

UNIVERSITÉ PARIS-SUD

ECOLE DOCTORALE 534: MODÉLISATION ET INSTRUMENTATION EN PHYSIQUE, ÉNERGIES, GÉOSCIENCES ET ENVIRONNEMENT

LABORATOIRE D'ÉTUDE DE PHYSIQUE

DISCIPLINE : PHYSIQUE

THÈSE DE DOCTORAT

Soutenue le 30/10/2014 par

Li CAI

Condensation et homogénéisation des sections efficaces pour les codes de transport déterministes par la méthode de Monte Carlo

: Application aux réacteurs à neutrons rapides de GEN IV

Directeur de thèse : M. Cheikh M. DIOP
Encadrant de thèse : M. Yannick PÉNÉLIAU

Directeur de Recherche (CEA)
Ingénieur-Chercheur (CEA)

Composition du jury :

Rapporteurs : M. Alain HÉBERT
M. Alexis NUTTIN
Examineurs : M. Enrico GIRARDI
M. Laurent TASSAN-GOT
M. Christos TRAKAS

Professeur (École Polytechnique de Montréal)
Maître de Conférences HDR (PHELMA/LPSC)
Docteur (EDF)
Directeur de Recherche (Univ. PARIS SUD 11)
Docteur (AREVA)

Synthèse

Dans le cadre des études de neutronique menées pour les réacteurs de GEN-IV, les nouveaux outils de calcul des cœurs de réacteur sont implémentés dans l'ensemble du code APOLLO3 pour la partie déterministe. Ces méthodes de calcul s'appuient sur des données nucléaires discrétisées en énergie (appelées multi-groupes et généralement produites par des codes déterministes eux aussi) et doivent être validées et qualifiées par rapport à des calculs basés sur la méthode de référence Monte-Carlo. L'objectif de cette thèse est de mettre au point une technique alternative de production des propriétés nucléaires multi-groupes par un code de Monte-Carlo (TRIPOLI-4).

Dans un premier temps, après avoir réalisé des tests sur les fonctionnalités existantes de l'homogénéisation et de la condensation avec des précisions accrues accessibles aujourd'hui, des incohérences sont mises en évidence. De nouveaux estimateurs de paramètres multi-groupes ont été développés et validés pour le code TRIPOLI-4 à l'aide de ce code lui-même, puisqu'il dispose de la possibilité d'utiliser ses propres productions de données multi-groupes dans un calcul de cœur.

Ensuite, le problème de l'anisotropie, notamment introduite par la fuite des neutrons a été étudié. Une technique de correction de la diagonale de la matrice de la section efficace de transfert par diffusion à l'ordre P1 (nommée technique IGSC et basée sur une évaluation du courant des neutrons par une approximation introduite par Todorova) est développée. Une amélioration de la technique IGSC dans la situation où les propriétés matérielles du réacteur changent drastiquement en espace est apportée. La solution est basée sur l'utilisation d'un nouveau courant qui est projeté sur l'axe X et plus représentatif dans la nouvelle situation que celui utilisant les approximations de Todorova, mais valable seulement en géométrie 1D.

A la fin, un modèle de fuite B1 homogène est implémenté dans le code TRIPOLI-4 afin de produire des sections efficaces multi-groupes avec un spectre critique calculé dans l'approximation du mode fondamental. Ce modèle de fuite est analysé et validé rigoureusement en comparant avec les autres codes : Serpent et ECCO ; ainsi qu'avec un cas analytique.

Suivant cette logique ci-dessus, ce document est composé par trois parties qui sont respectivement : les nouveaux estimateurs des constantes multi-groupes en Monte-Carlo ; le traitement de l'anisotropie et le modèle de fuite.

Partie I : Estimateurs des constantes multi-groupes en Monte-Carlo

Dans un premier temps, on présente l'équation de Boltzmann en énergie continue qui relève une relation d'équilibre entre les disparitions et les apparitions des neutrons.

$$\vec{v} \cdot (\hat{\Omega} \varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega})) + \Sigma_t(\vec{r}, E) \varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}) = \int_0^\infty dE' \int_0^{4\pi} d^2\hat{\Omega}' \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega}) \varphi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}') + q(\vec{r}, E, \hat{\Omega})$$

Eq (1.1)

avec $q(\vec{r}, E, \hat{\Omega})$: le terme de source.

Ensuite, si on commence par le cas le plus simple, c'est-à-dire, pour une géométrie homogène infinie, Eq (1.1) peut être simplifiée comme suivante :

$$\Sigma_t(E) \phi(E) = \int_0^\infty \Sigma_s^{eff}(E' \rightarrow E) \phi(E') dE' + \frac{1}{k_\infty} \int_0^\infty \chi_f(E' \rightarrow E) \nu \Sigma_f(E') \phi(E') dE'$$

Eq (1.2)

Le terme de source $q(\vec{r}, E, \hat{\Omega})$ est bien remplacé dans Eq (1.2) par ses composants explicites $\frac{1}{k_\infty} \int_0^\infty \chi_f(E' \rightarrow E) \nu \Sigma_f(E') \phi(E') dE'$.

On souligne ici la définition de la section de diffusion effective qui prend en compte la multiplication : $\Sigma_s^{eff}(E' \rightarrow E) = \Sigma_s(E' \rightarrow E) + 2\Sigma_{(n,2n)}(E' \rightarrow E) + 3\Sigma_{(n,3n)}(E' \rightarrow E) + 4\Sigma_{(n,4n)}(E' \rightarrow E)$.

Si on discrétise Eq (1.2) en énergie, on obtient alors une autre forme d'équation de Boltzmann en multi-groupe qui est donnée ci-dessous :

$$\Sigma_{t,g} \phi_g = \sum_{g'} P(g' \rightarrow g) \xi_{g'}^{exces} \Sigma_{s,g'}^{eff} \phi_{g'} + \frac{1}{K_\infty} \sum_{g'} \chi_f^{g' \rightarrow g} \nu \Sigma_{f,g'} \phi_{g'} \quad \text{Eq (1.3)}$$

Le travail de condensation consiste maintenant à définir ces paramètres multi-groupes qui sont les suivants: la section totale du groupe g $\Sigma_{t,g}$; la probabilité de transfert du groupe g' vers groupe le g $P(g' \rightarrow g)$; le poids d'excès du groupe g ξ_g^{exces} ; la section de diffusion effective du groupe g $\Sigma_{s,g}^{eff}$; le spectre de fission du groupe g' vers le groupe g $\chi_f^{g' \rightarrow g}$ et la section de production du groupe g $\nu \Sigma_{f,g}$.

