



HAL
open science

Développement d'outils académiques pour la conception et la sûreté de réacteurs innovants : premières applications au dimensionnement de SMR refroidis à l'eau légère et chargés en thorium

Pierre Prévot

► To cite this version:

Pierre Prévot. Développement d'outils académiques pour la conception et la sûreté de réacteurs innovants : premières applications au dimensionnement de SMR refroidis à l'eau légère et chargés en thorium. Physique Nucléaire Expérimentale [nucl-ex]. Université Grenoble Alpes, 2018. Français. NNT : 2018GREAY041 . tel-02017647

HAL Id: tel-02017647

<https://theses.hal.science/tel-02017647>

Submitted on 13 Feb 2019

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 LA COMMUNAUTE UNIVERSITE GRENOBLE ALPES

Spécialité : **Physique Subatomique et Astroparticules**

Arrêté ministériel : 25 mai 2016

Présentée par

Pierre Prévot

Thèse dirigée par **Alexis Nuttin, Maître de Conférences, PHELMA (Grenoble INP)**, et
codirigée par **Nicolas Capellan, Maître de Conférences, PHELMA (Grenoble INP)**

préparée au sein du **Laboratoire de Physique Subatomique et de
Cosmologie**
dans l'**École Doctorale de Physique**

**Développement d'outils académiques pour
la conception et la sûreté de réacteurs
innovants.**

**Première application au dimensionnement
de SMR refroidis à l'eau légère et chargés
en thorium**

Thèse soutenue publiquement le « **18 octobre 2018** »,
devant le jury composé de :

M. Pablo Rubiolo Professeur à PHELMA (Grenoble INP)	Président
M. Andrea Zoia Expert au CEA	Rapporteur
M. Frédéric Damian Expert au CEA	Rapporteur
M. Sylvain David Directeur adjoint scientifique au CNRS/IN2P3	Examineur



***"Informatique : alliance d'une science inexacte et
d'une activité humaine faillible."***

Remerciements

En premier lieu, je remercie Arnaud Lucotte, directeur du LPSC, d'avoir donné une suite favorable à ce sujet de thèse, de m'avoir fourni un cadre de travail agréable et de toute la bienveillance dont il a fait preuve à chacune de nos rencontres.

Je remercie également les membres de mon jury de thèse. En particulier, je remercie vivement mes deux rapporteurs : Andrea Zoia pour sa relecture extrêmement attentive et bienveillante et Frédéric Damian pour avoir dégagé des pistes claires et pertinentes d'améliorations de ce travail. Je suis conscient des efforts dont vous avez fait preuve pour venir à bout de ce manuscrit. Le sérieux de votre relecture ainsi que votre expertise du domaine auront contribué à en améliorer la qualité. Je remercie les autres membres de mon jury, à savoir Sylvain David et Pablo Rubiolo, d'avoir accepté d'en faire partie. Je suis reconnaissant envers Sylvain David d'avoir formulé une critique objective de ce document, en soulignant à la fois les aspects positifs, l'apport de ce travail pour le CNRS et ce qui reste d'encore perfectible tant sur le fond que sur la forme. Enfin, je remercie Pablo Rubiolo, tout d'abord de m'avoir fourni un enseignement de grande qualité en cinétique des réacteurs et en thermomécanique des crayons combustibles. Je te remercie également pour tes conseils pertinents et avisés pendant ce long parcours au LPSC ainsi que pour nos discussions informelles où tu m'as fait bénéficier de ton recul et de ton expérience du domaine à la fois côté industriel et côté recherche. Je te remercie de t'être prêté au rôle du président de jury malgré les responsabilités qui t'appelaient de part ailleurs.

Bien entendu, je n'oublie pas mes deux directeurs de thèse, Alexis Nuttin et Nicolas Capellan. Alexis, tu m'as pris sous ton aile très tôt, dès le stage de M1, et ce que je sais aujourd'hui en physique des réacteurs, c'est principalement grâce à toi. Je te remercie de m'avoir proposé un sujet aussi intéressant, riche et complet que celui-ci. Tu t'es toujours montré très disponible pour les discussions même si je dois bien l'avouer, je n'en ai sans doute pas assez profité. Tu nourris un amour immodéré pour la science, la vraie, celle qui nous entoure au quotidien et la pédagogie, la recherche du message optimal pour à la fois émerveiller et instruire ton prochain. Mais ce qui m'a le plus impressionné chez toi c'est ta maîtrise tactique et stratégique de la recherche, basée sur une véritable philosophie de vie : savoir faire simple et aller à l'essentiel (*le mieux est l'ennemi du bien*).

Nico*, ton rôle dans cette thèse est loin d'avoir été négligeable. Je n'étais pas des plus brillants en thermohydraulique quand j'ai débuté la thèse et si aujourd'hui j'y comprends quelque chose et que je trouve ça passionnant, tu y es pour beaucoup ! Ton côté humain, la clarté de tes explications et ta maîtrise du sujet font qu'à mon sens tu es bien plus qu'un simple encadrant de thèse. Je te remercie sincèrement pour ton précieux soutien morale, en particulier dans les moments les plus difficiles, ainsi que pour ta franchise et ton honnêteté.

Je remercie également tous les membres du groupes physiques des réacteurs : Annick, Éric, Grégoire, Christophe, Olivier, Sébastien, Véronique et Jacob (même s'il est dans les neutrinos), pour nos repas partagés ensemble. Merci de m'avoir accueilli dans votre petit groupe et d'avoir partagés tous ces moments de rire et de convivialité. Je tiens en particulier à remercier Olivier Méplan, pour les innombrables gaufrettes qu'il m'a offertes mais aussi pour la disponibilité et le

dévouement dont il a fait preuve, pour son soutien et pour toutes les questions que j'ai eu sur SMURE ou Linux/Fedora en générale.

Je salue également tous mes compagnons de voyage d'abord Mathieu, Axel et Robin (hélas parti trop vite!) puis Sylvain et enfin Mauricio qui a ridiculisé toutes les thèses précédentes et à venir. Merci pour nos cafés, nos moments de détente ensemble et toutes nos discussions. Merci aussi à Mahfoud pour ses sages conseils et ses encouragements. Merci également à la *team MSFR* pour les cafés 10h/11h ainsi que les repas que nous avons pris ensemble. Je souhaite également un grand courage à la prochaine génération de thésards, Juan, Johann et Briec pour les moments difficiles qui vous attendent. Courage à toi aussi Gari, si tu lis ces lignes, je suis sûr que ta thèse sera formidable, compte sur moi pour y assister!

Je tiens aussi à remercier à m'excuser auprès de ma famille : je n'ai pas été très présent pendant ces trois années qui furent très intenses, mais je compte bien me rattraper à l'avenir. Merci à vous tous d'avoir fait le déplacement pour assister à ma soutenance de thèse et m'encourager.

Enfin, je remercie Delphine, mon amour, pour m'avoir supporté dans les pires moments mais aussi dans les meilleurs. Je te remercie pour toutes ces promenades, ces sushis, ces frozen yogourts, ces innombrables cafés, ces confidences et ces fous rires. Je te remercie d'avoir été et d'être toujours mon rayon de soleil quotidien. Merci d'être là tout simplement. J'espère maintenant qu'on va profiter de notre nouvelle vie!

Glossaire

BU_{eff} Burnup effectif, rapport entre l'énergie produite et la masse fissile disparue, $MW.j.kg^{-1}$.

at% pourcentage atomique (ou molaire).

pcm pour cent mille.

ppm partie par million (en masse).

wgt% pourcentage massique.

AGE Algorithme génétique d'évolution.

AGP Algorithme génétique de positionnement.

APRP Accident de Perte de Réfrigérant Primaire.

BATH Basic Approach of Thermalhydraulics.

BOC Beginning of cycle, début de cycle.

CANDU CANada Deterium Uranium.

CDF Cumulative Density Function.

CR Conversion Ratio.

CTC Coolant Temperature Coefficient.

CVR Coolant Void Reactivity.

DNB Departure from Nucleat Boiling.

ENDF Evaluated Nuclear Data File, format standard des données nucleaires.

EOC End of cycle, fin de cycle.

EPR European Pressurized Reactor.

FCU Fuel Evolution with Few Univers.

FIR Fissile Inventory Ratio.

FTC Fuel Temperature Coefficient.

HZP Hot Zero Power, état d'attente a chaud.

ICR Integrated Conversion Ratio.

IPG Interaction Pastille Gaine.

LOCA Loss of Coolant Accident.

MDNBR Minimal Departure from Nucleat Boiling Ratio.

MOC Middle of cycle, milieu de cycle.

MOX Mixeded Oxide.

NDM Nodal Drift Method.

PDF Probability Density Function.

PF Produits de Fission.

- REA** Rod Ejection Accident.
- REB** Réacteur à Eau Bouillante.
- REC** Rapport a l'Échauffement Critique.
- REL HFC** Reacteur à Eau Legere et Haut Facteur de Conversion.
- REP** Réacteur a Eau Pressurisee.
- REX** Retour d'experience.
- RFTC** Rapport au Flux Thermique Critique.
- RIA** Reactivity Injection Accident.
- RM** Rapport de Modération.
- RNR** Réacteur a Neutrons Rapides.
- SMR** Small Modular Reactor.
- SMURE** Serpent2/MCNP Utility for Reactor Evolution.
- ThOX** Thorium OXide.
- TLP** Thermal Lumped Parameter.
- UOX** Uranium Oxide.

Table des matières

Remerciements	3
Glossaire	5
Introduction	11
I Méthodologie	16
1 Notions de physique des réacteurs	17
1.1 La neutronique	17
1.1.1 Notion de section efficace	17
1.1.2 L'équation de Boltzmann	19
1.1.3 Approximation du transport par la diffusion	21
1.1.4 La cinétique	27
1.1.5 La dynamique	29
1.1.6 Origine du couplage entre la neutronique et la thermohydraulique	29
1.2 La thermohydraulique	30
1.2.1 La thermique du combustible	30
1.2.2 Équations de Navier-Stokes	33
1.2.3 Écoulement diphasique	39
1.3 Conception et dimensionnement de réacteurs à eau légère	44
1.3.1 Les facteurs de forme	47
1.3.2 Critères de conception	48
1.3.3 Prédimensionnement géométrique d'un SMR	54
1.3.4 Méthodologie globale de conception des cœurs	55
2 Outils dédiés à l'évaluation de sûreté de concepts innovants	57
2.1 La Nodal Drift Method (NDM)	58
2.1.1 Présentation des équations	58
2.1.2 Conservation des courants de fuite aux interfaces	59
2.1.3 Schéma numérique d'intégration	61
2.1.4 Conditions limites appliquées	67
2.1.5 Mise à l'équilibre, l'algorithme IRIS	68
2.2 Modèle de thermique minimaliste : <i>Thermal Lumped Parameter</i> (TLP)	70
2.2.1 Équations du TLP	70
2.2.2 Détermination de la conductance thermique entre le combustible et le caloporteur	72
2.3 <i>Basic Approach to ThermalHydraulics</i> (BATH)	74
2.3.1 Hypothèses de modélisations et équations discrétisées	74

2.3.2	Traitement numérique aux interfaces	83
2.3.3	Ordonnancement des calculs dans BATH	87
2.4	Couplage neutronique/thermohydraulique	88
2.4.1	Influence de la neutronique sur la thermohydraulique	88
2.4.2	Influence de la thermohydraulique sur la neutronique	89
2.4.3	Différentiation des pas de temps neutronique et thermohydraulique	92
2.5	Validation sur le benchmark minicore	93
2.5.1	État stationnaire à puissance nominale	94
2.5.2	Accident d'éjection de grappe (REA)	97
2.5.3	Modélisation de l'éjection de grappe en théorie de la diffusion	97
2.5.4	Résultats du couplage NDM/TLP	98
2.5.5	Apport d'une thermique plus réaliste : couplage NDM/BATH	103
2.6	Conclusions	107
3	Outils destinés à l'évaluation des performances du combustible des réacteurs innovants	108
3.1	Principe de SMURE	108
3.1.1	Principe d'un code Monte Carlo	109
3.1.2	Fonctionnement et hypothèses de résolution de SMURE	116
3.2	Évolution cœur réalisée avec SMURE grâce à la méthode FCU	119
3.2.1	Retour sur la construction d'une géométrie en Monte Carlo	119
3.2.2	La simulation d'assemblages en milieu infini	120
3.2.3	Extension à l'échelle cœur, la méthode FCU	121
3.3	Adaptation de la NDM au calcul d'évolution de cœur	122
3.4	Inter-comparaison FCU/NDM	125
3.4.1	Définition du cas de comparaison	125
3.4.2	Vérifications préliminaires avec SMURE	126
3.4.3	Modélisation par la NDM	128
3.4.4	Comparaison des résultats NDM/FCU	128
3.5	Évaluation préliminaire de la précision des évolutions FCU	133
3.5.1	Discrétisation axiale du combustible	133
3.5.2	Ajout des contre-réactions thermiques	135
3.6	Conclusions	138
II	Résultats et Analyses	139
4	Première application de la méthodologie de dimensionnement à un SMR chargé en Th/U	140
4.1	Intérêt du cycle thorium	140
4.1.1	Notion de cycle combustible	140
4.1.2	Les leviers de la conversion en cycle thorium dans les réacteurs à eau légère	143
4.1.3	Antagonisme burnup/conversion, un éclairage théorique du phénomène	145
4.1.4	Exploration numérique de la haute conversion par sous-moderation en cycle Th/U	151
4.1.5	Conclusions préliminaires	156
4.2	Dimensionnement d'un SMR Th/U : Étude préliminaire en assemblage infini	156
4.2.1	Système étudié et sélection de l'enrichissement	156
4.2.2	Première approche des coefficients de température	158
4.2.3	Gestion de la réactivité	160

4.3	Études avancées à l'échelle cœur	172
4.3.1	Méthode FCU, détermination d'un maillage d'évolution	172
4.3.2	Zonage de l'enrichissement	175
4.3.3	Rétro-action des poisons consommables sur le facteur de forme	178
4.3.4	Conséquences des zonages sur le burnup et la gestion de la réactivité	181
4.3.5	Suivi du bore soluble et du champ de température pendant l'évolution	183
4.3.6	Bilan sur les performances cycle des SMR thoriés sous-modérés	186
4.4	Évaluation de la sûreté des concepts de SMR Th/U sous-modérés sur le cas d'un accident d'éjection de grappe	188
4.4.1	Définition de l'état initial	188
4.4.2	Résultats du transitoire : revue des paramètres globaux à l'échelle cœur	191
4.4.3	Revue des critères locaux de sûreté	200
4.4.4	Apport de la sûreté au design	204
4.5	Conclusions sur la méthodologie de conception et le potentiel des SMR Th/U	210
5	Raffinement méthodologique et application à un SMR chargé en Th/Pu	213
5.1	Intérêt du combustible Th/Pu	213
5.2	Étude préliminaire en assemblage infini	215
5.2.1	Choix du vecteur isotopique du plutonium	216
5.2.2	Gestion de la réactivité par un continuum de poisons consommables	223
5.3	Apport d'un rechargement fractionné	233
5.3.1	Méthodologie d'évolution 2-batches en milieu infini	233
5.3.2	Application de poisons consommables à une gestion multi-batch	236
5.4	Études avancées de cœur	242
5.4.1	Aplatissement du profil radial de puissance du cœur	242
5.4.2	Adaptation de l'empoisonnement à chaque univers en évolution	246
5.4.3	Évaluation thermohydraulique du cœur	249
5.4.4	Évolution avec bore et contre-réaction thermique moyennée	250
5.5	Apport de la sûreté au design	253
5.5.1	Définition de la situation accidentelle choisie	253
5.5.2	Résultats du transitoire d'éjection de grappe	259
5.6	Conclusions sur le potentiel des SMR Th/Pu	265
	Conclusions et perspectives	268
A	Outils dédiés à l'analyse de sûreté	271
A.1	Analyse de stabilité de la NDM	271
A.1.1	Équation de la diffusion et schéma aux différences finies	271
A.1.2	Propriétés des schémas numériques	271
A.1.3	Schéma explicite : Euler explicite d'ordre 1	272
A.1.4	Schéma implicite : Euler implicite d'ordre 1	279
A.1.5	Schémas d'ordre élevé	280
A.1.6	Conclusion sur la relation entre stabilité et algorithme d'intégration	284
A.1.7	Enrichissement (physique) de l'équation de la diffusion	284
A.1.8	Conclusion sur la stabilité des équations de la diffusion neutronique pour les méthodes aux différences finies	294
A.2	Étude de la convergence spatiale du maillage de la NDM sur la configuration du minicore	295
A.2.1	Étude sur une représentation 2D du minicore	295
A.2.2	Cas idéalisé : minicore UOX	297

A.3	Calcul du laplacien en différences finies	300
A.3.1	Discrétisation du laplacien en différences finies	300
A.3.2	Formulations alternatives de l'opérateur laplacien en différence finies . . .	301
A.3.3	Prise en compte de la variation du coefficient de diffusion	306
A.4	Algorithmes d'intégration temporel	308
A.4.1	Algorithmes d'intégration temporel testés :	308
A.4.2	Configuration utilisée pour l'inter-comparaison	312
A.4.3	Résultats	312
A.5	Étude de stabilité du code BATH	315
A.5.1	Dans le combustible / dans la gaine	315
A.5.2	Dans le caloporteur	318
A.6	Comparaison BATH - COBRA-EN	323
A.6.1	Puissance d'assemblage imposée à $16.3 MW_{th}$ ($320 \frac{W}{cm^3}$ dans le combustible) :	323
A.6.2	Puissance assemblage imposée à $24.5 MW_{th}$:	327
A.6.3	Puissance assemblage imposée à $41 MW_{th}$:	328
A.6.4	Conclusion :	330
B	Annexe du Chapitre sur la conception de SMR Th/U	331
B.1	REA sur les SMR-ThU : éjection d'une seule grappe de contrôle	331
B.1.1	Coeur 17x17	332
B.1.2	Coeur 19x19	333
B.2	Modèle de cinétique point adiabatique	334
B.3	Éjection d'une grappe de contrôle dans le cas d'un coeur 21x21 dont la hauteur et le débit massique sont augmentés.	335
	Article publié dans Annals of Nuclear Energy	335
	Article de conférence GLOBAL 2017	347
	Bibliographie	361

Introduction

La double contrainte énergie-climat

Augmentation de la demande énergétique et raréfaction des ressources

Le demande énergétique de nos sociétés (cf. figure 1) ne cesse d'augmenter en particulier dans les pays émergents qui aspirent à un niveau de vie comparable à celui du monde occidental.

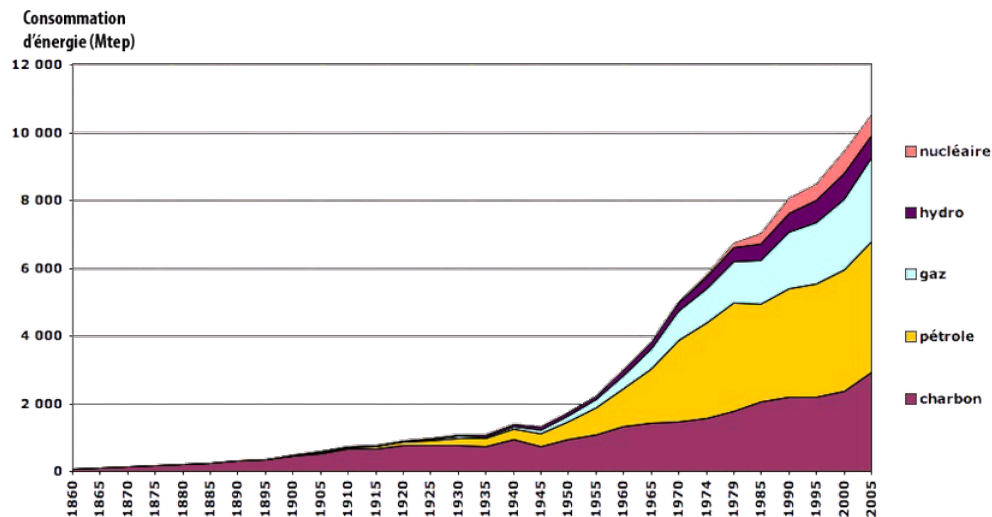


FIGURE 1: Estimation de l'évolution de la consommation énergétique primaire mondiale [1]

Des difficultés à satisfaire cette demande énergétique croissante commencent à voir le jour. C'est notamment le cas du pétrole brute conventionnel dont certains experts ([2], [3]) placent le franchissement du pic d'extraction (ou a minima l'atteinte d'un plateau) vers 2006, amorçant ainsi la crise financière de 2008.

Le dépassement de ce *peak oil* ne signifie pas la fin du pétrole; les réserves prouvées sont encore importantes (environ 40 ans au rythme de consommation actuelle, bien qu'aucun organisme officiel ne puisse en attester) mais cela pose des limites sur la capacité à faire face à la demande. Actuellement, ce déclin est partiellement mitigé par l'utilisation d'hydrocarbures non conventionnels au rendement énergétique moindre. Cependant la raréfaction de cette ressource contraint à son remplacement progressif.

Il en est de même à long terme pour toute énergie fossile dont le remplacement doit être anticipé par le développement de sources d'énergie capables d'une production à la fois massive et durable.

Le réchauffement climatique

Les énergies fossiles comme le pétrole sont au fondement de nos sociétés modernes et de leurs technologies. En France par exemple, 30% de l'énergie primaire consommée vient du pétrole [4], sans oublier que les 70% restants dépendent entièrement de cette énergie puisque l'essentiel du transport repose sur les hydrocarbures du fait de leur haute densité énergétique et de leur prix bon marché.

En plus de tensions naissantes sur cette ressource capitale, il est avéré que la libération dans l'atmosphère de CO_2 issu de la combustion des énergies fossiles, provoque un réchauffement climatique (anthropique) à une vitesse sans précédent (cf. figure 2).

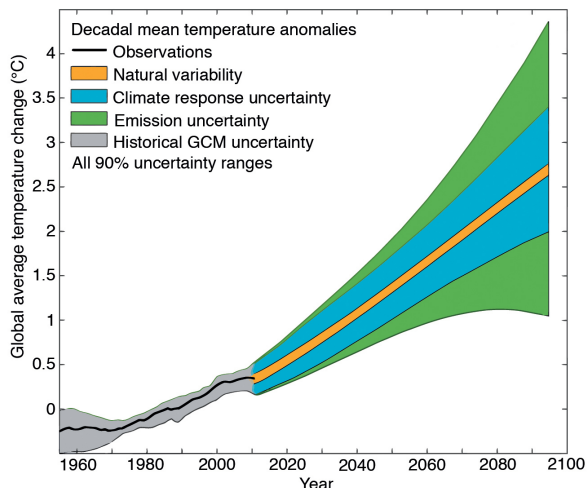


FIGURE 2: Prédiction de l'évolution de l'anomalie de température sans la mise en place de politiques de restriction des émissions en CO_2 , [5]

Les conséquences du réchauffement climatique sont déjà perceptibles (e.g. fonte des glaciers, élévation du niveau des océans, intensification de phénomènes météorologiques violents, désertification, crise de la biodiversité) et promettent d'être apocalyptiques si certaines contre-réactions positives s'enclenchent [6] comme la libération du méthane contenu dans les sols gelés du permafrost.

Il est donc urgent de réduire la production des gaz à effet de serre de façon à mitiger les conséquences environnementales, d'autant plus que le CO_2 déjà présent dans l'atmosphère restera actif pour encore longtemps. L'humanité fait donc face à un défi sans précédent puisqu'elle doit remplacer le plus rapidement possible (pour ne pas dire instantanément) l'écrasante majorité de ses sources d'énergie alors qu'historiquement les différents vecteurs énergétiques se sont toujours additionnés (cf. figure 1). Cette transition est un problème à part entière puisqu'elle nécessite à la fois une grande quantité d'énergie et de matériaux potentiellement en cours de raréfaction [7].

Position actuelle du nucléaire électrogène

Les SMR : une vision à court terme du nucléaire

Le nucléaire électrogène, en tant que faible émetteur de CO_2 , pourrait jouer un rôle important dans la transition énergétique qu'il nous faut accomplir. Bien que les centrales nucléaires permettent la production d'une grande quantité d'énergie, facilement pilotable et sans besoin de stockage, de nouvelles contraintes, de nature économique, s'opposent à leurs développements

à l'échelle mondiale. Le prix de l'électricité produite par une centrale nucléaire se divise en une série de facteurs parmi lesquels : le coût initial de construction de la centrale, le coût d'opération et de maintenance et le coût des matières premières (e.g. le combustible). La principale force du nucléaire électrogène réside dans son faible coût du combustible. A contrario le capital nécessaire pour la construction d'une centrale nucléaire est bien supérieur à celui d'autres sources d'énergie.

Ce frein économique a poussé une grande partie des acteurs du nucléaire à s'intéresser au concept des SMR (*Small Modular Reactor*). Un SMR est avant tout un réacteur dont la puissance électrique maximale est limitée à 300 MW_e. Cette réduction de la puissance du cœur implique une réduction de la taille du cœur, ce qui se traduit par un certain nombre d'avantages [8], [9] :

- Simplification de la construction : Plus de zones sont potentiellement disponibles pour l'implantation des centrales puisque celles-ci nécessitent des sources froides moins importantes. La taille réduite des composants facilite leur construction, c'est en particulier vrai pour les cuves que seuls quelques rares manufacturiers à travers le monde sont capables de produire. La production facilitée des composants permet d'envisager une fabrication standardisée. Il devient également plus facile de les acheminer, des moyens plus conventionnels (e.g. train, péniche) peuvent alors être utilisés pour leur transport. Enfin, la construction « en kit » de centrales (i.e. modularité) permet d'en accélérer la construction et de minimiser les aléas rencontrés *in situ*.
- Une maintenance réduite : Le fonctionnement des SMR prévoit de diminuer la fréquence des opérations de maintenance et de rechargement du combustible. Il est donc question d'avoir un haut rendement d'utilisation du combustible, sans rechargement fractionné.
- Une sûreté accrue : Le plus faible inventaire du cœur permet de réduire la zone de relâchement de radionucléides. De nombreux concepts de SMR sont pensés comme des réacteurs intégrés, c'est à dire que tout le circuit primaire est compacté pour tenir dans la cuve. Ce design du primaire minimise le recours aux conduites et donc leurs possibles ruptures. L'élimination du risque de brèche dès la conception permet de s'affranchir de circuits auxiliaires d'injection d'eau. Un recours plus large à des moyens de sûreté passifs est également prévu, notamment pour l'évacuation la chaleur résiduelle par convection naturelle dans le circuit primaire.

