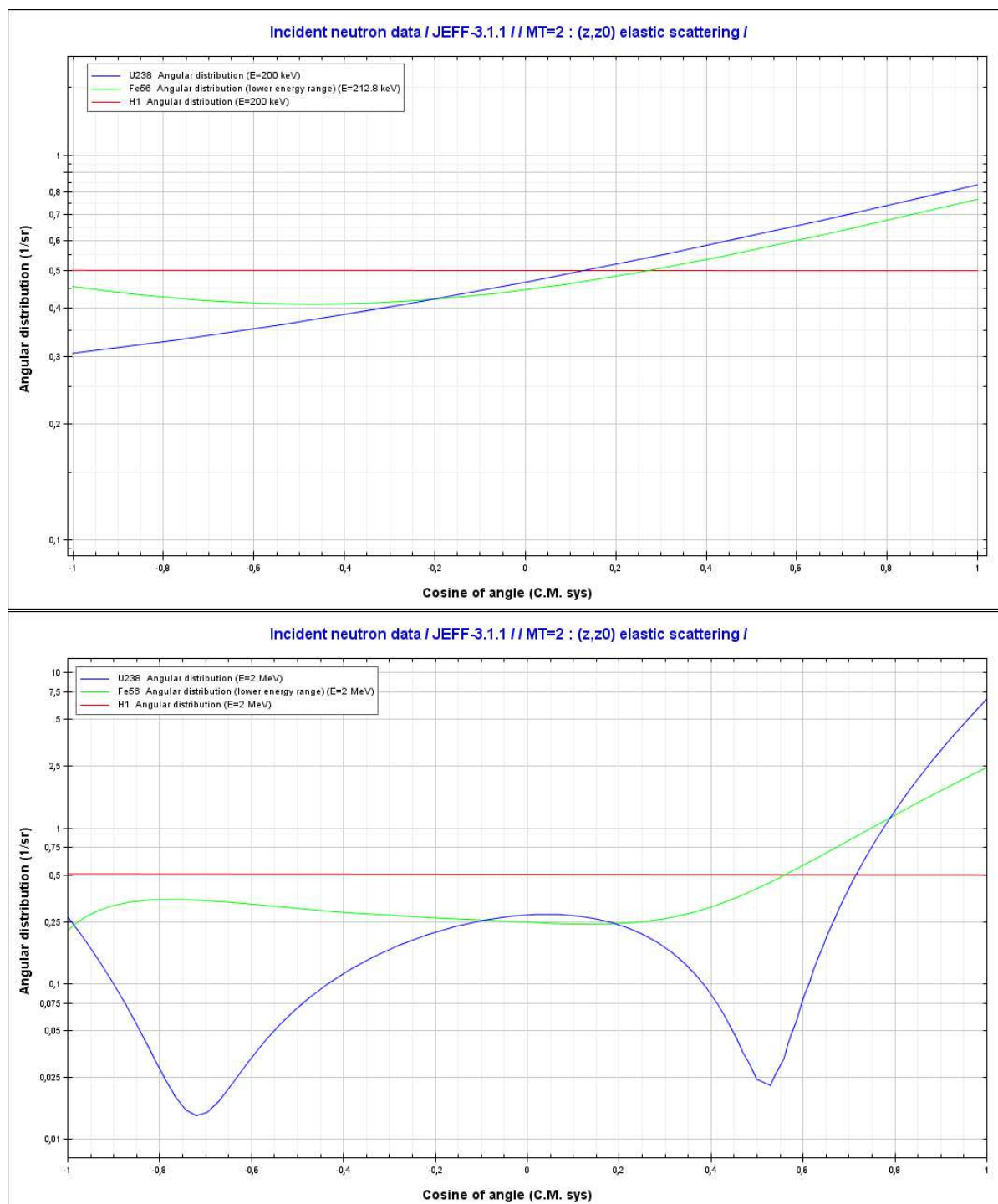


FIG. 3.1 – Distributions angulaires élastiques de l'uranium 238, du fer 56 et de l'hydrogène à 200 keV et 2 MeV.

noyaux avaient tous la même longueur de diffusion correspondant à la moyenne \bar{b} . La diffusion incohérente est la composante que l'on rajoute à la diffusion cohérente pour obtenir la diffusion « réelle » [39].

La distribution angulaire du neutron après le choc élastique sera isotrope sauf pour le choc élastique cohérent avec des fronts de Bragg². Dans le cas d'une molécule ou d'un cristal avec peu d'ordre, le choc peut être élastique incohérent. Dans ce cas, la dépendance angulaire de la section différentielle est portée par le facteur de Debye-Waller qui impose une diffusion isotrope dans le domaine thermique [39].

3.1.3 Choc inélastique

Suite à un choc inélastique, le noyau reste dans un état excité. L'énergie d'excitation provient de l'énergie cinétique du neutron incident. Dans les noyaux légers, la différence d'énergie entre le niveau fondamental et le premier niveau excité est de l'ordre de quelques MeV tandis que pour les noyaux plus lourds, elle vaut quelques dizaines de keV. Si le neutron incident possède une énergie juste au-dessus du seuil du choc inélastique, la probabilité que le noyau reste dans un état excité est très faible. Le choc inélastique devient, ainsi, important si le neutron incident a une énergie suffisante pour ouvrir plusieurs voies de désexcitation après choc.

De ce fait, pour les noyaux légers, le choc inélastique a peu d'influence dans les domaines d'énergie pour les calculs neutroniques. Pour les noyaux de masse moyenne ($A \sim 50$), les voies inélastiques s'ouvrent aux alentours de quelques centaines de keV (exemple : 860 keV pour le fer 56). Quant aux noyaux lourds, les chocs inélastiques commencent à des énergies plus basses, de l'ordre de quelques dizaines de keV (exemple : 45 keV pour l'uranium 238).

Dans un choc inélastique discret, le noyau reste dans un état excité particulier où la distribution angulaire dépend du noyau et de l'état d'excitation. La distribution angulaire (et donc, la section différentielle *in fine*) s'obtient par les relations de la cinématique, comme pour le choc élastique.

Lors de la formation du noyau composé, si seulement quelques niveaux d'excitation sont possibles pour le noyau composé, la théorie d'Hauser-Feshbach [40] propose que la section différentielle soit composée des polynômes de Legendre de degré pair et soit symétrique par rapport à un angle de 90° . Cependant, si un des deux moments angulaires orbitaux du neutron incident et du neutron sortant est nul, ou si le spin du niveau d'excitation dans le noyau composé vaut 0 ou $\frac{1}{2}$, seul le moment P0 est pris en compte dans la distribution angulaire qui sera isotrope dans le CM.

Pour un neutron incident d'énergie suffisamment élevée, plusieurs niveaux d'excitations sont accessibles pour le noyau cible et pour le noyau composé. Malgré des distributions angulaires

2. Aussi appelé diffusion de Bragg.

anisotropes pour quelques états particuliers, la moyenne sur tous les états excités sera presque isotrope dans le CM.

3.1.4 Choc inélastique dans le domaine thermique

Dans une molécule ou un cristal, les noyaux se déplacent autour de leur position d'équilibre. Ces vibrations ou rotations engendrent des états discrets d'énergie. Le neutron peut échanger de l'énergie de façon discrète avec le noyau cible et le niveau d'énergie du noyau sera modifié. Le choc inélastique est caractérisé par des sections doublement différentielles où la loi de transfert est déduite d'une fonction de corrélation entre l'énergie et la quantité de mouvement, $S(\alpha, \beta)$ [41].

3.2 Sources d'anisotropie

3.2.1 L'anisotropie dans le centre de masse

L'anisotropie dans le CM est une propriété de chaque noyau dépendant des types de réaction qu'ils vont subir en interagissant avec le neutron incident. Cette anisotropie ou distribution angulaire est mesurée expérimentalement et stockée dans les fichiers d'évaluation sous le format ENDF [40]. Les observations que nous pouvons faire sur cette anisotropie sont les suivantes.

La diffusion élastique est isotrope, ou presque isotrope, dans le système du centre de masse pour des énergies inférieures à ~ 100 keV. En augmentant l'énergie du neutron incident, les diffusions deviennent de plus en plus anisotropes. Ce phénomène est surtout observé pour les noyaux lourds, et très peu pour les noyaux légers. Dans le cas de l'hydrogène par exemple, les distributions angulaires restent plutôt isotropes dans la gamme d'énergie qui concerne la physique des réacteurs (0-20MeV), tandis que pour l'Uranium-238, les distributions angulaires deviennent très vite anisotropes dans le CM (*cf* Fig. 3.1). D'autre part, la diffusion inélastique est moins anisotrope dans le CM.

3.2.2 Cinématique et anisotropie par changement de référentiel

À présent, les lois de la cinématiques pour les chocs mentionnés ci-dessus sont dérivées. Une hypothèse importante dans ce cas est de considérer que pour un neutron rapide, voire épithermique, le noyau cible peut être considéré comme étant au repos. De ce fait, les agitations thermiques du noyau peuvent être négligées. Les lois qui seront obtenues peuvent l'être aussi en prenant une distribution de vitesse maxwellienne pour le noyau cible dans le domaine thermique.

Les calculs de la cinématique sont effectués dans le centre de masse où la somme des quantités de mouvement du noyau cible et du neutron est le vecteur nul (*cf* Fig. 3.2). Pour les

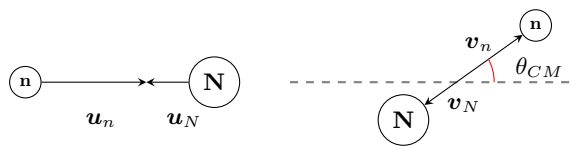


FIG. 3.2 – Choc dans le CM.

notations, les vitesses et énergies dans le CM (respectivement LAB) seront en lettres minuscules (respectivement majuscules). Les vecteurs vitesses seront en gras et leurs normes en lettres simples. Les vitesses avant choc seront notées \mathbf{u} ou \mathbf{U} et après choc \mathbf{v} ou \mathbf{V} et celles du noyau cible (neutron) indicées par N (n respectivement). Les énergies seront notées comme suit : avant choc e' , après choc e et Q_i celle du i -ème niveau discret. A désignera le rapport de masse entre le noyau et le neutron. On notera par ailleurs θ_{CM} et θ_{LAB} les angles de diffusion dans le centre de masse et dans le laboratoire respectivement avec μ_{CM} et μ_{LAB} leurs cosinus respectifs. Le choc dans le référentiel du LAB est esquissé dans la Fig. 3.3.

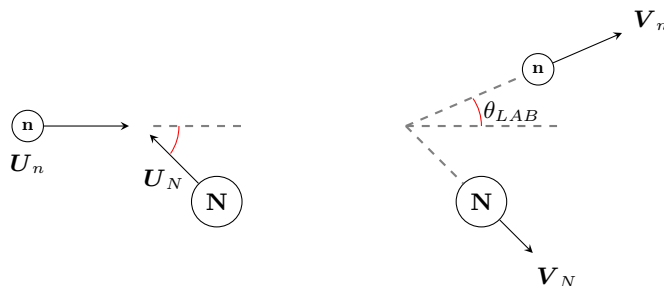


FIG. 3.3 – Choc dans le LAB.

Nous écrivons maintenant le principe de conservation de quantité de mouvement et d'énergie totale pour le système neutron-noyau [9, 15] :

- Quantité de mouvement

o dans le laboratoire

$$\mathbf{U}_n + A\mathbf{U}_N = \mathbf{V}_n + A\mathbf{V}_N = \mathbf{U}_n \quad (3.3)$$

o dans le centre de masse

$$\mathbf{u}_n + A\mathbf{u}_N = \mathbf{v}_n + A\mathbf{v}_N = \mathbf{0} \quad (3.4)$$

- Énergie totale dans le centre de masse

$$e'_n + e'_N = e_n + e_N + Q_i \quad (3.5)$$

Les chocs élastiques et inélastiques discrets peuvent être représentés par les mêmes formules en considérant le choc élastique comme un cas particulier du choc inélastique dans lequel l'énergie d'excitation Q_i sera nulle. Les lois de la conservation nous permet de déduire les relations suivantes :

- la vitesse du CM dans le LAB

$$\mathbf{u}_{CM} = \frac{\mathbf{U}_n}{1+A} = \frac{\mathbf{u}_n}{A} \quad (3.6)$$

- les relations entre les vitesses dans le CM et le LAB

$$\mathbf{u}_n = \frac{A}{1+A} \mathbf{U}_n \quad (3.7)$$

- les énergies avant et après choc

$$\mathbf{e}'_N = \frac{e'_n}{A} \text{ et } \mathbf{e}_N = \frac{e_n}{A} \quad (3.8)$$

La loi de conservation de l'énergie et la relation entre les énergies avant et après choc amènent aux équations suivantes :

$$e'_n - e_n = \frac{A}{1+A} Q_i \quad (3.9)$$

$$\frac{e_n}{e'_n} = 1 - \frac{A}{1+A} \frac{Q_i}{e'_n} \quad (3.10)$$

$$\frac{v_n}{u_n} = \sqrt{1 - \frac{A}{1+A} \frac{Q_i}{e'_n}} \quad (3.11)$$

Dans le référentiel du laboratoire, l'énergie du neutron incident, E'_n s'exprime comme suit :

$$E'_n = \frac{1}{2} \mathbf{U}_n \cdot \mathbf{U}_n = \frac{1}{2} (\mathbf{u}_n + \mathbf{u}_{CM}) \cdot (\mathbf{u}_n + \mathbf{u}_{CM}) = \frac{u_n^2}{2} \left(\frac{1+A}{A} \right)^2 \quad (3.12)$$

d'où on peut déduire la relation suivante qui donne le passage de l'énergie d'un référentiel à un autre :

$$e'_n = E'_n \left(\frac{A}{1+A} \right)^2 \quad (3.13)$$

Le rapport entre les vitesses après choc et avant choc du neutron dans le CM s'écrit en posant $\gamma(E'_n) = A \sqrt{1 - \frac{A+1}{A} \frac{Q_i}{E'_n}}$:

$$\frac{v_n}{u_n} = \sqrt{1 - \frac{A+1}{A} \frac{Q_i}{E'_n}} = \frac{\gamma(E'_n)}{A} \quad (3.14)$$

Comme le noyau reste dans l'état excité après le choc, la collision inélastique ne peut se produire que lorsque le neutron a une énergie supérieure au seuil de collision inélastique. Dans le système du laboratoire (LAB), le seuil s'écrit :

$$E_{seuil} = -\frac{A+1}{A} Q_i \quad (3.15)$$

Expression de E_n en fonction de E'_n Nous écrivons une relation entre l'énergie du neutron avant et après choc.

$$E_n = \frac{1}{2} \mathbf{V}_n \cdot \mathbf{V}_n = \frac{1}{2} (\mathbf{v}_n + \mathbf{u}_{CM}) \cdot (\mathbf{v}_n + \mathbf{u}_{CM}) \quad (3.16)$$

$$= \frac{1}{2} v_n^2 + \frac{1}{2A^2} u_n^2 + \frac{1}{A} \mathbf{v}_n \cdot \mathbf{u}_n \quad (3.17)$$

$$= e'_n \frac{\gamma^2(E'_n)}{A^2} + e'_n \frac{1}{A^2} + e'_n \frac{2\mu_{CM}}{A^2} \gamma(E'_n) \quad (3.18)$$

en utilisant l'équation (3.14) et le fait que par définition $\mu_{CM} = \cos \theta_{CM} = \mathbf{v}_n \cdot \mathbf{u}_n / v_n u_n$.

En injectant (3.13) dans l'expression ci-dessus, nous obtenons le rapport des énergies après et avant choc dans le LAB :

$$\frac{E_n}{E'_n} = \frac{1 + 2\gamma(E'_n)\mu_{CM} + \gamma^2(E'_n)}{(A + 1)^2} \quad (3.19)$$

Expression de la probabilité de transfert $E'_n \rightarrow E_n$ Dans cette section, nous explicitions l'expression de la probabilité d'obtenir une énergie E_n , $p(E_n)$ après un transfert énergétique, $E'_n \rightarrow E_n$. Fig. 3.4 montre la relation entre \mathbf{u}_{CM} , \mathbf{u}_n et \mathbf{U}_n .

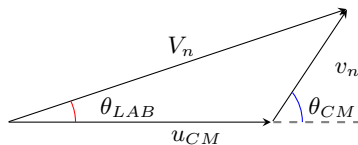


FIG. 3.4 – Relation entre la vitesse dans le CM et dans le LAB.

Le théorème des cosinus appliqué à ce triangle des vitesses amène à la relation suivante :

$$V_n^2 = u_{CM}^2 + v_n^2 + 2 \cdot u_{CM} v_n \cos \theta_{CM} \quad (3.20)$$

Sachant que u_{CM} et v_n sont indépendantes de θ_{CM} , en dérivant cette dernière relation et en remplaçant les vitesses u_{CM} et v_n par leurs expressions des Eq. (3.6) et Eq. (3.7) respectivement, nous obtenons :

$$\begin{aligned} 2V_n dV_n &= 2u_{CM}v_n d(\cos \theta_{CM}) \\ &= \frac{2A}{(A+1)^2} U_n^2 d(\cos \theta_{CM}) \end{aligned} \quad (3.21)$$

Cette expression peut être écrite en faisant apparaître les énergies initiale et finale du neutron dans le référentiel LAB.

$$2dE_n = \frac{4A}{(A+1)^2} E'_n d(\cos \theta_{CM}) = (1 - \alpha) E'_n d(\cos \theta_{CM}), \quad \alpha = \frac{(A-1)^2}{(A+1)^2} \quad (3.22)$$

Les distributions peuvent être écrites avec un changement de variable tel que :

$$p(E_n) dE_n = p(\theta_{CM}) d\theta_{CM} \quad (3.23)$$

et de ce fait, en injectant l'expression de $\frac{d\theta_{CM}}{dE_n}$ de l'Eq. (3.22) :

$$\begin{aligned} p(E_n) &= p(\theta_{CM}) \frac{d\theta_{CM}}{dE_n} \\ &= p(\theta_{CM}) \cdot \frac{2}{(1-\alpha) E'_n} \end{aligned} \quad (3.24)$$

$p(\theta_{CM})$ étant la distribution angulaire dans le CM. Cette expression pour la probabilité de transfert est valable si $E_n \in [\alpha E'_n, E'_n]$; elle est nulle sinon.

Expression de μ_{LAB} en fonction de μ_{CM} Le cosinus de l'angle de diffusion dans le LAB s'écrit par définition comme suit :

$$\mu_{LAB} = \cos \theta_{LAB} = \frac{\mathbf{U}_n \cdot \mathbf{V}_n}{U_n V_n} = \frac{(\mathbf{u}_n + \frac{\mathbf{u}_n}{A}) \cdot (\mathbf{v}_n + \frac{\mathbf{u}_n}{A})}{\sqrt{(\mathbf{u}_n + \frac{\mathbf{u}_n}{A})^2 (\mathbf{v}_n + \frac{\mathbf{u}_n}{A})^2}} \quad (3.25)$$

Comme précédemment, en utilisant la définition de μ_{LAB} et les équations (3.13) et (3.14), nous obtenons l'expression du changement de référentiel pour le cosinus de l'angle de déviation :

$$\mu_{LAB} = \frac{1 + \gamma(E'_n) \mu_{CM}}{\sqrt{1 + 2\gamma(E'_n) \mu_{CM} + \gamma^2(E'_n)}} \quad (3.26)$$

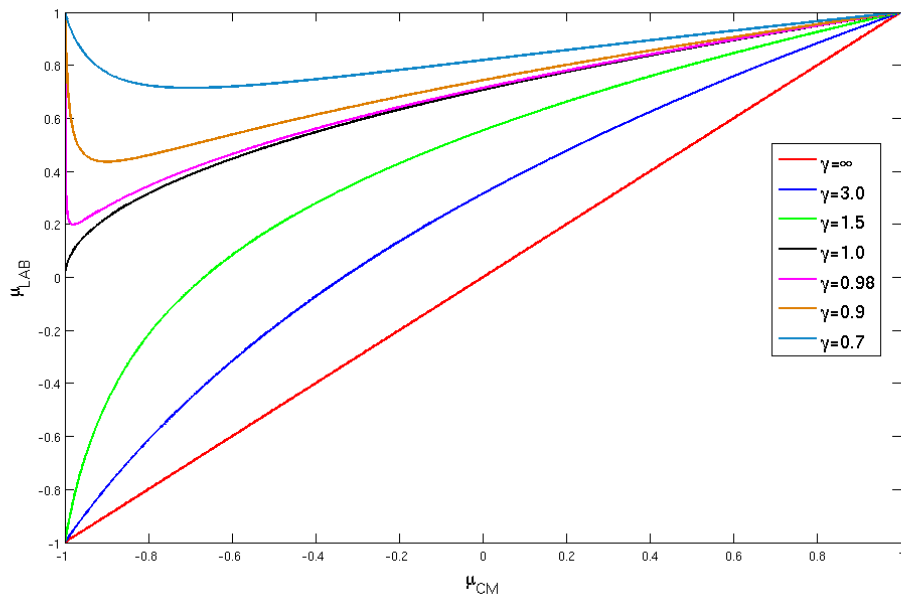
Dans le CM, les valeurs entre [-1,1] sont toutes possibles pour μ_{CM} , mais ce n'est pas le cas pour μ_{LAB} . Si $E' < E_{90} = -Q_i A / (A+1)$, on aura $0 \leq \gamma(E') \leq +1$ et de ce fait, $0 \leq \mu_{LAB} \leq +1$, c'est-à-dire que le neutron n'est dévié que vers l'avant après choc. Si $E' > E_{90}$, on a $\gamma(E') > 1$, toutes les directions sont possibles pour μ_{LAB} .

On constate sur Fig. 3.5 que pour $\gamma < 1$ il existe deux μ_{CM} correspondant à un seul μ_{LAB} , ce qui revient à dire qu'il y a deux énergies sortantes possibles pour le même angle de déviation dans le référentiel du laboratoire. Ceci correspond aux relations suivantes : $E = \Gamma^{-1}(E'_n, \mu_{LAB})$ où

$$E = \Gamma^{-1}(E'_n, \mu_{LAB}) = \begin{cases} \frac{E'_n}{(A+1)^2} \left(\mu_{LAB} \pm \sqrt{\gamma^2(E'_n) - 1 + \mu_{LAB}^2} \right)^2, & \text{si } E'_n \leq E_{90} \\ \frac{E'_n}{(A+1)^2} \left(\mu_{LAB} + \sqrt{\gamma^2(E'_n) - 1 + \mu_{LAB}^2} \right)^2, & \text{si } E'_n > E_{90} \end{cases}$$

On en déduit aussi que $E' = \Gamma(E, \mu_{LAB})$ avec

$$\Gamma(E, \mu_{LAB}) = \frac{E_n}{(A-1)^2} \cdot \left[\frac{A^2 - 1 - A(A-1) \frac{Q_i}{E}}{\mu_{LAB} + \sqrt{A^2 - 1 - A(A-1) \frac{Q_i}{E} + \mu_{LAB}^2}} \right]^2 \quad (3.27)$$

FIG. 3.5 – μ_{LAB} vs μ_{CM}

Expression de μ_{LAB} en fonction de E'_n et E_n L'expression suivante est obtenue en injectant l'expression de μ_{CM} déduite de l'Eq. (3.19) dans l'Eq. (3.26) :

$$\mu_{LAB} = S(E'_n, E_n) = \frac{A+1}{2} \sqrt{\frac{E'_n}{E_n}} - \frac{A-1}{2} \sqrt{\frac{E'_n}{E_n}} + \frac{A}{2} \frac{Q_i}{\sqrt{E'_n E_n}} \quad (3.28)$$

Effet du changement de référentiel A partir de la relation entre μ_{LAB} et μ_{CM} , on peut trouver la relation différentielle entre ces deux termes.

$$\frac{d\mu_{CM}}{d\mu_{LAB}} = \frac{[1 + 2\gamma(E'_n)\mu_{CM} + \gamma^2(E'_n)]^{3/2}}{\gamma^2(E'_n) [\gamma(E'_n) + \mu_{CM}]} \quad (3.29)$$

Sachant que $p(\mu_{LAB})d\mu_{LAB} = p(\mu_{CM})\frac{d\mu_{CM}}{d\mu_{LAB}}d\mu_{LAB}$, on trouve donc la relation suivante :

$$p(\mu_{LAB}) = \frac{[1 + 2\gamma(E'_n)\mu_{CM} + \gamma^2(E'_n)]^{3/2}}{\gamma^2(E'_n) [\gamma(E'_n) + \mu_{CM}]} p(\mu_{CM}) \quad (3.30)$$

Ces relations conduisent à la formule de passage entre μ_{LAB} et μ_{CM} . On regarde maintenant les deux cas :

$$\gamma(E'_n) \rightarrow \infty$$

Dans ce cas, $\mu_{LAB} \approx \mu_{CM}$, et donc, $p(\mu_{LAB}) \approx p(\mu_{CM})$. C'est le cas des chocs entre un neutron et des noyaux lourds. Les distributions angulaires sont donc presque les mêmes dans les deux référentiels.

$$\gamma(E'_n) \approx 1$$

Les chocs élastiques sur l'hydrogène sont de ce type ; avec l'angle de déviation dans le LAB qui est la moitié de celui dans le CM, d'où une valeur maximale de l'angle de déviation LAB de $\pi/2$. La relation entre les densités de probabilité est donc : $p(\mu_{LAB}) = 4\mu_{LAB}p(\mu_{CM})$

Lorsque le choc est isotrope dans le CM, $p(\mu_{CM}) = 0.5$, avec $-1 \leq \mu_{CM} \leq +1$, la distribution dans le LAB sera $p(\mu_{LAB}) = 2\mu_{LAB}$, où $0 \leq \mu_{LAB} \leq +1$. Le choc dans le référentiel LAB devient donc anisotrope vers l'avant. Sur Fig. 3.6 ci-après, on remarque que lorsque $\gamma(E'_n)$ est petit, l'anisotropie est importante, et lorsque $\gamma(E'_n)$ est inférieur à 1, la fonction densité présente un pôle au point $\mu_{CM} = -\gamma(E'_n)$. De ce fait, $\mu_{LAB,min}$, le cosinus de l'angle de déviation correspondant dans le référentiel LAB, ne peut varier que dans l'intervalle $]\mu_{LAB,min}, +1]$.

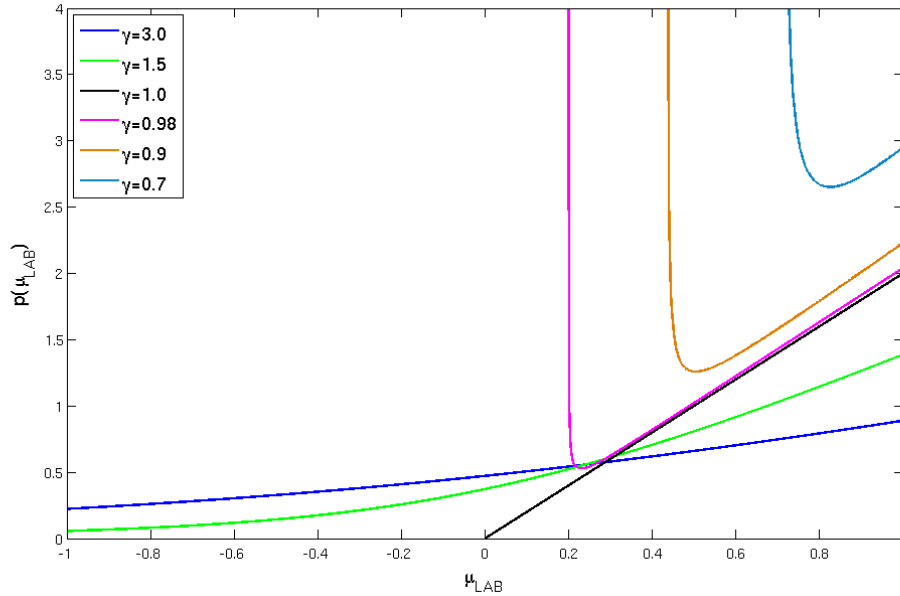
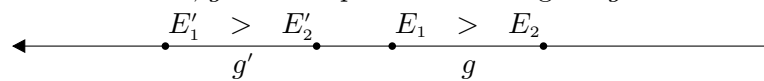


FIG. 3.6 – Distribution angulaire dans le référentiel laboratoire, $p(\mu_{LAB})$, vs μ_{LAB} , en supposant que le choc est isotrope dans le CM, $p(\mu_{CM}) = \frac{1}{2}$

3.2.3 Anisotropie multigroupe

Dans la théorie multigroupe, un neutron passe d'un groupe $g' = [E'_1, E'_2]$ vers un groupe $g = [E_1, E_2]$ lors d'une diffusion, g' n'étant pas forcément égal à g .



Comme établi précédemment, dans le cas des énergies ponctuelles, dans le cas d'une diffusion

élastique, μ_{LAB} est entièrement déterminé par le rapport E/E' .

$$\mu_{LAB} = \frac{1}{2}(A+1)\sqrt{\frac{E}{E'}} - \frac{1}{2}(A-1)\sqrt{\frac{E'}{E}} \quad (3.31)$$

Dans le cas particulier de l'hydrogène, cette relation se réduit à $\mu_{LAB} = \sqrt{\frac{E}{E'}}$. De ce fait, dans l'approximation multigroupe, μ_{LAB} est contraint à l'intervalle $\left[\sqrt{\frac{E_1}{E'_2}}, \sqrt{\frac{E_2}{E'_1}}\right]$. Le cosinus de l'angle de déviation est donc restreint à un intervalle du domaine $[-1, +1]$. Cet intervalle est d'autant plus petit que le maillage est fin.

Par ailleurs, cet intervalle dépend aussi du noyau considéré. Pour les noyaux lourds, dans le domaine où les diffusions élastiques sont prépondérantes, le gain maximal en léthargie est très faible lors d'un ralentissement du neutron. De ce fait, les transferts sont surtout réduits aux groupes $g' \rightarrow g'$ et $g' \rightarrow g' + 1$, donc, englobent toutes les valeurs possibles de E/E' , et les valeurs de μ_{LAB} sont distribuées sur $[-1, +1]$. L'anisotropie multigroupe dans ce cas est très peu prononcée.

Cependant, pour les noyaux légers comme l'hydrogène, présents en très grande quantité dans les REL, le gain maximal de léthargie est bien plus grand que la largeur des groupes dans le cadre des maillages fins. Les transferts de $g' \rightarrow g$ restreignent les valeurs de E/E' , et donc de μ_{LAB} . Ceci introduit donc une forme d'anisotropie de la loi de choc en approximation multigroupe qui ne peut être négligée.

C'est à cette anisotropie que nous nous intéresserons pour les travaux de la thèse.

3.3 L'anisotropie de la mesure au calcul

Dans cette section, on cherche surtout à mettre en évidence les endroits où les divers types d'anisotropie interviennent dans la chaîne de *processing* des données nucléaires aux codes de calcul. Ceci permettra de mieux positionner ces travaux de thèse dans cette chaîne avant de présenter le traitement de l'anisotropie de la loi de choc dans le prochain chapitre. Cette chaîne de *processing* est illustrée Fig. 3.7.

Les mesures des sections efficaces servent à constituer un ensemble de modèles et de paramètres nucléaires cohérents qui sont stockés sous un format bien défini que l'on nomme *ENDF* [40]. Ceci permet ainsi de définir une bibliothèque de données nucléaires constituée de plusieurs isotopes d'intérêt.

Les codes de *processing* de données nucléaires comme NJOY reconstruisent ensuite les sections efficaces à partir des paramètres stockés. Celles-ci sont produites sous deux formes : ponctuelle (PENDF) ou multigroupe (GENDF). Le code de *processing* CALENDF [42] produit les tables de probabilités pour la représentation des sections efficaces dans le domaine non-résolu. Le PENDF et les tables de probabilités sont directement utilisés par les codes stochastiques.

Jusqu'à ce point dans le traitement des données nucléaires, l'anisotropie du choc est constituée de celle qui caractérise les distributions angulaires dans le CM et l'anisotropie supplémentaire induite par changement de référentiel.

La transformation des PENDF en GENDF induit l'anisotropie multigroupe qui sera ensuite propagée au travers des codes déterministes. Le code NJOY utilise le formalisme des polynômes de Legendre³ dans son module de traitement⁴ pour la mise en groupe des sections efficaces de transfert différentielles. C'est à cette endroit de la chaîne du *processing* que nous nous plaçons pour les développements et les études qui seront menés dans cette thèse.

3. Ceci sera détaillé dans le prochain chapitre.

4. GROUPE

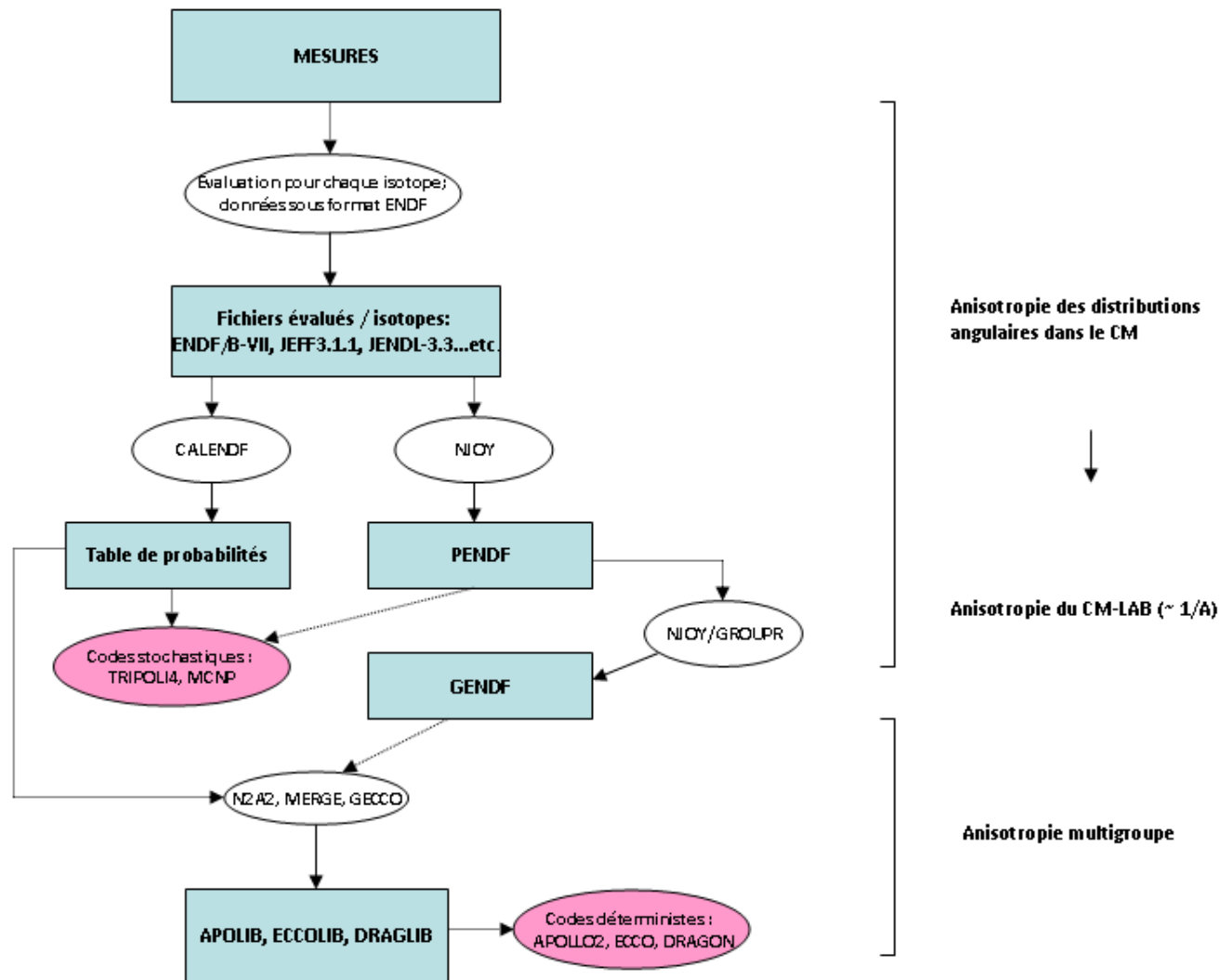


FIG. 3.7 – Chaîne de *processing* des données nucléaires.

État de l'art du traitement de l'anisotropie du choc

Dans le chapitre précédent, les différents types de diffusions neutron-noyau ont été décrits. Ce chapitre présentera dans un premier temps le format des données nucléaires, ENDF - *Evaluated Nuclear Data Format*. Puis, les méthodes qui sont employées pour traiter les chocs des neutrons seront détaillées en premier lieu, dans les codes stochastiques et en second lieu, dans les codes déterministes où le formalisme multigroupe rajoute une difficulté particulière en ce qui concerne l'anisotropie multigroupe.

Par ailleurs, ce chapitre mettra aussi en avant l'état de l'art des diverses méthodes qui ont été développées pour le traitement de l'anisotropie multigroupe jusqu'à ces dernières années.

4.1 Le format ENDF pour les lois de choc

Evaluated Nuclear Data File [40] est un format de stockage pour des données nucléaires évaluées pour chaque noyau pertinent pour la recherche et l'industrie nucléaire. L'évaluation est le processus d'analyse des données nucléaires expérimentales (des sections efficaces par exemple) et de comparaison entre divers modèles qui traduisent au mieux les mesures. L'ajustement des paramètres et la réduction de données sous forme tabulée produisent un ensemble de données évaluées. Ces dernières sont définies sur une grille avec des lois d'interpolation¹ pour les points non-tabulés.

Le format ENDF possède des blocs de données appelés « *File* » auxquels un numéro MF est attribué. Chaque section à l'intérieur d'un *File* est définie par un numéro MT. Les MF1, MF2 et MF3 décrivent respectivement les informations générales liées au noyau, les paramètres de résonances et les sections de réactions. Dans le cadre de l'anisotropie liée aux lois de choc, les *File* pertinents sont MF4, MF5, MF6 et MF7.

La MF4 contient les informations sur les distributions de neutrons émis² quand la particule incidente est un neutron. La MF4 est restreinte aux chocs élastiques et inélastiques discrets. Les distributions angulaires pour chaque réaction (MT) sont stockées pour une série croissante

1. linéaire-linéaire, log-log, linéaire-log

2. ainsi que pour d'autres particules ou noyaux

d'énergies incidentes. Elles peuvent être tabulées dans le système du centre de masse (CM) ou du laboratoire (LAB), voire dans les deux (exemple ^{56}Fe).

La MF5 décrit les spectres d'énergie des particules secondaires. Elle concerne les réactions pour des neutrons incidents sauf si l'information peut être obtenue de la MF4³. Les données pour la diffusion inélastique dans le continuum, les neutrons prompts de fission, les réactions $(n, 2n)$, les neutrons retardés et certaines réactions inélastiques qui produisent des neutrons secondaires doivent être prises à partir de la MF5 sauf si elles sont aussi dans la MF6.

La MF6 représente les distributions angulo-énergétiques. Elle est recommandée quand

- les distributions angulaires et énergétiques des particules émises sont couplées,
- la description simultanée des diffusions et des émissions est nécessaire,
- plusieurs possibilités de réactions existent et ne sont pas séparables,
- les distributions sont requises pour les particules chargées ou les noyaux composés.

Elle est utilisée de pair avec la MF3 et remplace les MF4 et MF5.

La MF7 contient des données sur la diffusion des neutrons dans le domaine thermique ($E' < 5eV$) pour les matériaux modérateurs. Seuls quelques noyaux ont une MF7 : H1(H₂O), H1(ZrH), H1(CaH₂), H1(CH₂), D(D₂O), ^4Be , C(graphite), Mg et Ca(CaH₂). Elle contient les corrélations énergie-quantité de mouvement $S(\alpha, \beta)$.

4.2 Traitement au sein des codes Monte Carlo ponctuels

Dans les codes de Monte Carlo comme TRIPOLI4 ou MCNP, les variables qui décrivent l'état d'une particule (position, angle ou énergie) sont échantillonnées de manière aléatoire. Après un choc, le type de réaction est d'abord tiré puis le code procède à l'échantillonnage de l'angle de diffusion qui se fait dans la plupart des cas dans le CM⁴. Cet échantillonnage est basé sur les distributions angulaires qui ont été décrites précédemment.

En effet, à partir des distributions $f(E', \mu_{CM})$ qu'on simplifiera comme $f_{E'}(\mu)$, il est possible de construire une fonction de répartition $\mathcal{F}(\mu)$ définie comme suit :

$$\mathcal{F}(\mu) = \int_{-1}^{\mu} f_{E'}(\mu') d\mu' \quad (4.1)$$

De ce fait, μ est distribué selon la densité de probabilité $f_{E'}(\mu)$ si $\mu = \mathcal{F}^{-1}(\xi)$, \mathcal{F}^{-1} étant l'inverse de \mathcal{F} et ξ un nombre aléatoire uniformément distribué dans $[0, 1]$. Cependant, les distributions angulaires étant données par les polynômes de Legendre d'ordre élevé (souvent > 1), la fonction inverse ne peut pas être calculée de manière simple et l'échantillonnage de l'angle de diffusion ne peut se faire par cette méthode.

Pour palier à ce problème, la distribution angulaire est reconstruite à partir de l'évalua-

3. Les chocs élastiques ou inélastiques discrets.

4. Cela dépend de l'évaluation.

tion sur une fonction en escaliers équiprobables. L'intervalle $[-1, +1]$ est discrétisé en N sous-intervalles ou *bins* $[\mu_{k-1}, \mu_k]$ et la distribution angulaire peut être approximée de la manière suivante :

$$f_{E'}(\mu) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \frac{H(\mu - \mu_{k-1}) - H(\mu - \mu_k)}{\mu_k - \mu_{k-1}} \quad (4.2)$$

où H est la fonction de Heaviside ou fonction échelon.

Un nombre aléatoire ξ est tiré uniformément dans $[0, 1]$ et le bin $[\mu_{k-1}, \mu_k]$ est choisi avec la condition $k - 1 \leq N\xi \leq k$. De cette manière, le cosinus de l'angle de diffusion dans le centre de masse s'écrit :

$$\mu = \mu_k - (k - N\xi)(\mu_k - \mu_{k-1}) \quad (4.3)$$

L'échantillonnage de l'angle de diffusion est simplifié grâce à cette méthode qui sera d'autant plus précise que le nombre de bins sera grand. En général, dans MCNP, le nombre de bins vaut 16 et dans TRIPOLI4 il vaut 16 ou 32.

La section de transfert ponctuelle s'écrit comme suit :

$$\Sigma(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, \mu) = \Sigma(\mathbf{r}, E')P(E' \rightarrow E, \mu) \quad (4.4)$$

où $P(E' \rightarrow E, \mu)$ est la probabilité de transfert en énergie et en angle. Dans le cadre des chocs élastiques, ce dernier peut se décomposer de la manière suivante :

$$P(E' \rightarrow E, \mu) = f(E', \mu)g(E', E) \quad (4.5)$$

$f(E', \mu)$ est la distribution angulaire et $g(E', E)$ est déterminé par les lois de la cinématique explicitées dans le précédent chapitre. Le code stochastique récupère les distributions angulaires de la MF4 du format ENDF après tirage de μ à l'énergie E' . μ permet ensuite de déterminer E .

S'il existe des corrélations entre les énergies E' et E et/ou μ^5 , le tirage se fait suivant les cas :

- si E' et E sont corrélées, le tirage de E' permet de choisir ainsi le spectre de la MF5 et le tirage de μ permet de choisir la distribution angulaire de la MF4.
- si E et μ sont corrélés, la sélection d'une loi de choc appropriée se fait dans la MF6 (distribution angulo-énergétique).

4.3 Traitement au sein des codes déterministes multigroupes

L'équation du transport écrite dans le formalisme multigroupe est détaillée par l'équation (2.14). Dans cette dernière, la modélisation de la section de transfert multigroupe est nécessaire.

5. diffusion inélastique continue ou (n, 2n) ... etc.

Cette partie présentera la principale méthode qui depuis les années cinquante jusqu'à aujourd'hui a été et est utilisée par tous les codes de neutronique ainsi que les diverses autres méthodes qui ont été proposées dans l'intervalle.

4.3.1 Développement en polynômes de Legendre

Cette modélisation est la plus répandue actuellement dans tous les systèmes de codes de neutronique déterministes. Elle a été formulée dans un premier temps par K. M. Case pour les chocs isotropes et généralisée par J. R. Mika pour des lois anisotropes [43]. Elle consiste à développer l'équation du transport comme une série finie de polynômes de Legendre. Ceci permettait de résoudre l'équation de Boltzmann monoénergétique de manière analytique et élégante. La section différentielle s'écrit ainsi :

$$\sigma_s(E' \rightarrow E, \mu_{LAB}) \approx \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \sigma_{sl}(E' \rightarrow E) P_l(\mu_{LAB}) \quad (4.6)$$

Les $\sigma_{sl}(E' \rightarrow E)$ sont les moments de Legendre et sont définis par :

$$\sigma_{sl}(E' \rightarrow E) = \int_{-1}^{+1} \sigma_s(E' \rightarrow E, \mu_{LAB}) P_l(\mu_{LAB}) d\mu_{LAB} \quad (4.7)$$

Les méthodes de résolution de l'équation du transport proviennent principalement de l'astrophysique où le transfert de radiation était largement étudié dans la communauté. L'astrophysicien J. H. Jeans proposa de développer le flux angulaire émis sur la base des harmoniques sphériques⁶ [44]. Cette méthode a été reprise par R. Marshak dans [45] qui l'appliqua au problème à source dit problème de Milne [46] en géométrie sphérique. Les harmoniques sphériques forment une base orthonormale de fonctions qui présente des propriétés intéressantes comme le théorème d'addition :

$$P_l(\boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega}) = \sum_{m=-l}^{+l} R_l^m(\boldsymbol{\Omega}') R_l^m(\boldsymbol{\Omega}) \quad (4.8)$$

Le flux étant développé sur cette base, l'utilisation du théorème d'addition permettait de simplifier les équations en découplant la direction incidente de la direction de sortie, motivant le développement de la section efficace aussi sur une base polynomiale tronquée. Cette méthode permet ainsi de séparer l'énergie et l'angle dans la loi de choc.

Cependant, la section différentielle multigroupe est une fonction continue par rapport au cosinus de l'angle de déviation μ_{LAB} mais elle n'est pas dérivable en tout point de l'intervalle $[-1, +1]$. Approcher une fonction C^0 par une base de fonctions C^∞ telles que des polynômes n'est pas très approprié et mène à des phénomènes d'oscillation comme le phénomène de Runge. De plus, en général, l'ordre de développement de la section efficace est très faible (≤ 5).

6. Qui correspondent aux polynômes de Legendre à une dimension.

4.3.1.1 Loi de choc multigroupe exacte en ralentissement et choc élastique

Cette section reprend les travaux de J.-F. Vidal de [47]. La loi de choc exacte sera établie en théorie multigroupe en faisant les hypothèses simplificatrices :

- choc élastique, $Q_i = 0$ dans l'Eq. (3.28).
- domaine d'énergie en ralentissement. Ce qui implique que le noyau cible peut être considéré au repos et le flux de pondération $\phi(\mathbf{r}, E') = 1/E'$,
- choc isotrope dans le centre de masse ; $f(\mu_{CM}, E') = 0.5$,
- la section de diffusion est prise comme étant la section potentielle dans le domaine d'énergie considérée. Ceci permet de simplifier les équations et d'obtenir une expression analytique.

Ceci nous permet d'écrire la loi de choc sous la forme suivante telle qu'elle est dérivée dans la section précédente :

$$P(E' \rightarrow E, \mu_{LAB}) = \begin{cases} \frac{1}{(1-\alpha)E} \cdot \delta \left[\mu_{LAB} - \frac{A+1}{2} \sqrt{\frac{E}{E'}} + \frac{A-1}{2} \sqrt{\frac{E'}{E}} \right] & , \text{ si } \alpha E' \leq E \leq E, \\ 0 & , \text{ sinon.} \end{cases}$$

La section de transfert ponctuelle est définie comme $\sigma_s(E' \rightarrow E, \mu_{LAB}) = \sigma_s(E')P(E' \rightarrow E, \mu_{LAB})$ et en multigroupe, elle s'écrit :

$$\begin{aligned} \sigma_s^{g' \rightarrow g}(\mu_{LAB}) &= \frac{\int_{E_{g+1}}^{E_g} dE \int_{E_{g'+1}}^{E_{g'}} dE' \sigma_s(E' \rightarrow E, \mu_{LAB}) \phi(E')}{\int_{E_{g'+1}}^{E_{g'}} dE' \phi(E')} \\ &= \frac{1}{\Delta^{g'}} \int_{E_{g'+1}}^{E_{g'}} dE' \sigma_s(E') \phi(E') \int_{E_{g+1}}^{E_g} dE P(E' \rightarrow E, \mu_{LAB}) \end{aligned} \quad (4.9)$$

en notant l'intégrale du flux de pondération $\Delta^{g'}$. En développant l'expression précédente, on retrouve :

$$\begin{aligned} \sigma_s^{g' \rightarrow g}(\mu_{LAB}) &= \frac{1}{(1-\alpha)\Delta^{g'}} \int_{E_{g'+1}}^{E_{g'}} dE' \frac{\sigma_s(E')}{E'^2} \\ &\quad \times \int_{E_{g+1}}^{E_g} dE \delta \left[\mu_{LAB} - \frac{A+1}{2} \sqrt{\frac{E}{E'}} + \frac{A+1}{2} \sqrt{\frac{E'}{E}} \right] \end{aligned} \quad (4.10)$$

En remplaçant la section dépendante de E' par la sections potentielle $\sigma_{s,p}$ et après simplification, l'expression suivante est obtenue :

$$\begin{aligned} \sigma_s^{g' \rightarrow g}(\mu_{LAB}) &= \frac{\sigma_{s,p}}{A\Delta^{g'}} \frac{(\mu_{LAB} + \sqrt{\mu_{LAB}^2 + A^2 - 1})^2}{\sqrt{\mu_{LAB}^2 + A^2 - 1}} \times \\ &\quad \left[\mathcal{G}(E_{g'+1}, E_g, \mu_{LAB}) - \mathcal{G}(E_{g'+1}, E_{g+1}, \mu_{LAB}) - \mathcal{G}(E_{g'}, E_g, \mu_{LAB}) + \mathcal{G}(E_{g'}, E_{g+1}, \mu_{LAB}) \right] \end{aligned} \quad (4.11)$$

où

$$\mathcal{G}(E', E, \mu_{LAB}) = \ln \left(\frac{\sqrt{S(E', E) + A^2 - 1} - S(E', E)}{\sqrt{\mu_{LAB} + A^2 - 1} - \mu_{LAB}} \right) \cdot H[\mu_{LAB} - S(E', E)] \quad (4.12)$$

Une routine MATLAB a été mise en place pour produire ces sections différentielles multi-groupes $\sigma_s^{g' \rightarrow g}(\tilde{\mu})$ exacte dans les hypothèses définies auparavant. Ces sections différentielles ont été projetées sur les polynômes de Legendre pour produire des moments de Legendre $\sigma_{sl}^{g' \rightarrow g}$.

4.3.1.2 Effet d'anisotropie en fonction de A et de la largeur du maillage énergétique

Les transferts exacts de quelques noyaux sont étudiés : ^{238}U , ^{16}O et ^1H . Les maillages seront à pas constants en léthargie : 0.2 pour le ralentissement au-dessus de 22.5 eV dans SHEM, 0.04 en dessous et 0.0083 dans le maillage ECCO à 1968 groupes.

Uranium 238 $L'^{238}\text{U}$ a un gain maximal en léthargie, $\epsilon = \ln(1/\alpha)$, qui vaut 0.017. Ce gain est faible par rapport à la largeur des groupes du maillage SHEM mais est deux fois plus grand que pour le maillage ECCO (qui a été choisi en fonction de cela pour rendre l'hypothèse résonance étroite valable à toute énergie). De ce fait, comme le montre la Fig. 4.1, les sections de transfert dans le maillage SHEM sont linéaires et un polynôme d'ordre 1 suffit pour les représenter très précisément. Ceci n'est pas le cas pour le maillage ECCO où la section est « triangulaire » (cf Fig. 4.3). Par ailleurs, seuls les transferts jusqu'à $g + 2$ sont non-nuls.

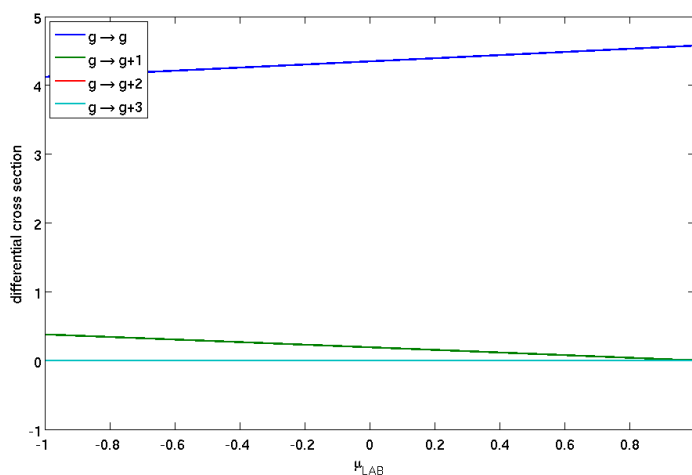


FIG. 4.1 – Sections de transfert élastique pour ^{238}U pour le maillage SHEM, largeur en léthargie, $\Delta u = 0.2$.

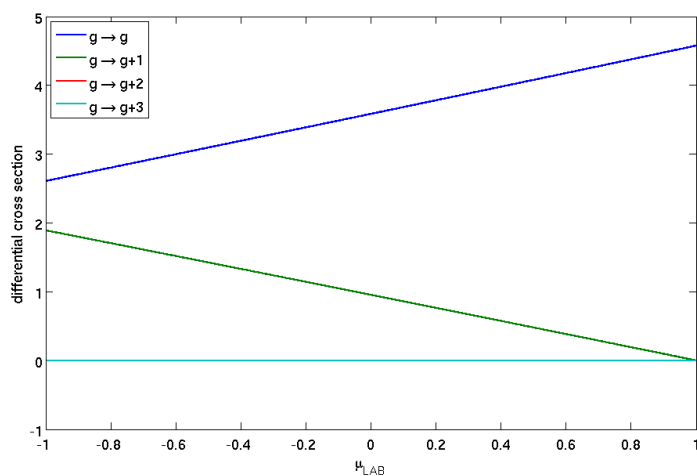


FIG. 4.2 – Sections de transfert élastique pour ^{238}U pour le maillage SHEM, largeur en léthargie, $\Delta u = 0.04$.

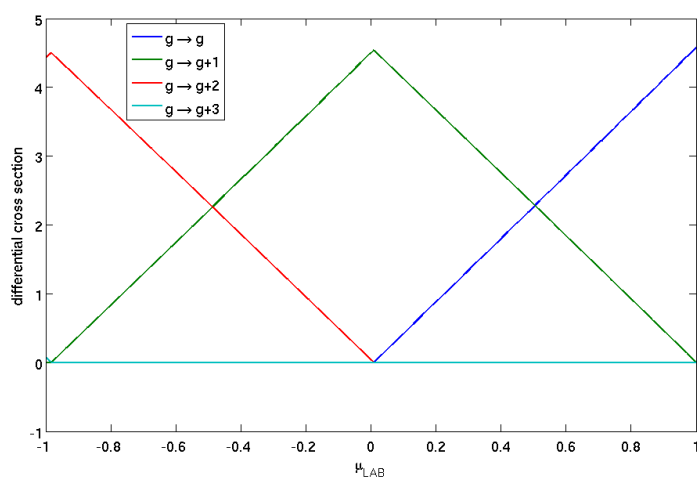


FIG. 4.3 – Sections de transfert élastique pour ^{238}U pour le maillage ECCO, largeur en léthargie, $\Delta u = 0.0083$.

Oxygène 16 Contrairement à l' ^{238}U , l'oxygène va ralentir les neutrons beaucoup plus et joue un rôle significatif avec un gain en léthargie de 0.25. Les transferts sont non-nuls jusqu'à $g > g+3$ (cf Fig. 4.4) et les neutrons ont tendance à être renvoyés de plus en plus vers l'arrière plus le groupe d'arrivée est bas en énergie. Dans les situations de vidange dans les réacteurs, c'est le noyau qui contribue le plus au ralentissement.

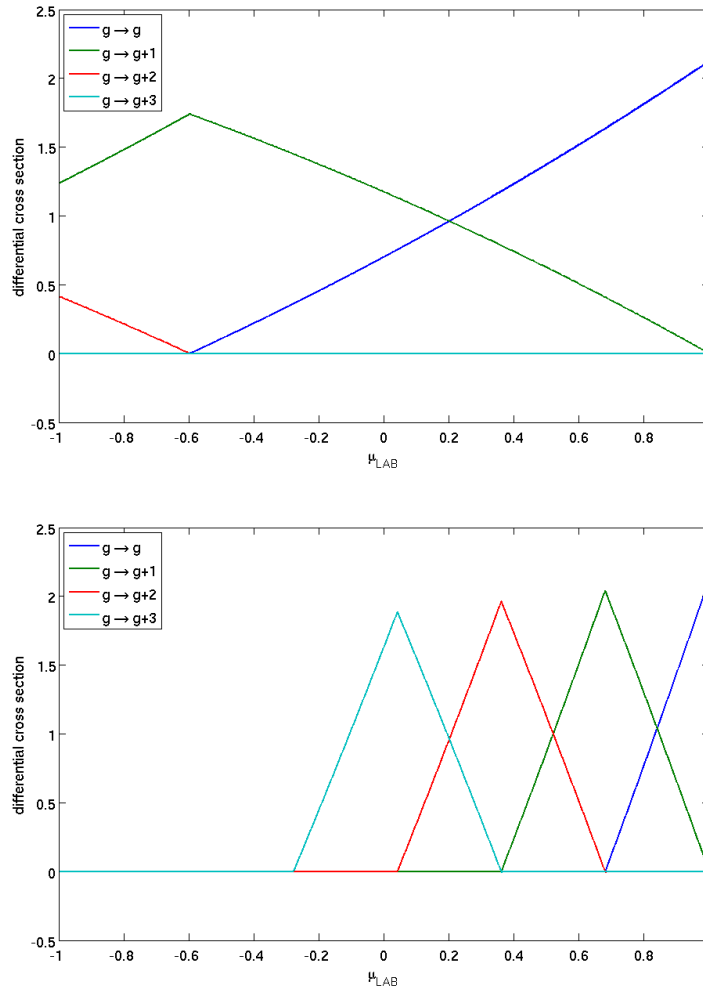


FIG. 4.4 – Sections de transfert élastique pour ^{16}O pour le maillage SHEM, largeurs en léthargie, $\Delta u = 0.2$ en haut et $\Delta u = 0.04$ en bas.

Hydrogène Avec un gain en léthargie infini, l'hydrogène est le principal ralentisseur des neutrons dans les réacteurs à eau légère. Les sections de transfert élastique de l'hydrogène sont tracées sur la Fig. 4.5. L'hydrogène est un cas particulier car les neutrons ne sont renvoyés que vers l'avant dans le référentiel LAB après les chocs.

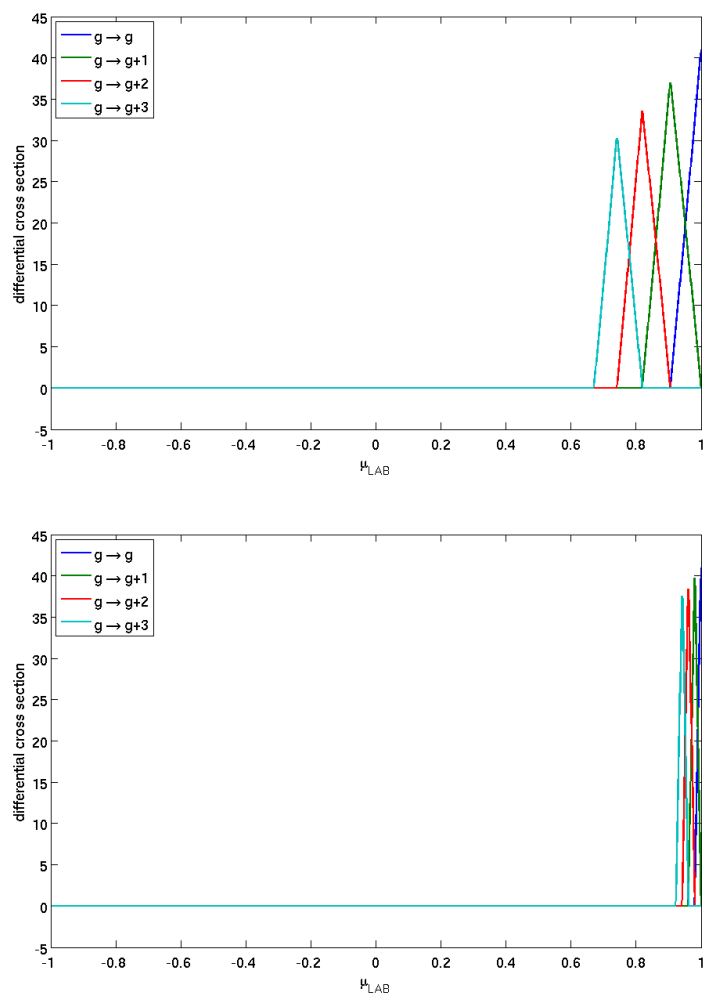


FIG. 4.5 – Sections de transfert élastique pour ^1H pour le maillage SDEM, largeurs en léthargie, $\Delta u = 0.2$ en haut et $\Delta u = 0.04$ en bas.

L'effet d'anisotropie dépend non seulement de la largeur du maillage énergétique mais aussi de la masse du noyau cible comme nous aurons pu le constater sur les figures précédentes. Pour plus de visibilité dans la comparaison, les transferts $g \rightarrow g$ (à gauche) et $g \rightarrow g + 1$ ont été tracés sur la même figure pour les noyaux étudiés.