Parmi toutes ces sections efficaces multi-groupes, les plus faciles à définir sont les sections efficaces à une dimension. On les nomme $\Sigma_{j,g}$, où j représente le type de réaction, par exemple, la collision totale ou la fission ou la diffusion. Ce type de section efficace multi-groupe est directement pondérée par le flux scalaire comme montré dans Eq (1.4).

$$\Sigma_{j,g} = \frac{\int_{E \in g} \Sigma_j(E) \phi(E) dE}{\int_{E \in g} \phi(E) dE} \quad \text{Eq (1.4)}$$

Dans la simulation de TRIPOLI-4, le flux scalaire $\phi(E, \vec{r})$ est déduit de la densité de collision $\Psi(E, \vec{r})$ qui peut être estimée par le poids de neutron noté comme $\omega(E, \vec{r})$ à chaque collision. Ainsi, l'estimateur de section efficace multi-groupe telle que décrite au-dessus est donné comme dans Eq (1.5).

$$\hat{\Sigma}_{j,g} = \frac{\sum_i \Sigma_j(E_i, \vec{r}_i) \cdot \frac{\omega(E_i, \vec{r}_i)}{\Sigma_t(E_i, \vec{r}_i)}}{\sum_i \frac{\omega(E_i, \vec{r}_i)}{\Sigma_t(E_i, \vec{r}_i)}} \quad \text{Eq (1.5)}$$

Où l'indice i marque toutes les collisions dont l'énergie et la position appartiennent au macro-groupe g et au macro-volume V dans lesquels l'homogénéisation et la condensation sont réalisées.

Ce dernier type de section efficace est proprement implémenté dans la version existante de TRIPOLI-4. Par contre, le souci se trouve sur les trois autres paramètres multi-groupes que l'on va les expliquer dans la suite.

Probabilité de transfert $P(g' \rightarrow g)$

La définition corrigée de cette probabilité de transfert énergétique du groupe g' vers le groupe g est directement donnée dans Eq (1.6).

$$P(g' \rightarrow g) = \frac{\int_{E \in g} \int_{E' \in g'} [\Sigma_s(E' \rightarrow E) + X \Sigma_{(n,Xn)}(E' \rightarrow E)] \phi(E') dE' dE}{\int_{E' \in g'} [\Sigma_s(E' \rightarrow E) + X \Sigma_{(n,Xn)}(E' \rightarrow E)] \phi(E') dE'} \quad \text{Eq (1.6)}$$

Son estimateur est ensuite donné par Eq (1.7) :

$$\hat{P}(g' \rightarrow g) = \frac{\sum_i \omega(E'_i, \vec{r}_i) \sum_j P_j(E'_i, \vec{r}_i) \times P_{nabs}^j(E'_i, \vec{r}_i) \sum_k P_j^k(E'_i, \vec{r}_i) \times \{1, X\} \times \Pi(E_{i,j}^k \in g)}{\sum_i \omega(E'_i, \vec{r}_i) \sum_j P_j(E'_i, \vec{r}_i) \times P_{nabs}^j(E'_i, \vec{r}_i) \sum_k P_j^k(E'_i, \vec{r}_i) \times \{1, X\}} \quad \text{Eq (1.7)}$$

Le numérateur et le dénominateur dans l'équation ci-dessus sont respectivement les scores pour les événements de diffusion qui partent du groupe g' et arrivent dans le groupe g et pour tous les événements de diffusion qui partent du groupe g'. Ils sont calculés par une suite de probabilités d'échantillonnage.

- $P_j = \frac{N_j \sigma_t^j}{\Sigma_t}$: la probabilité de choisir l'isotope j lors de la collision ;
- $P_{nabs}^j = \frac{\sigma_s^j + \sigma_{(n,Xn)}^j}{\sigma_t^j}$: la probabilité de non-absorption pour l'isotope j ;
- $P_j^k(E'_i, \vec{r}_i)$: la probabilité de choisir l'interaction de diffusion de type k ;
- $\Pi(E_{i,j}^k \in g)$: la fonction porte pour aider à sélectionner les événements de diffusion arrivant dans le groupe g.

Si l'interaction sélectionnée est une diffusion pure, la valeur 1 est stockée ; si c'est une diffusion avec multiplication des neutrons, alors la multiplicité X est stockée.

Poids d'excès $\xi_{g'}$ ^{exces}

Ce paramètre indique le rapport entre les apparitions des neutrons et les disparitions des neutrons par diffusion. Ainsi, il est défini par la formule suivante :

$$\xi_{g'}^{exces} = \frac{\int_{E' \in g'} [\Sigma(E', \vec{r}) + X \Sigma_{(n, Xn)}(E')] \phi(E') dE'}{\int_{E' \in g'} [\Sigma(E', \vec{r}) + \Sigma_{(n, Xn)}(E')] \phi(E') dE'} \quad \text{Eq (1.8)}$$

Son estimateur est aussi donné grâce au poids du neutron dans Eq (1.9).

$$\xi_{g'}^{exces} = \frac{\sum_i \omega(E_i', \vec{r}_i) \times P_{nabs}(E_i', \vec{r}_i) \times \xi^{exces}(E_i', \vec{r}_i)}{\sum_i \omega(E_i', \vec{r}_i) \times P_{nabs}(E_i', \vec{r}_i)} \quad \text{Eq (1.9)}$$

- $P_{nabs}(E_i', \vec{r}_i) = \frac{\Sigma_s(E_i', \vec{r}_i) + \Sigma_{(n, Xn)}(E_i', \vec{r}_i)}{\Sigma_t(E_i', \vec{r}_i)}$: la probabilité de non-absorption macroscopique ;
- $\xi^{exces}(E_i', \vec{r}_i) = \frac{\Sigma_s(E_i', \vec{r}_i) + X \Sigma_{(n, Xn)}(E_i', \vec{r}_i)}{\Sigma_s(E_i', \vec{r}_i) + \Sigma_{(n, Xn)}(E_i', \vec{r}_i)}$: le poids d'excès ponctuel.

Il est important de noter que cette probabilité de non-absorption marquée dans Eq (1.9) n'est pas le même que celle utilisée dans Eq (1.7) parce qu'elle est calculée avec les sections efficaces macroscopiques et non avec les sections efficaces microscopiques qui sont utilisées pour la probabilité de transfert.