De façon générale, le design des SMR se veut simplifié et leur sûreté renforcée afin de permettre un déploiement rapide. Pour y parvenir les concepts de SMR s'appuient majoritairement sur des technologies déjà éprouvées et bénéficiant d'un important retour sur expérience comme celui des REP (Réacteur à Eau sous Pression).

Les SMR visent une niche économique assez précise. Ils sont principalement destinés à des pays encore non nucléarisés ainsi qu'aux zones où le réseau de distribution électrique n'est pas assez développé pour supporter de grosses installations. Les SMR pourraient également s'avérer utiles pour des applications industrielles nécessitant des sources de chaleur comme la désalinisation. Cette technologie pourrait malgré tout concerner la France qui devra faire face à la fin de vie très proche de son parc nucléaire, dont le renouvellement n'est pas encore planifié¹.

Soulignons que la plupart des avantages mentionnés ci-dessus sont avancés par les concepteurs de SMR mais ne sont pas encore prouvés. Ils doivent donc faire l'objet d'études permettant de quantifier à la fois leurs performances en terme d'énergie extraite du combustible et leurs performances en sûreté grâce à l'évaluation de leur comportement en conditions accidentelles. L'évaluation physique de ces nouveaux concepts de réacteur est un premier pas vers l'évaluation de leur compétitivité.

1. ce qui laisse la porte ouverte à de nouveaux concepts mais sans rupture technologique

Le projet SIRIUS : une alternative pour le nucléaire à moyen terme

Dans une perspective à long terme, le nucléaire électrogène rencontre deux problématiques majeures (outre l'opinion publique) qui sont [10] :

- L'accumulation des déchets nucléaires : bien que le choix officiel soit actuellement l'enfouissement des déchets, celui-ci ne fait pas l'unanimité. D'autres alternatives existent (e.g. les ADSR, *Accelerator Driven Subcritical Reactor*) mais celles-ci sont encore en cours de développement et ne sauraient être considérées comme une technologie mature.
- L'approvisionnement en fissile : au rythme actuel de consommation, les ressources naturelles de fissile constituent une réserve prouvée d'environ 100 ans pour un coût d'extraction à 130 \$/kg [11]. Les réacteurs à neutrons rapides sur-générateurs sont une réponse technologique permettant de s'affranchir de cette limite mais ils tardent à se concrétiser.

Dans l'hypothèse d'une contribution significative du nucléaire au mix énergétique mondial et d'un retard des réacteurs de IV^{ème} génération, le projet SIRIUS (*Simulation Initiative for Reactors Improving Uranium savings and Safety margins*), mené au sein du CNRS/IN2P3, se concentre sur la possibilité d'améliorer les performances d'utilisation du combustible dans les réacteurs actuels (e.g. REP) sous contrainte d'une sûreté équivalente voire accrue.

Les données nucléaires suggèrent que l'utilisation de thorium permet un meilleur taux de conversion que l'uranium tout en conservant l'eau comme caloporteur, ce qui dans le cadre d'un scénario de parc symbiotique permet de réduire la consommation d'uranium [12]. L'amélioration de la conversion est parfaitement illustrée dans les réacteurs CANDU (*CANada Deuterium Uranium*) modérés à l'eau lourde. Leur excellente économie de neutrons, due à un faible enrichissement et à un rechargement en ligne, permet d'être proche de la régénération [13]. La sous-modération appliquée aux REP (*Réacteur à Eau Pressurisée*), contribue à un accroissement significatif de la conversion mais l'utilisation d'une réserve de réactivité permettant d'atteindre des burnups conventionnels ne permet pas d'égaliser les performances des CANDU. Pour y remédier, un durcissement de spectre plus important encore est nécessaire, mais cette solution est limitée par des contraintes thermohydrauliques. Une autre voie pour y parvenir serait le remplacement total ou partiel de l'eau légère par de l'eau lourde [14].

De simples calculs d'évolution à l'échelle assemblage sont suffisants pour identifier les principaux leviers de la conversion et proposer des designs innovants permettant d'accroître les performances du combustible [15], [16]. Néanmoins, des évolutions à l'échelle cœur restent nécessaires pour confirmer ces résultats et avoir une évaluation plus précise des bénéfices qu'ils apportent. Ces calculs d'évolution à l'échelle cœur ont dans premier temps pu être réalisés grâce à au code DONJON dédié au CANDU et adapté au fonctionnement des REP, [13]. Cependant l'utilisation d'un code dont le développement nous est étranger s'est révélé peu pratique pour envisager et tester des options innovantes, d'où le besoin de développer nos propres outils d'étude des cœurs.

Enfin, l'évaluation de la sûreté des réacteurs innovants reste indispensable pour juger de leur crédibilité. Les performances en sûreté ont d'abord été évaluées de façon préliminaire grâce à un code de cinétique point, couplé à une thermique simplifiée. Les études comparatives menées par cette modélisation sur des accidents d'injection de réactivité (ou RIA pour *Reactivity Injection Accident*) mettent en avant les bonnes performances thermiques du ThO_2 [14]. Cependant, les critères de sûreté utilisés en REP sont locaux ce qui requiert le développement d'outils de neutronique permettant d'accéder à un détail spatial. En cohérence avec une démarche préliminaire et académique de conception des cœurs, les outils dédiés à l'évaluation de la sûreté qui seront développés se doivent de rester simples.

La prolongation de ce projet de recherche conduit naturellement au développement d'une méthodologie de conception des cœurs ainsi que d'outils permettant à la fois d'évaluer les per-

performances d'utilisation du combustible (i.e. évolution à l'échelle cœur) et les performances en sûreté (i.e. critère de sûreté locaux). Ces développements sont appliqués à la conception de SMR afin de mieux cerner le potentiel de cette nouvelle technologie dans un contexte d'économie de l'uranium. Considérer des SMR lors de cette phase de développement s'avère d'autant plus indiqué du fait de leur design simplifié et de leur taille réduite, permettant une modélisation plus aisée.

Organisation du document

Ce document est divisé en deux grandes parties :

La première partie expose les principes méthodologiques de conception des cœurs, le fonctionnement des outils développés ainsi que les vérifications qui ont pu être menées. Le premier chapitre est destiné à introduire des notions fondamentales de physique des réacteurs. Il permet également de donner un aperçu au lecteur de la complexité du dimensionnement des cœurs, des principaux critères de conception, ainsi que de la méthodologie de conception utilisée dans la suite de ce document. Le second chapitre a pour but de présenter la méthode NDM, utilisée pour la résolution de la neutronique et le code BATH, dédié à la thermohydraulique des assemblages. Le couplage entre la NDM et BATH est destiné à l'évaluation des critères de sûreté du cœur lors de transitoires accidentels. Le troisième chapitre introduit l'outil de simulation SMURE, utilisé pour les calculs d'évolution aussi bien à l'échelle d'un assemblage qu'à l'échelle du cœur complet.

La seconde partie du document applique ces outils à la conception et à l'évaluation des performances en cycle et en sûreté des SMR étudiés. Le premier concept de SMR envisagé utilise un combustible Th/U. Une attention particulière est portée à la possibilité d'optimiser les performances en conversion grâce à l'utilisation de réseaux sous-modérés. L'incidence de ce choix de conception est explicité lors de la simulation d'un accident d'éjection de grappe. Le second concept de SMR utilise un combustible Th/Pu, il permet ainsi d'estimer le potentiel d'élimination du plutonium grâce aux SMR. Ce sera également l'occasion de revenir sur la méthodologie de dimensionnement initialement proposée pour tenir compte des difficultés rencontrées lors du dimensionnement du SMR Th/U, notamment en matière de gestion de la réactivité.

Première partie
Méthodologie

Chapitre 1

Notions de physique des réacteurs

Ce chapitre se divise en trois grandes parties :

La première introduit les notions de base pour comprendre la neutronique. Après avoir décrit l'équation fondamentale de la neutronique, l'équation de Boltzmann, elle s'attache à dérouler, d'une façon originale et personnelle, le cheminement qui mène à son approximation la plus courante, à savoir l'équation de la diffusion neutronique.

La seconde partie commence par exposer les équations fondamentales pour la détermination du champ de température dans le crayon et dans le caloporteur. La thermohydraulique diphasique sera ensuite brièvement introduite. Seul les phénomènes pertinents au regard de l'analyse de sûreté d'un REP seront explicités.

La troisième partie de ce chapitre traite de la conception des cœurs de REP. Après avoir exposé la complexité du problème, les principaux critères de conception seront énoncés avant de détailler les principes de la méthodologie de design adoptée.

1.1 La neutronique

1.1.1 Notion de section efficace

Section efficace microscopique

La situation décrite par la figure 1.1 représente un neutron dont la direction de propagation l'amène à traverser une surface S contenant un noyau atomique.

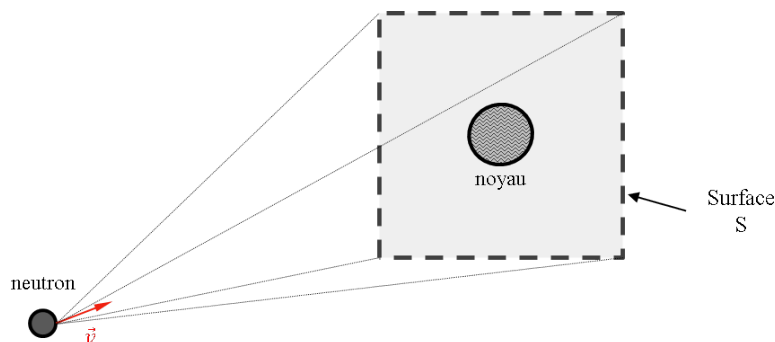


FIGURE 1.1: Neutron projeté vers une surface S contenant un noyau atomique dans sa plus grande section.

En admettant que la vitesse du neutron soit déterminée à un angle solide $d\Omega$ près couvrant l'intégralité de la surface S , la probabilité d'interaction P du neutron passant au voisinage du

noyau (dont la position est elle même incertaine d'après le principe d'Heisenberg) s'exprime comme :

$$P = \frac{\sigma}{S}$$

Où S est la surface vers laquelle le neutron est projeté et σ la section efficace microscopique de l'atome.

La section efficace est une notion centrale de la neutronique. Elle représente l'aire d'interaction d'un noyau avec un neutron. Il s'agit d'une probabilité non normalisée qui s'exprime communément en *barn*, ce qui équivaut en unit SI à 10^{-24} cm^2 .

Une analogie géométrique avec la mécanique classique permet d'assimiler σ à l'aire qu'occupe le noyau (cf. figure 1.1). Il y a collision entre le noyau atomique et le neutron lorsque les surfaces qu'ils occupent se recouvrent. Cette analogie est cependant limitée car σ varie fortement selon la vitesse relative du neutron dans le référentiel du noyau mais aussi selon la nature même de l'isotope et plus précisément de la structure de ses niveaux excités.

Sur un même isotope plusieurs interactions sont possibles dont les principales sont la capture radiative, la diffusion (élastique ou inélastique) et bien entendu la fission essentielle pour le fonctionnement des réacteurs nucléaires. Pour chacune de ces réactions indicées r , on peut définir un σ_r . La probabilité d'interagir quel que soit le type d'interaction est simplement la somme de ces probabilités :

$$\sigma_{tot} = \sum_{\forall r} \sigma_r$$

Section Efficace macroscopique

Dans la configuration présentée par la figure 1.2, on considère cette fois un neutron projeté sur un matériau, constitué d'un seul type d'isotope, dans un volume de surface S et d'épaisseur dx .

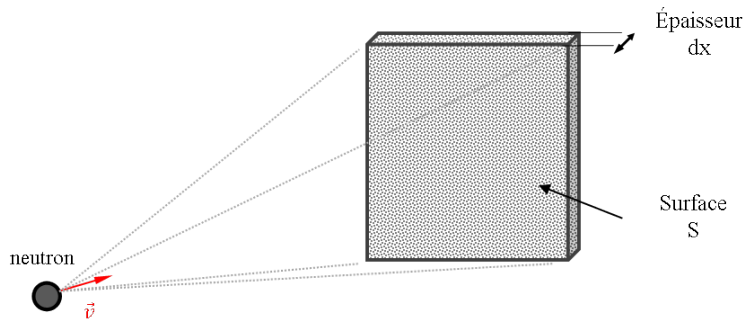


FIGURE 1.2: Neutron projeté vers une couche d'un matériau constitué d'une épaisseur dx et d'une surface S .

La probabilité pour que ce neutron interagisse lors de sa traversée du matériau s'exprime simplement comme :

$$dP = \underbrace{\frac{\sigma}{S}}_{\text{probabilité d'interaction avec un seul atome}} \times \underbrace{(S \times d \times dx)}_{\text{nombre d'atomes}}$$

Avec :

- dP l'élément différentiel de probabilité qu'un neutron interagisse dans un matériau sur une épaisseur dx .
- d la densité du matériau, (*atome* · cm^{-3})

Ce qui se simplifie comme :

$$\frac{dP}{dx} = \sigma \times d = \Sigma$$

Avec Σ la section efficace macroscopique du matériau, exprimée en (cm^{-1}). Cette grandeur correspond donc à une probabilité d'interaction par unité de longueur parcourue.

Remarquons que si le matériau était constitué de plusieurs types d'isotopes alors la probabilité d'interaction du neutrons avec ce matériaux serait la somme des probabilités d'interaction pour chaque type d'isotope contenu dans le matériau :

$$\Sigma_{tot, mat} = \sum_{\forall \text{ isotope } i} \Sigma_{tot i}$$

Les propriétés d'additivité des sections efficaces microscopiques reste vraies pour les sections efficaces macroscopiques.

1.1.2 L'équation de Boltzmann

L'équation de Boltzmann est une équation fondamentale qui décrit l'évolution d'un gaz hors équilibre. Elle permet de déterminer la répartition de particules indépendantes (i.e. n'interagissant pas entre elles) en fonction des variables d'espaces, d'énergie, de direction et de temps. Chercher une distribution continue de la densité de particules implique de s'intéresser à un nombre suffisamment grand de particules.

L'absence de charge électrique du neutron et leur densité relativement faible devant celle des noyaux atomiques rendent négligeables leurs interactions mutuelles. L'approximation du gaz idéal se prête donc bien au cas de la neutronique, ce qui permet d'adapter l'équation de Boltzmann en y ajoutant les termes de création et de disparition :

$$\begin{aligned} \frac{dN(\vec{r}, \vec{v}, t)}{dt} = & - \underbrace{div|_{\vec{r}}(\vec{v} \cdot N(\vec{r}, \vec{v}, t))}_{\text{terme de transport spatial}} \\ & - \underbrace{\Sigma_{abs}(\vec{v}) \cdot \phi(\vec{r}, \vec{v}, t)}_{\text{taux d'absorption (capture radiative et fission)}} \\ & + \underbrace{\chi(\vec{v})}_{\text{spectre des neutrons émis par fission}} \times \underbrace{\int_{\forall \vec{v}'} \Sigma_{fis}(\vec{v}') \cdot \phi(\vec{r}, \vec{v}', t) \cdot d\vec{v}'}_{\text{taux de fission}} \\ & + \underbrace{\int_{\forall \vec{v}'} \Sigma(\vec{v}' \rightarrow \vec{v}) \cdot \phi(\vec{r}, \vec{v}', t) \cdot d\vec{v}'}_{\text{taux de diffusion vers le vecteur vitesse } \vec{v}} \\ & - \underbrace{\int_{\forall \vec{v}'} \Sigma(\vec{v} \rightarrow \vec{v}') \cdot \phi(\vec{r}, \vec{v}, t) \cdot d\vec{v}'}_{\text{taux de diffusion vers d'autres vecteurs vitesses}} \end{aligned}$$

Avec :

- $N(\vec{r}, \vec{v}, t)$ la densité au temps t , en un volume infinitésimal dr^3 placé aux coordonnées \vec{r} , de neutrons ayant un vecteur vitesse \vec{v} à $\pm d\vec{v}$ près, ($neutron \cdot cm^{-4} \cdot s^{-1}$).
- $\phi(\vec{r}, \vec{v}, t)$ le flux neutronique, en ($neutron \cdot cm^{-3} \cdot s^{-2}$)
- Σ_{abs} la section efficace d'absorption du milieu, (cm^{-1})
- χ la proportion de neutron apparût à la vitesse $\vec{v} \pm d\vec{v}$ suite à la fission, aussi appelé le spectre énergétique des neutrons émis par fission.
- Σ_{fis} la section efficace de fission, (cm^{-1})

- $\Sigma_{scatt}(\vec{v}' \rightarrow \vec{v}'')$ la section efficace d'une diffusion qui transformant un vecteur vitesse \vec{v}' en un vecteur \vec{v}'' , en (s^{-1})

Par convention, l'équation de Boltzmann est écrite pour une nouvelle variable appelée flux neutronique et notée ϕ . Elle se définit comme :

$$\phi(\vec{r}, \vec{v}, t) = \|\vec{v}\| \cdot N(\vec{r}, \vec{v}, t)$$

A la différence d'autres domaines de la physique (e.g. thermique, hydraulique, électromagnétisme) le flux est ici une grandeur scalaire [17]. Son équivalent vectoriel est appelé courant neutronique, il correspond au nombre de neutrons par seconde qui traversent une surface élémentaire $d\vec{S}$ selon un vecteur vitesse donné :

$$\vec{J} = \vec{v} \cdot N(\vec{r}, \vec{v}, t)$$

Traditionnellement le vecteur vitesse est décomposé en une énergie cinétique E , calculée comme $\frac{1}{2}m\|\vec{v}\|^2$, et un vecteur indiquant la direction de propagation des neutrons¹, noté $\vec{\Omega}$ et calculé comme $\frac{\vec{v}}{\|\vec{v}\|}$.

Ci-dessous une revue terme à terme de l'équation de Boltzmann est proposée :

Absorption et fission

La décomposition en variable énergie/direction a l'avantage d'éliminer la composante directionnelle là où elle n'est pas nécessaire. C'est le cas pour les réactions d'absorption Σ_{abs} et de fission Σ_{fis} qui sont considérées comme isotropes. L'émission des neutrons issus de la fission est également considérée comme équiprobable sur l'ensemble des angles solides d'où sa ré-écriture en :

$$\chi(\vec{v}) = \frac{\chi(E)}{4\pi}$$

Transport

Le transport des neutrons est multi-directionnel², ce qui n'est pas sans rappeler la propagation des photons dans un milieu multi-sources. Le flux de l'ensemble des neutrons qui se propagent selon une direction donnée s'appelle le flux en phase [17].

Diffusion

Les réactions de diffusion ont un double emploi, elles changent l'énergie cinétique des neutrons (i.e. E) ainsi que leurs directions de propagation (i.e. $\vec{\Omega}$). Ces transformations jouent donc un rôle essentiel dans le transport des neutrons.

Comme explicité dans l'équation de Boltzmann, le terme de diffusion se scinde naturellement en deux parties :

- les diffusions amenant les neutrons en dehors de l'intervalle d'énergie $E \pm dE$ et de la phase $\Omega \pm d\Omega$,
- les diffusions amenant les neutrons en provenance d'autres niveaux d'énergie et de directions de propagation dans le volume infinitésimal attaché au point (E, Ω) (où dans $\vec{v} \pm d\vec{v}$ pour reprendre les notations initiales).

1. Cette décomposition ne fait pas intervenir de variables supplémentaires puisqu'un vecteur vitesse est représenté par 3 composantes tandis que l'énergie cinétique ne compte que pour une composante et le vecteur direction pour deux composantes puisqu'il peut s'écrire uniquement à l'aide des angles polaire et azimutal des coordonnées sphériques.

2. À la différence de l'hydraulique, où il existe en général un mouvement d'ensemble des particules fluide

Sous le terme Σ_{scatt} sont, en réalité, réunis plusieurs types de réaction de diffusion [17] :

- La diffusion potentielle élastique : Elle correspond au rebond du neutron sur le noyau. Le neutron n'est à aucun moment intégré au noyau cible. Suite à cette diffusion, l'état du noyau reste inchangé. Cette réaction se produit sur tout type de noyaux sans seuil énergétique.
- La diffusion résonnante : Elle se caractérise par la formation d'un noyau composé suivi de la ré-émission d'un neutron. Cette réaction est fortement dépendante de la nature du noyau ainsi que de la vitesse relative du neutron par rapport au noyau cible. Suite à l'éjection de ce nouveau neutron, le noyau cible peut se trouver dans le même état que celui précédant la réaction, la diffusion est alors dite élastique. Soit le noyau cible se retrouve dans un état excité auquel il mettra fin grâce à l'émission d'un photon gamma. La réaction est alors inélastique, elle est caractérisée par des seuils d'énergie correspondant aux niveaux d'excitation du noyau.

Les diffusions élastiques sont majoritaires dans les cœurs de réacteurs. Elles s'apparentent aux chocs élastiques de la mécanique classique. Du fait de leur faible masse (en comparaison d'un noyau) et de leur énergie élevée suite à leur émission par fission (de l'ordre du MeV , à mettre en comparaison avec l'énergie d'agitation thermique des noyaux, de l'ordre du keV), les neutrons vont céder une partie de leur énergie cinétique à leurs cibles sous la forme d'agitation thermique. Cette étape, appelée ralentissement des neutrons, est d'autant plus efficace que la réaction de diffusion est probable et que l'atome cible est léger.

Avec les conventions d'écriture introduite et d'après les hypothèses exposées, l'équation de Boltzmann s'écrit à présent comme :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\|\vec{v}\|} \frac{d\phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t)}{dt} = & - \operatorname{div}_{\vec{r}} (\vec{\Omega} \cdot \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t)) - \Sigma_{abs}(\vec{r}, E) \cdot \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) \\ & + \frac{\chi(\vec{r}, E)}{4\pi} \times \int_{\forall E'} \int_{4\pi} \Sigma_{fis}(\vec{r}, E') \cdot \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E', t) \cdot d\Omega' \cdot dE' \\ & + \int_{4\pi} \int_{\forall E'} \Sigma_{scatt}(\vec{\Omega}', E' \rightarrow \vec{\Omega}, E) \cdot \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E', t) \cdot d\Omega'^2 \cdot dE' \\ & + \int_{4\pi} \int_{\forall E'} \Sigma_{scatt}(\vec{\Omega}, E \rightarrow \vec{\Omega}', E') \cdot \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) \cdot d\Omega'^2 \cdot dE' \end{aligned}$$

avec :

- $\phi(\vec{r}, E, \Omega, t)$ le flux neutronique, en ($neutron \cdot cm^{-2} \cdot eV^{-1} \cdot Sr^{-1}$)
- $\Sigma_{scatt}(\vec{\Omega}, E \rightarrow \vec{\Omega}', E')$ la section efficace d'une diffusion allant de (E, Ω) à (E', Ω') , en ($cm^{-1} \cdot Sr^{-1}$)

1.1.3 Approximation du transport par la diffusion

La résolution analytique de l'équation de Boltzmann est irréalisable si l'on considère la complexité des géométries des cœurs et la dépendance en énergie (très chahutée) des sections efficaces. C'est pourquoi l'approche numérique s'est naturellement imposée. Elle implique une discrétisation selon chacune des variables : temps, énergie, espace, direction. Cependant l'aspect multi-échelle du cœur rend le nombre d'inconnues encore trop important :

- Les neutrons apparaissent suite à la fission à des énergies de l'ordre du MeV , tandis que la plupart des neutrons qui induisent des fissions en REP se trouvent à des énergies de l'ordre de l' eV . Il est donc nécessaire de simuler le ralentissement des neutrons sur plusieurs décades en énergie.
- En chaque point du maillage, une trentaine de directions doivent être considérées pour modéliser correctement le transport des neutrons [18].

- Les cœurs de réacteurs ont des dimensions qui sont généralement de l'ordre de quelques mètres. Ils sont en majorité composés de réseaux de crayons (ou d'aiguilles) combustible dont l'ordre de grandeur est le cm . En toute rigueur, le découpage devrait se faire en dessous du cm pour tenir compte des effets d'autoprotection (i.e. variation spatiale rapide du spectre neutronique).

Il est donc très tôt apparu le besoin de simplifier cette équation. Pour ce faire une série d'approximations sont couramment employées :

La condensation en groupe d'énergie :

Cette approximation consiste en une discrétisation de la variable énergétique qui auparavant été continue. Elles se traduit par l'utilisation de groupes en énergie, indexés dans la suite par la lettre g . En conséquence, le flux neutronique ainsi que les sections efficaces sont également discrétisés en groupes d'énergie au sein desquels ils sont supposés constant. Les sections efficaces discrétisées en énergie se déduisent par la conservation du taux de réaction dans le groupe d'énergie correspondant :

$$\Sigma_r^g = \frac{\int_{4\pi} d\Omega^2 \int_{E_{g-1}}^{E^g} \Sigma_r(E) \cdot \phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) dE}{\int_{4\pi} d\Omega^2 \int_{E_{g-1}}^{E^g} \phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) dE}$$

L'objectif des approximations suivantes est de se débarrasser de la dépendance aux vecteurs directions. Celle-ci apparaît en deux endroits de l'équation de Boltzmann, dans le terme de diffusion et dans le terme de transport.

L'approximation des chocs isotropes :

Cette approximation consiste à supposer que la distribution angulaire de toutes les diffusions est isotrope. Cette hypothèse se traduit mathématiquement comme :

$$\begin{aligned} \Sigma_{scatt}(\vec{\Omega} \rightarrow \vec{\Omega}', E \rightarrow E') &= \Sigma_{scatt}(\vec{\Omega} \rightarrow \vec{\Omega}') \Big|_E \cdot \Sigma_{scatt}(E \rightarrow E') \\ &= \frac{1}{4\pi} \cdot \Sigma_{scatt}(E \rightarrow E') \end{aligned}$$

avec ;

- $\Sigma_{scatt}(\vec{\Omega} \rightarrow \vec{\Omega}', E \rightarrow E')$, la section efficace de diffusion du groupe d'énergie E au groupe E' et de la direction de propagation $\vec{\Omega}$ à $\vec{\Omega}'$, ($cm^{-1} \cdot eV^{-1} \cdot Sr^{-1}$)
- $\Sigma_{scatt}(E \rightarrow E')$ la section efficace de diffusion du groupe d'énergie E au groupe E' , ($cm^{-1} \cdot eV^{-1}$)

Le même raisonnement s'applique pour la section efficace d'entrée dans le volume $E \pm dE$, $\vec{\Omega} \pm d\vec{\Omega}$. Ce qui permet de simplifier le terme de diffusion comme :

$$\int_{4\pi} \frac{1}{4\pi} d\Omega^2 \times \int_{\forall E'} \Sigma_{scatt}(E \rightarrow E') \cdot \phi(\vec{\Omega}, E') \cdot dE'$$

Compte tenu de l'approximation multi groupe, les termes de diffusion dans l'équation de Boltzmann deviennent :

$$- \sum_{g'} \Sigma_{scatt}^{g \rightarrow g'} \cdot \phi^g + \sum_{g'} \Sigma_{scatt}^{g' \rightarrow g} \cdot \phi^{g'}$$

Où le flux est ici considéré comme intégré sur toutes les phases. L'ensemble du processus de ralentissement (suite de chocs diffusif) est donc compris dans ces section efficaces de diffusions dont la dépendance n'est plus qu'énergétique et spatiale.