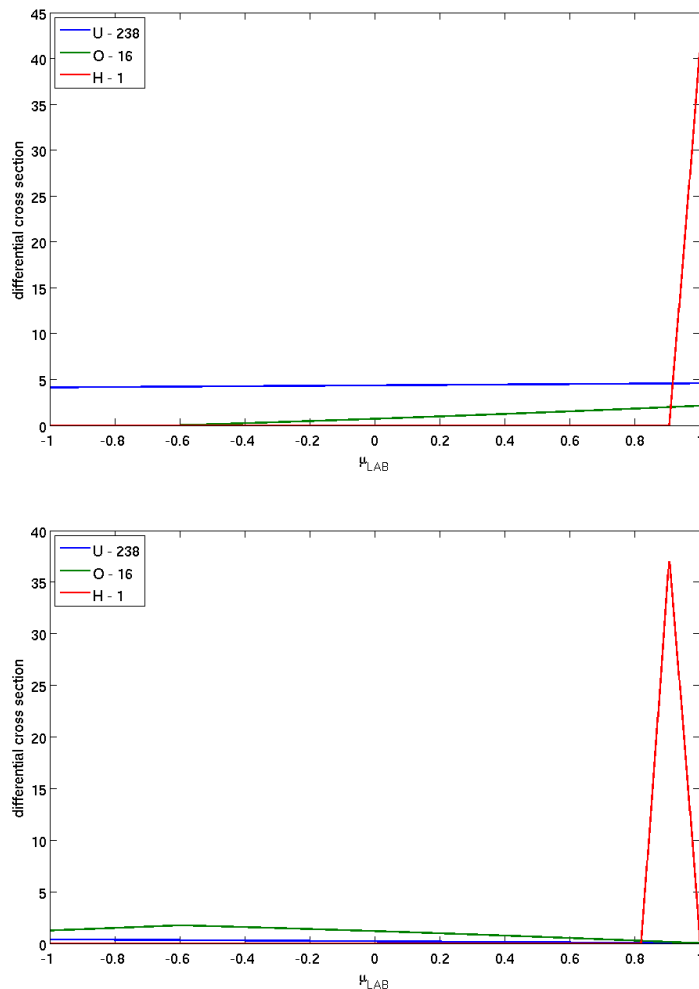


FIG. 4.6 – Effet de la masse sur l'anisotropie pour les transferts $g \rightarrow g$ (en haut) et $g \rightarrow g + 1$ (en bas), largeur en léthargie, $\Delta u = 0.2$.

La Fig. 4.6 montre clairement que les transferts pour l'uranium et l'oxygène sont très faiblement anisotropes par rapport à ceux de l'hydrogène qui ont une forme très piquée.

4.3.1.3 Représentation polynômiale de la section de transfert exacte

Des polynômes de degré faible modélisent mal la forme très piquée que prennent ces sections surtout dans le cadre des maillages énergétiques fins et pour les noyaux légers. Par ailleurs, cette représentation introduit aussi des valeurs négatives qui n'ont pas de sens physique. Dans

la Fig. 4.7, la figure du haut montre la modélisation de la section de transfert exacte du groupe 20 au groupe 26 dans le maillage SHEM à travers des polynômes de Legendre de degré ≤ 20 ; ceux-ci ne sont pas suffisants pour appréhender ce pic. La figure du bas donne la représentation avec des polynômes jusqu'à des ordres très élevés qui atténuent les oscillations négatives sans toutefois les faire disparaître complètement et augmenter l'ordre ne semble pas être une solution numériquement viable pour modéliser fidèlement la loi de choc.

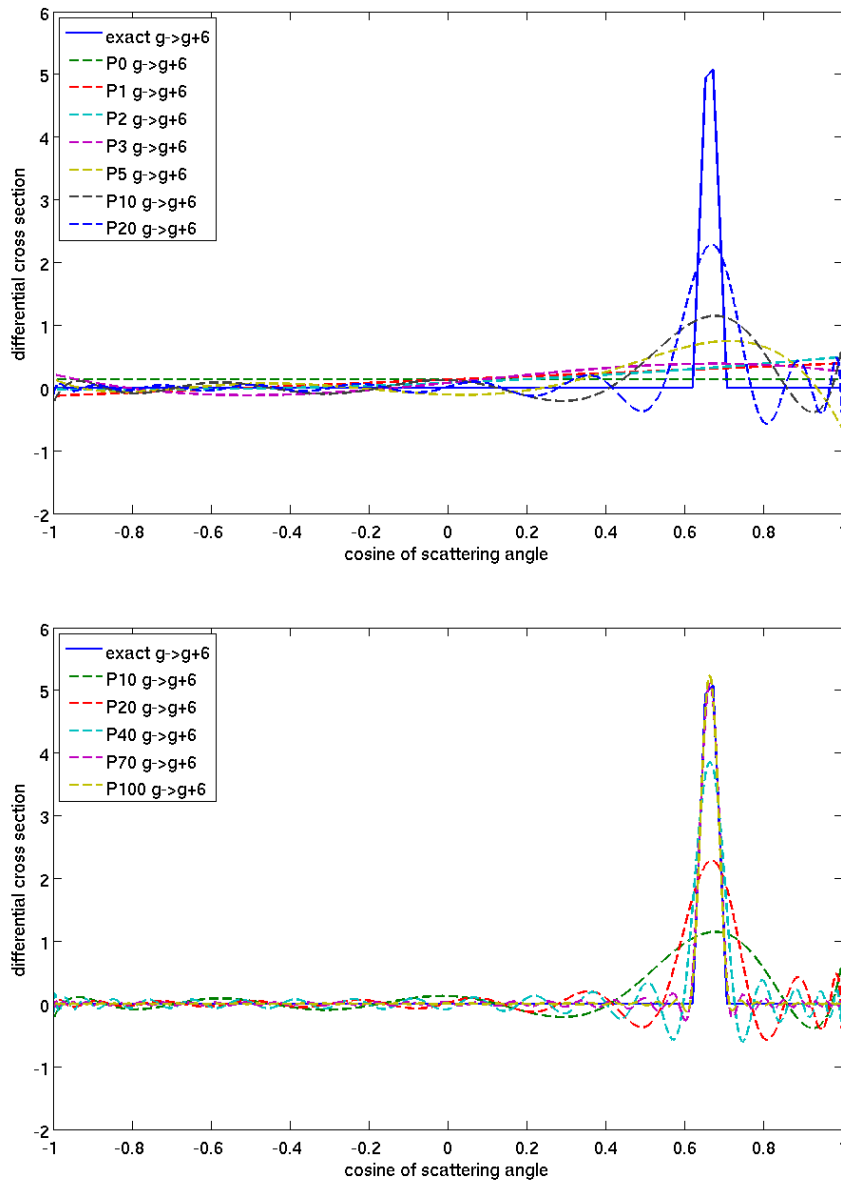


FIG. 4.7 – Section de transfert multigroupe de l'hydrogène pour $g = 20 \rightarrow g = 26$ du maillage SHEM (largeur en léthargie ~ 0.1) vs μ .

Un aspect important aussi est le fait que les sections différentielles multigroupes sont non-nulles sur une plage très faible de $[-1, +1]$, celle-ci étant d'autant plus faible que le maillage

sera fin (à la limite, on retrouve la distribution de Dirac de la représentation ponctuelle).

4.3.1.4 Impact de l'hydrogène sur l'anisotropie

Cette section vise à mettre en exergue l'impact de l'anisotropie due à l'hydrogène. La Fig. 4.8 montre les sections de transfert exactes calculées pour l'hydrogène à travers le programme MATLAB⁷. Ces figures permettent de constater que dans le cadre d'un noyau cible très léger, quel que soit le domaine énergétique considéré, les sections de transfert sont non-nulles sur un intervalle du cosinus de l'angle de déviation très faible.

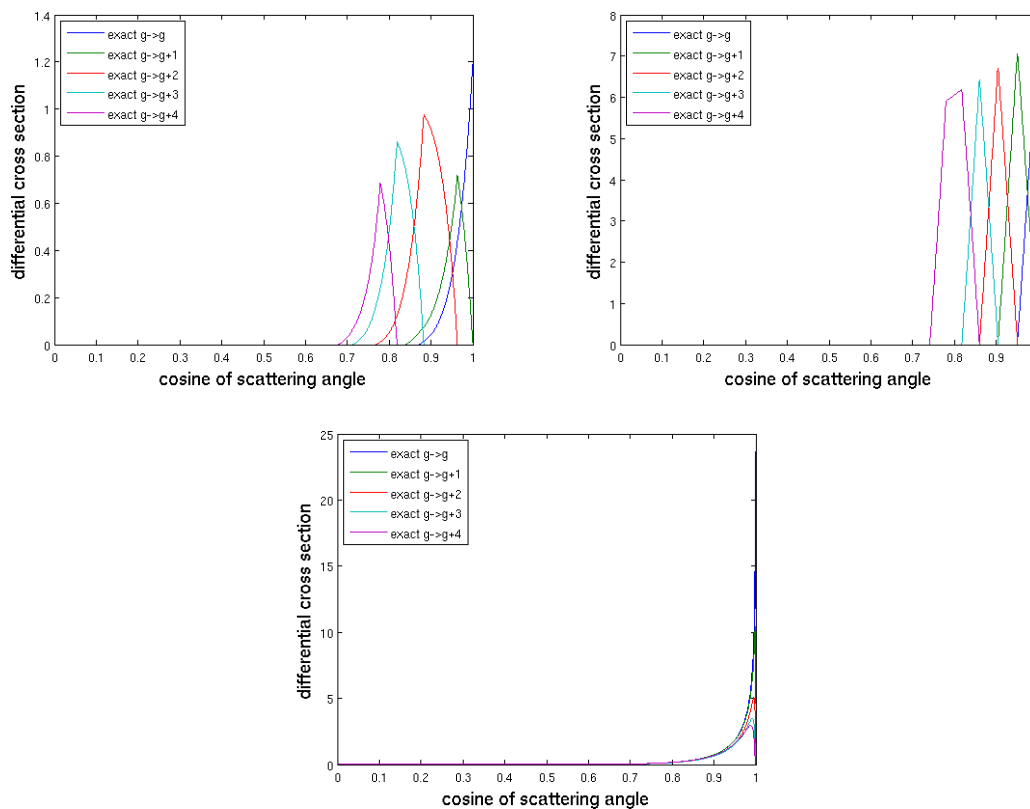


FIG. 4.8 – Sections de transfert de l'H dans les domaines rapide $g = 1$ (haut gauche), en ralentissement $g = 20$ (haut droite) et en thermique $g = 230$ pour le maillage SHEM.

De ce fait, quelques cas de cellules de type REL (UOX, MOX à froid (293 K), MOX à chaud (873 K), MOX à chaud (873 K) vidangé à 40%) ont été étudiés afin d'évaluer les effets d'anisotropie de l'hydrogène dans le cadre des développements en polynômes de Legendre. Dans un premier temps, les écarts $P_n - P_0$ sont calculés avec l'hydrogène traité à l'ordre n comme tous les noyaux; puis, l'hydrogène est traité uniquement en P_0 quel que soit l'ordre n du développement pour les autres noyaux.

⁷. La dérivation de la loi de choc pour les groupes rapides et thermiques sera explicitée plus tard dans le document, cf Chapitre 6.

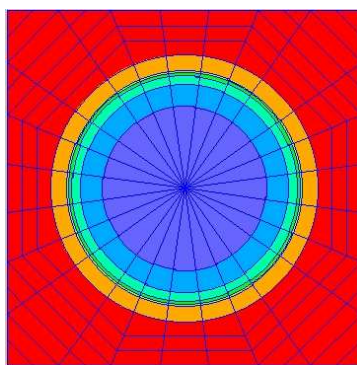


FIG. 4.9 – Maillage spatial utilisé.

Les calculs ont été réalisés avec une cellule au pas de 1.262 cm, le maillage énergétique SHEM à 281 groupes et le solveur MOC du code APOLLO2.8-2. Les paramètres pour les quadratures angulaires pour le MOC sont $N_\varphi=60$ (angles azimutaux), $N_\mu=12$ (angles polaires), $\Delta r=0.0025$ avec des trajectoires cycliques. Le schéma spatial utilisé est le schéma constant (STEP) avec le maillage spatial de la Fig. 4.9 (*cf* Annexe A).

Les résultats sont donnés dans Tab. 4.1, sous la forme de la décomposition sur les six facteurs : χ le facteur $(n, 2n)$, ϵ_{even} et ϵ_{odd} les facteurs de fission rapide des noyaux pairs et impairs respectivement, p le facteur antitrappe, f le facteur d'utilisation thermique et η le facteur de reproduction [48] (*cf* Annexe B).

Conclusion : Dans une cellule de type REP, les effets d'anisotropie viennent principalement de l'hydrogène. En traitant l'hydrogène de manière isotrope, l'anisotropie due aux autres noyaux induit des effets très faibles sur les différents facteurs (< 20 pcm). Par contre, la prise en compte de l'anisotropie due à l'hydrogène, même si la loi de choc est approchée, conduit à des effets pouvant atteindre 300 pcm. La recherche d'une meilleure modélisation de la loi de choc pour modéliser l'anisotropie due à l'hydrogène est essentielle pour le calcul des REL. Ceci permettra aussi de vérifier si la représentation actuelle en polynômes de Legendre donne des résultats suffisamment précis au regard des exigences attendues des méthodes déterministes.

D'autres modélisations ont été mises en place au fil des années et sont présentées brièvement dans les sections suivantes.

D'abord, nous présentons les méthodes exponentielles et de reconstruction par priorité. Elles conservent la représentation polynômiale et traitent surtout de la « non-négativité » de la section de transfert multigroupe⁸.

Ensuite, des méthodes plus novatrices qui s'affranchissent des polynômes de Legendre seront exposées.

8. Ces méthodes sont présentées à titre indicatif de ce qui existe dans l'état de l'art mais ne concernent pas directement les travaux de thèse pour des raisons qui seront explicitées.

UOX	MOC P0	Hydrogène anisotrope (pcm)			Hydrogène isotrope (pcm)		
		P1-P0	P3-P0	P5-P0	P1-P0	P3-P0	P5-P0
χ	1.00133	0	0	0	0	0	0
ϵ_{even}	1.03181	-9	-10	-10	-3	-3	-3
ϵ_{odd}	1.08820	9	-9	-9	-3	-3	-3
p	0.74637	-115	-55	-56	2	3	3
f	0.82241	202	193	198	2	3	4
η	1.88556	-2	-1	-1	0	0	0
k_{∞}	1.30126	85	117	121	-2	0	1
MOX 293 K	MOC P0	Hydrogène anisotrope (pcm)			Hydrogène isotrope (pcm)		
		P1-P0	P3-P0	P5-P0	P1-P0	P3-P0	P5-P0
χ	1.00159	0	0	0	0	0	0
ϵ_{even}	1.04703	3	-5	-5	-4	-4	-4
ϵ_{odd}	1.20102	132	42	43	-3	-3	-3
p	0.59780	-426	-206	-205	-5	-5	-6
f	0.92013	264	228	232	3	3	4
η	1.67166	-77	-50	-50	0	0	-1
k_{∞}	1.15810	-104	10	15	-10	-9	-9
MOX 873 K	MOC P0	Hydrogène anisotrope (pcm)			Hydrogène isotrope (pcm)		
		P1-P0	P3-P0	P5-P0	P1-P0	P3-P0	P5-P0
χ	1.00183	0	0	0	0	0	0
ϵ_{even}	1.06400	11	0	0	-2	-2	-2
ϵ_{odd}	1.31519	184	64	67	8	8	8
p	0.49568	-420	-178	-180	-23	-23	-25
f	0.95075	125	103	105	2	3	4
η	1.64375	-50	-29	-29	-1	-1	-1
k_{∞}	1.08600	-150	-39	-36	-15	-15	-16
V40 873 K	MOC P0	Hydrogène anisotrope (pcm)			Hydrogène isotrope (pcm)		
		P1-P0	P3-P0	P5-P0	P1-P0	P3-P0	P5-P0
χ	1.00221	0	0	0	0	0	0
ϵ_{even}	1.09661	11	1	1	-1	-1	-1
ϵ_{odd}	1.64587	210	60	67	11	12	13
p	0.35400	-332	-104	-111	-23	-23	-26
f	0.97137	44	35	37	1	1	2
η	1.61979	-33	-17	-18	-1	-1	-1
k_{∞}	1.00751	-100	-25	-24	-12	-12	-13

TAB. 4.1 – L'impact de l'anisotropie de l'hydrogène sur quatre cas d'études, décomposé sur les six facteurs.

4.3.2 Méthode exponentielle

Elle intervient à la suite des travaux de J. Morel et M. Landesman pour s'assurer de la positivité des sections développées sur les polynômes de Legendre pour l'équation du transport dans sa forme générale⁹. Ils proposaient d'ajuster les moments de Legendre de l'opérateur de transport de l'équation unidimensionnelle [49] en conservant les ordres zéro et un. Les autres termes de la matrice de diffusion sont ajustés par une méthode des moindres carrés aux points correspondants de la quadrature angulaire de Galerkin [50]. La fonctionnelle à minimiser est la suivante :

$$\Delta\sigma_{sl}^{g'\rightarrow g} = \sum_{l=0}^L (\sigma_{sl}^{g'\rightarrow g,*} - \sigma_{sl}^{g'\rightarrow g})^2 \quad (4.13)$$

σ_{sl}^* étant la section modifiée.

J. Dahl a étendu cette représentation de la section de transfert [51, 52] pour des cas multidimensionnels avec des quadratures de type ordonnées discrètes. Dans ce cadre, la fonctionnelle à minimiser est :

$$\Delta\sigma_{sl}^{g'\rightarrow g} = \left[\frac{(\sigma_{sl}^{g'\rightarrow g,*} - \sigma_{sl}^{g'\rightarrow g})(\sigma_{s0}^{g'\rightarrow g} - |\sigma_{sl}^{g'\rightarrow g}|)}{\sigma_{s0}^{g'\rightarrow g}} \right]^2 \quad (4.14)$$

Selon Dahl, l'ajout du terme $(\sigma_{s0} - |\sigma_{sl}|)/\sigma_{s0}$ laisse plus de liberté dans l'ajustement de moments qui seraient très faibles par rapport à l'ordre 0. Par ailleurs, pour réduire davantage les erreurs liées à la méthode des moindres carrés et améliorer l'efficacité de son solveur des moindres carrés, il implémente une méthode de maximum d'entropie en se basant sur les travaux de Moscalev sur la théorie de l'information [53] en remplaçant les moments de Legendre par des moments d'exponentielles :

$$\sigma_{sl}^{g'\rightarrow g} = \int_{-1}^{+1} P_l(\mu) \cdot \exp\left(\sum_{l'=0}^N \lambda_{l'}^{g'\rightarrow g} P_{l'}(\mu) d\mu\right) \quad (4.15)$$

Les coefficients $\lambda_{l'}^{g'\rightarrow g}$ sont calculés en préservant les moments initiaux et en résolvant un système d'équations non-linéaires. Cette méthode a été mise en place dans le système de codes PARTISN [54] et les résultats obtenus sont cohérents avec celui d'un code de référence stochastique. Cependant, même si la section multigroupe ne comporte plus de composante négative, elle peut être non nulle sur un ensemble de μ où elle devrait l'être, ce qui n'est toujours pas physiquement juste.

Cette représentation permet surtout de corriger le problème de flux angulaires négatifs (qui peuvent causer des instabilités numériques¹⁰) et d'utiliser des schémas spatiaux tels que le MOC avec une source exponentielle¹¹.

Cette méthode est très complexe et ne résoud pas complètement le problème de l'anisotropie multigroupe. Par ailleurs, le moment d'ordre un peut être négatif pour certains noyaux, dans

9. Equation de Fokker-Planck

10. Ce phénomène est rarement observé sur les cas de physique des réacteurs.

11. Dans le code APOLLO2, le MOC est implanté sous la forme de schéma constant $q_n^g(\mathbf{r}) = a$ ou linéaire $q_n^g(\mathbf{r}) = a + \mathbf{b} \cdot \mathbf{r}$. Le schéma exponentiel est de la forme $q_n^g(\mathbf{r}) = \exp(a + \mathbf{b} \cdot \mathbf{r})$

le cas de l'hydrogène par exemple, et conserver ce moment pour rechercher la positivité des sections n'est peut-être pas judicieux.

4.3.3 Méthode de reconstruction par priorité

Cette méthode a été appliquée par J. W. Kim et N. Z. Cho [55]. Leur objectif était de produire des sections différentielles multigroupes non-négatives à partir du développement en Legendre. Ils partent de la définition de l'équation du transport multigroupe à une dimension et obtiennent ainsi les expressions pour la source de diffusion et le flux scalaire. Ils adoptent ensuite une écriture qui combinent l'approche des volumes finis avec un principe de priorité des sections de transfert que nous détaillons. Les diverses modélisations qu'ils obtiennent sont données dans Tab. 4.2.

S_n Legendre Classique	Volumes Finis Sections Non-négatives
<i>Source de transfert multigroupe</i>	
$S_{Leg}^{g' \rightarrow g, n' \rightarrow n} = \sum_{l=0}^L (2l+1) P_l(\mu_n) \sigma_{s,l}^{g' \rightarrow g}$ $\cdot \frac{1}{2} \sum_{n'=1}^N \omega_{n'} P_l(\mu_{n'}) \phi^{g'}(\mu_{n'})$	$S_{New}^{g' \rightarrow g, n' \rightarrow n} = \Delta\Omega_{n'} \sigma_{s, Non-Neg}^{g' \rightarrow g, n' \rightarrow n} \phi^{g'}(\mu_{n'})$
<i>Flux scalaire</i>	
$\phi^g = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \omega_n \phi^g(\mu_n)$	$\phi^g = \frac{1}{4\pi} \sum_{n=1}^N \Delta\Omega_n \phi^g(\mu_n)$
<i>Poids</i>	
$\sum_{n=1}^N \omega_n = 2$	$\Delta\Omega_n = 2\pi\omega_n, \quad \sum_{n=1}^N \Delta\Omega_n = 4\pi$

TAB. 4.2 – Modélisations de Kim pour la source et le flux scalaire.

En imposant que seul le flux angulaire incident, $\phi^{g'}(\mu_{n'})$ vaille 1.0, ils calculent la source de diffusion pour $n' = 1, \dots, N/2$ (par symétrie en 1D) et donc obtiennent $S_{Leg}^{g' \rightarrow g, n' \rightarrow n} \cong S_{New}^{g' \rightarrow g, n' \rightarrow n} = \Delta\Omega_{n'} \sigma_{s, Non-Neg}^{g' \rightarrow g, n' \rightarrow n} \phi^{g'}(\mu_{n'})$ et de cette dernière, en déduisent que :

$$\sigma_{s, Non-Neg}^{g' \rightarrow g, n' \rightarrow n} \cong \frac{S_{Leg}^{g' \rightarrow g, n' \rightarrow n}}{\Delta\Omega_{n'} \phi^{g'}(\mu_{n'})} \quad (4.16)$$

Néanmoins, $S_{Leg}^{g' \rightarrow g, n' \rightarrow n}$ étant développée sur une base polynômiale tronquée, elle n'est pas strictement non-négative et de ce fait, ils classent les $\sigma_s^{g' \rightarrow g, n' \rightarrow n}$ par ordre de grandeur :

$$\sigma_{s,p=1}^{g' \rightarrow g, n' \rightarrow n} > \sigma_{s,p=2}^{g' \rightarrow g, n' \rightarrow n} > \dots > \sigma_{s,p=N}^{g' \rightarrow g, n' \rightarrow n} \quad (4.17)$$

p étant l'ordre de priorité. Par ailleurs, une condition que doit satisfaire cette méthode est $\sigma_{s, Non-Neg}^{g' \rightarrow g, n' \rightarrow n} = \sigma_{s, Non-Neg}^{g' \rightarrow g, n \rightarrow n'}$. Ceci est vraie suite à l'hypothèse initiale que seul le flux angulaire

incident est non-nul et vaut 1.0. L'ordre de priorité établi, ils imposent des règles de sélection pour les sections de transfert :

$$\begin{aligned}
\sigma_{s,Non-Neg}^{g' \rightarrow g, n' \rightarrow n} &= \sigma_{s,Non-Neg}^{g' \rightarrow g, n \rightarrow n'}, \text{ pour } n_{(k)} < n' \\
\sigma_{s,Non-Neg}^{g' \rightarrow g, n' \rightarrow n} &= \sigma_{s,p}^{g' \rightarrow g, n' \rightarrow n}, \text{ pour } \sigma_{s,p}^{g' \rightarrow g, n' \rightarrow n} > 0 \\
\sigma_{s,Non-Neg}^{g' \rightarrow g, n' \rightarrow n} &= \sigma_{s,Non-Neg}^{g' \rightarrow g, n' \rightarrow n-1}, \text{ pour } \sigma_{s,p}^{g' \rightarrow g, n' \rightarrow n} \leq 0
\end{aligned} \tag{4.18}$$

Finalement, ils imposent aussi la conservation du moment d'ordre 0 via la relation suivante :

$$\sum_{n'=1}^{n'-1} \sigma_{s,Non-Neg}^{g' \rightarrow g, n' \rightarrow n} \Delta \Omega_{n'} + f_{adj} \sum_{n'=n'}^N \sigma_{s,Non-Neg}^{g' \rightarrow g, n' \rightarrow n} \Delta \Omega_{n'} = \sigma_{s,0}^{g' \rightarrow g} \tag{4.19}$$

f_{adj} étant un facteur de normalisation. La méthode a été étendue à deux et trois dimensions [56, 57]. Cette méthode vise principalement à conserver la représentation polynômiale et cherche surtout la non-négativité des sections en employant une sélection numérique. Ce n'est pas notre objectif principal dans ce travail.

4.3.4 Méthode directe - *Exact Kernel Method*

Cette méthode consiste à utiliser les sections de transfert multigroupes dites *exactes* pour le calcul de la source de diffusion. Elle évite le développement de la section de transfert en polynômes de Legendre et propose d'insérer directement la section doublement différentielle multigroupe $\sigma_s^{g' \rightarrow g}(\Omega' \rightarrow \Omega)$ dans le code de transport de type ordonnées discrètes. Elle a été proposée par J. P. Odom [58, 59].

Ce dernier a implémenté cette méthode pour la diffusion élastique et a modifié en conséquence les systèmes de codes dans ses travaux de thèse. Cette méthode est très appropriée pour traiter les sections fortement anisotropes. Cependant, un inconvénient majeur est de calculer la section doublement différentielle multigroupe pour chaque transfert d'énergie de $g' \rightarrow g$ et aussi de chaque angle solide $\Omega_{n'}$ à Ω_n appartenant à la quadrature angulaire choisie. Par ailleurs, cette méthode pose aussi le problème de stockage de ces sections pour chaque voie de sortie possible (élastique, inélastique, continuum, ... etc). D'autre part, si l'on considère un cas avec plusieurs noyaux qui ont chacun des voies de sortie différentes, une telle méthode nécessiterait le calcul et le stockage de toutes les sections correspondantes.

4.3.5 Méthodes de transformation du noyau de diffusion

Ces méthodes ont été développées initialement par A. Takahashi [60] en collaboration avec J. Yamamoto [61] puis étendues avec D. Rusch [62] du centre de recherche de Karlsruhe. Ces méthodes consistent à transformer le noyau de diffusion, c'est-à-dire les sections multigroupes doublement différentielles, en faisant apparaître la distribution delta de Dirac pour chaque type de collision. Cette dernière permet, de ce fait, de séparer les variables énergétiques et angulaires

et ensuite de ré-écrire la source de diffusion dans l'équation du transport multigroupe. Nous présentons succinctement ces méthodes appelées I_i et I^* en utilisant les notations des auteurs que nous expliciterons (ceci donne un sens au nom de leurs méthodes).

4.3.5.1 Méthode I_i

Le noyau de diffusion pour chaque interaction i (élastique ou inélastique discret), développé avec le delta de Dirac, s'écrit de la manière suivante :

$$\sigma_i^{g' \rightarrow g}(\mathbf{\Omega}' \rightarrow \mathbf{\Omega}) = \frac{1}{2\pi} \sigma_i^{g' \rightarrow g,0} \cdot \delta(\mu_0 - \mu_i^*) \quad (4.20)$$

μ_0 correspond au cosinus de l'angle entre la direction incidente du neutron $\mathbf{\Omega}'$ et la direction de sortie $\mathbf{\Omega}$ et s'écrit¹²

$$\mu_0 = \mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{\Omega} = \mu' \mu + \sqrt{1 - \mu'^2} \sqrt{1 - \mu^2} \cos(\varphi - \varphi') \quad (4.21)$$

La présence de la distribution δ contraint ainsi la valeur de μ_0 à un seul angle de sortie μ_i^* qui est défini par la cinématique. La section de transfert notée, $\sigma_i^{g' \rightarrow g,0}$, est égale à $\sigma_i(E_{g'}, \mu_{ci}^*) \cdot f_i(E_{g'})$ où

- μ_{ci}^* est le cosinus de l'angle de diffusion dans le CM.
- $\sigma_i(E_{g'}, \mu_{ci}^*)$ est la section différentielle qui s'obtient à partir des fichiers d'évaluation.
- $f_i(E_{g'})$ est le jacobien pour une interaction de type i pour une énergie incidente $E_{g'}$. Elle correspond à la transformation suivante :

$$f_i(E') = \left| \frac{\partial \mu_0}{\partial E} \right| \cdot \left| \frac{\partial \mu_c}{\partial \mu_0} \right| \quad (4.22)$$

(E' et E sont les énergies « continues » incidente et de sortie du neutron respectivement). Dans le cadre des réactions élastiques et inélastiques discrètes, ces dérivées peuvent être calculées à partir des relations de la cinématique décrites dans le chapitre précédent et donc f peut s'exprimer ainsi :

$$f_i(E') = \frac{2}{\left[(1 - \alpha) E' \sqrt{1 - \frac{A+1}{A} \frac{Q_i}{E'}} \right]} \quad (4.23)$$

De ce fait, la source de diffusion s'écrit de la manière suivante :

$$\sum_{g'} \int_{-1}^{+1} \sigma_i^{g' \rightarrow g,0} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \delta(\mu_0 - \mu_i^*) \phi^{g'}(\mathbf{r}, \mu', \varphi') d\varphi' d\mu' \quad (4.24)$$

Cette expression est simplifiée suite à des changements de variables et l'intégration sur φ' . Nous donnons ici l'expression finale qui s'écrit ainsi :

$$\sum_{g'} \int_{-1}^{+1} \sigma_i^{g' \rightarrow g,0} I_i(\mu', \mu) \phi^{g'}(\mathbf{r}, \mu', \varphi + \Delta_i^*) d\mu' \quad (4.25)$$

où

12. $\mathbf{\Omega}$ est fonction de μ et φ , le cosinus de l'angle polaire et l'angle azimutal respectivement.

- $I_i(\mu', \mu)$ représente les transferts angulaires et est défini par :

$$I_i(\mu', \mu) = \frac{1}{\pi \sqrt{1 - \mu^2 - \mu'^2 - \mu_i^{*2} + 2\mu\mu'\mu_i^*}}, \text{ pour } \beta_1 < \mu < \beta_2$$

$$= 0, \text{ pour } \mu \leq \beta_1 \text{ ou } \mu \geq \beta_2 \text{ et } |\mu|, |\mu'|, |\mu_i^*| \neq 1$$

$$\beta_1 = \mu'\mu_i^* - \sqrt{1 - \mu'^2} \sqrt{1 - \mu_i^{*2}} \text{ et } \beta_2 = \mu'\mu_i^* + \sqrt{1 - \mu'^2} \sqrt{1 - \mu_i^{*2}}$$

- Δ_i^* est un changement de phase azimutale et s'exprime comme suit :

$$\Delta_i^* = \arccos \left[\frac{\mu_i^* - \mu\mu'}{\sqrt{1 - \mu'^2} \sqrt{1 - \mu^2}} \right], |\mu|, |\mu'|, |\mu_i^*| \neq 1$$

$I_i(\mu', \mu)$ est une distribution pour la probabilité qu'un neutron incident d'angle μ' ¹³ subisse un choc de type i (pour rappel élastique ou inélastique discret) et ressort avec un angle μ qui impose un angle de μ_i^* dans le référentiel du laboratoire. Cette distribution prend en compte la transformation CM-LAB.

La méthode I_i représente rigoureusement les transferts angulaires car la loi de choc est traitée sans aucune approximation. Comme le soulignent les auteurs, la distribution I_i contraint l'angle de sortie μ , ce qui n'est pas le cas de l'approximation polynômiale qui utilise le support complet de $-1 \leq \mu \leq +1$.

Par ailleurs, cette méthode a été implémentée dans un code de transport S_n . Dans les années 70, le système de code ANISN [63] permettait de traiter l'anisotropie du choc dans les codes de transport. Cependant, à l'époque, les codes traitaient en amont les données nucléaires avant d'amorcer le calcul de transport. De ce fait, un nouveau système de codes, NITRAN [64] a été développé pour implémenter cette méthode en géométrie 1D sphérique.

4.3.5.2 Méthode I^*

La méthode précédente permettait de traiter les chocs élastiques et inélastiques discrets. Ces travaux qui ont été menés dans le cadre de la fusion nucléaire s'intéressaient aussi aux autres voies de sortie à des énergies plus élevées. De ce fait, la méthode I_i devait être généralisée afin de prendre en compte de manière plus efficace les effets d'anisotropie. L'idée est d'écrire un opérateur qui traduit le fait que le cosinus de l'angle entre Ω' et Ω soit égal au cosinus de l'angle de diffusion dans le laboratoire :

$$\sigma_s(E' \rightarrow E, \mu_0) = \int_{-1}^{+1} \sigma_s(E' \rightarrow E, \mu^*) \cdot \delta(\mu_0 - \mu^*) d\mu^* \quad (4.26)$$

L'objectif de cette méthode est de réduire les variables angulaires à celles qui sont pertinentes : μ^* , le cosinus de l'angle de diffusion dans le laboratoire. La source de diffusion multigroupe

13. par abus de langage, le mot angle est utilisé pour les cosinus des angles polaires de Ω .

s'exprime à partir de là de la manière suivante :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\pi} \sum_{g'} \int_{-1}^{+1} d\mu' \int_0^{2\pi} d\varphi' \sigma_s^{g' \rightarrow g}(\mu_0) \phi^{g'}(\mathbf{r}, \mu', \varphi') \\ &= \frac{1}{2\pi} \sum_{g'} \int_{-1}^{+1} d\mu' \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_{-1}^{+1} d\mu^* \sigma_s^{g' \rightarrow g}(\mu^*) \cdot \delta(\mu_0 - \mu^*) \phi^{g'}(\mathbf{r}, \mu', \varphi') \end{aligned} \quad (4.27)$$

Après un changement de variable et l'intégration sur φ' , cette expression se simplifie en :

$$\frac{1}{2\pi} \sum_{g'} \int_{-1}^{+1} d\mu' \int_{\beta_1^*}^{\beta_2^*} d\mu^* \sigma_s^{g' \rightarrow g}(\mu^*) I^*(\mu^*, \mu', \mu) \phi^{g'}(\mathbf{r}, \mu', \varphi + \Delta^*) \quad (4.28)$$

où

- $I^*(\mu^*, \mu', \mu)$ représente la probabilité des transferts angulaires et est défini par :

$$\begin{aligned} I_i(\mu', \mu) &= \frac{1}{\pi \sqrt{1 - \mu^2 - \mu'^2 - \mu^{*2} + 2\mu\mu'\mu^*}}, \text{ pour } \beta_1^* < \mu^* < \beta_2^* \\ &= 0, \text{ pour } \mu^* \leq \beta_1^* \text{ ou } \mu^* \geq \beta_2^* \end{aligned}$$

$$\beta_1^* = \mu'\mu - \sqrt{1 - \mu'^2} \sqrt{1 - \mu^2} \text{ et } \beta_2^* = \mu'\mu + \sqrt{1 - \mu'^2} \sqrt{1 - \mu^2}$$

- Δ^* est un changement de phase azimutale et s'exprime comme suit :

$$\Delta^* = \arccos \left[\frac{\mu^* - \mu\mu'}{\sqrt{1 - \mu'^2} \sqrt{1 - \mu^2}} \right]$$

Dans cette méthode par comparaison avec la méthode I_i , c'est l'angle de diffusion dans le laboratoire μ^* qui est contraint sur un sous-intervalle dans $[-1, +1]$. D'autre part, la méthode I^* n'est pas liée à la cinématique et est plus générale que la précédente.

Dans [65], l'auteur souligne les difficultés à mettre en place une telle méthode de manière numérique. Elle a finalement été implémentée sous la forme de NITRAN- I^* [61]. Par ailleurs, J. Ligou et P. Miazza ont proposé des améliorations numériques dans [66] et ont étendu la méthode pour le transport des particules chargées qui présentent de fortes anisotropies dans [67].

Le principal défaut de ces méthodes I_i et I^* réside dans l'implémentation car elles introduisent un déphasage Δ par rapport à la direction considérée. Avec une discrétisation angulaire type S_n , les quadratures sont déjà fixées et il se peut qu'il n'y ait pas de direction qui existe pour le déphasage calculé.

4.3.6 Représentation moyenne par volume

Dans [68], Borsari, Fioresi et Trombetti proposent d'utiliser une représentation constante par morceaux de la sphère unité pour modéliser la source de transfert anisotrope. Ils considèrent

de ce fait des quadratures angulaires pour les ordonnées discrètes et supposent que chaque « morceau » est l'élément $\Delta\Omega_n$ qui entoure un noeud n . Ces partitions de la sphère unité ne se chevauchent pas et les sections de transfert d'un élément n' à n se ramènent à :

$$\sigma_s^{g' \rightarrow g, n' \rightarrow n} = \int_{\Delta\Omega_{n'}} \frac{d^2\Omega'}{\Delta\Omega_{n'}} \int_{\Delta\Omega_n} \frac{d^2\Omega}{\Delta\Omega_n} \sigma_s^{g' \rightarrow g}(\Omega' \cdot \Omega) \quad (4.29)$$

Leur publication met en exergue toute la mécanique numérique nécessaire mais très complexe pour le calcul de la source de diffusion avec des flux constants par morceau et des sections de transfert moyennées sur une partition de la sphère unité. Une partie importante de leur travail est cependant basée sur l'hypothèse que les sections de transfert sont aussi constantes par morceau, sous la forme :

$$\sigma_s^{g' \rightarrow g}(\mu_{LAB}) = \int_{\Delta\mu_{LAB}} \sigma_s^{g' \rightarrow g}(\mu') d\mu' \quad (4.30)$$

Cependant, l'évaluation de ces sections « moyennes par morceaux » n'est pas explicitée. D'autre part, la méthode d'intégration de la source se restreint aux quadratures « produit » pour les ordonnées discrètes et ne peut s'appliquer aux quadratures « level-symmetric ». Ces remarques nous amènent aux travaux qui seront décrits dans le prochain paragraphe.

J. M. Del Grande et K. Mathews se sont intéressés à la manière de calculer des sections de transferts multigroupes moyennées [69]. Leur méthode consistait à « paver » la sphère avec des éléments ou des volumes finis en forme de quadrilatères et de calculer les sections de transferts moyennes multigroupes d'un volume à un autre par un processus de Monte Carlo. Le flux angulaire et la section de transfert qu'ils calculent s'écrivent respectivement :

$$\phi_n^g = \int_{\Delta\Omega_n} d^2\Omega \int_{\Delta E_g} dE \phi(E, \Omega) \quad (4.31)$$

et

$$\sigma_s^{g' \rightarrow g, n' \rightarrow n} = \frac{\int_{\Delta\Omega_{n'}} d^2\Omega' \int_{\Delta\Omega_n} d^2\Omega \int_{\Delta E_{g'}} dE' \int_{\Delta E_g} dE \sigma_s(E' \rightarrow E, \Omega' \cdot \Omega) \phi(E')}{\Delta\Omega_{n'} \int_{\Delta E_{g'}} dE' \phi(E')} \quad (4.32)$$

Cette méthode permet de prendre en compte le support angulaire complet sur la sphère des directions. Cependant, le calcul de l'intégrale sextuple (2×2 en angle, et 2 en énergie) par simulation Monte Carlo est très coûteux en temps. Néanmoins, ces sections peuvent être calculées une seule fois à une discrétisation de la sphère donnée et tabulées pour être ré-utilisées.

4.3.7 Section de transfert par morceaux

Cette section décrit les travaux qui ont été menés pour mettre en place une représentation constante par morceaux de la section de transfert. Dans le papier de Brockmann [65], l'auteur

relève une méthode proposée par S. Gerstl [70] pour développer les flux angulaires et la source externe de l'équation du transport sur une base polynômiale arbitraire sur N sous-intervalles arbitraires de $[-1, +1]$ ¹⁴ de telle sorte que le flux angulaire s'écrit à une dimension :

$$\phi(x, E, \mu) = \sum_{n=1}^N \phi_n(x, E, \mu) = \sum_{n=1}^N \phi(x, E, \mu) [H(\mu - \mu_{n-1}) - H(\mu - \mu_n)] \quad (4.33)$$

H est la distribution de Heaviside et μ la variable angulaire. Un flux de cette forme peut être discontinu en angle. La même décomposition peut s'appliquer aussi pour la section de transfert :

$$\sigma_s(x, E' \rightarrow E, \mu_{LAB}) = \sum_{k=1}^K \sigma_s(x, E' \rightarrow E, \mu_{LAB}) [H(\mu_{LAB} - \mu_{LAB,k-1}) - H(\mu_{LAB} - \mu_{LAB,k})] \quad (4.34)$$

Sur chaque $[\mu_{n-1}, \mu_n]$ pour le flux ou $[\mu_{LAB,k-1}, \mu_{LAB,k}]$ pour la section, il est possible de développer ces grandeurs sur une base de polynômes orthogonaux judicieusement choisie pour simplifier les équations. Une possibilité est d'utiliser des polynômes de Legendre « partial-range » qui sont définis par :

$$P_{n,l}(\mu) = P_l(\alpha_n \mu + \beta_n) [H(\mu - \mu_{n-1}) - H(\mu - \mu_n)] \quad (4.35)$$

où $\alpha_n = 2/(\mu_n - \mu_{n-1})$ et $\beta_n = (\mu_n + \mu_{n-1})/(\mu_n - \mu_{n-1})$ sont calculés tel que le $P_{n,l}(\mu)$ soit orthogonal sur $]\mu_{n-1}, \mu_n[$. Le flux et la section de transfert s'expriment respectivement :

$$\phi(x, E, \mu) = \sum_{n=1}^N \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2\pi(\mu_n - \mu_{n-1})} \phi_{n,l}(x, E) P_{n,l}(\mu) \quad (4.36)$$

et

$$\sigma_s(x, E' \rightarrow E, \mu_{LAB}) = \sum_{k=1}^K \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2\pi(\mu_{LAB,k} - \mu_{LAB,k-1})} \sigma_{s,(k,l)}(x, E' \rightarrow E) P_{k,l}(\mu_{LAB}) \quad (4.37)$$

Cette méthode est très adaptée pour représenter les sections de transfert multigroupes fortement anisotropes comme le démontre [72] où les auteurs étudient le cas de la section de transfert de l'eau. Ils s'intéressent au transfert de (3.3287, 3.0119 MeV) à (2.7253, 2.4660 MeV). Ce dernier possède deux gammes de diffusion possibles : $[-1, 0.2010]$ pour l'oxygène et $[0.8607, 0.9510]$ dû à l'hydrogène. Ils comparent une représentation classique à l'ordre 8 (donc neuf coefficients) et deux polynômes d'ordre 3 et 4 pour l'oxygène et l'hydrogène respectivement (neuf coefficients aussi). Ils concluent que l'approximation $P_{n,l}$ est nettement supérieure au P_l standard (*cf* Fig. 4.10¹⁵). Cependant, cette méthode n'a jamais été appliquée due à la complexité de sa mise en œuvre dans la résolution de l'équation de Boltzmann.

Une autre représentation de la section par morceaux est proposée par D. Gerts et K. Matthews dans [73, 74]. Ces travaux reprennent essentiellement la même modélisation que Del

14. Méthode initialement de J. Yvon [71].

15. Figure qui provient de [72]

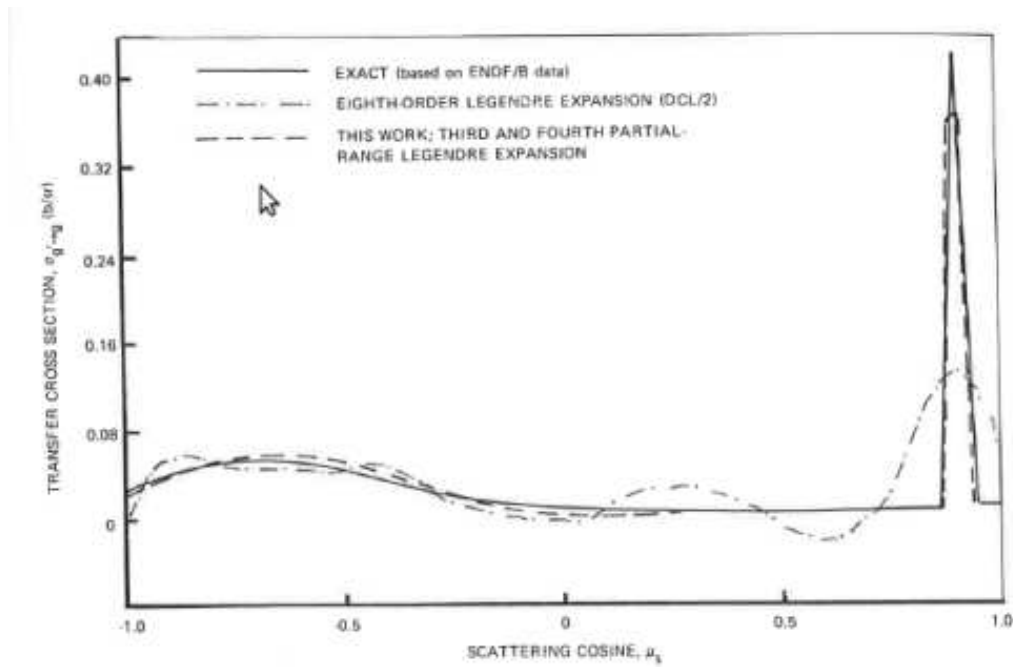


FIG. 4.10 – Section de transfert de l'eau et comparaison des méthodes.

Grande que l'on a explicitée dans la section précédente mais en changeant la méthodologie pour calculer les sections de transfert. En effet, la méthode d'intégration par Monte Carlo pour l'intégrale sextuple n'est pas pratique. Les travaux de Gerts consistaient à calculer de manière plus efficace cette intégrale.

Il combine l'approche de la méthode I^* avec la méthode des volumes finis de Del Grande. En effet dans la méthode I^* , Takahashi écrit la section de transfert en faisant apparaître une distribution de Dirac (voir l'Eq. (4.26)). Ensuite, il adopte le formalisme de Del Grande pour décrire les transferts en angle :

$$\begin{aligned}
 \sigma_s^{g' \rightarrow g, n' \rightarrow n} &= \frac{\int_{\Delta\Omega_{n'}} d^2\Omega' \int_{\Delta\Omega_n} d^2\Omega \int_{\Delta E_{g'}} dE' \int_{\Delta E_g} dE \sigma_s(E' \rightarrow E, \mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{\Omega}) \phi(E')}{\Delta\Omega_{n'} \int_{\Delta E_{g'}} dE' \phi(E')} \\
 &= \frac{\int_{\Delta E_{g'}} dE' \int_{\Delta E_g} dE \int_{-1}^{+1} d\mu_{LAB} \sigma_s(E' \rightarrow E, \mu_{LAB}) \phi(E') \int_{\Delta\Omega_{n'}} d^2\Omega' \int_{\Delta\Omega_n} d^2\Omega \delta(\mu_{LAB} - \mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{\Omega})}{\int_{\Delta E_{g'}} dE' \phi(E') \Delta\Omega_{n'}} \\
 &= \frac{\int_{\Delta E_{g'}} dE' \int_{\Delta E_g} dE \int_{-1}^{+1} d\mu_{LAB} \sigma_s(E' \rightarrow E, \mu_{LAB}) \phi(E')}{\int_{\Delta E_{g'}} dE' \phi(E')} h^{n' \rightarrow n}(\mu_{LAB}) \quad (4.38)
 \end{aligned}$$

Par ailleurs, Gerts introduit un opérateur de diffusion multigroupe ($S^{g' \rightarrow g}$) qu'il définit comme

suit, le \cdot étant une fonction de μ ($= \mu_{LAB}$) :

$$S^{g' \rightarrow g} = \frac{\int_{-1}^{+1} d\mu \int_{\Delta E_{g'}} dE' \int_{\Delta E_g} dE \sigma_s(E' \rightarrow E, \mu) \phi(E')}{\int_{\Delta E_{g'}} dE' \phi(E')} \quad (4.39)$$

La section de transfert multigroupe d'un pavé n' à n , ou section de transfert « *bin-to-bin* » dans les termes de l'auteur est ainsi simplement définie comme :

$$\sigma_s^{g' \rightarrow g, n' \rightarrow n} = S^{g' \rightarrow g} h^{n' \rightarrow n}(\mu) \quad (4.40)$$

$h^{n' \rightarrow n}$ représente la probabilité pour, qu'en moyenne, une direction de $\Delta\Omega_{n'}$ fasse un angle de cosinus $\tilde{\mu}$ avec une direction de $\Delta\Omega_n$. D'autre part, les moments de Legendre et les sections de transfert moyennes par morceaux s'écrivent respectivement :

$$\sigma_{s_l}^{g' \rightarrow g} = S^{g' \rightarrow g} P_l(\mu) \quad (4.41)$$

et

$$\sigma_{s,k}^{g' \rightarrow g} = S^{g' \rightarrow g} \frac{H(\mu_k - \mu)H(\mu - \mu_{k-1})}{\mu_k - \mu_{k-1}} \quad (4.42)$$

En discrétisant l'intégrale sur μ sur $[-1, +1]$ dans l'Eq.(4.40) en K sous-intervalles, ceci revient à écrire la section de transfert :

$$\sigma_s^{g' \rightarrow g, n' \rightarrow n} = \sum_{k=1}^K S^{g' \rightarrow g} \frac{H(\mu_k - \mu)H(\mu - \mu_{k-1})}{\mu_k - \mu_{k-1}} h^{n' \rightarrow n}(\mu) \quad (4.43)$$

L'étape suivante consiste à calculer l'intégrale de h sur chaque morceaux et obtenir ainsi son approximation constante par morceaux :

$$h_k^{n' \rightarrow n} = \int_{\mu_{k-1}}^{\mu_k} d\mu h^{n' \rightarrow n}(\mu) \quad (4.44)$$

Finalement, parce que $h_k^{n' \rightarrow n}$ étant constant, on peut le sortir de l'intégrale et simplifier l'écriture de l'Eq.(4.43) :

$$S^{g' \rightarrow g} \frac{H(\mu_k - \mu)H(\mu - \mu_{k-1})}{\mu_k - \mu_{k-1}} h^{n' \rightarrow n}(\mu) \approx h_k^{n' \rightarrow n} S^{g' \rightarrow g} \frac{H(\mu_k - \mu)H(\mu - \mu_{k-1})}{\mu_k - \mu_{k-1}} \quad (4.45)$$

Ceci nous amène donc à un développement de la section de transfert qui s'écrit :

$$\sigma_s^{g' \rightarrow g, n' \rightarrow n} = \sum_{k=1}^K \sigma_{s,k}^{g' \rightarrow g} h_k^{n' \rightarrow n} \quad (4.46)$$

qui correspond ainsi à l'approximation numérique de :

$$\sigma_s^{g' \rightarrow g, n' \rightarrow n} = \int_{-1}^{+1} d\mu h^{n' \rightarrow n}(\mu) \sigma_s^{g' \rightarrow g}(\mu) \quad (4.47)$$

Les travaux de thèse de Gerts sont portés sur le calcul des sections moyennes par morceaux en intégrant numériquement ou formellement les lois de choc qui proviennent des fichiers ENDF.

4.4 Conclusion

Le but de ce travail est de modéliser la section de transfert multigroupe de la manière la plus fidèle et la plus physiquement acceptable dans le cadre des calculs de physique des réacteurs. Les sections de transfert multigroupes doivent donc être modélisées telle qu'elles soient :

- non-nulles sur un intervalle $[a, b]$ correspondant au plus proche à celui de la section transfert exacte,
- représentent le plus fidèlement qui soit la forme piquée de la section de transfert exacte,
- positives.

La méthode de résolution doit être adaptée pour les sections multigroupes qui sont à support fini. De ce fait, la discrétisation angulaire de l'équation du transport sera primordiale pour prendre en compte les transferts angulaires non nuls sur une plage très faible en angle. La méthode S_n classique est de ce fait limité comme il sera montré dans la partie suivante. La méthode de volumes finis en angle comme le décrivent Borsari et Del Grande est plus appropriée.

Cette représentation choisie, elle conditionnera la forme discrétisée de la source de diffusion et ainsi que la modélisation de la section de transfert. La méthode de D. Gerts sera ensuite adoptée pour sa relative simplicité d'implémentation par rapport aux autres modélisations décrites dans cette partie.

Troisième partie

Développement et validation de
méthodes

Méthode des volumes finis en angle

Dans le but de modéliser de manière plus fidèle la section de transfert multigroupe, un aspect important est la forme de la source de diffusion traitée pour laquelle la méthode de discrétisation angulaire utilisée pour la résolution de l'équation du transport doit être adaptée. Par exemple, une approche S_n ou P_n ne mène pas à la même modélisation de la source de diffusion¹.

Dans ce chapitre, la méthode des volumes finis en angle sera développée, implémentée et validée [75].

5.1 Analyse du support angulaire

Comme constaté dans la partie précédente, les transferts d'un groupe d'énergie à un autre sont restreints sur un intervalle en μ_{LAB} très petit si les groupes sont fins en léthargie. Si une quadrature angulaire trop faible est utilisée, certaines particules risquent de ne jamais diffuser d'un groupe d'énergie à un autre. Ceci est d'autant plus apparent si on utilise un balayage angulaire de type ordonnée discrète.

L'angle solide Ω est défini comme suit (cf Fig. 5.1 - $\mu = \cos \theta$) :

$$\Omega = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \varphi \\ \sin \theta \sin \varphi \\ \cos \theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{1 - \mu^2} \cos \varphi \\ \sqrt{1 - \mu^2} \sin \varphi \\ \mu \end{pmatrix}$$

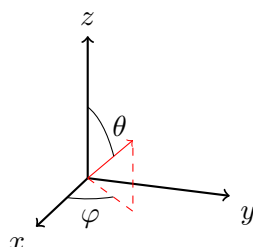


FIG. 5.1 – Définition de l'angle polaire et azimutal pour un angle solide Ω .

1. À une dimension, les modélisations P_{N-1} et S_N (Gauss-Legendre) sont équivalentes.

De ce fait, le produit scalaire entre deux directions $\boldsymbol{\Omega}'$ et $\boldsymbol{\Omega}$ s'exprime comme suit :

$$\mu_{LAB} = \boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega} = \sqrt{1 - \mu'^2} \sqrt{1 - \mu^2} \cos(\varphi - \varphi') + \mu' \mu \quad (5.1)$$

Dans la partie précédente, la loi de choc dans le référentiel du laboratoire pour les chocs élastiques a été dérivée et s'écrit (*cf* l'Eq. (3.28)) :

$$\mu_{LAB} = \frac{1}{2} \left[(A + 1) \sqrt{\frac{E' - \Delta E}{E'}} - (A - 1) \sqrt{\frac{E'}{E' - \Delta E}} \right] \quad (5.2)$$

où ΔE est l'énergie que perd le neutron lors de la diffusion. Un développement limité à l'ordre 1 de μ_{LAB} autour de $\Delta E \approx 0$ permet d'écrire le cosinus de l'angle de déviation, θ pour les petites pertes d'énergie :

$$\mu_{LAB} = 1 - A \frac{\Delta E}{E'} = 1 - \frac{\theta^2}{2} \quad (5.3)$$

et donc,

$$\theta_{LAB} \approx \sqrt{\frac{2A}{E'} \Delta E} \quad (5.4)$$

Dans le cadre des groupes fins, les angles de déviation pour les diffusions du groupe $g' \rightarrow g'$ et $g' \rightarrow g' + 1$ seront très faibles. Dans le premier cas de figure, pour les diffusions $g' \rightarrow g'$, le plus grand angle de déviation (donc pour μ_{LAB} minimal) est obtenu quand un neutron diffuse de l'énergie de la borne supérieure du groupe à l'énergie de la borne inférieure du groupe g' , c'est-à-dire $\Delta E = \Delta E_{g'}$. Dans la méthode aux ordonnées discrètes, les angles de déviation possibles sont fixés par la quadrature angulaire choisie (réunion de tous les produits scalaires $\boldsymbol{\Omega}_{n'} \cdot \boldsymbol{\Omega}_n$ définis par Eq. (5.1)). Pour s'assurer d'obtenir des diffusions dans un même groupe, deux directions n' et n de la quadrature doivent être suffisamment proches pour que l'angle de déviation entre elles, $\theta(\boldsymbol{\Omega}_{n'} \rightarrow \boldsymbol{\Omega}_n)$, vérifie :

$$\theta(\boldsymbol{\Omega}_{n'} \rightarrow \boldsymbol{\Omega}_n) \leq \sqrt{\frac{2A}{E'} \Delta E_{g'}}, \forall n, n' \quad (5.5)$$

Dans [76], le choix d'une quadrature angulaire en ordonnées discrètes pour les transferts anisotropes est décrit de manière rigoureuse. Si on considère les quadratures symétriques par niveau pour les ordonnées discrètes, les cosinus maximums de l'angle de déviation entre les directions possibles², $\mu_{LAB,max}$, sont donnés dans Tab. 5.1.

Au vu du chapitre précédent, la section de transfert est fortement anisotrope et donc non-nulle sur un intervalle très faible en μ . Dans Tab. 5.1, en supposant l'utilisation d'une quadrature S_{16} , le cosinus maximum est de 0.99072. En supposant que la loi de choc exacte puisse être utilisée dans les codes de calcul déterministes avec le maillage SHEM, 89 groupes sur les 281 ont un cosinus de l'angle de déviation plus grand que 0.99072. De ce fait, pour tous ces groupes, les transferts de g dans g ne sont pas assurés par ce qui est qualifié de manque de support angulaire.

2. Ce qui correspond aux deux directions les plus proches dans la quadrature angulaire.

Ordre S_n	No. de directions dans l'hémisphère	$\mu_{LAB,max}$
2	4	0.77777
4	12	0.75497
6	24	0.88401
8	40	0.95613
12	84	0.98258
16	144	0.99072

TAB. 5.1 – Tableau résumant les propriétés des quadratures « level-symmetric ».

Si le maillage énergétique est suffisamment raffiné, il est possible de trouver un minimum des angles de diffusion d'une ordonnée à une autre qui ne respecte pas la condition de Eq. (5.5) et fait que l'on perd de l'information par manque de support angulaire.

Dans le cas de la diffusion de $g' \rightarrow g' + 1$, le même type de raisonnement permet d'écrire $\Delta E = \Delta E_{g'} + \Delta E_{g'+1}$. Cependant, cette diffusion est moins contraignante sur la quadrature angulaire, même s'il est toujours possible de trouver un maillage énergétique assez fin pour que la quadrature angulaire ne soit pas suffisante pour garantir les diffusions $g' \rightarrow g' + 1$.

5.2 Formulation volumes finis de l'équation de Boltzmann

Dans le but d'améliorer les modélisations de la source de diffusion, on se propose de changer la représentation de la section de transfert multigroupe car il est très possible qu'un mauvais traitement de la loi de choc puisse avoir un effet significatif sur le calcul du flux. Contrairement à la loi exacte, la modélisation actuelle de la loi de choc en polynômes de Legendre est toujours non-nulle sur tout l'intervalle $[-1, +1]$. Une représentation plus fidèle signifie une loi non-nulle uniquement sur l'intervalle où la loi exacte l'est. La méthode collocative classique comme la méthode des ordonnées discrètes n'est pas adaptée pour traiter ce type de modélisation de la section de transfert car elle n'est pas conservative comme démontré ci-dessus.

Une méthode de volumes finis en angle a été retenu à la place. Cette méthode simple est fortement utilisée en transfert thermique et dans le domaine de la mécanique des fluides, justement parce qu'elle est conservative.

Un solveur basé sur une méthode de volumes finis en angle a été mis en place afin de pouvoir utiliser une autre modélisation de la source de diffusion. En effet, la section différentielle de transfert sera représentée sur une base de fonctions continues par morceaux sur des sous-intervalles de l'intervalle $[-1, +1]$ en μ .

5.2.1 Méthode

Dans la méthode des volumes finis, la sphère unité est partitionnée en « pavés » $\Delta\Omega_n$ qui ne se chevauchent pas, puis on intègre l'équation du transport multigroupe sur ces pavés par :

$$\int_{\Delta\Omega_n} d^2\Omega (\Omega \cdot \nabla + \Sigma_t^g(\mathbf{r})) \phi^g(\mathbf{r}, \Omega) = \frac{1}{2\pi} \sum_{g'=1}^G \int_{\Delta\Omega_n} d^2\Omega \int_{4\pi} d^2\Omega' \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}, \Omega' \cdot \Omega) \phi^{g'}(\mathbf{r}, \Omega') + \int_{\Delta\Omega_n} d^2\Omega q^g(\mathbf{r}, \Omega) \quad (5.6)$$

$$\int_{\Delta\Omega_n} d^2\Omega (\Omega) \cdot \frac{\nabla \phi_n^g(\mathbf{r})}{\Delta\Omega_n} + \Sigma_t^g(\mathbf{r}) \phi_n^g(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi} \sum_{g'=1}^G \sum_{n'=1}^N \int_{\Delta\Omega_n} d^2\Omega \int_{\Delta\Omega_{n'}} d^2\Omega' \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}, \Omega' \cdot \Omega) \frac{\phi_{n'}^{g'}(\mathbf{r})}{\Delta\Omega_{n'}} + \int_{\Delta\Omega_n} d^2\Omega q^g(\mathbf{r}, \Omega) \quad (5.7)$$

La direction moyenne sur chaque portion de la sphère unité est définie comme suit :

$$\Omega_n = \frac{\int_{\Delta\Omega_n} d^2\Omega \Omega}{\|\int_{\Delta\Omega_n} d^2\Omega \Omega\|} \quad (5.8)$$

et l'hypothèse volumes finis suppose que le flux angulaire est constant sur chaque portion de la sphère ce qui permet d'écrire le flux intégré par portion $\phi_n^g(\mathbf{r})$:

$$\phi_n^g(\mathbf{r}) = \int_{\Delta\Omega_n} d^2\Omega' \phi^g(\mathbf{r}, \Omega') = \Delta\Omega_n \phi^g(\mathbf{r}, \Omega), \quad \Omega \in \Delta\Omega_n \quad (5.9)$$

En multipliant chaque terme de l'équation (5.7) par $\alpha_n = \Delta\Omega_n / \|\int_{\Delta\Omega_n} d^2\Omega \Omega\|$, il est donc possible de ré-écrire l'équation du transport sous sa forme volumes finis :

$$\Omega_n \cdot \nabla \phi_n^g(\mathbf{r}) + \alpha_n \Sigma_t^g(\mathbf{r}) \phi_n^g(\mathbf{r}) = \alpha_n \left[\frac{1}{2\pi} \sum_{g'=1}^G \sum_{n'=1}^N \frac{1}{\Delta\Omega_{n'}} \int_{\Delta\Omega_n} d^2\Omega \int_{\Delta\Omega_{n'}} d^2\Omega' \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}, \Omega' \cdot \Omega) \phi_{n'}^{g'}(\mathbf{r}) + \int_{\Delta\Omega_n} d^2\Omega q^g(\mathbf{r}, \Omega) \right] \quad (5.10)$$

5.2.2 Comparaison ordonnées discrètes - volumes finis

Tab. 5.2 compare cette forme volumes finis en angle de l'équation du transport à la forme collocative classique de la méthode des ordonnées discrètes dont le développement est donné en Annexe C. Les deux formes partent de la forme multigroupe de l'équation du transport (*cf* équation (5.11)) et se ressemblent beaucoup.

$$\Omega \cdot \nabla \phi^g(\mathbf{r}, \Omega) + \Sigma_t^g(\mathbf{r}) \phi^g(\mathbf{r}, \Omega) = \frac{1}{2\pi} \sum_{g=0}^G \int_{4\pi} d^2\Omega' \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}, \Omega' \cdot \Omega) \phi^{g'}(\mathbf{r}, \Omega') + q^g(\mathbf{r}, \Omega) \quad (5.11)$$

Méthode collocative S_n	Méthode des volumes finis FV
<i>Formes de l'équation du transport</i>	
$\mathbf{\Omega}_n \cdot \nabla \phi_n^g(\mathbf{r}) + \Sigma_t^g(\mathbf{r}) \phi_n^g(\mathbf{r}) =$ $\frac{1}{2\pi} \sum_{g'=1}^G \sum_{n'=1}^N \omega_{n'} \Sigma_s^{g' \rightarrow g, n' \rightarrow n}(\mathbf{r}) \phi_{n'}^{g'}(\mathbf{r})$ $+ q^g(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}_n)$	$\mathbf{\Omega}_n \cdot \nabla \phi_n^g(\mathbf{r}) + \alpha_n \Sigma_t^g(\mathbf{r}) \phi_n^g(\mathbf{r}) =$ $\frac{\alpha_n}{2\pi} \sum_{g'=1}^G \sum_{n'=1}^N \Sigma_s^{g' \rightarrow g, n' \rightarrow n}(\mathbf{r}) \phi_{n'}^{g'}(\mathbf{r})$ $+ \alpha_n \int_{\Delta\Omega_n} d^2\Omega q^g(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) \text{ avec } \alpha_n = \Delta\Omega_n / \int_{\Delta\Omega_n} d^2\Omega \ \mathbf{\Omega}\ $
<i>Inconnues à calculer</i>	
Flux angulaires : $\phi_n^g(\mathbf{r}) = \phi^g(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}_n)$	Flux intégrés par portion de la sphère : $\phi_n^g(\mathbf{r}) = \int_{\Delta\Omega_n} d^2\Omega \phi^g(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})$
<i>Modélisation de la section de transfert</i>	
$\Sigma_s^{g' \rightarrow g, n' \rightarrow n}(\mathbf{r}) = \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}_{n'} \cdot \mathbf{\Omega}_n)$	$\Sigma_s^{g' \rightarrow g, n' \rightarrow n}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\Delta\Omega_{n'}} \int_{\Delta\Omega_n} d^2\Omega \int_{\Delta\Omega_{n'}} d^2\Omega' \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{\Omega})$

TAB. 5.2 – S_n vs. volumes finis.