Spectre de fission $\chi_f^{g' \rightarrow g}$

L'originalité de notre spectre de fission est qu'il est matriciel. C'est-à-dire qu'il dépend à la fois du groupe de départ et du groupe d'arrivée. Cela fait la différence par rapport du traitement déterministe qui, en revanche, ne distingue pas les différents groupes de départ. Un autre point important à souligner est qu'il ne faut pas oublier de prendre en compte les fissions retardées qui peuvent éventuellement entraîner environ 200 pcm de biais pour un assemblage de type RNR. Donc, la définition de ce spectre de fission est donnée par Eq (1.10).

$$\chi_f^{g' \rightarrow g} = \frac{\int_{E \in g} \int_{E' \in g'} \phi(E') \Sigma_t(E') \times [\chi_f^p(E' \rightarrow E) \nu^p + \chi_f^d(E' \rightarrow E) \nu^d] \frac{\Sigma_f(E')}{\Sigma_t(E')} dE' dE}{\int_{E' \in g'} \phi(E') \Sigma_t(E') \times \left[\frac{\nu^p \Sigma_f(E')}{\Sigma_t(E')} + \frac{\nu^d \Sigma_f(E')}{\Sigma_t(E')} \right] dE'}$$

Eq (1.10)

Son estimateur est aussi donnée directement en-dessous :

$$\hat{\chi}_f^{g' \rightarrow g} = \frac{\sum_i \omega(E'_i, \vec{r}_i) \times \sum_j \nu_j \frac{\Sigma_f(E'_i, \vec{r}_i)}{\Sigma_t(E'_i, \vec{r}_i)} \times \Pi(E_i \in g)}{\sum_i \omega(E'_i, \vec{r}_i) \times \sum_j \nu_j \frac{\Sigma_f(E'_i, \vec{r}_i)}{\Sigma_t(E'_i, \vec{r}_i)}} \quad \text{Eq (1.11)}$$

avec l'indice j qui inclut les fissions prompts et aussi retardés.

Comparaison des sections efficaces multi-groupes entre ECCO et TRIPOLI-4

Après avoir corrigé ces estimateurs des paramètres multi-groupes, on les applique sur l'assemblage externe de SuperPhénix en configuration homogène infinie. On compare dans un premier temps les sections efficaces multi-groupes produites par TRIPOLI-4 avec celles venant d'ECCO comme montrées dans Tableau 1.1.

Paramètre	ECCO	TRIPOLI-4®	Diff.
K_∞	1,35298	1,35364±8pcm	-66pcm
Units	cm ⁻¹	cm ⁻¹ (10 ⁻³ %)	%
Σ_{t1}	1,840E-01	1,841E-01(1,7)	0,05
Σ_{t2}	2,233E-01	2,234E-01(1,4)	0,05
Σ_{t3}	2,859E-01	2,858E-01(1,1)	-0,03
Σ_{t4}	3,977E-01	3,978E-01(2,0)	0,03
Σ_{t5}	5,797E-01	5,797E-01(4,2)	0,00
Σ_{t6}	5,350E-01	5,362E-01(15)	0,22
Σ_{a1}	7,212E-03	7,213E-03(6,3)	0,01
Σ_{a2}	3,608E-03	3,608E-03(1,4)	0,00
Σ_{a3}	3,762E-03	3,762E-03(1,8)	0,00
Σ_{a4}	7,158E-03	7,168E-03(3,3)	0,14
Σ_{a5}	1,642E-02	1,641E-02(12)	-0,06
Σ_{a6}	4,217E-02	4,239E-02(49)	0,52
$\nu \Sigma_{f1}$	1,885E-02	1,884E-02(5,4)	-0,05
$\nu \Sigma_{f2}$	7,509E-03	7,508E-03(2,8)	-0,01
$\nu \Sigma_{f3}$	5,710E-03	5,710E-03(0,2)	0,00
$\nu \Sigma_{f4}$	6,368E-03	6,396E-03(2,0)	0,44
$\nu \Sigma_{f5}$	1,389E-02	1,386E-02(14)	-0,22
$\nu \Sigma_{f6}$	4,407E-02	4,430E-02(59)	0,52

Tableau 1.1 Comparaison des sections efficaces multi-groupes calculées par ECCO et TRIPOLI-4 sur l'assemblage externe de SuperPhénix en configuration homogène et infinie

Avant de faire la comparaison, on souligne qu'ECCO est un code de réseau déterministe qui est déjà validé pour les cellules rapides. Les données d'entrées utilisées par ces deux codes sont identiques : la bibliothèque de JEFF3.1.1, plus l'option de Tables de Probabilités. Les sections efficaces produites sont à 6 groupes, un découpage utilisé dans les calculs RNR, avec les codes de la génération précédente.

Si on compare les résultats d'ECCO et de TRIPOLI-4, on voit un très bon accord dans les groupes de haute énergie. Par contre, les écarts relatifs sont plus importants dans le sixième groupe. Ce phénomène est tout à fait normal parce qu'il y a peu d'évènements de transfert

vers les groupes de basse énergie qui induit du coup une grande incertitude sur les sections efficaces produites.

Utilisation des sections efficaces multi-groupes produites par TRIPOLI-4

Dans cette section, on va examiner les comportements de ces sections efficaces produites par TRIPOLI-4 dans des calculs de cœur. Les procédures de validation sont illustrées dans la figure suivante. Tout d'abord, la simulation ponctuelle de TRIPOLI-4 donne des résultats de référence et aussi les sections efficaces multi-groupes. Ces dernières sont utilisées par la suite soit dans une simulation de TRIPOLI-4 multi-groupe soit dans une simulation de PARIS (une plateforme déterministe avec un solveur Sn). Les résultats de ces derniers calculs vont être comparés par rapport à ceux obtenus par TRIPOLI-4 en simulation ponctuelle.