Notons que la réaction $\Sigma_{scatt}^{g \rightarrow g}$ a un sens dans un groupe en énergie de largeur ΔE , cependant elle n'est pas comptabilisée dans l'opérateur de diffusion discrétisée en groupe d'énergie. Le rôle de cette réaction est implicitement pris en compte dans la modélisation de l'opérateur de transport comme expliqué ci-dessous.

La loi de Fick :

Ce paragraphe doit être vu comme un essai original permettant de comprendre « avec les mains » le cheminement pour passer du transport à la diffusion. Pour les non initiés, des démonstrations plus piétonnes sont disponibles dans de nombreux ouvrages [17], [19], [20], [21].

Dans les autres branches de la physique (et chimie), la diffusion correspond au déplacement d'une particule soumise à un ensemble de chocs aléatoires (i.e. réactions de diffusion) qui modifient sa direction de propagation tout en conservant (en moyenne) son énergie cinétique. L'exemple le plus emblématique est le mouvement brownien, où des particules³ en suspension dans un liquide sont mises en mouvement suite aux chocs aléatoires des molécules du liquide mues par agitation thermique.

Sur la base d'observations phénoménologiques, Fick propose en 1855, une loi similaire à l'expression du courant de chaleur. La première loi de Fick stipule qu'en dépit de la migration aléatoire de particules, l'isotropie de leur diffusion tend à l'homogénéisation de leur répartition spatiale. Le courant macroscopique de particules vient donc s'opposer au gradient de concentration :

$$\vec{J} = -D \cdot \overrightarrow{grad}(\phi)$$

Où D est le coefficient de diffusion, exprimé en (cm^2) .

En 1905, Einstein parvient à la démonstration formelle de cette loi en étudiant le mouvement brownien dans le formalisme de la physique statistique. L'expression du coefficient de diffusion est alors précisément déterminée comme :

$$D = \frac{\langle x^2 \rangle - (c \cdot t)^2}{2 \cdot t}$$

Avec c la vitesse d'advection du fluide et $\langle x^2 \rangle$ le déplacement moyen des particules en suspension et t le temps.

En neutronique, dans la grande majorité des groupes d'énergie⁴, la diffusion est prépondérante devant les autres réactions. Le mouvement des neutrons s'apparente alors à celui du mouvement brownien. Cette équation semble d'autant plus fondée pour les groupes de neutrons thermiques (i.e. ceux dont l'énergie cinétique est comparable au niveau d'agitation thermique des atomes) et que les réactions de diffusion ont été supposées isotropes.

D'où l'idée de se servir des fondations théoriques solides de la diffusion pour venir simplifier le problème du transport neutronique.

Plusieurs raisonnements [17], [19], permettent à partir de l'équation de Boltzmann de justifier a posteriori l'utilisation de la loi de Fick en neutronique. La plus connue est l'approximation P1 qui consiste en la projection sur les harmoniques sphériques de l'équation de Boltzmann, limitée aux polynômes de Legendre d'ordre 1, ce qui correspond alors à une anisotropie linéaire [17]. Ces démonstrations permettent notamment d'explicitier les conditions de validité de l'approximation de la diffusion [19] :

3. supposée beaucoup plus grosses que les constituants du fluide

4. la finesse des groupes en énergie joue alors un rôle

- Le milieu doit être homogène (i.e. constitué d'un seul matériau).
- L'absorption doit être faible devant la diffusion⁵. Pour une description à plusieurs groupes d'énergie, cette condition doit être vérifiée dans chaque groupe, avec $\Sigma_{abs}^g \ll \Sigma_{scatt}^{g \rightarrow g}$
- La configuration étudiée doit être proche de l'état stationnaire. Des fortes valeurs de courant, et donc d'importants gradients de flux sont à proscrire.
- Le volume considéré doit être d'au moins quelques libres parcours moyens. Cette contrainte implique donc que si la région simulée est trop petite, on ne peut pas considérer que les neutrons puissent y diffuser. De plus, l'approximation n'est plus valide près des limites du systèmes ou de sources de neutrons.

L'approximation *P1* et l'hypothèse d'isotropie des réaction de diffusion permettent d'aboutir à une expression du coefficient de diffusion comme étant :

$$D^g = \frac{1}{3 \cdot \Sigma_{tot}^g}$$

Avec $\Sigma_{tot}^g = \Sigma_{abs}^g + \Sigma_{scatt}^{g \rightarrow g}$

L'utilisation des coefficients de diffusion ainsi calculé serait néanmoins décevante car l'hypothèse isotropie des réactions de diffusion ne s'applique pas dans la plus part des système. Pour tenir compte de l'anisotropie, les coefficients de diffusion doivent être corrigé, on parle alors de correction de transport.

Correction de transport

En considérant une unique source ponctuelle dans un milieu diffusif, supposer l'isotropie des diffusions à deux conséquences, l'une en terme de distribution angulaire et l'autre en terme de distribution radiale du flux depuis cette source.

En effet, l'isotropie des diffusions implique qu'aucune direction de propagation n'est privilégiée. Cette hypothèse est vérifiée dans la plus part des réacteurs puisque :

- leur géométrie est globalement invariante selon les directions de propagation
- la plus part des diffusions sont faiblement anisotropes
- les sources de neutrons sont isotropes.

En conséquence pour une répartition homogènes des sources (sur des distances de quelques libres parcours moyens), la distribution angulaire du flux reste approximativement uniforme, même en présence de réactions de diffusion anisotropes, En revanche, toujours d'un point de vue angulaire, l'anisotropie va avoir une influence sur les échanges entre les différentes phases du flux.

La seconde conséquence de l'anisotropie est plus indirecte. Elle porte sur la distance moyenne parcourue à « vol d'oiseau » par les neutrons. Cette grandeur est plus communément examinée au travers de l'aire de migration M définie comme :

$$M = \frac{1}{6} \langle r^2 \rangle$$

où r est la distance entre son point de naissance et son point de disparition.

Comme le montre la figure 1.3, si la diffusion des neutrons est anisotrope, les neutrons « gardent en partie la mémoire » de leur précédent déplacement et donc éventuellement de leur direction d'origine. Au final, cela leur permet de parcourir une distance, depuis leur point d'émission, plus ou moins importante en comparaison du cas purement isotrope.

5. En terme de mouvement brownien cela se traduit par une viscosité pas trop importante du fluide devant l'énergie d'agitation thermique du fluide et l'inertie des particules en suspension.

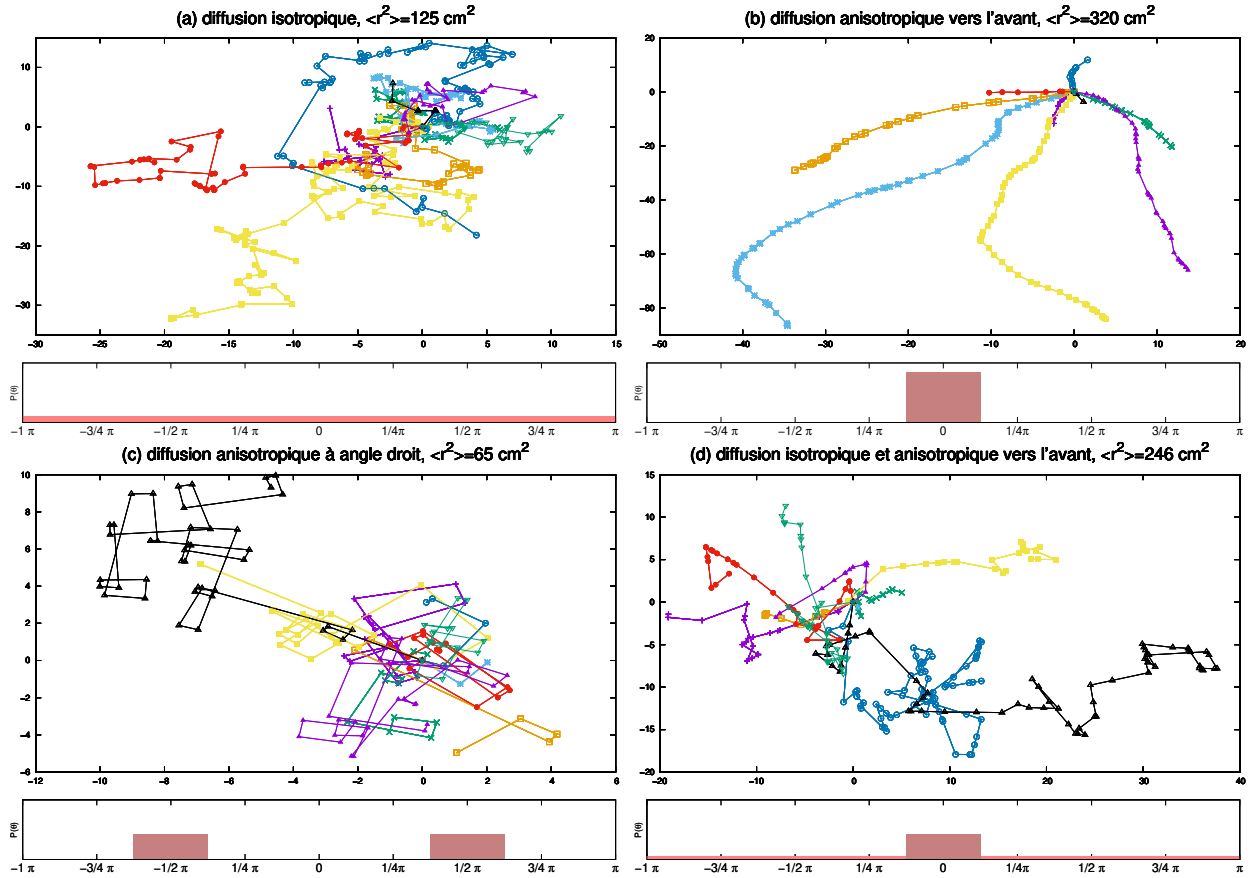


FIGURE 1.3: Trajectoires Monte Carlo d'une dizaine de neutrons, dans un milieu caractérisé par $\Sigma_{abs} = 2.3 \times 10^{-2} \text{ cm}^{-1}$ et $\Sigma_{scatt} = 6.5 \times 10^{-1} \text{ cm}^{-1}$. Les neutrons sont issus d'une source ponctuelle isotrope placée à l'origine. Suite aux réactions de diffusion, l'angle de sortie des neutrons est tiré aléatoirement de façon à respecter la loi de probabilité $P(\theta)$ représentée en dessous de chaque graphique de trajectoires. Le carré de la distance moyenne parcourue est calculé à ± 50 pcm.

Dans les réacteurs à eau légère, la diffusion sur les éléments légers est responsable du ralentissement des neutrons. Elle est caractérisée par une anisotropie vers l'avant (dans le référentiel du laboratoire) [17]. L'augmentation du $\langle r^2 \rangle$ qui en résulte est modélisée par un « allongement artificiel » du libre parcours moyen tout en conservant un déplacement isotrope. Ce libre parcours moyen est dit corrigé du transport (anisotropique), il est noté λ_{tr} .

Soit μ le cosinus moyen de l'angle de diffusion, c'est à dire la contribution de chaque trajet du neutron à sa direction de propagation initiale. Le libre parcours moyen de transport entre deux collisions se calcule comme [20] :

$$\lambda_{tr} = \lambda + \underbrace{\mu}_{\text{contribution à la direction initiale}} \cdot \underbrace{\frac{\Sigma_{scatt}}{\Sigma_{tot}}}_{\text{probabilité de diffusion}} \cdot \lambda$$

augmentation du libre parcours moyen dû à l'anisotropie des diffusions

En supposant que l'anisotropie est faible, c'est à dire $\mu \frac{\Sigma_{scatt}}{\Sigma_{tot}} \ll 1$, il vient que :

$$\lambda_{tr} \approx \lambda \cdot \frac{1}{1 - \mu \frac{\Sigma_{scatt}}{\Sigma_{tot}}}$$

d'où :

$$\lambda_{tr} = \frac{1}{\Sigma_{tot} - \mu \cdot \Sigma_{scatt}}$$

Par la suite on notera $\Sigma_{tr} = \Sigma_{tot} - \mu \cdot \Sigma_{scatt}$, la section efficace macroscopique dite de transport, corrigée de l'anisotropie des diffusions. Une démonstration plus rigoureuse de cette relation est disponible dans [19].

Cette augmentation du libre parcours moyen a des répercussions dans l'approximation du transport neutronique. Elle se manifeste lors de l'évaluation du coefficient de diffusion comme :

$$D = \frac{1}{3 \cdot \Sigma_{tr}}$$

Pour une anisotropie vers l'avant, les neutrons ont une aire de migration plus importante que dans le cas isotrope. L'utilisation de Σ_{tr} permet d'en rendre compte en augmentant le coefficient de diffusion. Le courant neutronique est alors plus important ce qui permet bien un aplatissement plus rapide de la nappe de flux.

En pratique, le coefficient de diffusion est estimé directement en exploitant la relation qui le lie à l'aire de migration ainsi que la section efficaces d'absorption :

$$M^2 = \frac{D_g}{\Sigma_{abs,g}}$$

La correction de transport est implicitement prise en compte au travers de l'estimation du $\langle r_g^2 \rangle$. C'est notamment cette méthode qui est utilisée dans le code *Serpent2*, [22] et qui est revisitée dans [23].

L'homogénéisation

Les premiers concepts de réacteurs étaient limités dans leur conception par un faible enrichissement en isotope fissile. Pour y pallier, les neutrons devaient être thermalisés afin d'augmenter leur sections efficaces microscopique de fission.

Les neutrons naissent dans le combustible suite aux réactions de fission avec une énergie élevée. Le ralentissement sur des atomes lourds tel que l'uranium est relativement inefficace et implique des pertes non négligeables par absorption. C'est pourquoi le combustible est entouré d'un modérateur (contenant des éléments légers tel que l'hydrogène, l'hélium, le béryllium ou du carbone) qui vont permettre de thermaliser efficacement les neutrons.

Les réacteurs thermiques sont donc par construction éminemment hétérogènes. L'utilisation de la théorie de diffusion nécessite donc une étape d'« homogénéisation » des sections efficaces qui vient se sur-ajouter à celle de la condensation en énergie. Le calcul des sections efficaces homogénéisées suit le principe de conservation des taux de réactions au seins d'un volume $V_{tot} = \sum_{\forall m} V_m$ constitué de plusieurs matériau (indiqué m) :

$$\overline{\Sigma}_g = \frac{\sum_m \Sigma_r^g \phi_m^g \cdot V_m}{\sum_m \phi_m^g \cdot V_m}$$

Avec :

- $\overline{\Sigma}_g$ la section efficace homogénéisée sur le volume V_{tot}
- V_m le volume d'un matériau m
- r l'indice désignant un type de réaction
- m l'indice désignant un matériau

Tout comme l'étape de condensation, l'homogénéisation des sections efficaces requiert au préalable une estimation de la distribution en énergie du flux, c'est à dire son spectre, dans chacune des régions hétérogènes.

Enfin, notons que rien ne garantit que le flux calculé avec les sections efficaces homogénéisées ($\overline{\Sigma}_r$) corresponde bien au flux moyen dans le volume utilisé pour l'homogénéisation. C'est pourquoi le calcul des sections efficaces homogénéisées est parfois itéré de façon à retrouver les bons taux de réactions à l'échelle du volume total. Ces méthodes portent le nom de *super homogénéisation*, [24].

Équations de la diffusion multigroupe

L'ensemble des simplifications opérées sur l'équation de Boltzmann aboutit aux équations de la diffusion multigroupe :

$$\frac{1}{v^g} \frac{d\phi^g}{dt} = \text{div}(D^g \cdot \overrightarrow{\text{grad}}(\phi^g)) - \Sigma_{abs}^g \phi^g + S_g - \sum_{\forall g'} \Sigma_{scatt}^{g \rightarrow g'} \phi^g + \sum_{\forall g'} \Sigma_{scatt}^{g' \rightarrow g} \phi^{g'}$$

Avec ϕ^g le flux dans le groupe d'énergie g défini par les bornes $[E_{g-1}; E_g]$ et intégré sur toutes les directions :

$$\phi^g = \int_{E_{g-1}}^{E_g} \int_{4\pi} \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E', t) d\Omega^2 dE'$$

Où ϕ^g est exprimé en neutron $\cdot \text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$.

Les dépendances spatiales et temporelles de l'équation ont été volontairement omises par souci de lisibilité.

Pour un découpage en énergie grossier, on suppose que tous les neutrons apparaissent dans le premier groupe en énergie :

$$\begin{cases} S_1 &= \sum_{\forall g} \nu^g \Sigma_{fiss}^g \phi^g \\ S_g &= 0 \quad \forall g \neq 1 \end{cases}$$

Où ν^g est le nombre de neutrons émis par une fission produite à partir d'un neutron d'énergie g . Dans le cas d'un découpage fin en énergie, un spectre de fission χ_g devra être considéré.

Les autres groupes d'énergie sont ensuite peuplés lors du ralentissement des neutrons. De façon générale « *l'upscattering* », c'est à dire le gain d'énergie cinétique d'un neutron suite à une collision est improbable tant que son énergie cinétique est supérieure à celle d'agitation thermique des noyaux (de l'ordre de l'eV).

1.1.4 La cinétique

La cinétique est le domaine de la neutronique qui rend compte d'une évolution rapide de la population de neutrons, par exemple lors de transitoires de pilotage ou accidentels.

La réactivité

La population neutronique du réacteur considéré dans son ensemble est régie par le bilan neutronique suivant :

$$\frac{dN}{dt} = \nu \cdot \text{Taux de fission} - \text{Taux d'absorption} - \text{Fuites à la surface du coeur}$$

Ce bilan neutronique instantané est historiquement exprimé sous la forme d'un rapport appelé coefficient de multiplication effectif et noté k_{eff} :

$$k_{eff} = \frac{\nu \cdot \text{Taux de fission}}{\text{Taux d'absorption} + \text{Fuites}}$$

Pédagogiquement, le k_{eff} d'un cœur à un instant donné peut s'interpréter comme le facteur par lequel sa population sera multipliée le temps d'une génération de neutrons.

La mesure de l'écart du k_{eff} par rapport à la configuration d'équilibre (i.e. $k_{eff} = 1$) s'appelle la réactivité. Elle se définit comme :

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

La réactivité est le plus souvent exprimée en pour cent mille, noté *pcm*.

Les précurseurs de neutrons retardés

Lors de la fission, en moyenne ν neutrons sont libérés. La plupart le sont « instantanément », ils sont alors qualifiés de prompts. Cependant, une fraction β des neutrons est émise avec un certain délai, ils sont alors qualifiés de retardés.

Les neutrons retardés sont libérés par des fragments de fission, appelés précurseurs, après que ces derniers aient effectué une (ou plusieurs) décroissances β^- [17].

Les précurseurs sont généralement réunis en familles au sein desquels leur constante de décroissance est similaire. L'évolution de la densité de précurseurs est régie par l'équation suivante :

$$\frac{dp_f}{dt} = \beta_f \sum_{\forall g} \nu^g \cdot \Sigma_{fiss}^g \cdot \phi^g - \lambda_f p_f$$

Avec :

- p_f la concentration de précurseurs dans la famille f , (*isotopes · cm⁻³*).
- β_f la fraction de neutrons retardés correspondant à la famille f de précurseurs (*pcm*).
- λ_f la constante de décroissance des précurseurs de la famille f (*s⁻¹*).

Les équations de la diffusion multigroupe doivent être modifiées pour prendre en compte les créations et décroissances de précurseurs. Cela se traduit dans le groupe d'apparition des neutrons (ici noté $g = 1$) par l'apparition ou la modification de certains termes :

$$\begin{aligned} \frac{1}{v^1} \frac{d\phi^1}{dt} = & \text{div}(D^1 \cdot \overrightarrow{\text{grad}}(\phi^1)) - \Sigma_{abs}^1 \phi^1 - \sum_{\forall g'} \Sigma_{scatt}^{1 \rightarrow g'} \phi^1 + \sum_{\forall g'} \Sigma_{scatt}^{g' \rightarrow 1} \phi^{g'} \\ & + (1 - \beta_{eff}) \times \sum_{\forall g} \nu^g \Sigma_{fiss}^g \phi^g + \sum_{\forall f} \lambda_f \cdot p_f \end{aligned}$$

Lors de leur émission, les neutrons retardés ont une énergie cinétique moins élevée que celle des neutrons prompts, ce qui augmente leur probabilité d'aboutir à une fission. Pour tenir compte de la plus grande importance des neutrons retardés dans la réaction en chaîne, les facteurs β_f sont artificiellement augmentés, ils sont alors qualifiés d'effectifs. Le $\beta_{eff} = \sum_{\forall f} \beta_f$ appelé la fraction totale de neutrons retardés effectives qui prend également en compte une pondération par l'adjoint du flux neutronique.

Pour un cas stationnaire où la population de neutrons est en équilibre avec celle des précurseurs, on remarquera que les neutrons prompts seuls ne forment pas un système critique. En conséquence pour $0 < \rho - 1 < \beta_{eff}$, la croissance de la population de neutrons est ultimement limitée par la vitesse de décroissance des précurseurs. C'est cette propriété qui rend le réacteur pilotable puisque le temps de décroissance des précurseurs est de l'ordre de la seconde. En revanche pour $\rho - 1 > \beta_{eff}$, les neutrons prompts forment un système critique sans avoir recours aux précurseurs. Le système est dit sur-critique prompt et sa cinétique est celle du temps inter-fission ($\approx 10^{-5}$ s en REP).

1.1.5 La dynamique

La dynamique s'intéresse à l'évolution de la population neutronique sur les temps longs. À ces échelles de temps, les captures neutroniques changent les compositions isotopiques des matériaux par :

- la consommation des isotopes fissiles
- l'accumulation de produits de fissions dont certains sont très neutrophages
- la consommation de divers isotopes (fertiles, poisons neutroniques, cf. chapitre 4)

Ces changements dans les inventaires ont des rétro-actions neutroniques dans la répartition du flux, le spectre neutronique et de manière générale influe sur la réactivité du système.

L'évolution du vecteur isotopique d'un matériau est donnée par la résolution d'un système d'équations appelées équations de Bateman, celles-ci doivent être couplées à une résolution de la neutronique. Cet aspect est détaillé dans le chapitre 3.

Le « degré » d'irradiation du combustible est communément quantifié au travers de la variable « burnup », que l'on traduit en français par « taux de combustion » et définie comme :

$$BU = \frac{\int_0^T P(t) dt}{m_{HM}}$$

Où :

- $P(t)$ la puissance neutronique produite dans un volume donné de combustible, (MW)
- m_{HM} la masse de noyaux lourds (HM signifiant alors *Heavy Metal*) contenue dans le volume de combustible considéré, en (*tonne*)
- T le durée pendant lequel le matériau est irradié, exprimée en (*jour*)
- BU le burnup du matériau en ($MW.j/ton$).

Le burnup rend compte de l'énergie qui a pu être extraite du combustible, rapporté à la masse en noyaux lourds de ce matériau. Cette variable peut être définie à différente échelle, celle du crayon, de l'assemblage ou plus généralement du cœur.

1.1.6 Origine du couplage entre la neutronique et la thermohydraulique

La température d'un matériau a une incidence sa section efficace microscopique et donc sur la neutronique. Cette contre-réaction des températures est particulièrement marquée dans le combustible et dans le modérateur.

L'augmentation de la température du combustible correspond à un accroissement de l'agitation thermique des atomes du matériau. Cet effet augmente l'écart-type de la distribution statistique des vitesses des noyaux. En conséquence la différence relative de vitesse entre les noyaux et les neutrons incidents est perçue avec une plus grande variance. Pour des neutrons incidents dont l'énergie est proche de celle d'une résonance de section efficace, les chances d'être vu par le noyau dans l'énergie de la résonance sont plus importantes. Réciproquement, du point de vue des neutrons les résonances des sections efficaces des noyaux paraissent élargies, (cf. figure 1.4). Statistiquement cela se traduit par une plus forte absorption des neutrons par les noyaux possédant des résonances (i.e. noyaux lourds). Ce phénomène, appelé effet Doppler, a un effet stabilisant sur la réaction en chaîne si globalement le taux de capture augmente plus vite que le taux de fission. Dans cette situation, lorsque la température du combustible augmente cela se traduit par une baisse de la réactivité, la contre-réaction est alors dite négative.

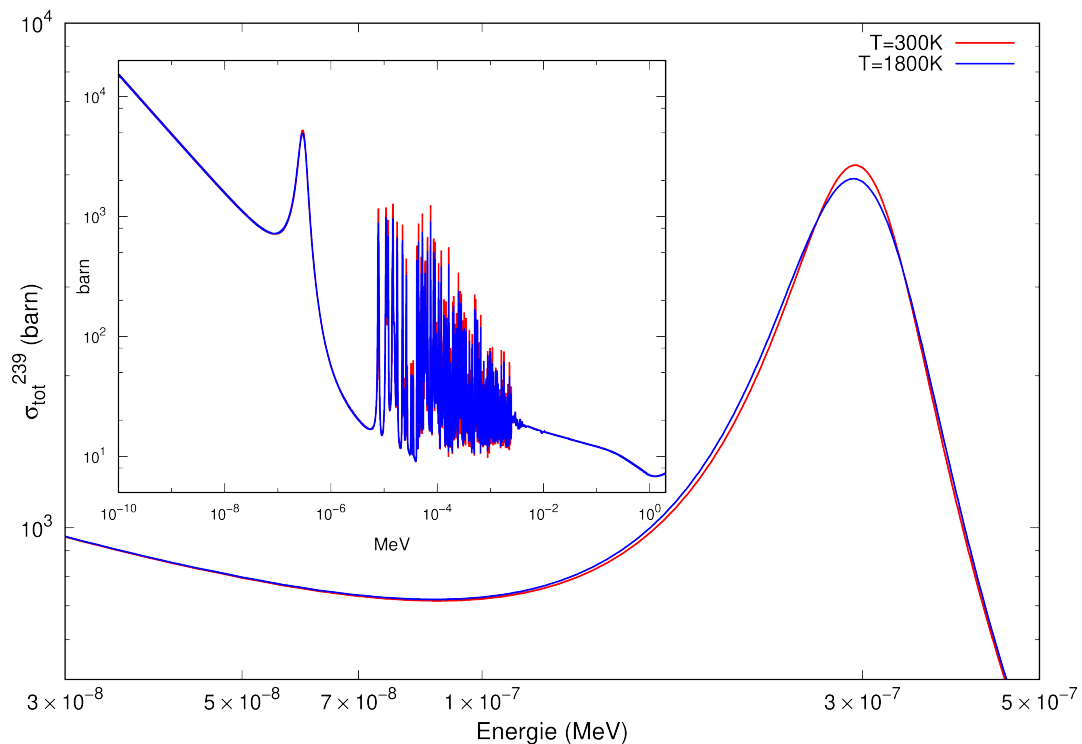


FIGURE 1.4: Section efficace totale de ^{239}Pu à 300 K et à 1800 K, extrait de la base ENDF/B-VII.1 Illustration de l'effet Doppler sur la résonance principale de ^{239}Pu . L'élargissement de la section efficace microscopique est également visible dans le domaine épithermique (entre 5×10^{-5} et 5×10^{-6} MeV).