Tandis que la méthode des ordonnées discrètes, qui est une méthode collocative, utilise des directions particulières pour la résolution, la méthode des volumes finis considère, quant à elle, des mailles sur la sphère unité. Par ailleurs, la différence principale entre ces deux modélisations réside dans leur terme source respectif. La méthode S_n utilise la section de transfert multigroupe obtenue via le cosinus de deux directions dans la quadrature ; la méthode volumes finis considère la moyenne de la section de transfert sur la maille de départ et la maille d'arrivée.

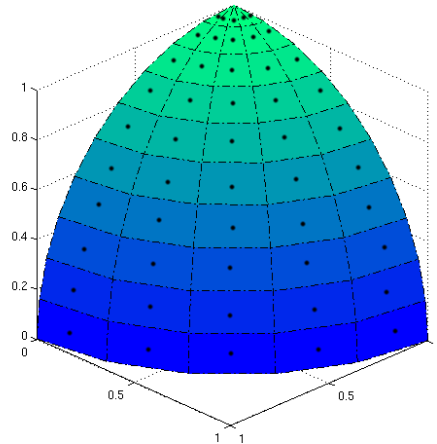


FIG. 5.2 – Un octant de la sphère unité. La méthode S_n considère les directions en un point sur chaque pavé de la sphère unité ; dans les volumes finis, les grandeurs physiques sont considérées comme des valeurs intégrées ou moyennées par pavé.

5.2.3 Maillage de la sphère unité

Dans un premier temps, pour la mise en place du solveur volumes finis en angle avec un schéma spatial en différences finies, des sections développées sous forme de polynômes de Legendre seront utilisées comme nous l'avons présenté dans l'équation (4.6). Celle-ci s'écrit pour des sections macroscopiques de la manière suivante :

$$\Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega}) \approx \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \Sigma_{sl}^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}) P_l(\boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega}) \quad (5.12)$$

Le terme en $P_l(\boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega})$ est développé en appliquant le théorème d'additivité des harmoniques sphériques réelles :

$$P_l(\boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega}) = \sum_{m=-l}^{+l} R_l^m(\boldsymbol{\Omega}') R_l^m(\boldsymbol{\Omega}) \quad (5.13)$$

et les harmoniques sphériques réelles sont définies de la manière suivante [15] :

$$R_l^m(\boldsymbol{\Omega}) = R_l^m(\mu, \varphi) = \sqrt{(2 - \delta_{m,0}) \frac{(l - |m|)!}{(l + |m|)!}} P_l^{|m|}(\mu) \mathcal{T}_m(\varphi) \quad (5.14)$$

$$\mathcal{T}_m(\varphi) = \begin{cases} \cos(m\varphi) & \text{si } m \geq 0 \\ \sin(|m|\varphi) & \text{si } m < 0 \end{cases} \quad (5.15)$$

Les $P_l^{|m|}(\mu)$ sont les fonctions de Legendre qui s'écrivent avec la définition de Ferrer comme suit :

$$P_l^m(\mu) = (1 - \mu)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{d\mu^m} P_l(\mu) \text{ si } m \geq 0. \quad (5.16)$$

Les polynômes de Legendre $P_l(\mu)$ sont obtenus par récurrence :

$$\begin{aligned} P_0(\mu) &= 1 \\ P_1(\mu) &= \mu \\ P_{l+1}(\mu) &= \frac{1}{l+1} [(2l+1)\mu P_l(\mu) - lP_{l-1}(\mu)] \end{aligned} \quad (5.17)$$

Ceci conduit à l'écriture suivante pour l'équation du transport :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Omega}_n \cdot \nabla \phi_n^g(\mathbf{r}) + \alpha_n \Sigma_t^g(\mathbf{r}) \phi_n^g(\mathbf{r}) = \\ \alpha_n \Delta \boldsymbol{\Omega}_n \left[\sum_{g'=1}^G \sum_{n'=1}^N \phi_{n'}^{g'}(\mathbf{r}) \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \Sigma_{sl}^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}) \sum_{m=-l}^{+l} r_n^{lm} r_{n'}^{lm} + \frac{1}{\Delta \boldsymbol{\Omega}_n} \int_{\Delta \boldsymbol{\Omega}_n} d^2 \boldsymbol{\Omega} q^g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) \right] \end{aligned} \quad (5.18)$$

$$\text{où } r_n^{lm} = \frac{1}{\Delta \boldsymbol{\Omega}_n} \int_{\Delta \boldsymbol{\Omega}_n} d^2 \boldsymbol{\Omega} R_l^m(\boldsymbol{\Omega})$$

De l'équation (5.18), il découle que pour la mise en place de la forme volumes finis de l'équation du transport, il est nécessaire de calculer les moyennes des harmoniques sphériques réelles r_n^{lm} sur chaque maille $\Delta \boldsymbol{\Omega}_n$ de la sphère unité.

5.2.4 Intégration des harmoniques sphériques

Le calcul de r_n^{lm} est une intégrale double sur μ et sur φ et l'évaluer revient à calculer le produit de deux intégrales simples sur ces mêmes domaines, sous la conditions que les frontières de mailles en φ suivent des méridiens et en μ , des parallèles. Dans le cadre de géométries en deux dimensions³, grâce aux symétries, il suffit de décrire un hémisphère. Dans une géométrie 2D cartésienne, l'hémisphère correspondant à $\mu \geq 0$ est utilisée tandis que pour une géométrie 2D cylindrique (RZ), la sphère unité peut se réduire à l'hémisphère $-1 \leq \mu \leq +1$ et $0 \leq \varphi \leq \pi$, comme le montre la Fig. 5.3.

Pour une discrétisation donnée de la sphère unité, les bornes de chaque maille $\Delta \boldsymbol{\Omega}_n$ en μ , $[\mu_n^-, \mu_n^+]$ et en φ , $[\varphi_n^-, \varphi_n^+]$ sont connues et permettent de calculer r_n^{lm} . Par exemple, pour un

3. En 3D, il faut prendre en compte la sphère complète.

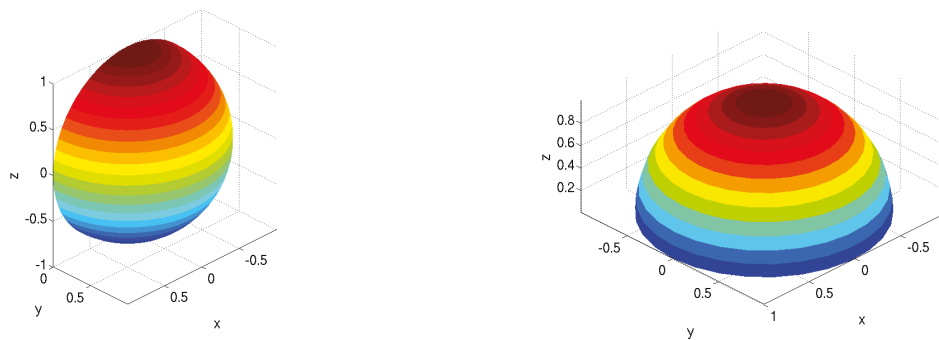


FIG. 5.3 – Hémisphères en géométries 2D : cylindrique à gauche, cartésienne à droite.

découpage de la sphère unité en parallèles N_μ , et en méridiens N_φ , le maillage résultant est un maillage produit, et le nombre de pavés (et donc, de « directions ») sur la sphère est $N_\mu N_\varphi$.

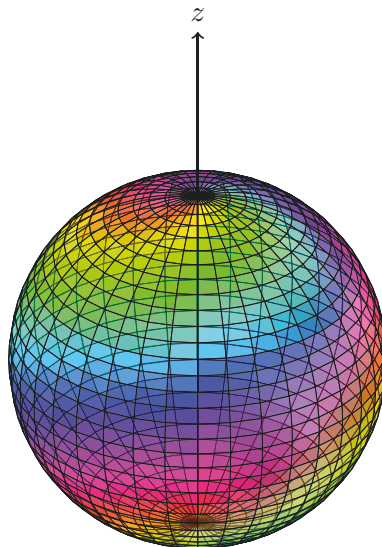


FIG. 5.4 – Maillage produit de la sphère unité.

Les harmoniques sphériques réelles sont intégrées en le faisant d'une part pour les fonctions trigonométriques pour la partie en φ et d'autre part en dérivant des relations de récurrence sur les indices l et m des fonctions de Legendre pour la partie en μ . On utilise l'approche proposée par [77] et [78]. La première récurrence porte sur l'indice l :

$$\int_{\mu_-}^{\mu_+} P_l^m(\mu) d\mu = \frac{(l-2)(l-1+m)}{(l+1)(l-m)} \int_{\mu_-}^{\mu_+} P_{l-2}^m(\mu) d\mu - \frac{(2l-1)}{(l+1)(l-m)} [P_{l-1}^m(\mu_+) - P_{l-1}^m(\mu_-)] \quad (5.19)$$

Cette relation est valable pour $0 \leq m < l$ et pour $m = l - 1$. Le premier terme est nul car

P_{l-2}^{l-1} est nul. Pour $m = l$, on utilise la deuxième relation de récurrence :

$$\int_{\mu_-}^{\mu_+} P_l^l(\mu) d\mu = \frac{l(2l-3)(2l-1)}{(l-1)} \int_{\mu_-}^{\mu_+} P_{l-2}^{l-2}(\mu) d\mu + [\mu_+ P_l^l(\mu_+) - \mu_- P_l^l(\mu_-)] \quad (5.20)$$

Le calcul direct des premiers termes (indices $l = 0, 1$) permet d'initialiser la récurrence :

$$\begin{aligned} \int_{\mu_-}^{\mu_+} P_0^0(\mu) d\mu &= \mu_+ - \mu_- \\ \int_{\mu_-}^{\mu_+} P_1^0(\mu) d\mu &= \frac{\mu_+^2 - \mu_-^2}{2} \\ \int_{\mu_-}^{\mu_+} P_1^1(\mu) d\mu &= \frac{1}{2} [\mu_+ \sqrt{1 - \mu_+^2} - \mu_- \sqrt{1 - \mu_-^2} + \arcsin(\mu_-) - \arcsin(\mu_+)] \end{aligned} \quad (5.21)$$

La raison principale pour laquelle nous avons utilisé ces relations de récurrence plutôt qu'une « simple » quadrature, c'est le fait de pouvoir intégrer exactement ces fonctions de Legendre à n'importe quel ordre l . De ce fait, on pourrait évaluer des flux en P7, P12, voire en P20 pour étudier la convergence du k_{eff} avec l'ordre du développement de Legendre.

D'autre part, ceci nous affranchit d'une difficulté qui est l'utilisation d'une quadrature numérique pour faire cette intégration. En effet, les fonctions de Legendre ont une forme polynômiale pour les valeurs de m paires. Dans le cas contraire, ce sont des fonctions irrationnelles. Dans le cas où les fonctions P_l^m sont polynômiales, on peut utiliser une quadrature de Gauss-Legendre pour les intégrer, sinon c'est une quadrature de Gauss-Chebyshev qui intégrerait le mieux ces fonctions.

Le maillage utilisé pour la sphère unité peut être généralisé très simplement. En traitant la sphère unité comme un maillage « classique », il est possible d'obtenir les bornes en μ et φ de chaque maille et donc d'intégrer les harmoniques sphériques très simplement quel que soit le maillage de la sphère unité - à condition d'avoir des mailles « rectangulaires » ; c'est-à-dire que pour chaque frontière de maille, μ ne varie pas quand φ varie et inversement (*cf* Fig. 5.5).

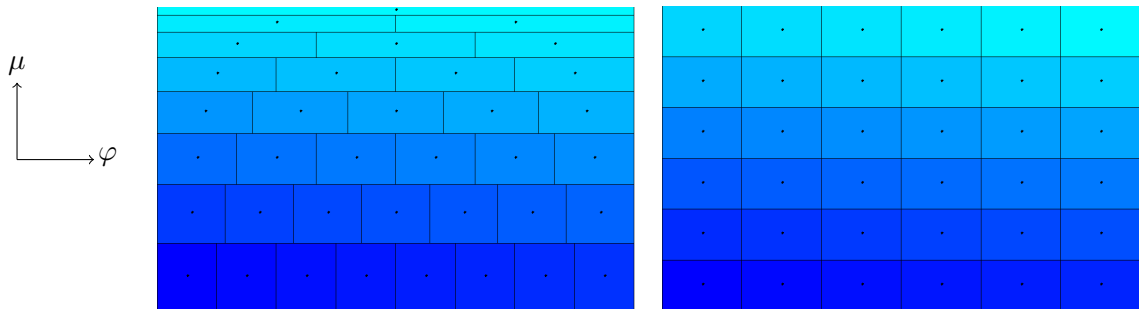


FIG. 5.5 – Découpage du premier octant de la sphère unité en quadrature symétrique par niveau LS16 (à gauche) et en quadrature de type produit $N_\mu = 6, N_\varphi = 6$ - le nombre de directions par octant étant égal à 36 dans les deux cas.

5.3 Validation du solveur volumes finis en angle

Les méthodes décrites précédemment ont été implémentées dans l'environnement du solveur SNATCH [35]. Dans SNATCH, à chaque type d'itération est attaché un objet informatique : *Solver*, *GroupScatteringLoop*, *FissionLoop*. Chacun de ces objets ou classe informatique hérite d'une même classe générique, *SolvingStep*.

L'opérateur (*LegendreOperatorForSnMultiD*) calcule $\sum_{g=0}^G \sum_{sl}^{\mathbf{g}' \rightarrow \mathbf{g}}(\mathbf{r}) \phi_{lm}^{\mathbf{g}'}(\mathbf{r})$ pour chaque indice l et m . Ce terme constitue la source de diffusion.

L'équation du transport est résolue spatialement pour chaque direction n . Dans un groupe donné, la source de diffusion est évaluée comme suit grâce à l'opérateur de diffusion :

$$\sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \sum_{m=-l}^{+l} R_l^m(\boldsymbol{\Omega}_n) \sum_{g=0}^G \sum_{sl}^{\mathbf{g}' \rightarrow \mathbf{g}}(\mathbf{r}) \phi_{lm}^{\mathbf{g}'}(\mathbf{r}) \quad (5.22)$$

Puis, cette source est calculée sur la direction n en évaluant les harmoniques sphériques en $\boldsymbol{\Omega}_n$. La source évaluée et la source externe $q_n^g(\mathbf{r})$ sont additionnées et l'équation du transport est résolue pour $\phi_n^g(\mathbf{r})$. Ce flux angulaire n'est pas stocké mais dès qu'il est calculé, il est projeté sur les harmoniques sphériques $R_l^m(\boldsymbol{\Omega})$ pour obtenir les moments du flux $\phi_{lm}^g(\mathbf{r})$ qui serviront à calculer la source de diffusion à la prochaine itération.

Pour le solveur volumes finis en angle, la source de diffusion suivant un angle solide $\boldsymbol{\Omega}_n$ s'écrit :

$$\sum_{g'=1}^G \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \sum_{sl}^{\mathbf{g}' \rightarrow \mathbf{g}}(\mathbf{r}) \sum_{n'=1}^N \phi_{n'}^{\mathbf{g}'}(\mathbf{r}) \sum_{m=-l}^{+l} r_n^{lm} r_{n'}^{lm} \quad (5.23)$$

Son implémentation a été effectuée en modifiant la discrétisation angulaire du solveur SNATCH (S_n) comme suit :

- Les flux angulaires multigroupes calculés, $\phi_n^g(\mathbf{r})$ ne sont pas projetés sur les harmoniques sphériques et sont stockés directement après le calcul. Dans le formalisme des volumes finis en angle, ces flux correspondent aux flux intégrés par maille de la sphère unité.
- Une nouvelle implémentation d'opérateur de diffusion a été mise en place et nommée *LegendreOperatorForFV*. Dans le cas de SNATCH, la source de diffusion est calculée à partir des moments du flux angulaires, ce qui n'est plus le cas pour les volumes finis. Cet opérateur calcule les intégrales des harmoniques sphériques par maille de la sphère unité, r_n^{lm} . Elles sont précalculées une fois pour toutes pour une discrétisation donnée de la sphère unité et stockées pour être ré-utilisées. Puis, l'opérateur de diffusion assemble la source de diffusion en n tel qu'elle est explicitée dans l'Eq. (5.23).

Pour la validation du solveur volumes finis en angle, deux cas ont été étudiés : d'abord une validation sur un benchmark très anisotrope à un groupe, puis la validation sur un cas multi-groupe simple. On compare le solveur FV aux solveurs S_n standards avec deux types de quadratures : les quadratures symétriques (Level-Symmetric - LS_n) et les quadratures « produit » de type Chebychev-Legendre (CLS_n). Le solveur volumes finis utilise un maillage « produit »

uniforme en μ (cosinus de l'angle polaire) et en φ , FV, ainsi que la discrétisation des quadratures symétriques par niveau, FV LS (*cf* Remarque).

Remarque : L'implémentation de la discrétisation angulaire S_n dans le solveur SNATCH passe par les objets *Quadrature* et *UnitSphereMesh*. *Quadrature* définit les directions n , (μ_n, φ_n) et leur poids associé ω_n , sur le premier octant $\mu \in [0, 1] \otimes \varphi \in [0, \frac{\pi}{2}]$ de la sphère unité. *UnitSphereMesh* construit ensuite toutes les directions sur la partie d'intérêt de la sphère unité par rapport à la géométrie traitée.

UnitSphereMesh définit aussi une discrétisation en μ et en φ qui correspondent à tous les μ_n , φ_n avec les poids associés. De ces discrétisations, un maillage est construit soit par leur produit cartésien pour les maillages produit soit par niveau de μ pour un maillage non conforme pour les quadratures symétriques par niveau. Ce maillage est utilisé pour des fonctionnalités telles que le raffinement adaptatif qui existe dans SNATCH [79].

In fine, pour le solveur SNATCH, le maillage de la sphère unité lui est transparent et seuls les noeuds (directions) et les poids associés sont pris en compte pour la résolution car la source de diffusion est calculée simplement en évaluant $R_l^m(\Omega)$ en (μ_n, φ_n) . Dans le cadre des volumes finis, le maillage angulaire peut être obtenu à travers l'objet *UnitSphereMesh*. De ce dernier, les bornes de chaque maille qui contiennent les directions (μ_n, φ_n) sont récupérées et utilisées pour le calcul des intégrales des harmoniques sphériques.

5.3.1 Benchmark d'Hébert

Le cas qu'on étudie ici est un benchmark à un groupe qui a été proposé par A. Hébert dans [80]. La géométrie et les sections $P1$ sont données respectivement dans la Fig. 5.6 et le Tab. 5.3. Les conditions limites utilisées sont des conditions de vide. Le pas du réseau est de 40 cm. Le schéma spatial qu'on utilisera dans ce cas et tout au long du document sera des différences finies en schéma diamant. La valeur de référence du k_{eff} donnée dans [80] est de 0.991902 ± 76.9 pcm.

material	Σ_t	Σ_{s0}	Σ_{s1}	$\nu\Sigma_f$
mix 1	0.025	0.013	0.0	0.0155
mix 2	0.025	0.024	0.006	0.0
mix 3	0.075	0.0	0.0	0.0

TAB. 5.3 – Compositions des milieux

Les résultats sont présentés sous la forme de la convergence du k_{eff} en fonction du nombre de directions (noeuds) dans la demi-sphère. Ces courbes comparent les résultats entre les quadratures LS_n , CLS_n , FV et FV LS. Les quadratures « level-symmetric » disponibles dans la plateforme de SNATCH possèdent un nombre de directions maximum égal à 144 (correspondant

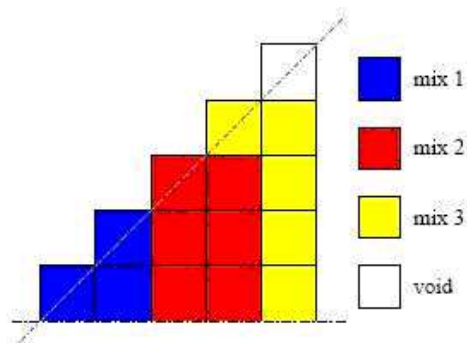
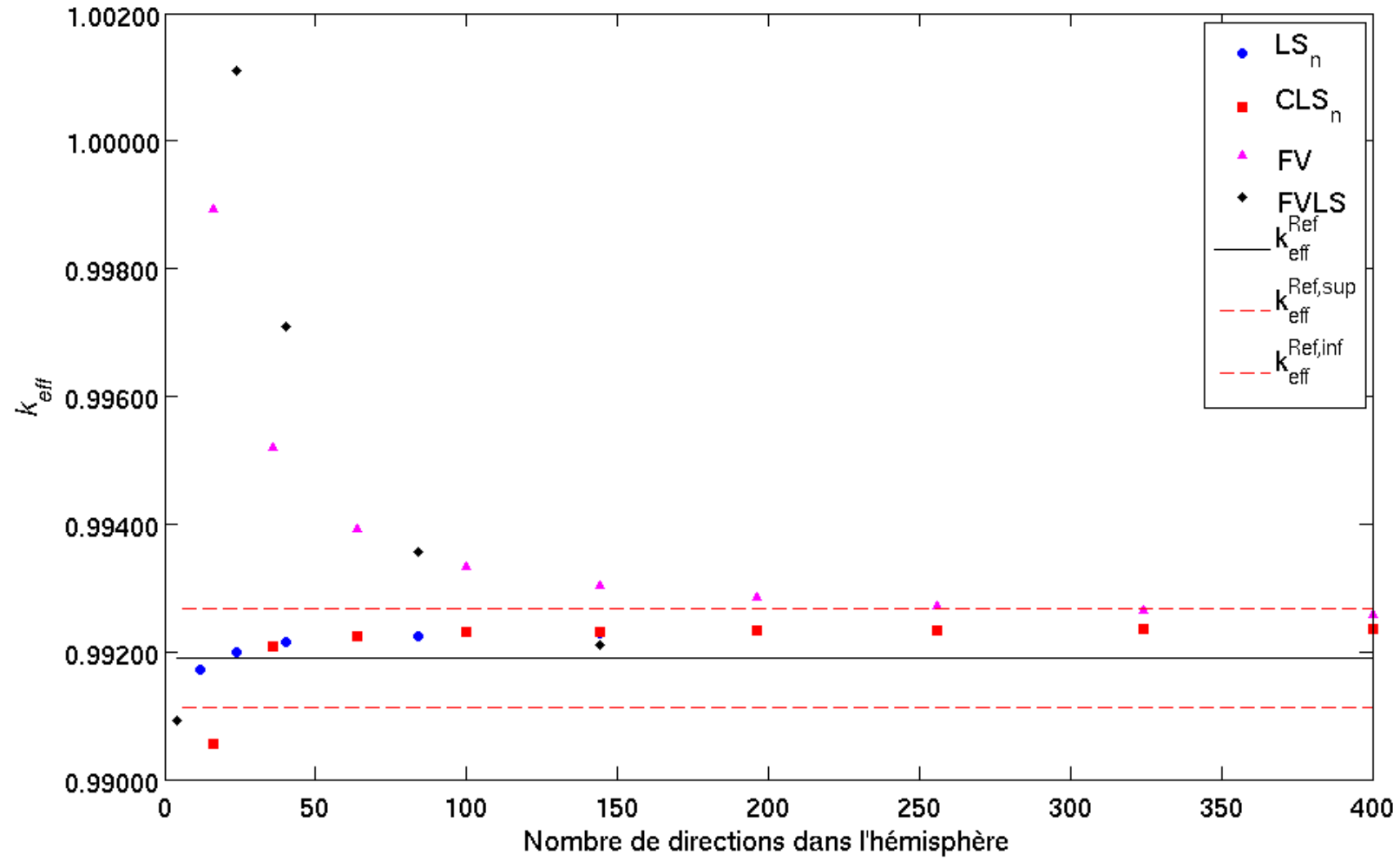


FIG. 5.6 – Géométrie du benchmark anisotrope.

au LS_{16}) dans la demi-sphère, les quadratures plus élevées sont obtenues via les quadratures « produit ».

Sur la Fig. 5.7, on remarque donc que le solveur FV converge vers la même valeur que le solveur S_n standard. La convergence est toutefois plus lente. Il faut *a minima* utiliser 144 directions (l'équivalent d'une quadrature LS_{16}) pour obtenir une précision satisfaisante. La même tendance est observée en P0.

FIG. 5.7 – Convergence du k_{eff} en P1 vs no. de directions.

5.3.2 Cas multigroupe : cellule UOX REP

Dans cette partie, l'étude porte sur une cellule carrée UOX de type REP, avec un pas de réseau qui vaut 1,26 cm. La géométrie du combustible est limitée par le fait que les solveurs S_n et FV ne permettent de calculer que des géométries 2D cartésiennes. De ce fait, le combustible sera un combustible carré avec un raffinement en « couronnes » qui est constitué de carrés « concentriques ». Cette étude utilise aussi une composition simplifiée pour le combustible : U235, U238 et O16, et le modérateur est constitué d'eau « non-liée » dans un modèle de gaz libre et contenant les isotopes H1, O16 et B10. La géométrie est illustrée par la Fig. 5.8.

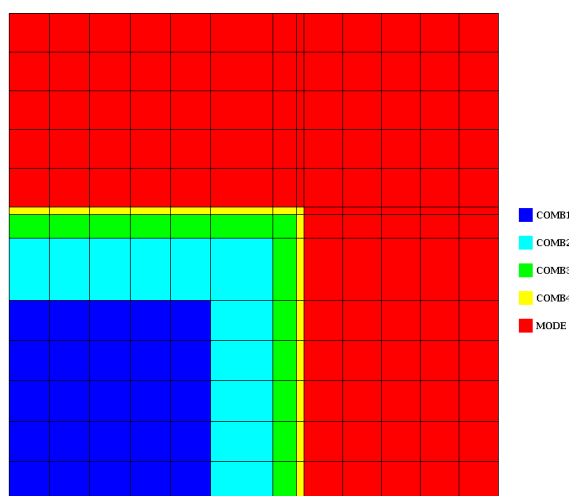


FIG. 5.8 – Géométrie de la cellule UOX.

Plusieurs calculs ont été menés en utilisant le code APOLLO2. En effet, SNATCH étant un code « cœur », les sections efficaces à 281 groupes des noyaux résonnants ont été autoprotégées avec APOLLO2 pour ensuite être utilisées dans un calcul avec le solveur MOC dont les options de tracking (voir le § 2.2.2.2 de ce document) sont $N_\varphi=12$, $N_\mu=3$ pour les discrétisations azimutale et polaire, et le solveur S_n avec une quadrature symétrique LS_{16} . La sortie d'APOLLO2 - appelée saphyb - contient les sections efficaces multigroupes autoprotégées requises par SNATCH pour un calcul avec le solveur FV. Comme précédemment, les calculs SNATCH sont menés avec le solveur S_n standard avec les différentes quadratures et le solveur FV. Les ordres d'anisotropie utilisés sont P0, P1, P3 et P5 et les calculs ont tous été réalisés avec le maillage énergétique SHEM. La valeur du k_∞ de référence calculée avec TRIPOLI4 est de 1.33914 ± 4.5 pcm.

Les résultats sont donnés dans les tableaux Tab. 5.4 à Tab. 5.6.

Tab. 5.5 montre que quelle que soit la méthode de résolution utilisée, les écarts entre les ordres de Legendre restent les mêmes. De même, Tab. 5.6 montre qu'à partir de l'ordre $P1$, les écarts entre méthodes sont constants et ne dépassent pas 33 pcm.

k_∞	P0	P1	P3	P5
Pij (collision probability in 2D exact geometry)	1.33629			
MoC	1.33624	1.33878	1.33866	1.33871
LS16 AP2	1.33535	1.33794	1.33779	1.33783
LS16 SNATCH	1.33540	1.33828	1.33812	1.33816
CLS Order6 SNATCH	1.33503	1.33853	1.33852	1.33859
FV Order6 SNATCH	1.33626	1.33883	1.33868	1.33871
FV LS16 SNATCH	1.33645	1.33881	1.33872	1.33875

TAB. 5.4 – Résultats des calculs : k_∞ .

$\Delta\rho$	MoC (pcm)	LS16 AP2 (pcm)	LS16 SNATCH (pcm)	CLS6 SNATCH (pcm)	FV 6 (pcm)	FV LS16 (pcm)
P1-P0	-142	-145	-161	-196	-143	-132
P3-P1	7	8	9	1	8	5
P5-P3	-3	-2	-2	-4	-1	-2

TAB. 5.5 – Comparaison des écarts entre les ordres de Legendre pour un solveur donné.

Difference in k_{eff}	P0 (pcm)	P1 (pcm)	P3 (pcm)	P5 (pcm)
LS AP2 - LS SNATCH	3	19	19	19
LS SNATCH- CLS SNATCH	-21	14	22	24
CLS SNATCH- FV	69	17	9	6
LS SNATCH- FV LS	59	27	33	33

TAB. 5.6 – Comparaison des écarts entre les divers solveurs à un ordre donné.

5.4 Conclusion

Dans ce chapitre, la méthode des volumes finis en angle a été dérivée pour l'équation du transport et comparée à la méthode des ordonnées discrètes S_n . L'intérêt de ce développement a été explicité par le manque de support angulaire du S_n .

Les développements et l'implémentation concrète sous la forme du solveur FV au sein de l'environnement informatique du solveur S_n ont ensuite été abordés. Ce solveur a été validée par rapport au MOC et à SNATCH. Cette validation démontre un bon comportement du solveur FV sur les k_∞ calculés. Néanmoins, le cas de validation avec le benchmark anisotrope démontre que la convergence angulaire est plus lente que le solveur SNATCH.

Section efficace moyenne par morceaux

Dans cette partie, nous nous intéressons à une nouvelle représentation des sections de transfert multigroupes qui ne fait pas intervenir de développement sur la base des polynômes de Legendre. Gerts et Mathews [74] proposent une représentation des sections de transfert par des fonctions constantes par morceaux. Ceci permet de décrire plus précisément la loi de choc avec une modélisation différente de la source de transfert.

6.1 Forme volumes finis de la source de diffusion

La section de transfert multigroupe est écrite en faisant apparaître le delta de Dirac comme le proposait Takahashi dans la méthode I^* présentée auparavant (cf 4.3.5.2).

$$\Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega}) = \int_{-1}^{+1} \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}, \mu_{LAB}) \delta(\mu_{LAB} - \boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega}) d\mu_{LAB} \quad (6.1)$$

En exprimant la section de transfert sous sa forme volumes finis et en permutant les intégrales, l'expression suivante est obtenue :

$$\begin{aligned} \Sigma_s^{g' \rightarrow g, n' \rightarrow n}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\Delta\Omega_{n'}} \int_{\Delta\Omega_{n'}} d^2\boldsymbol{\Omega}' \int_{\Delta\Omega_n} d^2\boldsymbol{\Omega} \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega}) \\ &= \frac{1}{\Delta\Omega_{n'}} \int_{\Delta\Omega_{n'}} d^2\boldsymbol{\Omega}' \int_{\Delta\Omega_n} d^2\boldsymbol{\Omega} \int_{-1}^{+1} \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}, \mu_{LAB}) \delta(\mu_{LAB} - \boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega}) d\mu_{LAB} \\ &= \int_{-1}^{+1} d\mu_{LAB} \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}, \mu_{LAB}) \left(\frac{\int_{\Delta\Omega_{n'}} d^2\boldsymbol{\Omega}' \int_{\Delta\Omega_n} d^2\boldsymbol{\Omega} \delta(\mu_{LAB} - \boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega})}{\Delta\Omega_{n'}} \right) \\ &= \int_{-1}^{+1} d\mu_{LAB} \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}, \mu_{LAB}) h^{n' \rightarrow n}(\mu_{LAB}) \end{aligned} \quad (6.2)$$

$h^{n' \rightarrow n}$ représente la probabilité pour qu'en moyenne une direction de $\Delta\Omega_{n'}$ fasse un angle de cosinus μ_{LAB} avec une direction de $\Delta\Omega_n$. D. Gerts avait introduit l'opérateur de diffusion ($S^{g' \rightarrow g}$) qui permet d'écrire $\sigma_s^{g' \rightarrow g, n' \rightarrow n} = S^{g' \rightarrow g} h^{n' \rightarrow n}(\mu)$ (cf l'Eq. (4.40)).

En divisant l'intervalle $[-1, +1]$ en K sous-intervalles $[\mu_{LAB}^{k-1}, \mu_{LAB}^k]$ égaux¹, la section de

1. Le choix des sous-intervalles égaux a été fait pour faciliter l'implémentation. On pourrait utiliser une discrétisation particulière de $[-1, +1]$ pour chaque transfert $g' \rightarrow g$ mais une telle méthode complexifierait considérablement la mise en œuvre informatique

transfert multigroupe discrète en volumes finis s'exprime comme suit en partitionnant l'opérateur de diffusion (cf l'Eq. (4.43)) :

$$\begin{aligned} \Sigma_s^{g' \rightarrow g, n' \rightarrow n}(\mathbf{r}) &= \int_{-1}^{+1} d\mu_{LAB} \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}, \mu_{LAB}) h^{n' \rightarrow n}(\mu_{LAB}) \\ &\approx \sum_{k=1}^K \Sigma_{sk}^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}) h_k^{n' \rightarrow n} \end{aligned} \quad (6.3)$$

avec

$$\begin{aligned} \Sigma_{sk}^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}) &= S^{g' \rightarrow g} \frac{H(\mu_k - \mu) H(\mu - \mu_{k-1})}{\mu_k - \mu_{k-1}} \\ &= \frac{1}{\mu_{LAB}^k - \mu_{LAB}^{k-1}} \int_{\mu_{LAB}^{k-1}}^{\mu_{LAB}^k} d\mu_{LAB} \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}, \mu_{LAB}) \end{aligned} \quad (6.4)$$

et

$$\begin{aligned} h_k^{n' \rightarrow n} &= \int_{\mu_{LAB}^{k-1}}^{\mu_{LAB}^k} d\mu_{LAB} h^{n' \rightarrow n}(\mu_{LAB}) \\ &= \int_{\mu_{LAB}^{k-1}}^{\mu_{LAB}^k} d\mu_{LAB} \left(\frac{\int_{\Delta\Omega_{n'}} d^2\Omega' \int_{\Delta\Omega_n} d^2\Omega \delta(\mu_{LAB} - \Omega' \cdot \Omega)}{\Delta\Omega_{n'}} \right) \\ &= \frac{1}{\Delta\Omega_{n'}} \int_{\Delta\Omega_{n'}} d^2\Omega' \int_{\Delta\Omega_n} d^2\Omega \int_{\mu_{LAB}^{k-1}}^{\mu_{LAB}^k} d\mu_{LAB} \delta(\mu_{LAB} - \Omega' \cdot \Omega) \\ &= \frac{1}{\Delta\Omega_{n'}} \int_{\Delta\Omega_{n'}} d^2\Omega' \int_{\Delta\Omega_n} d^2\Omega \int_{-1}^{+1} d\mu_{LAB} \delta(\mu_{LAB} - \Omega' \cdot \Omega) \\ &\quad \times [H(\mu_{LAB}^k - \Omega' \cdot \Omega) \cdot H(\Omega' \cdot \Omega - \mu_{LAB}^{k-1})] \\ &= \frac{1}{\Delta\Omega_{n'}} \int_{\Delta\Omega_{n'}} d^2\Omega' \int_{\Delta\Omega_n} d^2\Omega [H(\mu_{LAB}^k - \Omega' \cdot \Omega) \cdot H(\Omega' \cdot \Omega - \mu_{LAB}^{k-1})] \end{aligned} \quad (6.5)$$

H étant la fonction de Heaviside. $H(\mu_{LAB}^k - \Omega' \cdot \Omega) \cdot H(\Omega' \cdot \Omega - \mu_{LAB}^{k-1})$ vaut 1 si $\mu_{LAB} \in [\mu_{LAB}^{k-1}, \mu_{LAB}^k]$; 0 sinon.

L'intégrale du terme de source de diffusion sous sa forme discrète s'écrit alors de cette manière :

$$\frac{\alpha_n \Delta\Omega_n}{2\pi} \sum_{g'=1}^G \sum_{n'=1}^N \phi_{n'}^{g'}(\mathbf{r}) \sum_{k=1}^K \Sigma_{sk}^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}) h_k^{n' \rightarrow n} \quad (6.6)$$

Finalement, l'équation de Boltzmann multigroupe sous sa forme volumes finis avec la source de diffusion « mixte » (Legendre et discrète) s'exprime ainsi :

$$\begin{aligned} \Omega_n \cdot \nabla \phi_n^g(\mathbf{r}) + \alpha_n \Sigma_t^g(\mathbf{r}) \phi_n^g(\mathbf{r}) &= \alpha_n \Delta\Omega_n \\ &\quad \left[\frac{1}{2\pi} \sum_{g'=1}^G \sum_{n'=1}^N \phi_{n'}^{g'}(\mathbf{r}) \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \Sigma_{sl}^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}) \sum_{m=-l}^{+l} r_n^{lm} r_{n'}^{lm} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2\pi} \sum_{g'=1}^G \sum_{n'=1}^N \phi_{n'}^{g'}(\mathbf{r}) \sum_{k=1}^K \Sigma_{sk}^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}) h_k^{n' \rightarrow n} + \frac{1}{\Delta\Omega_n} \int_{\Delta\Omega_n} d^2\Omega q^g(\mathbf{r}, \Omega) \right] \end{aligned} \quad (6.7)$$

6.2 Sections doublement différentielles multigroupes

Les sections de transfert multigroupes moyennes par morceaux sont générées à partir des sections doublement différentielles continues en énergie. Ceci se traduit de la manière suivante :

$$\sigma_s^{g' \rightarrow g}(\mu_{LAB}) = \frac{\int_{\Delta E_g} dE \int_{\Delta E_{g'}} dE' \sigma_s(E' \rightarrow E, \mu_{LAB}) \phi(E')}{\int_{\Delta E_{g'}} dE' \phi(E')} \quad (6.8)$$

Cependant, le code de processing des données nucléaires NJOY par le biais des intégrales via des *feed function* dans le module GROUPE (cf § 2.2.1) traite un transfert de $E' \rightarrow E$ avec une *feed function* $\mathcal{F} = \mathcal{F}_l^{g'}(E)$. Ce qui donne :

$$\mathcal{F}_l^{g'}(E) = \int_{E_{g'-1}}^{E_{g'}} dE' \int_{-1}^{+1} d\mu_{LAB} f(E' \rightarrow E, \mu_{CM}) P_l[\mu_{LAB}(\mu_{CM})] \quad (6.9)$$

Ce faisant, les distributions angulaires sont automatiquement projetées sur les polynômes de Legendre et l'accès aux sections doublement différentielles multigroupes n'est plus possible. De ce fait, il est impératif de générer ces dernières à l'extérieur de NJOY.

Dans l'équation du transport stationnaire à énergie continue (cf Eq. (1.6)), la section de transfert en énergie et en angle est construite à partir des sections de réactions, donc du type de choc. Pour les chocs élastiques et inélastiques discrets, la section de transfert pour le $i^{\text{ème}}$ niveau² est :

$$\sigma_{s,i}(E' \rightarrow E, \mu_{LAB}) = \sigma_{s,i}(E') \cdot P(E' \rightarrow E, \mu_{LAB}) \quad (6.10)$$

Sachant que dans ces réactions l'énergie de sortie E est complètement déterminée par l'énergie incidente E' et le cosinus de l'angle de déviation dans le CM μ_{CM} , la probabilité de transfert P peut s'écrire ainsi :

$$P(E' \rightarrow E, \mu_{LAB}) = f(\mu_{LAB}|E', E) \cdot g(E|E') \quad (6.11)$$

$g(E|E')$ est la distribution d'énergie du neutron après choc $g(E' \rightarrow E)$. Pour une distribution donnée, on peut procéder à un changement de variable de telle sorte que :

$$g(E' \rightarrow E) dE = g(\mu_{CM}) d\mu_{CM} \quad (6.12)$$

$$\implies g(E' \rightarrow E) = g(\mu_{CM}) \cdot \frac{d\mu_{CM}}{dE} \quad (6.13)$$

$g(\mu_{CM})$ n'étant rien d'autre que la distribution angulaire dans le CM à l'énergie E' .

D'un autre côté, $f(\mu_{LAB}|E', E)$ traduit le fait que pour un transfert $E' \rightarrow E$, il n'y a qu'un seul angle de déviation possible qui peut s'exprimer par une distribution de Dirac.

2. Cas particulier : $i = 0$ est le niveau élastique

Donc, pour un choc élastique ou inélastique discret, les transferts dépendent de la section efficace à l'énergie incidente du neutron et de la distribution angulaire :

$$\sigma_{s,i}(E' \rightarrow E, \mu_{LAB}) = \begin{cases} \sigma_{s,i}(E')f(E', \mu_{CM}) \left| \frac{d\mu_{CM}}{dE} \right| \cdot \delta(\mu_{LAB} - S(E', E)) \\ \text{si } \Gamma(E, +1) \leq E' \leq \Gamma(E, -1) \\ 0, \text{ sinon.} \end{cases}$$

où $i = 0, 1, \dots, I$ sont les niveaux inélastiques et $E' = \Gamma(E, \mu_{LAB})$ s'obtient de l'Eq. (3.28). $\sigma_{s,i}(E')$ est la section de diffusion à l'énergie E' pour le niveau i et $f(E', \mu_{CM})$ est la loi de choc dans le CM. $\left| \frac{d\mu_{CM}}{dE} \right|$ est le jacobien pour le changement de référentiel du CM dans LAB.

Les sections de transfert dans le continuum s'écrivent :

$$\sigma_{s,con}(E' \rightarrow E, \mu_{LAB}) = \sigma_{s,con}(E')f(E' \rightarrow E, \mu_{LAB}) \quad (6.14)$$

et la section de transfert totale est la somme de toutes les contributions :

$$\sigma_s(E' \rightarrow E, \Omega' \rightarrow \Omega) = \frac{1}{2\pi} \left[\sum_{i=0}^I \sigma_{s,i}(E' \rightarrow E, \mu_{LAB}) + \sigma_{s,con}(E' \rightarrow E, \mu_{LAB}) \right] \quad (6.15)$$

Dans le cadre de ce travail, les choc étudiés seront restreints aux chocs élastiques et inélastiques discrets. Sachant que de l'Eq. (3.19), $\left| \frac{d\mu_{CM}}{dE} \right| = \frac{(A+1)^2}{2E'\gamma(E')}$, la section de transfert multigroupe s'écrit ainsi pour un niveau i :

$$\sigma_{s,i}^{g' \rightarrow g}(\mu_{LAB}) = \frac{(A+1)^2}{2\Delta^{g'}} \int_{\Delta E_g} dE \int_{\Delta E_{g'}} dE' \frac{\sigma_{s,i}(E')f(E', \mu_{CM})\phi(E')}{E'\gamma(E')} \times \delta(\mu_{LAB} - S(E', E)) \quad (6.16)$$

En posant le changement de variable $x = \mu_{LAB} - S(E', E)$, en intégrant la distribution de Dirac avec la propriété $\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)f(x) dx = f(0)$, l'expression de la section de transfert multigroupe s'écrit finalement :

$$\sigma_{s,i}^{g' \rightarrow g}(\mu_{LAB}) = \begin{cases} \frac{1}{2\Delta^{g'}} \int_{\Delta E_g} dE \rho_i(E, \mu_{LAB}) \frac{\sigma_{s,i}(E')f(E', \mu_{CM})\phi(E')}{\gamma(E')} \\ \text{si } E_{g'+1} \leq E' = \Gamma(E, \mu_{LAB}) \leq E_{g+1} \\ 0, \text{ sinon.} \end{cases}$$

avec

$$\rho_i(E, \mu_{LAB}) = \frac{(A+1)^2}{\sqrt{A^2 - 1 - A(A-1)\frac{Q_i}{E} + \mu_{LAB}^2}}$$

E' qui apparaît encore dans les expressions de la section efficace et de la distribution angulaire dans l'intégrale sur E est exprimé en fonction de E à partir de la relation $E' = \Gamma(E, \mu_{LAB})$ (cf Eq. (3.27)).

6.3 Génération pour l'hydrogène et le fer

Dans les études qui suivront, une hypothèse simplificatrice sera faite : l'eau du modérateur sera traitée comme étant un gaz libre d'hydrogène et d'oxygène. Cette hypothèse ne change pas la physique que l'on souhaite mettre en avant mais permet de simplifier les équations et ainsi la production des sections notamment dans la partie thermique pour l'hydrogène où interviennent des corrélations en énergie réduite et en quantité de mouvement réduite appelées $S(\alpha, \beta)$.

Le neutron n'effectue que des chocs élastiques avec l'hydrogène. Pour ce dernier, cette loi de choc s'écrit en supposant une masse identique pour le proton et le neutron. Les distributions angulaires sont obtenues dans le centre de masse dans le domaine énergétique qui nous intéresse (0-20MeV) à partir du fichier d'évaluation³.

Le flux de pondération $\phi(E')$ est choisi tel qu'il soit représentatif de la physique des réacteurs, il a la forme d'un spectre de fission dans le domaine rapide, varie en $1/E$ dans le domaine du ralentissement et a la forme d'une maxwellienne dans le domaine thermique⁴ [20] :

$$\phi(E') = \begin{cases} C_1 \sqrt{(E')} \exp\left(-\frac{E'}{\theta_{fiss}}\right), & \text{si } E' > E'_{max,epi} \\ \frac{C_2}{E'}, & \text{si } E'_{max,th} < E' \leq E'_{max,epi} \\ C_3 E' \exp\left(-\frac{E'}{\theta_{th}}\right), & \text{si } E' \leq E'_{max,th} \end{cases}$$

Usuellement, $E'_{max,epi}$ et $E'_{max,th}$, les coupures épithermique et thermique respectivement, sont fixés par l'utilisateur dans le code NJOY. θ_{fiss} et θ_{th} sont la température de fission et l'énergie thermique respectivement. En imposant la continuité en $E'_{max,epi}$ et $E'_{max,th}$, on obtient :

$$\begin{aligned} C_1 &= \frac{1}{E'^{\frac{3}{2}} \cdot \exp\left(-\frac{E'_{max,epi}}{\theta_{fiss}}\right)} \\ C_2 &= 1 \\ C_3 &= \frac{1}{E'^2 \cdot \exp\left(-\frac{E'_{max,th}}{\theta_{th}}\right)} \end{aligned} \quad (6.17)$$

En dessous de quelques eV, l'agitation thermique du noyau cible ne peut plus être négligée et elle modifie en conséquence les distributions angulo-énergétiques du neutron diffusé. Un modèle de gaz libre est utilisé pour modéliser cette interaction qui donne lieu au phénomène de *ups-cattering* : un neutron qui diffuse sur un noyau cible peut gagner de l'énergie grâce à l'échange

3. MF4 MT2. Pour l'hydrogène, ces distributions sont quasiment isotropes dans la plage d'énergie 0-20MeV.

4. Spectre représentatif des REP.

d'énergie entre le neutron incident et le neutron du noyau qui possède une agitation thermique. Le modèle de gaz libre est la limite de l'inélastique incohérente dans le manuel ENDF et dans le jargon physique de NJOY, en supposant que l'énergie cinétique du système noyau-neutron est conservée dans cette réaction. Le noyau de diffusion en ralentissement avec le modèle de gaz libre a été développé par W. Rothenstein et R. Dagan dans [81] qui généralise le travail de M. Ouislounen et R. Sanchez [82]. En effet, ces derniers avaient dérivé les moments de Legendre des transferts $E' \rightarrow E$. Rothenstein et Dagan se sont intéressés à une dérivation complète de la section doublement différentielle pour un gaz maxwellien.

La section doublement différentielle thermique en dessous de 4 eV⁵ s'écrit :

$$\sigma_s(E' \rightarrow E, \mu_{LAB}) = \frac{\sigma_s(E')}{2k_B T} \left(\frac{A+1}{A} \right)^2 \sqrt{\frac{E}{E'}} e^{\frac{\beta}{2}} S(\alpha, \beta) \quad (6.18)$$

$S(\alpha, \beta)$ est une distribution qui traduit le gain en quantité de mouvement α et en énergie cinétique β . Ces derniers s'écrivent :

$$\alpha = \frac{E' + E - 2\mu_{LAB}\sqrt{E'E}}{Ak_B T} \quad (6.19)$$

$$\beta = \frac{E - E'}{Ak_B T} \quad (6.20)$$

$$S(\alpha, \beta) = \frac{1}{2\sqrt{\pi\alpha}} \exp\left(-\frac{\alpha^2 + \beta^2}{4\alpha}\right) \quad (6.21)$$

Une routine GENXS a été mise en place en MATLAB et en *java* pour produire ces sections différentielles multigroupes $\sigma_s^{g' \rightarrow g}(\mu_{LAB})$ pour l'hydrogène et des sections élastiques pour le fer ⁵⁶Fe. Tab. 6.1 résume les différentes valeurs des paramètres nécessaires pour GENXS. Ces valeurs proviennent des jeux de données NJOY qui servent à créer les bibliothèques CEAV4.1 pour le code de réseau APOLLO2.

Grandeur	Valeur en eV
$E'_{max,epi}$	1.32 E +6
$E'_{max,th}$	0.1
θ_{fiss}	1.29 E +6
θ_{th} à 20 °C	0.0253
θ_{th} à 300 °C	0.0488

TAB. 6.1 – Valeurs des différents paramètres utilisés pour GENXS.

Dans ses travaux de thèse, D. Gerts propose plusieurs méthodes pour intégrer exactement ou numériquement les lois de choc qui proviennent des évaluations : la méthode de Simpson adaptative et la méthode Gauss-Simpson adaptative.

5. Limite choisie par rapport aux bibliothèques de sections microscopiques utilisées par APOLLO2. Cette coupure thermique a été augmentée à 6.5 eV récemment dans les nouvelles bibliothèques CEAV5 basées sur JEFF3.1.1

Pour l'intégration numérique, la méthode Simpson adaptative a été implémentée avec une erreur qui est fixée par l'utilisateur. Les sections efficaces à une énergie donnée sont lues à partir d'un fichier tabulé. Un lecteur des fichiers d'évaluation a été développé pour récupérer les données des distributions angulaires de la MF4. Une grille pour l'énergie incidente a été mise en place après une étude très minutieuse. De ce fait, les distributions angulaires ont été reconstruites sur cette grille et stockées pour être ré-utilisées. L'algorithme est donné en Annexe E.

Ces sections différentielles ont été utilisées pour produire deux séries de sections multi-groupes : en les projetant sur les polynômes de Legendre, les moments de Legendre $\sigma_{st}^{g' \rightarrow g}$ sont générés ; et en moyennant sur les sous-intervalles de $[-1, +1]$, les sections constantes par morceaux $\sigma_{sk}^{g' \rightarrow g}$ sont obtenus.

6.4 Validation des sections générées par GENXS

6.4.1 Validation par comparaison à NJOY

Les sections constantes par morceaux ont été validées par deux procédés. Dans un premier temps, on compare les sections $P0$ et $P1$ qui ont été générées à partir des sections différentielles produites par la routine GENXS aux moments d'ordre 0 produits par NJOY pour les bibliothèques d'APOLLO2.

Les Fig. 6.1 et Fig. 6.2 montrent que la section produite par GENXS est très fidèle à celle générée par NJOY pour l'hydrogène de même que le moment d'ordre 1. La Fig. 6.3 présente l'erreur en % de cette comparaison. Les valeurs de référence sont obtenues directement des APOLIB, les bibliothèques de sections microscopiques pour APOLLO2. Les écarts sont plus marqués dans la partie thermique et sont dus aux méthodes et à la grille d'intégration numérique utilisées qui ne sont pas les mêmes que dans le module GROUPE de NJOY.

Cette comparaison a aussi été effectuée pour les sections efficaces du fer ^{56}Fe . Les Fig. 6.4 et Fig. 6.5 illustrent les moments d'ordre 0 et 1 calculés à partir de GENXS ainsi que ceux obtenus via NJOY. L'erreur en % est donnée dans la Fig. 6.6.

Les sections de l'hydrogène et du fer produites par la routine GENXS sont calculées avec respectivement, moins de 0.3% et 0.6% d'écart au maximum par rapport aux sections d'NJOY.

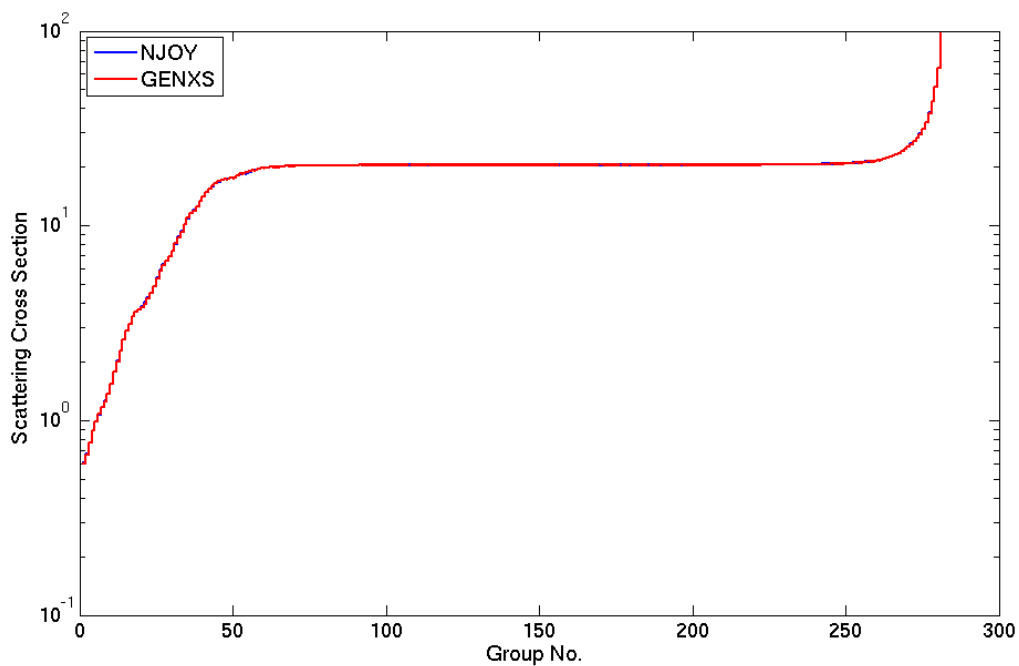


FIG. 6.1 – Moment d'ordre 0 de l'hydrogène avec NJOY et GENXS.

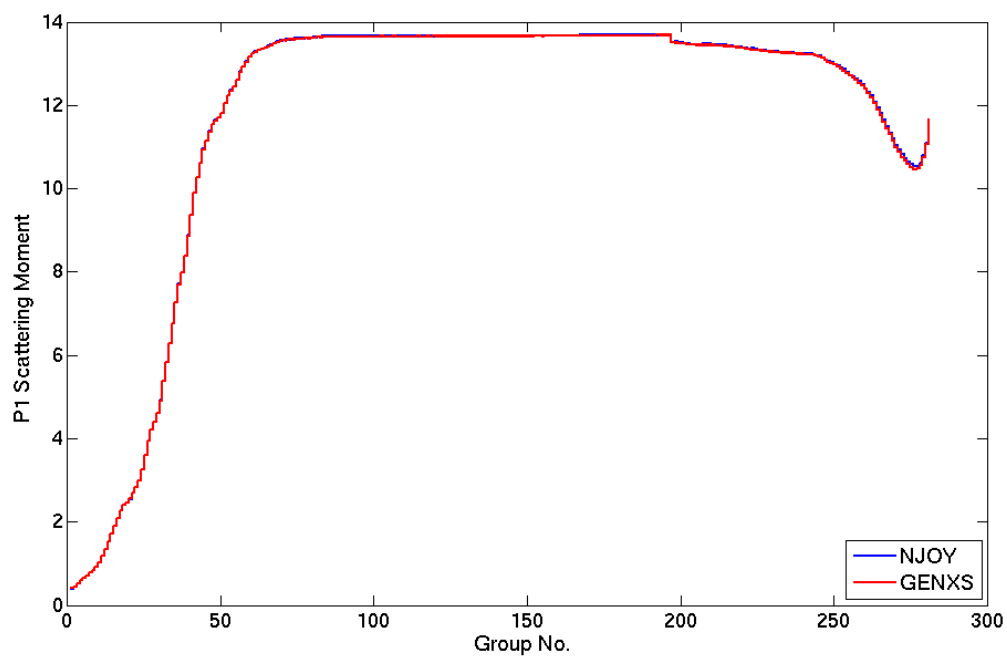
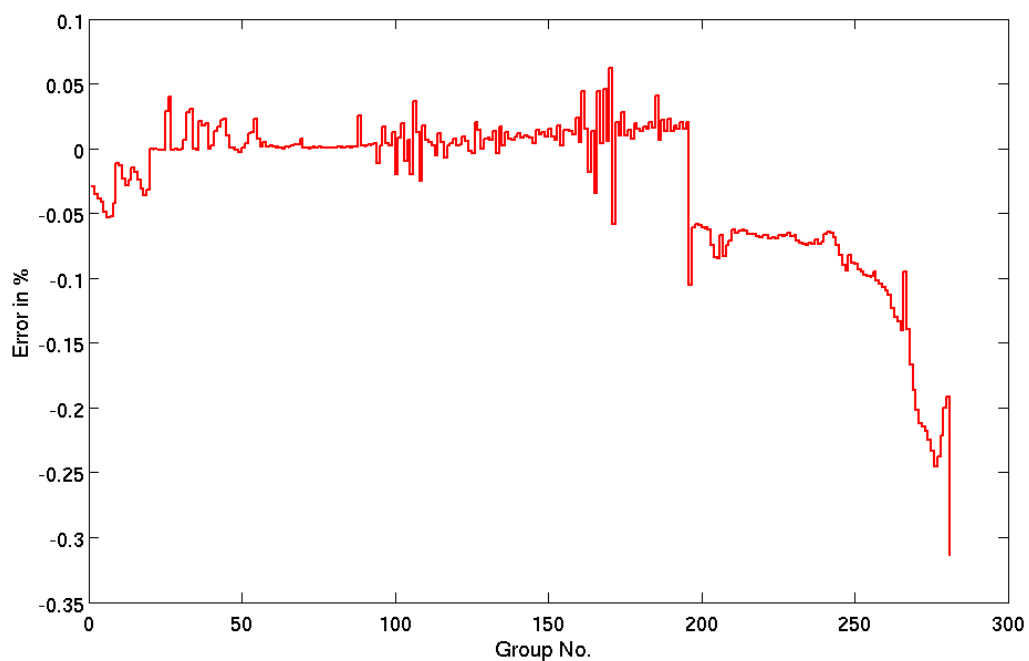
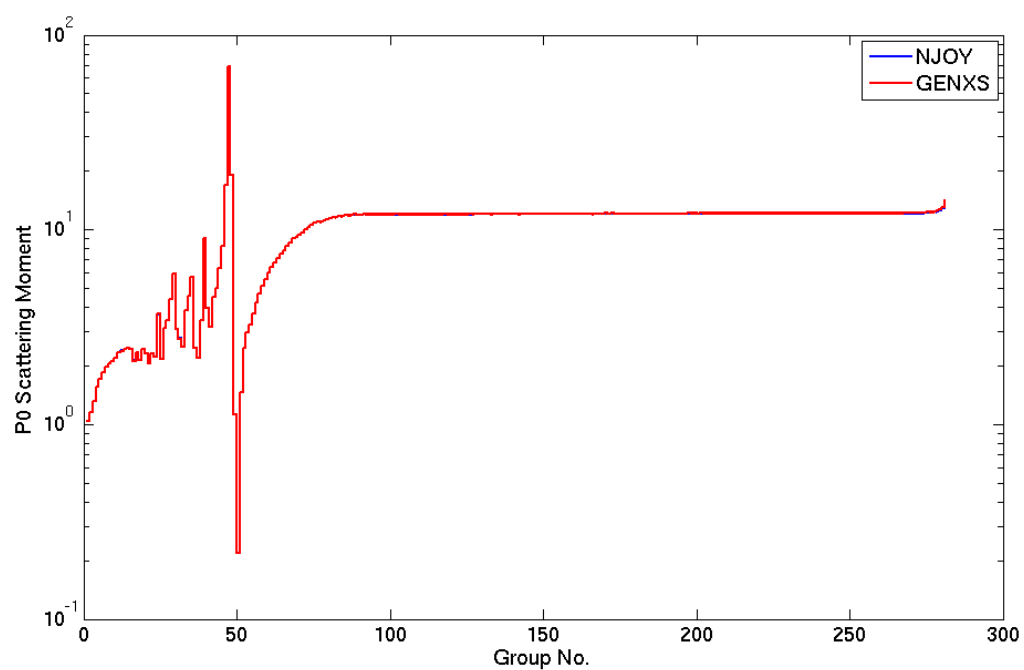
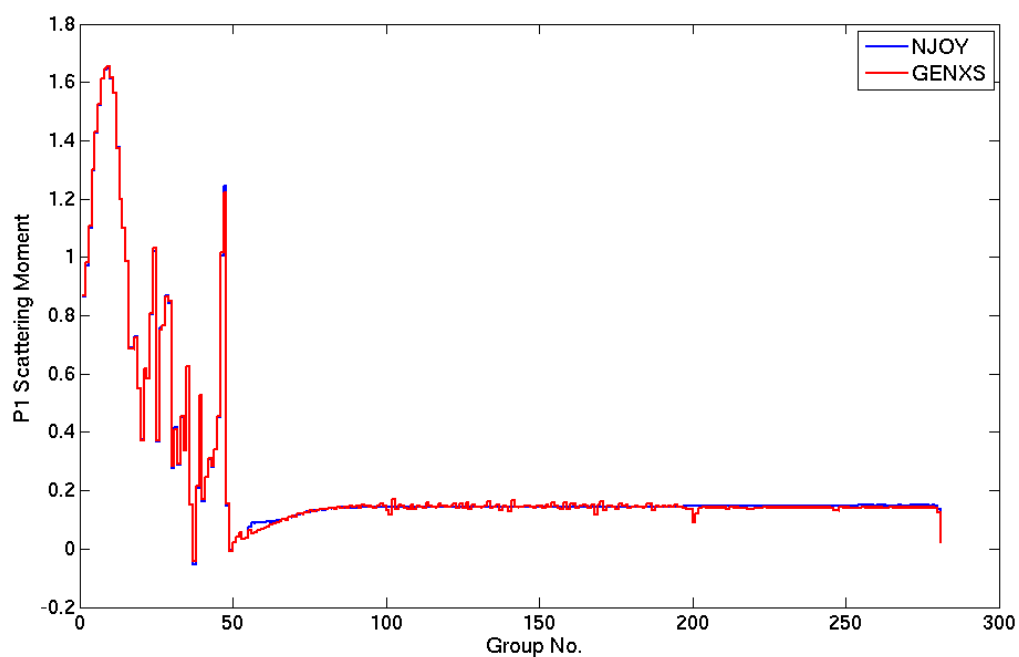
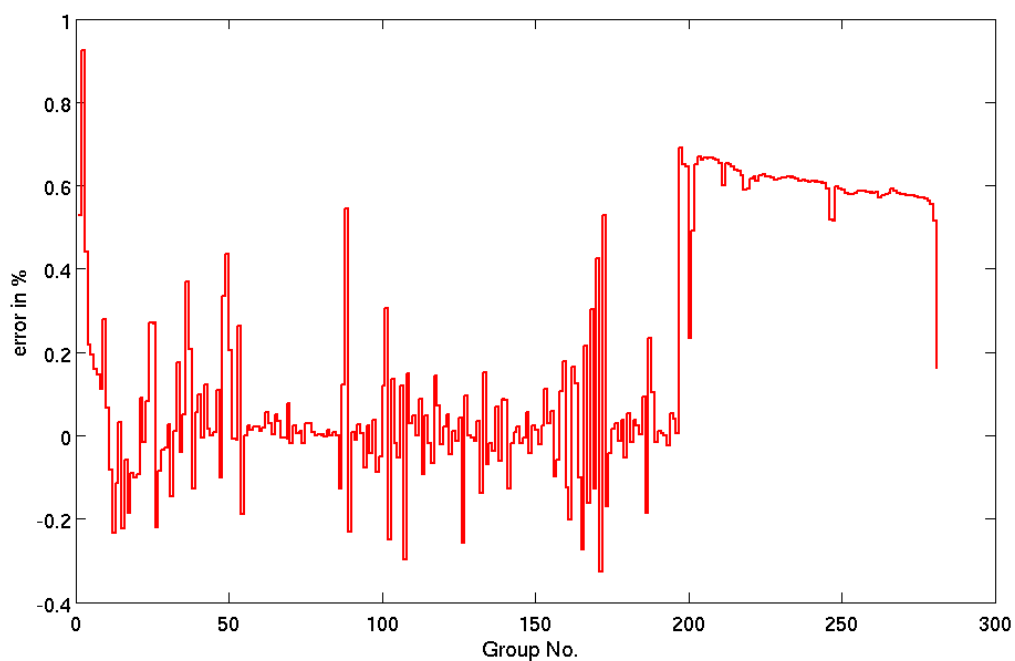


FIG. 6.2 – Moment d'ordre 1 de l'hydrogène avec NJOY et GENXS.