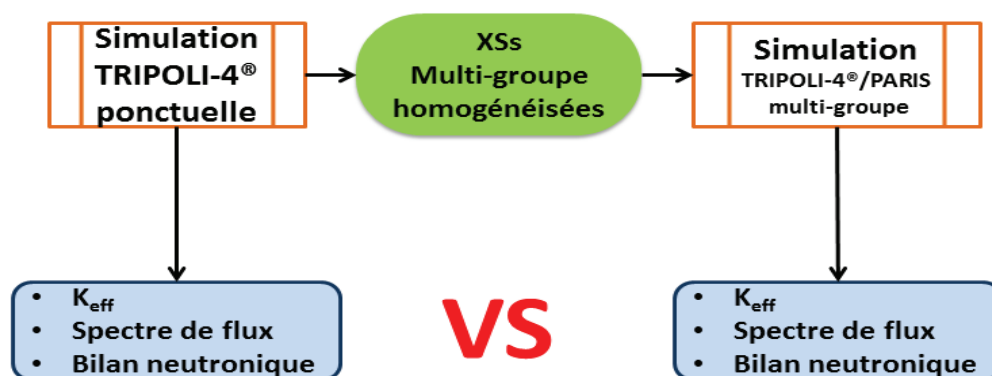


Figure 1.1 La méthodologie de validation des sections efficaces produites par TRIPOLI-4

L'exemple que l'on va montrer est toujours le même assemblage de SuperPhénix avec les données d'entrées JEFF3.1.1. On va comparer d'abord les facteurs de multiplication infinie calculés par différentes simulations et ensuite les spectres de flux ainsi que les taux de production.

1. Comparaisons des K_{inf}

Le tableau 1.2 résume les facteurs de multiplication calculés pour l'assemblage externe de SuperPhénix (SPX2) et aussi leurs écarts en pcm ($1 \text{ pcm} = 10^{-5}$). Les valeurs entre parenthèses sont leurs écarts types associés (σ) qui sont aussi en pcm. D'après la dernière ligne du Tableau 1.2, on peut conclure qu'il y a un très bon accord entre les simulations de TRIPOLI-4 multi-groupe et ponctuelle. En effet, les écarts sont compris dans l'intervalle de confiance à 2σ .

SPX2	6GR NJOY	33GR NJOY	6GR TABP	33GR TABP
Ponctuelle	1,34857(12)	1,34857(12)	1,35364(8)	1,35364(8)
Multi-groupe	1,34826(17)	1,34851(17)	1,35326(54)	1,35352(2)
K_{∞} (pcm)	-31(21)	-6(21)	-38(55)	-12(8)

Tableau 1.2 Comparaisons des Kinf calculés sur l'assemblage externe de SuperPhénix à la configuration homogène et infinie

2. Comparaisons des spectres de flux

Dans la figure suivante, on montre d'abord les spectres de flux calculés respectivement par TRIPOLI-4 ponctuel (courbe rouge) et multi-groupe (courbe bleu) qui sont très bien superposés. En plus, la figure de droite (courbe rouge) révèle que les différences relatives entre ces deux résultats sont très bien couvertes par trois écarts types dans les groupes importants.

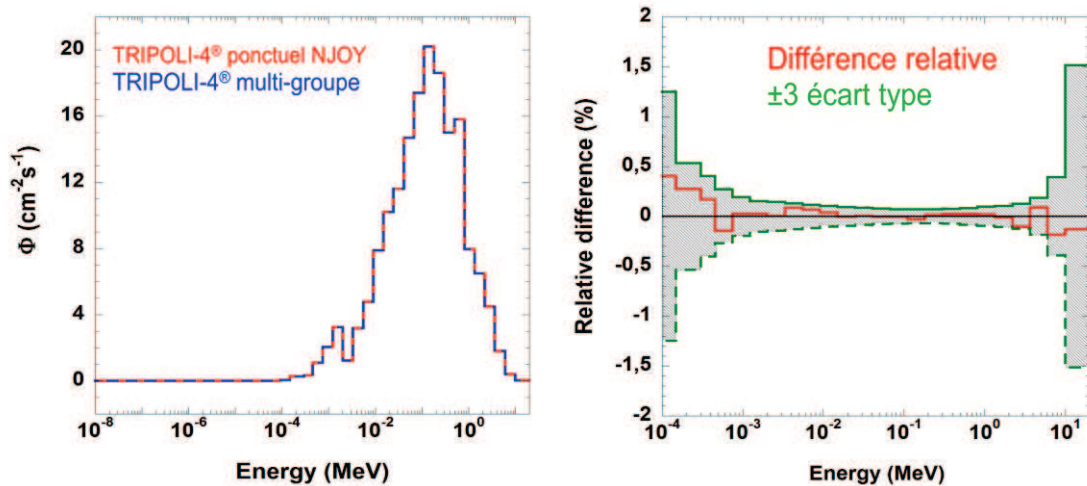


Figure 1.2 Comparaisons des spectres de flux pour SPX2 obtenus par simulation TRIPOLI-4 multi-groupe et ponctuelle

3. Comparaisons des taux de production

Après avoir validé les facteurs de multiplication infinie et les spectres de flux, on continue à comparer le bilan neutronique, notamment les taux de production. Les résultats de simulation ponctuelle et multi-groupe de TRIPOLI-4 sont donnés dans la Figure 1.3. La partie gauche contient les valeurs absolues en pcm qui confirment que les deux simulations sont très cohérentes entre elles. La partie droite illustre les écarts entre ces deux dernières simulations, toujours en pcm. On voit que pour les groupes de haute énergie, les différences de productions sont bien couvertes par 3 écarts types. Par contre, dans les groupes de basse énergie, les écarts sont plus importants. Cela peut être expliqué du fait qu'il y a peu de statistiques sur les transferts vers les énergies basses.

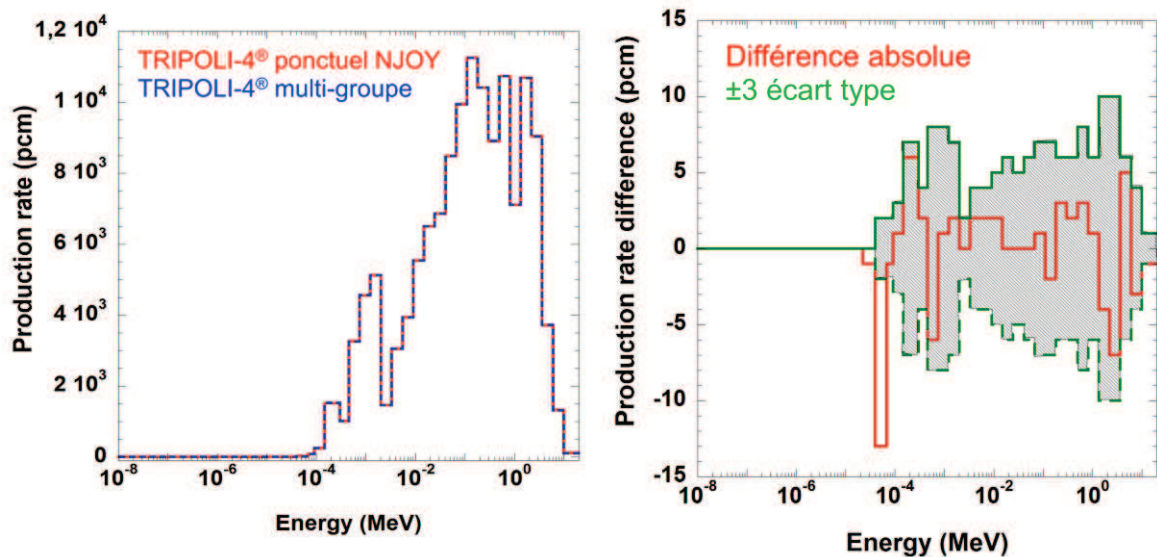


Figure 1.3 Comparaisons des taux de production pour SPX2 obtenus par simulation TRIPOLI-4 multi-groupe et ponctuelle