L'échauffement du modérateur provoque une dilatation de ce dernier. Le même phénomène se produit également dans les matériaux solides du cœur, mais il est moins prononcé. La diminution de densité du modérateur entraîne une baisse proportionnelle des sections efficaces macroscopiques dans ce matériau. En conséquence les neutrons subissent moins de collisions dans le modérateur avant de revenir dans le combustible, ils sont donc moins bien ralentis, ce qui modifie le rapport fission sur capture dans le combustible. Là encore une contre-réaction thermique négative du modérateur sera toujours recherchée afin de stabiliser la réaction en chaîne.

1.2 La thermohydraulique

La thermohydraulique est une science centrale dans le fonctionnement d'un réacteur car :

- elle spécifie la façon dont sera extraite la puissance du réacteur (ce qui est la raison d'être du réacteur).
- la grande majorité des critères de sûreté du cœur sont en définitive des limites thermiques.
- du fait du couplage avec la neutronique, la modélisation de la thermohydraulique s'avère indispensable pour rendre compte de l'évolution du cœur pendant les transitoires.

1.2.1 La thermique du combustible

Les cœurs auxquels nous nous intéresserons dans la suite sont des réseaux d'assemblage qui sont eux-mêmes des réseaux de crayons. Comme l'illustre la figure 1.5, les crayons sont composés

d'une pastille, ceinturée d'une couche de gaz appelée « gap », elle même entouré d'une gaine, le tout en contact avec le caloporteur.

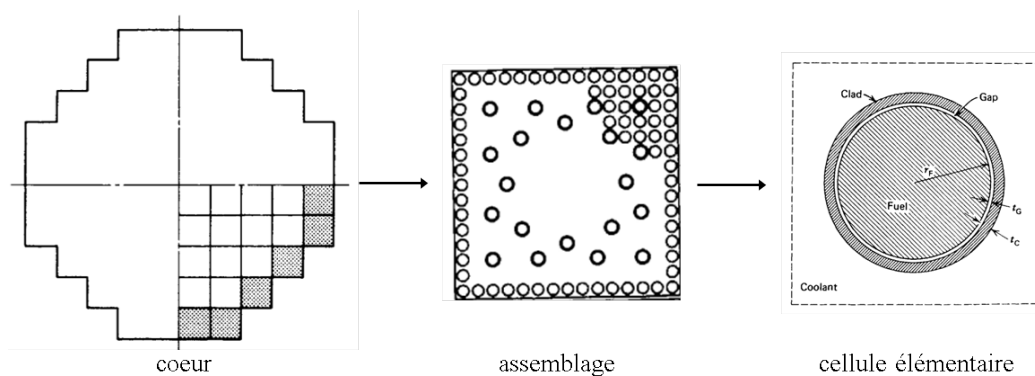


FIGURE 1.5: Représentation 2D d'un cœur de réacteur et des différentes échelles qui le compose [25]

Au sein du combustible et de la gaine le champ de température s'obtient après résolution de l'équation de la chaleur :

$$\rho \cdot C_p \frac{dT}{dt} = \text{div}(\lambda \cdot \overrightarrow{\text{grad}}(T)) + \ddot{q}$$

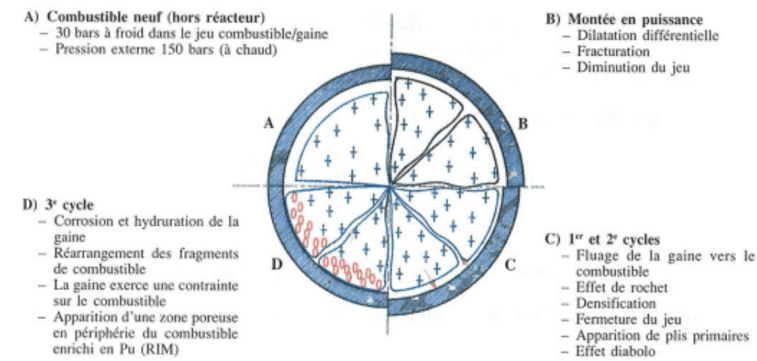
Avec :

- T la température, (K)
- ρ la densité du matériau, ($kg \cdot m^{-3}$)
- λ la conductivité thermique du matériau, ($W \cdot m^{-2}$)
- C_p la capacité thermique (isobare) du matériau, ($J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$)
- \ddot{q} la densité de puissance du matériau, ($W \cdot m^{-3}$)

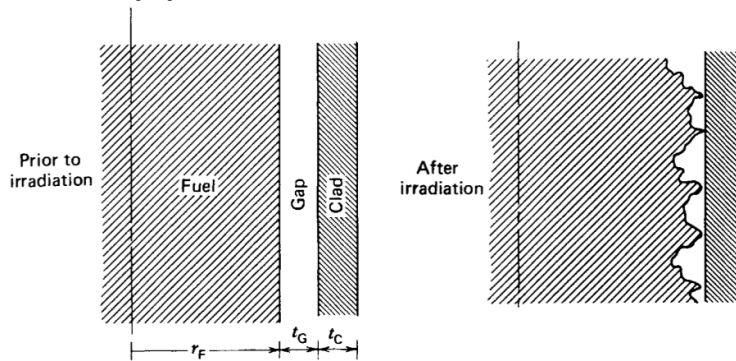
La densité de puissance étant considérée comme nulle dans la gaine.

Il est essentiel de tenir compte de la variation des propriétés thermiques en fonction de la température notamment dans le combustible où celle-ci peut varier du simple au double entre le centre de la pastille et sa surface. Les propriétés thermiques du combustible (i.e. C_p , λ) dépendent également de l'état de la pastille (fracturation), de sa porosité (phénomène de densification), de la stoechiométrie de l'oxyde et de son burnup (relâchement des gaz de produits de fissions) [26]. Ces considérations restent pertinentes dans la gaine qui est affecté à l'extérieur par le phénomène d'hydruration (formation de ZrO_2) et à l'intérieur par la corrosion (sous contrainte) des gaz de produits de fission, ainsi que du fluage sous irradiation.

Entre la gaine et le combustible se trouve le gap. Il s'agit d'une couche de gaz initialement remplie d'hélium (gaz inerte) sous pression (environ 30 bar [27]). L'épaisseur du gap est comprise, avant toute irradiation, entre 50 et 100 μm . Au cours de l'irradiation, la pastille se dilate et se fragmente radialement dès sa première montée en puissance sous l'effet de son gradient de température. Cela conduit à une première réduction du jeu pastille/gaine. Sous l'effet de l'oxydation, du fluage dû au différentiel de pression (inter/externe), de son irradiation et dans une moindre mesure de sa dilatation thermique, la gaine gonfle ce qui conduit à la fermeture du gap. L'ensemble des interactions qui en résulte est désigné sous le terme d'IPG (Interaction Pastilles-Gaine).



(a) Comportement typique d'un crayon de REP UOX sous irradiation [28].



(b) Illustration du contact entre le combustible et la gaine lors de la fermeture du gap, [26]

FIGURE 1.6

Plusieurs processus d'échanges thermiques sont à l'œuvre dans le gap, leur efficacité varie au cours de l'irradiation :

- la conduction thermique dans la couche de gaz. Cette dernière est amenée à se dégrader au fur et à mesure de la libération des produits de fissions gazeux (en majorité le Xénon et le Krypton)
- la conduction par contact. Lorsque le jeu pastille/gaine se referme, des fragments de pastilles se trouvent localement en contact avec la gaine (cf. figure 1.6 (b)). L'efficacité de cette conduction dépend de la pression de contact entre les fragments de pastille et ceux de la gaine.
- la conduction par rayonnement thermique qui n'est pas négligeable du fait des hautes températures du combustible.

Même si la déformation de la pastille peut-être modélisée par les codes de mécanique actuels, calculer l'ensemble de ces processus à chaque instant du cycle restes complexes, c'est pourquoi la solution communément retenue est l'utilisation d'une conductance thermique, notée h_{gap} , en ($W \cdot K^{-1} \cdot m^{-2}$). Cette variable est utilisée sous la forme de corrélation (ou tabulation), déterminée expérimentalement et dépendant du burnup. Comme le montre la figure 1.7, la conductance du gap (h_{gap}) est amenée à varier sur au moins un ordre de grandeur au cours du cycle, ce qui entraîne des variations de l'écart de température entre le combustible et la gaine de l'ordre de 140 à 280 K [25].

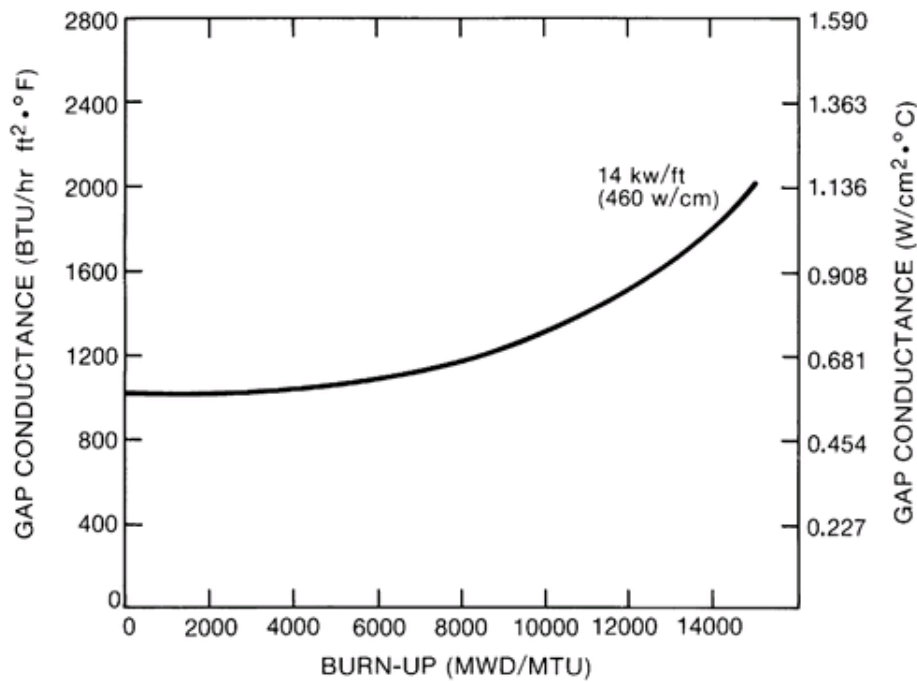


FIGURE 1.7: Variation de h_{gap} en fonction du burnup pour un crayon typique de REP soumis à une puissance linéique de $460 \text{ kW} \cdot \text{cm}^{-1}$, [29].

1.2.2 Équations de Navier-Stokes

L'ensemble des particules de fluide contenues dans un volume $\delta \vec{r}^3$ (fixe) subissent un mouvement d'ensemble selon un vecteur \vec{v} (lui-même attaché à ce même volume élémentaire). Si l'on considère un écoulement 1D selon un axe x , la position d'une particule de fluide dépend du temps : $x(t)$. La dérivée de toute grandeur moyenne (e.g. la température notée T) d'un ensemble de particules fluides situées en $x(t)$ à la date t doit donc tenir compte de la dérive de ces particules, ce qui s'exprime mathématiquement comme :

$$\frac{DT(x(t), t)}{Dt} = \frac{\partial T}{\partial t} + \underbrace{\frac{\partial x(t)}{\partial t} \cdot \frac{\partial T}{\partial x}}_{\text{terme d'advection}}$$

Cette expression de la dérivée particulière se généralise à plusieurs dimensions comme :

$$\frac{DT(\vec{r}(t), t)}{Dt} = \frac{\partial T}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}(T)$$

On utilisera dans cette section les notations usuellement utilisées dans la discipline. Ainsi $\vec{\nabla}$ désigne le gradient d'un scalaire ou le produit tensoriel d'un vecteur tandis que $\nabla \cdot$ désigne la divergence d'un vecteur.

Les équations de Navier-Stokes expriment des bilans conservatifs sur des volumes élémentaires :

Conservation de la masse

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}) = 0$$

Avec :

- ρ la densité du fluide, au point \vec{v} et à la date t , $kg \cdot m^{-3}$
- \vec{v} ma vitesse du fluide, au point \vec{v} et à la date t , en $(m \cdot s^{-1})$

Pour des fluides circulants à des vitesses faibles devant la vitesse du son, l'hypothèse d'incompressibilité constitue une bonne approximation. Elle se traduit comme :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0$$

Conservation de la quantité de mouvement

Cette équation dérive de l'application de la relation fondamentale de la dynamique appliquée à un volume élémentaire de fluide :

$$\rho \frac{d\vec{v}}{dt} + \rho \vec{\nabla} \cdot (\vec{v} \cdot \vec{v}) = -\vec{\nabla} p + g + \underbrace{\mu(\vec{\nabla} \cdot \vec{v} + \nabla \cdot \vec{v} + \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v})}_{\nabla \bar{\tau}}$$

Avec :

- p la pression, (Pa)
- g la constante de la force de gravité (ou plus généralement la résultante de toute force volumique), $(N \cdot m^{-3})$
- μ la viscosité dynamique, $(Pa \cdot s)$
- $\bar{\tau}$ le tenseur des contraintes, (Pa)

L'expression donnée pour le tenseur des contraintes visqueuses définit l'approximation d'un fluide Newtonien. Cette approximation est couramment acceptée pour des gaz ou des fluides simples tel que l'eau. Notons que cette expression peut encore se simplifier si le fluide est supposé incompressible, on a alors : $\nabla \bar{\tau} = \mu \nabla^2 \vec{v}$, où $\nabla^2 \vec{v}$ représente le laplacien vectoriel du vecteur vitesse.

Conservation de l'énergie

L'équation de conservation de l'énergie peut être dérivée (en partie) de celle de la conservation du mouvement en multipliant cette dernière par \vec{v} , ce qui permet de faire ressortir la variable d'énergie cinétique définie comme : $e_c = \rho \frac{1}{2} v^2$. Cette variable peut ensuite être remplacée par l'enthalpie du fluide qui s'exprime comme : $h = u + \frac{p}{\rho}$, avec u l'énergie totale définie comme la somme de l'énergie interne du fluide et de son énergie cinétique.

L'équation ainsi obtenue s'écrit :

$$\rho \frac{Dh}{Dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{q}''_{rad} - \vec{\nabla} \cdot \vec{q}''_{cond} + \ddot{q} + \frac{Dp}{Dt} + \Phi$$

Avec :

- \vec{q}''_{rad} le flux thermique par radiation, $(W \cdot m^{-2})$
- \vec{q}''_{cond} le flux thermique par conduction, $(W \cdot m^{-2})$
- \ddot{q} une source volumique de puissance ponctuelle, $(W \cdot m^{-3})$
- Φ source de chaleur due aux dissipations par frottements visqueux, $(W \cdot m^{-3})$

Où Φ s'exprime comme :

$$\Phi = \tau_{xx} \frac{\partial v_x}{\partial x} + \tau_{yy} \frac{\partial v_y}{\partial y} + \tau_{zz} \frac{\partial v_z}{\partial z} + \tau_{xy} \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \right) + \tau_{yx} \left(\frac{\partial v_y}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial y} \right) + \tau_{zx} \left(\frac{\partial v_z}{\partial x} + \frac{\partial v_x}{\partial z} \right)$$

Et où l'expression du flux par conduction est donnée par la loi de Fourier :

$$\vec{q}''_{cond} = -\lambda \vec{\nabla} (T)$$

Dans les problèmes de physique des réacteurs, le flux de chaleur échangé par radiation dans le caloporteur peut être négligé. De même, la chaleur produite par les frottements visqueux est négligeable par rapport aux autres termes de l'équation.

Les problèmes d'échange de chaleur privilégient la variable température (cf. loi de Fourier), c'est pourquoi l'équation de conservation de l'énergie est ré-écrite pour cette variable. L'enthalpie s'exprime comme :

$$h = \frac{\partial h}{\partial T} dT + \frac{\partial h}{\partial p} dp$$

Que l'on peut ré-écrire grâce aux identités thermodynamiques comme :

$$h = C_p dT + (1 - \beta T) \frac{dp}{\rho}$$

Avec β le coefficient de dilatation thermique isobare, (K^{-1}).

D'où :

$$\rho \cdot C_p \cdot \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} T \right) = \nabla \cdot (\lambda \vec{\nabla} T) + \dot{q} + \beta T \frac{Dp}{Dt}$$

Le terme $\frac{Dp}{Dt}$ est négligeable dans la plupart des écoulements, excepté sur le front d'une onde de choc.

Équation d'état

Les équations précédentes utilisent 3 variables scalaires et une variable vectorielle qui sont : ρ, p, T et \vec{v} , mais seules 2 équations scalaires et une vectorielle ont été données. Il est nécessaire d'ajouter une 4^{ème} équation, nommée équation d'état, pour fermer le système. Cette équation fait le lien entre les différentes propriétés thermodynamiques :

$$p(\rho, T)$$

Bien souvent, les calculs de thermohydrauliques (monophasiques) sont basés sur l'hypothèse d'incompressibilité. Dans ce cas il n'existe pas d'équation d'état puisque $\rho = cst$. Il est donc nécessaire d'établir une relation permettant de calculer le champ de pression correspondant.

En appliquant l'opérateur de divergence à l'équation de conservation du mouvement et en utilisant l'équation de conservation de la masse avec l'hypothèse d'incompressibilité, il vient :

$$\nabla \cdot (\nabla p) = \Delta p = \rho \nabla \cdot (\vec{\nabla} \cdot (\vec{v} \cdot \vec{v})) + \rho \vec{\nabla} \cdot \vec{g}$$

Avec Δ l'opérateur laplacien.

L'absence de dépendance temporelle dans cette relation signifie que le champ de pression doit être résolu à chaque pas de temps et en chaque point de la géométrie de façon à satisfaire l'hypothèse d'incompressibilité.

Modélisation de l'échange thermique à l'interface gaine/caloporteur

Le flux thermique échangé entre la paroi et le fluide peut se déduire directement par une résolution couplée des équations de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement. Les conditions limites en paroi alors utilisées expriment :

- la continuité du flux thermique
- la continuité du champ de vitesse

La paroi étant considérée comme fixe, la vitesse des particules de fluide doit donc y être nulle. La variation abrupte de la vitesse près de la paroi nécessite de considérer des échelles d'espace extrêmement petites par rapport à celle du problème étudié pour la résolution des équations de Navier-Stokes. En pratique ce problème n'est donc jamais résolu par « force-brute » mais plutôt par l'application d'un modèle simplifié permettant le calcul du flux thermique en paroi.

Couche limite hydrodynamique et thermique

Lorsque le fluide entre dans une conduite (cf. figure 1.8), les particules de fluides en contact avec la paroi adoptent la même vitesse que cette dernière (i.e. vitesse nulle), ce qui provoque un ralentissement de proche en proche des « couches » de fluide adjacentes.

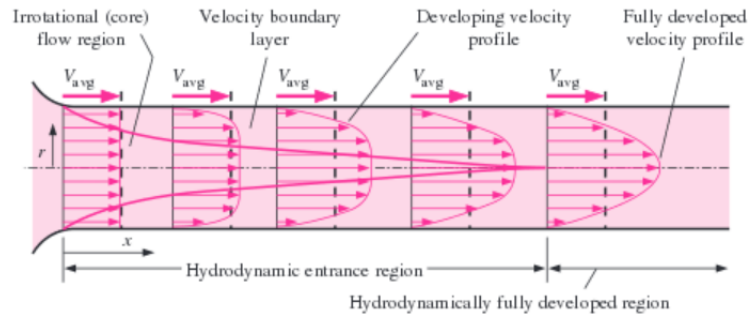


FIGURE 1.8: Développement de la couche limite hydrodynamique après entrée dans une conduite circulaire.

Ce frottement inter-couches est caractérisé par la viscosité du fluide. Cette viscosité peut aussi s'interpréter comme une diffusion cinématique (i.e. de la quantité de mouvement). Ce phénomène diffusif va propager la perturbation du champ de vitesse depuis la paroi (où la vitesse est nulle) jusqu'au centre de la conduite. Un écoulement est dit pleinement développé lorsque l'information relative à la condition de bord s'est propagée jusqu'au centre, aboutissant ainsi à un nouveau profil de vitesse (cf. figure 1.8).

La viscosité a tendance à diffuser l'information selon une direction normale à la paroi. Dans le même temps le phénomène d'advection propage cette information parallèlement à la paroi. Le nombre de Reynolds permet d'estimer (en ordre de grandeur) quel est le phénomène de propagation de l'information qui est dominant. Comme la plupart des nombres adimensionnels de l'hydraulique, il est construit comme un rapport, ici entre le processus d'advection/convection et le processus de diffusion :

$$Re = \frac{\text{advection cinématique}}{\text{diffusion cinématique}} = \frac{U_0 \cdot L}{\nu}$$

Avec U_0 la vitesse dans le sens de l'écoulement et L une distance caractéristique de cet écoulement (typique le diamètre d'une conduite fermée) et ν la viscosité cinématique en $(m^2 \cdot s^{-1})$.

La couche limite (ou visqueuse) se définit alors comme l'épaisseur du fluide en contact avec la paroi où les effets visqueux sont au moins aussi importants que les effets inertiels ($Re_x < 1$), (cf. figure 1.9).

De façon équivalente à la diffusion cinématique, pour un flux ou une température imposée en paroi les particules de fluide en contact avec la paroi vont rapidement se mettre à l'équilibre. La chaleur peut ensuite être propagée aux autres couches de l'écoulement soit par diffusion thermique soit par advection. La compétition entre l'advection (provoquée par l'écoulement forcé dans une direction donnée), et la diffusion thermique (transversale à l'écoulement) est aussi mesurée par un nombre adimensionnel, appelé nombre de Péclet :

$$Pe = \frac{\text{advection thermique}}{\text{diffusion thermique}} = \frac{U_0 \cdot L}{\alpha}$$

Avec α le coefficient de diffusion thermique $(m^2 \cdot s^{-1})$.

Il est également possible de définir une couche limite thermique (cf. figure 1.9) comme étant la couche de fluide caractérisée par un fort gradient thermique permettant la continuité du champ de température (entre la température de la paroi et celle loin de la paroi).

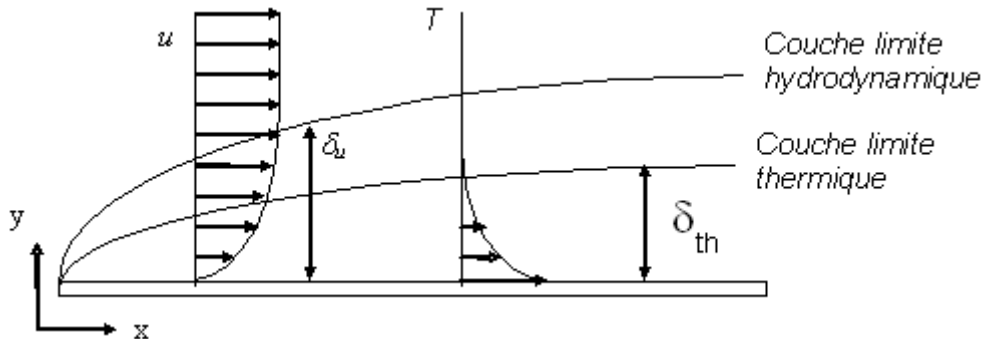


FIGURE 1.9: Couche limite hydrodynamique et thermique

Près de la paroi deux processus de diffusion ont donc lieu simultanément : la diffusion cinématique et la diffusion thermique. Ces deux processus peuvent s'influencer ; en effet si la diffusion cinématique est rapide alors la chaleur peut être propagée plus rapidement par ce processus que par la diffusion thermique. Au contraire, si la diffusion thermique est rapide, elle peut influencer la diffusion cinématique par le biais de la force d'Archimède. Le nombre adimensionnel de Prandtl est l'indicateur du processus de diffusion dominant :

$$Pr = \frac{\text{diffusion cinématique}}{\text{diffusion thermique}} = \frac{\nu}{\alpha}$$

En résumé, la chaleur se propage loin de la paroi soit par diffusion thermique, soit grâce au gradient de vitesse transversale du fluide (i.e. la convection). Le nombre adimensionnel de Nusselt quantifie l'importance de la diffusion thermique par rapport au flux total transmis au fluide :

$$Nu = \frac{\text{flux thermique réel}}{\text{flux diffusion thermique}} \approx \frac{\dot{q}}{\lambda \frac{(T_w - T)}{D_c}}$$

Avec :

- \dot{q} le flux de chaleur en paroi, ($W \cdot m^{-2}$)
- λ la conductivité thermique, ($W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$)
- D_c du longueur caractéristique de la diffusion thermique (perpendiculaire à la paroi)
- T_w et T les températures de la paroi et du fluide.

Pour un Re et un Pr faible (de l'ordre de 1), il apparaît que la propagation de la chaleur vers le *bulk*, c'est à dire le volume fluide sans les couches limites aux parois, est efficace par conduction ce qui abouti à un Nu également proche de l'unité. Intuitivement, il existe donc un lien entre ces nombres adimensionnels nous permettant d'estimer le « flux réel » de chaleur en paroi.

Loi de Newton et coefficient de transfert thermique

Pour un champ de température connu dans la couche limite thermique et en paroi, le flux de chaleur pourrait être déterminé via la loi de Fourier. Cependant on souhaite éviter une telle résolution pour ne considérer que la température de paroi et celle du *bulk*. Ces considérations aboutissent à la modélisation simplifiée de la loi de Newton :

$$\vec{q} = h_{cc}(T_w - T_b) \vec{n}$$

Avec :

- T_w la température en paroi (aussi appelée T_{wall}), (K)
- T_b la température du bulk, (K)
- \vec{n} le vecteur unitaire normal à la paroi
- h_{cc} le coefficient de conducto-convection, ($W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}$)

L'estimation du flux thermique requiert la connaissance d'un coefficient de transfert de chaleur noté h_{cc} . Cette variable est calculée par des fonctions semi-empiriques, appelées corrélations, dépendant à la fois des propriétés du caloporteur, de la vitesse, du type d'écoulement et de la géométrie.