FIG. 6.3 – Erreur entre les sections de diffusion P_0 NJOY et GENXS pour l'hydrogène.FIG. 6.4 – Moment d'ordre 0 du ^{56}Fe avec NJOY et GENXS.

FIG. 6.5 – Moment d'ordre 1 du ^{56}Fe avec NJOY et GENXS.FIG. 6.6 – Erreur entre les sections de diffusion $P0$ NJOY et GENXS pour le fer.

6.4.2 Validation via un calcul P_n

La matrice de transfert générée par GENXS n'a pas exactement la même structure que celle obtenue via NJOY dû aux différences des méthodes d'intégration et aux erreurs numériques, surtout pour des transferts qui ont des valeurs très faibles (de l'ordre de 10^{-6}).

De ce fait, pour valider la représentation de l'anisotropie du choc et prendre en compte uniquement les écarts dus au *processing* des sections par la routine GENXS, on effectue une normalisation des sections générées. Cette normalisation est effectuée de la manière suivante :

- Les moments de la section de diffusion d'ordre 0, $\Sigma_{s_0}^g$ sont calculées à partir de la matrice de transfert pour les sections « NJOY » $\Sigma_{s_0, \text{NJOY}}^g$ et les sections « GENXS » $\Sigma_{s_0, \text{GENXS}}^g$.
- Le facteur de normalisation est le rapport $\Sigma_{s_0, \text{NJOY}}^g / \Sigma_{s_0, \text{GENXS}}^g$.
- Pour les calculs, les moments de transfert d'ordre 0 sont pris égaux à ceux de NJOY mais les moments d'ordres supérieurs à 0 sont remplacés par les moments de transferts $\Sigma_{s_0, \text{GENXS}}^{g' \rightarrow g}$ corrigés par le facteur de normalisation. De cette manière, la section de diffusion d'ordre 0 est conservée et les écarts aux ordres supérieurs sont dus uniquement à ceux introduits par le processing GENXS.

Une méthode pour valider ces sections différentielles consiste à effectuer un premier calcul cellule à l'ordre $P1$ et obtenir les six facteurs. Ensuite, un deuxième calcul est mis en œuvre en remplaçant les sections d'ordre $P1$ issues d'APOLLO2 par celles générées par GENXS. Ce calcul sera appelé *P1Mod*, et les six facteurs sont extraits à la fin du calcul pour comparer avec le premier calcul. Tab. 6.2 ci-après permet de s'assurer sur la cellule UOX du 5.3.2 que les résultats sont identiques.

281G	P1	P1Mod - P1
χ	1.00131	0
ϵ_{even}	1.02993	0
ϵ_{odd}	1.08564	0
p	0.75463	0
f	0.83169	-1
η	1.90528	0
k_∞	1.33881	-1

TAB. 6.2 – Ecart sur les six facteurs entre le calcul $P1$ et le calcul $P1Mod$.

6.4.3 Validation du calcul de l'intégrale $h_k^{n' \rightarrow n}$

Dans l'équation (6.7), les $h_k^{n' \rightarrow n}$ dépendent uniquement de la discrétisation de la sphère unité. Ces quantités peuvent donc être pré-calculées et stockées dans un fichier pour plusieurs discrétisations. A la demande de l'utilisateur, le solveur volumes finis ira récupérer la discrétisation choisie, stockant les valeurs sous forme d'un tableau.

Par ailleurs, il convient de noter que cette fonction ne peut être calculée de manière ana-

lytique. De ce fait, cette intégrale quadruple est calculée par une méthode de Monte Carlo en tirant de manière aléatoire un certain nombre de directions dans les mailles de départ et d'arrivée, n' et n respectivement. Afin d'obtenir une statistique correcte, une étude a été menée sur le nombre de tirage à effectuer pour obtenir des valeurs de $h_k^{n' \rightarrow n}$ convergées.

Fig. 6.7 présente le calcul de $h_k^{1 \rightarrow 6}$ pour un maillage angulaire de type FV6 avec $K = 16$. Seules les valeurs non-nulles sont présentées. À partir de 100000 tirages, la convergence est atteinte.

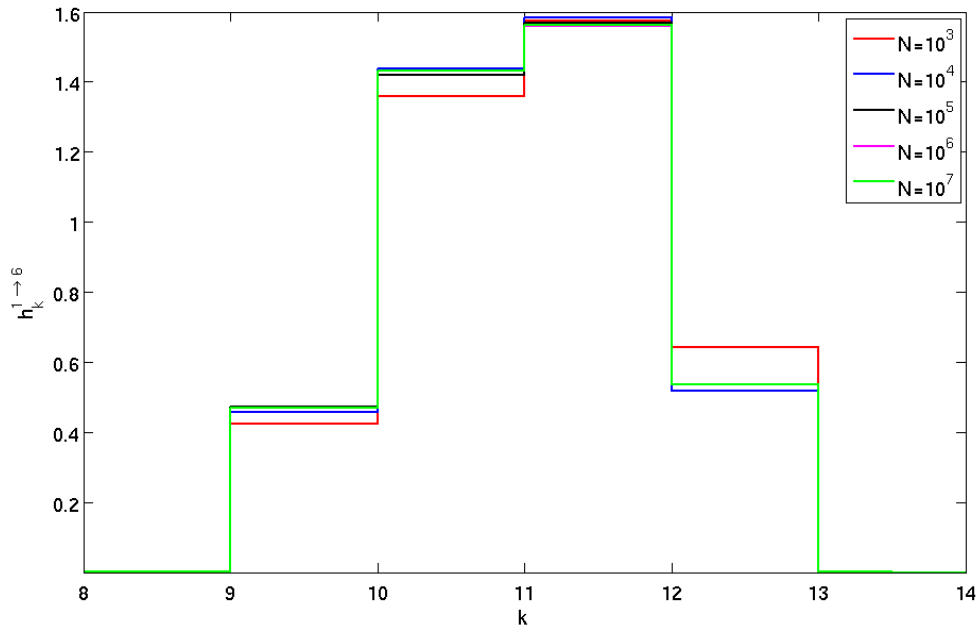


FIG. 6.7 – Convergence de $h_k^{1 \rightarrow 6}$.

L'influence de la valeur de $h_k^{n' \rightarrow n}$ est ensuite évaluée sur un calcul avec la cellule UOX utilisée plus tôt à 8 groupes et à 26 groupes (pour cause de temps de calcul et de quantité de mémoire utilisée). Cette étude cherche à déterminer le nombre de tirage de directions aléatoires N nécessaires pour obtenir un calcul convergé.

Les résultats sont donnés sur la Fig. 6.8 pour le k_∞ et le facteur antitrappe p . Dans les deux cas, le calcul est convergé à partir de 100000 tirages, et les ordres plus élevés n'amènent pas de modification significative du résultat. $N = 100000$ sera donc retenu aussi pour limiter le temps de calcul ; pour 144 directions dans la demi-sphère (équivalent au LS_{16} ou FV6), celui-ci vaut environ une demi-heure. Comme les $h_k^{n' \rightarrow n}$ peuvent être calculées en ligne pour une discrétisation pour laquelle ces quantités n'ont pas été pré-calculées, il ne faut pas que le temps nécessaire à l'évaluation de ces intégrales devienne prépondérant par rapport à la résolution du problème.

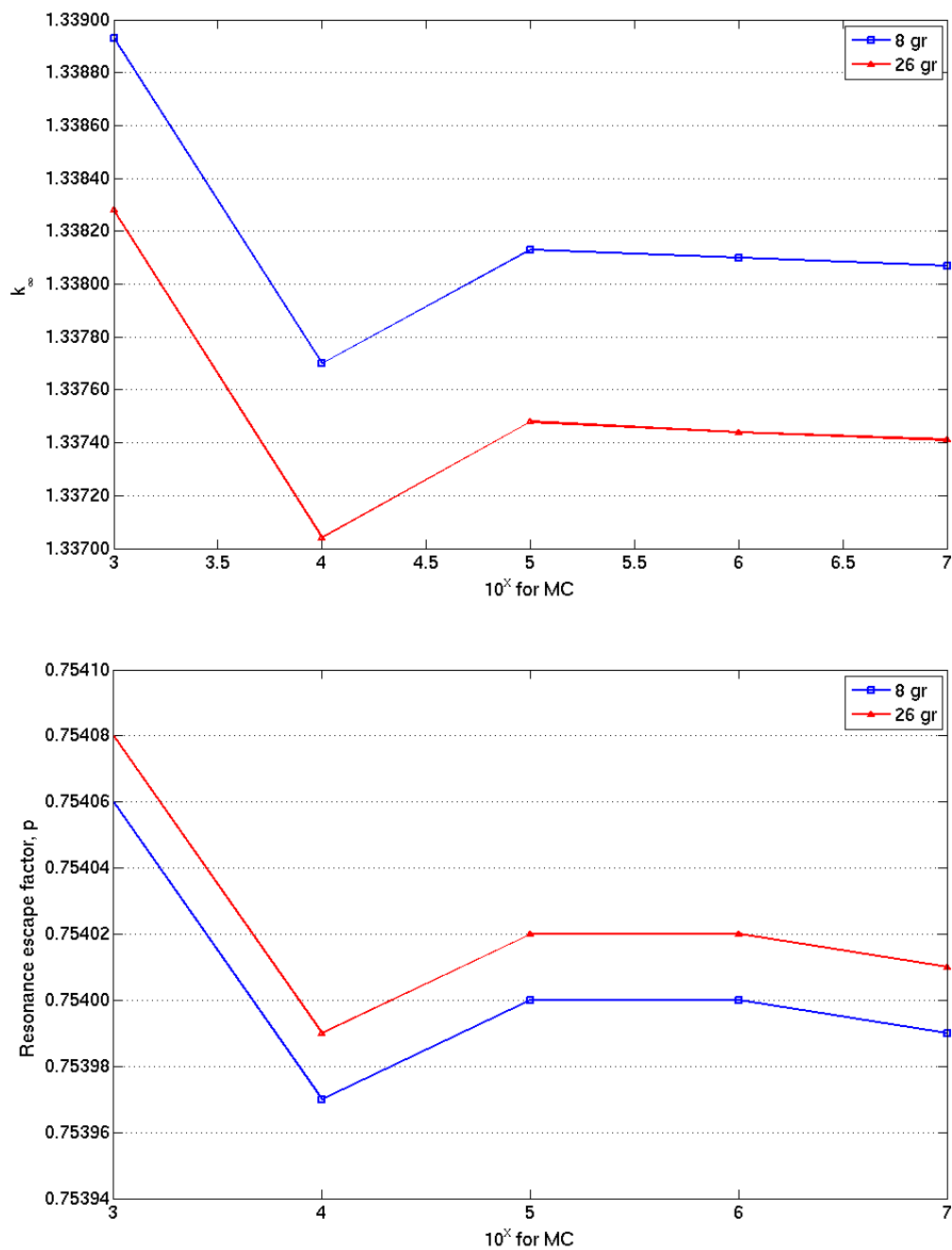


FIG. 6.8 – Convergence du k_∞ et du facteur antitrappe p en fonction de nombre de tirages et avec 144 directions dans l'hémisphère.

6.4.4 Validation du solveur volumes finis avec des sections continues par morceaux

Les sections de transfert continues par morceaux seront utilisées avec le solveur FV. Précédemment, le calcul de l'intégrale $h_k^{n' \rightarrow n}$ a été validé. Dans cette section, le calcul de flux complet sera effectué avec le formalisme de la source « hybride ».

Dans ce cadre, et afin de pouvoir se comparer à un calcul « classique », un premier calcul en $P0$ est effectué avec le solveur FV avec un maillage angulaire produit (6×6) pour la cellule UOX. Un deuxième calcul est ensuite mené avec tous les noyaux traités à un ordre d'anisotropie $P0$ sauf l'hydrogène. En supposant un découpage de $[-1, +1]$ avec un seul palier, c'est-à-dire $K = 1$, la section moyenne par morceaux équivalente à l'ordre $P0$ s'écrit :

$$\begin{aligned} \Sigma_{s_k}^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\mu_{LAB}^k - \mu_{LAB}^{k-1}} \int_{\mu_{LAB}^{k-1}}^{\mu_{LAB}^k} d\mu_{LAB} \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}, \mu_{LAB}) \\ &= \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} d\mu_{LAB} \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}, \mu_{LAB}) \\ &= \frac{1}{2} \Sigma_{s,0}^{g' \rightarrow g} \end{aligned} \quad (6.22)$$

Par ailleurs, cette section étant constante sur $[-1, +1]$, ce dernier peut être découpé en K_{P0} sous-intervalles avec les mêmes valeurs pour les $\Sigma_{s_k, P0}^{g' \rightarrow g} = \frac{1}{2} \Sigma_{s,0}^{g' \rightarrow g}$. Cet exercice a été effectué pour l'hydrogène avec $K_{P0} = 8$. De cette manière, l'hydrogène est traité à l'ordre 0 mais dans une modélisation discrète de la source de transfert. Ce calcul permet ainsi de valider la chaîne complète avec la source « hybride ».

	Pure $P0$	$P0_DisP0$ - Pure $P0$
χ	1.00131	0
ϵ_{even}	1.03008	0
ϵ_{odd}	1.08568	0
p	0.75571	0
f	0.82878	0
η	1.90532	0
k_∞	1.33629	0

TAB. 6.3 – Comparaison entre un calcul « tout » $P0$ et un calcul mixte $P0$ et sections discrètes équivalentes au $P0$ pour l'hydrogène.

Le Tab. 6.3 confirme la vérification du mécanisme de calcul qui sera employé pour la suite.

6.4.5 Effet du nombre de discrétisations

Sur la Fig. 6.9, les représentations de la section de transfert exacte sont données avec deux approximations dans le cadre des sections constantes par morceaux. 64 sous-intervalles repré-

sentent très précisément les sections de transfert mais c'est peut s'avérer excessif en regard du temps de calcul et de l'occupation mémoire.

La sensibilité du calcul à cette discrétisation a été étudiée. La géométrie de calcul utilisée est celle décrite précédemment (*cf* Fig. 5.8). L'intervalle $[-1, +1]$ a été discrétisé en 8, 16, 32 et 64 sous-intervalles et les sections de transfert continues par morceaux correspondantes ont été générées pour l'hydrogène. Le calcul a été réalisé en substituant une première fois les sections de l'hydrogène par des moments $P1$ générés par GENXS, puis par les sections discrètes.

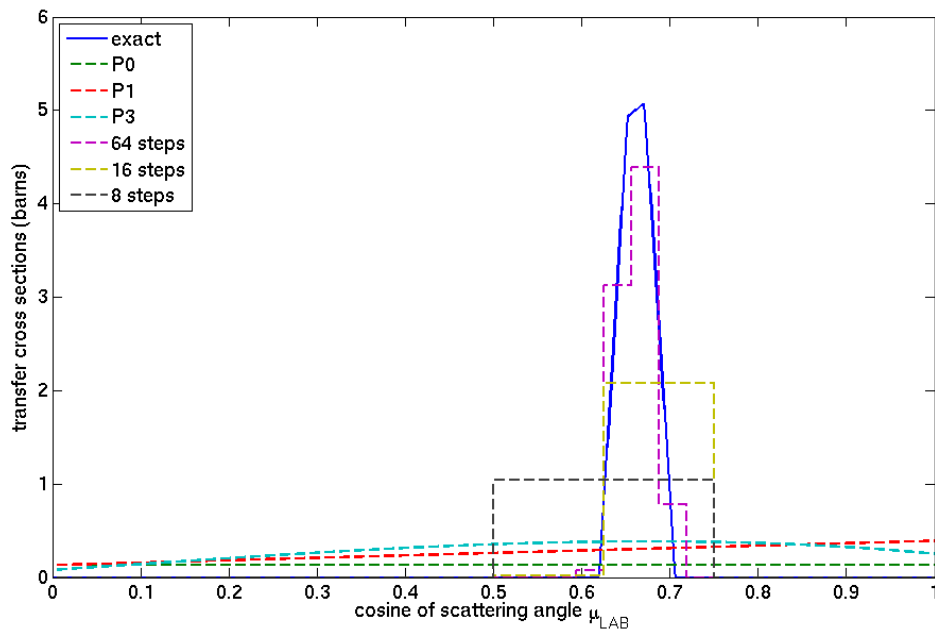


FIG. 6.9 – Sections discrètes pour l'hydrogène en 64, 16 et 8 paliers pour le transfert $20 \rightarrow 26$ dans le maillage SHEM, en comparaison avec les moments $P0$, $P1$ et $P3$.

Le nombre de discrétisations ne semble pas beaucoup affecter le résultat du calcul. La représentation en 16 paliers sera donc adoptée. En effet, c'est un bon compromis sur la modélisation de la section en termes de forme du pic et l'intervalle sur μ_{LAB} où la section exacte est non-nulle.

Remarque : Le calcul à 64 paliers pour le maillage SHEM 281 groupes n'a pu être réalisé faute d'espace mémoire.

6.5 Optimisation du solveur avec les sections discrètes

Cette section vise à mettre en avant l'optimisation en temps de calcul qui a été effectué. Cette optimisation ne change pas les résultats de validation et permet l'utilisation des sections

26G	P1	Dis8k - P1	Dis 16k-P1	Dis 32k - P1	Dis 64k - P1
χ	1.00131	0	0	0	0
ϵ_{even}	1.02998	2	2	1	1
ϵ_{odd}	1.08610	-5	-6	-6	-5
p	0.75364	43	44	44	44
f	0.83182	-74	-72	-71	-71
η	1.90528	1	1	1	1
k_∞	1.33787	-33	-31	-30	-31
<hr/>					
281G	P1	Dis8k - P1	Dis 16k-P1	Dis 32k - P1	
χ	1.00131	0	0	0	
ϵ_{even}	1.02993	8	3	7	
ϵ_{odd}	1.08564	-11	-12	-12	
p	0.75463	58	59	60	
f	0.83169	-82	-79	-79	
η	1.90528	4	4	4	
k_∞	1.33880	-23	-25	-19	

TAB. 6.4 – Sensibilité du calcul au nombre de discrétisations k de l'intervalle $[-1, +1]$

discrètes avec le solveur volumes finis dans des temps de calcul acceptables pour permettre des études nécessaires à notre travail.

Initialement, le solveur a été mis en place en modifiant un solveur S_n où l'on stockait les flux angulaires. Dans le formalisme des volumes finis, les flux intégrés par pavé de la sphère unité étaient stockés. De ce fait, les opérateurs de diffusion calculaient complètement la source de diffusion. Les opérateurs calculaient les intégrales r_n^{lm} et $h_k^{n' \rightarrow n}$, et les sauvegardaient dans des tableaux.

Le cas le plus pénalisant était le calcul de la source discrète. Calcul qui, pour G groupes, N directions, et K discrétisations de $[-1, +1]$, faisait intervenir $G^2 N^2 K$ opérations pour la somme $\sum_{k=1}^K \sum_{sk}^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}) h_k^{n' \rightarrow n}$ et $G^2 N^2$ opérations pour assembler la source complète. On suppose que les opérations de multiplication sont plus pénalisantes en terme d'algorithme.

On peut écrire l'équation de Boltzmann « volumes finis » (Eq. (6.7)) sous une forme différente (Eq. (6.23)) de sorte à avoir des opérateurs de diffusion qui prendraient moins de temps pour assembler la source de diffusion.

$$\begin{aligned}
\Omega_n \cdot \nabla \phi_n^g(\mathbf{r}) + \alpha_n \Sigma_t^g(\mathbf{r}) \phi_n^g(\mathbf{r}) = \alpha_n \Delta \Omega_n \\
\left[\frac{1}{2\pi} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \sum_{m=-l}^{+l} r_n^{lm} \sum_{g'=1}^G \Sigma_{sl}^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}) \sum_{n'=1}^N r_{n'}^{lm} \phi_{n'}^{g'}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2\pi} \sum_{k=1}^K \sum_{g'=1}^G \Sigma_{sk}^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}) \sum_{n'=1}^N h_k^{n' \rightarrow n} \phi_{n'}^{g'}(\mathbf{r}) \right. \\
\left. + \frac{1}{\Delta \Omega_n} \int_{\Delta \Omega_n} d^2 \Omega q^g(\mathbf{r}, \Omega) \right] \quad (6.23)
\end{aligned}$$

Le flux peut être stocké sous la forme d'un vecteur :

$$\left[\sum_{n'=1}^N r_{n'}^{lm} \phi_{n'}^{g'}(\mathbf{r}), \sum_{n'=1}^N h_k^{n' \rightarrow n} \phi_{n'}^{g'} \right].$$

Les projections du flux intégré par pavé $\phi_{n'}^{g'}(\mathbf{r})$ sur les intégrales des harmoniques sphériques r_n^{lm} et sur les fonctions $h_k^{n' \rightarrow n}$ sont stockées. Le vecteur stocké est ainsi $[\Phi_{lm}^g(\mathbf{r}), \Phi_{nk}^g(\mathbf{r})]$. Ceci est similaire à ce qui est fait dans un solveur de type S_n et permet pour la partie du flux projeté sur les intégrales des harmoniques sphériques de compacter l'information et de se retrouver avec des « pseudo-moments » du flux, tandis que pour la partie discrète, on stocke beaucoup plus d'objets car il y a $N \times K$ « moments » sur les fonctions $h_k^{n' \rightarrow n}$. Néanmoins, les opérateurs de diffusion sont allégés car ils n'ont qu'à faire la multiplication des « moments » par $\Sigma_{sl}^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r})$ et $\Sigma_{sk}^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r})$ pour calculer respectivement $\sum_{l=0}^L \sum_{m=-l}^{+l} \sum_{g'=1}^G \Sigma_{sl}^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}) \Phi_{lm}^g(\mathbf{r})$ et $\sum_{k=1}^K \sum_{g'=1}^G \Sigma_{sk}^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}) \Phi_{nk}^g(\mathbf{r})$. Le cas le plus pénalisant reste celui de la partie discrète de la source de diffusion et comporte G^2NK opérations. L'assemblage de la source complète est fait dans le solveur et demande GNK opérations, alors que la projection du flux intégré calculé sur les $h_k^{n' \rightarrow n}$ coûte GN^2K opérations.

Le rapport du nombre d'opérations après et avant optimisation est donc :

$$\frac{G^2NK + GN^2K + GNK}{G^2N^2K + G^2N^2} = \frac{1/G + 1/N + 1/GN}{1 + 1/K} \rightarrow \frac{1}{G} + \frac{1}{N} \quad (6.24)$$

La Fig. 6.10 présente les temps de calcul pour des traitements en polynômes de Legendre uniquement sur le cas de la cellule UOX traitée précédemment (*cf* Fig. 5.8). Les calculs ont été menés à 26 groupes. L'amélioration entre le cas optimisé et le non-optimisé est très marquée quel que soit l'ordre du développement de Legendre considéré. En effet, le gain en temps de calcul sur le développement $P1$ équivaut à un facteur 10, voire 15 en $P3$.

Par ailleurs, les temps plus longs du solveur SNATCH sont dus au fait que l'erreur résiduelle sur le flux calculé est minimisée avec un critère qui porte sur tous les moments Pn . C'est ce qui explique que le temps de calcul en S_n est d'autant plus long que l'ordre du développement est élevé. Quant au solveur volumes finis, le critère de convergence porte seulement sur le flux scalaire.

Des sections discrètes pour l'hydrogène ont ensuite été substituées aux moments de Legendre pour diverses quadratures avec le solveur volumes finis sous ses formes optimisée et non-optimisée, le cas de source mixte étant le plus défavorable. Fig. 6.11 montre les résultats obtenus pour la cellule UOX.

Avec peu de directions, le gain de l'optimisation est faible. Cependant, comme le montre l'équation (6.24), en augmentant le nombre de directions, le temps de calcul augmente rapidement pour le solveur non optimisé et un gain équivalent à un facteur de 2 est obtenu sur celui-ci à 144 directions. Ce gain est d'autant plus significatif en utilisant le maillage SHEM à 281 groupes avec 144 directions et 16 intervalles en $[-1, +1]$; le temps de calcul passe de 3 semaines à 3 jours. La quantité de mémoire occupée quant à elle augmente de 12 Go pour la version non-optimisée à 19 Go car le nombre d'objets stockés augmente significativement (un

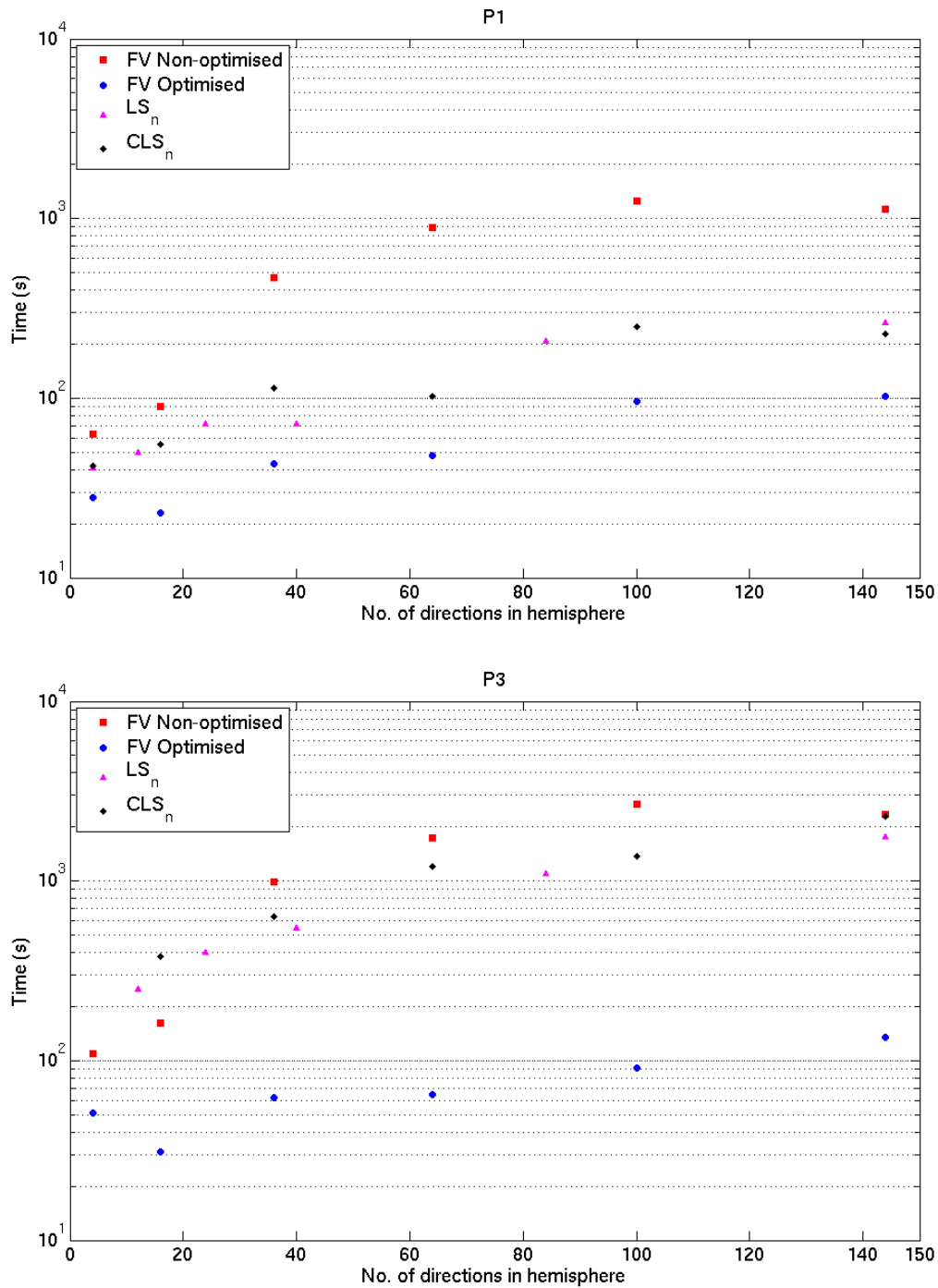


FIG. 6.10 – Temps de calcul de la cellule UOX en fonction du nombre de directions dans la demi-sphère avec et sans optimisation et en comparant aux solveurs S_n avec le même schéma spatial.

calcul à l'ordre $P3$ pour le flux stocke $(3 + 1)(3 + 2)/2 = 10$ objets à deux dimensions, tandis que le calcul avec les flux discrets, Φ_{nk}^g , garde en mémoire $N \times K$ objets, ce qui équivaut donc à (144×16) pour une quadrature type LS16 ou FV6 avec 16 paliers pour la représentation des

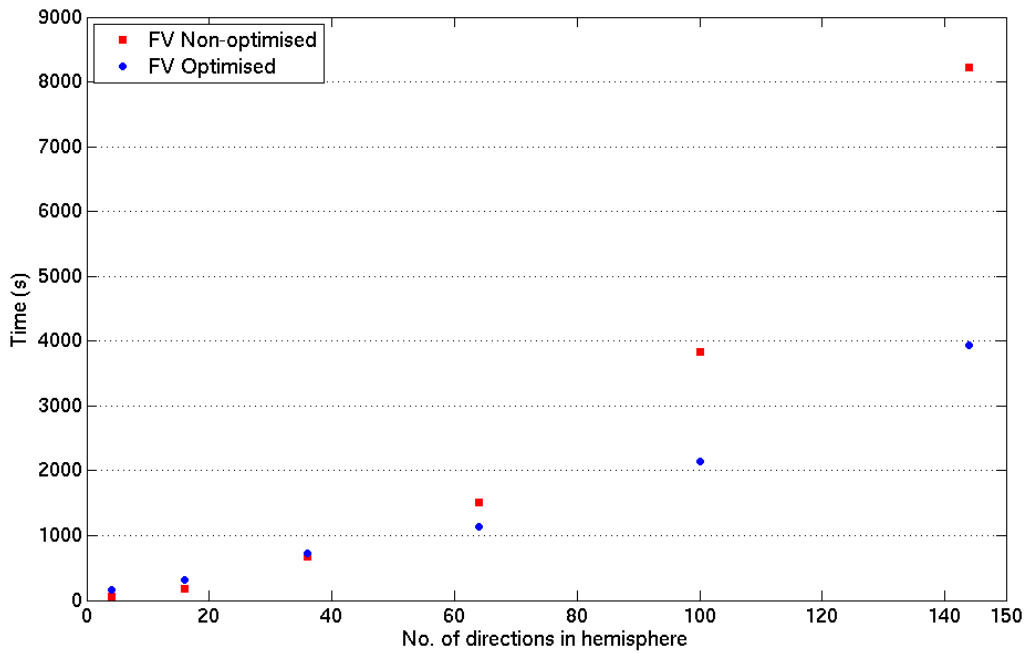


FIG. 6.11 – Temps de calcul de la cellule UOX en fonction du nombre de directions dans la demi-sphère avec et sans optimisation.

sections de transfert, soit un facteur voisin de 200).

Par ailleurs, le solveur FV a été parallélisé via un process de *multithreading* qui existe déjà pour les solveurs SNATCH. Le détail de ce processus est donné en Annexe F.

Néanmoins, le problème actuel demeure le fait que, même avec relativement peu de directions (FV6), la quantité de mémoire requise pour un calcul 2D cellule avec des sections discrètes vaut environ 20 Go. En augmentant le nombre de directions, la mémoire devient très vite le facteur limitant et prohibitif.

Remarque : Les performances du solveur FV sont étroitement liées à l’architecture de l’environnement au sein duquel il a été implanté (PARIS). En effet, SNATCH a été initialement développé pour effectuer des calculs de cœurs 3D en transport S_n . Les ordres de grandeurs associés aux discrétisations de ces problèmes sont : 10^4 mailles spatiales, 10^1 directions et 10^1 groupes d’énergies. Dans ce cadre, les optimisations ont été effectués sur la résolution spatiale du flux.

Dans le cas des calculs de cellules en 2D, la configuration est inversée car on se retrouve avec peu de mailles spatiales 10^2 , mais beaucoup de directions - 10^3 et plus de groupes - 10^2 . De ce fait, le temps passé dans le calcul du flux est plus limité par rapport au balayage angulaire et énergétique.

D'autres part, il est aussi important de faire ressortir que les solveurs SNATCH et FV ne bénéficient pas de méthode d'accélération telle qu'une accélération synthétique (le calcul de transport est initialisé avec un calcul effectué d'abord en diffusion⁶). De ce fait, le nombre d'itérations a tendance à croître en fonction du nombre de groupes. D'autre part, SNATCH a été implémenté pour le calcul de réacteur à neutrons rapides où l'*upscattering* thermique est très peu significatif par rapport aux cas d'études que nous verrons par la suite.

6.6 Conclusion

Dans ce chapitre, les sections efficaces multigroupes continues par morceaux ont été présentées et dérivées dans le cadre des volumes finis en angle. Ces sections ont ensuite été générées à partir des fichiers d'évaluation ENDF pour les chocs élastiques de l'hydrogène et du fer, ⁵⁶Fe à travers une routine, GENXS.

Ces sections générées par GENXS ont été validées par rapport à celles obtenues généralement par le code de *processing* des données nucléaires, NJOY. Les écarts obtenus sont de l'ordre de 0.5%. Par ailleurs, pour l'hydrogène, l'écart dû au *processing* par GENXS est de l'ordre du pcm sur le k_∞ et les six facteurs.

Enfin, nous avons vérifié le bon fonctionnement du mécanisme solveur volumes finis FV avec une représentation mixte sections de transfert multigroupes en moments de Legendre et sections continues par morceaux.

6. L'efficacité de cette méthode d'accélération a été étudiée pour le solveur SNATCH dans le cadre du stage de Master de Recherche de L. Naymeh [83].

Quatrième partie

Validation de la représentation
constante par morceaux pour la
modélisation de l'anisotropie du choc

Calculs de cellules en réseau infini

Dans ce chapitre, les différentes composantes qui ont été mises en place dans les parties précédentes seront utilisées pour quantifier les biais de la modélisation de l'anisotropie du choc dans les calculs déterministes. Pour ce faire, les sections efficaces de transfert multigroupes constantes par morceaux seront injectées comme données d'entrée au solveur volumes finis pour quatre cas cellules en réseau infini. Cette validation évaluera l'apport d'une représentation plus précise dans le calcul de la source de diffusion et donc, *a priori*, dans le calcul de flux.

7.1 Présentation des cas d'études

Cette étude sera menée en plusieurs étapes. Dans un premier temps, les différences entre les cas étudiés et une cellule « classique » sont quantifiées. Ces différences sont dues à :

- la géométrie utilisée pour les calculs,
- l'utilisation de l'hydrogène non-lié dans l'eau - approximation de gaz libre.

Cette étape est essentielle pour s'assurer que l'effet de l'anisotropie du choc modélisée classiquement par les polynômes de Legendre n'est pas affecté significativement par ces changements. Ensuite, les effets dus aux sections constantes par morceaux pourront être analysés.

La validation de la modélisation avec des sections de transfert multigroupes constantes par morceaux porte sur quatre cas d'études pour les cellules en réseau infini : une cellule à combustible UOX à froid (293 K) [84], un cas MOX à froid (293 K), puis à chaud (873 K) et une cellule MOX à chaud vidangée à 40%. Ces cellules contiennent toutes du bore ^{10}B d'une concentration de 1000 ppm. Tab. 7.1 à Tab. 7.3 résument les compositions des divers milieux.

Milieu	Isotope	Conc en 10^{24} atomes/cm ³
COMBUSTIBLE	^{238}U	2.15E-02
	^{235}U	9.09E-04
	^{234}U	6.85E-06
	^{16}O	4.49E-02
VIDE	^{27}Al	1.00E-08
GAINE	Zr Nat	3.75E-02
MODÉRATEUR 293 K	^1H	6.65E-02
	^{16}O	3.32E-02
	^{10}B	1.11E-05

TAB. 7.1 – Composition des milieux dans la cellule UOX.

Milieu	Isotope	Conc en 10^{24} atomes/cm ³
COMBUSTIBLE	²³⁴ U	8.44E-07
	²³⁵ U	5.16E-05
	²³⁶ U	2.01E-07
	²³⁸ U	2.11E-02
	²³⁸ Pu	2.12E-05
	²³⁹ Pu	9.12E-04
	²⁴⁰ Pu	3.86E-04
	²⁴¹ Pu	1.25E-04
	²⁴² Pu	8.31E-05
	²⁴¹ Am	4.76E-05
	¹⁶ O	4.59E-02
VIDE	²⁷ Al	1.00E-08
GAINÉ	Zr Nat	3.75E-02
MODÉRATEUR 293 K	¹ H	6.65E-02
	¹⁶ O	3.32E-02
	¹⁰ B	1.11E-05

TAB. 7.2 – Composition des milieux dans la cellule MOX à froid.

Milieu	Isotope	Conc en 10^{24} atomes/cm ³
MODÉRATEUR 573 K	¹ H	4.84E-02
	¹⁶ O	2.42E-02
	¹⁰ B	8.07E-06
MODÉRATEUR 40% vide 573 K	¹ H	2.90E-02
	¹⁶ O	1.45E-02
	¹⁰ B	4.84E-06

TAB. 7.3 – Composition du modérateur dans les cellules MOX à chaud et MOX vidangée à 40%.

Comme les combustibles ne sont pas les mêmes et les rapports de modération sont modifiés par les températures, les spectres de ces diverses cellules sont différents et sont présentés dans la Fig. 7.1. On observe une atténuation du spectre à basse énergie en passant du combustible UOX au MOX. Dans le MOX, les isotopes plutonifères ont des sections efficaces d'absorption plus élevées que celles des isotopes d'uranium dans le domaine thermique. De ce fait, les neutrons seront plus absorbés entraînant un déplacement du spectre vers les hautes énergies. Par ailleurs, sur les cellules moxées, cette atténuation thermique s'observe aussi en diminuant le rapport de modération car les neutrons effectuent moins de chocs, ont un gain plus faible en léthargie, provoquant un durcissement du spectre. Ainsi, cet effet du spectre sur l'anisotropie est mis en avant dans les études qui suivent.

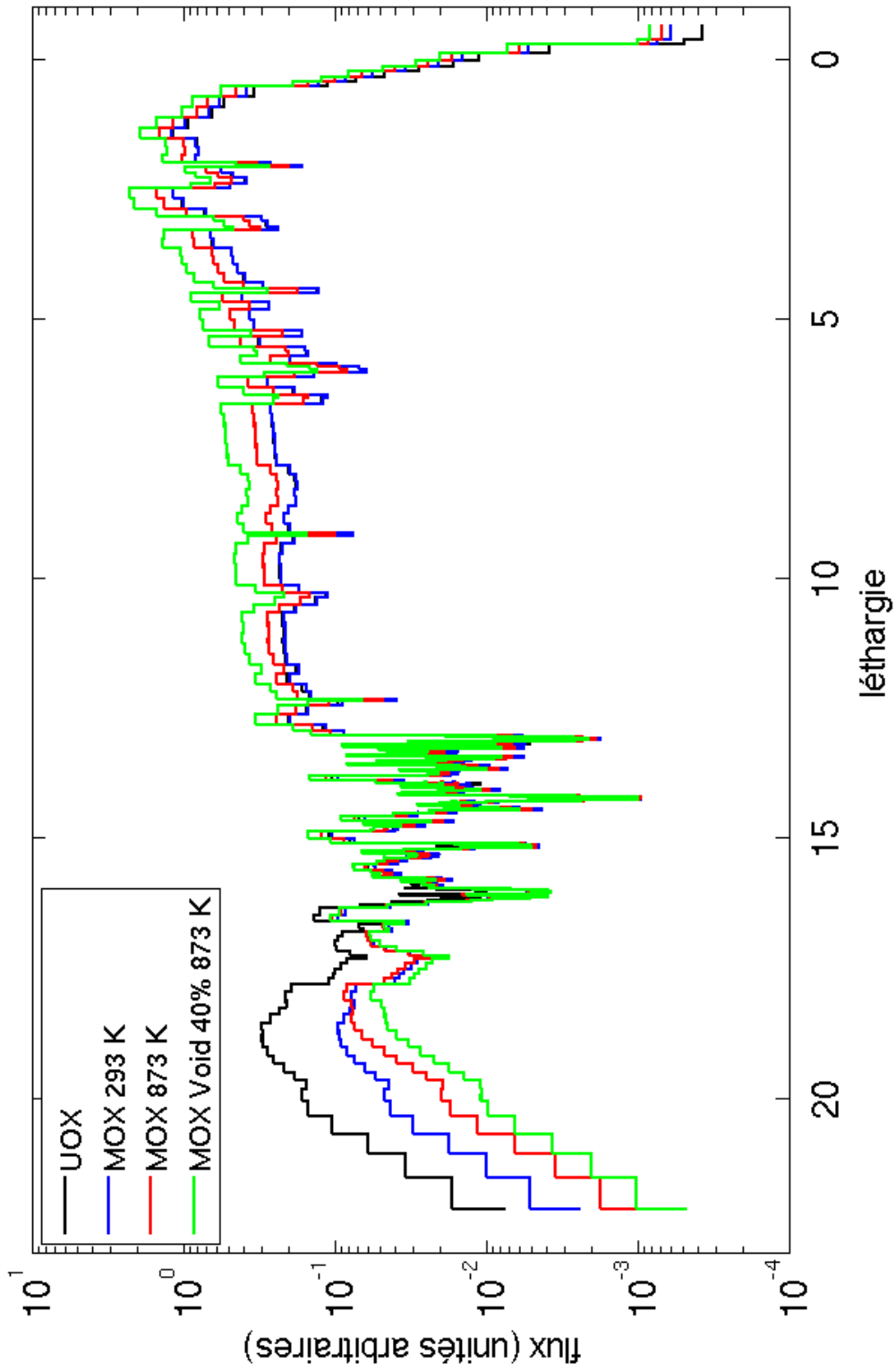


FIG. 7.1 – Spectre des différents cas.

7.2 Du combustible cylindrique au combustible carré

Dans cette section, les hypothèses qui ont été faites pour étudier l'anisotropie du choc seront validées. Deux différences majeures sont apportées dans les cas d'études par rapport à un calcul cellule « classique » : la géométrie du combustible et l'état de l'eau.

Dans les calculs « classiques » avec le solveur MOC, la cellule de combustible est décrite avec sa géométrie réelle. Cependant, dans l'étude qui est proposée ici, le solveur volumes finis en angle ne traite que des cas bidimensionnels cartésiens. De ce fait, le crayon combustible cylindrique est approximé par un emboîtement de carrés qui conservent les volumes du combustible, du gap et de la gaine. Le combustible est découpé en 4 couronnes pour prendre en compte le gradient du flux. La géométrie modifiée est montrée dans la Fig. 7.2.

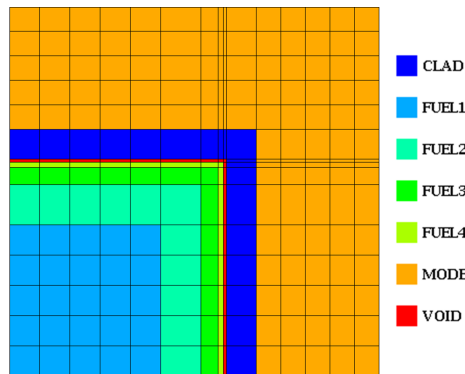


FIG. 7.2 – Géométrie de la cellule carrée.

Tab. 7.4 résume les données géométriques pour une cellule à crayon combustible carré. Les effets dus à ce changement de géométrie ont été quantifiés.

	Rayon (cm)	Demi-côte carré (cm)
COMB1	0.2915	0.2583
COMB2	0.3687	0.3267
COMB3	0.4018	0.3561
COMB4	0.4123	0.3654
GAINE INT.	0.4187	0.3711
GAINE EXT.	0.4758	0.4217
DEMI COTE		0.6310

TAB. 7.4 – Données géométriques pour la cellule à combustible cylindrique (gauche) et carrée (droite).

D'autre part, l'eau est considérée comme étant un gaz d'hydrogène et d'oxygène non lié. Cette simplification a été faite pour pouvoir générer de manière simple des sections différentielles pour l'hydrogène sans prendre en compte les effets des liaisons moléculaires. En effet, l'hydrogène lié dans l'eau ne se comporte pas de la même manière que l'hydrogène libre [85]. Il est donc

essentiel de démontrer que l'utilisation de l'hydrogène non-lié pour notre étude ne change pas les effets quant à la physique de l'anisotropie du choc.

Pour quantifier les biais dus à la géométrie carrée du combustible et à l'hydrogène non-lié, les calculs sont effectués avec le code stochastique TRIPOLI4 et le code déterministe APOLLO2. Un calcul avec une cellule de référence constituée d'un crayon cylindrique classique et de l'eau liée est effectué avec les deux codes. Il sert de référence pour chaque changement qui sera quantifié. Cette quantification se fera à un code donné, c'est-à-dire la comparaison du k_∞ dû au changement de géométrie avec TRIPOLI4 par rapport au calcul TRIPOLI4 de référence et de même pour APOLLO2.

Les calculs TRIPOLI4 sont réalisés de sorte à avoir une convergence de quelques pcm sur le k_∞ (à 1σ). Quant aux calculs APOLLO2, le solveur utilisé est le solveur MOC en schéma « STEP » avec un maillage spatial très raffiné en crayon cylindrique et carré (*cf* Fig. 4.9 pour le cylindrique et Fig. 7.2 pour le carré). Les paramètres de tracking (voir le § 2.2.2.2 de ce document) pour la discrétisation angulaire en azimutal et polaire sont respectivement $N_\varphi=60$ et $N_\mu=12$, et pour la densité de trajectoires $\Delta r=0.0025$. Le maillage énergétique utilisé est le maillage SHEM à 281 groupes. Les calculs sont réalisés pour plusieurs ordres de Legendre, P_n ($n = 0, 1, 3, 5$) et pour l'ordre 0 avec la correction de transport qui sera noté, $P0c^1$.

Ils sont effectués suivant la logique ci-dessous :

- pour quantifier l'effet de géométrie (Geo. Eff.), la géométrie de la cellule de référence est modifiée en substituant les rayons par les dimensions de carrés équivalentes. L'eau reste liée.
- pour quantifier l'effet de l'hydrogène libre (Free H Eff.), l'eau dans la cellule de référence est remplacée par de l'hydrogène et de l'oxygène en concentrations équivalentes. La géométrie cylindrique reste inchangée.
- pour valider les biais globaux avec APOLLO2, la géométrie et l'état de l'eau de la cellule de référence sont modifiés simultanément.

Les résultats des calculs qui quantifient chaque effet séparément sont présentés dans le tableau Tab. 7.5. Tab. 7.6 présente les écarts $P_n - P_5$ des calculs APOLLO2 qui visent à valider les effets totaux.

Dans Tab. 7.5, il est observé que les effets entre les calculs TRIPOLI4 et le développement P_3 sont cohérents entre eux sur tous les cas pour ce qui est des effets dus à la géométrie. Le $P0c$ présente cependant des écarts plus élevés et pouvant aller jusqu'à 80 pcm sur le k_∞ et 200 pcm sur le facteur antitrappe (V40). Les interprétations physiques avec le $P0c$ seront ainsi plus sensibles aux effets de géométrie.

L'effet dû à l'utilisation de l'hydrogène non lié est aussi cohérent entre les calculs TRIPOLI4 et les calculs en MOC. Il faut cependant noter que les calculs TRIPOLI4 ont été effectués avec

1. *cf* Annexe D pour le détail de la correction de transport.

UOX 293 K	T4 Cyl Ref	U (1 σ)	TRIPOLI4		MOC 60 12 P3		MOC 60 12 P0c	
			Geo. Eff.	Free H Eff.	Geo. Eff.	Free H Eff.	Geo. Eff.	Free H Eff.
χ	1.00128	31	-3	0	0	0	0	0
ϵ_{even}	1.03182	22	5	-12	2	-12	2	-10
ϵ_{odd}	1.08781	34	46	-175	41	-178	33	-173
p	0.74708	17	-524	202	-491	201	-457	201
f	0.82357	14	259	57	243	57	250	30
η	1.88558	20	-2	110	-1	111	-1	110
k_{∞}	1.30386	4	-219	183	-207	180	-173	158
<hr/>								
MOX 293 K	T4 Cyl Ref	U (1 σ)	TRIPOLI4		MOC 60 12 P3		MOC 60 12 P0c	
			Geo. Eff.	Free H Eff.	Geo. Eff.	Free H Eff.	Geo. Eff.	Free H Eff.
χ	1.00158	36	-5	5	0	0	0	0
ϵ_{even}	1.04713	29	37	-72	35	-75	32	-73
ϵ_{odd}	1.19996	46	270	-470	269	-472	244	-465
p	0.59827	18	-1173	1232	-1169	1259	-1093	1286
f	0.92175	20	299	-465	290	-467	296	-511
η	1.67113	21	-64	684	-68	683	-66	678
k_{∞}	1.15981	4	-637	913	-644	929	-587	915
<hr/>								
MOX 873 K	T4 Cyl Ref	U (1 σ)	TRIPOLI4		MOC 60 12 P3		MOC 60 12 P0c	
			Geo. Eff.	Free H Eff.	Geo. Eff.	Free H Eff.	Geo. Eff.	Free H Eff.
χ	1.00183	35	-2	1	0	0	0	0
ϵ_{even}	1.06418	30	72	-88	69	-87	62	-88
ϵ_{odd}	1.31374	52	459	-634	465	-604	410	-608
p	0.49677	16	-1438	1287	-1436	1257	-1296	1293
f	0.95153	22	171	-171	168	-163	168	-179
η	1.64320	23	-56	456	-58	441	-55	442
k_{∞}	1.08794	4	-795	851	-791	845	-710	860
<hr/>								
V40 873 K	T4 Cyl Ref	U (1 σ)	TRIPOLI4		MOC 60 12 P3		MOC 60 12 P0c	
			Geo. Eff.	Free H Eff.	Geo. Eff.	Free H Eff.	Geo. Eff.	Free H Eff.
χ	1.00227	39	-1	-5	0	0	0	0
ϵ_{even}	1.09675	35	86	-121	81	-120	71	-123
ϵ_{odd}	1.64026	75	690	-1154	669	-1101	558	-1120
p	0.35605	13	-1426	1665	-1400	1622	-1202	1682
f	0.97161	28	92	-126	92	-119	88	-135
η	1.61927	28	-53	547	-53	521	-48	527
k_{∞}	1.00996	4	-605	809	-611	805	-532	831

TAB. 7.5 – Ecart en pcm dus au changement de géométrie et à l'utilisation de l'hydrogène libre.

une version de TRIPOLI4 modifiée. La coupure de la loi des gaz libres est prise à $1000kT/A^2$ dans TRIPOLI4 tandis que dans APOLLO2, elle est fixée à 4 eV pour tous les noyaux pour la bibliothèque CEA2005V4.1. De ce fait, dans TRIPOLI4, l'*upscattering* est permis à une énergie plus élevée - de l'ordre de quelques dizaines d'eV - et induit des biais importants, de l'ordre de 300 pcm sur le facteur antitrappe, par rapport à un calcul APOLLO2. Une modification a été apportée dans TRIPOLI4 afin de fixer cette coupure à 4 eV. Les biais sans la modification sont donnés dans l'Annexe G.

D'après l'Annexe B, le facteur antitrappe p s'écrit :

$$p = \frac{A_2}{A_1 + A_2 - (F_1^{even} + F_1^{odd})} = \frac{A_2}{C_1 + A_2} \quad (7.1)$$

où les indices 1 et 2 sont les domaines rapide et thermique respectivement et A , C et F sont les taux d'absorption, de capture et de fission respectivement.

En négligeant la prise en compte des liaisons moléculaires avec l'utilisation de l'hydrogène non-lié, le gain moyen en léthargie des neutrons est plus grand et de ce fait, ils ont une probabilité plus forte de se faire absorber dans le domaine thermique, ce qui se traduit par un facteur antitrappe plus élevé.

Par ailleurs, Tab. 7.6 présente les écarts $P_n - P_5$ pour les différentes cellules.

Les écarts $P_n - P_5$ sont faiblement impactés - au maximum une vingtaine de pcm - par le fait d'utiliser une géométrie cartésienne pour le crayon combustible et de l'eau non-liée. L'ordre le plus touché est le $P0c$, et comme le montre Tab. 7.5, l'effet de changement de géométrie est différent - avec des écarts de 200 pcm - par rapport au calcul $P3$ ou au calcul TRIPOLI4.

2. Ce qui équivaut à 25 eV pour l'hydrogène libre à 293 K au lieu de 1.4 eV pour l'hydrogène lié dans l'eau.

UOX 293 K	Cylindrique H ₂ O				Carré ¹ H, ¹⁶ O			
	P0-P5	P1-P5	P3-P5	P0c-P5	P0-P5	P1-P5	P3-P5	P0c-P5
χ	0	0	0	-1	0	0	0	0
ϵ_{even}	10	1	0	-16	10	-1	0	-16
ϵ_{odd}	9	18	0	-14	11	11	0	-16
p	56	-59	0	127	54	-58	0	160
f	-198	5	-4	-101	-202	50	-4	-122
η	1	-1	0	1	1	-1	0	0
k_{∞}	-121	-36	-4	-4	-127	-1	-4	6
MOX 293 K	P0-P5	P1-P5	P3-P5	P0c-P5	P0-P5	P1-P5	P3-P5	P0c-P5
χ	0	0	0	-1	0	0	0	-1
ϵ_{even}	5	8	0	-31	6	5	0	-33
ϵ_{odd}	-43	89	-1	-96	-32	72	1	-114
p	205	-221	-1	354	182	-200	-5	465
f	-232	32	-3	-157	-221	83	-4	-203
η	50	-27	1	45	31	-34	1	44
k_{∞}	-15	-119	-5	114	-33	-75	-7	159
MOX 873 K	P0-P5	P1-P5	P3-P5	P0c-P5	P0-P5	P1-P5	P3-P5	P0c-P5
χ	0	0	0	-1	0	0	0	-1
ϵ_{even}	0	11	0	-48	1	9	0	-56
ϵ_{odd}	-67	117	-3	-202	-58	108	-1	-263
p	180	-240	2	547	158	-229	-3	730
f	-105	20	-2	-98	-91	37	-2	-118
η	29	-21	1	36	20	-25	0	42
k_{∞}	36	-114	-2	235	29	-99	-5	335
V40 873 K	P0-P5	P1-P5	P3-P5	P0c-P5	P0-P5	P1-P5	P3-P5	P0c-P5
χ	0	0	0	0	0	0	0	0
ϵ_{even}	-1	11	0	-64	1	10	0	-79
ϵ_{odd}	-67	143	-7	-457	-51	139	-3	-590
p	111	-221	7	833	87	-219	0	1098
f	-37	7	-2	-58	-31	16	-1	-80
η	18	-15	1	40	11	-20	1	54
k_{∞}	24	-76	-1	294	16	-73	-3	403

TAB. 7.6 – Ecart en pcm dus au changement de géométrie et à l'utilisation de l'hydrogène libre sur les effets $P_n - P_5$.

7.3 Analyse physique sur des cellules en réseau infini

Les cellules utilisées sont les cellules avec les combustibles à géométrie carrée. Le maillage spatial utilisé est le maillage raffiné de la Fig. 5.8 car celui-ci est convergé spatialement. Le maillage énergétique est le maillage à 281 groupes SHEM.

Dans tous ces calculs, le nombre de directions de la quadrature angulaire est constant et est égal à 144. Ceci correspond à la quadrature symétrique par niveau (« level-symmetric ») d'ordre 16 pour le solveur S_n . Dans le cas du MOC avec l'option de tracking cyclique, la discrétisation angulaire retenue est $N_\varphi=12$ et $N_\mu=3$. Pour le solveur en volumes finis, un octant de sphère est découpé régulièrement en 36 pavés, ce qui revient à découper les intervalles des angles azimutaux et polaires en 6 chacun (FV 6 6). Dans les études qui suivront, MOC $N_\varphi N_\mu$ ou FV $N_\varphi N_\mu$ dénomme le solveur utilisé avec le nombre de discrétisations pour les angles azimutaux et polaires.

Dans un premier temps, le nombre de directions choisi correspond au S_{16} car celui-ci permet d'effectuer les calculs avec les sections discrètes en un temps acceptable et avec une quantité de mémoire facilement disponible (~ 20 Go) (c'est surtout la quantité de mémoire qui est le facteur limitant car la majorité des ordinateurs à notre disposition, de type PC, possèdent 24 Go de mémoire). Pour quelques cas, des calculs ont pu être menés avec des quadratures angulaires plus élevées ($N_\varphi=24$ et $N_\mu=12$) avec le solveur volumes finis³, mais la mémoire nécessaire est conséquente (de l'ordre de 100 Go).

3. Calculs lancés sur un serveur de calcul.

7.3.1 Comparaisons des écarts $P_n - P_5$

Cette partie quantifie les effets d'anisotropie observés avec le traitement classique en développement en moments de Legendre pour les cas d'étude énoncés plus haut. Les résultats des différents calculs sont donnés dans les tableaux Tab. 7.7 et Tab. 7.8. Ces derniers montrent le bon comportement du solveur FV par rapport aux autres solveurs du code APOLLO2 ou de SNATCH avec des quadratures symétriques par niveau (« level-symmetric ») ou produit (Tchebychev-Legendre).

Dans tous les cas, les écarts entre les divers ordres de Legendre « classiques » P_0 , P_1 et P_3 par rapport au P_5 entre les divers solveurs restent du même ordre de grandeur sur les six facteurs et sur le k_∞ calculé.

Quant au P_0c , les écarts des calculs avec les quadratures « level-symmetric » sont plus importants que pour les autres ordres P_n . Ces écarts sur le facteur antitrappe valent une centaine de pcm pour l'UOX, 200 et 400 pcm pour le MOX à froid et à chaud et 600 pcm sur le cas vidangé. Par ailleurs, sur les cas avec du combustible moxé, le spectre étant décalé vers de plus hautes énergies, les fissions rapides sont favorisées. Le P_0c utilisé avec la quadrature symétrique par niveau S_{16} surestime fortement le calcul du facteur de fission rapide impair par rapport au calcul P_5 - jusqu'à 450 pcm sur le cas vidangé.