En conclusion, dans la première partie de mon travail, on essaie de valider les fonctionnalités de condensation dans TRIPOLI-4 pour les cas les plus simples, c'est-à-dire, où il n'y a pas de fuite et le milieu est totalement homogène. Théoriquement, pour ces genres de géométries homogènes et infinies, les facteurs de multiplication et le bilan de neutronique doivent être exactement respectés entre les calculs ponctuels et multi-groupe. Après avoir implémenté les nouveaux estimateurs qui sont notamment : la probabilité de transfert ; le poids d'excès et le spectre de fission, on arrive finalement à produire les sections efficaces multi-groupes qui assurent les conservations des Kinf et aussi les bilans neutroniques.

Partie II : Traitement de l'anisotropie

Dans cette partie, on rajoute la fuite des neutrons qui représente mieux la vraie simulation mais rend la problématique de l'homogénéisation et de la condensation plus compliquée à traiter. Pour cela, on a besoin d'abord d'une géométrie quasi-critique qui nous permet d'éviter les approximations utilisées dans les modèles de fuite. La figure 2.1 ci-dessous montre la procédure pour établir une configuration quasi-critique sur la base de l'assemblage externe de SuperPhénix. Les conditions limites que l'on impose sur cette configuration sont des réflexions suivant la direction axiale et le vide pour la direction radiale.

Les premiers tests sont faits avec TRIPOLI-4 en utilisant les nouveaux estimateurs que l'on a montrés précédemment. Les résultats obtenus par les simulations de TRIPOLI-4 multi-groupe et ponctuelle sont tous inclus dans le tableau 2.1 qui révèle une grande différence entre les calculs ponctuel et multi-groupe. Cela implique que les sections efficaces multi-groupes produites avec les nouveaux estimateurs dans TRIPOLI-4 ne sont pas capables de reproduire les valeurs de Keff adéquates dans des calculs de cœur.

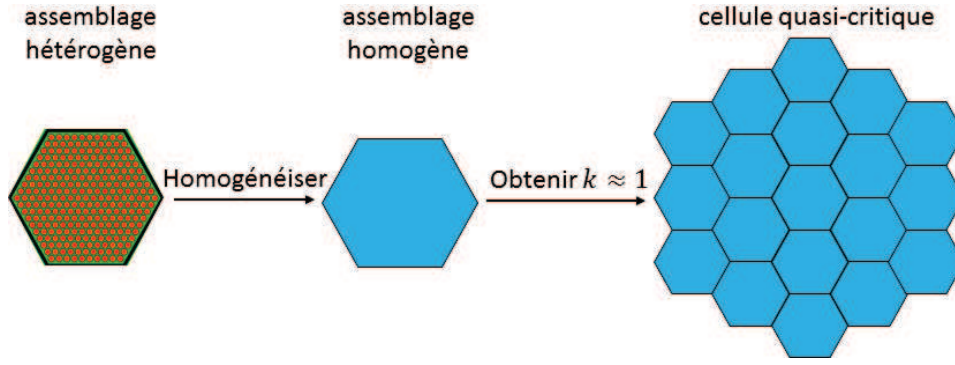


Figure 2.1 Schéma de construction de géométrie quasi-critique avec l'assemblage externe de SuperPhénix

Cas NJOY	33GR	6GR
K_{eff} ponctuel	1,01570(6)	1,01572(9)
K_{eff} multi-groupe	1,02099(10)	1,02303(9)
ΔK_{eff} (pcm)	529(12)	731(13)

Tableau 2.1 Comparaisons des K_{eff} entre les simulations de TRIPOLI-4 ponctuelle et multi-groupe sur une géométrie quasi-critique sur la base de SPX2

Cette incohérence nous oblige à vérifier comment le code TRIPOLI-4 traite les paramètres de l'anisotropie. En fait, la loi de l'anisotropie sous la forme multi-groupe est modélisée dans TRIPOLI-4 par une densité de probabilité constante par morceaux sur 20 équi-intervalles entre [-1 ; 1]. Sa définition est donnée par la formule suivante :

$$P(\mu \in I_i | g \rightarrow g') = \frac{\int_{E \in g} \int_{E' \in g'} \int_{\mu \in I_i} \Sigma_s(\mu, E' \rightarrow E) \phi(E) d\mu dE' dE}{\int_{E \in g} \int_{E' \in g'} \int_{\mu \in [-1;1]} \Sigma_s(\mu, E' \rightarrow E) \phi(E) d\mu dE' dE} \quad \text{Eq (2.1)}$$

Où μ est le cosinus de la déviation angulaire et I_i sont les 20 équi-intervalles entre -1 et 1.

Apparemment, cette construction pour la loi de l'anisotropie multi-groupe n'est pas performante pour des géométries qui sont impactées par les fuites des neutrons. Pour résoudre ce problème, on se sert du code déterministe ECCO pour bien comprendre comment calculer cette loi d'anisotropie correctement, car le code ECCO fournit des résultats jugés satisfaisants en RNR.