Les corrélations permettent généralement d'estimer le nombre de Nusselt puisque ce dernier est directement proportionnel au coefficient de conducto-convection :

$$Nu = \frac{\dot{q}_{\text{réel}}}{\lambda \frac{(T_w - T_b)}{D_e}} = \frac{h_{cc}(T_w - T_b)}{\lambda \frac{(T_w - T_b)}{D_e}} = \frac{h_{cc} D_e}{\lambda}$$

Il est important de préciser que la plupart des corrélations sont obtenues pour des écoulements internes, (c'est à dire des conduites chauffantes où l'eau circule à l'intérieur du tuyau), dans ce contexte la longueur caractéristique D_c est sans ambiguïté le diamètre intérieur de la conduite. Ces résultats peuvent tout de même être exploités en écoulement externe (c'est le cas des REP où l'eau est en dehors du tube) grâce à une transformation appelée géométrie inversée (« *inverted geometry* », [26]).

Le diamètre hydraulique équivalent est alors calculé comme :

$$D_h = \frac{4 \cdot S_{\text{mouillé}}}{P_{\text{mouillé}}}$$

Avec :

- $P_{\text{mouillé}}$ le périmètre mouillé, (m)
- $S_{\text{mouillé}}$ l'aire de passage du fluide (perpendiculairement à la direction de l'écoulement), (m^2)

Ce diamètre hydraulique est une longueur caractéristique qui pourra, par exemple, être utilisée dans le calcul du Reynolds. En toute rigueur le diamètre hydraulique ne correspond pas à la longueur caractéristique dans l'échange de chaleur utilisée pour le calcul du Nusselt. Cette dernière correspond au diamètre chauffant calculé comme :

$$D_c = \frac{4 \cdot S_{\text{mouillé}}}{P_{\text{chauffant}}}$$

Avec $P_{\text{chauffant}}$ le périmètre chauffant, (m).

Notons cependant que de nombreuses corrélations sur le Nusselt sont construites en utilisant le diamètre hydraulique à la place du diamètre chauffant. C'est le cas pour les corrélations présentées dans la suite de ce document. Il convient alors d'utiliser uniquement D_h pour le calcul de h_{cc} .

Corrélation pour le coefficient de transfert thermique en régime turbulent

Les corrélations données le sont pour un régime turbulent (c'est le cas en REP) entièrement développé hydrauliquement et thermiquement. Il est à noter que la plupart des corrélations ont une précision comprise entre 10 et 20%⁶.

6. ce qui justifie de ne pas avoir à développer un modèle trop raffiné pour la représentation des cœurs, (cf. chapitre 2)

Les expériences ainsi que des développements théoriques permettent d'établir que l'expression du nombre adimensionnel Nusselt est bien approchée par des formules du type :

$$Nu = C \cdot Re^\alpha \cdot Pr^\beta \cdot \left(\frac{\mu_w}{\mu_b} \right)^\kappa$$

Avec C, α, β, κ des constantes dépendant du fluide et de la géométrie du sous-canal, μ_w la viscosité du fluide prise à la température de la paroi et μ_b la viscosité du fluide prise à la température du *bulk*. En général, on considère $\mu_w \approx \mu_b$ pour la gamme de température concernée par l'écoulement ($T_{in} < T < T_{out}$). Cette hypothèse peut-être retenue dans le cas d'un REP à dans un état stationnaire respectant les impératifs de sûreté.

1.2.3 Écoulement diphasique

Bien que le fonctionnement normal du circuit primaire des REP soit prévu pour un écoulement monophasique, l'étude des écoulements diphasiques est indispensable pour l'évaluation de l'état du cœur en conditions accidentelles. Cette partie sera essentiellement qualitative. Elle se concentre principalement sur les conséquences des régimes diphasiques sur l'évacuation de chaleur (i.e. h_{cc}).

Ébullition en vase (Pool Boiling)

L'ébullition en vase désigne l'ébullition d'un liquide non circulant⁷ sur une paroi solide. Cette situation est donc éloignée de celle d'un sous-canal de REP, mais son étude présente un grand intérêt pédagogique, car elle permet de comprendre les variations du coefficient de conducto-convection lors de l'apparition d'une phase vapeur.

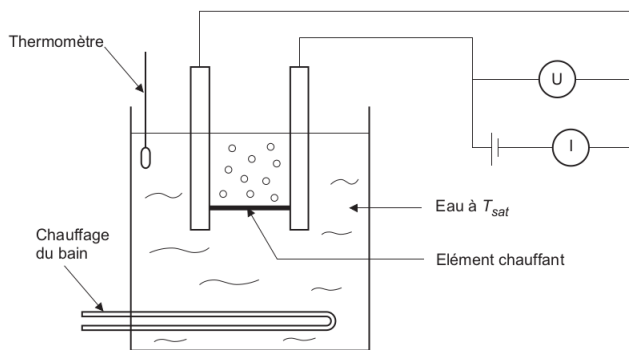


FIGURE 1.10: Schéma de l'expérience de Nukiyama, [30]

L'expérience la plus emblématique de l'ébullition en vase est celle de Nukiyama, réalisée en 1934. La figure 1.10 en propose un schéma de principe. Un fil est immergé dans un bain d'eau portée à la température de saturation. Ce dernier est parcouru d'un courant électrique lui permettant de produire un flux thermique surfacique (noté \dot{q}) uniforme. Le flux de chaleur transmis à l'eau est contrôlé par l'intermédiaire de l'intensité du courant traversant le fil. La température du bain (notée T_b) est mesurée en permanence ainsi que celle du fil (notée T_w).

7. Excepté du fait de sa propre convection naturelle

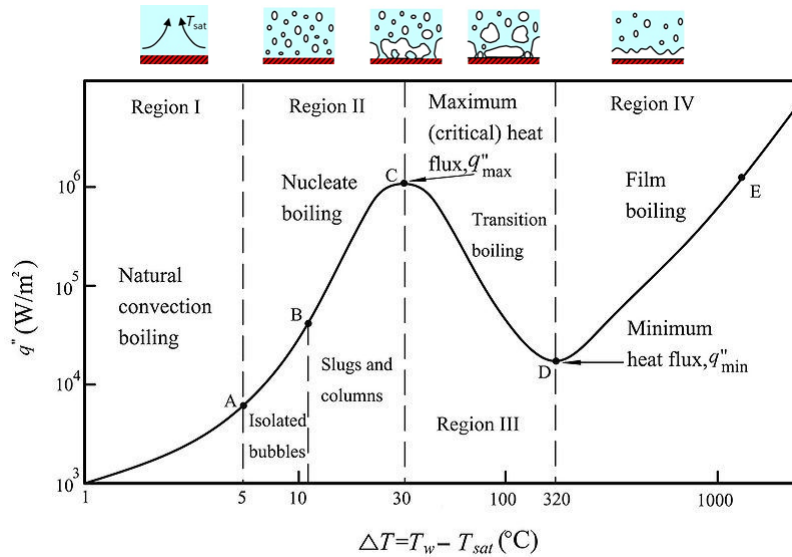


FIGURE 1.11: Évolution du flux thermique à la surface d'un fil en fonction de la différence entre la température de surface du fil et celle du *bulk* de l'eau (i.e. loin de la zone d'échange thermique) lors d'une ébullition en vase à pression atmosphérique. Les schémas au dessus du graphique représentent la configuration d'écoulement dans le voisinage du fil au fur à mesure que le flux surfacique augmente.

Cette expérience permet de tracer la courbe du flux surfacique en fonction de $(T_w - T_b)$ (cf. figure 1.11). La dérivée de cette courbe correspond alors au coefficient de transfert thermique h_{cc} .

Plusieurs régimes d'évacuation de la chaleur se dégagent :

- L'ébullition nucléée (du point A à C) : Le domaine précédant le point A correspond au transfert par écoulement monophasique sans apparition de phase vapeur. Au point A, les premières bulles apparaissent sur les sites de nucléation à la surface du fil. Le nombre de sites de nucléation actifs dépend de l'état de la surface du fil, de la mouillabilité de la surface et la capacité du fluide à chasser l'air des micro-cavités pour s'y infiltrer (i.e. viscosité du fluide). L'ébullition nucléée va considérablement augmenter le coefficient d'échange thermique grâce au changement de phase à proximité du fil. L'augmentation du flux thermique (de A vers C) accroît le nombre de bulles ainsi que leurs rayons moyens. Cependant, celles-ci se décrochent de leur site de nucléation avant de pouvoir coalescer entre elles, laissant toujours le fil mouillé. Le point C correspond au maximum de chaleur qui peut être échangé par ce mécanisme de nucléation, il est caractérisé par le flux critique (\dot{q}_{CHF} , CHF pour *critical heat flux*).
- l'ébullition de transition (du point C à D) : Au point C, la production de bulles est importante mais le liquide arrive encore à mouiller la paroi. Si l'élévation de T_w se poursuit alors le diamètre des bulles augmente jusqu'à ce qu'elles coalescent entre elles avant de se décrocher de la paroi. Elles forment alors des poches de vapeur qui seront de plus en plus étendues à la surface du fil. Ce phénomène entraîne la diminution du flux thermique échangé du fait de la moins bonne conduction thermique de la vapeur. Au point D, un film de vapeur entoure complètement le fil, l'isolant thermiquement du *bulk*, le flux de chaleur échangé atteint son minimum.
- L'ébullition en film (du point D à E) : Un film de vapeur entoure complètement le fil. Sous l'action du flux de chaleur, cette vapeur surchauffe ($T_{vapeur} > T_{sat}$), alimentant l'extension de cette phase côté *bulk*. Au delà d'une certaine température de paroi le

rayonnement joue un rôle significatif dans l'échange de la chaleur.

Ce que cette expérience enseigne (et qui reste vrai pour le cas en convection forcée) est que l'ébullition nucléée augmente le coefficient d'échange thermique jusqu'à un certain flux critique noté \dot{q}_{CHF} . Au delà de ce flux critique, le fil s'entoure d'une couche de vapeur, ce qui dégrade l'échange thermique et provoque une brusque augmentation de la température du fil pouvant mener à la destruction du matériau.

Ébullition en convection forcée (*Flow boiling*)

Contrairement à l'ébullition en vase, le liquide a ici un débit massique imposé. Au problème des différents régimes de transmission de la chaleur s'ajoute donc celui des régimes d'écoulement diphasique. Historiquement, l'ébullition en convection forcée a d'abord été étudiée pour des écoulements internes en conduite cylindrique dont la paroi est chauffée soit à flux thermique soit à température imposée.

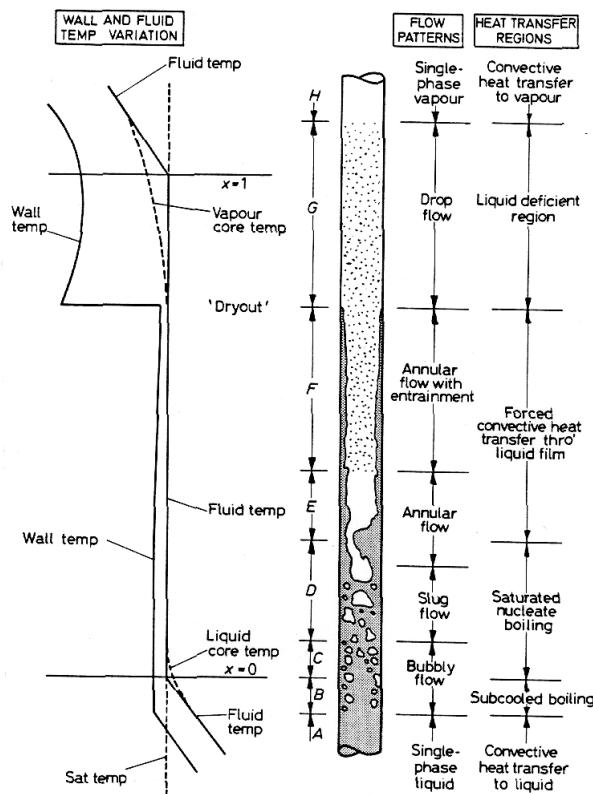


FIGURE 1.12: Région du transfert de chaleur en ébullition et en convection forcée pour un flux de chaleur fixe en paroi.

Dans la suite, nous considérons le cas d'une conduite verticale, où le fluide arrive par le bas à une température inférieure à T_{sat} (la température de saturation pour la pression d'entrée). La fig. 1.12 montre les différents régimes de transfert de chaleur ainsi que les configurations d'écoulement pour cette configuration pour un flux thermique fixé et axialement uniforme.

Comme pour l'ébullition en vase, plusieurs régimes thermiques d'échange de chaleur se dégagent :

- La convection forcée monophasique : La température de paroi et celle du *bulk* évoluent « parallèlement » pour un flux thermique donné, c'est la situation qu'est censée modéliser la loi de Newton.
- L'ébullition sous-saturée (*subcooled boiling*) : Bien que la température du *bulk* reste inférieure à la température de saturation, des bulles peuvent apparaître en paroi grâce à ses aspérités de surface. Ces bulles peuvent ensuite se décrocher de la paroi et se résorber dans le *bulk*, augmentant la température de ce dernier jusqu'à T_{sat} . diphasique. Le changement de phase ainsi que les turbulences créées par les bulles vont améliorer significativement l'échange de chaleur entre la paroi et le *bulk*. Cela doit se traduire par une hausse du coefficient de transfert afin de ne pas sur-estimer les température de la paroi (ou de sous-estimer la température du *bulk*).
- L'ébullition saturée (*saturated nucleate boiling*) : La température du *bulk* atteint la température de saturation, les bulles formées en paroi ne peuvent donc plus se résorber, elles deviennent plus nombreuses et coalescent entre elles ce qui donne lieu à des configurations d'écoulement variées. Dans le régime d'ébullition saturé, la température du *bulk* reste à T_{sat} du fait du changement de phase en cours. La température de paroi peut être considérée comme constante au premier ordre car le transfert de chaleur reste très efficace.

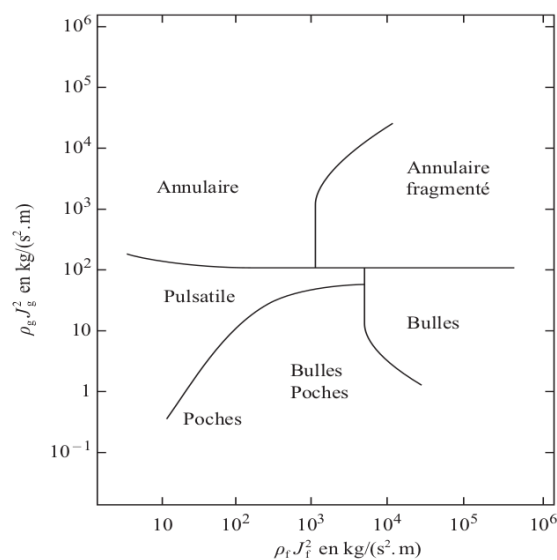


FIGURE 1.13: Carte d'écoulement diphasique de Hewitt et Roberts, réalisée avec un mélange air/eau, pour un écoulement vertical co-courant ascendant. Les paramètres ρ et J en abscisse et en ordonnée désignent respectivement la densité moyenne d'une phase (g pour gaz et f pour fluide) et le débit volumique moyenné spatialement et temporellement.

L'ébullition saturée est caractérisée par une grande variété d'écoulements possibles : à bulles, à bouchons, annulaire, etc... Bien que la prédiction d'un type d'écoulement diphasique repose sur l'examen d'un grand nombre de variables, des cartes d'écoulement (cf. figure 1.13) sont communément utilisées. Ces cartes d'écoulements⁸ sont en réalité une représentation simplifiée d'une situation physique complexe, les transitions entre écoulement se font de façon continue, en fonction des pertes de charges, du flux de chaleur en paroi, etc.. La détermination du régime d'écoulement diphasique permet le renvoi à l'utilisation d'un modèle spécifique pour le décrire.

8. valable pour une installation spécifique donnée

- La convection forcée par film liquide : La diversité des écoulements en ébullition nucléée saturée s'achève par l'écoulement annulaire par entrainement. Un film liquide en contact avec la paroi assure le transfert thermique jusqu'à la phase vapeur où l'évaporation se poursuit.
- Convection forcée en phase vapeur : Arrivé à une certaine hauteur, l'évaporation du film liquide est complète, la vapeur commence alors à surchauffer ($T_{vapeur} > T_{sat}$), c'est le phénomène d'assèchement. La disparition du film liquide entraîne une brusque diminution du coefficient de transfert de chaleur et donc une forte augmentation de la température de paroi.

Les écoulements diphasiques restent extrêmement complexes à simuler précisément. Au début de l'ébullition, les bulles forment une collection d'objets discontinus qui interagissent localement avec une phase continue et vice-versa lors de l'assèchement de la vapeur. Pour pouvoir traiter ce phénomène dans le formalisme des équations de Navier-Stokes, la géométrie est divisée en volume de contrôle au sein desquels chaque paramètre est moyenné spatialement et temporellement. Cette approche moyennée des équations de Navier-Stokes nécessite l'ajout de termes qui rendent compte des interactions entre les phases au sein des volumes de contrôle (e.g. coefficient de mélange, débit volumique de phases, tension de surface, etc...).

Les observations faites pour cette conduite verticale sont transposables aux géométries d'un REP. Le coefficient de conducto-convection est d'abord amélioré par l'apparition d'une phase vapeur. La disparition de la phase liquide est caractérisée (comme pour l'ébullition en vase) par un effondrement du h_{cc} .

Les crises d'ébullition

Un flux thermique critique est un seuil à partir duquel une diminution importante et abrupte du coefficient de transfert est observée. Elle entraîne une augmentation importante de la température de paroi.

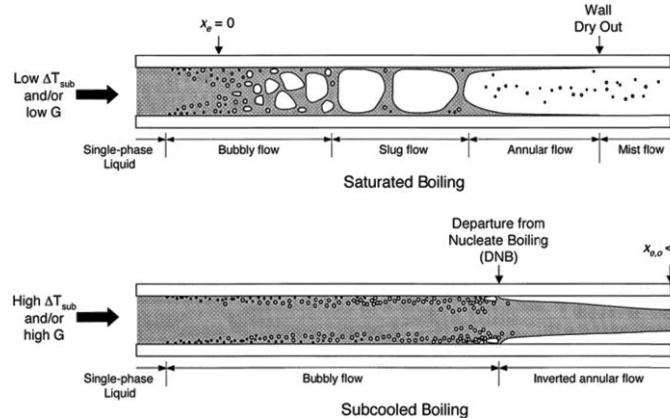


FIGURE 1.14: Illustration du *dryout* (figure du dessus) et du *DNB* (*departure from nucleate boiling*, figure du dessous).

Pour les écoulements forcés il existe deux types de flux critiques, ces derniers sont illustrés par la figure 1.14 et décrits ci-dessous :

- Le *dryout* : survient pour un titre élevé, c'est à dire un rapport élevée du débit de la vapeur par rapport au débit total (vapeur et liquide), après un écoulement en film et pour une certaine puissance délivrée dans le sous canal. Le film d'eau encore en contact avec la paroi, entraîné par le flux de vapeur, finit par disparaître entièrement sous l'effet

du chauffage en paroi. Cette disparition entraîne une dégradation significative du coefficient de transfert thermique⁹. Ne reste plus alors qu'une phase vapeur contenant des gouttes en suspension. La vapeur est ensuite surchauffée ($T_{vapeur} > T_{sat}$) ce qui élimine les gouttes encore en suspension (i.e. assèchement de la phase vapeur). Ce premier type de flux critique est un problème principalement rencontré dans les REB (Réacteur à Eau Bouillante).

- Le DNB (*Departure from Nucleate Boiling*) : il survient pour des flux thermiques surfaciques élevés (relativement au flux massique) et pour un titre faible (i.e. pendant ou avant la phase d'ébullition nucléée). La brusque génération de vapeur en paroi va permettre à un film vapeur de se former, ce qui va isoler thermiquement la paroi du *bulk*, dégradant fortement l'échange de chaleur. Ce phénomène, appelé caléfaction est similaire à celui de l'ébullition en vase (cf. figure 1.11, lors du passage du point C au point E en suivant un segment horizontal). Éviter ce second flux thermique critique constitue une contrainte de conception forte en REP.

1.3 Conception et dimensionnement de réacteurs à eau légère

La raison d'être des réacteurs électronucléaires est la production d'une énergie électrique la plus rentable possible et qui plus est compétitive vis-à-vis des autres moyens de production électrique. Les critères économiques vont donc naturellement orienter la conception vers une optimisation du rendement physique de la centrale.

En conséquence, le cœur est conçu neutroniquement de façon à maximiser l'énergie extraite du combustible (i.e. burnup) ainsi que sa puissance volumique (pour minimiser la masse de combustible).

Mais ces choix sont contraints, notamment par la thermohydraulique qui pose des limites sur la capacité du caloporteur à évacuer la chaleur tout en maintenant des niveaux de température et de pression acceptables pour l'intégrité du cœur. De même, pour des raisons thermomécaniques, il est nécessaire de pouvoir garantir l'autoportance des diverses structures du cœur ainsi qu'une résistance mécanique satisfaisante en dépit de l'irradiation, des vibrations hydrauliques, de la pression et du cyclage thermique imposés par le pilotage du cœur.

Toutes ces précautions se traduisent par ce qu'on appelle des limites de conception. Ces limites restreignent le choix des matériaux ainsi que les points de fonctionnement possibles du cœur de façon à garantir un fonctionnement sûr en condition nominale ou lors de transitoire de pilotage.

9. il est à noter que le saut de température de la paroi sera moins important que dans la situation du *DNB*

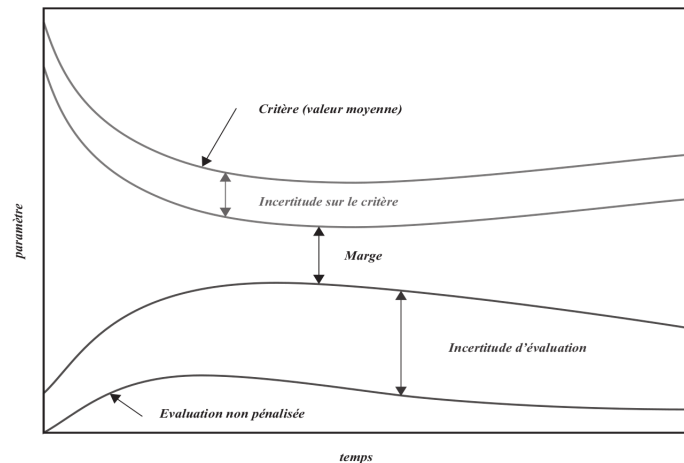


FIGURE 1.15: Illustration des marges et des incertitudes, [30]

Ce n'est néanmoins pas suffisant car la rétention de la radioactivité du cœur doit être assurée en toute situation, même accidentelle. L'analyse de sûreté consiste à anticiper les accidents possibles pour un design donné, à dégager des limites physiques¹⁰ appelées critères de sûreté, puis à vérifier que ces limites sont respectées en tenant compte de marges¹¹. Comme le montre la figure 1.15, une marge à un critère de sûreté peut être réduite à la fois par les incertitudes physiques dans l'expression du critère de sûreté (e.g. mesure de propriétés thermiques) et par les incertitudes lors de l'évaluation de ce critère (e.g. imprécision des codes). L'analyse de sûreté se traduit généralement par un sur-dimensionnement du réacteur ainsi que la mise en place de systèmes de protections/mitigations qui détériorent la compétitivité du réacteur.

Pour résumer, l'objectif de la conception de cœurs est de déterminer les paramètres optimaux du point de vue des performances tout en satisfaisant un compromis inter-disciplinaire centré sur la sûreté du réacteur. Chaque discipline fournissant des indications différentes sur la façon de raffiner le design, la conception d'un cœur se fait nécessairement de façon itérative, comme l'illustre la figure 1.16.

10. en terme de pression, température ou phénomènes à éviter

11. Mentionnons que des marges doivent également être respecter pour les critères de conception

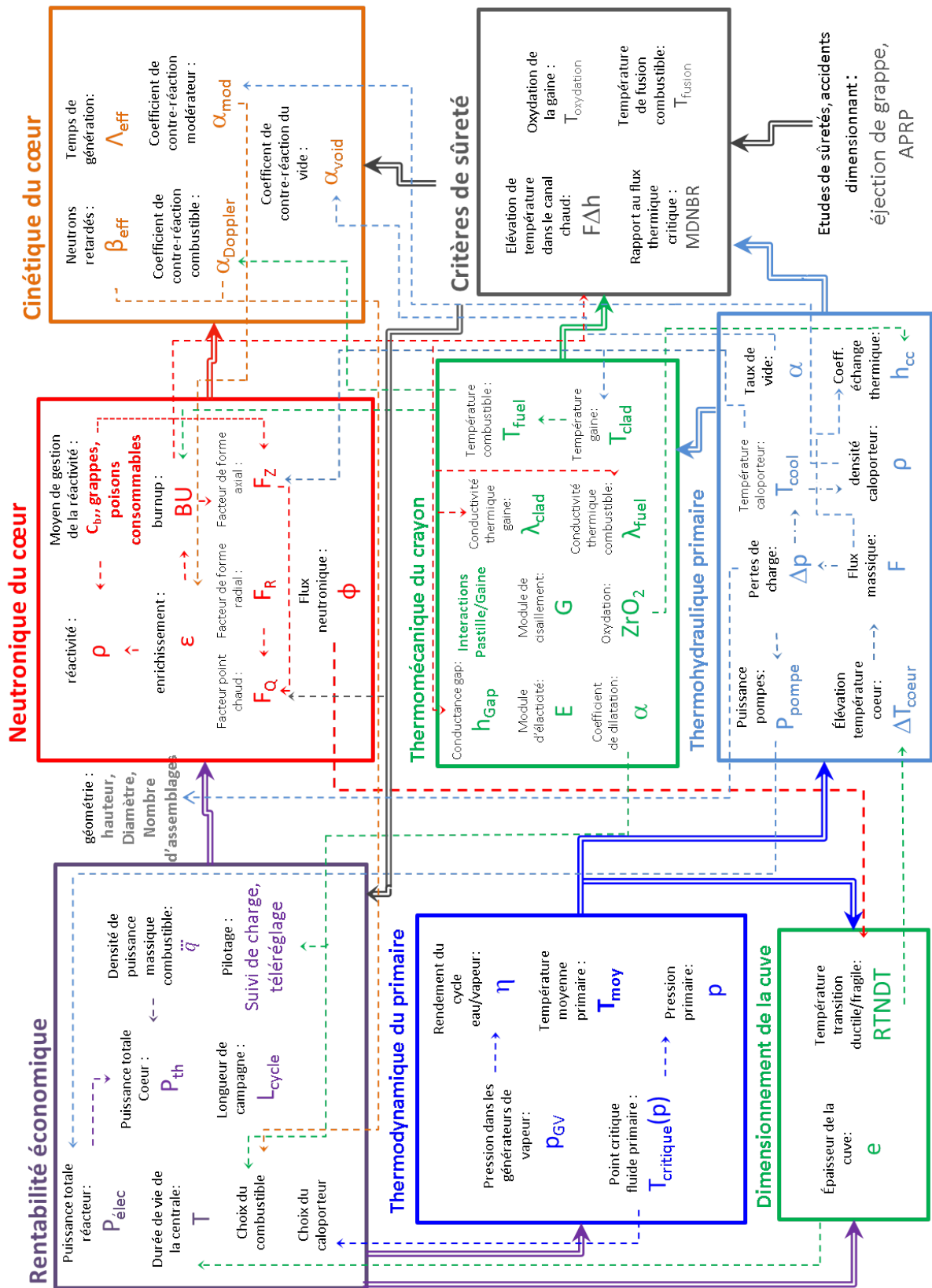


FIGURE 1.16: Illustration de la complexité des interconnexions entre les disciplines nécessaires à la conception de cœurs. Les doubles flèches indiquent le conditionnement d'une discipline par une autre. Les flèches en pointillées correspondent à une rétro-action de certaines variables sur d'autres.