D'autre part, si les calculs en MOC 12 3 sont comparés aux calculs en MOC 60 12 convergé spatialement et angulairement, on observe que les calculs en P_0c sont très sensibles aux effets de quadratures comme le confirme l'étude de l'Annexe D. Les écarts sur l'UOX sont relativement faibles et valent +80 pcm sur le k_∞ et +160 pcm sur le facteur antitrappe. Cependant, ces écarts augmentent sur les cas de cellules MOX de quelques centaines de pcm sur p à une surestimation de plus de 1000 pcm pour le V40. Les écarts entre les ordres classiques $P_n - P_5$ sont faiblement impactés par la quadrature angulaire en MOC - de l'ordre de quelques dizaines de pcm, valant au maximum 50 pcm sur le facteur antitrappe en V40.

Les calculs en P_3 sont presque convergés par rapport à un calcul en P_5 qui ne diffère que de quelques pcm. Sur les diverses cellules étudiées, les écarts $P_n - P_5$ en MOC et en FV sont voisins à un nombre de directions fixé.

	UOX 293 K					MOX 293 K			
MOC 12 3	P0-P5	P1-P5	P3-P5	P0c-P5		P0-P5	P1-P5	P3-P5	P0c-P5
χ	0	0	0	-1		0	0	0	-1
ϵ_{even}	12	1	0	-22		8	6	1	-32
ϵ_{odd}	10	10	0	15		-39	67	1	21
p	60	-53	1	12		204	-181	-2	80
f	-208	42	-5	-78		-226	76	-4	-136
η	1	-1	0	-1		34	-32	0	13
k_{∞}	-124	0	-4	-75		-19	-64	-5	-55
S_{16} LS									
χ	0	0	0	0		0	0	0	0
ϵ_{even}	12	1	0	4		8	6	0	9
ϵ_{odd}	10	10	0	45		-41	66	1	155
p	63	-53	0	-108		208	-182	-3	-250
f	-209	45	-4	-28		-227	79	-4	-73
η	1	-1	0	-3		34	-33	0	-17
k_{∞}	-123	2	-4	-90		-18	-64	-5	-176
S_{16} SNATCH									
χ	0	0	0	0		0	0	0	0
ϵ_{even}	11	0	0	6		7	6	0	8
ϵ_{odd}	10	10	0	37		-38	68	1	115
p	60	-54	0	-67		201	-187	-3	-141
f	-207	46	-4	-49		-225	81	-4	-96
η	1	-1	0	-2		33	-33	0	-7
k_{∞}	-124	1	-4	-74		-21	-67	-6	-121
S_{16} Cheby Leg									
χ	0	0	0	-1		0	0	0	-1
ϵ_{even}	12	1	0	-23		8	6	1	-35
ϵ_{odd}	11	11	0	11		-34	70	1	8
p	57	-56	0	44		190	-194	-4	144
f	-205	47	-4	-79		-222	82	-4	-148
η	1	-1	0	-1		32	-34	0	16
k_{∞}	-125	1	-4	-49		-26	-69	-6	-16
FV 6 6									
χ	0	0	0	-1		0	0	0	-1
ϵ_{even}	12	1	0	-23		8	6	1	-34
ϵ_{odd}	10	10	0	13		-38	66	1	18
p	60	-53	0	26		201	-182	-4	94
f	-204	45	-3	-73		-224	77	-3	-135
η	1	-1	0	-1		33	-32	0	13
k_{∞}	-122	2	-3	-60		-19	-65	-5	-43
MOC 60 12									
χ	0	0	0	0		0	0	0	-1
ϵ_{even}	10	-1	0	-16		6	5	0	-33
ϵ_{odd}	11	11	0	-16		-32	72	1	-114
p	54	-58	0	160		182	-200	-5	465
f	-202	50	-4	-122		-221	83	-4	-203
η	1	-1	0	0		31	-34	1	44
k_{∞}	-127	-1	-4	6		-33	-75	-7	159

TAB. 7.7 – UOX et MOX à froid : Ecart sur les six facteurs entre les ordres de Legendre.

MOC 12 3	MOX 873 K				MOX 873 K V40			
	P0-P5	P1-P5	P3-P5	P0c-P5	P0-P5	P1-P5	P3-P5	P0c-P5
χ	0	0	0	0	0	0	0	0
ϵ_{even}	1	10	0	-33	-1	9	0	-23
ϵ_{odd}	-73	95	-1	36	-86	107	-4	129
p	191	-198	0	77	141	-166	4	-60
f	-94	33	-2	-66	-34	13	-2	-25
η	22	-23	0	5	15	-16	1	-8
k_{∞}	48	-83	-2	18	36	-53	0	13
S_{16} LS								
χ	0	0	0	0	0	0	0	0
ϵ_{even}	0	9	0	19	-3	7	0	31
ϵ_{odd}	-82	89	-1	268	-110	90	-4	456
p	208	-189	1	-412	177	-141	5	-606
f	-96	33	-2	-17	-35	12	-1	11
η	24	-22	0	-27	17	-14	1	-40
k_{∞}	54	-80	-2	-168	46	-46	1	-147
S_{16} SNATCH								
χ	0	0	0	0	0	0	0	0
ϵ_{even}	0	9	0	17	-2	7	0	29
ϵ_{odd}	-75	94	-1	207	-98	98	-4	381
p	195	-198	0	-280	160	-153	4	-484
f	-94	34	-2	-32	-35	12	-1	3
η	23	-23	0	-18	16	-15	1	-33
k_{∞}	48	-84	-3	-105	41	-51	0	-104
S_{16} Cheby Leg								
χ	0	0	0	4	0	0	0	0
ϵ_{even}	2	10	1	165	0	10	0	-32
ϵ_{odd}	-64	101	-1	430	-73	117	-3	64
p	171	-214	-1	-958	120	-185	2	65
f	-92	36	-2	79	-32	14	-1	-31
η	21	-24	0	-54	13	-17	1	-4
k_{∞}	39	-91	-3	-334	29	-60	-1	62
FV 6 6								
χ	0	0	0	0	0	0	0	0
ϵ_{even}	1	9	0	-35	-1	9	0	-26
ϵ_{odd}	-72	94	-1	31	-84	106	-3	118
p	188	-197	0	93	138	-166	3	-35
f	-93	33	-2	-65	-33	13	-1	-25
η	22	-22	0	5	15	-16	1	-8
k_{∞}	46	-83	-3	28	35	-54	-1	24
MOC 60 12								
χ	0	0	0	-1	0	0	0	0
ϵ_{even}	1	9	0	-56	1	10	0	-79
ϵ_{odd}	-58	108	-1	-263	-51	139	-3	-590
p	158	-229	-3	730	87	-219	0	1098
f	-91	37	-2	-118	-31	16	-1	-80
η	20	-25	0	42	11	-20	1	54
k_{∞}	29	-99	-5	335	16	-73	-3	403

TAB. 7.8 – MOX à chaud et MOX V40% : Ecart sur les six facteurs entre les ordres de Legendre.

7.3.2 Effets des sections discrètes

Les sections de l'hydrogène sont maintenant substituées par les sections constantes par morceaux en utilisant une discrétisation de l'intervalle $[-1, +1]$ en 16 sous-intervalles. Les autres noyaux sont traités à l'ordre $P1$.

La comparaison des résultats P1Mod-P1 effectuée dans la partie précédente avait permis de conclure sur la fiabilité des sections différentielles produites par GENXS pour l'hydrogène à 293 K et à 573 K. Les écarts observés quel que soit le cas d'étude sont de l'ordre du pcm au maximum sur tous les facteurs considérés. De ce fait, ceci permet de faire confiance aux sections discrètes qui elles sont produites à partir de ces sections différentielles.

Les résultats sont présentés dans les tableaux Tab. 7.9 et Tab. 7.10. Dans Tab. 7.9, les calculs avec les sections discrètes confirment la convergence des résultats de l'ordre $P1$ au $P3$ sur les différents cas calculés. En effet, les écarts $Pn - Discrete$ diminuent lorsque l'ordre du développement n est augmenté démontrant ainsi la convergence des calculs avec l'ordre du développement Pn .

UOX 293 K	P1-Discrete	P3-Discrete	MOX 293K	P1-Discrete	P3-Discrete
χ	0	0	χ	0	0
ϵ_{even}	-2	-3	ϵ_{even}	5	-1
ϵ_{odd}	13	3	ϵ_{odd}	80	14
p	-60	-6	p	-238	-61
f	71	24	f	113	34
η	-4	-4	η	-54	-22
k_{∞}	17	13	k_{∞}	-94	-36

MOX 873K	P1-Discrete	P3-Discrete	MOX V40	P1-Discrete	P3-Discrete
χ	0	0	χ	0	0
ϵ_{even}	5	-4	ϵ_{even}	5	-3
ϵ_{odd}	131	36	ϵ_{odd}	178	69
p	-291	-94	p	-284	-116
f	55	20	f	25	10
η	-49	-27	η	-47	-31
k_{∞}	-150	-70	k_{∞}	-123	-71

TAB. 7.9 – Résultats avec les sections de transferts discrètes en FV 6 6.

Tab. 7.9 montre que les écarts $Pn - Discrete$ sont très faibles pour la cellule UOX, notamment les écarts $P3 - Discrete$ sur les six facteurs qui sont de l'ordre de quelques pcm voire une vingtaine de pcm. Ceci confirme la convergence du calcul par rapport à l'anisotropie à l'ordre $P3$ pour les cellules UOX en réseau infini.

Pour les cellules moxées, les écarts $Pn - Discrete$ sont relativement plus élevés que pour l'UOX et atteignent une centaine de pcm. De plus, les écarts $Pn - Discrete$ augmentent en diminuant le rapport de modération.

Tab. 7.10 présente les comparaisons $Pn - Discrete$ pour l'UOX et le MOX vidangée à chaud, V40 pour des calculs effectués à une quadrature plus élevée, avec une discrétisation azimutale et polaire valant 24 et 12 respectivement afin d'assurer la convergence angulaire du calcul. En comparant les valeurs de Tab. 7.9 à celles de Tab. 7.10, on peut ainsi noter que l'effet $P1 - Discrete$ est faiblement affecté, de l'ordre de 50 pcm sur le facteur antitrappe pour le V40, tandis que $P3 - Discrete$ est quasiment indépendant de la finesse de la quadrature.

UOX 293 K	P1-Discrete	P3-Discrete	MOX V40	P1-Discrete	P3-Discrete
χ	0	0	χ	0	0
ϵ_{even}	-4	-4	ϵ_{even}	8	-2
ϵ_{odd}	12	2	ϵ_{odd}	205	68
p	-62	-5	p	-327	-116
f	76	25	f	28	11
η	-4	-4	η	-50	-30
k_{∞}	18	14	k_{∞}	-137	-70

TAB. 7.10 – Résultats avec les sections de transferts discrètes avec des quadratures FV 24 12.

Ces premières analyses indiquent que les calculs semblent converger au sens de l'anisotropie du choc à l'ordre $P3$.

7.3.3 Comparaisons des écarts par rapport à TRIPOLI4

Il reste maintenant à comparer ces résultats à un calcul de référence Monte Carlo. Seuls les calculs UOX et V40 convergés angulairement avec une quadrature suffisamment élevée sont comparés aux calculs TRIPOLI4⁴. Ceci permettra de mettre en évidence l'apport des sections discrètes sur la modélisation de l'anisotropie du choc dans les calculs réalisés. Les comparaisons sont présentées dans les tableaux Tab. 7.11 et Tab. 7.12.

FV 24 12	T4 punctual	U (1 σ)	P0c	P0	P1	P3	P5	Dis
χ	1.00132	31	-1	0	0	0	0	0
ϵ_{even}	1.03175	22	-30	-8	-19	-18	-18	-14
ϵ_{odd}	1.08641	34	6	32	32	21	22	20
p	0.74464	17	10	-94	-208	-151	-151	-146
f	0.82622	14	-8	-96	156	105	109	80
η	1.88764	20	-3	-3	-4	-3	-3	0
k_{∞}	1.30352	4	-26	-168	-42	-46	-42	-60

MOC 24 12	T4 punctual	U (1 σ)	P0c	P0	P1	P3	P5
χ	1.00132	31	-1	-1	-1	-1	-1
ϵ_{even}	1.03175	22	-44	-14	-25	-24	-24
ϵ_{odd}	1.08641	34	5	30	30	19	19
p	0.74464	17	16	-77	-189	-132	-132
f	0.82622	14	-67	-151	101	48	52
η	1.88764	20	-3	-2	-3	-3	-3
k_{∞}	1.30352	4	-93	-214	-88	-92	-88

TAB. 7.11 – UOX : Ecart par rapport au calcul TRIPOLI4.

FV 24 12	T4 punctual	U (1 σ)	P0c	P0	P1	P3	P5	Dis
χ	1.00225	38	-5	-4	-4	-4	-4	-4
ϵ_{even}	1.09635	35	-87	-9	1	-9	-9	-7
ϵ_{odd}	1.63261	73	-47	495	687	549	553	482
p	0.35690	13	242	-773	-1080	-869	-870	-753
f	0.97129	28	-38	7	54	37	39	27
η	1.62730	28	28	-14	-44	-25	-25	5
k_{∞}	1.01198	4	93	-298	-387	-320	-317	-250

MOC 24 12	T4 punctual	U (1 σ)	P0c	P0	P1	P3	P5
χ	1.00225	38	-5	-5	-5	-5	-5
ϵ_{even}	1.09635	35	-93	-28	-18	-28	-28
ϵ_{odd}	1.63261	73	13	403	595	453	457
p	0.35690	13	123	-652	-959	-742	-742
f	0.97129	28	-48	-7	40	22	24
η	1.62730	28	28	-3	-34	-13	-14
k_{∞}	1.01198	4	18	-291	-381	-312	-309

TAB. 7.12 – MOX V40% : Ecart par rapport au calcul TRIPOLI4.

L'utilisation des sections discrètes ne change pas de manière significative le calcul pour la

4. Les résultats sont présentés pour les cellules UOX et MOX vidangées uniquement car les calculs convergés en termes de quadrature angulaire nécessitent une capacité mémoire très élevée. Cependant, les résultats sur ces deux cas peuvent nous permettre de discuter de la validité de la méthode car la cellule vidangée constitue le cas le plus défavorable en ce qui concerne les effets d'anisotropie (*cf* Tab. 7.8).

cellule UOX comme le montre Tab. 7.11, mais les effets deviennent plus conséquents sur la cellule MOX vidangée. Pour la cellule UOX, le k_∞ est dégradé de 20 pcm et ceci par un jeu de compensation sur les six facteurs. En effet, les autres facteurs dans le calcul avec les sections discrètes ont le même biais par rapport à TRIPOLI4 que les calculs $P3$ ou $P5$ sauf le facteur d'utilisation thermique f . Ce dernier présente une surestimation plus faible de 20 pcm qui compense moins la sous-estimation du facteur antitrappe et de ce fait, augmente légèrement les biais sur le k_∞ .

L'apport des sections discrètes, même s'il est relativement faible dans le cas UOX, permet de mieux traiter les renvois des neutrons dans les groupes et de ce fait, de mieux modéliser le ralentissement et l'absorption des neutrons dans les résonances.

Quant à la cellule V40 dont les comparaisons sont données en Tab. 7.12, les résultats avec les sections discrètes démontrent une amélioration significative sur le facteur de fission rapide des isotopes impairs ϵ_{odd} (-70 pcm), le facteur antitrappe p (+120 pcm) et *in fine* sur le k_∞ (+70 pcm). Dans Tab. 7.12, les résultats des ordres Pn montrent une convergence sensiblement visible vers le résultat *Dis*. Dans un spectre plus dur, les sections de transfert sont plus piquées en fonction du cosinus de l'angle de diffusion et donc plus anisotropes (*cf* Chapitre 4 - loi de choc élastique sur l'hydrogène de type « boule de billard »). Les sections de transfert discrètes tendent vers la section de transfert exacte expliquant ainsi cette convergence des résultats Pn .

Cependant, sur les deux tableaux Tab. 7.11 et Tab. 7.12, nous constatons aussi que le $P0c$ présente des biais beaucoup plus faibles que les calculs Pn . Les six facteurs sont calculés à partir de taux de réaction à 2 groupes (coupure thermique à 0.625 eV) et il est probable que ceci fasse apparaître des compensations. Les résultats sont donc analysés plus finement via les taux de réaction.

7.3.4 Taux de réactions

Les résultats sont maintenant analysés à travers la comparaison des taux d'absorption et de diffusion par isotope (seulement les plus importants) sur le motif cellule. Ces résultats sont présentés en pcm de l'absorption totale sur un macro-maillage énergétique à 13 groupes dont le découpage est donné en Tab. 7.13.

Largeur des groupes dans le maillage SHEM	Macro-Groupes pour l'analyse		
	No.	Borne Sup.(MeV)	Borne Inf. (MeV)
groupes larges ($\Delta u \sim 0.2$)	1	2.00E+01	2.23E+00
	2	2.23E+00	4.94E-01
	3	4.94E-01	1.11E-02
	4	1.11E-02	7.49E-04
	5	7.49E-04	7.51E-05
	6	7.51E-05	4.02E-05
	7	4.02E-05	2.25E-05
groupes très fins pour les résonances majeures	8	2.25E-05	1.94E-05
	9	1.94E-05	8.30E-06
	10	8.30E-06	4.00E-06
	11	4.00E-06	6.25E-07
	12	6.25E-07	1.90E-07
groupes larges ($\Delta u \sim 0.15$)	13	1.90E-07	1.00E-11

TAB. 7.13 – Macro-maillage à 13 groupes pour l'analyse des taux de réactions.

Dans le maillage SHEM, comme nous l'avons mentionné, l'autoprotection n'est effectuée qu'à partir de 22.5 eV. De ce fait, les biais en dessous de ce seuil d'énergie correspondent aux biais dus à la loi de choc. Dans le découpage énergétique à 13 groupes, les groupes 8 à 12 présentent une largeur très faible qui permet de rendre compte des écarts sur les résonances majeures (*cf* Fig. 7.3).

Les tableaux Tab. 7.14, Tab. 7.15, Tab. 7.16 comparent les résultats des calculs FV aux ordres $P0c$ et $P3$ pour le développement Legendre au calcul faisant intervenir les sections discrètes, *DisXS*. Les résultats sont donnés en pcm et ceux obtenus avec le solveur MOC avec une quadrature équivalente sont aussi présentés à titre indicatif. Tous les taux de réactions de référence obtenus avec TRIPOLI4 sont calculés à 0.01 % au maximum à 1σ .

Pour le crayon UOX, Tab. 7.14 montre que les taux d'absorption avec les sections discrètes conduisent à des écarts voisins de ceux des résultats en $P3$ quel que soit le cas ou l'isotope considéré par rapport au $P0c$. Au-dessus de 22.5 eV, le $P0c$, le $P3$ et les sections discrètes présentent des biais très proches par rapport au calcul TRIPOLI4 qui valent quelques pcm à une dizaine de pcm (*cf* Tab. 7.14). Cependant, le $P0c$ sous-estime le taux d'absorption dans les grandes résonances traitées avec SHEM (6.67 eV pour ^{238}U , groupe 10 et 20.87 eV, groupe 8) par rapport aux $P3$ et *DisXS* (*cf* Tab. 7.14 en rouge). Par ailleurs, Tab. 7.14 montre que sur les taux de diffusion, la même tendance est observée. La représentation continue par morceaux améliore de quelques dizaines de pcm les résultats sur les taux d'absorption et de diffusion sur la cellule UOX par rapport au calcul $P3$. Cette amélioration, quoique faible représente quelques

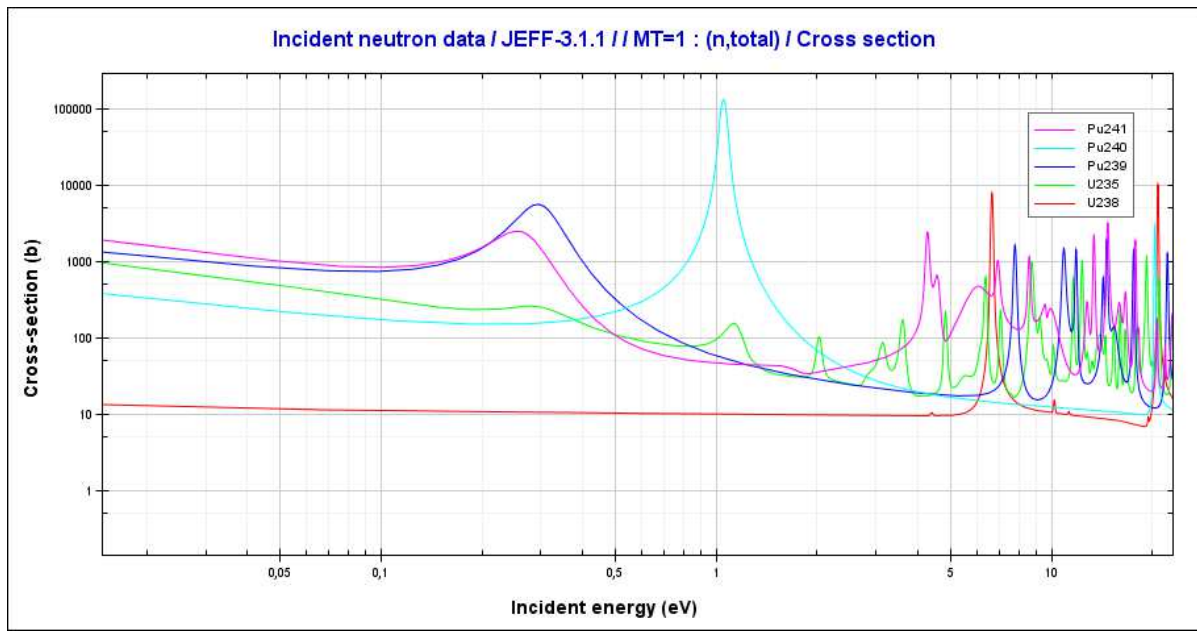


FIG. 7.3 – Résonances majeures dans le domaine thermique.

%, voire quelques dizaines de %, par rapport aux biais du calcul *P3*. Les biais des calculs FV avec les calculs MOC sont très proches pour le développement *P3*.

Quant à la cellule MOX vidangée à chaud V40, les résultats sont présentés dans Tab. 7.15 pour les isotopes de l'uranium et dans Tab. 7.16 pour les isotopes du plutonium. Les résultats précédents sont confirmés en ce qui concerne le *P0c*. Dans le Tab. 7.15, ce dernier sous-estime le taux d'absorption sur ^{238}U dans le groupe 8 (contenant la résonance à 20.87 eV) de 34 pcm pour le FV et dans le groupe 10 de 65 pcm pour le calcul FV (50 pcm en MOC) (*cf* Tab. 7.15 en rouge). Les taux de diffusion sont plus fortement sous-estimés sur ^{238}U dans les groupes à haute énergie. Les calculs avec les sections discrètes démontrent une nette amélioration des taux de diffusion, avec un gain de 100 pcm sur la somme des biais sur tous les groupes par rapport au *P3* et 400 pcm sur le *P0c* en FV. Les calculs en FV *P0c* et *P3* présentent des biais qui sont plus faibles (400 pcm et 200 pcm respectivement) sur la somme totale des taux de diffusion par rapport au MOC.

Par ailleurs, Tab. 7.16 présente les taux d'absorption et de diffusion sur les isotopes prépondérants du plutonium. Les calculs en *P0c* présentent des écarts plus élevés, -70 pcm, dans la grande résonance du ^{240}Pu à 1 eV dans le groupe 11 (en bleu). *Dis* sous-estime le taux d'absorption dans le groupe 12 qui contient les résonances thermiques des plutonium 239 et 241 (en vert et jaune respectivement) mais calcule mieux les taux de réactions dans le groupe le plus thermique.

Le calcul *P0c* donne des biais qui sont cependant meilleurs dans le groupe thermique, le groupe 13 (en vert ^{239}Pu , en bleu ^{240}Pu et en jaune ^{241}Pu), par rapport aux calculs *P3* et *Dis*

en FV ou que le $P3$ en MOC. Le $P0c$ absorbe moins de neutrons dans le domaine épithermique, et de ce fait, plus de neutrons sont disponibles dans le domaine thermique, ce qui entraîne ainsi plus d'absorptions. Cependant, si la quadrature angulaire MOC est raffinée ($N_\varphi=60$, $N_\mu=12$), ceci corrige les taux d'absorption du ^{239}Pu dans le groupe 13 d'une dizaine de pcm en $P3$, -131 pcm par rapport à TRIPOLI4 au lieu de -142 en MOC 24 12, alors que le $P0c$ converge vers une valeur qui induit au final -82 pcm de biais au lieu de -32 pcm, soit plus de 100% d'erreur sur le biais initial. Ceci est confirmé par les résultats de l'étude de la convergence angulaire qui a été effectuée dans l'Annexe D dans Tab. D.7.

Comme les sections discrètes représentent plus fidèlement la loi de choc qu'un développement sur les polynômes de Legendre, la proximité des résultats avec ceux du $P3$ tend à confirmer la validité d'un développement polynômial à un ordre élevé plutôt que la correction de transport à l'ordre 0 (prise en compte approchée à l'ordre 0 de la composante anisotrope d'ordre 1, cf Annexe D). Les résultats qui semblaient meilleurs pour le $P0c$ sur les six facteurs apparaissent comme une compensation d'erreur entre les groupes où un calcul d'autoprotection est effectué et ceux en dessous de 22.5 eV où ce n'est pas le cas.

ABSORP Group	T4 U235	MOC 24 12		FV 24 12			T4 U238	MOC 24 12		FV 24 12		
		P0c	P3	P0c	P3	Dis		P0c	P3	P0c	P3	Dis
1	152.6	-2.4	-1.5	-1.6	-1.0	-0.9	1723.8	-27.1	-16.8	-17.8	-11.3	-10.5
2	313.7	-3.5	-1.8	-2.1	-1.7	-1.4	1448.9	-17.5	-9.3	-10.2	-7.8	-6.7
3	507.9	0.2	0.1	0.2	-0.2	-0.3	1374.6	-6.4	-7.0	-6.5	-7.8	-7.9
4	772.4	4.0	3.7	4.0	3.9	3.7	2134.5	13.4	12.7	13.4	13.2	12.5
5	2019.9	-4.3	-3.8	-3.6	-2.5	-3.3	3246.0	17.9	18.3	18.9	20.3	19.1
6	1067.1	-1.2	-0.6	-0.7	0.3	-0.1	796.4	-8.1	-7.9	-7.7	-7.2	-7.5
7	1188.0	-10.1	-7.5	-9.0	-6.0	-6.5	1854.2	13.1	18.1	15.4	21.1	20.3
8	150.6	-1.3	-0.6	-1.0	-0.3	-0.3	2029.4	-11.7	20.5	-16.7	17.0	16.6
9	2211.2	29.5	33.0	32.4	36.9	36.5	368.5	1.3	1.7	1.6	2.1	2.0
10	587.0	0.4	2.2	1.5	3.5	3.2	4173.1	-39.4	16.0	-40.8	18.6	17.5
11	2245.9	1.9	1.3	2.7	2.5	-4.6	596.1	-0.5	-0.6	-0.3	-0.3	-2.1
12	4902.7	19.6	18.2	25.4	24.9	-6.3	542.4	1.9	1.8	2.5	2.5	-0.9
13	45377.8	-24.8	-52.8	-17.8	-48.6	-42.4	4455.6	-2.3	-5.0	-1.6	-4.4	-5.6
Total	61496.8	8.1	-9.9	30.4	11.7	-22.7	24743.5	-65.3	42.4	-49.8	55.9	46.7

DIFFUSION Group	T4 U235	MOC 24 12		FV 24 12			T4 U238	MOC 24 12		FV 24 12		
		P0c	P3	P0c	P3	Dis		P0c	P3	P0c	P3	Dis
1	796.7	-12.4	-7.6	-8.0	-5.1	-4.7	21242.8	-330.8	-202.8	-214.9	-136.2	-126.1
2	1427.8	-16.2	-8.3	-9.6	-8.0	-6.6	41376.8	-465.8	-237.8	-276.6	-231.5	-189.8
3	2364.5	-0.1	-0.3	-0.1	-2.4	-2.2	67169.4	-169.4	-175.4	-168.2	-232.7	-227.8
4	1174.4	6.6	6.2	6.6	6.4	6.1	33580.5	193.5	181.5	194.7	189.8	179.9
5	900.7	4.8	5.0	5.1	5.5	5.3	25403.4	-159.4	-155.4	-151.6	-140.0	-149.1
6	227.5	0.1	0.2	0.2	0.4	0.3	6253.5	-91.8	-88.6	-88.7	-83.3	-85.5
7	187.1	-0.8	-0.5	-0.6	-0.2	-0.3	5963.0	-120.1	-107.4	-114.1	-99.6	-101.8
8	41.5	-0.2	-0.2	-0.2	-0.1	-0.1	1525.2	-10.8	7.3	-12.2	6.9	6.7
9	271.5	-0.3	0.0	-0.1	0.2	0.2	4764.4	-10.6	-7.3	-7.8	-2.8	-3.7
10	183.4	-0.5	-0.3	-0.3	0.0	-0.1	3745.4	-12.1	-3.8	-9.3	0.3	-1.0
11	625.2	-0.4	-0.5	-0.3	-0.3	-2.2	10611.2	-7.2	-9.2	-5.1	-5.4	-36.8
12	418.5	1.4	1.2	1.9	1.8	-0.9	6560.2	21.9	19.6	28.9	27.7	-12.0
13	1394.5	-0.4	-1.0	1.7	-0.7	-3.6	20869.1	-4.1	-14.1	2.0	-8.8	-53.8
Total	10013.4	-18.5	-6.1	-3.8	-2.5	-8.9	249064.9	-1166.7	-793.4	-823.0	-715.7	-800.9

TAB. 7.14 – UOX : Taux d'absorption et de diffusion (en pcm) sur les isotopes d'uranium.

ABSORP Group	T4 U235	MOC 24 12		FV 24 12			T4 U238	MOC 24 12		FV 24 12		
		P0c	P3	P0c	P3	Dis		P0c	P3	P0c	P3	Dis
1	13.7	-0.1	-0.1	-0.1	-0.1	-0.1	2686.5	-27.2	-22.9	-23.3	-18.0	-14.8
2	31.4	-0.2	-0.2	-0.1	-0.1	-0.1	2384.7	-17.5	-12.0	-10.8	-7.9	-4.8
3	60.6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2854.1	-21.9	-21.5	-20.4	-21.7	-21.9
4	89.2	0.3	0.3	0.3	0.3	0.3	4509.9	27.5	27.3	25.7	27.7	26.3
5	209.8	-0.1	0.0	-0.2	0.1	0.0	6329.2	80.7	82.9	76.6	85.8	84.2
6	99.3	-0.4	-0.4	-0.5	-0.3	-0.3	1256.0	5.1	6.2	4.1	7.2	6.8
7	117.8	-1.5	-1.3	-1.6	-1.2	-1.2	2698.8	36.1	47.7	33.7	50.2	49.6
8	14.4	-0.3	-0.3	-0.4	-0.3	-0.3	2698.4	-16.8	31.3	-33.9	26.6	26.5
9	207.9	-0.4	-0.6	-0.5	-0.5	-0.5	530.0	0.3	-0.3	0.0	0.1	0.0
10	41.4	-0.3	-0.3	-0.3	-0.2	-0.2	4839.0	-49.6	16.6	-64.6	17.7	16.8
11	96.2	-0.4	-0.6	-0.3	-0.5	-0.8	550.1	-1.9	-3.4	-1.6	-3.3	-4.6
12	77.2	-0.5	-0.6	-0.4	-0.6	-0.8	173.9	-1.2	-1.6	-1.0	-1.5	-2.1
13	259.5	1.6	-3.2	1.8	-3.9	-2.3	461.6	2.5	-5.8	3.0	-7.0	-4.4
Total	1318.5	-2.5	-7.1	-2.3	-7.3	-6.3	31972.2	16.0	144.5	-12.6	155.9	157.5

DIFFUSION Group	T4 U235	MOC 24 12		FV 24 12			T4 U238	MOC 24 12		FV 24 12		
		P0c	P3	P0c	P3	Dis		P0c	P3	P0c	P3	Dis
1	71.5	-0.7	-0.6	-0.6	-0.4	-0.4	32971.4	-320.4	-266.4	-270.6	-206.0	-165.2
2	144.0	-1.2	-0.8	-0.7	-0.6	-0.4	72141.8	-601.8	-401.8	-361.9	-282.0	-192.8
3	282.0	-0.2	-0.1	0.0	-0.1	-0.1	138695.7	-785.7	-725.7	-641.8	-725.8	-712.6
4	136.3	0.7	0.7	0.6	0.7	0.6	68739.3	284.7	280.7	260.5	287.4	264.5
5	94.2	0.5	0.5	0.4	0.6	0.5	46342.9	-183.9	-167.9	-209.3	-147.8	-160.6
6	20.5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	9739.7	-158.4	-149.9	-164.9	-142.7	-145.0
7	17.3	-0.2	-0.2	-0.3	-0.2	-0.2	8952.9	-179.0	-156.6	-184.8	-150.5	-151.9
8	3.2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1993.0	-17.7	9.7	-25.2	8.8	8.8
9	21.8	-0.1	-0.1	-0.1	-0.1	-0.1	6434.2	-19.7	-24.4	-22.5	-20.0	-20.7
10	12.8	0.0	-0.1	0.0	0.0	-0.1	4498.3	-20.7	-19.9	-22.3	-16.8	-17.0
11	32.8	-0.1	-0.2	-0.1	-0.2	-0.3	9697.3	-31.4	-56.7	-25.9	-54.7	-78.7
12	8.3	-0.1	-0.1	0.0	-0.1	-0.1	2275.4	-15.0	-20.3	-11.9	-19.6	-27.3
13	10.2	0.0	-0.1	0.1	-0.2	-0.1	2657.6	10.8	-34.3	13.8	-41.1	-28.8
Total	855.0	-1.5	-1.1	-0.7	-0.7	-0.5	405139.4	-2038.1	-1733.4	-1666.8	-1510.8	-1427.4

TAB. 7.15 – V40 : Taux d'absorption et de diffusion (en pcm) sur les isotopes de l'uranium.

ABSORP Group	T4	MOC 24 12		FV 24 12			T4	MOC 24 12		FV 24 12			T4	MOC 24 12		FV 24 12		
	Pu239	P0c	P3	P0c	P3	Dis	Pu240	P0c	P3	P0c	P3	Dis	Pu241	P0c	P3	P0c	P3	Dis
1	370.0	-3.7	-3.1	-3.1	-2.4	-2.0	143.9	-1.4	-1.2	-1.2	-0.9	-0.7	43.6	-0.4	-0.4	-0.4	-0.3	-0.2
2	792.2	-6.3	-4.2	-3.8	-2.9	-2.0	248.0	-1.8	-1.2	-1.1	-0.8	-0.5	105.1	-0.8	-0.5	-0.5	-0.4	-0.2
3	977.4	-1.9	-1.4	-0.9	-1.4	-1.4	115.6	0.0	0.0	0.1	0.0	0.0	182.5	0.6	0.7	0.8	0.7	0.7
4	1246.4	6.6	6.5	6.1	6.7	6.3	194.1	3.3	3.3	3.2	3.3	3.2	238.7	3.3	3.3	3.2	3.4	3.3
5	4147.7	-16.3	-14.3	-18.9	-11.9	-12.9	717.5	-14.3	-13.9	-14.7	-13.5	-13.7	607.1	6.8	7.0	6.4	7.4	7.2
6	2473.4	-26.8	-24.8	-28.5	-22.9	-23.4	596.3	-5.6	-4.8	-6.0	-4.3	-4.5	157.3	13.3	13.4	13.2	13.6	13.5
7	509.1	-5.9	-5.7	-6.2	-5.5	-5.5	357.8	-19.9	-17.8	-20.1	-17.4	-17.5	335.6	-1.0	-0.8	-1.2	-0.6	-0.6
8	450.7	5.4	8.2	5.1	8.7	8.7	185.2	-3.0	-1.8	-3.4	-1.8	-1.8	7.7	-0.1	0.0	-0.1	0.0	0.0
9	3776.5	48.7	61.0	46.4	66.3	66.0	5.7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1016.0	8.6	8.7	8.0	9.5	9.4
10	1132.0	15.4	19.9	15.0	21.3	21.4	12.4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	977.4	3.7	2.4	3.5	3.2	3.1
11	1326.6	-4.1	-8.0	-3.1	-7.3	-11.1	9595.7	-69.7	17.7	-69.1	25.0	-3.3	245.2	-0.9	-1.5	-0.7	-1.5	-2.1
12	11264.3	-16.3	-1.3	-1.7	-4.5	-39.2	895.3	-5.8	-8.3	-4.6	-8.0	-11.0	724.9	-3.2	-3.5	-2.3	-3.9	-5.8
13	10338.2	31.8	-142.2	42.8	-168.9	-120.1	989.5	4.3	-13.1	5.4	-15.8	-10.4	1664.5	5.3	-23.2	7.1	-27.5	-19.1
Total	38804.2	26.8	-109.3	49.0	-124.8	-115.3	14057.1	-114.0	-41.2	-111.6	-34.1	-60.2	6305.7	35.2	5.7	37.1	3.5	9.1

DIFF. Group	T4	MOC 24 12		FV 24 12			T4	MOC 24 12		FV 24 12			T4	MOC 24 12		FV 24 12		
	Pu239	P0c	P3	P0c	P3	Dis	Pu240	P0c	P3	P0c	P3	Dis	Pu241	P0c	P3	P0c	P3	Dis
1	1144.1	-11.0	-9.1	-9.3	-7.1	-5.6	491.0	-4.8	-4.0	-4.0	-3.1	-2.5	166.9	-1.6	-1.3	-1.4	-1.0	-0.8
2	2370.8	-19.9	-13.3	-12.0	-9.4	-6.4	1126.6	-9.5	-6.3	-5.7	-4.5	-3.1	331.6	-2.8	-1.9	-1.7	-1.3	-0.9
3	5320.4	-2.4	-0.3	2.8	-0.5	0.0	2407.6	-2.5	-1.5	-0.1	-1.6	-1.3	664.8	-0.3	0.0	0.4	0.0	0.0
4	2730.1	18.6	18.4	17.7	18.7	17.7	1488.6	3.1	3.0	2.6	3.2	2.7	335.0	1.7	1.7	1.6	1.7	1.6
5	2167.6	-4.9	-4.0	-6.0	-3.0	-3.7	1340.8	-18.3	-17.6	-19.0	-16.9	-17.3	258.3	1.8	1.9	1.7	2.0	1.9
6	442.2	-4.7	-4.3	-4.9	-4.0	-4.1	718.6	-6.3	-5.4	-6.8	-4.8	-5.0	51.8	0.9	0.9	0.8	0.9	0.9
7	257.3	-1.6	-1.4	-1.8	-1.2	-1.3	378.5	-17.0	-15.2	-17.2	-14.8	-14.9	49.0	0.5	0.6	0.5	0.6	0.6
8	45.0	-0.1	0.0	-0.1	0.1	0.1	31.8	-0.4	-0.3	-0.5	-0.2	-0.2	7.3	-0.1	0.0	-0.1	0.0	0.0
9	352.2	0.0	0.0	-0.1	0.3	0.2	149.7	-0.4	-0.6	-0.5	-0.4	-0.5	83.2	0.4	0.4	0.4	0.5	0.5
10	183.6	-0.4	-0.6	-0.3	-0.5	-0.5	123.6	-0.3	-0.5	-0.3	-0.4	-0.4	34.4	-0.1	-0.1	-0.1	-0.1	-0.1
11	447.0	-1.4	-2.6	-1.1	-2.5	-3.6	1171.0	-7.9	-1.0	-7.3	-0.3	-3.6	65.9	-0.2	-0.4	-0.2	-0.4	-0.5
12	125.3	-0.9	-1.1	-0.2	-1.1	-1.6	2.2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	18.0	-0.1	-0.2	-0.1	-0.2	-0.2
13	90.3	0.3	-1.2	1.0	-1.4	-1.0	11.5	0.0	-0.2	0.1	-0.2	-0.1	17.9	0.1	-0.2	0.2	-0.3	-0.2
Total	15676.0	-28.4	-19.5	-14.2	-11.5	-9.9	9441.3	-64.3	-49.4	-58.7	-44.1	-46.3	2084.0	0.2	1.3	2.2	2.5	2.8

TAB. 7.16 – V40 : Taux d'absorption et de diffusion (en pcm) sur les isotopes du plutonium.

7.3.5 Flux et source angulaires

Dans le cas du solveur volumes finis en angle, une des hypothèses suppose que le flux angulaire est constant par maille sur la sphère unité. Suite à un calcul avec la représentation discrète, les flux « angulaires » ainsi que les sources de diffusion ont été évaluées dans chaque maille de la sphère unité dans une cellule modérateur loin du combustible. Ces grandeurs sont tracées pour les angles azimutaux correspondant au premier niveau d'angle polaire, et dans 3 groupes d'énergies sur le maillage à 13 groupes : les groupes 1, 10 (contenant la grande résonance de ^{238}U à 6.67 eV), et 13. Les sources ont également été tracées pour un calcul utilisant un développement $P3$.

Fig. 7.4 et Fig. 7.5 permettent de constater visuellement que les flux angulaires dans toutes les cellules considérées sont très faiblement anisotropes dans le cas UOX et que cette anisotropie du flux devient plus significative sur la cellule vidangée.

Cependant, les sources de diffusion présentent un profil complètement lissé et on observe une cohérence parfaite entre celles issues du calcul avec la représentation constante par morceaux et celles calculées avec le développement $P3$. Ce dernier point montre que l'opérateur de diffusion multigroupe, en sommant les contributions de différentes énergies et directions, gomme non seulement les aspérités du flux angulaire mais également celles des sections de transfert.

Les cas « réseau », de par les symétries et la répétition du motif, ne conduisent pas à une anisotropie très forte du flux. Il est donc important de vérifier que le très bon accord $P3 - Discrete$ se retrouve sur des cas plus hétérogènes.

7.4 Conclusion

Les calculs avec les sections discrètes sur les cellules en réseau infini permettent de lever le doute sur l'approximation la plus fiable entre le $P0c$ et le $P3$. Cependant, le calcul en discret sur ces cas « réseau » ne remet pas en cause l'approximation polynômiale et confirme qu'un développement à l'ordre $P3$ est suffisant. On s'intéressera dans la suite à des situations plus hétérogènes pour lesquels cette conclusion pourrait être mise en défaut.

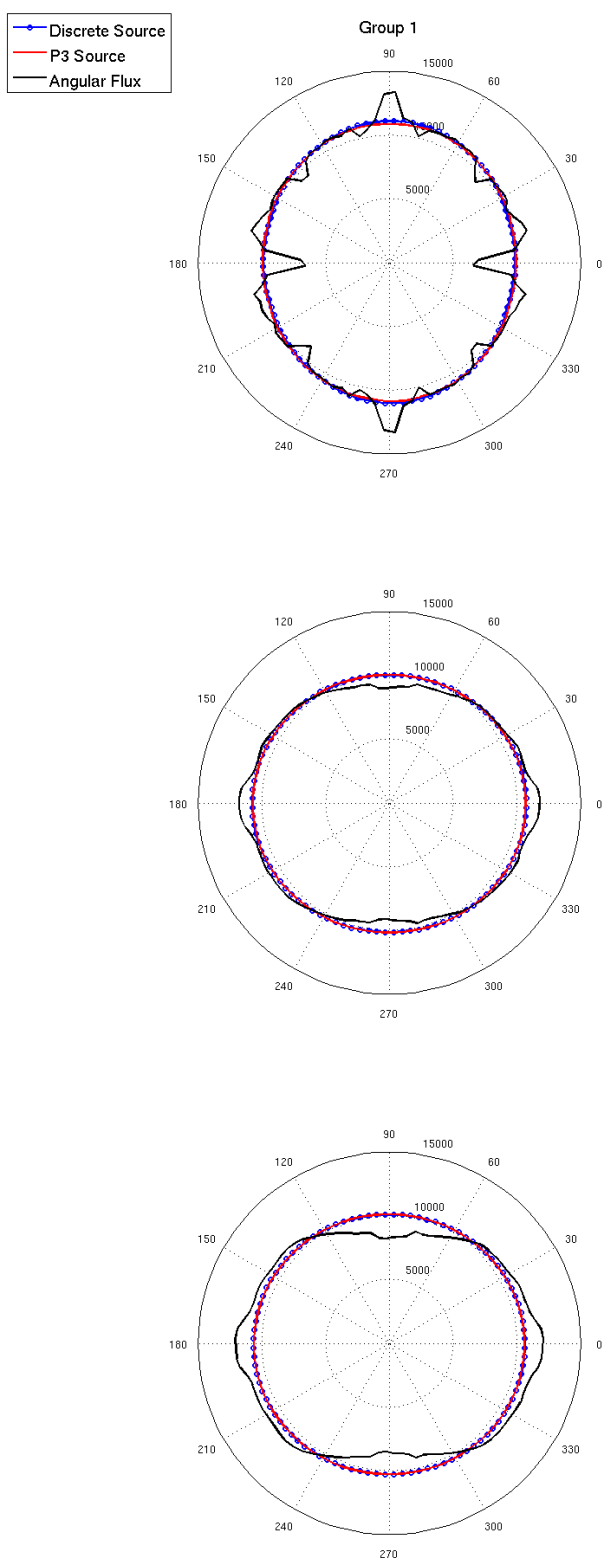


FIG. 7.4 – UOX : Flux angulaires et sources de diffusion dans les groupes 1 (rapide, premier à partir du haut), 10 (ralentissement, deuxième) et 13 (thermique, en bas)

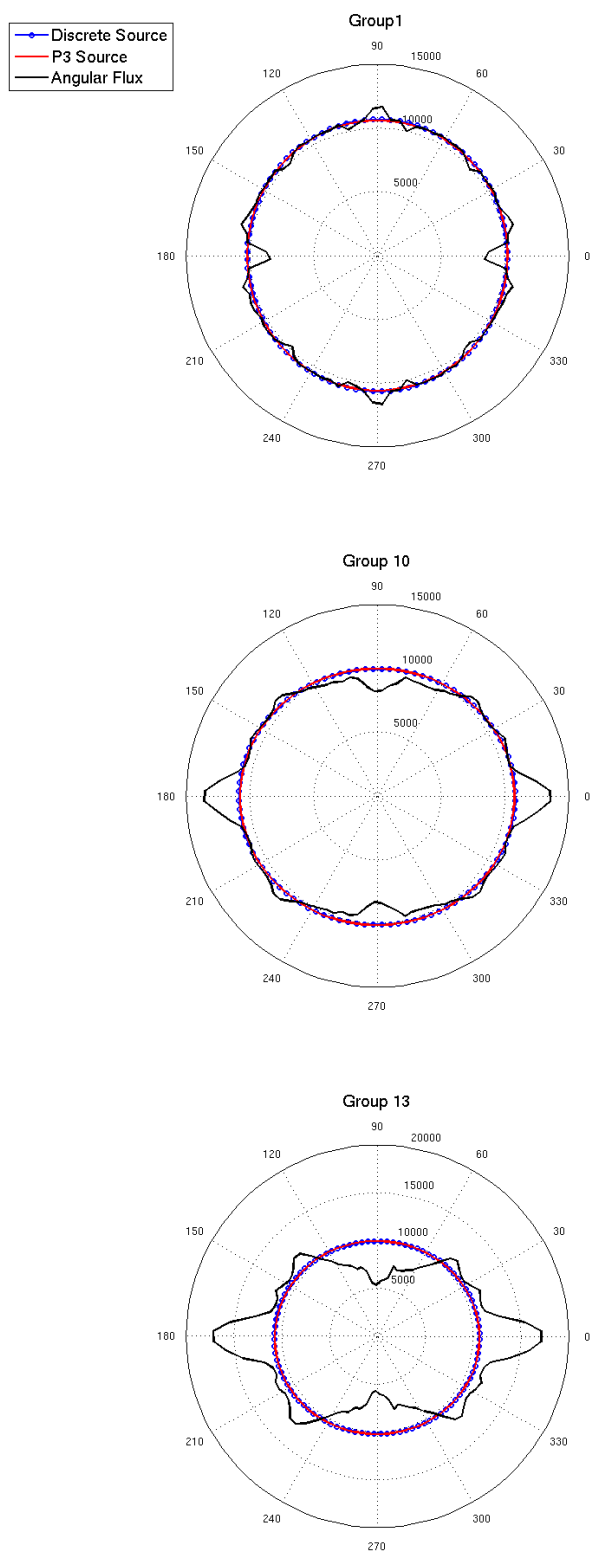


FIG. 7.5 – V40 : Flux angulaires et sources de diffusion dans les groupes 1 (rapide, premier à partir du haut), 10 (ralentissement, deuxième) et 13 (thermique, en bas)

Calculs de motifs hétérogènes

Dans ce chapitre, nous présentons les études et les résultats sur un motif hétérogène par rapport à la cellule en réseau infini.

8.1 Présentation de la géométrie du cluster

Le motif considéré est un cluster 3×3 de cellules combustibles¹ MOX à froid (293 K) dont la composition a été donnée dans le chapitre précédent, avec de l'eau borée (*cf* Chapitre 7) à 293 K comme modérateur. Fig. 8.1 illustre la géométrie des motifs d'intérêt. La géométrie en huitième de cluster de gauche est celle utilisée pour les calculs APOLLO2 ; à droite, en quart de cluster, c'est celle qui a été prise en compte pour les calculs dans les études qui suivront.

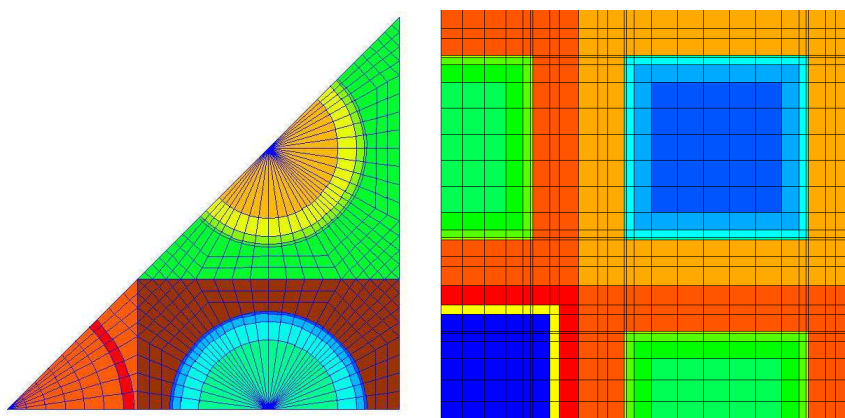


FIG. 8.1 – Cluster Tube Guide.

Les crayons de combustible en face et en angle de la cellule centrale sont distingués spatialement comme FACE et ANGLE respectivement. Ceci est dû au fait que ces deux crayons ne subissent pas le même flux de neutrons car le volume de modérateur qu'ils traversent avant d'atteindre le crayon ANGLE est plus grand. De ce fait, les effets d'autoprotection ne seront pas identiques pour ces deux crayons et il est impératif d'un point de vue neutronique de les différencier. Par ailleurs, l'emboîtement de 4 carrés est appliqué comme dans les calculs réseau pour prendre en compte le creusement du flux dans les crayons combustibles. Le choix d'un

1. Simplifiées en enlevant la gaine.

motif 3×3 a été motivé par des considérations d'occupation mémoire et de temps de calcul nécessaires pour mener les calculs avec le formalisme de la section continue par morceaux.

La cellule centrale est composée dans un premier temps d'eau avec un tube guide en zirconium (TG H₂O) - correspondant à un trou d'eau avec tube guide dans les REL. Ensuite, un deuxième cas d'étude avec une barre d'absorbant B₄C y est inséré (TG B₄C). Dans le premier cas, l'eau dans le tube guide thermalise les neutrons et fait office de source de neutrons thermiques. Le B₄C d'un autre côté absorbe les neutrons thermiques - avec une section efficace totale valant 3867 barns à 25 meV, laissant ainsi peu de neutrons à cette énergie.

Une conséquence directe de cette hétérogénéité spatiale apportée par la cellule centrale dans la géométrie est l'ajout d'une composante supplémentaire à l'anisotropie du problème : celle du flux en sus de l'anisotropie du choc. De ce fait, il est essentiel de définir un maillage spatial convergé et une discrétisation angulaire suffisamment fine. Ceci est important car les effets dus à l'anisotropie du choc que l'on cherche à mettre en exergue sont très fins et s'assurer de la convergence angulaire et spatiale du problème est primordial.

8.2 Convergence spatiale

Dans cette section, nous déterminons un maillage spatial qui soit convergé pour la suite des études. Les calculs sont effectués avec le solveur MOC du code APOLLO2. La géométrie en huitième de cluster présentée en Fig. 8.2 est décrite avec le maillage dit « moulin à vent » (MAV) (*cf* Annexe A) pour une cellule de combustible, et utilisée dans le schéma REL2005.

Ce maillage est raffiné en utilisant dans un premier temps le maillage fin RAF_MOD (*cf* Annexe A) puis l'« ultrafin » SPIDER pour obtenir le maillage spatial illustré Fig. 8.1 pour les cellules combustibles ANGLE et FACE. Le trou central de la cellule tube guide est discrétisé avec 6 couronnes. Les effets du maillage sur l'anisotropie du choc est ainsi mis en avant et ces biais sont écartés dès maintenant afin que dans la suite des études, les écarts soient clairement imputables à un effet d'anisotropie du choc.

Les options de tracking sont $N_\varphi=24$, $N_\mu=2/3$ et $\Delta r=0.04$ avec les ordres d'anisotropie du choc en $P0c$ et $P3$. Les résultats des calculs sont présentés Tab. 8.1 ainsi que la comparaison avec le calcul de référence TRIPOLI4.

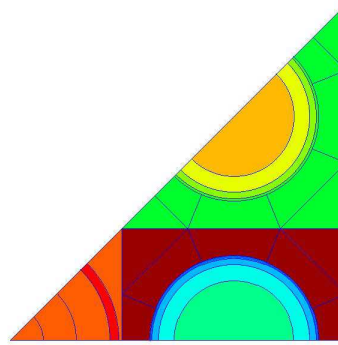


FIG. 8.2 – Cluster Tube Guide avec maillage spatial « moulin à vent ».

MAV	T4 TG H ₂ O		P0c		P3		T4 TG B ₄ C		P0c		P3	
	val.	U (1 σ)	24 2	24 3	24 2	24 3	val.	U (1 σ)	24 2	24 3	24 2	24 3
χ	1.00172	54	1	1	1	1	1.00179	86	1	2	1	2
ϵ_{even}	1.05351	45	-39	-33	-26	-18	1.10258	78	-195	-186	-65	-60
ϵ_{odd}	1.22357	66	-14	-33	46	32	1.44517	127	-641	-689	26	-28
p	0.58458	24	132	173	-105	-63	0.38850	31	1230	1337	280	417
f	0.91999	23	-46	-46	122	115	0.79058	40	441	412	-154	-158
η	1.66823	21	63	65	12	16	1.65387	31	68	72	9	11
k_{∞}	1.15853	4	94	124	47	80	0.81087	4	905	947	96	182

RAF_ MOD	T4 TG H ₂ O		P0c		P3		T4 TG B ₄ C		P0c		P3	
	val.	U (1 σ)	24 2	24 3	24 2	24 3	val.	U (1 σ)	24 2	24 3	24 2	24 3
χ	1.00172	5.38E-04	1	1	1	1	1.00179	86	1	2	1	1
ϵ_{even}	1.05351	4.46E-04	-30	-24	-22	-15	1.10258	78	-173	-164	-57	-53
ϵ_{odd}	1.22357	6.62E-04	46	26	112	97	1.44517	127	-475	-524	164	109
p	0.58458	2.43E-04	37	79	-225	-184	0.38850	31	708	816	-206	-67
f	0.91999	2.32E-04	-129	-128	77	71	0.79058	40	606	577	44	44
η	1.66823	2.11E-04	51	54	-10	-6	1.65387	31	61	64	-2	0
k_{∞}	1.15853	4.13E-05	-26	6	-69	-37	0.81087	4	731	773	-54	37

SPIDER	T4 TG H ₂ O		P0c		P3		T4 TG B ₄ C		P0c		P3	
	val.	U (1 σ)	24 2	24 3	24 2	24 3	val.	U (1 σ)	24 2	24 3	24 2	24 3
χ	1.00172	54	1	1	1	1	1.00179	86	1	2	1	1
ϵ_{even}	1.05351	45	-27	-20	-20	-13	1.10258	78	-166	-157	-50	-46
ϵ_{odd}	1.22357	66	55	35	119	104	1.44517	127	-466	-515	173	118
p	0.58458	24	26	68	-233	-191	0.38850	31	697	805	-217	-78
f	0.91999	23	-137	-136	67	60	0.79058	40	598	569	36	36
η	1.66823	21	50	53	-11	-7	1.65387	31	60	63	-3	-1
k_{∞}	1.15853	4	-34	-2	-79	-47	0.81087	4	723	765	-61	29

TAB. 8.1 – Effet de la convergence spatiale dans le schéma REL2005.

Les comparaisons du Tab. 8.1 montrent que les effets de convergence du maillage spatial sont assez significatifs. Sur le cas du cluster avec trou d'eau, TG H₂O dans le tableau, en comparant au maillage SPIDER, le k_{∞} en P0c ou P3 est sur-estimé avec le maillage MAV de 130 pcm, avec une sous-estimation de 70 pcm du facteur de fission rapide des isotopes impairs ϵ_{odd} et une sur-estimation du facteur antitrappe p de 130 pcm en P3 et de 100 pcm en P0c. Par ailleurs, en P0c, le facteur d'utilisation thermique f est sur-estimé de 100 pcm.

Pour le cluster B_4C , ces effets sont encore plus importants car le facteur antitrappe est surestimé de plus de 500 pcm en $P0c$ et $P3$ et le k_∞ de presque 200 pcm en $P0c$.

8.3 Convergence angulaire

La convergence spatiale étant établie, nous étudions maintenant la convergence du calcul avec la discrétisation angulaire. Dans Tab. 8.1, il apparaît qu'augmenter l'ordre de la quadrature angulaire induit un effet de quelques dizaines de pcm sur le k_∞ , voire presque 150 pcm sur le facteur antitrappe p pour le B_4C avec le maillage spatial raffiné. Ce dernier sera ainsi utilisé pour mener l'étude sur la convergence angulaire en augmentant le nombre de directions progressivement jusqu'à ce que les six facteurs soient convergés.

Les résultats sont comparés à TRIPOLI4 et présentés dans Tab. 8.2 pour le tube guide avec de l'eau et dans Tab. 8.3 pour le cluster avec B_4C .

TG H ₂ O	T4 punctual		P0c						
	val.	U (1 σ)	24 2	24 3	24 8	18 12	24 12	36 12	60 12
χ	1.00172	54	1	1	1	-1	1	0	0
ϵ_{even}	1.05351	45	-27	-20	-27	-85	-25	-47	-46
ϵ_{odd}	1.22357	66	55	35	98	99	87	82	85
p	0.58458	24	26	68	-37	-55	-24	-22	-24
f	0.91999	23	-137	-136	-85	-86	-88	-88	-88
η	1.66823	21	50	53	69	68	72	72	71
k_∞	1.15853	4	-34	-2	-70	-175	-54	-82	-81

TG H ₂ O	T4 punctual		P3						
	val.	U (1 σ)	24 2	24 3	24 8	18 12	24 12	36 12	60 12
χ	1.00172	54	1	1	1	0	1	1	1
ϵ_{even}	1.05351	45	-20	-13	-21	-50	-18	-22	-23
ϵ_{odd}	1.22357	66	119	104	168	151	162	161	161
p	0.58458	24	-233	-191	-170	-162	-163	-163	-163
f	0.91999	23	67	60	93	91	91	91	91
η	1.66823	21	-11	-7	-27	-25	-25	-25	-25
k_∞	1.15853	4	-79	-47	-104	-139	-95	-100	-101

TAB. 8.2 – Convergence angulaire du $P3$ et du $P0c$ en MoC pour TG H₂O.

Les résultats sont convergés angulairement avec une quadrature $N_\varphi=60$, $N_\mu=12$. Dans le tableau Tab. 8.2 pour le tube guide H₂O, on constate que les résultats sont convergés avec $N_\varphi=24$, $N_\mu=8$ pour le calcul $P3$. Le $P0c$ démontre la même convergence (moins de 10 pcm d'écart sur les biais par rapport au calcul convergé (60/12)) à une quadrature plus élevée avec $N_\varphi=36$, $N_\mu=12$. Cette convergence du $P0c$ est aussi cohérente avec celle du cluster B_4C .

Une remarque très intéressante aussi est le fait que la quadrature $N_\varphi=18$, $N_\mu=12$ qui contient plus de directions que la discrétisation $N_\varphi=24$, $N_\mu=8$ converge plus lentement que ce dernier. En $P0c$ pour le B_4C les écarts entre ces deux discrétisations valent -100 pcm (*cf* Tab. 8.2) et -140 pcm (*cf* Tab. 8.3) respectivement sur le k_∞ . La même tendance est aussi observée en

TG B ₄ C	T4 punctual		P0c						
	val.	U (1 σ)	24 2	24 3	24 8	18 12	24 12	36 12	60 12
χ	1.00163	86	1	2	1	-1	2	0	1
ϵ_{even}	1.10258	78	-166	-157	-153	-247	-151	-186	-183
ϵ_{odd}	1.44514	127	-466	-515	-386	-376	-409	-413	-409
p	0.38856	31	697	805	513	443	562	563	556
f	0.79057	40	598	569	597	599	591	586	589
η	1.65393	31	60	63	48	48	51	50	50
k_{∞}	0.81087	4	723	765	619	465	644	599	603

TG B ₄ C	T4 punctual		P3						
	val.	U (1 σ)	24 2	24 3	24 8	18 12	24 12	36 12	60 12
χ	1.00163	86	1	1	1	0	1	1	1
ϵ_{even}	1.10258	78	-50	-46	-44	-97	-41	-47	-48
ϵ_{odd}	1.44514	127	173	118	224	194	212	215	213
p	0.38856	31	-217	-78	-322	-296	-294	-300	-299
f	0.79057	40	36	36	45	43	41	38	41
η	1.65393	31	-3	-1	-13	-12	-12	-12	-12
k_{∞}	0.81087	4	-61	29	-110	-169	-93	-106	-105

TAB. 8.3 – Convergence angulaire du P3 et du P0c en MoC pour TG B₄C.

P3 avec des écarts qui sont moindres (-40 pcm sur le cluster H₂O et -70 pcm pour le B₄C). Ceci permet d'inférer qu'en 2D, il est préférable de mieux discrétiser les angles azimutaux que polaires car les phénomènes physiques sont plus significatifs dans le plan XY que dans la direction perpendiculaire.