Les équations résolues par ECCO sont directement données ci-dessous. Il s'agit l'approximation de P1 consistant exprimée ici en géométrie infinie:

$$i b \phi_1^g - \Sigma_{t0}^g \phi_0^g + \frac{1}{2} \chi^g + \sum_{g'=1}^N \Sigma_{s0}^{g' \rightarrow g} \phi_0^{g'} = 0 \quad \text{Eq (2.2)}$$

$$i b \phi_0^g - 3 \Sigma_{t1}^g \phi_1^g + 3 \sum_{g'=1}^N \Sigma_{s1}^{g' \rightarrow g} \phi_1^{g'} = 0 \quad \text{Eq (2.3)}$$

On voit que dans ce système d'équations, il contient des sections efficaces multi-groupes pondérées par le flux scalaire et aussi quelques unes par le courant. Notamment, pour la section totale, elle possède deux formes : Σ_{t0}^g (pondérée par le flux) et Σ_{t1}^g (pondérée par le courant). Mais, au final, il n'y a qu'une seule section qui sera utilisée dans un calcul de cœur. Cet effet implique alors soit une modification de la loi d'anisotropie soit une modification sur la loi de transfert énergétique qui sont exprimées par l'Eq (2.4) ou l'Eq (2.5).

$$\widetilde{\Sigma_{s1}^{g \rightarrow g}} = \Sigma_{t0}^g - \Sigma_{t1}^g + \Sigma_{s1}^{g \rightarrow g} \quad \text{Eq (2.4)}$$

$$\widetilde{\Sigma_{s0}^{g \rightarrow g}} = \Sigma_{t1}^g - \Sigma_{t0}^g + \Sigma_{s0}^{g \rightarrow g} \quad \text{Eq (2.5)}$$

Dans ce travail, on a choisi d'utiliser la section totale pondérée par le flux et par conséquent, on doit modifier la loi de l'anisotropie d'après l'Eq (2.6).

$$\widetilde{\mu^{g \rightarrow g}} = \bar{\mu}^{g \rightarrow g} + \frac{\Sigma_{t0}^g - \Sigma_{t1}^g}{\Sigma_{s0}^{g \rightarrow g}} \quad \text{Eq (2.6)}$$

Du coup, le problème devient la manière d'obtenir la section totale pondérée par le courant avec TRIPOLI-4. Pour l'instant, on n'a pas encore le moyen d'estimer un vrai courant volumique dans le code Monte-Carlo TRIPOLI-4. On est obligé d'utiliser des approximations. Nous avons fait le choix d'utiliser un courant que l'on le nomme le courant de Todorova qui est exprimé par:

$$||\vec{j}(\vec{r}, E)|| = ||D \cdot \nabla \phi(\vec{r}, E)|| \approx D \cdot \phi(\vec{r}, E) \approx \frac{1}{3\Sigma_{tr}(\vec{r}, E)} \cdot \phi(\vec{r}, E) \approx \frac{1}{3(\Sigma_t(\vec{r}, E) - \bar{\mu}\Sigma_{s0}(\vec{r}, E))} \cdot \phi(\vec{r}, E) \quad \text{Eq (2.7)}$$

A l'aide de ce courant de Todorova, on arrive à calculer la section totale $\Sigma_{t1}^g(\vec{r})$ qui est montrée dans l'Eq (2.8).

$$\Sigma_{t1}^g(\vec{r}) = \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \Sigma_t(\vec{r}, E) \frac{\phi(\vec{r}, E)}{\Sigma_t(\vec{r}, E) - \bar{\mu}\Sigma_{s0}(\vec{r}, E)} dE}{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \frac{\phi(\vec{r}, E)}{\Sigma_t(\vec{r}, E) - \bar{\mu}\Sigma_{s0}(\vec{r}, E)} dE} \quad \text{Eq (2.8)}$$

Maintenant on assume que la loi de la distribution de μ respecte une forme linéaire : $f(\mu) = \frac{1}{2}(3\bar{\mu}\mu + 1)$. Alors, la nouvelle loi de l'anisotropie devient : $\tilde{f}(\mu) = \frac{1}{2}(3\tilde{\mu}\mu + 1) = f(\mu) + \frac{3}{2}\Delta\bar{\mu}\mu$.

Au final, les probabilités dans chaque intervalle sont ainsi changées d'après l'équation suivante :

$$\tilde{P}(\mu \in I_i) = \int_{\mu \in I_i} \tilde{f}(\mu) d\mu = P(\mu \in I_i) + \frac{3}{4} \frac{\Sigma_{t0}^g - \Sigma_{t1}^g}{\Sigma_{s0}^{g \rightarrow g}} (\mu_{i+1}^2 - \mu_i^2)$$

Cette nouvelle fonction de distribution va être utilisée dans la simulation de TRIPOLI-4 multi-groupe. Si on souhaite continuer à effectuer un calcul de cœur mais déterministe, on peut également calculer les sections de diffusions à différents ordres du développement sur les polynômes de Legendre :

$$d\Sigma_{s1}^{g \rightarrow g} = \Sigma_{s0}^{g \rightarrow g} \times \sum_{i=0}^l \alpha_i \langle \widehat{\mu^i} \rangle^{g \rightarrow g}$$

$$\text{Si } P_l(\mu) = \sum_{i=0}^l \alpha_i \mu^i$$

et $\langle \widehat{\mu^i} \rangle^{g \rightarrow g}$ correspondent les moments à l'ordre i de la variable μ mais avec la nouvelle loi de distribution.

Cette technique de correction de la distribution de probabilité pour l'anisotropie est nommée ultérieurement la technique IGSC (In-Groupe Scattering Correction). En utilisant cette technique IGSC, on arrive à améliorer les résultats (Keff, spectre de flux, bilan neutronique) pour une grande catégorie de cœurs. Ici, un exemple SNEAK7A est choisi pour montrer les améliorations. C'est un modèle simplifié d'une maquette critique de type réacteur rapide sans Na et dont le combustible est composé de MOX et de graphite. Le cœur est illustré par la Figure 2.2.

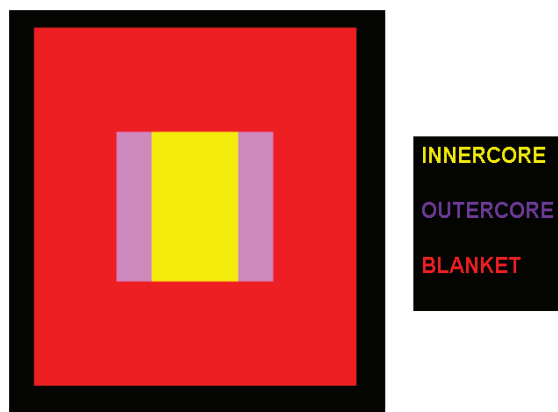


Figure 2.2 Schéma d'illustration de cœur SNEAK7A

Dans un premier temps, on montre dans le tableau 2.2 les Keff obtenus avec différentes options de simulation. La valeur de référence vient de la simulation ponctuelle de TRIPOLI-4. Et on voit que les résultats de calculs de cœur (Monte-Carlo ou déterministe) en utilisant les sections efficaces multi-groupes qui prennent en compte la technique IGSC sont globalement améliorés par rapport à ceux qui n'ont pas utilisé la méthode IGSC.