La suite de cette section vise à introduire les principales limites de conception utilisées.

1.3.1 Les facteurs de forme

La distribution de puissance du cœur est communément résumée par des facteurs de forme adimensionnels qui renseignent sur les valeurs extrêmes :

- Facteur de forme radial :

Dans la suite ce de document nous l'utiliserons principalement à l'échelle de l'assemblage le plus chaud (i.e. avec la plus forte puissance) :

$$F_R^{\text{assemblage}} = \frac{\text{puissance totale de l'assemblage le plus chaud}}{\text{puissance moyenne d'un assemblage}}$$

La définition du facteur de forme radial peut également se décliner à l'échelle du crayon le plus chaud :

$$\begin{aligned} F_R^{\text{crayon}} &= \frac{\text{puissance totale maximale du crayon le plus chaud}}{\text{puissance moyenne des crayons}} \\ &= F_R^{\text{assemblage}} \times F_R^{\text{intra-assemblage}} \end{aligned}$$

Où :

$$F_R^{\text{intra-assemblage}} = \frac{\text{puissance maximale du crayon le plus chaud dans l'assemblage}}{\text{puissance moyenne des crayons dans l'assemblage}}$$

- Facteur de forme axial :

Ce facteur de forme est généralement utilisé à l'échelle du sous-canal le plus chaud (*hot channel*), c'est à dire la cellule élémentaire de l'assemblage où le flux thermique et/ou l'élévation d'enthalpie sont les plus importants :

$$F_z = \frac{\text{maximum local de puissance linéique (axiale) du crayon le plus chaud}}{\text{puissance linéique (axiale) moyenne du crayon le plus chaud}}$$

- Facteur de forme total ou facteur de point chaud :

Le point chaud (*hot spot*) désigne simplement la zone du crayon le plus chaud délivrant la puissance la plus importante :

$$F_Q = \frac{\text{maximal local de la puissance du crayon le plus chaud}}{\text{puissance moyenne des crayons en coeur}}$$

Compte tenu des définitions précédentes le facteur de point chaud s'exprime également comme :

$$F_Q = F_R^{\text{crayon}} \times F_z$$

Le F_Q typique d'un REP, avec zonage de son chargement, est de 2.6 avec $F_R \approx 1.6$ et $F_z \approx 1.6$.

Le respect des principales contraintes thermohydrauliques sur l'assemblage le plus chaud, le sous-canal le plus chaud et le point chaud assure que l'ensemble du cœur respecte ces conditions. L'analyse thermique du cœur consiste donc dans un premier temps à identifier les facteurs de forme et dans un second temps à mener des calculs de thermohydraulique uniquement sur les éléments les plus chauds (i.e. assemblage, sous-canal, crayon).

1.3.2 Critères de conception

L'objectif d'un réacteur nucléaire de puissance est de produire de l'énergie. A ce titre le cœur n'est qu'une source de chaleur exotique permettant de chauffer le caloporteur. La puissance du cœur n'est pas limitée par la neutronique mais par la capacité du circuit primaire à évacuer la chaleur et par le comportement thermomécanique des structures du cœur. C'est pourquoi les principales limites de conception portent sur les températures. Ces dernières sont exposées ci-dessous :

Limites de conception relatives au caloporteur

Point de fonctionnement du circuit primaire

Le rendement thermodynamique de la centrale est conditionné par la température moyenne de la source chaude (i.e. température moyenne du primaire) et celle de sa source froide (i.e. rivière, mer).

En augmentant la pression du primaire, on augmente la température de saturation de l'eau et donc la température de la source chaude.

Cependant la pression du primaire doit rester inférieure à 20 MPa. En effet à cette pression l'eau se trouve proche de son point critique, sa capacité calorifique y est excellente (ce qui permet un faible flux massique) mais elle est soumise à une instabilité. En cas d'augmentation de la température moyenne du primaire, cette valeur de capacité massique diminue fortement, conduisant à l'impossibilité d'évacuer la chaleur. La pression moyenne dans le circuit primaire des REP est donc fixée à 15.5 MPa, ce qui inclut les marges nécessaires aux transitoires de pilotage. Cette pression permet d'envisager une température maximale d'environ 600 K soit environ 20 K en dessous de la température de saturation [27]. Notons également qu'une pression plus élevée requiert une épaisseur de cuve plus importante.

La cuve est l'élément central du circuit primaire car c'est le seul composant qui ne peut pas être remplacé. Elle détermine par conséquent le temps de vie de la centrale. La dimensionnement de la cuve doit exclure tout risque de rupture brutale. L'irradiation, le chargement mécanique dû à sa mise sous pression, les sollicitations thermo-hydrauliques, la corrosion et le cyclage (lié aux conditions normales d'opération) sont des phénomènes qui favorisent l'apparition de fissures dans la cuve. En conséquence le gradient thermique subi par la cuve doit être limité, en particulier dans la zone irradiée du cœur, de façon à pouvoir résister à des variations violentes de température et de pression et ce à tout âge de la centrale [27]. En REP, l'élévation de température en cœur est généralement limitée entre 30 et 40 K. Des variations importantes de la pression/température peuvent survenir lors de transitoires de pilotage ou en situations accidentelles. C'est par exemple le cas lors d'un AAR (Arrêt Automatique du Réacteur) où la puissance neutronique s'annule quasiment instantanément. La cuve encore chaude est alors mise en contact avec de l'eau « froide ».

Critère du $F\Delta h$

Le fonctionnement des REP est prévu pour un écoulement monophasique. Cette condition est satisfaite par l'ajustement du flux massique et de la température moyenne du primaire (de sorte que $\Delta T_{\text{cœur}} = 40$ K). Cependant tous les assemblages n'ont pas le même niveau de puissance. Les disparités de puissance entre assemblages (i.e. $F_R^{\text{assemblage}}$) doivent donc être limitées afin qu'aucun assemblage n'atteigne la température de saturation¹² en sortie du cœur.

Cette limite peut être calculée à l'aide d'un simple bilan énergétique. Considérons le cas d'un sous-canal à l'état stationnaire où l'écoulement est supposé unidimensionnel vers le haut.

12. Il s'agit là d'une limite haute car elle ne laisse aucune marge en cas d'accident.

L'équation de conservation de l'énergie s'écrit alors comme :

$$\rho \underbrace{\left(\frac{\partial h}{\partial t} + v_z \frac{\partial h}{\partial z} \right)}_{=0} = \ddot{q} \frac{S_{\text{combu}}}{S_{\text{mouillée}}}$$

Avec :

- h l'enthalpie du fluide, ($W \cdot m^{-3}$), pour rappel l'enthalpie se définit comme : $h(T) = h(T_0) + \int_{T_0}^T C_p(T) dT$
- v_z la vitesse axiale du caloporteur, ($m \cdot s^{-1}$)
- S_{combu} la surface du combustible dans une coupe radiale, (m^2)
- $S_{\text{mouillée}}$ la surface occupée par le caloporteur, (m^2)
- \ddot{q} la puissance volumique délivrée par la pastille combustible, ($W \cdot m^{-3}$)

On pose $F = \rho \cdot v_z$, le flux massique du caloporteur, en ($kg \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$), supposé constant sur toute la hauteur de l'assemblage.

Le profil axial de puissance ne joue ici aucun rôle puisque seule la température de sortie de l'assemblage est considérée. Cette équation est donc intégrée sur toute la hauteur de l'assemblage d'où :

$$F \cdot \frac{\Delta h}{H} = \int_{z=0}^{z=H} \ddot{q} dz \cdot \frac{S_{\text{combu}}}{S_{\text{mouillée}}} = P \cdot \frac{S_{\text{combu}}}{S_{\text{mouillée}}} = P \cdot \frac{D_{\text{combu}}}{D_h}$$

Avec :

- H la hauteur de l'assemblage en (m)
- P la puissance totale de l'assemblage, (W)
- D_{combu} le diamètre du combustible, (m)
- D_h le diamètre hydraulique du sous-canal, (m)

En se ramenant au bilan d'énergie effectué dans un assemblage moyen (i.e. fournissant une puissance moyenne), on retrouve l'expression du facteur de forme radial :

$$\frac{F \Delta h}{F \cdot \overline{\Delta h}} = \frac{P_{\text{max}}}{\overline{P}} = F_R$$

Avec :

- P_{max} la puissance dans le sous-canal le plus chaud, (W)
- \overline{P} la puissance moyenne d'un sous-canal en cœur, (W)
- F le flux massique, ($W \cdot K^{-1} \cdot m^{-2}$)
- Δh l'élévation d'enthalpie dans le sous-canal le plus chaud, ($J \cdot Kg^{-1}$)
- $\overline{\Delta h}$ l'élévation d'enthalpie moyenne d'un sous-canal, ($J \cdot Kg^{-1}$)
- F_R le facteur de forme radial du cœur

Dans le cas d'un REP standard où le flux massique est imposé de sorte que le $\Delta T_{\text{cœur}}$ moyen soit de 40 K, l'élévation d'enthalpie nécessaire pour qu'un assemblage atteigne la température de saturation en sortie du cœur correspond à un facteur de forme radial de 1.55. Notons que cette limite ne dépend ni de la hauteur des assemblages, ni de leur flux massique.

Limites de conception relatives à la gaine

Contraintes générales

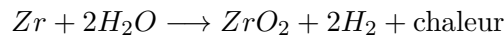
Le gaine doit assurer le confinement des éléments combustibles sans gêner la production de puissance. Cela se traduit par une multitude de critères :

- neutroniquement, sa section efficace d'absorption doit être faible.
- thermiquement sa conductivité thermique est satisfaisante. La gaine doit également présenter une bonne résistance thermomécanique au cyclage lié au pilotage du cœur.

- chimiquement, elle doit être résistante à la corrosion
- mécaniquement, la gaine doit conserver de bonnes propriétés structurales sous irradiation (i.e. autoportance de la gaine). Elle doit résister aux contraintes mécaniques dues au différentiel de pression entre sa surface intérieure et extérieure, à la corrosion des gaz issus des produits de fission et à la fragmentation de la pastille qui peut localement créer des points de pression.

Le choix d'un alliage en zirconium (désigné sous le terme de zircaloy) s'est imposé pour les réacteurs REP. Le point de fusion du zircaloy est situé à environ 1755 K. Pour les densités de puissance commune dans un REP (environ $250 \text{ W} \cdot \text{cm}^{-3}$ dans la pastille [31]), la température moyenne de la gaine est d'environ 600 K, elle subit alors un gradient thermique d'environ 100 K [27]. La fusion de la gaine n'est donc pas une contrainte de conception très forte.

L'oxydation de la gaine est due à une réaction exothermique du zirconium avec l'eau [31] :



La température de la gaine doit être maintenue en dessous de 1200 K pour éviter une vitesse d'oxydation excessive. Au delà de 1477 K, la réaction d'oxydation s'emballé.

L'épaisseur de la couche d'oxyde doit être limitée à $100 \mu\text{m}$ (soit environ 17% de son épaisseur initiale [27]) de façon à limiter la dégradation des propriétés mécaniques de la gaine. En pratique, c'est surtout cette contrainte ainsi que les déformations liés à l'irradiation des gaines (grandissement et arcquage) qui limitent les burnups atteignables en cœur ($\approx 60 \text{ GW}\cdot\text{j}/\text{ton}$, [31]).

Critère du MDNBR (Minimal Departure From Nucleate Boiling Ratio)

La contrainte la plus forte qui s'applique sur la gaine consiste à éviter la crise d'ébullition nucléée. Pour rappel, la crise d'ébullition nucléée survient lorsque le flux critique¹³ est atteint. Une couche de vapeur se crée en surface de la gaine, l'isolant thermiquement du caloporteur ce qui a pour conséquence une augmentation brutale de la température de la gaine.

La distance au flux critique est quantifiée par le rapport au flux critique, noté *DNBR* (*Departure from Nucleate Boiling Ratio*) aussi appelé RFTC (rapport au flux thermique critique). Il se calcule comme :

$$\text{DNBR}(z) = \frac{\dot{q}_{CHF}(z)}{\dot{q}(z)}$$

Où :

- $\dot{q}_{CHF}(z)$ correspond au flux critique à une hauteur donnée et calculée selon une corrélation, ($\text{W} \cdot \text{m}^{-2}$)
- $\dot{q}(z)$ est le flux thermique réel constaté à la paroi de la gaine à la même hauteur ($\text{W} \cdot \text{m}^{-2}$)

Le calcul de ce rapport en REP est basé sur différentes corrélations n'ayant pas toujours la même modélisation des phénomènes au flux critique, ni les mêmes facteurs correctifs pour prendre en compte la distribution axiale du flux. Aux imprécisions sur l'estimation du *DNBR* effectuée au travers de corrélations (et parfois loin du flux critique) doivent s'ajouter d'autres facteurs (e.g. marge dans les calculs de conceptions, incertitudes expérimentales, dégradations de la conductivité de la gaine, etc...) qui nécessitent de garantir une valeur minimal au *DNBR* bien supérieure à l'unité en toutes circonstances.

Le critère de sûreté porte sur la valeur minimale que peut atteindre le *DNBR* aussi appelé *MDNBR* (*Minimal Departure from Nucleate Boiling Ratio*).

13. Pour un assemblage typique de REP le flux critique est d'environ $250 \text{ W} \cdot \text{cm}^{-2}$

primary circuit inventory to the atmosphere are within regulations. Given the dependence of fission gas release on temperature, these limits are also imposed on fuel particle center temperature.

Steady-state 100% power $\approx 1300^{\circ}\text{C}$ (2372°F)
 Peak transient $\approx 1600^{\circ}\text{C}$ (2822°F) for short term

Since the particles are very small, the average temperature is very close to the center temperature. The full power limit minimizes steady-state diffusion, whereas the transient limit, based on in-pile tests, is imposed to minimize cracking of the protective coatings.

2.5 THERMAL DESIGN MARGIN

A striking characteristic of thermal conditions existing in any core design is the large difference among conditions in different spatial regions of the core. The impact of the variation in thermal conditions for a typical core is shown in Figure 2.6. Starting with the nominal core average condition characterized by the linear power rating $\langle q' \rangle$, defined by Equation 2.4, nuclear power-peaking factors, engineering, and process parameter uncertainty factors are sequentially applied, leading to a more limiting $\langle q' \rangle$ value. Each condition, appearing in Figure 2.6, is clearly defined by a combination of the terms nominal, average, peak, and maximum. No consistent set of definitions exists for these terms. However, a consensus of usage, which we adopt, is the following:

Nominal: Normally, the value of a parameter calculated using variables at their design-specified values.

Average: Usually, a core or assembly or pin averaged value. The distinction must be made or inferred from the application.

Peak: Sometimes referred to as hot spot; refers exclusively to a physical location at which the extreme value occurs; that is, peak pin is that pin located

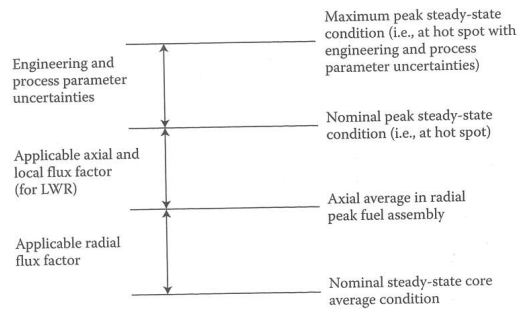


FIGURE 2.6 Thermal design nomenclature.

where the radial power p at an axial location along *Maximum:* Value of a parameter of the variables from

These differences stem from engineering and process parameter steady-state core average condition parameters beyond those showing CHF condition, margins in and process parameter uncertainty failure limit is unity in MDNBR respond to the highest power rating to accommodate uncertainties power decreases to ultimately design for MDNBR shown are all specified utilized. The radial and axial power in a classic core that follow shape. The values shown in Figure for typical fuel cells from the S

MDNBR	
Design condition	~ 2.19
Safety analysis limit	~ 1.43
Design limit	~ 1.26
Correlation limit	~ 1.17
Failure limit	1.00

FIGURE 2.7 Thermal analysis Texas PWR Plant Final Safety Analysis

* A transition core is composed of fuel assemblies of a new design are graded

FIGURE 1.17: Marge de sûreté vis à vis de la variable MDNBR pour des valeurs typiques de REP. [26]

Le figure 1.17, illustre les valeurs seuil que peut atteindre le *MDNBR* en fonction des conditions d'opération d'un cœur de REP typique. On retiendra qu'en cas accidentel le *MDNBR* doit être supérieur à 1.3 tandis qu'en fonctionnement nominal cette valeur est augmentée à 2.2. Le respect de ce critère de sûreté est fortement contraignant pour le dimensionnement de la puissance maximale du cœur. Si la puissance ne peut être aplatie alors le débit massique en entrée des assemblages devra être augmenté. Ainsi, pour une puissance thermique imposée, la puissance de la pompe sera plus élevée (diminution du *power to flow ratio*) ce qui dégradera le rendement énergétique de l'installation.

Limites de conception du combustible

Contraintes générales

Historiquement plusieurs types de combustible ont été considérés, parmi lesquelles [30] : l'uranium métallique (U), le carbure d'uranium (UC), le nitrure d'uranium et l'oxyde d'uranium (UO_2) et de façon plus anecdotique l'hydrure d'uranium-zirconium (UZrH).

En dépit de sa densité modeste (ce qui augmente le besoin d'enrichissement) et de sa faible conductivité thermique, l' UO_2 s'est imposé dans les REP grâce à son haut point de fusion, sa bonne capacité calorifique mais surtout son faiblement gonflement sous irradiation ainsi que sa bonne tolérance chimique.

Étant une céramique, l' UO_2 est fragile mécaniquement, ainsi le gradient de température radial entraîne dès la première montée en puissance la fissuration de la pastille combustible. Il en résulte une plus faible conductivité thermique au sein de la pastille et la fermeture du jeu pastille/gaine.

Critère sur la puissance linéique

Pour un réacteur de puissance, la densité de puissance dans le combustible est une variable à maximiser car elle permet à la fois de maximiser la puissance du réacteur et de minimiser l'inventaire combustible. Cependant elle est limitée par la température maximum atteignable dans le combustible, à savoir sa température de fusion. Pour l' UO_2 , la température de fusion est d'environ 3200 K, cette valeur est diminuée à environ 2900 K afin de tenir compte de l'irradiation et des incertitudes, [27].

Pour un profil de puissance à l'équilibre et une densité de puissance considérée comme radialement uniforme dans le crayon, la température maximale se trouve au centre de la pastille. La résolution de l'équation de la chaleur pour cette représentation idéalisée du combustible permet de montrer que l'écart de température entre le centre et la surface de la pastille (température minimum) est directement lié à la puissance linéique [25] :

$$\Delta T_{comb} = \frac{\dot{q}}{4\pi\bar{\lambda}}$$

Avec $\bar{\lambda}$ la conductivité moyenne du combustible dans la pastille. Notons que ce résultat est indépendant du diamètre du crayon. Limiter la température maximale du combustible revient donc à limiter la puissance linéique maximale. La température de fusion du combustible est obtenue pour une densité de puissance linéique d'environ $720 W \cdot cm^{-1}$ [27]. Ce critère est ramené à $590 W \cdot cm^{-1}$ en REP pour tenir compte de l'irradiation du combustible et des incertitudes expérimentale¹⁴. Notons que la température maximale au centre de la pastille dépend de sa température de surface, elle-même tributaire de l'efficacité du transfert thermique dans la gaine et *in fine* de la température du caloporteur.

14. La puissance linéique maximale est encore diminuée à $522 W \cdot cm^{-1}$ en considérant les incertitudes liées à l'instrumentation [27].

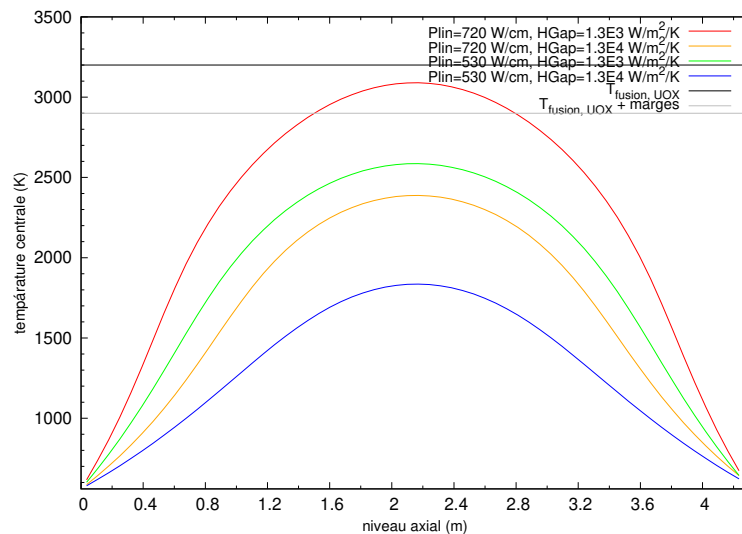


FIGURE 1.18: Température centrale d'un crayon pour une puissance linéique moyenne imposée (le profil de puissance imposé est alors sinusoïdal). Résultats obtenus avec le code BATH (voir chapitre 2).

Comme le montre la figure 1.18, le seuil de puissance linéique maximale adopté en REP est une valeur très prudente. En fonctionnement normal la plupart des réacteurs travaillent avec une puissance linéique maximale de l'ordre de $420 \text{ à } 460 \text{ W} \cdot \text{cm}^{-1}$. Une telle restriction est en réalité liée à la conservation d'une température de gaine inférieure à la limite d'oxydation lors d'un APRP (Accident Perte Réfrigérant Primaire) [31] ainsi qu'à une limitation de l'interaction pastille/gaine.

Une fois de plus le critère sur la puissance linéique maximale peut être exprimé en fonction des facteurs de forme :

$$\dot{q}_{max} = \bar{\bar{q}} \cdot S_{comb} \cdot F_Q$$

Avec :

- $\bar{\bar{q}}$ la puissance volumique moyenne du combustible, ($\text{W} \cdot \text{cm}^{-3}$)
- \dot{q}_{max} la puissance linéique maximale dans le combustible, ($\text{W} \cdot \text{cm}^{-1}$)
- S_{comb} surface de la pastille combustible pour une coupe radiale, (cm^2)
- F_Q le facteur de point chaud.

Pour un assemblage typique de REP comportant 17 crayons par côté et 25 tubes guides, ainsi que pour une densité de puissance moyenne d'environ $\bar{\bar{q}} = 300 \text{ W} \cdot \text{cm}^{-3}$, un facteur de point chaud $F_Q = 3.68$ est nécessaire pour atteindre la limite de la puissance linéique (i.e. $\dot{q}_{max} = 590 \text{ W} \cdot \text{cm}^{-1}$).

Le premier critère de conception sur le $F\Delta H$ qui limite le F_R à 1.55, restreint les valeurs du facteur de forme axial à F_z sous 2.37. Pour un profil axial de puissance sinusoïdal, qui est par défaut celui rencontré pour un combustible neuf¹⁵, le F_Q vaut environ 1.6.

On peut donc conclure que ce dernier critère sera quasiment toujours respecté. Il pose néanmoins des contraintes de conception dans le cas d'un zonage axial des crayons ou pour le dimensionnement des grappes de contrôle.

15. au couplage thermohydraulique près

1.3.3 Prédimensionnement géométrique d'un SMR

- Une baisse du rendement physique de la centrale est acceptable à condition qu'elle implique :
- une réduction de l'investissement financier initial nécessaire à la construction de la centrale.
 - un niveau de sûreté au moins équivalent à celui des centrales actuelles.

La cuve étant l'un des éléments les plus onéreux du cœur, sa taille est revue à la baisse.

Afin de limiter la dégradation des performances neutroniques du cœur liée à la réduction de sa taille, nous nous intéresserons au dimensionnement d'un SMR de $900 MW_{th}$, ce qui constitue la puissance maximale considérée pour ce type de réacteur [32]. Les designs proposés dans la suite reposent grandement sur ceux des REP déjà existants. De cette façon, de multiples critères de conception sont supposés valides tel que le comportement thermomécanique des crayons. Nous supposerons que le SMR considéré utilise un circuit primaire dont le point de fonctionnement thermodynamique est identique à celui d'un REP conventionnel, à savoir une pression moyenne de 15.5 MPa, une température moyenne de 580 K et une élévation du caloporteur de $\Delta T_{caloporteur} = 40$ K en cœur.

En ce qui concerne les assemblages, le rapport entre la taille du crayon et le pas du réseau constitue un optimum neutronique entre le ralentissement des neutrons et leur absorption par les résonances du combustible [17]. Le diamètre des crayons est également soumis à des considérations thermohydrauliques (i.e. surface d'échange). En conséquence, cette valeur est gardée identique à celle utilisée dans les REP.

Dans un assemblage 17x17, la puissance volumique des REP est de l'ordre de $300 W \cdot cm^{-3}$ dans le combustible soit environ $100 W \cdot cm^{-3}$ dans l'assemblage. Ces densités de puissance constituent un optimum entre la production d'énergie et des niveaux de température acceptables. Le niveau de puissance et sa densité permettent de contraindre le volume actif du cœur (i.e. sans réflecteur ou couverture fertile) du SMR à environ $9 m^3$. La forme des cœurs est approximativement cylindrique. La minimisation du taux de fuite neutronique incite à maximiser le ratio volume sur surface, ce qui revient imposer un rapport entre le diamètre (D) et la hauteur (H) du cylindre de 1. Dans notre cas, cela aboutit à un rayon du cœur $R \approx 115$ et une hauteur $H \approx 230$ cm.