Un compromis entre temps de calcul, occupation mémoire et précision du calcul amène au choix de la quadrature $N_{\varphi}=24$, $N_{\mu}=8$ pour les études qui suivent. La convergence angulaire avec cette discrétisation angulaire avec le solveur FV a été vérifiée.

8.4 Effet du changement de géométrie et de l'hydrogène non-lié

Par la suite, le calcul des clusters hétérogènes qui sont étudiés sont effectués avec l'hypothèse d'une géométrie cartésienne pour les crayons combustibles et de l'eau sous forme de gaz libre d'hydrogène et d'oxygène. Les cas étudiés à présent étant plus hétérogènes spatialement, il est essentiel de vérifier l'impact de ces changements sur un calcul de référence avec du combustible cylindrique et de l'eau liée.

Dans un premier temps, les effets sont quantifiés séparément comme il a été explicité dans le § 7.2 du précédent chapitre. Pour ce faire, les calculs sont effectués avec APOLLO2 et TRIPOLI4, et les écarts dus aux changements sont évalués. Le maillage spatial utilisé pour les calculs APOLLO2 en géométrie cartésienne est celui de droite sur Fig. 8.1 car il est convergé spatialement.

Nous rappelons que les calculs APOLLO2 sont effectués avec des paramètres de tracking très fins : $N_{\varphi}=24$, $N_{\mu}=8$ pour les discrétisations angulaires et $\Delta r=0.0025$ pour la densité de trajectoires. Tab. 8.4 quantifie chaque effet séparément.

TG H ₂ O	Geo. Eff.			Free H Eff.			TG B ₄ C	Geo. Eff.			Free H Eff.		
	T4	P3	P0c	T4	P3	P0c		T4	P3	P0c	T4	P3	P0c
χ	0	0	0	0	0	0	χ	0	0	0	3	0	0
ϵ_{even}	36	35	30	-103	-102	-97	ϵ_{even}	275	278	264	-85	-86	-94
ϵ_{odd}	243	248	228	-600	-596	-572	ϵ_{odd}	523	522	439	-626	-617	-657
p	-998	-998	-936	1250	1276	1266	p	-2486	-2479	-2346	1835	1828	1774
f	235	212	226	-100	-137	-192	f	-395	-399	-359	-1254	-1230	-1077
η	-49	-52	-54	698	696	681	η	-83	-83	-83	705	702	713
k_{∞}	-533	-555	-506	1144	1137	1086	k_{∞}	-2166	-2162	-2084	578	596	659

TAB. 8.4 – Quantification des effets dus à la géométrie et à l’hydrogène libre.

Tab. 8.4 démontre que les effets de changements de géométrie et l’utilisation de l’hydrogène non-lié sont cohérents entre les calculs TRIPOLI4 et les calculs P3. Comme pour les cellules en réseau infini, les calculs P0c sont plus sensibles à ces changements et ont des écarts qui diffèrent de ceux du TRIPOLI4 ou du P3 d’une cinquantaine de pcm sur le tube guide H₂O et d’une centaine de pcm sur le tube guide B₄C pour le k_{∞} .

Les effets sur le tube guide B₄C sont exacerbés. Comme mentionné dans le § 7.2, les absorptions thermiques sont favorisées dans le cas de l’hydrogène non-lié or les neutrons thermiques sont aussi absorbés dans ce cas par le bore présent dans le B₄C contrairement au cluster H₂O où les neutrons thermiques sont surtout absorbés par le combustible. De ce fait, les effets observés sur le facteur antitrappe, et donc le k_{∞} , sont plus significatifs pour le cluster B₄C que pour le cluster H₂O.

TG H ₂ O	Cylindrique H ₂ O				Carré H			
	P0c-P5	P0-P5	P1-P5	P3-P5	P0c-P5	P0-P5	P1-P5	P3-P5
χ	-1	0	0	0	-1	0	0	0
ϵ_{even}	-22	6	8	0	-23	13	5	0
ϵ_{odd}	-64	-127	107	-1	-62	-83	87	0
p	239	534	-246	0	303	462	-227	-4
f	-197	-535	37	-3	-242	-560	95	-3
η	58	110	-29	1	45	77	-38	1
k_{∞}	14	-12	-122	-4	21	-91	-77	-6

TG B ₄ C	Cylindrique H ₂ O				Carré H			
	P0c-P5	P0-P5	P1-P5	P3-P5	P0c-P5	P0-P5	P1-P5	P3-P5
χ	-1	0	0	0	-1	0	0	0
ϵ_{even}	-137	-324	61	-2	-160	-374	63	-2
ϵ_{odd}	-632	-1318	329	-11	-781	-1520	336	-9
p	879	2373	-806	24	974	2261	-790	19
f	546	1576	-9	-2	762	2290	-26	0
η	63	78	-26	1	85	69	-39	1
k_{∞}	718	2385	-451	10	880	2727	-456	9

TAB. 8.5 – Quantification des écarts $Pn - P5$ dus à l’effet combiné de la géométrie et de l’hydrogène libre.

Tab. 8.5 permet de quantifier l’effet des changements de géométrie et de l’état de l’hydrogène dans l’eau et donne l’effet global sur les écarts $Pn - P5$.

Ces changements n’impactent pas fortement les écarts $Pn - P5$ qui sont du même ordre de

grandeur. Ceci est un constat important car il permet de conclure que les effets d'anisotropie du choc peuvent être étudiés avec les approximations qui sont faites sur la géométrie et l'hydrogène non-lié.

8.5 Effet des sections discrètes

À présent, les calculs sont effectués avec le solveur volumes finis en angle, la discrétisation angulaire valant $N_\varphi=24$ et $N_\mu=8$. Les sections discrètes sont injectées ensuite en entrée du solveur volumes finis en angle pour substituer les moments de Legendre de l'hydrogène. Les autres noyaux sont traités à l'ordre 1.

Les écarts par rapport à la valeur $P5$ sont donnés pour tous les moments Pn ainsi que pour le calcul avec les sections discrètes Dis . Ces résultats sont présentés dans Tab. 8.6.

TG H ₂ O	MOC 24 8				FV 24 8				
	P0c-P5	P0-P5	P1-P5	P3-P5	P0c-P5	P0-P5	P1-P5	P3-P5	Dis-P5
χ	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ϵ_{even}	-19	13	5	0	-15	13	5	0	1
ϵ_{odd}	-47	-84	86	0	-50	-90	86	1	-14
p	261	464	-226	-3	265	490	-222	-4	58
f	-236	-560	95	-3	-233	-581	94	-3	-40
η	42	77	-38	1	43	81	-37	0	22
k_∞	1	-90	-77	-6	9	-88	-75	-6	27

TG B ₄ C	MOC 24 8				FV 24 8				
	P0c-P5	P0-P5	P1-P5	P3-P5	P0c-P5	P0-P5	P1-P5	P3-P5	Dis-P5
χ	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ϵ_{even}	-156	-372	63	-2	-141	-379	62	-2	6
ϵ_{odd}	-744	-1522	335	-9	-739	-1557	330	-9	-11
p	895	2264	-788	19	889	2338	-778	19	-14
f	774	2290	-27	0	747	2285	-25	0	-4
η	80	70	-39	1	81	75	-38	1	23
k_∞	849	2729	-455	9	836	2763	-450	9	0

TAB. 8.6 – Écarts par rapport au calcul $P5$ en FV et en MOC.

Les écarts $Pn - P5$ du solveur MOC sont bien reproduits par le solveur FV comme on peut le constater dans Tab. 8.6. Les calculs $P3$ sont quasiment convergés.

Tab. 8.7 donne les comparaisons des ordres Pn par rapport aux sections continues par morceaux pour les deux motifs en FV. Les calculs Pn semblent converger vers le calcul obtenu par les sections discrètes. Néanmoins, ces écarts sont faibles, valant tout au plus en $P5$ une cinquantaine de pcm sur p pour le motif avec de l'eau.

FV 24 8	TG H ₂ O					TG B ₄ C				
	P0c-Dis	P0-Dis	P1-Dis	P3-Dis	P5-Dis	P0c-Dis	P0-Dis	P1-Dis	P3-Dis	P5-Dis
χ	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ϵ_{even}	-16	12	4	-1	-1	-147	-384	56	-8	-6
ϵ_{odd}	-36	-76	100	15	14	-728	-1547	341	1	11
p	207	432	-280	-61	-58	902	2352	-765	33	14
f	-194	-541	134	37	40	751	2289	-22	4	4
η	21	58	-60	-22	-22	58	52	-61	-22	-23
k_{∞}	-18	-115	-102	-32	-27	835	2763	-450	9	0

TAB. 8.7 – Comparaison des écarts Pn par rapport aux sections discrètes.

Comme pour les calculs cellules en réseau infini, ces premières analyses indiquent que la convergence du calcul vis à vis de l'anisotropie du choc est suffisante en $P3$, voire $P5$ pour le cluster avec B₄C. Le $P0c$ est une approximation qui n'est pas cohérente sur tous les calculs, avec des écarts assez importants par rapport au calcul Dis .

8.6 Comparaison avec TRIPOLI4

Les résultats des calculs déterministes sont maintenant comparés à ceux du code de référence TRIPOLI4 afin d'évaluer les biais résiduels et d'identifier l'apport des sections discrètes. Cette comparaison se fera en deux temps : d'abord les six facteurs pour évaluer de manière globale les effets et ensuite de manière plus fine, sur les taux de réactions.

8.6.1 Décomposition en six facteurs

Tab. 8.8 compare les résultats déterministes en FV et en MOC par rapport au TRIPOLI4 pour le cluster TG H₂O. Tab. 8.9 en fait de même pour le cluster B₄C.

Dans Tab. 8.8, le formalisme des sections discrètes réduit légèrement les biais par rapport à TRIPOLI4. Cette correction vaut 20 pcm sur le k_∞ et 60 pcm sur le facteur antitrappe p . De même, le facteur d'utilisation thermique, f a une surestimation moindre de 40 pcm. De plus, en comparant les valeurs en Pn , on constate une tendance à la convergence vers le résultat *Dis*. L'apport des sections de transfert continues par morceaux, quoique faible, s'explique par une meilleure modélisation du ralentissement, ce qui permet de mieux respecter le bilan dans le domaine thermique où se produisent la majorité des fissions. Le *P0c*, le *P3* et le calcul *Dis* ont quasiment les mêmes biais sur le k_∞ . Cependant, le *P0c* semble mieux calculer le facteur antitrappe p que le *P3* ou le *Dis*.

FV 24 8	T4	U (1 σ)	P0c	P0	P1	P3	P5	Dis
χ	1.00171	52	1	1	1	1	1	1
ϵ_{even}	1.05281	43	-40	-12	-20	-25	-25	-24
ϵ_{odd}	1.21904	65	150	110	286	201	200	186
p	0.58622	24	-129	96	-616	-398	-394	-336
f	0.92104	23	-133	-481	195	98	100	60
η	1.67912	21	9	46	-72	-34	-34	-12
k_∞	1.16557	4	-144	-241	-228	-158	-153	-126

MOC 24 8	T4	U (1 σ)	P0c	P0	P1	P3	P5
χ	1.00171	52	1	1	1	1	1
ϵ_{even}	1.05281	43	-51	-19	-27	-32	-32
ϵ_{odd}	1.21904	65	103	66	236	150	150
p	0.58622	24	-21	182	-508	-285	-282
f	0.92104	23	-169	-493	162	64	67
η	1.67912	21	22	56	-58	-20	-21
k_∞	1.16557	4	-118	-209	-195	-124	-118

TAB. 8.8 – Comparaison à TRIPOLI4, cluster TG H₂O.

Les comparaisons dans le Tab. 8.9 démontrent que les mêmes conclusions que le cluster H₂O sont valables pour le cluster B₄C. Le calcul *P5* semble avoir complètement convergé sur le résultat du calcul avec les sections discrètes avec les mêmes biais à quelques pcm près. Par ailleurs, sur ce motif, le *P0c* est clairement moins approprié pour le calcul par rapport à un

développement Pn . Les neutrons étant plus absorbés dans le domaine thermique par le bore, le $P0c$ calcule certainement mal cette absorption, ce qui pourrait expliquer ces écarts importants par rapport aux biais du cluster H_2O .

Les résultats MOC sont meilleurs qu'en FV avec le schéma différences finies, surtout pour le cluster B_4C , avec une sous-estimation de p plus faible. Ceci provient très probablement du fait que le maillage spatial n'est complètement convergé avec le solveur FV².

FV 24 8	T4	U (1 σ)	P0c	P0	P1	P3	P5	Dis
χ	1.00184	84	-4	-4	-4	-4	-4	-4
ϵ_{even}	1.10359	76	-186	-423	17	-47	-45	-39
ϵ_{odd}	1.45049	124	-368	-1187	701	361	371	360
p	0.38831	30	207	1657	-1460	-663	-682	-695
f	0.77607	38	923	2461	150	176	176	172
η	1.66414	31	42	36	-76	-37	-38	-15
k_∞	0.80422	4	618	2545	-667	-209	-218	-217

MOC 24 8	T4	U (1 σ)	P0c	P0	P1	P3	P5
χ	1.00184	84	-5	-4	-4	-4	-4
ϵ_{even}	1.10359	76	-224	-441	-5	-70	-69
ϵ_{odd}	1.45049	124	-481	-1258	599	294	303
p	0.38831	30	499	1868	-1183	-477	-495
f	0.77607	38	832	2348	31	88	88
η	1.66414	31	58	48	-61	-21	-22
k_∞	0.80422	4	684	2564	-620	-191	-200

TAB. 8.9 – Comparaison à TRIPOLI4, cluster TG B_4C .

Enfin, il est clair que les biais finaux sur les k_∞ en FV ou en MOC résultent de compensations significatives sur les divers facteurs quel que soit le motif d'étude.

8.6.2 Taux d'absorption

L'analyse des motifs d'étude se complète maintenant par les taux d'absorption qui sont présentés dans Tab. 8.10 à Tab. 8.12 pour le cluster H_2O et pour le B_4C , de Tab. 8.13 à Tab. 8.15 qui sont situés en fin de ce chapitre. Ces taux, calculés à 281 groupes, sont condensés à 13 groupes comme dans le chapitre précédent. Les comparaisons des divers taux d'absorption sont effectuées en distinguant les combustibles FACE et ANGLE comme il était mentionné au début de cette partie. Les valeurs pertinentes dans les tableaux sont respectivement en rouge pour l' ^{238}U , en vert pour le ^{239}Pu , en bleu pour le ^{240}Pu et en jaune pour le ^{241}Pu .

Une première remarque importante sur l'ensemble des tableaux ci-après est le fait que dans les groupes rapides et épithermiques (groupes 1 à 7) avec une largeur en léthargie relativement grande, le $P0c$, le $P3$ et le Dis présentent des biais du même ordre de grandeur quel que soit le cas

2. En effet, l'analyse de la convergence spatiale a été faite précédemment avec le MoC pour la rapidité du calcul. Le maillage déterminé avec le MoC n'est peut-être pas convergé complètement pour les différences finies, ce qui peut expliquer les écarts observés entre les deux méthodes de résolution.

ou l'isotope considéré. Ces groupes sont traités avec le formalisme d'autoprotection. Les groupes 8-12 sont plus fins pour prendre en compte les grandes résonances des isotopes de l'uranium et du plutonium sans autoprotection. Les biais sont de ce fait imputables principalement à la loi de choc et à la méthode de résolution.

Tab. 8.10 présente les résultats pour le cluster TG H₂O pour le combustible FACE. Sur les taux d'absorption des isotopes de l'uranium, globalement le *P0c*, le *P3* et le discret ont des biais concordants dans les groupes 1-7. Pour l'²³⁸U dans le groupe 10, les biais du *P0c* sont de signe opposé par rapport au *P3* et au *Dis* (en rouge).

Dans ce même tableau, les comparaisons sont aussi faites pour les isotopes majeurs du plutonium. Les biais du *P0c* sur le ²³⁹Pu dans le groupe 12 sont relativement élevés (en vert). De plus, le *P0c* sousestime l'absorption dans cette résonance alors que le *P3* démontre une sur-estimation du même ordre de grandeur. Sur le ²⁴⁰Pu, le *P0c* démontre le même comportement notamment pour le groupe 11 qui contient la résonance à 1 eV.

Le calcul avec les sections discrètes sont meilleurs que le *P3* sur les groupes 12 et 13 avec une amélioration d'environ 30 pcm (soit une amélioration de 30% et 67% respectivement) dans les deux groupes pour le ²³⁹Pu (*cf* Tab. 8.10 en vert). Pour le ²⁴⁰Pu, dans le groupe 12, les biais sont réduits de 50% par rapport au calcul *P3*, ce qui est une réduction d'écart assez significative sur l'absorption dans la résonance à 1 eV (*cf* Tab. 8.10 en bleu). Sur le ²⁴¹Pu, les biais sont plus faibles que sur les deux autres isotopes de manière absolue mais sont du même ordre de grandeur en relatif (en jaune). De manière assez globale sur les divers isotopes, le *P0c* calcule mieux l'absorption dans le groupe le plus thermique que ce soit en FV ou en MOC.

Tab. 8.11 montre les comparaisons sur la cellule combustible ANGLE du tube guide H₂O. Les conclusions sont très proches de celles observées dans Tab. 8.10 pour le combustible FACE. Sur les isotopes du plutonium, les tendances précédentes sont confirmées pour les résultats du calcul *Dis*. Ce dernier, avec une amélioration de l'ordre de quelques dizaines de pcm sur les taux d'absorption dans les groupes 11 pour le ²⁴⁰Pu (en bleu) et 12 pour le ²³⁹Pu (en vert), permet de lever 50% et 70% respectivement des biais résiduels sur le calcul déterministe.

La comparaison des taux d'absorption sur les combustibles ANGLE et FACE permet de conclure sur la capacité du calcul à modéliser correctement le transport des neutrons dans ces deux directions. Le calcul en discret présente des biais plus faibles que le *P3* sur les groupes 10 à 13 en ANGLE ou en FACE. Cependant, par un jeu de compensation des biais sur le total de tous les groupes, le calcul *P3* apparaît comme la meilleure approximation. Par ailleurs, les résultats en FV sont fortement voisins de ceux du MOC.

Quant au cluster TG B₄C, Tab. 8.13 présente les taux par isotope sur le milieu FACE. Sur les isotopes de l'uranium, le *P0c*, le *P3* et le *Dis* sont relativement proches même si le *P3* et *Dis* sont meilleurs dans le groupe 10 qui contient la grande résonance à 6.67 eV (en rouge). De manière similaire, sur le ²³⁹Pu, les biais dans le groupe thermique 13 sont relativement élevés en *P0c* (en vert). Les sections discrètes d'un autre côté apporte une amélioration relative par

rapport au *P3* assez conséquente notamment dans le groupe 12 pour le ^{239}Pu ($\sim 100\%$) et dans le groupe 11 pour le ^{240}Pu ($\sim 90\%$, cf Tab. 8.13 en bleu).

Ces résultats sont confirmés sur la cellule ANGLE, étant même exacerbés sur les groupes 12 et 13 pour le ^{239}Pu (en vert). Le calcul *Dis* est globalement la meilleure approximation des trois sur quasiment tous les taux des isotopes du plutonium, avec un apport considérable sur le ^{239}Pu .

Tab. 8.15 compare les taux d'absorption pour tous les isotopes pour les milieux ANGLE, FACE et B_4C . Le *P0c* calcule moins bien l'absorption dans les groupes 12 et surtout 13 (ANGLE, en jaune et vert et FACE, en vert). Les résultats *Dis* démontrent une amélioration par rapport au *P3* sur tous les taux dans ce tableau, surtout dans les groupes 11 à 13 pour les combustibles (en bleu, jaune et vert respectivement). Quant à l'absorption sur le B_4C , les biais du *P0c* permettent de mieux comprendre les écarts importants par rapport au *P3* et au *Dis*. En effet, dans les groupes 10 à 13 (en magenta), le *P0c* sous-estime fortement l'absorption sur le B_4C et de ce fait, le calcul du ralentissement et l'absorption des neutrons épithermiques dans les grandes résonances sont aussi impactés.

8.7 Conclusion

Les diverses études et analyses qui ont été menées dans ce chapitre permettent de conclure que le *P3* reste l'approximation la plus fiable et cohérente, contrairement au *P0c*. Les résultats de l'analyse sur les convergences spatiales et angulaires démontrent que ce dernier est très sensible aux paramètres de calcul et donne des résultats inacceptables pour le B_4C .

Les résultats des calculs *Dis* sur les deux motifs étudiés ne semblent pas apporter de gain significatif par rapport au *P3* sur les six facteurs. Une analyse plus fine des taux d'absorption permet de montrer que l'écart relatif sur les divers groupes qui ne sont pas autoprotégés est important, surtout pour ceux qui contiennent les résonances des plutonium. Sur le cluster TG B_4C , on a constaté que les résultats des calculs en *Pn* étaient quasiment convergés par rapport au *Dis* via la décomposition du k_∞ sur les six facteurs. La somme des biais sur tous les groupes d'énergies montrent que les résultats en *P3* et ceux de *Dis* sont très proches via une compensation de biais plus élevée pour le *P3*.

Cependant, en terme de précision par rapport au temps de calcul et à l'occupation mémoire, le *P3* ou l'ordre supérieur *P5* restent des approximations plus intéressantes que le calcul *Dis*. En effet, les calculs *Pn* avec le solveur FV prennent 24 à 36 heures au maximum avec environ 20 G de mémoire. Ces valeurs sont considérablement augmentées avec les calculs *Dis* avec des temps de calcul de l'ordre de quelques semaines en initialisant avec un flux proche de la solution du problème et une occupation mémoire de l'ordre de 100 G. Les calculs MOC sont bien plus rapides avec des temps de calcul de l'ordre de l'heure mais ce solveur a fait l'objet d'un très gros travail d'optimisation et bénéficie notamment de méthodes d'accélération très performantes [3].

H ₂ O FACE Group	U235	MOC 24 8		FV 24 8			U238	MOC 24 8		FV 24 8		
	T4	P0c	P3	P0c	P3	Dis	T4	P0c	P3	P0c	P3	Dis
1	5.2	-0.1	0.0	0.0	0.0	0.0	1010.2	-11.0	-8.6	-9.8	-7.2	-6.4
2	9.7	-0.1	0.0	-0.1	-0.1	0.0	777.0	-6.5	-4.3	-4.7	-4.3	-3.5
3	15.7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	734.4	-3.5	-4.3	-3.6	-4.7	-4.7
4	23.9	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	1123.5	5.8	5.4	6.1	5.9	5.8
5	61.4	0.0	0.0	0.0	0.1	0.0	1663.0	9.1	9.5	10.1	11.2	11.1
6	31.5	-0.1	0.0	-0.1	0.0	0.0	376.1	-1.3	-1.2	-0.9	-0.6	-0.6
7	38.5	-0.9	-0.8	-0.9	-0.8	-0.8	925.3	12.6	14.8	14.0	16.5	16.4
8	4.7	-0.2	-0.1	-0.1	-0.1	-0.1	974.4	0.3	9.7	0.3	10.3	10.5
9	74.1	-0.3	-0.1	-0.2	0.0	0.0	185.6	-0.2	0.4	0.0	0.7	0.7
10	17.3	-0.2	-0.1	-0.1	0.0	0.0	1985.3	-14.3	5.0	-10.0	9.6	9.5
11	40.7	-0.3	-0.1	-0.3	0.0	-0.1	223.7	-1.6	-0.6	-1.4	-0.3	-0.9
12	42.1	-0.6	-0.1	-0.5	0.0	-0.2	92.8	-1.3	-0.4	-1.1	-0.2	-0.5
13	360.6	0.5	-2.2	-0.3	-3.0	-1.7	616.1	0.5	-3.7	-0.8	-5.0	-3.0
Total	725.4	-2.0	-3.5	-2.5	-3.8	-2.8	10687.5	-11.3	21.7	-1.8	31.9	34.3

H ₂ O FACE Group	Pu239	MOC 24 8		FV 24 8			Pu240	MOC 24 8		FV 24 8			Pu241	MOC 24 8		FV 24 8		
	T4	P0c	P3	P0c	P3	Dis	T4	P0c	P3	P0c	P3	Dis	T4	P0c	P3	P0c	P3	Dis
1	138.8	-1.5	-1.2	-1.3	-1.0	-0.9	54.0	-0.6	-0.4	-0.5	-0.4	-0.3	16.4	-0.2	-0.1	-0.2	-0.1	-0.1
2	245.6	-2.0	-1.2	-1.4	-1.4	-1.1	78.7	-0.6	-0.4	-0.5	-0.4	-0.4	32.5	-0.3	-0.2	-0.2	-0.2	-0.1
3	254.1	-0.1	-0.4	-0.2	-0.6	-0.5	30.1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	47.4	0.2	0.1	0.2	0.1	0.1
4	333.4	1.8	1.7	1.9	1.8	1.8	52.3	0.4	0.4	0.4	0.4	0.4	63.8	0.9	0.9	1.0	1.0	0.9
5	1209.0	-6.0	-5.4	-5.0	-3.9	-4.1	200.1	-1.2	-1.0	-1.0	-0.8	-0.8	177.9	2.4	2.5	2.5	2.7	2.7
6	773.6	-6.2	-5.1	-5.3	-3.8	-3.9	184.5	-1.7	-1.4	-1.4	-1.1	-1.1	50.3	3.8	3.9	3.9	4.0	4.0
7	158.7	1.4	1.8	1.5	2.0	2.0	105.3	-4.0	-3.6	-3.8	-3.4	-3.4	109.5	-0.2	0.1	-0.1	0.2	0.2
8	153.4	2.3	3.0	2.7	3.4	3.5	77.9	2.1	2.0	2.2	2.1	2.1	3.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
9	1336.6	20.0	25.4	23.2	29.3	29.3	2.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	360.0	0.4	1.6	0.9	2.3	2.3
10	416.3	10.2	12.2	11.2	13.4	13.5	4.8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	385.5	-0.4	1.3	0.2	2.2	2.2
11	579.6	-4.4	-1.5	-3.7	-0.4	-2.1	4595.4	-29.3	17.3	-19.6	26.6	12.9	98.9	-0.7	-0.3	-0.6	-0.2	-0.4
12	6376.9	-58.5	29.7	-48.4	39.1	13.3	462.3	-6.1	-2.0	-5.2	-1.0	-2.7	417.7	-5.7	0.4	-5.1	0.9	-0.9
13	12073.2	-4.2	-63.2	-24.5	-83.0	-58.5	1270.0	0.5	-7.6	-2.0	-10.0	-6.4	2045.3	0.7	-11.2	-3.2	-14.9	-9.6
Total	24049.2	-47.2	-4.1	-49.5	-5.1	-7.8	7117.4	-40.5	3.0	-31.4	11.9	0.2	3808.2	1.1	-0.8	-0.8	-2.0	1.3

TAB. 8.10 – Taux d'absorption sur les principaux isotopes du cluster TG H₂O FACE.

TG H ₂ O ANGLE Group	U235	MOC 24 8		FV 24 8			U238	MOC 24 8		FV 24 8		
	T4	P0c	P3	P0c	P3	Dis	T4	P0c	P3	P0c	P3	Dis
1	5.2	-0.1	0.0	-0.1	0.0	0.0	1010.1	-13.2	-7.8	-11.2	-7.6	-7.2
2	9.7	-0.1	0.0	-0.1	-0.1	0.0	778.9	-7.6	-3.6	-6.3	-4.4	-3.8
3	15.8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	736.5	-3.7	-4.4	-4.0	-4.9	-4.8
4	23.8	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	1112.6	6.4	4.8	6.5	5.4	5.3
5	61.1	0.0	0.0	0.1	0.1	0.0	1626.0	6.4	4.1	7.5	6.1	5.9
6	31.2	0.0	-0.1	0.0	0.0	0.0	365.0	-1.3	-2.2	-0.9	-1.5	-1.6
7	38.1	-0.7	-0.7	-0.7	-0.7	-0.7	898.8	17.4	16.2	19.0	18.1	18.0
8	4.6	-0.1	-0.1	-0.1	-0.1	-0.1	936.9	3.6	9.0	3.8	9.9	10.0
9	73.1	-0.1	-0.1	0.0	0.0	0.0	183.0	0.3	0.4	0.5	0.7	0.7
10	16.8	-0.1	-0.1	0.0	0.0	0.0	1901.2	-4.2	4.5	-3.2	9.6	9.3
11	39.8	-0.2	-0.1	-0.1	0.0	-0.1	219.5	-1.0	-0.6	-0.9	-0.3	-0.9
12	39.7	-0.3	-0.1	-0.3	0.0	-0.2	88.0	-0.8	-0.4	-0.6	-0.2	-0.5
13	320.7	0.6	-1.9	-0.4	-3.0	-1.9	548.8	0.7	-3.3	-0.8	-5.0	-3.4
Total	679.6	-1.0	-3.2	-1.6	-3.7	-2.9	10405.2	3.0	16.6	9.3	26.0	27.0

TG H ₂ O ANGLE Group	Pu239	MOC 24 8		FV 24 8			Pu240	MOC 24 8		FV 24 8			Pu241	MOC 24 8		FV 24 8		
	T4	P0c	P3	P0c	P3	Dis	T4	P0c	P3	P0c	P3	Dis	T4	P0c	P3	P0c	P3	Dis
1	138.8	-1.8	-1.1	-1.5	-1.0	-1.0	54.0	-0.7	-0.4	-0.6	-0.4	-0.4	16.4	-0.2	-0.1	-0.2	-0.1	-0.1
2	246.5	-2.3	-1.0	-1.9	-1.4	-1.2	79.0	-0.7	-0.4	-0.6	-0.5	-0.4	32.7	-0.3	-0.1	-0.3	-0.2	-0.1
3	255.3	-0.3	-0.3	-0.4	-0.6	-0.6	30.2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	47.6	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1
4	332.9	2.0	1.5	2.1	1.7	1.7	52.2	0.4	0.3	0.4	0.4	0.4	63.8	1.0	0.9	1.0	0.9	0.9
5	1198.5	-4.0	-5.4	-3.1	-3.8	-4.0	198.0	-0.9	-1.1	-0.7	-0.8	-0.8	176.9	2.6	2.4	2.8	2.7	2.6
6	761.0	-4.5	-5.3	-3.7	-3.8	-4.0	179.7	-1.1	-1.3	-0.9	-1.0	-1.0	49.8	4.0	3.9	4.0	4.0	4.0
7	156.5	1.9	2.0	2.0	2.2	2.2	102.7	-3.3	-3.3	-3.0	-3.0	-3.0	108.4	0.0	0.1	0.1	0.2	0.2
8	150.1	3.1	2.9	3.4	3.3	3.4	75.1	2.6	2.0	2.7	2.2	2.2	2.9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
9	1304.8	26.6	24.6	29.8	28.7	28.6	2.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	353.9	1.7	1.6	2.2	2.4	2.4
10	406.1	12.0	11.7	12.9	12.9	13.0	4.7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	377.5	1.0	1.2	1.5	2.1	2.1
11	565.0	-2.5	-1.7	-1.7	-0.5	-2.2	4370.6	-7.8	14.9	2.3	25.2	12.0	97.1	-0.5	-0.3	-0.4	-0.2	-0.4
12	5942.2	-19.8	25.7	-11.0	34.1	9.7	441.3	-3.6	-2.1	-2.8	-1.1	-2.7	387.2	-2.8	0.3	-2.4	0.7	-0.9
13	10809.7	6.3	-56.7	-19.3	-84.8	-65.7	1133.1	1.1	-6.7	-1.9	-10.0	-7.2	1826.9	1.9	-9.9	-2.8	-15.0	-10.8
Total	22267.4	16.6	-3.0	7.6	-13.1	-20.0	6722.5	-13.9	2.1	-5.1	11.0	-1.0	3541.1	8.5	0.1	5.7	-2.4	-0.1

TAB. 8.11 – Taux d’absorption sur les principaux isotopes du cluster TG H₂O ANGLE.

TG H ₂ O Group	ANGLE T4	MOC 24 8		FV 24 8			FACE T4	MOC 24 8		FV 24 8		
		P0c	P3	P0c	P3	Dis		P0c	P3	P0c	P3	Dis
1	1346.9	-16.9	-9.9	-14.3	-9.5	-13.9	1347.1	-13.9	-10.8	-12.5	-9.0	-10.6
2	1178.8	-11.4	-5.3	-9.4	-6.7	-10.8	1175.5	-9.7	-6.3	-6.9	-6.5	-7.1
3	1106.0	-3.8	-4.6	-4.3	-5.5	-5.2	1102.2	-3.3	-4.5	-3.6	-5.3	-4.4
4	1620.0	10.2	8.0	10.4	8.8	11.3	1631.6	9.4	8.7	9.7	9.5	10.5
5	3357.4	5.7	1.4	8.1	5.8	12.5	3408.9	5.7	6.9	8.1	10.8	11.9
6	1444.0	-4.0	-5.9	-2.3	-3.2	0.4	1474.0	-6.4	-4.7	-4.9	-2.4	-2.5
7	1334.0	17.9	16.8	20.0	19.5	22.7	1367.2	11.3	14.8	13.2	17.2	15.6
8	1171.5	9.2	13.8	9.8	15.3	11.3	1215.4	4.5	14.5	5.0	15.7	6.1
9	1980.6	29.1	27.2	33.1	32.6	38.5	2023.1	20.5	28.1	24.4	33.2	29.5
10	2770.2	8.6	17.3	14.7	24.6	22.0	2874.2	-4.9	18.5	1.0	25.2	7.6
11	6250.9	-8.6	17.0	4.3	31.0	18.4	6526.2	-37.8	19.4	-25.1	32.4	-12.1
12	7320.7	-27.1	25.4	-16.1	36.4	-5.1	7836.4	-74.2	29.9	-61.7	41.9	-49.6
13	15065.8	11.2	-80.8	-25.8	-121.5	-66.5	16844.1	-1.1	-91.1	-31.2	-119.6	-59.6
Total	45946.8	20.1	20.4	28.2	27.8	35.6	48826.0	-100.0	23.3	-84.5	43.1	-64.8

TAB. 8.12 – TG H₂O : Comparaison des taux d'absorption sur les combustibles FACE et ANGLE.

B ₄ C FACE Group	U235	MOC 24 8		FV 24 8			U238	MOC 24 8		FV 24 8		
	T4	P0c	P3	P0c	P3	Dis	T4	P0c	P3	P0c	P3	Dis
1	5.4	-0.1	-0.1	0.0	0.0	0.0	1064.4	-13.7	-10.5	-9.9	-7.6	-6.9
2	10.5	-0.1	-0.1	-0.1	-0.1	0.0	833.9	-8.0	-5.2	-4.5	-4.1	-3.3
3	17.4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	813.9	-4.5	-4.9	-4.5	-5.3	-5.2
4	25.8	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	1213.3	6.4	5.8	6.4	6.1	6.1
5	62.4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1678.3	11.6	10.7	11.8	11.8	11.5
6	30.0	-0.1	-0.1	-0.1	0.0	0.0	358.9	0.6	0.3	0.7	0.7	0.5
7	35.3	-0.8	-0.8	-0.8	-0.7	-0.7	852.9	12.8	14.1	13.6	15.3	15.0
8	4.2	-0.1	-0.1	-0.1	-0.1	-0.1	863.4	-2.3	7.2	-2.8	7.3	7.1
9	63.3	-0.1	-0.1	-0.1	0.0	-0.1	159.6	0.1	0.2	0.2	0.4	0.3
10	13.9	-0.1	-0.1	-0.1	0.0	0.0	1598.0	-10.8	3.8	-8.5	6.3	5.1
11	29.0	0.0	-0.1	0.0	-0.1	-0.2	161.7	-0.2	-0.5	-0.2	-0.5	-1.0
12	26.0	-0.1	-0.1	-0.1	-0.1	-0.2	57.8	-0.2	-0.3	-0.2	-0.3	-0.5
13	161.2	3.1	-1.2	2.3	-1.9	-1.4	276.9	5.1	-2.1	3.9	-3.2	-2.5
Total	484.4	1.7	-2.5	1.1	-3.0	-2.7	9933.0	-3.0	18.6	6.0	26.8	26.1

B ₄ C FACE Group	Pu239	MOC 24 8		FV 24 8			Pu240	MOC 24 8		FV 24 8			Pu241	MOC 24 8		FV 24 8		
	T4	P0c	P3	P0c	P3	Dis	T4	P0c	P3	P0c	P3	Dis	T4	P0c	P3	P0c	P3	Dis
1	146.3	-1.9	-1.4	-1.3	-1.0	-0.9	56.9	-0.7	-0.5	-0.5	-0.4	-0.4	17.3	-0.2	-0.2	-0.2	-0.1	-0.1
2	265.3	-2.4	-1.5	-1.4	-1.3	-1.0	84.8	-0.8	-0.5	-0.4	-0.4	-0.3	35.2	-0.3	-0.2	-0.2	-0.2	-0.1
3	281.7	-0.4	-0.4	-0.3	-0.7	-0.6	33.3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	52.6	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1
4	360.9	1.9	1.7	1.9	1.8	1.8	56.5	0.4	0.4	0.4	0.4	0.4	69.2	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
5	1221.7	-5.8	-6.0	-5.4	-5.0	-5.3	201.7	-1.0	-1.1	-1.0	-0.9	-0.9	180.6	2.5	2.5	2.5	2.6	2.6
6	735.4	-5.4	-5.1	-5.0	-4.3	-4.6	174.7	-1.2	-1.1	-1.1	-0.9	-1.0	47.9	3.8	3.8	3.8	3.9	3.8
7	144.3	1.3	1.5	1.3	1.5	1.5	97.7	-4.0	-3.7	-3.8	-3.5	-3.5	100.0	-0.1	0.0	-0.1	0.0	0.0
8	137.3	2.0	2.6	2.3	2.8	2.8	68.9	1.8	1.7	1.8	1.8	1.8	2.6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
9	1145.9	18.4	21.3	20.3	23.7	23.1	1.7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	308.4	1.1	1.4	1.2	1.8	1.6
10	340.3	9.0	9.9	9.5	10.6	10.4	3.8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	306.3	0.7	0.9	0.9	1.3	1.1
11	402.0	0.0	-1.2	0.1	-0.8	-2.2	3132.5	-5.6	8.6	-1.6	12.4	1.4	71.9	-0.1	-0.2	-0.1	-0.2	-0.4
12	3878.5	8.0	13.3	9.2	14.4	-0.2	291.8	-0.8	-1.7	-0.6	-1.3	-2.4	250.0	-0.4	-0.2	-0.4	-0.1	-1.1
13	5551.5	93.2	-38.5	71.8	-57.0	-49.2	574.3	10.2	-4.4	7.8	-6.5	-5.2	933.0	16.4	-6.7	12.6	-10.0	-8.2
Total	14611.2	117.8	-4.0	102.7	-15.3	-24.2	4778.7	-1.7	-2.2	1.1	0.6	-10.2	2374.9	24.3	2.2	21.1	0.0	0.2

TAB. 8.13 – Taux d'absorption sur les principaux isotopes du cluster TG B₄C FACE.

B ₄ C ANGLE Group	U235	MOC 24 8		FV 24 8			U238	MOC 24 8		FV 24 8		
	T4	P0c	P3	P0c	P3	Dis	T4	P0c	P3	P0c	P3	Dis
1	5.5	-0.1	0.0	-0.1	0.0	0.0	1077.1	-13.8	-9.8	-12.0	-8.8	-8.3
2	10.6	-0.1	-0.1	-0.1	-0.1	0.0	843.5	-7.7	-4.7	-6.0	-4.8	-4.2
3	17.5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	816.7	-4.8	-5.2	-5.0	-5.6	-5.5
4	26.0	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	1214.9	4.5	4.9	4.5	5.4	5.3
5	63.8	-0.2	0.0	-0.2	0.0	0.0	1694.5	-0.4	4.0	0.2	5.6	5.6
6	31.0	-0.2	-0.1	-0.2	0.0	0.0	366.8	-4.3	-3.0	-4.1	-2.4	-2.5
7	36.8	-1.0	-0.8	-1.0	-0.7	-0.7	878.1	8.2	13.8	9.5	15.5	15.4
8	4.4	-0.2	-0.1	-0.2	-0.1	-0.1	891.1	-3.7	8.3	-3.7	8.8	9.1
9	66.9	-0.6	-0.1	-0.6	0.0	0.0	168.6	-1.0	0.2	-0.9	0.5	0.4
10	14.7	-0.2	-0.1	-0.1	0.0	0.0	1683.5	-15.2	3.4	-12.0	7.0	6.8
11	31.5	-0.2	-0.1	-0.2	-0.1	-0.1	175.6	-1.5	-0.6	-1.6	-0.5	-0.9
12	28.4	0.0	-0.1	0.0	-0.1	-0.2	63.1	-0.1	-0.4	-0.1	-0.3	-0.5
13	181.6	4.2	-1.3	3.4	-2.0	-1.4	311.7	7.0	-2.3	5.7	-3.4	-2.5
Total	518.7	1.5	-2.7	0.9	-3.0	-2.7	10185.2	-32.9	8.6	-25.4	17.0	18.2

B ₄ C ANGLE Group	Pu239	MOC 24 8		FV 24 8			Pu240	MOC 24 8		FV 24 8			Pu241	MOC 24 8		FV 24 8		
	T4	P0c	P3	P0c	P3	Dis	T4	P0c	P3	P0c	P3	Dis	T4	P0c	P3	P0c	P3	Dis
1	148.1	-1.9	-1.3	-1.6	-1.2	-1.1	57.6	-0.7	-0.5	-0.6	-0.5	-0.4	17.5	-0.2	-0.2	-0.2	-0.1	-0.1
2	268.2	-2.4	-1.4	-1.8	-1.5	-1.3	85.7	-0.8	-0.5	-0.6	-0.5	-0.4	35.5	-0.3	-0.2	-0.2	-0.2	-0.2
3	283.0	-0.4	-0.5	-0.5	-0.7	-0.6	33.5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	52.8	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1
4	363.5	1.4	1.6	1.5	1.8	1.7	56.9	0.3	0.4	0.3	0.4	0.4	69.7	0.9	1.0	0.9	1.0	1.0
5	1245.8	-10.0	-6.3	-9.4	-4.9	-5.0	205.6	-1.8	-1.1	-1.7	-0.9	-0.9	184.4	2.0	2.5	2.0	2.7	2.7
6	757.4	-10.2	-6.4	-9.7	-5.3	-5.3	178.8	-2.5	-1.6	-2.4	-1.3	-1.3	49.6	3.6	3.9	3.7	4.0	4.0
7	150.5	0.5	1.6	0.5	1.7	1.7	100.6	-4.3	-3.5	-4.1	-3.3	-3.3	104.4	-0.7	0.0	-0.7	0.1	0.1
8	142.6	1.7	2.8	2.0	3.2	3.2	71.4	1.6	1.8	1.7	1.9	1.9	2.7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
9	1201.7	14.7	22.7	16.9	25.9	25.9	1.8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	325.2	-0.8	1.5	-0.6	2.0	2.0
10	359.9	8.0	10.7	8.6	11.6	11.6	4.1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	327.3	-1.5	1.0	-1.3	1.5	1.4
11	437.6	-2.5	-1.4	-2.4	-0.8	-2.0	3384.3	-1.4	9.8	3.9	15.6	6.0	78.0	-0.7	-0.3	-0.7	-0.2	-0.4
12	4231.7	32.9	12.7	34.9	15.2	-2.0	319.0	-0.8	-1.9	-0.6	-1.5	-2.6	273.0	1.4	-0.2	1.4	-0.1	-1.3
13	6231.3	130.4	-40.8	107.3	-59.8	-50.1	646.0	14.1	-4.7	11.5	-6.9	-5.3	1048.5	22.6	-7.1	18.5	-10.5	-8.3
Total	15821.3	162.2	-6.0	146.4	-15.0	-23.3	5145.3	3.7	-2.0	7.5	3.0	-6.1	2568.6	26.4	2.1	22.9	0.2	1.0

TAB. 8.14 – Taux d'absorption sur les principaux isotopes du cluster TG B₄C ANGLE.

TG B ₄ C Group	ANGLE T4	MOC 24 8		FV 24 8			FACE T4	MOC 24 8		FV 24 8			B ₄ C T4	MOC 24 8		FV 24 8		
		P0c	P3	P0c	P3	Dis		P0c	P3	P0c	P3	Dis		P0c	P3	P0c	P3	Dis
1	1435.6	-17.9	-12.5	-15.5	-11.1	-10.3	1418.6	-17.6	-13.4	-12.6	-9.6	-8.6	60.4	19.2	19.4	19.8	19.8	19.9
2	1278.3	-11.6	-7.0	-9.0	-7.3	-6.0	1264.0	-11.9	-7.6	-6.7	-6.3	-4.8	142.1	3.9	4.3	5.0	4.7	5.0
3	1226.3	-5.1	-5.5	-5.3	-6.3	-6.1	1221.6	-4.8	-5.3	-4.7	-5.9	-5.6	853.0	-0.1	0.2	0.8	0.8	1.1
4	1769.0	7.5	8.2	7.6	8.9	8.8	1763.3	10.2	9.3	10.1	9.8	9.7	1831.7	6.2	3.3	10.2	7.8	7.6
5	3494.9	-9.2	0.5	-7.8	4.1	4.0	3443.7	8.6	7.4	9.4	10.0	9.7	4051.2	21.2	10.0	39.7	28.9	28.5
6	1440.7	-14.9	-8.2	-13.8	-6.0	-6.0	1402.1	-3.2	-3.1	-2.6	-1.6	-1.7	1640.7	6.6	3.1	15.1	11.2	11.2
7	1298.8	5.1	13.7	6.6	15.9	16.0	1257.5	11.5	13.5	12.5	15.1	15.0	1716.6	2.9	0.8	11.4	8.5	8.6
8	1114.0	-0.6	12.7	-0.1	13.8	14.1	1078.2	1.4	11.4	1.2	11.8	12.0	411.8	-11.3	-0.8	-8.8	1.2	1.2
9	1823.1	12.5	25.0	15.0	29.1	29.4	1734.7	20.0	23.4	22.1	26.4	26.4	2778.7	-7.0	-5.3	3.2	3.4	3.9
10	2444.9	-9.4	14.9	-5.3	20.1	20.6	2314.1	-1.3	14.5	1.7	18.1	18.0	2332.9	-33.2	-5.3	-27.2	-0.6	0.0
11	4885.1	-7.0	10.9	-0.6	18.8	9.3	4520.2	-4.2	9.7	0.7	14.7	3.9	5695.5	-153.5	-11.1	-149.4	-11.4	-24.3
12	5221.5	35.3	11.1	37.9	14.7	-0.8	4784.6	8.0	12.1	9.7	13.9	-1.6	2252.8	-161.0	-6.1	-161.9	-10.5	-17.5
13	8661.9	183.6	-58.0	150.8	-85.2	-57.5	7712.5	132.0	-54.5	101.4	-81.0	-57.7	3637.5	-85.0	-19.1	-115.5	-54.0	-49.6
Total	36094.1	168.3	5.8	160.5	9.5	15.6	33915.3	148.5	17.2	142.3	15.5	14.7	27404.9	-391.0	-6.7	-357.7	9.8	-4.5

TAB. 8.15 – TG B₄C : Comparaison des taux d'absorption sur les combustibles FACE et ANGLE, et sur le B₄C.

Calculs de réflecteur

Ce chapitre présente un dernier cas de géométrie d'étude : une traverse à une dimension avec réflecteur. On souhaite vérifier l'apport de la représentation discrète sur le calcul de l'effet réflecteur et des nappes de flux et de taux de fission, sur une géométrie représentative d'une situation cœur.

9.1 Présentation de la géométrie

La géométrie qui sera traitée est présentée Fig. 9.1. Le choix de traiter la géométrie en une dimension plutôt qu'une rangée de cellules en géométrie XY est motivé par des considérations de temps de calcul et d'occupation mémoire comme il a été mentionné dans les chapitres précédents sur la validation de la méthodologie.

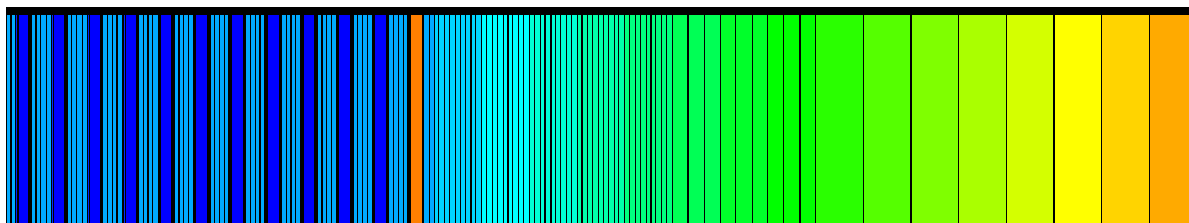


FIG. 9.1 – Géométrie de la traverse.

Sur la figure ci-dessus, le « cœur » est composé de cellules combustibles et le réflecteur est en eau borée comme le modérateur. Les plaques combustibles sont en bleu foncé, sauf celle qui est juste à côté du réflecteur qui est en orange. Cette dernière sera traitée séparément pour l'autoprotection car l'effet Dancoff n'est pas le même que celui que subissent les autres plaques. Le combustible est constitué d'UOX dont la composition est la même qu'au Chapitre 7, Tab. 7.1. Le modérateur est de l'eau borée à 293 K avec la composition donnée en Tab. 7.3.

L'épaisseur des plaques a été calculée pour conserver la corde moyenne par rapport aux crayons carrés de façon à respecter au mieux le parcours moyen des neutrons dans le combustible. Cette méthode permet ainsi d'obtenir un effet d'autoprotection comparable.

Soit le combustible carré de côté L et de hauteur h . La transformation en une géométrie 1D équivaut à un combustible d'épaisseur e , de hauteur h et de profondeur h aussi (par simplifica-

tion).

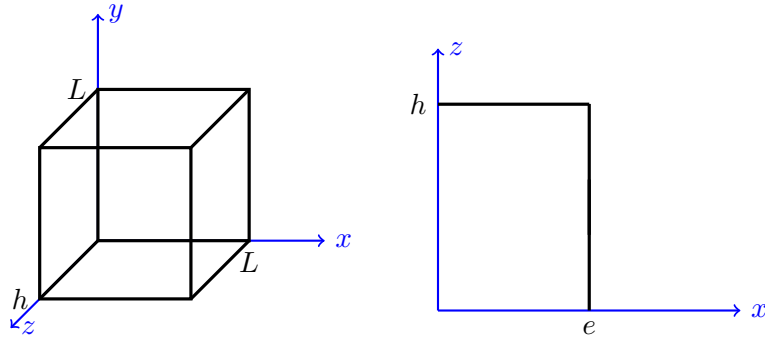


FIG. 9.2 – Passage de la géométrie XY à la géométrie 1D.

La conservation de la corde moyenne s'écrit comme suit :

$$\begin{aligned}
 l &= \frac{4\text{Volume}}{\text{Surface}} \\
 &= \frac{4L^2h}{2L^2 + 4Lh}, \text{ en géométrie } XY \\
 &= \frac{4eh^2}{4eh + 2h^2}, \text{ en géométrie 1D}
 \end{aligned}$$

En faisant tendre $h \rightarrow \infty$, nous obtenons :

$$L = 2e$$

De ce fait, afin de conserver la corde moyenne, les épaisseurs des combustibles dans la géométrie 1D sont pris égaux à la moitié du côté du combustible bidimensionnel. Le creusement du flux est aussi pris en compte en discrétisant le combustible suivant des lamelles à 50, 80 et 95% de l'épaisseur de la plaque en allant du centre du combustible vers la périphérie.

Par ailleurs, le rapport de modération doit aussi être conservé. Ceci nous permettra ainsi d'obtenir les épaisseurs de modérateur x_{mod} , à mettre entre les plaques pour obtenir une cellule à géométrie 1D équivalente à celle en géométrie XY . En supposant que ce dernier ait un pas de réseau p ,

$$\begin{aligned}
 \frac{V_{mod}}{V_{comb}} &= \frac{p^2 - L^2}{L^2} \\
 &= \frac{2x_{mod}}{e}
 \end{aligned}$$

En ce qui concerne le réflecteur, il est important de prendre en compte la remontée de flux thermique qui a lieu sur les six premiers centimètres. La discrétisation spatiale adoptée est donc la suivante :

- maillage très fin sur les 6 premiers centimètres, avec des mailles qui font 1.4 mm d'épaisseur,

- maillage fin entre 6 cm et 10 cm : mailles de 4.2 mm d'épaisseur,
- maillage relâché au-delà : 1.262 cm.

9.2 Calcul avec la représentation discrète

La convergence spatiale et angulaire du calcul est vérifiée avant toute chose avec les solveurs MOC et FV. La discrétisation angulaire retenue est $N_\varphi=24$, $N_\mu=8$ pour les angles azimutaux et polaires respectivement. Par ailleurs, cette géométrie très allongée impose des conditions de convergence plus serrées en ce qui concerne le calcul en MOC. Il est important d'imposer des conditions de convergence sur tous les moments du flux et pas seulement sur le flux scalaire¹. Cette modification a aussi été implémentée dans le solveur FV. Les résultats obtenus sont présentés dans les sections suivantes.

9.2.1 Écart $P_n - P_5$

On compare ici les écarts $P_n - P_5$ en pcm.

MOC 24 8	P5	P0-P5	P1-P5	P3-P5	P0c-P5
χ	1.00125	4	-1	0	-4
ϵ_{even}	1.04939	-408	-3	-1	-121
ϵ_{odd}	1.13163	-504	13	0	31
p	0.77540	-2836	67	0	301
f	0.58430	11604	-322	-5	-1064
η	1.88653	-13	0	0	-3
k_∞	1.01627	7846	-246	-6	-859

FV 24 8	P5	P0-P5	P1-P5	P3-P5	P0c-P5
χ	1.00125	4	-1	0	-4
ϵ_{even}	1.04931	-402	3	-1	-109
ϵ_{odd}	1.13193	-497	19	0	45
p	0.77385	-2844	65	0	301
f	0.58578	11534	-369	-5	-1171
η	1.88649	-13	0	0	-3
k_∞	1.01698	7781	-311	-6	-940

TAB. 9.1 – Convergence du calcul par rapport à l'ordre P_5 .

Dans Tab. 9.1, les valeurs MOC et FV sont très proches et confirment les observations qui ont été faites plus haut. D'autre part, les calculs P_0 présentent un écart très important avec le calcul P_5 . Quant au P_0c , ces écarts sont aussi très conséquents. Dans ce calcul réflecteur, le flux rapide est surtout dirigé vers le réflecteur tandis que le flux thermique est surtout rentrant vers le combustible (*cf* Fig. 9.3). Dans une telle situation où les neutrons thermiques sont réfléchis vers

1. À noter également que l'utilisation du tracking cyclique requiert des conditions plus fortes pour que la fermeture de la trajectoire soit assurée, notamment sur le nombre de rebonds nécessaires.

le combustible, une approximation isotrope n'est pas appropriée et la correction de transport améliore cette approximation sans que cela soit suffisant [86].

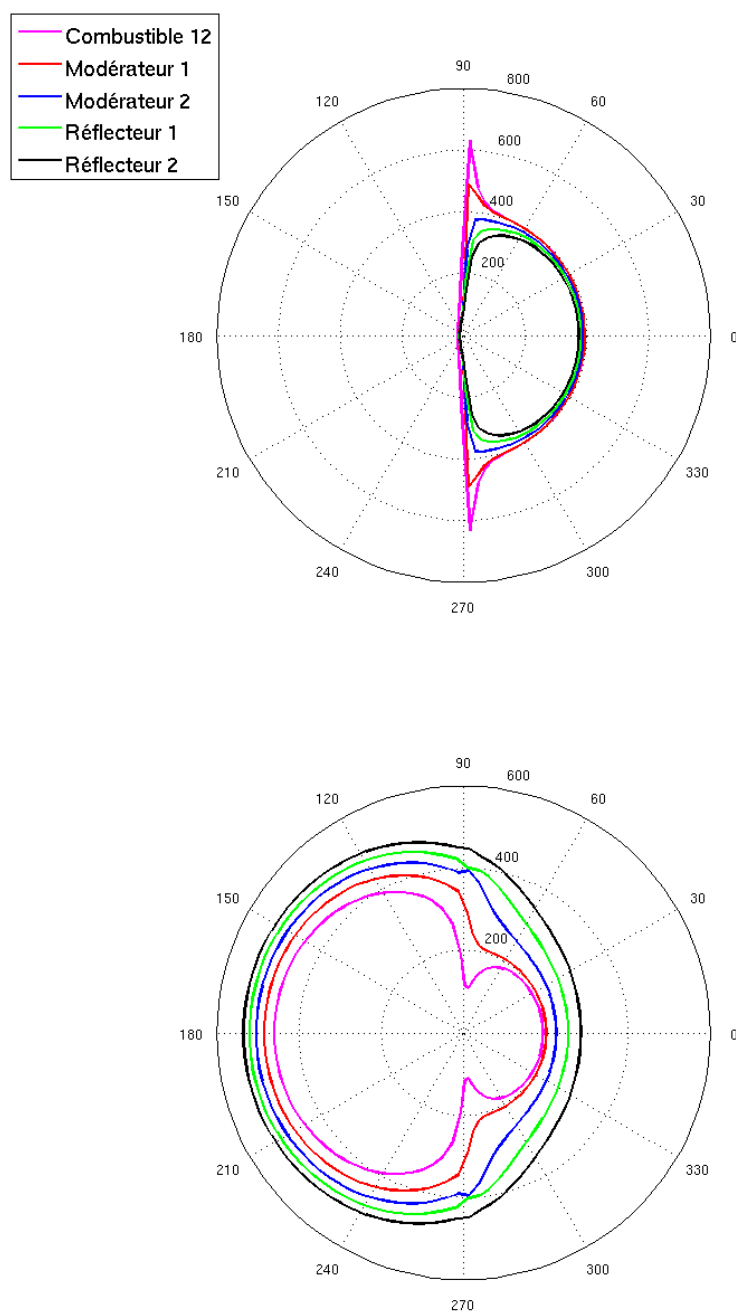


FIG. 9.3 – Flux angulaires sur la traverse, dans le domaine rapide en haut et en thermique en bas. Ces flux angulaires sont calculés sur la dernière cellule de combustible avant le réflecteur et pour les deux cellules de modérateur à côté ainsi que les deux premières mailles de réflecteur.

Tab. 9.1 montre que la convergence est atteinte en $P3$ (l'écart $P1 - P5$ étant encore signi-

ficatif : de l'ordre de -300 pcm).

9.2.2 Effet des sections discrètes

À présent, les sections discrètes sont substituées aux moments de Legendre de l'hydrogène. Les autres isotopes sont traités à l'ordre $P1$. Les résultats des calculs sont comparés au calcul de référence TRIPOLI4. Cette comparaison est effectuée sur les six facteurs et est présentée dans Tab. 9.2.

FV 24 8	T4	U (1 σ)	P0	P1	P3	P5	Dis
χ	1.00125	23	4	-1	0	0	0
ϵ_{even}	1.04992	21	-460	-55	-58	-58	-62
ϵ_{odd}	1.13150	36	-459	58	39	38	36
p	0.77618	18	-3144	-236	-301	-301	-274
f	0.58317	11	11980	78	441	447	332
η	1.88659	24	-18	-5	-5	-5	-1
k_{∞}	1.01581	4	7898	-194	112	117	29

MOC 24 8	T4	U (1 σ)	P0	P1	P3	P5
χ	1.00125	23	4	-1	0	0
ϵ_{even}	1.04992	21	-458	-54	-51	-50
ϵ_{odd}	1.13150	36	-493	24	12	11
p	0.77618	18	-2936	-33	-100	-100
f	0.58317	11	11797	-128	189	194
η	1.88659	24	-16	-3	-3	-3
k_{∞}	1.01581	4	7891	-201	39	45

TAB. 9.2 – Comparaison au calcul TRIPOLI4 (écarts en pcm).

La représentation discrète améliore le calcul du facteur d'utilisation thermique, f , en réduisant la surestimation de 110 pcm. Cette amélioration se traduit aussi sur le k_{∞} avec un biais d'une trentaine de pcm.

Le facteur antitrappe p est légèrement amélioré avec une sous-estimation moindre d'une vingtaine de pcm. De ce fait, on peut conclure que par rapport à une modélisation polynômiale, la représentation discrète augmente faiblement le nombre de neutrons qui passent les résonances pour être disponibles pour les fissions dans le domaine thermique. Cependant, comparativement à l'amélioration sur f , celle sur p est très faible. Par rapport aux calculs précédents sur les clusters 3×3 avec trou d'eau central où l'on n'observait pas une telle amélioration de f (par rapport à p), cela implique que la forme du flux et notamment ses variations sont mieux calculées en thermique avec les sections discrètes.

9.2.3 Nappe de flux et taux de fission

Les flux à deux groupes sont maintenant présentés en Fig. 9.4. La coupure thermique est prise à 0.625 eV. Cette figure présente les flux calculés avec TRIPOLI4 (en noir) ainsi que les

erreurs en % pour les calculs MoC P_3 , FV P_3 et $Dis.$

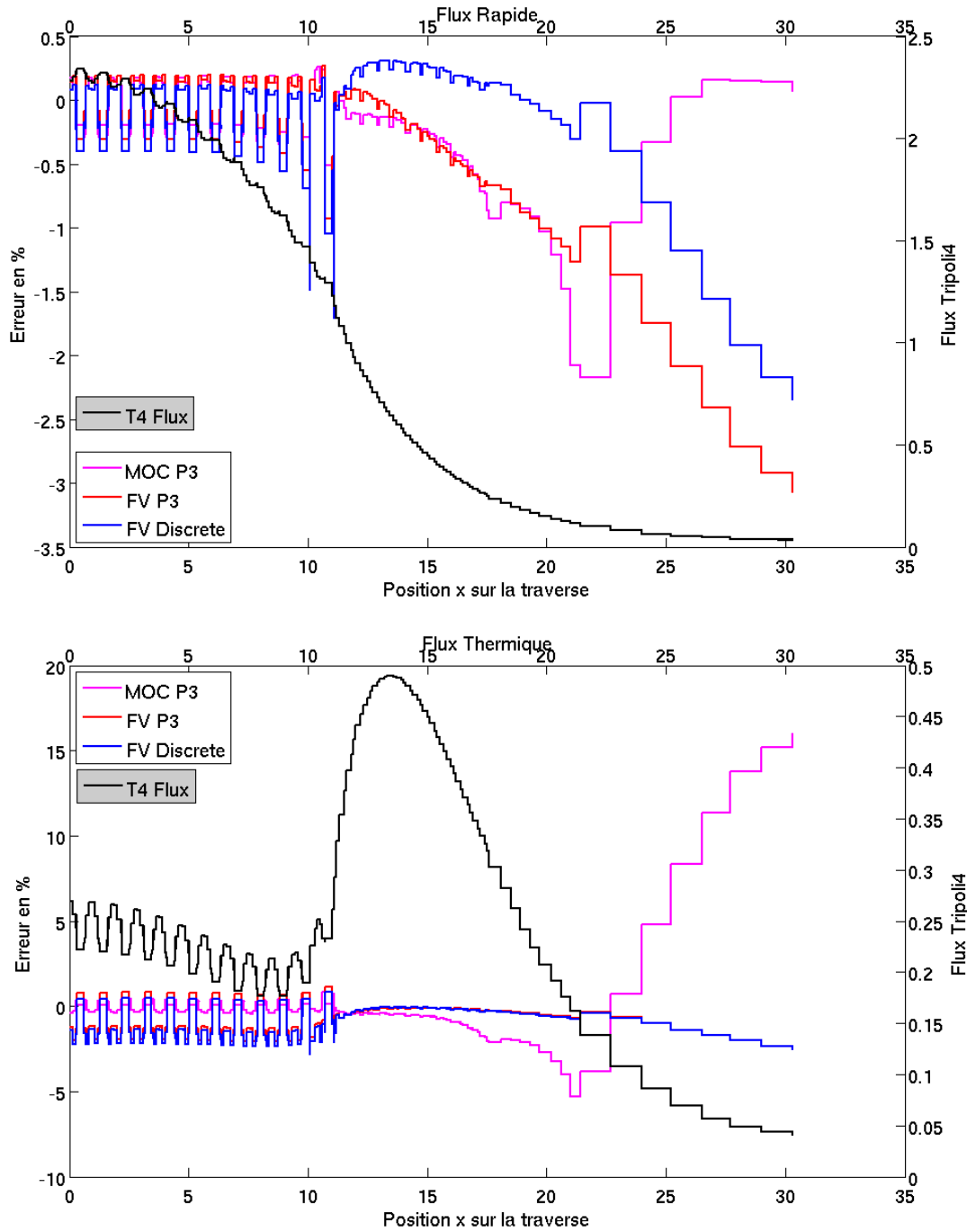


FIG. 9.4 – Flux rapide (en haut) et thermique (en bas) sur la traverse avec les erreurs en % dues aux méthodes et à la représentation de l’anisotropie.