	TRIPOLI-4® ponctuel	TRIPOLI-4® MG (IGSC)	TRIPOLI-4®MG (non IGSC)	PARIS (IGSC)	PARIS (non IGSC)
K_{eff}	1.00665(4)	1.00511(9)	1.01018(9)	1.00476	1.00978
Δk_{eff} (pcm)	-----	-155(10)	+353(10)	-189(4)	+313(4)

Tableau 2.2 Comparaison des Keff pour SNEAK7A à 33-groupe

Si on continue à analyser le spectre de flux, on peut conclure d'après la Figure 2.3 que le spectre de flux calculé avec les sections efficaces multi-groupes obtenu en utilisant la technique IGSC est plus proche de la référence par rapport à celui qui n'a pas utilisé la technique IGSC.

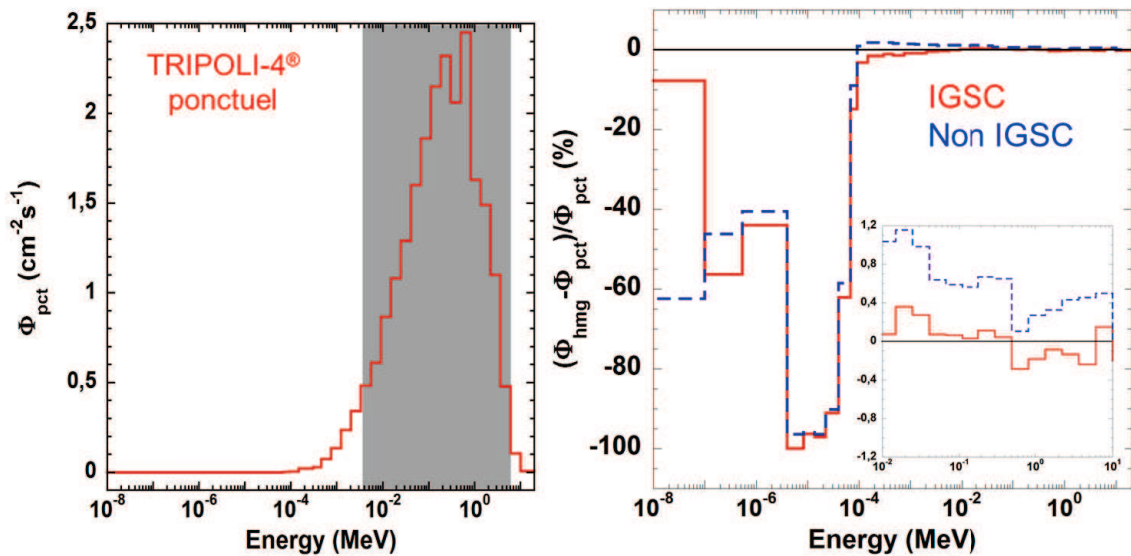


Figure 2.3 Comparaison de spectre de flux pour SNEAK7A à 33-groupe

Cette technique IGSC en utilisant le courant approximatif de Todorova est également appliquée aux différents cas qui sont présentés dans le Tableau 2.3. On a aussi montré les différentes valeurs de Keff obtenues avec ou sans l'utilisation de la technique IGSC (courant Todorova). On peut trouver que pour la plupart des cœurs testés, une correction d'anisotropie avec le courant de Todorova peuvent de mieux conserver les Keff. Par contre, pour deux cas particuliers (ZONA2B et SPX), l'utilisation de la technique IGSC a beaucoup dégradé la valeur de Keff estimée.

Cas	Géométries	K_{eff} Référence	Δk_{eff} (pcm) non IGSC	Δk_{eff} (pcm) IGSC
HMF001	homog1D	0,99678(0,4)	+99(6)	+58(6)
HMF004	homog1D	0,99530(1,8)	-192(11)	-403(9)
PMF001	homog1D	1,00020(0,4)	+73(2)	+47(2)
SNEAK7A	homog2D	1,00665(4)	+353(10)	-155(10)
ZONA2A	homog2D	1,00832(4)	+499(10)	-255(10)
ZONA2B	homog2D	1,00941(5)	+1303(10)	-1919(10)
SPX-RZ	homog2D	1,05965(6)	+314(11)	-26(11)
MAS1B	hétéro3D	1,00333(5)	+2531(11)	+451(11)
SPX	hétéro3D	1,00424(5)	+222(9)	-4483(9)

Tableau 2.3 Comparaisons des Keff pour différents cas testés

Pour y résoudre ce problème, on a dû analyser le courant Todorova qui entraîne des approximations majeures qui ne sont éventuellement pas valables pour ces cas spéciaux. C'est-à-dire des géométries qui contiennent des milieux qui sont fortement hétérogènes.

Donc un nouveau courant qui est censé être plus représentatif est calculé dans TRIPOLI-4. Pour l'instant, il est limité à des géométries à 1D. On a vraiment prouvé qu'avec ce nouveau courant, la correction IGSC arrive à beaucoup améliorer les valeurs de Keff estimées.

Pour conclure la deuxième partie de ce travail, il a pu être montré qu'il était nécessaire d'introduire de la correction d'anisotropie pour bien prendre en compte l'effet de fuite de neutrons dans un calcul multi-groupe de cœur. Cette technique de correction IGSC a besoin justement d'une estimation du courant adéquate du système que l'on étudie. Pour des situations générales, un courant approximatif Todorova suffit. Mais pour des géométries qui sont fortement hétérogènes, un courant plus précis est nécessaire.

Partie III : Modèle de fuite

A la fin de ce travail, on cherche à implémenter un modèle de fuite dans TRIPOLI-4 pour nous permettre d'effectuer des calculs d'assemblage mais avec des spectres critiques qui représentent la situation du cœur.

Pour commencer ce travail, on a choisi le modèle le plus souvent utilisé : B1 homogène qui correspond aux équations ci-dessous.

$$\Sigma_{t,g}\phi_g + d_g B^2 \phi_g = \sum_{g'=1}^G \Sigma_{s,0}^{g' \rightarrow g} \phi_{g'} + \frac{\chi_g}{k_{\text{eff}}} \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_f^{g'} \phi_{g'} \quad \text{Eq (3.1)}$$

$$d_g = \frac{1}{\Sigma_{t,g}\gamma_g} \left\{ \frac{1}{3} + \sum_{g'=1}^G \Sigma_{s,1}^{g' \rightarrow g} \frac{\phi_{g'}}{\phi_g} d_{g'} \right\} \quad \text{Eq (3.2)}$$

Les sections efficaces multi-groupes dans les équations ci-dessus sont des constantes connues qui sont fournies par la simulation de TRIPOLI-4. Les inconnues à trouver sont les flux multi-groupes et les coefficients de diffusion.