Notons que l'application de la théorie de la diffusion à 1 groupe en énergie à un cœur cylindrique considéré comme homogène permet une optimisation plus fine. En effet dans cette configuration le coefficient de multiplication effectif du cœur s'exprime comme [19] :

$$k_{eff} = \frac{k_{\infty}}{1 + M^2 \cdot B^2}$$

Avec :

- k_{eff} le coefficient de multiplication effectif.
- k_{∞} le coefficient de multiplication en milieu infini, qui correspond au rapport du taux de génération sur le taux d'absorption dans le milieu.
- M^2 l'aire de diffusion, (cm^2)
- B^2 le laplacien géométrique, première valeur propre de l'opérateur laplacien, (cm^{-2})

Où le laplacien géométrique s'exprime comme :

$$B^2 = \left(\frac{\mu_0}{R}\right)^2 + \left(\frac{\pi}{H}\right)^2$$

Avec μ_0 la premier zéro de la fonction de Bessel du première espèce d'ordre 0. Le terme :

$$\frac{1}{1 + M^2 \cdot B^2}$$

représente la probabilité de non fuite du réacteur. Pour une composition matérielle donnée, le k_{eff} sera d'autant plus grand que cette probabilité sera grande, ce qui revient à minimiser le laplacien géométrique. En travaillant à volume constant (ce qui lie les variables R et H), on trouve que le minimum est atteint pour :

$$B_{geo}^2 \text{ minimum} \longrightarrow \frac{D}{H} = \frac{2 \cdot \mu_0^2}{\pi^2} \approx 1.167$$

En pratique il s'avère que le rapport D/H des REP est inférieur à l'unité comme le montre le tableau 1.1.

type de réacteur	REP 900 MW _e	REP 1300 MW _e	REP 1400 MW _e	EPR
rapport D/H	0.82	0.78	0.78	0.89

Tableau 1.1: Évolution du rapport D/H pour les différents modèles de REP

Étant donné la surface d'un assemblage des REP et de celle de notre cœur cylindrique, notre premier design de cœur de SMR peut contenir environ 85 assemblages, ce qui est arrondi à 89 pour satisfaire à un arrangement concentrique des assemblages.

Le flux massique moyen nécessaire pour respecter un $\Delta T_{cœur}$ de 40 K se déduit par le même raisonnement qui a servi à établir la limite du $F \cdot \Delta h$:

$$F \cdot \frac{\Delta h}{H} = F \cdot C_p \cdot \frac{\Delta T_{cœur}}{H} = \bar{P}_{assemblage} \cdot \frac{D_{combu}}{D_h}$$

Avec $\bar{P}_{assemblage}$ moyenne d'un assemblage en cœur, (W).

L'ensemble des spécifications du SMR utilisées dans la suite sont résumées dans le tableau 1.2.

puissance neutronique (P_{th})	900 MW _{th}
nombre d'assemblage	89
hauteur des assemblages	230 cm
largeur des assemblages	21.42 cm
diamètre des crayons	0.40945 cm
épaisseur du gap	0.00855 cm
épaisseur de gaine	0.057 cm
$\Delta T_{cœur}$	40 K
flux massique pour un assemblage 17x17	1908 kg · m ⁻² · s ⁻¹
flux massique pour un assemblage 19x19	2344 kg · m ⁻² · s ⁻¹
flux massique pour un assemblage 21x21	3209 kg · m ⁻² · s ⁻¹

Tableau 1.2: Spécifications géométriques d'un SMR 900 M_{th}

1.3.4 Méthodologie globale de conception des cœurs

La méthodologie ici proposée est principalement axée sur la conception neutronique du cœur. Même au sein d'une seule discipline, comme la neutronique, les différents choix de conception (e.g. type de combustible, enrichissement, gestion de la réactivité, etc) sont susceptibles de

s'influencer mutuellement. C'est pourquoi toute méthodologie de conception se doit d'être progressive afin d'identifier ces contre-réactions et éventuellement de les intégrer. Il est également nécessaire de s'assurer au fur et à mesure de l'élaboration du design du respect des différentes limites de conception précédemment évoquées. En conséquence, la conception des cœurs de SMR est divisée en trois grandes étapes de complexité croissante :

- **L'étape assemblage** : En premier lieu le niveau d'enrichissement doit être fixé afin de répondre aux attentes en termes de burnup et plus marginalement en termes de conversion. Pour ce faire des calculs d'évolution sont menés à l'échelle assemblage selon la méthodologie exposée dans le chapitre 3. Le niveau d'enrichissement détermine la réserve de réactivité qui devra être compensée au cours du cycle. Pour évaluer la faisabilité de cette tâche et déterminer les moyens de gestions appropriés, un programme préliminaire de gestion de la réactivité est proposé. Cette étape permet également une première estimation des paramètres cinétiques de sûreté, notamment des coefficients de contre-réaction thermique.
- **L'étape cœur** : La prise en compte du détail spatial permet la vérification des principaux critères de conception relatifs aux facteurs de forme (i.e. $F \cdot \Delta H$, MDNBR). La répartition naturelle du flux en début de cycle n'est pas particulièrement satisfaisante ce qui nécessite la mise en place d'une stratégie d'aplatissement de la nappe de puissance. Cet aplatissement devra rester effectif sur toute la durée du cycle. L'étape cœur permet également d'affiner la gestion de la réactivité, grâce à la prise en compte du taux de fuite réel ainsi que des contraintes sur les redistributions de puissance qu'elle est susceptible d'induire.
- **L'étape de vérification de la sûreté** : La sûreté des concepts proposés est évaluée sur leurs comportements lors d'un transitoire dimensionnant : l'éjection de grappe. Lors de ce transitoire exigeant s'appliquent des critères de sûreté visant à assurer l'intégrité du crayon combustible ou a minima la rétention des éléments radioactifs en cœur. Selon le type d'accident envisagé, les critères de sûreté appliqués peuvent se révéler plus restrictifs que les limites de conceptions utilisées en conditions nominales. Cette étape est donc indispensable pour mettre en lumière les faiblesses du design (e.g. excès de bore, poids des grappes de contrôle trop important) et envisager leurs corrections.

Chapitre 2

Outils dédiés à l'évaluation de sûreté de concepts innovants

La philosophie suivie pour le développement de nos outils académiques est de privilégier les modèles et les méthodes numériques les plus simples et les plus robustes. Le recours à une démarche simpliste est motivée par plusieurs aspects :

- Avoir des méthodes souples et facilement adaptables.
- Les calculs sont destinés à des cœurs de réacteurs en cours de conception, où aucun paramètre ne doit être fixé a priori. Les évaluations de sûreté ainsi obtenues, même grossières, ont pour vocation à expliciter des limites de conception afin d'aboutir à des réacteurs innovants et plus sûrs.
- Pouvoir faire des études rapides, ce qui pose une limite sur la complexité des méthodes numériques employées, en faisant varier simplement de nombreux paramètres, permettant ainsi d'envisager les solutions techniques susceptibles d'améliorer le design.
- Nos études portant sur des réacteurs innovants, aucune donnée expérimentale n'est disponible, ce qui rend non pertinent tout calcul de haute précision.

Ces choix volontairement simplistes pourront être raffinés au fil des études si le besoin s'en fait sentir.

Ce chapitre est structuré de la façon suivante :

1. Présentation de la méthode NDM (*Nodal Drift Method*, [33]) permettant la résolution des équations de la diffusion neutronique. La gestion de la dépendance spatiale du coefficient de diffusion sera explicitée ainsi que les conditions limites utilisées et l'algorithme de mise à l'équilibre.
2. Présentation du code simplifié TLP (*Thermal Lumped Parameter*, [14]) qui permet une résolution minimaliste du champ de température nécessaire au couplage avec la neutronique.
3. Présentation du code BATH (*Basic Approach to ThermalHydraulics* [28]) qui en comparaison au code TLP vient raffiner le traitement thermique de la pastille combustible.
4. Validation. Les différents couplages seront testés et validés sur le « benchmark du mini-core ». D'abord sur un cas stationnaire à pleine puissance puis sur un transitoire accidentel d'éjection de grappe. Ce dernier cas sera l'occasion d'apprécier l'apport du raffinement de la thermique combustible permis par BATH.

2.1 La Nodal Drift Method (NDM)

2.1.1 Présentation des équations

La théorie de la diffusion est l'approximation la plus simple de l'équation de Boltzmann qui permette de calculer l'évolution du flux avec un détail spatial et énergétique. La NDM (*Nodal Drift Method*) est un ensemble de méthodes permettant la résolution des équations de la diffusion à deux groupes d'énergie et à 6 familles de précurseurs.

Le découpage en deux groupes d'énergie est communément retenue pour les calculs de REP à l'échelle d'un cœur complet [17]. Cette répartition est en accord avec la distribution énergétique du flux, appelée spectre, obtenue dans ce type de réacteurs et qui se ramène schématiquement à deux « bosses » correspondant à une distribution thermique (issue du ralentissement des neutrons) et une distribution rapide (issue de la fission). La répartition en 2 groupes d'énergie est la discrétisation énergétique minimale pour apprécier la différence de comportement entre ces deux populations de neutrons. Pour les neutrons rapides qui ont des vitesses plus importantes, le couplage entre les différentes zones du cœur est meilleur. Les fuites hors du cœur sont également plus probables pour les neutrons du groupe rapide. Une étude de sensibilité au nombre de groupes d'énergie (corrélée à la discrétisation du maillage) est proposée en annexe de ce chapitre.

Pour résoudre ces équations, le cœur du réacteur est discrétisé en un maillage généralement cartésien du fait de la géométrie des assemblages de REP. En chaque nœud du maillage les équations discrétisées, ici données dans un cas 1D, sont résolues :

$$\begin{aligned} \left. \frac{dn_1}{dt} \right|_i^t &= D_1 \frac{(\phi_1^{i+1} + \phi_1^{i-1} - 2 \cdot \phi_1^i)}{\Delta x^2} \\ &+ ((1 - \beta_{eff}) \nu_1^i \Sigma_{fis,1}^i - \Sigma_{abs,1}^i - \Sigma_{scatt,1 \rightarrow 2}^i) \cdot \phi_1^i \\ &+ ((1 - \beta_{eff}) \nu_2^i \Sigma_{fis,2}^i + \Sigma_{scatt,2 \rightarrow 1}^i) \cdot \phi_2^i \\ &+ \sum_{j \in family} \lambda_j \cdot p_j \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left. \frac{dn_2}{dt} \right|_i^t &= D_2 \frac{(\phi_2^{i+1} + \phi_2^{i-1} - 2 \cdot \phi_2^i)}{\Delta x^2} \\ &- (\Sigma_{abs,2}^i - \Sigma_{scatt,2 \rightarrow 1}^i) \cdot \phi_2^i \\ &+ \Sigma_{scatt,1 \rightarrow 2}^i \cdot \phi_1^i \end{aligned}$$

$$\left. \frac{dp_j}{dt} \right|_i^t = \beta_j \cdot (\nu_1^i \Sigma_{fis,1}^i \phi_1^i + \nu_2^i \Sigma_{fis,2}^i \phi_2^i) - \lambda_j \cdot p_j$$

Avec :

- ϕ_g^i le flux neutronique ($neutron \cdot cm^{-2} \cdot s^{-1}$) dans le groupe d'énergie g au nœud i et au temps t . Pour rappel, le flux s'exprime comme le produit $v_g \cdot n_g$, avec v_g la vitesse moyenne des neutrons (en $cm \cdot s^{-1}$) dans le groupe g et n_g la densité de neutrons ($neutron \cdot cm^{-3}$) dans le groupe g .
- ν_g le nombre moyen de neutrons émis par fission dans le groupe g .
- $\Sigma_{fis,g}^i$ la section efficace macroscopique de fission (en cm^{-1}) dans le groupe g , au nœud i et au temps t .
- $\Sigma_{abs,g}^i$ la section efficace macroscopique d'absorption (en cm^{-1}) dans le groupe g , au nœud i et au temps t .

- $\Sigma_{scatt,g \rightarrow g'}^i$ la section efficace macroscopique de diffusion du groupe g au nœud i et au temps t .
- D_g le coefficient de diffusion (en cm) du groupe g au nœud i et au temps t .
- p_j la densité de précurseurs de la famille j (en $precurseurs \cdot cm^{-3}$), au nœud i et au temps t .
- λ_j la constante de décroissance (s^{-1}) des précurseurs dans la famille j .
- β_j la fraction de neutrons retardés produits de la famille j lors d'une fission.
- β_{eff} la proportion totale de neutrons retardés, définie comme $\beta_{eff} = \sum_{j \in family} \beta_j$.
- Δx le pas d'espace (en cm), aussi défini comme la distance entre deux nœuds.

Ce schéma numérique de discrétisation porte le nom de schéma aux différences finies (abrégié en DF). Grâce à cette transformation, les relations différentielles sont approximées par des relations algébriques facilement calculables par ordinateur. Les DF sont une des méthodes les plus simples mais également l'une des mieux connues et des plus robustes pour la résolution d'équations aux dérivées partielles (EDP).

Cette résolution suppose que dans chaque volume associé à un nœud, la distribution de neutrons (ou de précurseurs) est uniforme. Cette hypothèse pose implicitement une limite sur la taille maximale du maillage pour que les résultats de la simulation soient significatifs. Les schémas en DF sont généralement dépréciés pour des géométries trop complexes.

La limite énergétique entre le groupe thermique et rapide est communément placée à 0.625 eV. Cette valeur optimale est, en outre, censée limiter le phénomène d'*up-scattering* qui correspond à une collision élastique où le neutron regagne de l'énergie cinétique. La section efficace $\Sigma_{scatt,2 \rightarrow 1}$ modélise cette réaction. Cette dernière est assez réduite puisqu'en moyenne $\Sigma_{scatt}^{1 \rightarrow 2}$ est environ 10 fois plus grande que $\Sigma_{scatt}^{2 \rightarrow 1}$. En pratique cette réaction est négligée dans l'étude des REP. Cependant, dans la perspective de l'étude de réacteurs faiblement modérés, cette option est gardée ouverte.

Par soucis de lisibilité, les équations discrétisées ont été écrites dans l'hypothèse d'une géométrie 1D. Les nœuds y sont alors indicés en fonction de leur position (i.e. indice i). Le temps est également discrétisé. Les valeurs prises par ce paramètre sont indicés par la lettre t , ce qui correspond à un nombre de pas de temps élémentaires (Δt). Nous reviendrons dans la suite sur les techniques d'intégration testées et utilisées pour la NDM. Dans les équations fournies ci-dessus, la dépendance au temps des sections efficaces ainsi que des densités de neutrons a volontairement été omise par souci de lisibilité.

Les géométries envisagées par la suite sont le plus souvent tridimensionnelles. L'opérateur de diffusion s'exprime alors comme :

$$D\Delta\phi = D\left(\frac{(\phi_{i+1,j,k} + \phi_{i-1,j,k} - 2 \cdot \phi_{i,j,k})}{\Delta x^2} + \frac{(\phi_{i,j+1,k} + \phi_{i,j-1,k} - 2 \cdot \phi_{i,j,k})}{\Delta y^2} + \frac{(\phi_{i,j,k+1} + \phi_{i,j,k-1} - 2 \cdot \phi_{i,j,k})}{\Delta z^2}\right)$$

Où le triplet (i, j, k) désigne les coordonnées du nœud dans le maillage tridimensionnel. La dépendance au groupe d'énergie des neutrons a été ici omise. Notons que cette discrétisation du laplacien, appelée « *7-stencils* » [34], [35], autorise de prendre des pas d'espace différents dans chaque dimension (i.e. les nœuds sont alors associés à des pavés droits). Pour revenir à un cas 2D il suffit simplement de ne pas considérer le terme relatif à la 3^{ème} dimension.

2.1.2 Conservation des courants de fuite aux interfaces

Les configurations simulées sont le plus souvent composées de régions neutroniquement hétérogènes, c'est à dire caractérisées par des jeux de sections efficaces différents.

Dans le cas du taux de fuite volumique, c'est à dire : $D\Delta\phi$, le coefficient de diffusion peut également être différent d'un nœud à l'autre. Cependant les quantités de neutrons échangés entre

les nœuds doivent permettre la conservation du taux de fuite volumique, ce qui n'est pas le cas avec la discrétisation de l'opérateur de diffusion précédemment proposée.

Pour remédier à ce défaut, une nouvelle formulation du terme de fuite est proposée. Elle s'appuie sur un bilan du taux de fuite en chaque nœud comme présenté dans la situation figure 2.1.

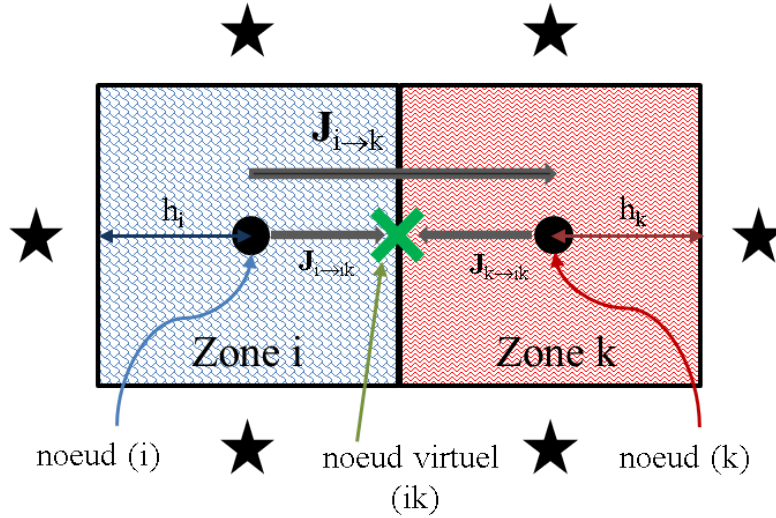


FIGURE 2.1: Schéma d'une configuration où un bilan du taux de fuite est appliquée dans le but d'aboutir à une nouvelle formulation du taux de fuite volumique. Les disques noirs matérialisent les nœuds du maillage représentatifs d'une zone dont les sections efficaces sont différentes (en particulier les coefficients de diffusion). La croix représente un nœud fictif positionné à l'interface de deux zones, entre deux nœuds « réels ». L'étoile symbolise l'application de condition de réflexion, le courant totale à ces interfaces est donc nul. La flèche $J_{i \rightarrow k}$ représente le courant neutronique entre les nœuds i et k . La flèche $J_{i \rightarrow ik}$ représente le courant neutronique entre le nœud i et le nœud « virtuel » (ik) positionné sur l'interface. La distance entre un nœud i et la surface de sa zone sont notées h_i .

Dans la suite le courant neutronique est noté \vec{j} . Ces courant s'expriment dans la théorie grâce à la loi de Fick comme : $\vec{j} = -D \cdot \overrightarrow{grad}(\phi)$.

Les courants allant du nœud i vers k et réciproquement peuvent donc être écrits comme :

$$\vec{j}_{i \rightarrow k} = -D_i \cdot \overrightarrow{grad}(\phi_i) \quad (2.1)$$

$$\vec{j}_{k \rightarrow i} = -D_k \cdot \overrightarrow{grad}(\phi_k) \quad (2.2)$$

Avec D_i et D_k les coefficients de diffusion respectif des zones i et k .

La conservation du courant à travers la surface commune aux zones i et k implique :

$$\vec{j}_{i \rightarrow k} + \vec{j}_{k \rightarrow i} = 0$$

En effet, dans le formalisme de la diffusion le terme $-D \cdot \overrightarrow{grad}(\phi)$ correspond au courant total à l'interface et non à un courant partiel. Ainsi les \vec{j} peuvent être aussi bien négatifs que positifs. Si D_i et D_j sont différents alors le système d'équations est inconsistant. En effet, le gradient $\overrightarrow{grad}(\phi_i)$ est égal à $-\overrightarrow{grad}(\phi_k)$. Il n'est donc pas possible de satisfaire l'égalité entre $\vec{j}_{i \rightarrow k}$ et $-\vec{j}_{k \rightarrow i}$, pour $D_i \neq D_j$.

Afin de conserve le taux de fuites, on introduit un nouveau nœud, noté (ik) , qui est dit « virtuel » car non considéré lors de la résolution des équations sur le maillage et situé sur l'interface entre les zones (voir figure 2.1).

Les gradients sont ensuite exprimés, entre les nœuds du maillage et ce nouveau nœud virtuel, dans le formalisme des différences finies :

$$\begin{aligned}\overrightarrow{grad}(\phi_i) \cdot \overrightarrow{dS}_{i \rightarrow k} &= \frac{(\phi_{ik} - \phi_i)}{h_i} \\ \overrightarrow{grad}(\phi_k) \cdot \overrightarrow{dS}_{k \rightarrow i} &= \frac{(\phi_{ik} - \phi_k)}{h_k}\end{aligned}$$

Avec \overrightarrow{dS} un vecteur unitaire normal à la surface d'échange et ϕ_{ik} le flux à l'interface au nœud (ik). On se place dans un cas général où le pas d'espace en i (noté h_i) est différent de celui en k (noté h_k). Les pas d'espace correspondent à la distance du nœud par rapport à l'interface. Dans la suite on omettra la notation vectorielle puisque la configuration considérée est 1D.

L'ensemble des équations écrites jusqu'alors établissent un système qui va contraindre la valeur du flux à l'interface (ϕ_{ik}). Par continuité du courant il vient que :

$$D_i \cdot \frac{(\phi_{ik} - \phi_i)}{h_i} + D_k \cdot \frac{(\phi_{ik} - \phi_k)}{h_k} = 0$$

Ce qui aboutit à :

$$\phi_{ik} = \frac{D_i \cdot \phi_i \cdot h_k + D_k \cdot \phi_k \cdot h_i}{D_i \cdot h_k + D_k \cdot h_i}$$

D'où :

$$\begin{aligned}j_{i \rightarrow k} &= D_i \cdot \frac{(\phi_{ik} - \phi_i)}{h_i} \\ j_{i \rightarrow k} &= D_i \cdot \frac{\frac{D_i \cdot \phi_i \cdot h_k + D_k \cdot \phi_k \cdot h_i}{D_i \cdot h_k + D_k \cdot h_i} - \phi_i}{h_i} \\ j_{i \rightarrow k} &= \frac{D_i \cdot D_k}{D_i \cdot h_k + D_k \cdot h_i} \cdot (\phi_k - \phi_i)\end{aligned}$$

Au final le terme de diffusion s'écrit comme :

$$\left. \text{div}(\overrightarrow{Dgrad}(\phi)) \right|_i \approx \frac{D_i \cdot D_{i+1}}{D_i \cdot h_{i+1} + D_{i+1} \cdot h_i} \cdot \frac{(\phi_{i+1} - \phi_i)}{(h_i + h_{i+1})} + \frac{D_i \cdot D_{i-1}}{D_i \cdot h_{i-1} + D_{i-1} \cdot h_i} \cdot \frac{(\phi_{i-1} - \phi_i)}{(h_i + h_{i-1})}$$

La formule obtenue peut être vérifiée en l'appliquant au cas particulier d'un maillage uniforme (i.e. $h_i = h_{i-1} = h_{i+1}$) et dans un milieu neutroniquement identique (i.e. $D_i = D_{i-1} = D_{i+1}$), ce qui permet de retrouver la formulation classique du laplacien en différences finies.

Le raisonnement peut se généraliser sans difficulté en 2D si l'on utilise l'opérateur laplacien « multi-1D », c'est à dire le schéma à *5-stencils* (ou en 3D le schéma *7-stencils*.) En annexe est présenté un raisonnement beaucoup plus générale permettant l'accès au calcul du laplacien en différences finies à des ordres plus élevés.

2.1.3 Schéma numérique d'intégration

Dans un souci de lisibilité, l'équation de la diffusion sera écrite à un groupe en énergie et à une dimension dans l'ensemble de cette section.

Les schémas aux différences finies sont principalement basés sur des développements limités où les éléments différentiels sont approximés par des constantes appelées pas d'espace ou de temps, considérées suffisamment petites en comparaison des grandeurs caractéristiques du système.

Les opérateurs tels que les dérivées spatiales sont simplement approximés par des fractions de différences (cf. opérateur de diffusion) permettant la discrétisation de l'équation neutronique

de la diffusion. Il est ainsi possible d'exprimer la dérivée de la densité de neutrons au temps t . Le passage d'un pas de temps t à $t + 1$ se fait par intégration (numérique) cette dérivée neutronique sur le pas de temps Δt .

La majorité des algorithmes d'intégration numérique sont basés sur le développement limité en temps du vecteur de l'ensemble des variables du cœur au pas de temps $t + 1$ en partant du pas de temps t :

$$\vec{n}^{t+1} = \vec{n}^t + \Delta t \cdot \frac{\partial \vec{n}^t}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2!} \cdot \frac{\partial^2 \vec{n}^t}{\partial t^2} + \frac{\Delta t^3}{3!} \cdot \frac{\partial^3 \vec{n}^t}{\partial t^3} + \mathcal{O}(\Delta t^4)$$

Le vecteur de la dérivée $\frac{\partial \vec{n}^t}{\partial t}$ est évalué grâce aux équations discrétisées et aux valeurs du vecteur \vec{n} pris au temps t . L'approximation la plus simple consiste à négliger toutes les dérivées temporelles d'ordre supérieure à 1. Cette approximation conduit au schéma d'Euler explicite (encore appelé schéma d'ordre 1 vers l'avant) :

$$\vec{n}_i^{t+1} \approx \vec{n}_i^t + \Delta t \cdot \frac{\partial \vec{n}^t}{\partial t}$$

L'intégration est ainsi ramenée à une simple manipulation algébrique. L'ensemble des termes négligés sont rassemblés sous le terme $\mathcal{O}(\Delta t)$. L'erreur ainsi commise est dite d'ordre 1, ce qui signifie qu'elle est directement proportionnelle à la taille du pas de temps Δt .

Schéma implicite/explicite

Il existe une forme d'arbitraire à estimer la dérivée moyenne du segment allant de t à $t + 1$ par la dérivée au début de ce segment, c'est à dire celle calculée pour les valeurs des nœuds à l'instant t .