Dans la partie cœur, en rapide ou en thermique, les trois calculs déterministes sont très proches avec des biais de moins de 0.5% par rapport au calcul TRIPOLI4. Cependant, dans le réflecteur, sur les premiers centimètres, pour le flux rapide, les calculs P_3 en MoC et FV et le

calcul *Dis* ont des écarts avec des signes différents mais de même ordre de grandeur. Dans ce domaine d'énergie, les sections discrètes sont globalement meilleures sur le calcul du flux avec des écarts de 0.2% dans les 10 premiers centimètres, alors que les erreurs atteignent 1% dans cette zone avec les calculs *P3*. Par ailleurs, loin dans le réflecteur, le calcul *Dis* reste meilleur que le *P3* en FV mais c'est le MOC qui est plus précis.

Dans le domaine thermique, les conclusions précédentes sont toujours valables dans la partie cœur. Dans le réflecteur, sur les 10 premiers centimètres dans la remontée du flux thermique, les diverses méthodes sont très proches. Les calculs *Dis* et *P3* sont voisins sur toute la géométrie. Cependant, loin dans le réflecteur, le MOC donne des écarts très forts par rapport au FV. La géométrie a été raffinée sur tout le réflecteur de sorte à ce que toutes les mailles soient très fines, c'est-à-dire 1.4 mm d'épaisseur. Ceci améliore quelque peu le résultat mais l'écart reste de l'ordre de 15% sur le flux thermique. La discrétisation angulaire a aussi été raffinée, sans une amélioration significative des résultats.

Les taux de fission condensés à un groupe sont aussi présentés en Fig. 9.5 et les erreurs par rapport à TRIPOLI4 illustrées Fig. 9.6. En FV, les sections discrètes améliorent légèrement (de l'ordre de quelque dixièmes de %) les résultats de calcul par rapport au *P3*. Le calcul MOC est globalement plus proche du calcul de référence avec des écarts de l'ordre de 0.5%, sauf sur le crayon le plus proche du réflecteur où l'écart atteint 1.5%.

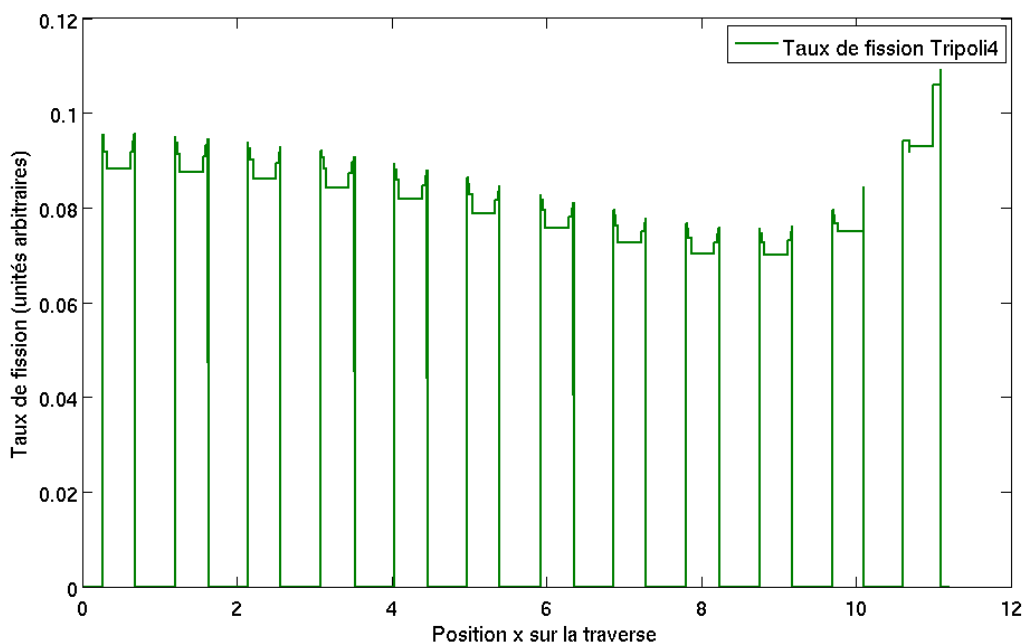


FIG. 9.5 – Fission à 1 groupe sur la traverse avec les erreurs dues en % aux méthodes et à la représentation de l'anisotropie.

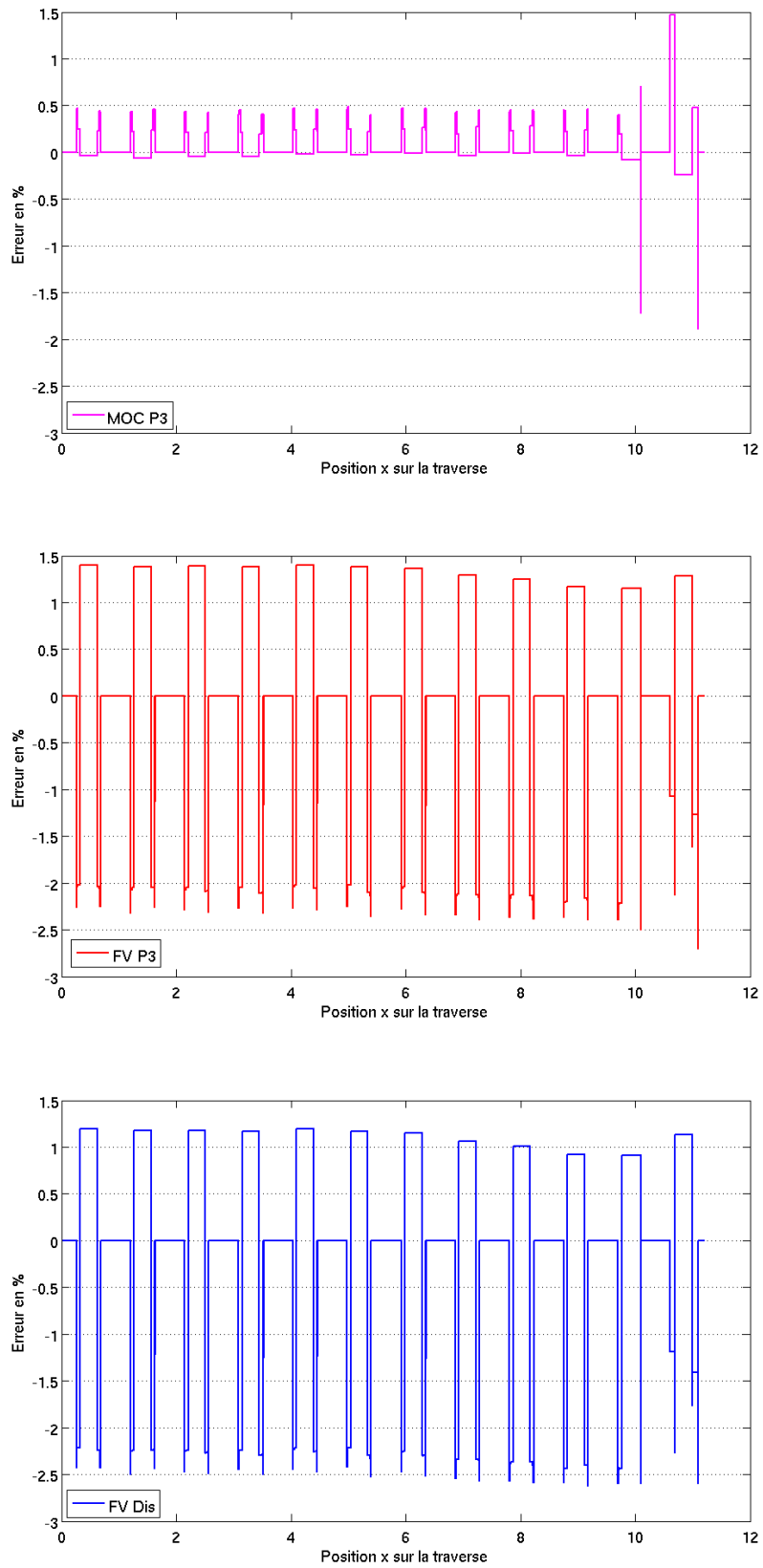


FIG. 9.6 – Les erreurs en % dues aux méthodes et à la représentation de l'anisotropie.

9.3 Conclusion

Les calculs effectués sur cette géométrie cœur-réflecteur 1D confirment les observations précédentes sur les calculs cellules et les clusters hétérogènes. Le développement polynômial d'ordre 3 est suffisant pour traiter les effets de l'anisotropie du choc. Les sections discrètes améliorent certes légèrement les résultats mais comme nous l'avons déjà mentionné dans le chapitre précédent, le gain obtenu par rapport au coût temps de calcul/occupation de mémoire est très faible.

Conclusion Générale et Perspectives

L'objectif de cette thèse était d'analyser les biais de la modélisation de l'anisotropie du choc dans les codes de calcul de neutronique déterministes. Ce document résume les travaux qui ont été conduits pour développer et valider une nouvelle méthodologie dans la manière de traiter l'anisotropie multigroupe.

Dans un premier temps, la notion d'anisotropie dans la physique des réacteurs a été expliquée et mise en évidence. Un état de l'art du traitement de l'anisotropie du choc dans les codes de calcul des années 60 à aujourd'hui a aussi été présenté. Ce dernier a permis de faire un choix critique sur une méthode innovante et plus rigoureuse pour la modélisation de l'anisotropie du choc dans les codes déterministes pour la physique des réacteurs. Le formalisme des sections efficaces de transfert multigroupes constantes par morceaux - sur les sous-intervalles de $[-1, +1]$, plage de variation du cosinus de l'angle de déviation - a été sélectionné.

Cette représentation de la loi de choc nécessite cependant une modification des méthodes de résolution de l'équation du transport, notamment sur la discrétisation angulaire effectuée. Ceci a conduit à la mise en œuvre de la méthode des volumes finis en angle et de son implémentation au sein de l'environnement du solveur SNATCH. Tout comme les méthodes S_n , les volumes finis ont été utilisés précédemment dans le domaine du transfert de chaleur, et l'originalité de ce travail consiste en une application sur des cas concrets en physique des réacteurs (cellule REP hétérogène). Cette méthode a été validée et optimisée en temps de calcul pour être comparable en termes de performance aux solveurs SNATCH et MOC (APOLLO2). Une action de parallélisation a aussi été menée.

Les développements qui ont suivi ont concerné la génération des sections de transfert multigroupe constantes par morceaux. Afin de les obtenir, l'accès aux sections doublement différentielles multigroupes est un prérequis incontournable. Le code de *processing* NJOY est habituellement utilisé pour la mise en groupe des sections efficaces ponctuelles reconstruites à partir des évaluations. Cependant, ce dernier ne calcule pas explicitement les sections doublement différentielles multigroupes.

De ce fait, un aspect important de ce travail a été la mise en place d'une routine de génération de ces sections, GENXS. Cet outil permet d'accéder aisément aux sections différentielles multigroupes. Dans un cadre où l'on souhaite changer la représentation de l'anisotropie multigroupe, disposer de ces sections multigroupes est essentiel. Dans les travaux de la thèse, les moments de Legendre aussi bien que les sections continues par morceaux ont été ainsi calculés pour l'hydrogène et le fer 56. GENXS a été validée par comparaison des moments des sections élastiques de l'hydrogène et du fer 56, à ceux obtenus via NJOY. Des écarts de 0.5% ont été

observés. Ceci se traduit par un effet de l'ordre du pcm sur le k_∞ dans un calcul de cellule en réseau infini.

En ce qui concerne le solveur volumes finis en angle, un apport intéressant de ces travaux de thèse a été le développement d'une méthode capable de gérer une source de diffusion « mixte ». Cet aspect n'a pas été abordé dans les précédents travaux sur le traitement de l'anisotropie du choc dans les codes. Le solveur volumes finis en angle a été adapté afin de pouvoir traiter la source de diffusion sous une représentation mixte en moments de Legendre et avec le formalisme des sections discrètes. De ce fait, les isotopes qui contribuent le moins à la diffusion peuvent être traités en P_n et les isotopes diffusants d'intérêt avec les sections discrètes.

Les effets du changement de modèle d'anisotropie du choc sur des motifs représentatifs de la physique des réacteurs ont été étudiés. Trois cas d'étude ont été distingués : des cellules en réseau infini, des clusters 3×3 de cellules hétérogènes avec tube guide central, avec et sans absorbant et des calculs de traverse avec réflecteur.

Les calculs de cellules en réseau infini qui ont été réalisés avec les sections discrètes en volumes finis montrent qu'un développement P_3 de la section de transfert multigroupe est suffisant pour représenter l'anisotropie du choc par rapport aux biais résiduels imputables au reste de la modélisation. L'apport des sections discrètes est plus significatif sur une cellule MOX vidangée que sur une cellule UOX. L'analyse des taux de réactions a confirmé l'insuffisance de la correction de transport, P_0c , notamment pour traiter les absorbants B_4C .

Par ailleurs, les flux angulaires ont aussi été analysés. Ils sont peu anisotropes par rapport à la forte anisotropie de la section de transfert. Cette anisotropie est ainsi fortement lissée par l'opérateur de diffusion qui agrège les contributions de différentes énergies et direction. La source de diffusion se révèle en fait très régulière et peu anisotrope ; un développement P_3 suffit donc à bien la modéliser.

Les motifs plus hétérogènes, clusters 3×3 avec trou d'eau et absorbant, ont confirmé les divers résultats qui ont été obtenus pour les calculs de cellules en réseau infini. Une étude a aussi été menée sur une géométrie de type traverse cœur-réflecteur à une dimension. Ces motifs exacerbent l'anisotropie du flux, sans que ce soit suffisamment anisotrope toutefois pour que l'anisotropie de la source soit fortement impactée. Néanmoins, les sections discrètes améliorent les résultats des calculs, notamment sur la traverse cœur-réflecteur où les flux sont mieux calculés sur les premiers centimètres du réflecteur. Cependant, les conclusions sont similaires aux calculs de cellules en réseau infini : un développement polynomial P_3 ou P_5 de la section de transfert multigroupe est suffisant pour traiter les effets de l'anisotropie du choc en physique des réacteurs.

Si les sections discrètes permettent une représentation plus précise des sections de transfert multigroupes, elles conduisent à des calculs très lourds en termes de ressources informatiques - temps de calcul extrêmement longs et occupation importante de l'espace mémoire. De ce fait, la méthode proposée n'est pas applicable dans un domaine industriel mais peut constituer une référence déterministe pour quantifier les biais qui sont dus à la loi de choc. Dans ce cadre,

les travaux qui ont eu lieu durant cette thèse posent la question de l'impact du formalisme d'autoprotection sur les biais résiduels dans les schémas de calcul ainsi que la méthode de résolution spatiale.

Ces travaux ont démontré que les sections discrètes ne sont pas viables dans le domaine de la physique des réacteurs pour des réacteurs à neutrons thermiques. Dans les perspectives de cette thèse, il serait intéressant de quantifier les effets d'anisotropie sur des cas représentatifs des réacteurs à neutrons rapides (RNR) en utilisant les sections discrètes comme la méthode étalon. En effet, jusqu'à présent, les calculs de réseau en géométries hétérogènes pour les RNR sont effectués en $P1$ avec le code ECCO et le maillage énergétique très fin à 1968 groupes. Moyennant les développements nécessaires, le traitement de l'anisotropie à l'ordre $P3$ ou $P5$ permettrait de lever le doute sur la convergence par rapport à l'anisotropie du choc.

Par ailleurs, concernant l'aspect de la méthode de résolution de l'équation du transport, d'autres voies d'amélioration peuvent encore être explorées sur la méthode des volumes finis en angle. Ces pistes d'améliorations ont été identifiées et sont listées ci-dessous :

- le solveur volumes finis pourrait être étendu à des géométries en trois dimensions,
- une méthode d'accélération telle que l'accélération synthétique pourrait être implémentée pour améliorer les temps de calcul,
- la méthode des volumes finis pourrait aussi être implémentée avec le MOC. On pourrait traiter le traçage des trajectoires selon la direction moyenne par pavé de la sphère unité avec la correction de la section totale par α_n (*cf* § 5.2.1). Quant au terme de diffusion, la méthode des volumes finis permettrait d'envisager des transferts moyens d'un pavé à un autre. On pourrait ainsi traiter des géométries non structurées.
- l'approche volumes finis permet d'envisager plus facilement que la méthode S_n standard le raffinement de maillage angulaire en fonction du groupe d'énergie et l'estimation d'erreur, qui apparaissent en effet plus naturellement (*cf* Annexe H). Dans cette logique, la représentation volumes finis du flux angulaire pourrait être généralisée en éléments finis discontinus.

Annexes

Convergence du calcul en fonction du maillage spatial

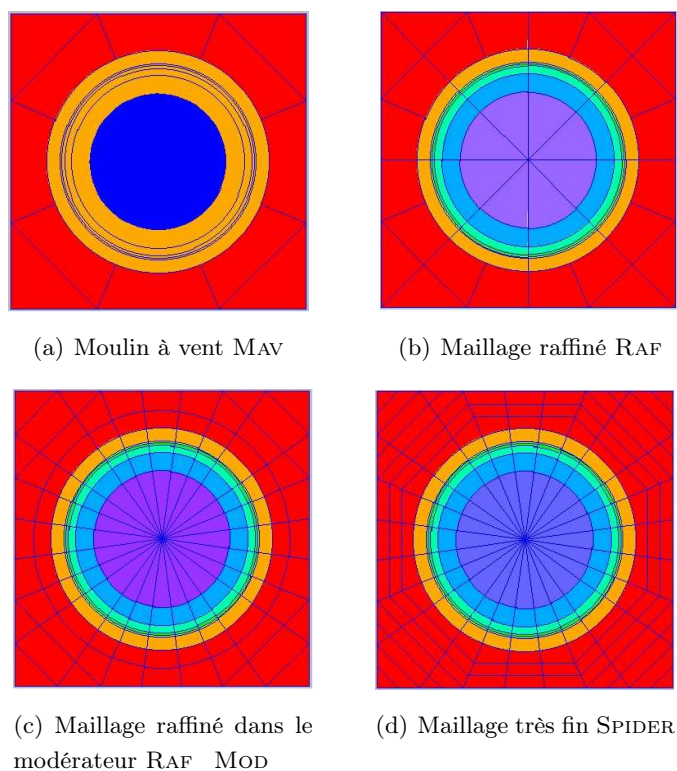


FIG. A.1 – Maillages spatiaux de la cellule

Nous nous intéressons dans cette partie à l'effet du maillage spatial sur la convergence des calculs. Les divers maillages utilisés sont donnés dans la Fig. A.1 et leurs principales différences en termes de nombres de mailles de combustibles et de modérateurs dans le tableau Tab. A.1.

Type de maillage	Nombre de mailles	
	Combustible	Modérateur
MAV	4	12
RAF	32	24
RAF_MOD	96	64
SPIDER	96	104

TAB. A.1 – Nombre de mailles de combustible et de modérateur dans les divers maillages

Les calculs sont effectués à 281 groupes d'énergie (SHEM) avec une quadrature angulaire très fine ($N_\varphi = 60$, $N_\mu = 12$) et aux ordres $P3$ et $P0c$ pour du combustible UOX et MOX à 293 K.

UOX 293 K	T4 Cyl Ref	U (1 σ)	P3				P0c			
			MAV	RAF	RAF	MOD	SPIDER	MAV	RAF	RAF
χ	1.00128	31	4	5	5	5	4	4	4	4
ϵ_{even}	1.03182	22	-14	-16	-13	-11	-34	-34	-30	-27
ϵ_{odd}	1.08781	34	10	10	20	26	-5	-5	7	12
p	0.74708	17	-134	-137	-141	-151	-14	-14	-16	-24
f	0.82357	14	116	120	62	52	50	50	-32	-45
η	1.88558	20	-3	-2	-3	-3	-2	-2	-2	-2
k_∞	1.30386	4	-18	-21	-70	-82	-2	-2	-69	-82

MOX 293K	T4 Cyl Ref	U (1 σ)	P3				P0c			
			MAV	RAF	RAF	MOD	SPIDER	MAV	RAF	RAF
χ	1.00158	36	2	2	2	2	1	1	1	1
ϵ_{even}	1.04713	29	-17	-21	-18	-15	-52	-52	-49	-46
ϵ_{odd}	1.19996	46	103	104	121	132	16	16	28	37
p	0.59827	18	-242	-256	-273	-291	75	75	75	64
f	0.92175	20	76	91	56	52	-39	-39	-94	-102
η	1.67113	21	-8	-10	-16	-19	27	27	26	25
k_∞	1.15981	4	-83	-88	-127	-137	29	29	-11	-19

TAB. A.2 – UOX : Effets du maillage spatial sur les six facteurs

Pour le cas UOX, dans le Tab. A.2, le facteur p n'est pas affecté de manière significative par le raffinement du maillage contrairement au facteur d'utilisation thermique qui présente un biais dû au maillage pouvant aller jusqu'à 90 pcm en $P0c$. En $P3$, le raffinement du maillage dans le modérateur assure un meilleur calcul du taux d'absorption thermique dans celui-ci et donc diminue la surestimation de f enlevant ainsi une partie des compensations entre ce dernier et p qui se reportaient sur le k_∞ .

Pour le MOX, dans le Tab. A.2, la même observation est faite sur le calcul du facteur f . Cependant, dans ce cas-ci, le facteur antitrappe p est plus sensible à l'effet du maillage spatial. Contrairement à l'UOX, raffiner le combustible en $P3$ accentue la sous-estimation de p (ce qui n'est pas le cas en $P0c$) tandis que raffiner le modérateur augmente la surestimation de ϵ_{odd} et diminue celle de f , qui peut se traduire par une augmentation du taux d'absorption dans le modérateur.

Conclusion : L'effet du maillage spatial peut s'avérer très significatif, surtout pour le calcul du flux dans le modérateur. Dans les études qui ont été menées dans ce document, on utilisera donc un maillage spatial très raffiné qui assure une bonne convergence spatiale du calcul, le maillage SPIDER.

Bilan phénoménologique : Formule des six facteurs

Dans la thèse de N. Hfaiedh [48], le facteur de multiplication en milieu infini k_∞ est décomposé selon un bilan phénoménologique :

$$k_\infty = \chi \epsilon_{even} \epsilon_{odd} p f \eta$$

où

- χ : le facteur (n, 2n)

$$\chi = \frac{A_1 + A_2}{S}$$

- ϵ_{even} : le facteur de fission rapide des noyaux pairs

$$\epsilon_{even} = \frac{P_1^{even} + P_1^{odd} + P_2}{P_1^{even} + P_2} \cdot \frac{A_1 + A_2 - F_1^{even}}{A_1 + A_2}$$

- ϵ_{odd} : le facteur de fission rapide des noyaux impairs

$$\epsilon_{odd} = \frac{P_1^{odd} + P_2}{P_2} \cdot \frac{A_1 + A_2 - (F_1^{even} + F_1^{odd})}{A_1 + A_2 - F_1^{even}}$$

- p : le facteur antitrappe

$$p = \frac{A_2}{A_1 + A_2 - (F_1^{even} + F_1^{odd})}$$

- f : le facteur d'utilisation thermique

$$f = \frac{A_2^{fuel}}{A_2}$$

- η : le facteur de reproduction

$$\eta = \frac{P_2}{A_2^{fuel}}$$

Ces facteurs sont calculés à partir des taux d'absorption (A), de fission (F) et de production (P) et la source (S). Les taux calculés sont condensés à deux groupes avec une coupure thermique à 0,625 eV (les indices 1 et 2 désignant les groupes rapide et thermique respectivement).

Développement de l'équation du transport sous la forme des ordonnées discrètes

La méthode des ordonnées discrètes ou S_n a été utilisée la première fois dans le domaine des transferts radiatifs et a été mise au point formellement par S. Chandrasekar [23], puis reprise par B. Carlson [24] dans le cadre de la physique des réacteurs pour le calcul de transport des particules.

L'équation du transport s'écrit sous sa forme stationnaire comme suit :

$$\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \phi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) + \Sigma_t(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) \phi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) = \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d^2\boldsymbol{\Omega}' \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}) \phi(\mathbf{r}, E', \boldsymbol{\Omega}') + q(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) \quad (\text{C.1})$$

Si les milieux sont isotropes, alors

$$\begin{aligned} \Sigma_t(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) &= \Sigma_t(\mathbf{r}, E) \\ \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}) &= \frac{1}{2\pi} \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, \boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega}) \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

Avec la mise en groupe, l'équation (C.1) s'écrit :

$$\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \phi^g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) + \Sigma_t^g(\mathbf{r}) \phi^g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \frac{1}{2\pi} \sum_{g=0}^G \int_{4\pi} d^2\boldsymbol{\Omega}' \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega}) \phi^{g'}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}') + q^g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) \quad (\text{C.3})$$

La forme S_n de cette équation est obtenue en considérant une direction n donnée d'un ensemble de N directions discrètes choisies au préalable via une quadrature sur la sphère unité.

$$\boldsymbol{\Omega}_n \cdot \nabla \phi_n^g(\mathbf{r}) + \Sigma_t^g(\mathbf{r}) \phi_n^g(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi} \sum_{g=0}^G \int_{4\pi} d^2\boldsymbol{\Omega}' \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega}_n) \phi^{g'}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}') + q_n^g(\mathbf{r}) \quad (\text{C.4})$$

où $\phi_n^g(\mathbf{r}) = \phi^g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}_n)$ et $q_n^g(\mathbf{r}) = q^g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}_n)$. L'étape suivante consiste à modéliser le plus fidèlement possible la section doublement différentielle $\Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega})$. Habituellement, la section multigroupe de transfert est développée sur une base de polynômes de Legendre comme ceci :

$$\Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega}) \approx \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \Sigma_{sl}^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}) P_l(\boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega}) \quad (\text{C.5})$$

où

$$\Sigma_{sl}^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}) = \int_{-1}^{+1} d\tilde{\mu} \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}, \tilde{\mu}) P_l(\tilde{\mu}) \quad (\text{C.6})$$

NB : Par simplication $\tilde{\mu} = \boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega}$. Maintenant, (C.5) est injectée dans (C.4) :

$$\boldsymbol{\Omega}_n \cdot \nabla \phi_n^g(\mathbf{r}) + \Sigma_t^g(\mathbf{r}) \phi_n^g(\mathbf{r}) = \sum_{g=0}^G \int_{4\pi} d^2 \boldsymbol{\Omega}' \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \Sigma_{sl}^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}) P_l(\boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega}_n) \phi^{g'}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}') + q_n^g(\mathbf{r}) \quad (\text{C.7})$$

En utilisant le théorème d'additivité des harmoniques sphériques réelles $R_l^m(\boldsymbol{\Omega})$:

$$P_l(\boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega}_n) = \sum_{m=-l}^{+l} R_l^m(\boldsymbol{\Omega}') R_l^m(\boldsymbol{\Omega}_n) \quad (\text{C.8})$$

et en reportant (C.8) dans (C.7)

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Omega}_n \cdot \nabla \phi_n^g(\mathbf{r}) + \Sigma_t^g(\mathbf{r}) \phi_n^g(\mathbf{r}) = \\ \sum_{g=0}^G \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \Sigma_{sl}^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}) \sum_{m=-l}^{+l} R_l^m(\boldsymbol{\Omega}_n) \int_{4\pi} d^2 \boldsymbol{\Omega}' R_l^m(\boldsymbol{\Omega}') \phi^{g'}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}') + q_n^g(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

Dans (C.9), il reste à évaluer les intégrales $\int_{4\pi} d^2 \boldsymbol{\Omega}' R_l^m(\boldsymbol{\Omega}') \phi^{g'}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}')$, projections des flux angulaires $\phi^{g'}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}')$ sur les harmoniques sphériques et appelées moments angulaires du flux $\phi_{lm}^{g'}(\mathbf{r})$. Pour évaluer ces intégrales, une quadrature numérique est utilisée :

$$\phi_{lm}^{g'}(\mathbf{r}) = \int_{4\pi} d^2 \boldsymbol{\Omega}' R_l^m(\boldsymbol{\Omega}') \phi^{g'}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}') \approx \sum_{n'=1}^N \omega_{n'} R_l^m(\boldsymbol{\Omega}_{n'}) \phi_{n'}^{g'}(\mathbf{r}) \quad (\text{C.10})$$

NB : comme précédemment $\phi_{n'}^{g'}(\mathbf{r}) = \phi^{g'}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}_{n'})$ et les $\omega_{n'}$ sont les poids associés à la quadrature. Finalement, avec la méthode des ordonnées discrètes, l'équation de Boltzmann est transformée en N équations sur les flux angulaires $\phi_n^g(\mathbf{r})$ couplées via les moments angulaires du flux.

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Omega}_n \cdot \nabla \phi_n^g(\mathbf{r}) + \Sigma_t^g(\mathbf{r}) \phi_n^g(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \sum_{m=-l}^{+l} R_l^m(\boldsymbol{\Omega}_n) \sum_{g=0}^G \Sigma_{sl}^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}) \phi_{lm}^{g'}(\mathbf{r}) + q_n^g(\mathbf{r}), \quad n = 1, \dots, N \\ \phi_{lm}^{g'}(\mathbf{r}) = \sum_{n'=1}^N \omega_{n'} R_l^m(\boldsymbol{\Omega}_{n'}) \phi_{n'}^{g'}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (\text{C.11})$$

Effets de quadrature sur les calculs cellules

Cette partie sera axée sur deux thématiques : la correction de transport dans un premier temps et ensuite la convergence angulaire des cas cellules en milieu infini avec le solveur MOC en comparant le $P0c$ et des ordres de Legendre plus élevés.

D.1 Correction de transport

Dans le cadre des calculs pour la physique des réacteurs, l'équation du transport est souvent résolue en supposant que les sources de diffusion sont isotropes. Cette hypothèse est très forte, mais permet de résoudre la forme intégrale de l'équation du transport (méthode des probabilités de collision) et de gagner en temps de calcul dans les méthodes aux ordonnées discrètes. Afin de compenser cette approximation, on ajoute une composante vers l'avant au développement en polynômes de Legendre de la section différentielle (D.1), composante qui se traduit sous la forme d'une distribution de Dirac.

$$\Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, \tilde{\mu}) \approx \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \tilde{\Sigma}_{sl}(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) P_l(\tilde{\mu}) + \Delta\Sigma_{tr}(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) \delta(\tilde{\mu} - 1) \quad (\text{D.1})$$

où $\tilde{\Sigma}_{sl}(\mathbf{r}, E' \rightarrow E)$ est un coefficient de Legendre modifié et $\Delta\Sigma_{tr}(\mathbf{r}, E' \rightarrow E)$ est le facteur correctif que multiplie la distribution de Dirac. Ces coefficients sont calculés de sorte que le développement de Legendre de la section de transfert (*cf* (C.5)) soit conservé pour $0 \leq l \leq L+1$:

$$\tilde{\Sigma}_{sl}(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) + \Delta\Sigma_{tr}(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) = \Sigma_{sl}(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) \text{ pour } 0 \leq l \leq L$$

et

$$\Delta\Sigma_{tr}(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) = \Sigma_{s,L+1}(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) \quad (\text{D.2})$$

Cette correction de transport est habituellement appliquée à l'ordre 0 du développement de Legendre ; les moments d'ordre $P0$ sont corrigés avec les moments $P1$ en posant $L = 0$ dans (D.1). L'expression résultante est ensuite injectée dans l'équation du transport :

$$\mathbf{\Omega} \cdot \nabla \phi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) + \Sigma_t(\mathbf{r}, E) \phi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) - \int_0^\infty dE' \Sigma_{s1}(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) \phi(\mathbf{r}, E', \mathbf{\Omega}) = \tilde{Q}(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) \quad (\text{D.3})$$

où $\tilde{Q}(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty [\Sigma_{s0}(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) - \Sigma_{s1}(\mathbf{r}, E' \rightarrow E)] \phi(\mathbf{r}, E', \boldsymbol{\Omega}) + q(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega})$

En utilisant une approximation de micro-réversibilité :

$$\int_0^\infty \tilde{\Sigma}_{s1}(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) \phi(\mathbf{r}, E', \boldsymbol{\Omega}) = \int_0^\infty \tilde{\Sigma}_{s1}(\mathbf{r}, E \rightarrow E') \phi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) \quad (\text{D.4})$$

l'équation (D.3) est simplifiée et les expressions pour la section totale corrigée $\tilde{\Sigma}_t(\mathbf{r}, E)$ et la section de transfert corrigée $\tilde{\Sigma}_{s0}(\mathbf{r}, E' \rightarrow E)$ sont respectivement :

$$\tilde{\Sigma}_t(\mathbf{r}, E) = \Sigma_t(\mathbf{r}, E) - \int_0^\infty dE' \Sigma_{s1}(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) \quad (\text{D.5})$$

et

$$\tilde{\Sigma}_{s0}(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) = \Sigma_{s0}(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) - \delta(E' - E) \int_0^\infty dE' \Sigma_{s1}(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) \quad (\text{D.6})$$

D.2 Effets de quadrature sur les calculs MOC en *P3* et *P0c*

Dans cette section, on s'intéresse aux effets de la quadrature angulaire sur le calcul, notamment sur les ordres d'anisotropie du choc. Les calculs sont menés avec le solveur MOC d'APOLLO2 avec le maillage spatial SPIDER décrit en Annexe A. La convergence spatiale de ce dernier a été vérifiée.

Les paramètres angulaires du MOC ainsi que l'ordre d'anisotropie sont variés pour les quatre cas d'étude présentés en Chapitre 7. L'espacement entre les trajectoires est de 0.0025 cm.

Les figures ci-après Fig. D.1 à Fig. D.6 donnent les écarts de réactivité des calculs MOC par rapport au calcul référence TRIPOLI4. Cette étude sur les quadratures a aussi été menée en volumes finis avec des quadratures de type produit (FV $N_\varphi N_\mu$ et des développements *P3* comme le montre Tab. D.5).

Sur ces figures, il en ressort que la convergence angulaire est atteinte plus rapidement en *P3* qu'en *P0c*.

Tab. D.1 à Tab. D.4 présentent les écarts des calculs MOC à diverses quadratures et différents ordres d'anisotropie, dont la correction de transport *P0c*, par rapport au calcul TRIPOLI4 sur les six facteurs. Tab. D.6 et Tab. D.7 illustrent les écarts sur les taux d'absorption sur les isotopes majeurs de l'uranium et du plutonium respectivement. Les taux de réactions sont convergés avec un écart type de moins de 0.001% sur tous les groupes. Ces taux sont présentés en pcm de la production totale et sont condensés sur le macromaillage à 13 groupes explicité dans le Chapitre 7.

Des Tab. D.1 à Tab. D.4, il est clair que le développement à l'ordre *P3* est quasiment convergé en ce qui concerne la convergence par rapport à l'ordre du développement polynômial de la section de transfert. Le calcul en *P5* n'offre pas d'apport significatif.

Pour revenir proprement à l'effet de la quadrature, l'écart entre les quadratures ($N_\phi=60$, $N_\mu=12$) et ($N_\phi=36$, $N_\mu=12$) n'est pas significatif (cf Tab. D.1 à Tab. D.4). Cette dernière est donc convergée du point de vue angulaire. D'autre part, sur les Tab. D.1 au Tab. D.4, lors du passage de ($N_\phi=36$, $N_\mu=12$) à ($N_\phi=24$, $N_\mu=12$), la convergence pour le développement Pn , $n \geq 3$ est faiblement impactée. Cependant sur le $P0c$, les écarts deviennent plus importants et changent même de signe sur les cas moxés. Il est clair que le $P0c$ est très sensible à la quadrature angulaire.

En ce qui concerne l'UOX, à la convergence, les développements $P3$ et $P0c$ présentent des écarts très voisins sur le k_∞ (≈ 10 pcm) et sur les six facteurs par rapport au calcul de référence TRIPOLI4 (cf Tab. D.1). Cependant, l'analyse des taux d'absorption (cf Tab. D.6, en rouge) montre que le $P0c$ sous-estime plus fortement les valeurs dans le groupe 10 (qui contient la résonance à 6.67 eV de ^{238}U).

Pour les combustibles moxés, à la convergence angulaire, le $P0c$ présente des écarts plus faibles sur le k_∞ par rapport à TRIPOLI4 (cf Tab. D.2 à Tab. D.4) que l'ordre $P3$ ou $P5$. Ceci provient du fait que le $P0c$ surestime p et sous-estime f alors que le $P3$ se comporte de la manière inverse. Ceci se traduit par des absorptions plus élevées dans le domaine thermique pour le $P0c$. Ce phénomène est accentué en diminuant le rapport de modération :

- par augmentation de la température du modérateur de 293 K à 573 K, de MOX 293 K à MOX 583 K,
- en vidangeant la cellule, de MOX 873 K à V40 873K.

Le $P0c$ est cependant plus sensible à la quadrature angulaire car en la dégradant de $N_\phi = 60$ et $N_\mu = 12$ à $N_\phi = 24$ et $N_\mu = 12$, sur le cas de la cellule vidangée (cf Tab. D.4), V40, le k_∞ évolue de 30 pcm pour le $P3$ (un effet en relatif de 11%) mais de 77 pcm en $P0c$ (soit un effet relatif de 260%), écart qui se traduit aussi sur le facteur antitrappe p (150%).

Sur les taux d'absorption de ^{238}U (cf Tab. D.6 en rouge), le $P0c$ sous-estime le taux d'absorption dans la résonance à 6.67 eV pour le MOX à froid, et la sur-estime sur la cellule vidangée. Quant au $P3$, les écarts sur les deux cas sont faiblement positifs et restent très proches en absolu.

Sur les isotopes du plutonium dans Tab. D.7, la même tendance est observée. Le $P0c$ sous-estime systématiquement les taux d'absorption dans la résonance à 1 eV du ^{240}Pu dans le MOX 293 K et le V40 (en bleu, groupe 11).

Dans le groupe thermique 13, le $P3$ sous-estime de manière significative l'absorption sur le ^{239}Pu (en vert) alors que le $P0c$ démontre une surestimation. Ceci a été expliqué précédemment dans le Chapitre 8. En effet, le $P0c$ en sous-estimant les absorptions dans les grandes résonances dispose de plus de neutrons dans le domaine thermique qui seront susceptibles d'être absorbés.

Conclusion : Le $P0c$ étant très sensible à la quadrature angulaire, il faut être prudent quant à son utilisation dans les calculs de réseaux de REL. De ce fait, nous préconisons l'utilisation

du développement à l'ordre $P3$ qui est plus robuste par rapport à la convergence angulaire.

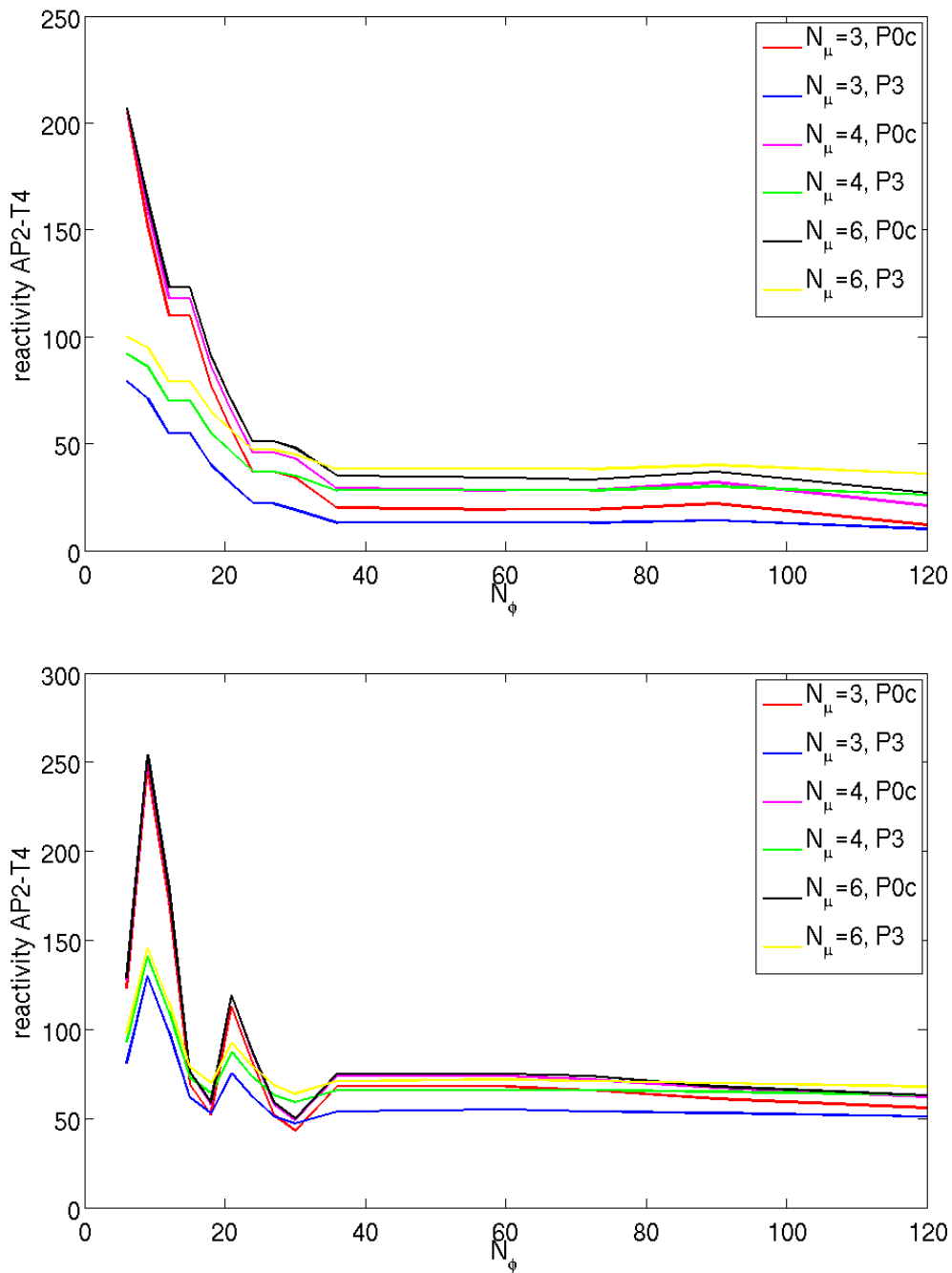


FIG. D.1 – Ecart de réactivité AP2-T4 pour du combustible UOX vs nombre d'angles azimutaux, N_ϕ , N_μ valant 3, 4, et 6 - combustible carré en haut, cylindrique en bas.

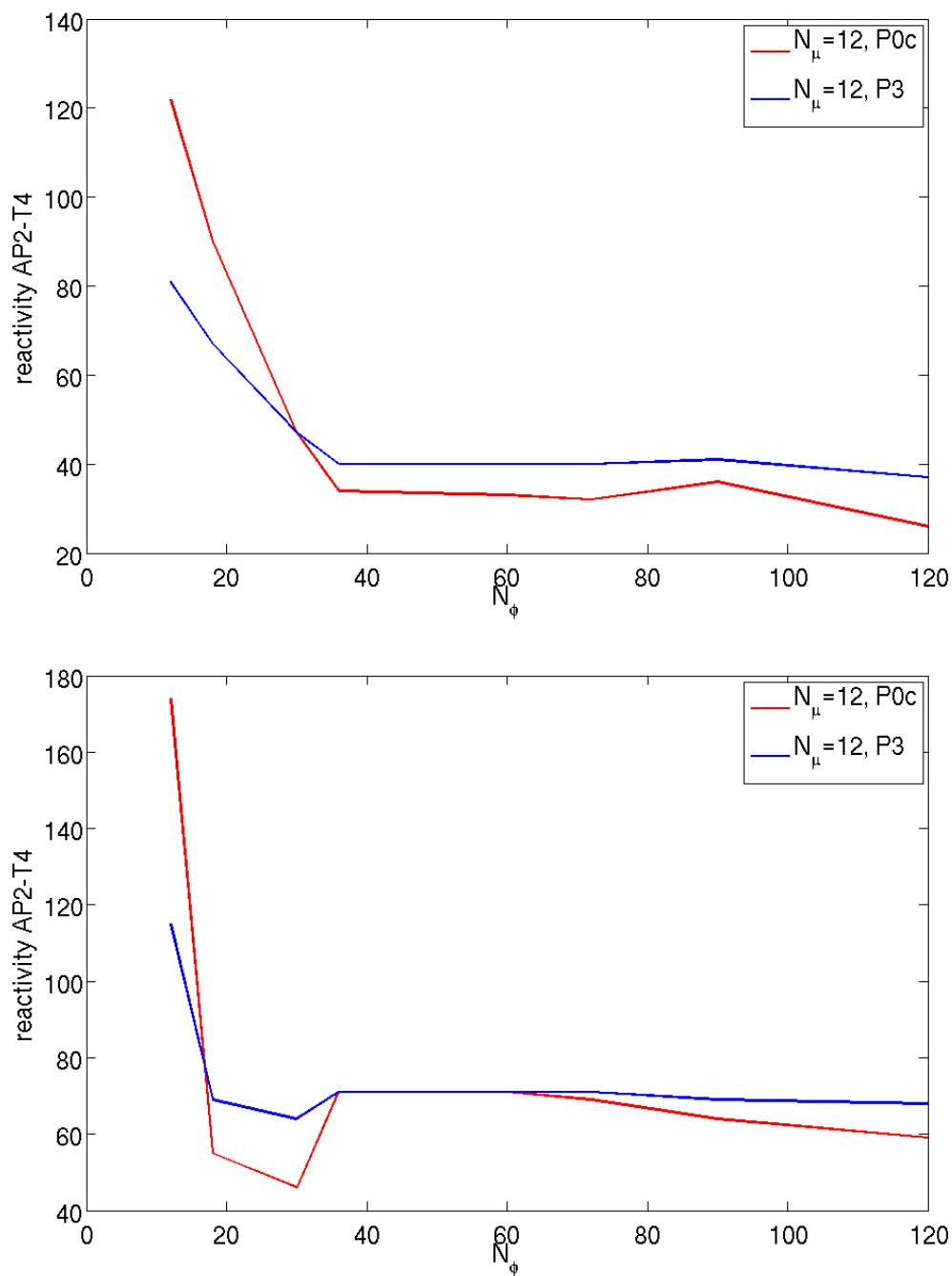


FIG. D.2 – Ecart de réactivité AP2-T4 pour du combustible UOX vs nombre d'angles azimutaux, N_ϕ , N_μ valant 12 - combustible carré en haut, cylindrique en bas.

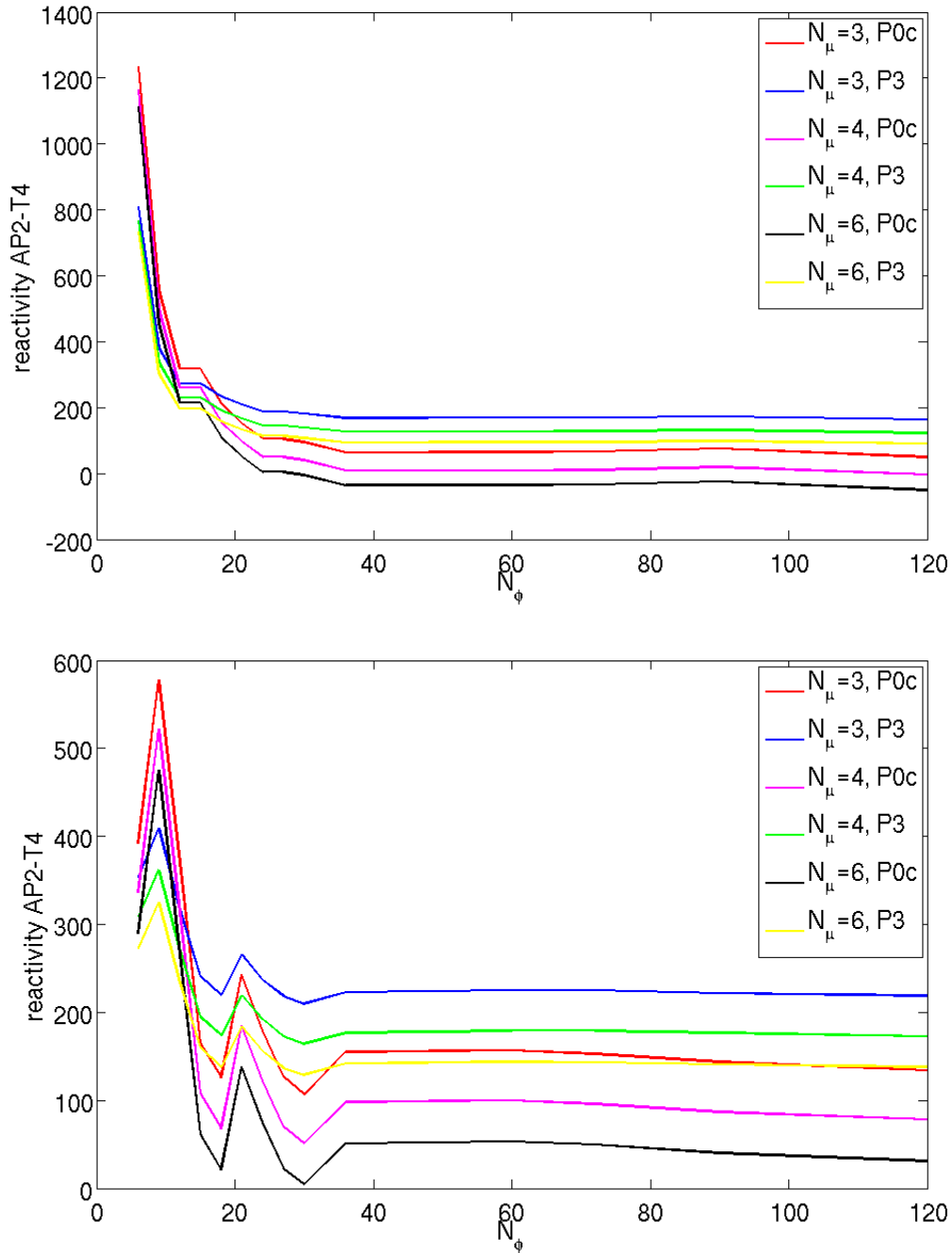


FIG. D.3 – Ecart de réactivité AP2-T4 pour du combustible MOX vs nombre d'angles azimutaux, N_ϕ , N_μ valant 3, 4, et 6 - combustible carré en haut, cylindrique en bas.

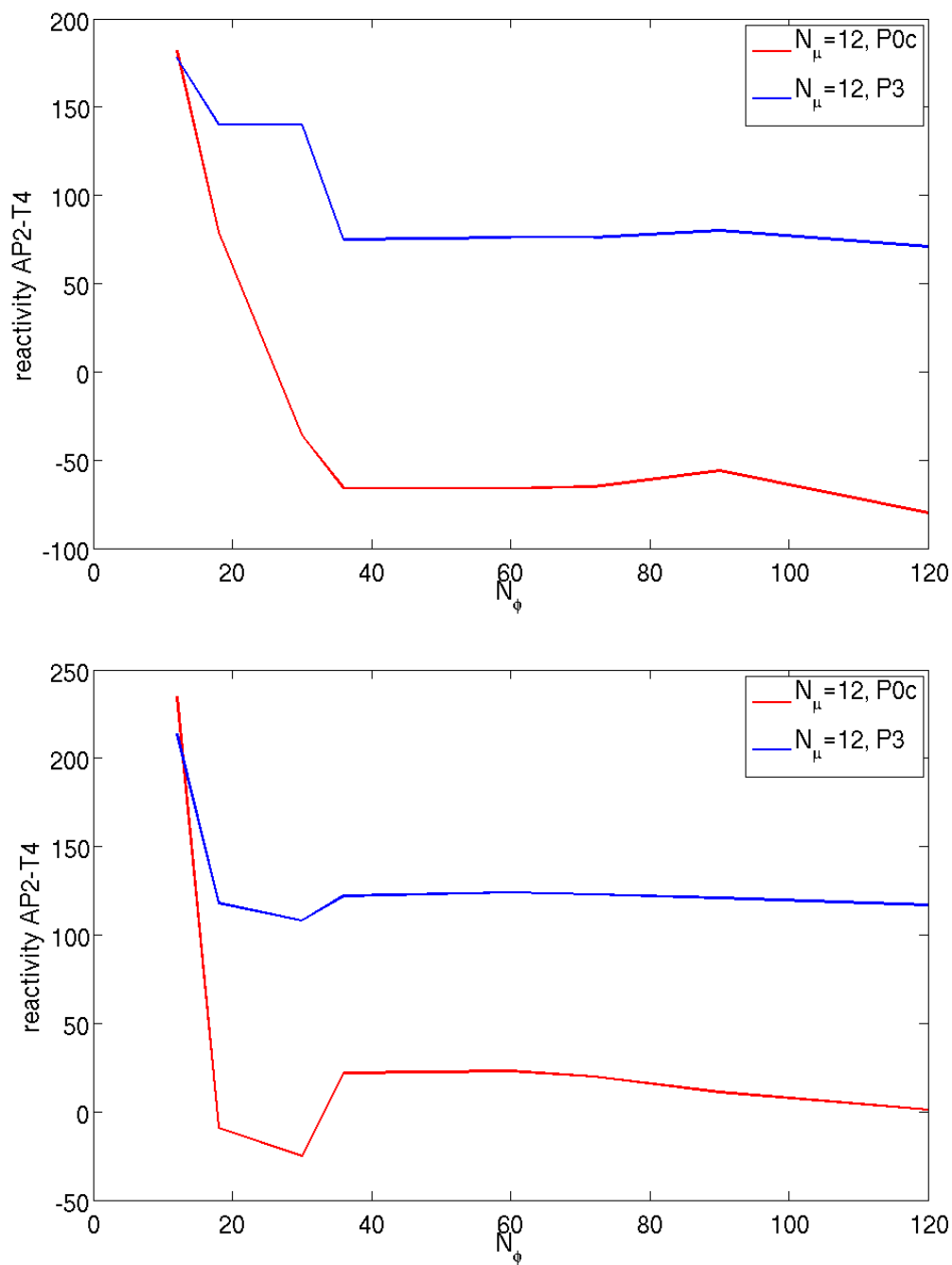


FIG. D.4 – Ecart de réactivité AP2-T4 pour du combustible MOX vs nombre d'angles azimutaux, N_ϕ , N_μ valant 12 - combustible carré en haut, cylindrique en bas.

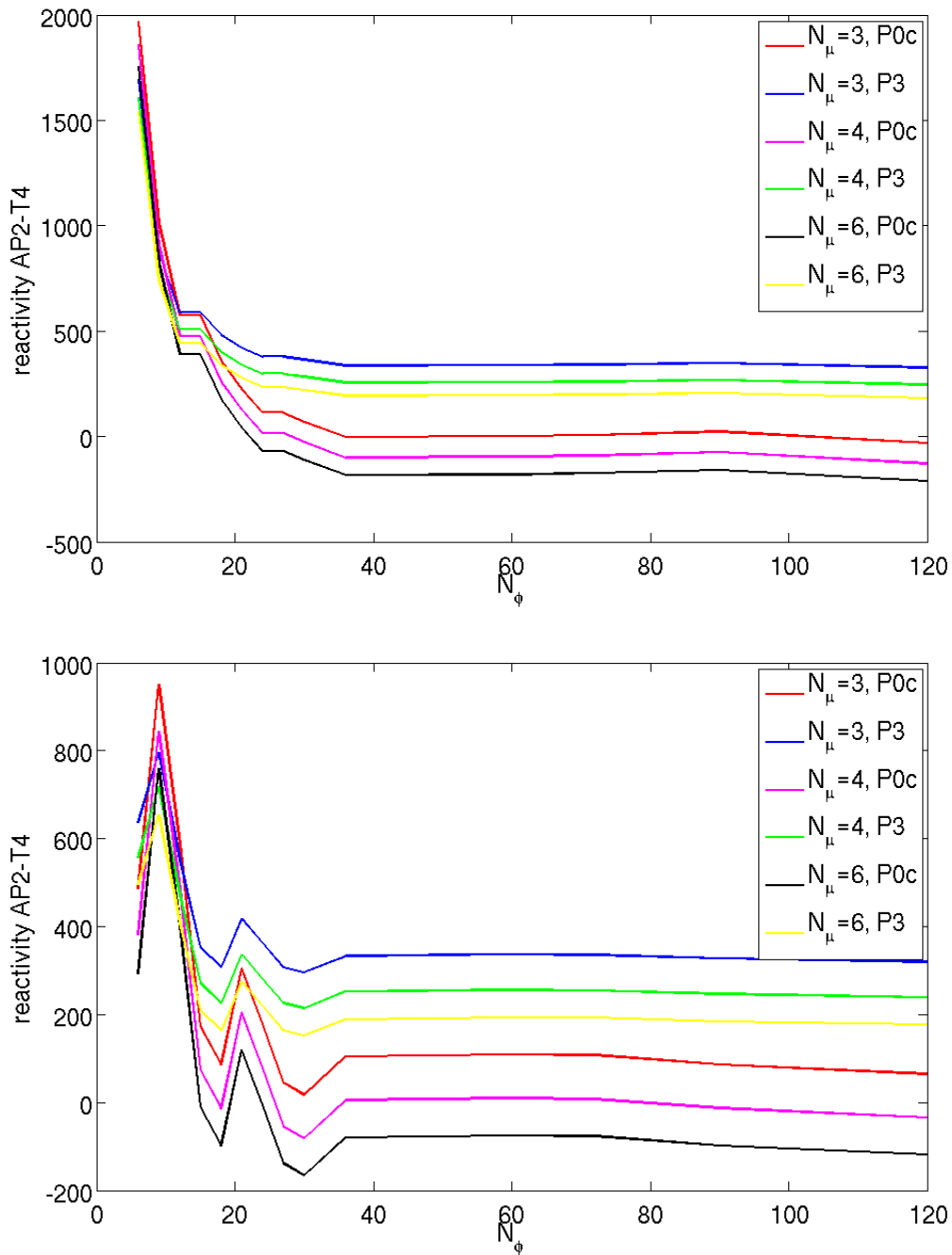


FIG. D.5 – Ecart de réactivité AP2-T4 pour du combustible MOX V40 vs nombre d'angles azimuthaux, N_ϕ , N_μ valant 3, 4, et 6 - combustible carré en haut, cylindrique en bas.

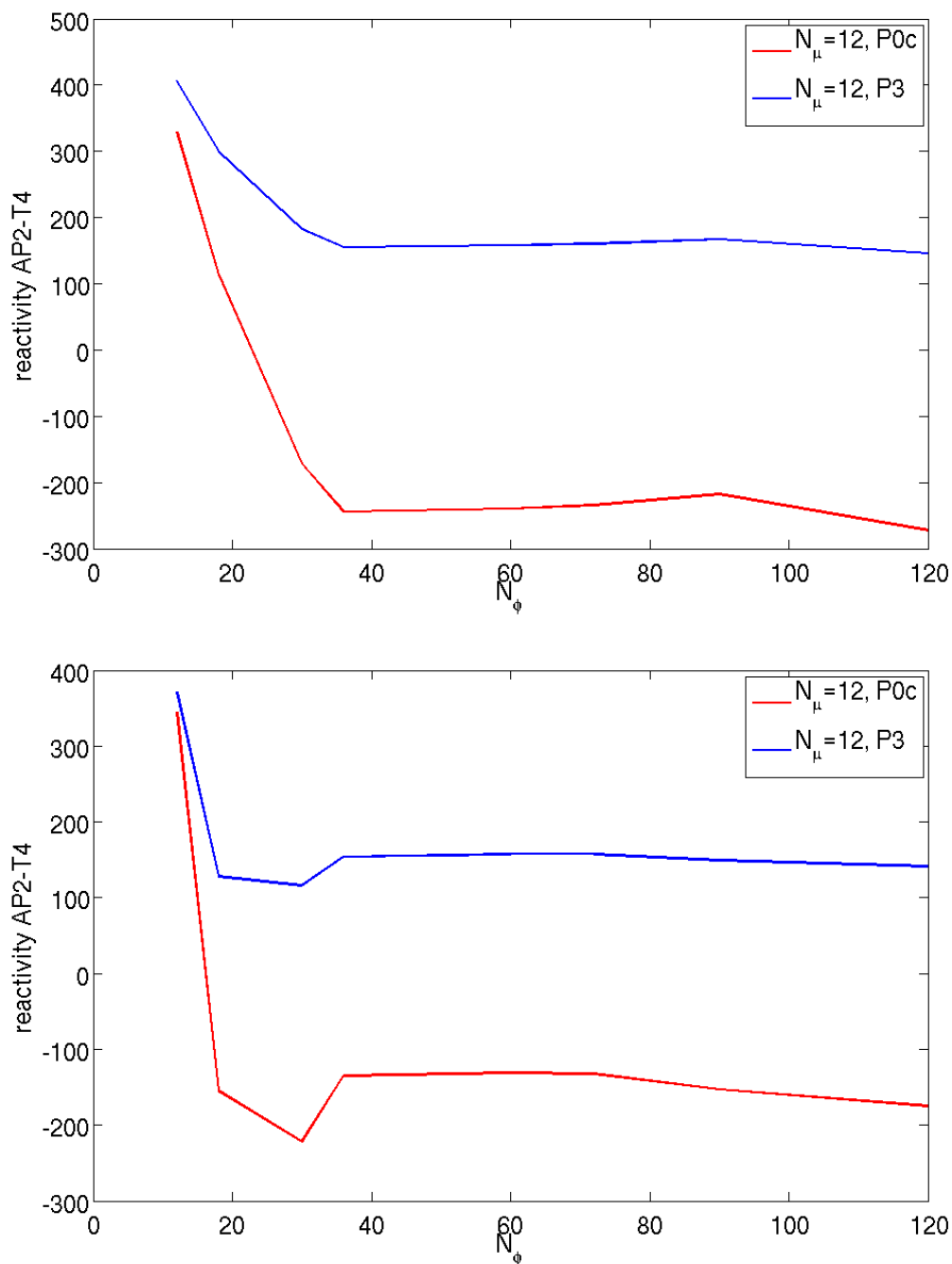


FIG. D.6 – Ecart de réactivité AP2-T4 pour du combustible MOX V40 vs nombre d'angles azimuthaux, N_ϕ , N_μ valant 12 - combustible carré en haut, cylindrique en bas.