L'algorithme que l'on a implémenté dans TRIPOLI-4 pour résoudre ces équations est illustré par le Figure 3.1. Il est généralement composé par deux parties : la partie gauche est la simulation ponctuelle de TRIPOLI-4 ; la droite est le module qui se charge de résoudre les équations B1 homogènes. Les points innovants de notre algorithme par rapport à ceux qui sont utilisés dans les autres codes, par exemple Serpent ou ECCO, sont principalement les suivants :

- Les sections efficaces multi-groupes calculées par TRIPOLI-4 sont pondérées par les spectres critiques ;
- Les coefficients de diffusion sortis de la solution des équations B1 homogènes combinés au Laplacien critique ($d_g B^2$) sont réutilisés dans la simulation ponctuelle de TRIPOLI-4 comme une section efficace d'absorption fictive.
- Les deux parties sont couplées et des itérations sont réalisées jusqu'à ce que l'on atteigne la vraie criticité du point de vue de la simulation TRIPOLI-4 ponctuelle.

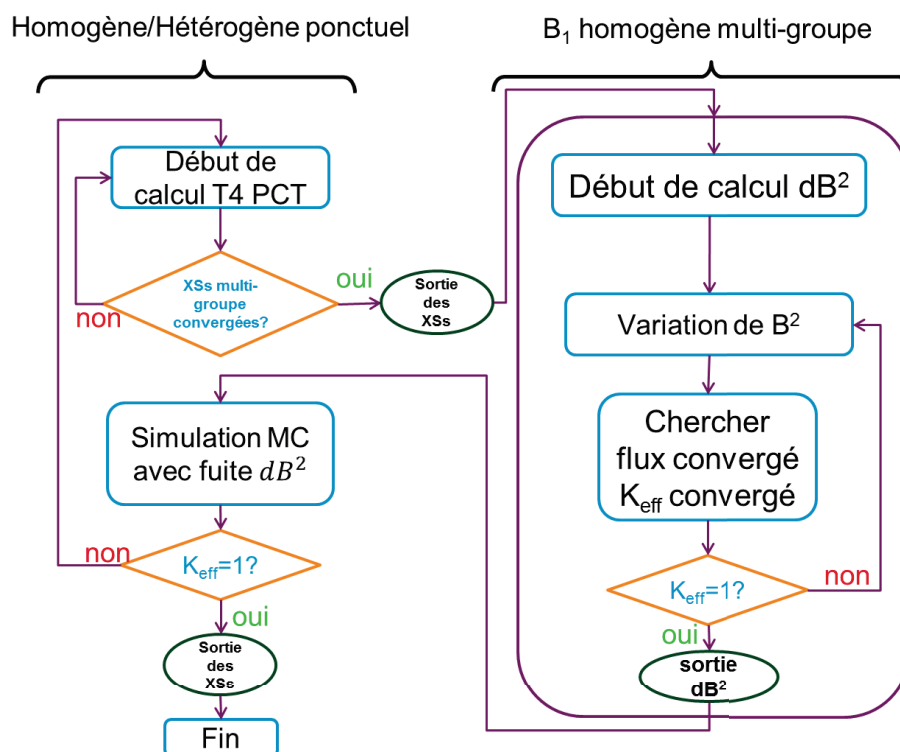


Figure 3.1 L'algorithme implémenté dans TRIPOLI-4 pour le modèle de fuite B1 homogène

Cet algorithme est appliqué sur un assemblage homogène de ZPPRCF (Zero Power Physics Reactor Double Colum Fuel) qui représente une grande probabilité de fuite (42%). Les résultats sont comparés avec un calcul analytique mais également deux autres codes : Serpent et ECCO.

Dans cette synthèse, on montre seulement les résultats obtenus pour les valeurs de Laplacien critique dans le Tableau 3.1. On voit que les résultats des modèles de fuite sont globalement cohérents par rapport à celui de référence de l'expérience numérique. Cela prouve que le modèle de fuite implémenté dans TRIPIOLI-4 est capable de reproduire les coefficients de fuite correctement.

	Expérience numérique	Modèle de fuite B1 homogène (33GR)		
		TRIPOLI-4®	Serpent 2.1.16	ECCO
B ² (10 ⁻³ .cm ⁻²)	2.869	2.812	2.807	2.747
Diff. Rel(%)	-----	-2.0	-2.2	-4.3

Tableau 3.1 Comparaison des valeurs de Laplacien critique calculés sur l'assemblage ZPPRDCF homogène

Des analyses sont aussi faites sur les autres résultats obtenus par notre modèle de fuite, notamment les spectres de flux critique ; les taux de fuite par groupe ; les sections efficaces multi-groupes pondérées par les flux critiques. On a observé la même cohérence sur ces résultats entre les différents modèles de fuite et ainsi l'expérience numérique.

Enfin, on conclut que l'algorithme de modèle de fuite implémenté dans TRIPIOLI-4 est validé pour calculer des assemblages homogènes. Surtout il arrive à produire les paramètres qui caractérisent les fuites des neutrons correctement.

L'ensemble de ces développements dans TRIPIOLI-4 permet de produire des sections efficaces multi-groupes qui peuvent être utilisées dans le code de calcul de cœur SNATCH de la plateforme PARIS. Ce dernier utilise la théorie du transport qui est indispensable pour la nouvelle filière à neutrons rapides. Les principales conclusions de ce travail de thèse sont :

- La production des constants multi-groupes en Monte-Carlo est une voie intéressante (surtout pour éviter les difficultés de l'autoprotection, de l'anisotropie limitée à un certain ordre du développement en polynômes de Legendre, du traitement des géométries exactes 3D), pour valider les codes déterministes comme ECCO ou APOLLO3 ou pour produire des données pour les codes déterministes ou Monte-Carlo multi-groupes.
- Les résultats obtenus pour le moment avec les données produites par TRIPIOLI-4 sont comparables mais n'ont pas encore vraiment montré d'avantage par rapport à ceux obtenus avec des données issues de codes déterministes tels qu'ECCO.