MOC 60 12	T4 punctual	U (1σ)	P0	P1	P3	P5	P0c
χ	1.00128	31	5	5	5	5	4
ϵ_{even}	1.03182	22	-1	-10	-11	-11	-27
ϵ_{odd}	1.08781	34	35	44	26	26	12
p	0.74708	17	-95	-211	-151	-151	-24
f	0.82357	14	-141	61	52	56	-45
η	1.88558	20	-1	-4	-3	-3	-2
k_{∞}	1.30385	4	-199	-114	-82	-77	-81
<hr/>							
MOC 36 12	T4 punctual	U (1σ)	P0	P1	P3	P5	P0c
χ	1.00128	31	5	5	5	5	4
ϵ_{even}	1.03182	22	-2	-11	-12	-12	-31
ϵ_{odd}	1.08781	34	35	44	26	26	11
p	0.74708	17	-95	-211	-151	-151	-21
f	0.82357	14	-140	62	53	57	-44
η	1.88558	20	-2	-4	-3	-3	-2
k_{∞}	1.30385	4	-199	-114	-82	-78	-83
<hr/>							
MOC 24 12	T4 punctual	U (1σ)	P0	P1	P3	P5	P0c
χ	1.00128	31	5	5	5	5	4
ϵ_{even}	1.03182	22	-8	-17	-19	-19	-35
ϵ_{odd}	1.08781	34	35	44	26	26	13
p	0.74708	17	-98	-214	-154	-154	-35
f	0.82357	14	-140	63	53	58	-43
η	1.88558	20	-2	-4	-3	-3	-2
k_{∞}	1.30385	4	-209	-124	-92	-88	-98

TAB. D.1 – Effets des quadratures sur le calcul de la cellule UOX cylindrique.

MOC 60 12	TRIPOLI4	U (1σ)	P0	P1	P3	P5	P0c
χ	1.00158	36	1	1	1	1	0
ϵ_{even}	1.04713	29	-10	-7	-15	-15	-46
ϵ_{odd}	1.19996	46	88	220	130	131	35
p	0.59827	18	-79	-505	-285	-284	70
f	0.92175	20	-176	87	52	55	-102
η	1.67113	21	32	-46	-18	-19	26
k_{∞}	1.15981	4	-147	-251	-137	-132	-18
MOC 36 12	T4 punctual	U (1σ)	P0	P1	P3	P5	P0c
χ	1.00158	36	1	1	1	1	0
ϵ_{even}	1.04713	29	-11	-8	-16	-16	-52
ϵ_{odd}	1.19996	46	88	220	130	131	32
p	0.59827	18	-78	-504	-284	-283	77
f	0.92175	20	-176	88	52	56	-102
η	1.67113	21	32	-46	-18	-19	26
k_{∞}	1.15981	4	-147	-252	-137	-132	-21
MOC 24 12	T4 punctual	U (1σ)	P0	P1	P3	P5	P0c
χ	1.00158	36	1	1	1	1	0
ϵ_{even}	1.04713	29	-18	-15	-23	-23	-53
ϵ_{odd}	1.19996	46	89	221	131	132	42
p	0.59827	18	-89	-515	-295	-293	39
f	0.92175	20	-175	89	53	57	-99
η	1.67113	21	31	-46	-19	-19	25
k_{∞}	1.15981	4	-163	-268	-154	-149	-48

TAB. D.2 – Effets des quadratures sur le calcul de la cellule MOX cylindrique à froid.

MOC 60 12	TRIPOLI4	U (1σ)	P0	P1	P3	P5	P0c
χ	1.00183	35	0	0	0	0	0
ϵ_{even}	1.06418	30	-16	-6	-16	-16	-64
ϵ_{odd}	1.31374	52	111	295	175	178	-25
p	0.49677	16	-221	-641	-399	-401	146
f	0.95153	22	-82	43	21	23	-74
η	1.64320	23	34	-17	5	4	41
k_{∞}	1.08794	4	-178	-329	-217	-215	20
MOC 36 12	T4 punctual	U (1σ)	P0	P1	P3	P5	P0c
χ	1.00183	35	0	0	0	0	-1
ϵ_{even}	1.06418	30	-18	-7	-18	-17	-69
ϵ_{odd}	1.31374	52	108	292	172	175	-36
p	0.49677	16	-214	-634	-391	-393	168
f	0.95153	22	-83	43	20	23	-75
η	1.64320	23	34	-16	5	5	42
k_{∞}	1.08794	4	-176	-326	-214	-212	25
MOC 24 12	T4 punctual	U (1σ)	P0	P1	P3	P5	P0c
χ	1.00183	35	0	0	0	0	0
ϵ_{even}	1.06418	30	-24	-13	-24	-24	-66
ϵ_{odd}	1.31374	52	112	297	177	179	-3
p	0.49677	16	-235	-655	-412	-414	86
f	0.95153	22	-81	44	22	24	-72
η	1.64320	23	33	-17	5	4	39
k_{∞}	1.08794	4	-198	-348	-237	-235	-19

TAB. D.3 – Effets des quadratures sur le calcul de la cellule MOX cylindrique à chaud.

MOC 60 12	TRIPOLI4	U (1σ)	P0	P1	P3	P5	P0c
χ	1.00227	39	-6	-6	-6	-6	-7
ϵ_{even}	1.09675	35	-13	-2	-13	-12	-77
ϵ_{odd}	1.64026	75	341	551	401	408	-49
p	0.35605	13	-578	-911	-682	-689	144
f	0.97161	28	-24	20	11	13	-45
η	1.61927	28	32	-1	15	14	54
k_{∞}	1.00996	4	-242	-342	-267	-267	27
MOC 36 12	T4 punctual	U (1σ)	P0	P1	P3	P5	P0c
χ	1.00227	39	-7	-7	-7	-7	-7
ϵ_{even}	1.09675	35	-17	-5	-16	-16	-83
ϵ_{odd}	1.64026	75	336	546	396	402	-59
p	0.35605	13	-570	-903	-674	-681	156
f	0.97161	28	-25	20	11	13	-45
η	1.61927	28	33	-1	16	15	55
k_{∞}	1.00996	4	-243	-343	-268	-267	24
MOC 24 12	T4 punctual	U (1σ)	P0	P1	P3	P5	P0c
χ	1.00227	39	-7	-7	-7	-7	-7
ϵ_{even}	1.09675	35	-20	-9	-20	-20	-69
ϵ_{odd}	1.64026	75	359	570	420	427	78
p	0.35605	13	-619	-952	-724	-731	-67
f	0.97161	28	-22	22	13	15	-39
η	1.61927	28	30	-3	13	12	47
k_{∞}	1.00996	4	-272	-372	-297	-297	-50

TAB. D.4 – Effets des quadratures sur le calcul de la cellule MOX cylindrique à chaud vidangée à 40%.

UOX 293 K	T4 punctual	U (1σ)	FV12 12	FV18 12	FV24 12	FV36 12
χ	1.00132	31	-1	0	0	0
ϵ_{even}	1.03175	22	-34	-22	-18	-15
ϵ_{odd}	1.08641	34	20	21	21	22
p	0.74464	17	-152	-151	-151	-150
f	0.82622	14	107	105	105	104
η	1.88764	20	-3	-3	-3	-3
k_∞	1.30352	4	-64	-51	-46	-42
<hr/>						
MOX 293 K	T4 punctual	U (1σ)	FV12 12	FV18 12	FV24 12	FV36 12
χ	1.00157	35	0	1	1	1
ϵ_{even}	1.04677	29	-43	-28	-23	-19
ϵ_{odd}	1.19756	45	155	156	157	158
p	0.59862	17	-341	-333	-331	-329
f	0.92023	19	96	94	93	92
η	1.68151	21	-32	-31	-31	-31
k_∞	1.16299	4	-165	-141	-134	-128
<hr/>						
MOX 873 K	T4 punctual	U (1σ)	FV12 12	FV18 12	FV24 12	FV36 12
χ	1.00182	35	1	1	1	2
ϵ_{even}	1.06401	30	-41	-24	-17	-11
ϵ_{odd}	1.31143	52	262	261	262	262
p	0.49602	16	-550	-533	-531	-527
f	0.95153	22	58	56	55	55
η	1.64979	23	-22	-21	-21	-20
k_∞	1.08858	4	-291	-261	-250	-240
<hr/>						
MOX V40 873 K	T4 punctual	U (1σ)	FV12 12	FV18 12	FV24 12	FV36 12
χ	1.00225	38	-5	-5	-4	-4
ϵ_{even}	1.09635	35	-31	-16	-9	-1
ϵ_{odd}	1.63261	73	576	551	549	547
p	0.35690	13	-928	-877	-869	-861
f	0.97129	28	41	38	37	37
η	1.62730	28	-28	-25	-25	-24
k_∞	1.01198	4	-375	-334	-320	-306

TAB. D.5 – Convergence du calcul en FV - P3. Ce tableau vise à démontrer la convergence angulaire de l'ordre P3 avec le solveur volumes finis en angle, FV avec du combustible carré et de l'hydrogène non lié. Comme on peut le constater, la discrétisation $N_\phi = 24$ et $N_\mu = 12$ est aussi suffisant pour assurer la convergence angulaire du calcul en FV.

UOX 293 K Group	U235	MOC 24 12		MOC 36 12		MOC 60 12		U238	MOC 24 12		MOC 36 12		MOC 60 12	
	T4	P0c	P3	P0c	P3	P0c	P3	T4	P0c	P3	P0c	P3	P0c	P3
1	153.0	-2.0	-1.2	-1.8	-0.9	-1.6	-0.8	1728.0	-22.9	-13.7	-20.8	-9.6	-18.3	-9.0
2	314.9	-2.8	-1.3	-1.9	-0.9	-1.7	-0.9	1454.1	-14.1	-6.9	-10.4	-4.6	-9.2	-4.6
3	508.6	0.6	0.5	0.9	0.5	0.8	0.5	1375.1	-4.9	-5.5	-4.4	-5.5	-4.5	-5.5
4	771.4	4.6	4.4	4.5	4.4	4.5	4.3	2116.4	16.0	15.4	15.8	15.2	15.7	15.2
5	2015.7	-2.7	-2.2	-3.0	-2.4	-3.1	-2.4	3176.7	21.9	22.8	21.6	22.5	21.5	22.4
6	1065.3	-1.2	-0.7	-1.4	-0.8	-1.5	-0.8	775.1	-3.4	-2.9	-3.4	-3.0	-3.4	-3.0
7	1183.2	-8.8	-6.7	-9.3	-6.8	-9.2	-6.8	1806.2	20.8	26.0	19.9	25.6	20.0	25.6
8	148.9	-1.1	-0.6	-1.2	-0.6	-1.2	-0.6	1961.6	-2.5	18.4	-6.0	17.4	-5.6	17.5
9	2202.8	29.9	33.4	28.9	33.1	28.9	33.0	368.3	1.3	1.6	1.2	1.6	1.2	1.6
10	585.3	-1.3	0.5	-1.6	0.5	-1.6	0.4	4046.5	-28.8	13.5	-35.5	11.6	-34.8	11.8
11	2389.7	2.4	2.9	2.5	2.8	2.3	2.7	629.0	-1.4	-1.2	-1.4	-1.3	-1.4	-1.3
12	5748.4	22.7	27.9	23.0	27.6	22.4	27.3	634.1	2.3	2.9	2.4	2.8	2.3	2.8
13	44415.1	-42.0	-70.0	-38.1	-71.1	-41.0	-71.1	4407.8	-6.0	-8.4	-5.5	-8.5	-5.9	-8.5
Total	61502.0	-1.5	-13.0	1.6	-14.5	-1.9	-15.0	24478.9	-21.7	62.0	-26.5	64.3	-22.5	65.0

MOX 293 K Group	U235	MOC 24 12		MOC 36 12		MOC 60 12		U238	MOC 24 12		MOC 36 12		MOC 60 12	
	T4	P0c	P3	P0c	P3	P0c	P3	T4	P0c	P3	P0c	P3	P0c	P3
1	9.1	-0.1	-0.1	-0.1	-0.1	-0.1	-0.1	1786.9	-22.8	-14.6	-22.3	-11.3	-19.9	-10.6
2	17.7	-0.1	-0.1	-0.1	0.0	-0.1	0.0	1418.6	-12.3	-5.9	-9.5	-4.2	-8.5	-4.1
3	28.6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1335.1	-4.5	-5.1	-4.1	-5.2	-4.1	-5.2
4	43.4	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	2064.9	15.9	15.2	15.7	15.1	15.6	15.0
5	112.1	-0.1	-0.1	-0.1	-0.1	-0.1	-0.1	3083.1	22.4	23.6	22.1	23.3	22.1	23.3
6	57.8	-0.1	-0.1	-0.2	-0.1	-0.2	-0.1	700.1	-4.6	-3.9	-4.6	-4.0	-4.6	-4.0
7	70.8	-1.8	-1.7	-1.8	-1.7	-1.8	-1.7	1727.1	22.9	28.0	22.1	27.7	22.2	27.7
8	8.8	-0.3	-0.2	-0.3	-0.3	-0.3	-0.3	1828.3	-5.9	16.0	-9.3	15.0	-8.9	15.1
9	137.2	-0.3	-0.1	-0.3	-0.1	-0.3	-0.1	343.6	0.3	0.7	0.2	0.7	0.2	0.7
10	32.5	-0.3	-0.2	-0.3	-0.2	-0.3	-0.2	3742.3	-33.7	7.2	-39.9	5.5	-39.2	5.7
11	80.4	-0.4	-0.2	-0.4	-0.2	-0.4	-0.2	437.2	-2.5	-1.9	-2.5	-1.9	-2.6	-1.9
12	92.4	-0.8	-0.2	-0.8	-0.2	-0.8	-0.2	202.6	-2.0	-0.7	-2.0	-0.8	-2.0	-0.8
13	646.9	2.6	-3.9	3.0	-3.8	2.9	-3.8	1117.3	3.6	-7.1	4.3	-7.0	4.1	-7.0
Total	1337.7	-1.5	-6.6	-1.1	-6.6	-1.2	-6.6	19787.1	-23.2	51.5	-29.8	52.9	-25.5	53.9

V40 873 K Group	U235	MOC 24 12		MOC 36 12		MOC 60 12		U238	MOC 24 12		MOC 36 12		MOC 60 12	
	T4	P0c	P3	P0c	P3	P0c	P3	T4	P0c	P3	P0c	P3	P0c	P3
1	13.8	-0.1	-0.1	-0.1	-0.1	-0.1	-0.1	2688.0	-23.4	-20.2	-25.0	-18.1	-23.2	-17.0
2	31.4	-0.2	-0.1	-0.2	-0.1	-0.1	-0.1	2387.1	-13.4	-9.0	-11.6	-6.5	-10.1	-6.1
3	60.6	0.0	0.0	0.1	0.1	0.1	0.0	2854.8	-20.7	-20.4	-19.4	-20.0	-19.3	-20.1
4	89.1	0.4	0.4	0.3	0.3	0.3	0.3	4491.4	25.4	25.0	23.9	24.5	23.7	24.5
5	209.5	0.1	0.2	0.0	0.1	-0.1	0.1	6260.5	73.9	76.6	70.1	75.9	69.9	75.9
6	99.2	-0.3	-0.3	-0.5	-0.3	-0.5	-0.3	1233.5	9.6	11.3	8.9	11.2	8.9	11.2
7	117.9	-1.3	-1.1	-1.4	-1.1	-1.4	-1.1	2657.9	50.5	61.4	46.7	60.6	46.7	60.8
8	14.3	-0.4	-0.3	-0.4	-0.4	-0.4	-0.4	2642.2	-6.6	29.7	-17.0	26.7	-16.8	27.1
9	208.3	-0.5	-0.7	-0.6	-0.7	-0.6	-0.7	530.6	0.0	-0.5	-0.4	-0.5	-0.4	-0.5
10	41.6	-0.6	-0.5	-0.6	-0.5	-0.6	-0.5	4763.3	-41.4	10.2	-57.0	5.8	-56.8	6.3
11	99.5	-0.4	-0.6	-0.4	-0.6	-0.4	-0.6	567.2	-2.8	-4.0	-2.5	-3.9	-2.5	-4.0
12	82.0	-0.8	-0.9	-0.7	-0.9	-0.7	-0.9	185.3	-2.0	-2.3	-1.7	-2.2	-1.7	-2.2
13	239.7	1.6	-1.9	2.5	-1.6	2.4	-1.7	428.3	2.4	-3.6	4.0	-3.2	3.9	-3.3
Total	1306.8	-2.5	-5.9	-2.0	-5.7	-2.1	-5.8	31690.1	51.6	154.3	18.9	150.1	22.2	152.5

TAB. D.6 – Taux d'absorption sur les isotopes d'uranium pour l'UOX, le MOX et le V40.

MOX Gr.	239	MOC 24 12		MOC 36 12		MOC 60 12		240	MOC 24 12		MOC 36 12		MOC 60 12		241	MOC 24 12		MOC 36 12		MOC 60 12	
	T4	P0c	P3	P0c	P3	P0c	P3		T4	P0c	P3	P0c	P3	P0c		P3	T4	P0c	P3	P0c	P3
1	245.5	-3.1	-2.0	-3.0	-1.5	-2.7	-1.4	95.5	-1.2	-0.8	-1.2	-0.6	-1.0	-0.5	28.9	-0.4	-0.2	-0.4	-0.2	-0.3	-0.2
2	449.0	-3.6	-1.7	-2.6	-1.2	-2.4	-1.2	144.0	-1.2	-0.6	-0.9	-0.4	-0.8	-0.4	59.5	-0.5	-0.2	-0.3	-0.2	-0.3	-0.2
3	461.8	-0.1	-0.2	0.1	-0.2	0.1	-0.2	54.7	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	86.2	0.3	0.3	0.4	0.3	0.3	0.3
4	606.0	3.3	3.1	3.2	3.1	3.2	3.1	94.9	1.1	1.0	1.1	1.0	1.0	1.0	116.0	1.7	1.7	1.7	1.7	1.7	1.7
5	2218.1	-11.2	-10.3	-11.6	-10.5	-11.6	-10.6	369.5	-3.8	-3.7	-3.9	-3.7	-3.9	-3.7	324.8	4.1	4.2	4.1	4.2	4.1	4.2
6	1435.9	-11.7	-10.4	-12.0	-10.6	-12.0	-10.6	346.2	-3.3	-2.9	-3.4	-3.0	-3.4	-3.0	92.5	7.0	7.1	7.0	7.1	7.0	7.1
7	293.9	3.2	3.5	3.1	3.5	3.1	3.5	198.1	-8.4	-7.8	-8.5	-7.8	-8.5	-7.8	201.6	-0.2	0.1	-0.3	0.1	-0.3	0.0
8	288.2	3.8	5.1	3.5	5.1	3.5	5.1	147.1	3.8	3.5	3.6	3.4	3.6	3.5	5.5	-0.1	0.0	-0.1	0.0	-0.1	0.0
9	2511.2	36.0	44.7	34.2	44.3	34.3	44.2	3.7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	669.4	1.7	2.8	1.4	2.7	1.4	2.7
10	786.6	17.7	21.0	17.1	20.8	17.2	20.8	9.0	-0.1	-0.1	-0.1	-0.1	-0.1	-0.1	726.8	-4.6	-3.3	-4.8	-3.3	-4.8	-3.4
11	1164.6	-6.7	-4.6	-6.7	-4.7	-6.8	-4.7	9282.6	-22.9	52.3	-31.6	48.7	-30.8	49.1	192.8	-1.1	-0.8	-1.1	-0.8	-1.1	-0.8
12	14105.8	-60.8	69.2	-63.8	67.2	-63.8	67.2	1001.7	-8.9	-3.9	-8.8	-4.0	-8.9	-4.0	928.3	-7.6	1.2	-7.7	1.1	-7.8	1.1
13	22567.4	29.6	-147.4	42.6	-144.4	39.6	-145.4	2325.6	5.6	-15.5	7.1	-15.2	6.7	-15.3	3768.0	8.7	-23.4	11.0	-22.9	10.4	-23.0
Tot.	47133.9	-3.6	-29.9	4.3	-29.1	1.8	-30.2	14072.5	-39.3	21.6	-46.5	18.5	-45.9	18.8	7200.4	9.1	-10.6	10.9	-10.3	10.3	-10.5

V40 Gr.	239	MOC 24 12		MOC 36 12		MOC 60 12		240	MOC 24 12		MOC 36 12		MOC 60 12		241	MOC 24 12		MOC 36 12		MOC 60 12	
	T4	P0c	P3	P0c	P3	P0c	P3		T4	P0c	P3	P0c	P3	P0c		P3	T4	P0c	P3	P0c	P3
1	370.2	-3.2	-2.7	-3.4	-2.4	-3.1	-2.3	143.9	-1.2	-1.0	-1.3	-0.9	-1.2	-0.9	43.7	-0.4	-0.3	-0.4	-0.3	-0.4	-0.3
2	793.1	-4.9	-3.2	-3.9	-2.3	-3.5	-2.1	248.3	-1.4	-0.9	-1.1	-0.6	-1.0	-0.6	105.3	-0.6	-0.4	-0.5	-0.3	-0.4	-0.3
3	978.1	-1.2	-0.8	-0.4	-0.6	-0.4	-0.6	115.7	0.0	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	182.7	0.7	0.8	0.9	0.8	0.9	0.8
4	1245.1	7.3	7.3	6.9	7.1	6.8	7.1	193.9	3.4	3.4	3.3	3.3	3.3	3.3	238.5	3.5	3.4	3.4	3.4	3.4	3.4
5	4138.3	-14.2	-12.6	-17.6	-13.2	-17.7	-13.3	715.3	-13.8	-13.5	-14.4	-13.6	-14.4	-13.6	606.2	7.3	7.5	6.8	7.4	6.8	7.4
6	2464.9	-28.4	-26.8	-31.1	-27.3	-31.1	-27.3	592.3	-6.2	-5.5	-6.8	-5.6	-6.8	-5.6	157.1	13.5	13.6	13.3	13.6	13.3	13.6
7	508.8	-5.4	-5.3	-5.8	-5.4	-5.8	-5.4	355.5	-19.7	-17.9	-20.3	-18.1	-20.3	-18.0	335.9	-1.0	-0.8	-1.3	-0.9	-1.3	-0.9
8	448.9	5.6	8.0	4.6	7.8	4.6	7.8	183.1	-2.4	-1.7	-3.0	-1.9	-3.0	-1.8	7.7	0.0	0.0	-0.1	0.0	-0.1	0.0
9	3766.3	49.1	59.9	41.6	58.5	41.6	58.6	5.7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1016.4	8.2	8.4	7.1	8.1	7.1	8.1
10	1130.2	14.8	18.8	12.7	18.4	12.7	18.4	12.6	-0.2	-0.2	-0.2	-0.2	-0.2	-0.2	993.7	-11.0	-12.1	-11.8	-12.2	-11.8	-12.2
11	1388.1	-8.9	-12.0	-8.2	-11.9	-8.2	-12.0	9839.9	-37.2	20.4	-48.9	14.3	-48.0	14.9	252.2	-0.9	-1.5	-0.8	-1.4	-0.8	-1.5
12	11853.3	-36.3	-30.3	-22.3	-30.3	-22.3	-30.3	959.6	-10.4	-12.2	-9.2	-12.0	-9.2	-12.1	756.3	-4.9	-5.4	-3.8	-5.4	-3.9	-5.4
13	9747.2	18.1	-110.4	52.7	-101.7	49.8	-103.4	922.4	3.9	-9.0	7.2	-8.1	6.9	-8.3	1561.1	3.8	-17.1	9.4	-15.7	8.9	-16.0
Tot.	38832.3	-7.5	-110.1	25.8	-103.2	23.5	-104.8	14288.2	-85.0	-38.0	-94.5	-43.2	-93.7	-42.7	6256.5	18.0	-4.0	22.2	-2.9	21.7	-3.3

TAB. D.7 – Taux d'absorption sur les isotopes du Pu pour le MOX à froid et V40.

Principe de GENXS

La routine GENXS qui a été mise en place est décrite ci-dessous :

Alg. 1 Calcul des sections efficaces de transfert multigroupes différentielles, $\sigma^{g' \rightarrow g}(\mu_{LAB})$.

Initialisation de la routine

Input : Fichier ENDF, Maillage énergétique.

Lecture des distributions angulaires sous format tabulé ou polynômial.

Construction des distributions angulaires aux énergies tabulées dans le fichier ENDF.

Interpolation des distributions angulaires sur une grille énergétique adaptée au maillage.

Output : Distribution interpolée.

Génération de sections

Input : Distribution interpolée, Fichier section efficace tabulé en énergie

Lecture des sections efficaces.

Chargement des distributions reconstruites.

for $g = 1 \rightarrow G$, Boucles sur les groupes.

gDépart = Limites (g_{min}, g_{max})

gArrivée = Limites (g_{min}, g_{max})

Choix du domaine énergétique selon gDépart.

Si gDépart = Rapide,

Loi de choc - boule de billard, Spectre de fission.

Si gDépart = Epithermique,

Loi de choc - boule de billard, Spectre en 1/E.

Si gDépart = thermique (> 4 eV),

Loi de choc - gaz libre, Spectre en 1/E.

Si gDépart = thermique (≤ 4 eV),

Loi de choc - gaz libre, Spectre maxwellien.

$\sigma^{g' \rightarrow g}(\mu_{LAB}) =$ Intégration des lois de choc (Distribution interpolée)
par Simpson-Adaptatif.

end

Calcul de moments de Legendre, $\sigma_{sl}^{g' \rightarrow g}$

Calcul de sections discrètes, $\sigma_{sk}^{g' \rightarrow g}$

Output : $\sigma_{sl}^{g' \rightarrow g}, \sigma_{sk}^{g' \rightarrow g}$

À titre d'information, la méthode d'intégration par Simpson adaptative est décrite ci-dessous :

Alg. 2 Calcul de $Q = \int_a^b f(x) dx$ par la méthode de Simpson adaptative.

Simpson-Adaptatif (a, b)

Input : a, b, ϵ

Output : Q

Intervalle d'intégration : $h = b - a$

Point milieu de $[a, b]$: $c = (a + b)/2$

Point milieu de $[a, c]$: $d = (a + c)/2$

Point milieu de $[b, c]$: $e = (b + c)/2$

$$Q_1 = h/6 * [f(a) + 4 * f(c) + f(b)]$$

$$Q_2 = h/12 * [f(a) + 4 * f(d) + 2 * f(c) + 4 * f(e) + f(b)]$$

Si $|Q_2 - Q_1| \leq \epsilon$

$$Q = Q_2 + (Q_2 - Q_1)/15$$

Sinon

$$Q = \text{Simpson-Adaptatif}(a, c) + \text{Simpson-Adaptatif}(c, b)$$

Parallélisation du solveur FV

De nos jours, les ordinateurs possèdent des processeurs dits *multicœurs* - des unités physiques de calculs - qui travaillent en parallèle. De ce fait, il est possible d'exécuter certaines tâches en parallèle, notamment dans le cadre des codes de calcul qui sont développés pour la physique en général. Dans le cadre de la plateforme PARIS et son solveur S_n SNATCH, la tâche qui a été parallélisée est le calcul du flux angulaire pour une direction donnée. Ce processus est parallélisable car les directions ou un sous-ensemble de directions sont indépendants. De ce fait, pour le solveur volumes finis en angle, la même approche a été mise en place. La parallélisation dépend aussi du type de conditions limites aux interfaces du maillage de calcul.

Pour un maillage 2D cartésien :

- sans réflexion : toutes les directions peuvent être calculées en parallèle,
- condition de réflexion sur les frontières en haut et/ou en bas : le calcul se fait en parallèle par paire de $(\Omega_n, \Omega_n^{\text{réfléchié par } Oy})$
- condition de réflexion sur les frontières à gauche et/ou à droite : le calcul se fait en parallèle par paire de $(\Omega_n, \Omega_n^{\text{réfléchié par } Ox})$
- condition de réflexion sur les frontières en haut et/ou en bas et à gauche et/ou à droite : le calcul se fait en parallèle par quadruplet de $(\Omega_n, \Omega_n^{\text{réfl. } Oy}, \Omega_n^{\text{réfl. } Oy \text{ puis refl. } Ox}, \Omega_n^{\text{réfl. } Ox})$

Cette parallélisation a été implémentée et testée sur un calcul de la cellule UOX présentée dans le Chapitre 5. Les calculs ont été effectués à 281 groupes et pour une quadrature angulaire FV 6 6, soit 144 directions dans la demi-sphère unité. Les conditions limites sont des réflexions en haut, en bas, à droite et à gauche.

Le facteur de gain est calculé comme le rapport entre le temps de calcul à un processeur, t_1 et celui à n processeurs, t_n : $\frac{t_1}{t_n}$. Les résultats sont présentés sur la Fig. F.1.

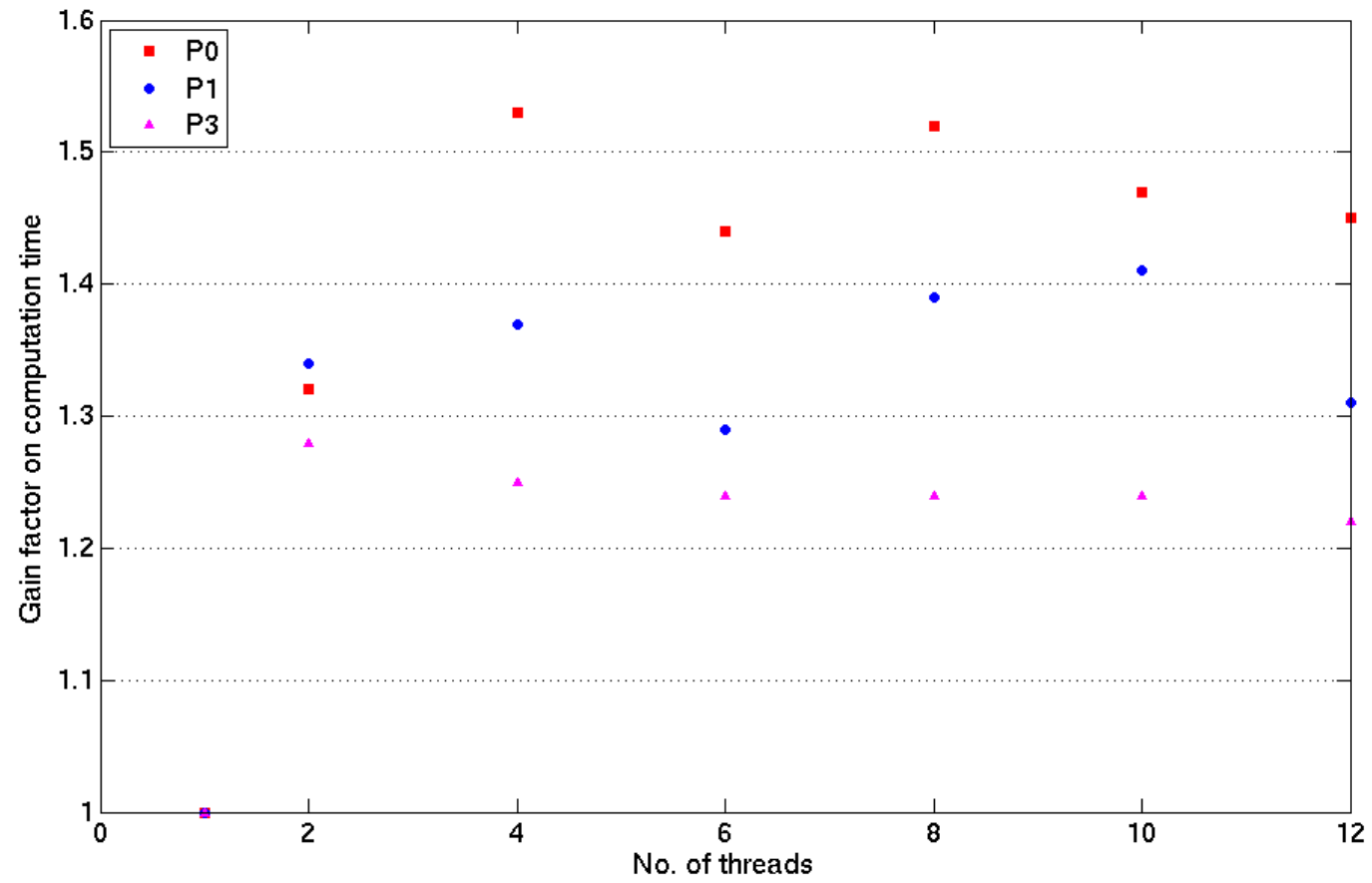


FIG. F.1 – Facteur de gain en fonction du nombre de processeurs.

Biais dus à la coupure gaz libre

UOX 293 K	TRIPOLI4 Free H Eff.	MOC 60 12 P3 Free H Eff.	MOC 60 12 P0c Free H Eff.
χ	1	0	0
ϵ_{even}	-10	-12	-10
ϵ_{odd}	-161	-178	-173
p	154	201	201
f	67	57	30
η	109	111	110
k_{∞}	159	180	158
<hr/>			
MOX 293 K	TRIPOLI4 Free H Eff.	MOC 60 12 P3 Free H Eff.	MOC 60 12 P0c Free H Eff.
χ	6	0	0
ϵ_{even}	-70	-75	-73
ϵ_{odd}	-433	-472	-465
p	1167	1259	1286
f	-452	-467	-511
η	669	683	678
$k_{\infty}k_{\infty}$	880	929	915
<hr/>			
MOX 873 K	TRIPOLI4 Free H Eff.	MOC 60 12 P3 Free H Eff.	MOC 60 12 P0c Free H Eff.
χ	-1	0	0
ϵ_{even}	-76	-87	-88
ϵ_{odd}	-470	-604	-608
p	1007	1257	1293
f	-153	-163	-179
η	417	441	442
k_{∞}	727	845	860
<hr/>			
V40 873 K	TRIPOLI4 Free H Eff.	MOC 60 12 P3 Free H Eff.	MOC 60 12 P0c Free H Eff.
χ	-9	0	0
ϵ_{even}	-104	-120	-123
ϵ_{odd}	-867	-1101	-1120
p	1292	1622	1682
f	-110	-119	-135
η	487	521	527
k_{∞}	690	805	831

TAB. G.1 – Ecart en pcm dus à l'utilisation de l'hydrogène libre dans TRIPOLI4 avec la coupure du modèle de gaz libre à $1000kT/A$.

Erreurs énergie-angle

Dans le cadre d'une quadrature angulaire de type ordonnées discrètes, on définit des couples $\{\Omega_n, \omega_n\}$. En raffinant la quadrature angulaire et donc en augmentant le nombre de directions, la quadrature raffinée ne contient plus les directions de la quadrature grossière.

Avec une discrétisation de la sphère unité en mailles et après raffinement du maillage angulaire, il est possible d'avoir un maillage raffiné qui soit un sous-ensemble du maillage initial. Dans cette optique, une méthode de volumes finis en angle permet de traiter donc le raffinement de maillage de la même manière que le raffinement du maillage spatiale. De plus, il est possible de généraliser la représentation volumes finis en élément finis discontinues pour définir des stratégies de raffinement en calculant la norme de l'erreur [79].

Une première mise en œuvre de ce calcul d'erreur a été effectuée à travers des projections de maillages angulaires.

Méthode et implémentation

En s'appuyant sur les travaux d'E. Girardi [87], on définit deux grilles angulaires : $G_D = \cup_D S_D$, un maillage grossier, les mailles étant notées - S_D - et $G_d = \cup_d S_d$, un maillage plus fin. La conservation du courant sur ces deux maillages impose¹ :

$$\int_{S_D} d^2\Omega |\Omega \cdot n| \phi(\Omega) = \sum_{d \cap D} \int_{S_d \cap S_D} d^2\Omega |\Omega \cdot n| \phi(\Omega) \quad (\text{H.1})$$

où les mailles S_d ont une intersection non-nulle avec la maille S_D .

En faisant l'approximation d'un flux angulaire plat dans chaque maille de la sphère unité, on retrouve l'hypothèse des volumes finis en angle et ceci revient à faire l'approximation à l'ordre zéro d'un développement de Taylor. En notant $\phi(\Omega_d) = \phi_d$ (respectivement Ω_D), la relation suivante est obtenue :

$$\phi_D \int_{S_D} d^2\Omega |\Omega \cdot n| = \sum_{d \cap D} \phi_d \int_{S_d \cap S_D} d^2\Omega |\Omega \cdot n| \quad (\text{H.2})$$

et donc

$$\phi_D = \sum_d \mathcal{A}_{d \rightarrow D} \phi_d, \quad \mathcal{A}_{d \rightarrow D} = \frac{\int_{S_d \cap S_D} d^2\Omega |\Omega \cdot n|}{\int_{S_D} d^2\Omega |\Omega \cdot n|} \quad (\text{H.3})$$

1. Les variables d'énergies et d'espace sont omises pour simplifier les équations.

$\mathcal{A}_{d \rightarrow D}$ étant l'opérateur de couplage angulaire.

Cette méthode de couplage a été implémentée avec le solveur volumes finis (FV) dans la plateforme PARIS. Un calcul de cellule en réseau infini a ensuite été pris comme cas d'application. La cellule simplifiée avec du combustible UOX du Chapitre 5 a été utilisée. Les calculs ont été menés à 8 groupes d'énergie et avec le même maillage spatial présenté en Fig. 5.8. L'ordre d'anisotropie est $P1$. Les étapes de calculs sont les suivantes :

- un premier calcul de référence avec un maillage angulaire produit très raffiné FV20, $N_\varphi = 20$ et $N_\mu = 20$ (ce qui équivaut à 400 directions sur un octant),
- un calcul avec un maillage produit plus relâché FV6 : $N_\varphi = 6$ et $N_\mu = 6$ (36 directions / octant),
- un calcul avec un maillage non conforme de type « level-symmetric » FVLS16 : le maillage de la quadrature S_{16} (36 directions / octant),
- la projection des résultats FV20, FV6 et FVLS16 sur un maillage produit FV10 ($N_\varphi = 10$ et $N_\mu = 10$),
- la norme de l'erreur dans un groupe g et une direction n , ϵ_n^g , est calculée comme suit :

$$\epsilon_n^g = \sqrt{\sum_i (\tilde{\phi}_{n,i}^{g,\text{cal}} - \tilde{\phi}_{n,i}^{g,\text{ref}})^2 \times V_i} \quad (\text{H.4})$$

i étant l'indice de la maille spatiale, V_i son volume et cal = FV6 ou FVLS16 et ref = FV20.

Commentaires : Les figures Fig. H.1 et Fig. H.2 présentent les erreurs ϵ_n^g pour les calculs FVLS16 et FV6 pour les huit groupes de calculs sur le maillage de projection FV10.

- Les erreurs absolues pour le maillage angulaire FV6 sont plus faibles sur ce cas d'étude que celles avec le maillage FVLS16.
- Les erreurs plus fortes sont localisées sur les bords de l'octant.

Cette analyse d'erreur peut être poussée sur des cas plus complexes tel qu'une interface cœur-réacteur. Ceci permettrait ainsi d'envisager et de définir des méthodes pour raffiner le maillage angulaire en fonction du groupe d'énergie et de la géométrie du problème.

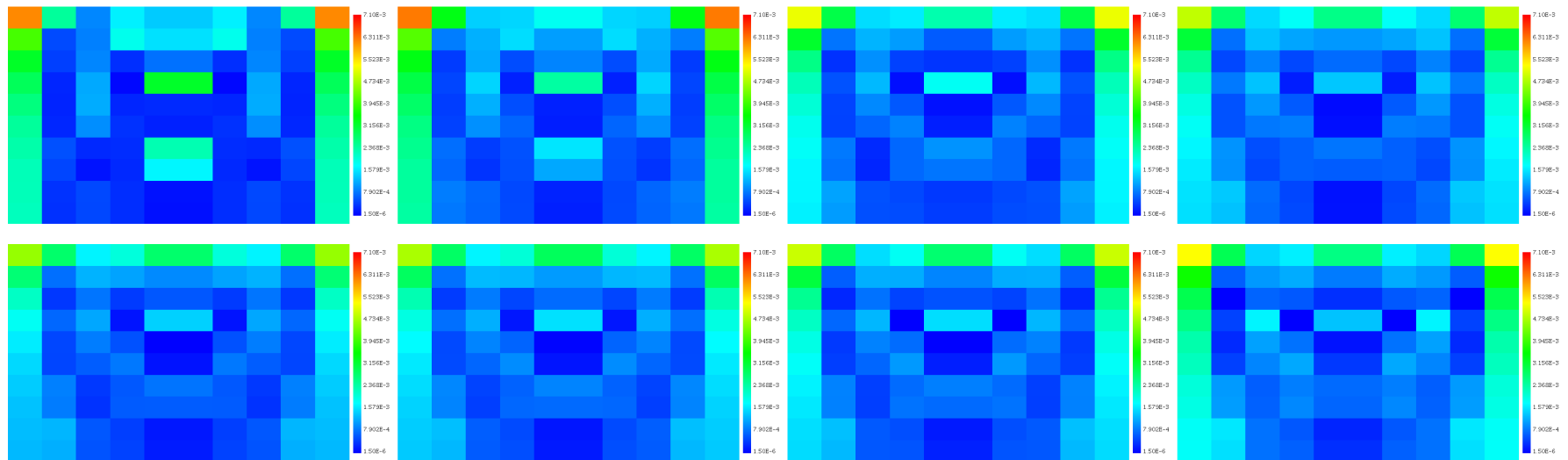
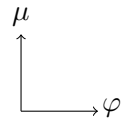


FIG. H.1 – Erreurs avec la quadrature FVLS16 pour le premier octant dans chaque groupe, de haut en bas et de gauche à droite, 1 à 8.

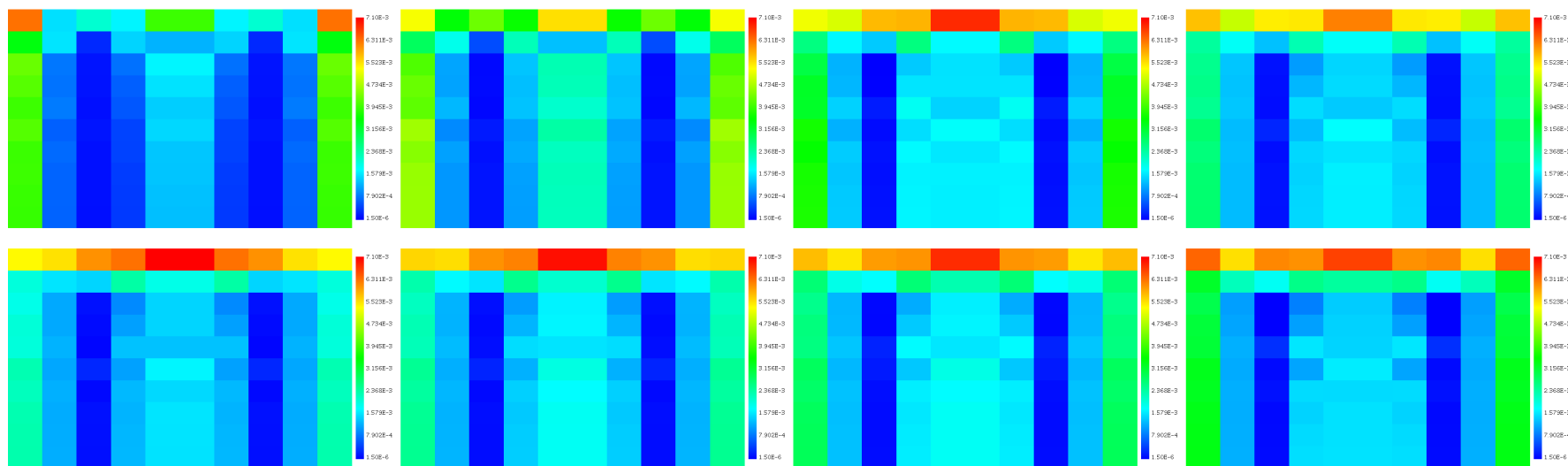
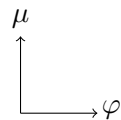


FIG. H.2 – Erreurs avec la quadrature FV6 pour le premier octant dans chaque groupe, de haut en bas et de gauche à droite, 1 à 8.

Bibliographie

- [1] R. SANCHEZ ET AL. Apollo2 year 2010. *Nuclear Engineering & Technology*, **42**(5), p. 474–499, October 2010.
- [2] J.-F. VIDAL, O. LITAIZE, D. BERNARD, ET AL. New modelling of LWR assemblies using the APOLLO2 code package. In *Proceedings of Joint International Topical Meeting on Mathematics and Computations and Supercomputing in Nuclear Applications, M & C + SNA*, Monterey, CA, April 2007.
- [3] S. SANTANDREA, R. SANCHEZ. Acceleration techniques for the characteristic method in unstructured meshes. *Annals of Nuclear Energy*, **29**, p. 323–352, 2002.
- [4] J.-P. BOTH, H. DERRIENIC, B. MORILLON, J.-C. NIMAL. A survey of TRIPOLI4. In *Proceedings of International Conference on Radiation Shielding*, Arlington, USA, 1994. ICRS-8.
- [5] N. HFAIEDH, A. SANTAMARINA. Determination of the optimised SHEM mesh for neutron transport calculation. In *Proceedings of International Conference on Mathematics and Computation*, Avignon, France, 2005. M&C 2005.
- [6] A. FODERARO. *The Elements of Neutron Interaction Theory*. MIT Press, 1971.
- [7] P. REUSS. *Précis de neutronique*. 2003.
- [8] N. BOHR. Neutron capture and nuclear constitution. *Nature*, **137**, 1936.
- [9] R. BARJON. *Physique des Réacteurs Nucléaires*. Presses Universitaires de Grenoble, 1993.
- [10] A. M. LANE, R. G. THOMAS. R-Matrix Theory of Nuclear Reactions. *Review of Modern Physics*, **30**(2), p. 257, 1958.
- [11] G. BREIT, E. WIGNER. Capture of Slow Neutrons. *Physical Review*, **49**, p. 519–531, 1936.
- [12] C. W. REICH, M.S. MOORE. Multilevel Formula for the Fission Process. *Physical Review*, **111**(3), p. 929–933, 1958.
- [13] T. TAMURA. Analyses of the Scattering of Nuclear Particles by Collective Nuclei in Terms of the Coupled-Channel Calculation. *Reviews of Modern Physics*, **37**(4), p. 679–708, 1965.
- [14] G. R. SATCHLER. *Direct Nuclear Reactions*. Oxford University Press, 1993.

- [15] A. HEBERT. *Applied Reactor Physics*. Presses Internationales Polytechnique, 2009.
- [16] E. E. LEWIS, W. F. MILLER JR. *Computational Methods for Neutron Transport*. John Wiley & Sons Inc., 1984.
- [17] J. VON NEUMANN, S. ULAM. Random ergodic theorems. *Bulletin of the American Mathematical Society*, 1945. Abstract 51-9-165.
- [18] N. METROPOLIS, S. ULAM. The Monte Carlo Method. *Journal of the American Statistical Association*, **44**(247), p. 335–341, 1949.
- [19] A.SANTAMARINA, D. BERNARD, Y. RUGAMA. *The JEFF-3.1.1 Nuclear Data Library*. Rapport JEFF Report 22, Nuclear Energy Agency, 2009.
- [20] R. E. MACFARLANE, D. W. MUIR, 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, RSICC Peripheral Shielding Routine Collection, Contributed by Los Alamos National Laboratory, 2000.
- [21] G. RIMPAULT. Algorithmic Features of the ECCO Cell Code for Treating Heterogeneous Fast Reactor Subassemblies. In *Proceedings of International Topical Meeting on Reactor Physics and Computations*, Portland, Oregon, May 1-5 1995.
- [22] P. MOSCA. *Conception et développement d'un mailleur énergétique adaptatif pour la génération des bibliothèques multigroupes des codes de transport*. Thèse de doctorat, Université Paris-Sud 11, 2009.
- [23] S. CHANDRASEKHAR. *Radiative Transfer*. Oxford, 1950.
- [24] B. G. CARLSON. *Solution of the Transport Equation by S_n Approximations*. Rapport LA-1599 (revised as LA-1891 in 1955), Los Alamos Scientific Laboratory, 1953.
- [25] I. K. ABU-SHUMAYS. Angular Quadratures for Improved Transport Computations. *Transport Theory and Statistical Physics*, **30**(2&3), p. 169–204, 2001.
- [26] T. TRAHAN, J. RAGUSA, J. MOREL. Galerkin-Quadratures for the S_n Method in 2D Cartesian Geometries and Application to Forward-Peaked Scattering Particle Transport Problems. In *Proceedings of International Conference on Mathematics, Computational Methods & Reactor Physics (M&C 2009)*, Saratoga Springs, New York, May 3-7 2009.
- [27] K. D. LATHROP. Ray effects in discrete ordinates equation. *Nuclear Science & Engineering*, **32**, p. 357–369, 1968.
- [28] V. S. VLADIMIROV. *PhD dissertation*. Thèse de doctorat, Stecklova Mathematics Institute, 1959.
- [29] J. R. ASKEW. *A Characteristics Formulation for the Neutron Transport Equation in Complicated Geometries*. Rapport, Winfrith : United Kingdom Atomic Energy Establishment, 1972.

- [30] R. LE TELLIER. *Développement de la méthode des caractéristiques pour le calcul de réseau*. Thèse de doctorat, Université de Montréal, 2006.
- [31] E. M. GELBARD. *Simplified spherical harmonics equations and their use in shielding problems*. Tech. Report WAPD-T-1182, Bettis Atomic Power Laboratory, 1961.
- [32] R. ROY. Anisotropic Scattering for Integral Transport Codes. Part2 : Cyclic Tracking and its Application to XY Lattices. *Annals of Nuclear Energy*, **18**, p. 511–524, 1991.
- [33] . RIMPAULT, D. CALAMAND, E. LEFEVRE. The ERANOS System Applied to Shielding Calculations with Validation on JANUS Experiments. In *8th International Conference on Radiation Shielding*, Arlington, Texas, April 1994.
- [34] R. SANCHEZ. APOLLO II : a user oriented, portable, modular code for multigroup transport assembly calculations. *Nuclear Science & Engineering*, **100**(3), p. 352–362, 1988.
- [35] L. GASTALDO, R. LE TELLIER, C. SUTEAU, D. FOURNIER, J. M. RUGGIERI. Highorder discrete ordinate transport in non-conforming 2d cartesian meshes. In *Proceedings of International Conference on Mathematics, Computational Methods & Reactor Physics*, Saratoga Springs, New York, May 3-7 2009. M&C 2009.
- [36] J. M. RUGGIERI, J. TOMMASI, J. F. LEBRAT, C. SUTEAU, D. PLISSON-RIEUNIER, C.DE ST JEAN. Eranos-2.1 : The international code system for gen-iv reactor analysis. In *Proceedings of International Congress of Advances in Nuclear Power Plants*, USA, June 2006.
- [37] G. RIMPAULT, D. PLISSON, J. TOMMASI, R. JACQMIN, J.-M. RIEUNIER, D. VERRIER. AND D. BIRON. The ERANOS code and data system for fast reactor neutronic analyses. In *Proceedings of PHYSOR 2002*, Seoul, Korea, 2002.
- [38] C. DODERLEIN ET AL. The 3D neutronics scheme for the development of the Jules-Horowitz-Reactor. In *Proceedings of the International Conference On The Physics Of Reactors*, Interlaken, Switzerland, September 2008.
- [39] G. L. SQUIRES. *Introduction to the theory of thermal neutron scattering*. Cambridge University Press, 1978.
- [40] M. HERMAN, A. TRKOV. *ENDF-6Formats Manual*. Members of the Cross Sections Evaluation Working Group, Brookhaven National Laboratory, 2009.
- [41] L. VAN HOVE. Correlations in Space and Time and Born Approximation Scattering in Systems of Interacting Particles. *Physical Review*, **95**, p. 249, 1954.
- [42] J.-C. SUBLET, P. RIBON, M. COSTE-DELCLAUX. *User manual for CALENDF-2005*. Rapport CEA R-6131, CEA/DEN Cadarache, 2006.
- [43] J. R. MIKA. Neutron Transport with Anisotropic Scattering. *Nuclear Science & Engineering*, **11**, p. 415–427, 1961.

- [44] J. H. JEANS. The Equations of Radiative Transfer of Energy. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, **78**, p. 28–36, 1917.
- [45] R. E. MARSHAK. Note on the Spherical Harmonic Method As Applied to the Milne Problem for a Sphere. *Physical Review*, **71**, p. 443–446, 1947.
- [46] E. A. MILNE. Radiative Equilibrium in the Outer Layers of a Star : the Temperature Distribution and Law of Darkening. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, **81**, p. 361–375, 1921.
- [47] J.-F. VIDAL. *Limites du traitement de l'anisotropie du choc dans les codes déterministes du CEA. Suggestions pour une nouvelle méthodologie dans APOLLO3*. Note Technique 08-200, CEA, 2008.
- [48] N. HFAIEDH. *Nouvelle Méthodologie de Calcul de l'Absorption Résonnante*. Thèse de doctorat, Université Louis Pasteur Strasbourg, September 2006.
- [49] M. LANDESMAN, J. E. MOREL. Angular-Fokker-Planck Decomposition and Representation Techniques. *Nuclear Science & Engineering*, **103**, p. 1–11, 1989.
- [50] J. E. MOREL. A Hybrid Collocation-Galerkin-Sn for Solving the Boltzmann Transport Equation. *Nuclear Science & Engineering*, **101**, p. 72–87, 1989.
- [51] J. A. DAHL. A non-linear method for representing the scattering cross section for discrete ordinates. In *Proceedings of The Joint International Conference on Mathematical Methods and Supercomputing for Nuclear Applications*, volume 2, p. 1497–1506, Saratoga Springs, New York, October 1997.
- [52] J. A. DAHL, B. D. GANAPOL, J. E. MOREL. Positive Scattering Cross Sections Using Constrained Least Squares. In *Proceedings of ANS Mathematics and Computation Topical Meeting*, p. 627, Madrid, Spain, 1999.
- [53] O. B. MOSCALEV. The reconstruction of a positive function from its finite fourier series. *Transport Theory and Statistical Physics*, **22**, p. 347, 1993.
- [54] R. E. ALCOUFFE, R. S. BAKER, S. A. TURNER. *PARTISN*. Rapport LACC98-62, Los Alamos National Laboratory, 1998.
- [55] J. W. KIM, N. Z. CHO. An efficient deterministic method for generating non-negative scattering cross-sections. *Annals of Nuclear Energy*, **34**, p. 967–976, 2007.
- [56] J. W. KIM, Y. LEE, N. Z. CHO. An Extension of the Generation Method of Non-negative Scattering Cross-sections for a Two Dimensional Geometry. *Proceedings of the Intentional Conference on Mathematics, Computational Methods & Reactor Physics, M&C 2009*, **5**, p. 3254–3266, 2009.
- [57] J. W. KIM, S. G. HONG, Y. LEE ET AL. An Extension of the Non-negative Scattering Cross Section Generation Method for a Three Dimensional Geometry with Unstructured

- Tetrahedral Mesh. *Journal of the Korean Physical Society*, **59**(2), p. 2079–2083, August 2011.
- [58] J. P. ODOM. *Neutron Transport with Highly Anisotropic Scattering*. Thèse de doctorat, Kansas State University, 1975.
- [59] J. P. ODOM, J. K. SHULTIS. Anisotropic neutron transport without legendre expansions. *Nuclear Science & Engineering*, **59**, p. 278–281, 1976.
- [60] A. TAKAHASHI, J. TAMAMOTO, M. EBISUYA ET AL. A Method for Calculating Anisotropic Neutron Transport Using the Scattering Kernel without Polynomial Expansion. *Journal of Nuclear Science and Technology*, **16**(1), 1979.
- [61] J. YAMAMOTO, A. TAHASHI, Y. SAKAKIHARA ET AL. Neutron transport calculations by using double-differential cross sections. *Journal of Nuclear Science and Technology*, **19**(4), p. 276–288, April 1982.
- [62] A. TAKAHASHI, D. RUSCH. *Fast Rigorous Numerical Method for the Solution of the Anisotropic Neutron Transport Problem and the NITRAN System for Fusion Neutronics Application, Part I*. Rapport KfK 2832/I, Kernforschungszentrum Karlsruhe, July 1979.
- [63] W. W. ENGLE JR. *A User's Manual for ANISN, a One-dimensional Discrete Ordinates Transport Code With Anisotropic Scattering*. Rapport K-1693, Union Carbide Corporation, 1967.
- [64] A. TAKAHASHI, D. RUSCH. *Fast Rigorous Numerical Method for the Solution of the Anisotropic Neutron Transport Problem and the NITRAN System for Fusion Neutronics Application, Part II*. Rapport KfK 2832/II, Kernforschungszentrum Karlsruhe, October 1979.
- [65] H. BROCKMANN. Treatment of anisotropic scattering in numerical neutron transport theory. *Nuclear Science & Engineering*, **77**, p. 377–414, 1981.
- [66] J. LIGOU, P. MIAZZA. Numerical Improvements of the Exact Kernel Method in Transport Theory. *Nuclear Science & Engineering*, **99**, p. 109–117, 1988.
- [67] P. MIAZZA, J. LIGOU. The Exact Kernel (I^*) Method Applied to the Charged-Particle Transport Equation. *Nuclear Science & Engineering*, **105**, p. 59–78, 1989.
- [68] B. BORSARI, R. FIORESI, T. TROMBETTI. Nonnegativity of the anisotropic scattering source in two-angle (μ, φ) transport. *Nuclear Science & Engineering*, **112**, p. 301–320, 1992.
- [69] J. M. DEL GRANDE, K. MATHEWS. Nonnegative Anisotropic Group Cross Sections : A Hybrid Monte Carlo-Discrete Elements-Discrete Ordinates Approach. *Nuclear Science & Engineering*, **139**, p. 33–46, 2001.
- [70] S. A. W. GERSTL. *The Analytical Treatment of Arbitrary Anisotropic Scattering in the Energy Dependent Transport Theory*. Rapport FBK 68-12, BMWF, April 1968.

- [71] J. YVON. La Diffusion Macroscopique des Neutrons : Une Méthode d'Approximation. *Journal of Nuclear Energy*, **4**, p. 305–318, 1957.
- [72] E. A. ATTIA, A. A. HARMS. A New Expansion for Highly Anisotropic Neutron-Nucleus Scattering. *Nuclear Science & Engineering*, **59**, p. 319–325, 1976.
- [73] DAVID W. GERTS. *Efficient and Accurate Computation of Non-Negative Anisotropic Group Scattering Cross Sections For Discrete Ordinates and Monte Carlo Radiation Transport*. Thèse de doctorat, USAF, 2002.
- [74] D. GERTS, K. MATHEWS. Non-negative Anisotropic Piecewise-Average Multigroup Cross Sections. In *Proceedings of International Conference on Mathematics, Computational Methods & Reactor Physics*, Gatlinburg, Tennessee, 2003. M&C 2003.
- [75] A. CALLOO, J. F. VIDAL, R. LE TELLIER, G. RIMPAULT. Angular Finite Volume Method For Solving the Multigroup Transport Equation with Piecewise Average Scattering Cross Sections. In *Proceedings of International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering*, Rio de Janeiro, RJ, Brazil, May 2011. M&C 2011.
- [76] W. J. MIKOLS, J. K. SHULTIS. Selection of angular quadrature for anisotropic transport computations. *Nuclear Science & Engineering*, **63**(1), p. 91–109, May 1977.
- [77] M. K. PAUL. Recurrence relations for integrals of associated legendre functions. *Journal of Geodesy*, **52**(3), p. 177–190, 1978.
- [78] A. R. DIDONATO. Recurrence relations for the indefinite integrals of associated legendre functions. *Mathematics of Computation*, **38**(158), p. 547–551, 1982.
- [79] D. FOURNIER. *Analyse et Développement de Méthodes de Raffinement hp en Espace pour l'Équation de Transport des Neutrons*. Thèse de doctorat, Université de Provence, Marseille, 2011.
- [80] A. HEBERT. The Search for Superconvergence in Spherical Harmonics Approximations. *Nuclear Science & Engineering*, **154**, p. 134–173, 2006.
- [81] W. ROTHENSTEIN AND R. DAGAN. Ideal Gas Scattering Kernel for Energy Dependent Cross-Sections. *Annals of Nuclear Energy*, **25**, 1998.
- [82] M. OUISLOUMEN AND R. SANCHEZ. A Model for Neutron Scattering of Heavy Isotopes that accounts for thermal agitation Effects. *Nuclear Science & Engineering*, **107**, 1991.
- [83] L. NAYMEH. Accélération synthétique de l'équation du transport neutronique discrétisée par éléments finis discontinus. Master's thesis, Phelma - Grenoble INP, 2010.
- [84] A. CALLOO, J. F. VIDAL, R. LE TELLIER, G. RIMPAULT. Mixed Legendre Moments and Discrete Scattering Cross Sections for Anisotropy Representation. In *Pro-*

ceedings PHYSOR 2012, Knoxville, Tennessee, USA, April 2012. PHYSOR 2012 Advances in Reactor Physics Linking Research, Industry, and Education.

- [85] C. MOUNIER. *Contribution à l'étude du coefficient de température des réacteurs à eau légère*. Thèse de doctorat, Université de Paris-Sud, 1993.
- [86] J-F. VIDAL, R. LE TELLIER, P. BLAISE, G. GUILLOT, N. HUOT, O. LITAIZE, A.SANTAMARINA, N. THIOLLAY, C. VAGLIO-GODARD. Analysis of the fluole experiment for the apollo2 validation of pwr core reflectors. In *Proceedings of International Meeting on the Physics of Reactors*. PHYSOR 2008, 2008.
- [87] E. GIRARDI. *Couplage de méthodes et décomposition de domaine pour la résolution de l'équation du transport des neutrons*. Thèse de doctorat, Université d'Evry Val d'Essonne, 2004.