A contrario du schéma d'Euler, il est possible d'approcher cette dérivée moyenne par la dernière valeur du segment d'intégration. Ce schéma d'intégration est appelé Euler implicite (ou encore schéma d'ordre 1 vers l'arrière) car il utilise les valeurs des nœuds du réseau encore non calculées. Formellement cela revient à considérer le développement limité qui remonte le temps, c'est à dire exprimant le pas de temps t en fonction du pas de temps $t + 1$:

$$\vec{n}^t = \vec{n}^{t+1} - \Delta t \cdot \frac{\partial \vec{n}^{t+1}}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2!} \cdot \frac{\partial^2 \vec{n}^{t+1}}{\partial t^2} - \frac{\Delta t^3}{3!} \cdot \frac{\partial^3 \vec{n}^{t+1}}{\partial t^3} + \mathcal{O}(\Delta t^4)$$

En tronquant à l'ordre 1, il vient :

$$n_i^{t+1} = n_i^t + \Delta t \cdot \left. \frac{dn}{dt} \right|^{t+1} + \mathcal{O}(\Delta t)$$

Ce qui s'exprime en chaque nœud comme :

$$\left. \frac{dn_i}{dt} \right|^{t+1} = D \cdot \frac{\phi_{i+1}^{t+1} + \phi_{i-1}^t - 2 \cdot \phi_i^t}{\Delta x^2} + (\nu \cdot \Sigma_f - \Sigma_a) \cdot \phi_i^{t+1}$$

Matriciellement le système s'écrit alors :

$$\begin{pmatrix} \ddots & \ddots & & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & \frac{D}{\Delta x^2} & \frac{-2 \cdot D}{\Delta x^2} + (\nu \cdot \Sigma_f - \Sigma_a) & \frac{D}{\Delta x^2} & 0 \\ 0 & 0 & & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \vdots \\ \phi_{i-1}^{t+1} \\ \phi_i^{t+1} \\ \phi_{i+1}^{t+1} \\ \vdots \end{pmatrix} = \overline{\overline{\overline{M}}}^{t+1} \cdot \vec{\phi}^{t+1}$$

Pour trouver la valeur $\vec{\phi}^{t+1}$ il est alors nécessaire de résoudre le système :

$$(\overline{\overline{Id}} - \Delta t \cdot \overline{\overline{M^{t+1}}}) \vec{\phi}^{t+1} = \vec{\phi}^t$$

Avec $\overline{\overline{Id}}$ la matrice identité.

Les schémas implicites sont donc plus complexes à mettre en œuvre car ils nécessitent une inversion de matrice. Notons que pour être cohérent les coefficients de la matrice doivent eux-mêmes être pris à l'instant $t + 1$. Pour de nombreux problèmes simples (e.g. conduction thermique), les méthodes implicites ont l'avantage d'être inconditionnellement stables, ce qui signifie que quel que soit le pas de temps utilisé le schéma numérique (qui mathématiquement n'est qu'une suite arithmético-géométrique) ne diverge pas.¹

Dans l'objectif de développer des codes simples à maintenir, à utiliser et à modifier, ces méthodes ne seront pas retenues dans la suite. Ce choix est d'autant plus justifié dans l'expectative d'un couplage où pour être cohérents les codes de neutronique et de thermohydraulique devraient être tous les deux implicites avec une résolution partagée de l'ensemble des équations.

De plus, l'analyse de stabilité présentée en annexe de ce chapitre (menée sur différents schémas numériques d'intégration) ne donne aucun avantage aux schémas implicites en terme de stabilité pour la résolution de l'équation de la diffusion (avec terme source directement dépendant du flux).

Soulignons également que la stabilité inconditionnelle d'une méthode numérique n'a pas de lien directe avec sa précision. En effet, dans le cas de la méthode d'Euler implicite ou explicite d'ordre 1, l'erreur commise dans les deux cas est en $\mathcal{O}(1)$. Cela signifie qu'à pas de temps égal (et si celui-ci est inférieur à la limite de stabilité), les résultats des schémas Euler implicite et Euler explicite ont la même précision pour un coût en calcul inégale.

Enfin, la solution d'un schéma numérique² converge vers celle des équations continues lorsque le maillage spatio-temporel est lui-même convergé, ce qui limite également la taille maximale des pas de temps.

Ordre de la méthode d'intégration

La plupart des développements limités se fondent sur l'utilisation de la formule de Taylor-Maclaurin, cependant au vue de l'évolution exponentielle de la population neutronique il pourrait être beaucoup plus judicieux d'utiliser un développement en fraction continue (aussi appelé approximant de Padé), comme suggéré et démontré dans [36].

Les schémas d'ordre élevés les plus connus et utilisés appartiennent à la famille des schémas Runge-Kutta, notés RK. Ces schémas cherchent à obtenir une valeur moyenne de la dérivée sur un segment de largeur Δt à partir de plusieurs estimations ponctuelles, permettant ainsi d'augmenter l'ordre (i.e. la précision) de l'intégration.

La méthode RK d'ordre 4, noté RK4, utilise 4 estimations de la dérivée comme l'illustre la figure 2.2 (1). La première estimation de la dérivée est identique à celle fournie par la méthode d'Euler :

$$k_0 = \frac{\partial n^t}{\partial t}$$

1. Il existe cependant des catégories de problèmes, comme le calcul d'orbite spatiale par exemple, ou la formulation implicite ne permet pas une stabilité inconditionnelle.

2. Si ce dernier est stable et consistant, c'est à dire qu'il converge lorsque les pas de temps et d'espace tendent vers 0 (cf. théorème de Lax).

Elle permet d'approximer la position d'un point au milieu de ce segment (cf. figure 2.2 (2)) :

$$n_1 = n^t + \frac{\Delta t}{2} k_0$$

$$k_1 = \frac{\partial n_1}{\partial t}$$

La création de ce point médian n'a d'autre objectif que l'estimation d'une nouvelle dérivée. À partir de cette dérivée que l'on pense être celle au milieu du segment, il est possible avoir une meilleure estimation la position du point au centre du segment ainsi que de sa dérivée (cf. figure 2.2 (3)) :

$$n_2 = n^t + \frac{\Delta t}{2} k_1$$

$$k_2 = \frac{\partial n_2}{\partial t}$$

On se sert ensuite de ce qui est interprété comme la dérivée au milieu du segment pour calculer une position approchée de la position finale ainsi que la dérivée sur la fin du segment d'intégration (cf. figure 2.2 (4)) :

$$n_3 = n^t + \Delta t \cdot k_2$$

$$k_3 = \frac{\partial n_3}{\partial t}$$

Puisqu'il n'y a pas une dérivée plus représentative de la pente moyenne sur Δt , toutes les estimations sont combinées pour en fournir une meilleure :

$$n^{t+1} = n^t + \Delta t \cdot \left(\frac{2 \cdot k_0 + k_1 + k_2 + 2 \cdot k_3}{6} \right)$$

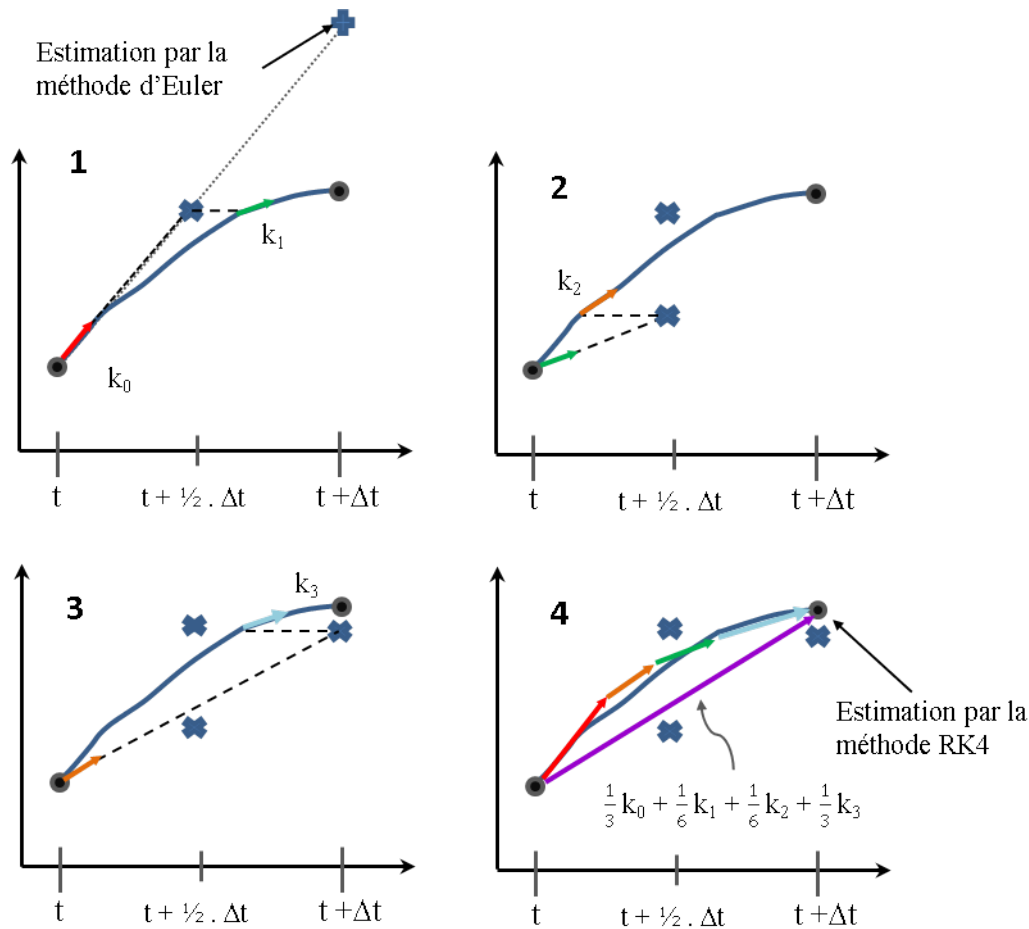


FIGURE 2.2: Illustration de la méthode Runge Kutta d'ordre 4.

Cette combinaison « finale » permet d'exprimer le plus de terme possible du développement limité mené en n^{t+1} à partir de n^t . En se servant de la linéarité de la dérivée, chaque dérivée estimée peut se réécrire selon la dérivée k_0 (calculée par la méthode d'Euler) :

$$\begin{aligned}
 k_1 &= k(n_1) \\
 &= k\left(n^t + \frac{\Delta t}{2} k_0\right) \\
 &= k_0 + \frac{\Delta t}{2} \cdot k_0^2
 \end{aligned}$$

Ce qui donne pour l'ensemble des estimations :

$$\begin{aligned}
 k_1 &= k_0 + \frac{\Delta t}{2} \cdot k_0^2 \\
 k_2 &= k_0 + \frac{\Delta t}{2} \cdot k_0^2 + \frac{\Delta k^2}{4} \cdot k_0^3 \\
 k_3 &= k_0 + \frac{\Delta t}{2} \cdot k_0^2 + \frac{\Delta k^2}{2} \cdot k_0^3 + \mathcal{O}(\Delta t^3)
 \end{aligned}$$

Une fois combinée entre elles, on retrouve le développement limité en temps jusqu'à l'ordre 4 :

$$n^{t+1} = n^t + \underbrace{\Delta t \cdot k_0 + \frac{\Delta t^2}{2} \cdot k_0^2 + \frac{\Delta t^3}{3} \cdot k_0^3 + \mathcal{O}(\Delta t^4)}_{\text{Développement limité d'ordre 4 à partir du pas de temps } t \text{ jusqu'à } t + \Delta t}$$

Ce schéma RK4 a la particularité d'être le dernier schéma numérique de type RK qui permet d'avoir une formule aux différences finies dont l'ordre est égal au nombre de dérivées à calculer. Par la suite, plus d'estimations de dérivées sont requises pour un ordre donné (e.g. l'ordre 8 requiert 13 évaluations de la dérivée), c'est pourquoi RK4 est usuellement considéré comme le meilleur compromis entre précision et coût de calcul.

Au-dessus de l'ordre 4, la détermination des coefficients dans la dernière estimation de la dérivée (i.e. celle d'ordre élevée) est surdéterminée, ce qui permet l'existence de plusieurs jeux de coefficients aboutissant à une estimation finale de dérivée de même ordre. La différence entre les estimations basées sur deux jeux de coefficients différents nous renseigne sur la valeur de l'erreur de troncature, c'est à dire l'erreur commise sur un pas de temps (i.e. le terme en $\mathcal{O}(\Delta t^n)$). Cette information est généralement utilisée pour adapter le pas de temps Δt au cours du calcul afin de maintenir l'erreur constante sur toute sa durée.

Bien entendu, les schémas Runge Kutta sont plus stables que la simple intégration d'Euler explicite. On pourrait arguer qu'en divisant le pas de temps d'Euler explicite par 4 le résultat serait sensiblement identique pour un même coût en calcul (i.e. estimation de 4 dérivées). Cette affirmation est rarement vérifiée puisque l'erreur de RK4 est en $\mathcal{O}(\Delta t^4)$ tandis que celle d'Euler serait dans ce cas en $\mathcal{O}(\frac{\Delta t}{4})$. Pour un pas de temps inférieur à 0.62 s ($\Leftrightarrow \frac{\Delta t}{4} > 1$), l'algorithme RK4 aura donc une erreur d'intégration plus faible que celle de l'algorithme d'Euler.

Du fait du temps caractéristique relativement petit imposé par la neutronique, le gain en précision et en stabilité apporté par une méthode Runge Kutta est relativement marginal. Étant donné la simplicité de nos choix de modélisation (autant pour la neutronique que pour la thermique), une méthode d'intégration plus légère s'avère suffisante.

Schéma d'Euler SOR (*Successive Over Relaxation*)

Le schéma numérique Euler SOR (pour *Successive Over Relaxation*, [37]) a été implémenté dans la NDM. Son fonctionnement est décrit par l'algorithme 1.

Algorithm 1 Algorithme SOR appliqué à l'intégration numérique

```

 $\vec{z}_0 = \vec{n}^t$ 
while  $\epsilon_j > 10^{-10}$  do
     $f(z_j) = \overline{M}^t \cdot \vec{z}_j$ 
     $\vec{n}_j^{t+1} = \vec{n}^t + \Delta t \cdot \frac{\partial z_j}{\partial t}$ 
     $\vec{z}_{j+1} = \omega \cdot \vec{n}_j^{t+1} + (1 - \omega) \cdot \vec{z}_j$ 
     $\epsilon_j = \sqrt{\frac{\|\vec{n}_j^{t+1} - \vec{z}_j\|^2}{2 \cdot \|\vec{n}_j^{t+1}\|^2}}$ 
end while

```

Avec :

- j l'indice de la boucle *While*
- \vec{z} le vecteur de nœud temporaire utiliser pour faire converger les valeurs des nœuds au temps $t + 1$.
- ω un paramètre de sous-relaxation usuellement fixé à 0.5. Lorsque $\omega > 1$ la méthode est sur-relaxée ce qui mène à l'instabilité du schéma numérique.

L'objectif de ce schéma numérique, couramment utilisé pour la résolution en dynamique des fluides, est de parvenir à estimer la dérivée de chaque nœud du cœur au temps $t + 1$ comme c'est le cas pour un schéma d'Euler implicite (aussi appelé « vers l'avant »). Pour éviter d'inverser une matrice comme dans une méthode implicite classique, on recourt à une méthode itérative

qui va approximer ce calcul. Lorsque la boucle *while* converge, typiquement pour moins de 10 itérations³, le vecteur de la dérivée $\frac{\partial \vec{n}}{\partial t}$ est bien calculé avec les valeurs du nouveau pas de temps. La précision de ce schéma reste d'ordre 1, mais elle permet un gain de stabilité par rapport à une intégration d'Euler classique pour un faible surcoût de calcul.

En annexe de ce chapitre sont proposées sur ce même thème :

- Une étude comparative des performances de différents algorithmes d'intégration explicite sur un cas simplifié.
- Une étude de stabilité sur le schéma de la diffusion pour différents types d'algorithmes d'intégration (explicite, implicite, ordre élevé, etc).
- Une étude sur la stabilité du couplage neutronique/thermohydraulique.

2.1.4 Conditions limites appliquées

L'approximation de la diffusion perd en validité près des bords du réacteur. Cette remarque s'applique principalement à un réacteur dont la zone la plus périphérique est bordée par du vide.

La solution la plus simple pour modéliser cette situation consiste à considérer un flux neutronique nul hors du cœur. Dans le cas où le cœur n'est pas nu, cette condition limite n'est physiquement pas réaliste puisque en dehors d'une zone fissile le flux s'annule progressivement en $e^{-\Sigma_{abs} \cdot x}$, avec Σ_{abs} la section efficace macroscopique du milieu ex-core. Pour être exact il faudrait donc simuler autant de couches de matière que possible autour du cœur jusqu'à ce que le flux puisse effectivement être approximé comme étant nul.

Si le cœur est entouré de vide, et en considérant une surface extérieure convexe, les neutrons qui s'échappent cessent de diffuser ou de réagir du fait de l'absence de milieu matériel. Ils continuent donc leur trajectoire. Cette situation physique est analogue au rayonnement thermique. Il est donc possible de dériver une condition limite de courant à l'interface uniquement dépendante de la distribution (énergétique) du flux proche de cette interface (i.e. à quelques libres parcours moyens).

Quel que soit la « véritable » condition limite hors du cœur, le profil de flux donné par la théorie de la diffusion est ajusté à la solution fournie par un calcul réalisé en transport grâce à la prise en compte d'une distance extrapolée sur les bords. Cette distance extrapolée correspond à une longueur depuis la surface du cœur et à laquelle le flux est considéré comme nul. La condition limite imposée est donc mixte, elle impose une relation affine entre le flux en paroi et sa dérivée, c'est ce qu'on appelle une condition de Robin. Elle s'écrit :

$$\frac{d\phi}{dx} + \frac{\phi}{d_{extrapolée}} = 0$$

Avec :

- ϕ le flux à la surface du cœur.
- $\frac{d\phi}{dx}$ la dérivée du flux (c'est à dire le courant neutronique à un facteur D près) à la surface du cœur.
- $d_{extrapolée}$ la distance extrapolée.

Pour une surface d'émission plane, la distance extrapolée se calcule comme :

$$d_{extrapolée} = \frac{0.7104}{\Sigma_{tr}}$$

Pour rappel (voir chapitre sur la neutronique), Σ_{tr} correspond à la section efficace de transport. La constante numérique utilisée provient de calcul menés en théorie du transport [19], [17]. Si la

3. mais cela dépend essentiellement du critère de convergence imposé

taille d'un réacteur fonctionnant en spectre thermique est grande, l'erreur associée à la distance extrapolée reste faible.

Dans la NDM les distances extrapolées est fonction du groupe d'énergie. Numériquement cette condition aux limites est appliquée lors du calcul du taux de fuite volumique.

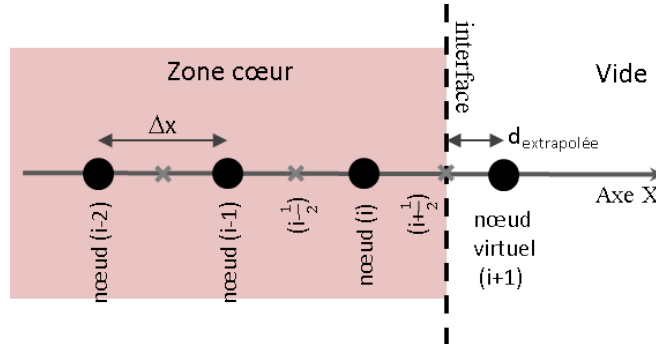


FIGURE 2.3: Schéma d'un réacteur 1D, discrétisé en nœud. Le nœud virtuel (i+1) correspond à un nœud en dehors du réacteur, à une distance $d_{extrapolée}$ de la surface et où le flux est considéré comme nul.

En se plaçant dans l'hypothèse d'un cœur homogène et unidimensionnel, le taux de fuite volumique s'écrit :

$$\text{div}(\overrightarrow{Dgrad\phi}) = \frac{\partial}{\partial x}(D \frac{\partial \phi}{\partial x}) = \frac{\partial}{\partial x}(\overrightarrow{j})$$

Ce qui se traduit dans le formalisme des différences finies par :

$$\frac{\partial}{\partial x}(\overrightarrow{j}) \approx \frac{(j_{i+\frac{1}{2}} - j_{i-\frac{1}{2}})}{\Delta x}$$

Où les indices fractionnaires $i + \frac{1}{2}$ et $i - \frac{1}{2}$ correspondent aux positions de nœuds virtuels à mi-chemin entre respectivement les nœuds i et $i + 1$ et les nœuds i et $i - 1$.

Avec :

$$j_{i+\frac{1}{2}} = D \cdot \frac{-\phi_i}{\frac{1}{2}\Delta x + d_{extrapolée}}$$

$$j_{i-\frac{1}{2}} = D \cdot \frac{\phi_{i-1} - \phi_i}{\Delta x}$$

Le flux utilisé à la surface du cœur correspond à une interpolation linéaire entre le flux du dernier nœud (i) et celui du nœud virtuel, situé à $d_{extrapolée}$ de la surface. Ce raisonnement se généralise pour les dimensions d'ordre supérieures et pour chaque groupe d'énergie.

2.1.5 Mise à l'équilibre, l'algorithme IRIS

La méthode IRIS [33] permet la mise à l'équilibre neutronique du cœur. Elle se base en grande partie sur l'algorithme de la puissance itérée, utilisé par de nombreux codes [38]. L'algorithme de la puissance itérée consiste à itérer la résolution des équations (i.e. dans notre cas à laisse le système évoluer jusqu'à d'atteindre un état stationnaire. Dans le cas particulier de la physique des réacteurs⁴ cet algorithme de base doit être modifié pour rendre également le cœur critique.

En effet, les jeux de sections efficaces utilisés ne correspondent pas exactement à une réactivité nulle lorsque la distribution spatiale du flux est à l'équilibre. Pour se ramener au Réacteur

4. Et sans prise en compte de contre-réaction thermique

Critique Associé (RCA, voir [19]), une correction de criticité est appliquée sur le nombre de neutrons par fission (ν). Dans le formalisme de la diffusion à un groupe et pour un profil de flux déjà relaxé dans son mode fondamental, il suffit de calculer le k_{eff} et de diviser ν par ce dernier pour se ramener au RCA.

Malheureusement, la distribution de flux dans son mode fondamental n'est a priori pas connue. Cette distribution est supposée initialement uniforme en espace (i.e. $\forall(i, j), n_g^i = n_g^j$) comme en énergie (i.e. $n_1 = n_2$). Il a été vérifié que la prise en compte d'un profil initial plus réaliste ne permet pas un gain de temps significatif pour atteindre l'état stationnaire.

Le système est itéré pour permettre la relaxation de la distribution spatiale du flux. Au cours de ces itérations, le cœur est rendu critique au moyen de la correction de criticité. Cette dernière, notée (CC) se calcule à chaque pas de temps comme : $CC^t = CC^{t-1} \cdot k_{eff}^t$. Le système est rendu progressivement critique en divisant le nombre de produit par fission ν dans chaque nœud par la correction de criticité au pas de temps correspondant. Il aurait été possible à chaque cycle de diviser ν directement par k_{eff}^t mais l'utilisation d'une correction de criticité « sous-relaxée » (i.e. convoluée aux valeurs des pas de temps précédents) permet de converger plus rapidement vers l'état stationnaire.

Notons que l'évolution de la distribution de flux au fil des itérations va impacter la valeur du k_{eff} , en particulier via le taux de fuite. Cette dépendance du k_{eff} au profil spatial du flux se retrouve dans la correction de criticité. Réciproquement, la correction de criticité impacte la distribution des neutrons (et ce bien qu'elle soit uniformément appliquée). En effet, le rapport du nombre des neutrons dans le groupe thermique (groupe 2) par rapport au nombre de neutrons dans le groupe rapide (groupe 1) dépend de ν comme l'exprime cette égalité démontrée en milieu infini dans [19] :

$$\frac{n_2}{n_1} = \frac{\Sigma_{abs,1} - \frac{\nu_0}{CC} \cdot \Sigma_{fis,1}}{\frac{\nu_0}{CC} \cdot \Sigma_{fis,2}}$$

Avec ν_0 le nombre de neutrons produit par fission initialement fourni par le jeu de sections efficaces (i.e. sans la correction CC). Cette interdépendance du profil de flux et de la correction de criticité rend nécessaire une mise à l'équilibre itérative.

L'état d'équilibre est atteint lorsque l'entropie, au sens de Shannon, du système est convergée. Cette entropie S est définie comme :

$$S = \sum_{\forall i \in \text{node}} n_i \cdot \ln\left(\frac{1}{n_i}\right)$$

avec n_i la densité de neutrons totale⁵ (tout groupe en énergie confondu) au nœud i du maillage. Elle permet de s'assurer qu'un équilibre a été atteint localement pour tous les nœuds.

Durant la mise à l'équilibre, l'évolution des précurseurs n'est pas calculée. Ceux-ci sont considérés implicitement comme étant déjà à l'équilibre. En conséquence, dans l'équation de la densité neutronique les termes de production de précurseurs :

$$\sum_{\forall g \in \text{groupe d'énergie}} -\beta_{eff} \nu_g \Sigma_{fis,g} \phi_g$$

s'équilibrent avec la production de neutrons retardés issue de la décroissance des précurseurs :

$$\sum_{\forall f \in \text{family}} \lambda_f \cdot p_f$$

Cela permet de simplifier l'écriture de la dérivée temporelle des densités de neutrons, épargnant ainsi la résolution des densités de précurseurs dans chaque cellule.

5. Notons que dans le cas d'un maillage non uniforme la formule tiendrait compte du nombre total de neutrons dans chaque maille.

Une fois l'état d'équilibre atteint, la densité de précurseurs est imposée à celle d'équilibre :

$$p_f = \beta_f \cdot \frac{\sum_{g \in group} \nu_g \Sigma_{fis,g} \phi_g}{\lambda_f}$$

Les équations du flux prennent alors à nouveau compte des termes de production de précurseurs et de production de neutrons retardés.

L'ensemble des étapes de l'algorithme IRIS sont résumées par le pseudo-code suivant :

Algorithm 2 IRIS

```

while  $\frac{S_t - S_{t-1}}{S_t} > \epsilon$  do
  Intégrer le flux sur le pas de temps  $\Delta t$  ( $t \leftarrow t + 1$ )
  Normaliser la densité de neutronique à l'unité.
  Calculer  $k_{eff}^t$ 
  Calculer l'entropie :  $S_n = \sum_{\forall i \in nodes} n_i * \ln(\frac{1}{n_i})$ 
  Mettre à jour de la correction criticité :  $CC^t = CC^{t-1} * k_{eff}^t$ 
  Appliquer la correction de criticité :  $\forall i : \nu_i = \frac{\nu_i^0}{CC^t}$ 
end while

```

2.2 Modèle de thermique minimaliste : *Thermal Lumped Parameter* (TLP)

Le calcul du champ de température est nécessaire pour la simulation d'un transitoire accidentel. D'où le développement d'un premier code de thermique, TLP (pour *Thermal Lumped Parameter* et dont une première version est mentionnée dans [14]), le plus simple possible, mais permettant calculer en chaque nœud neutronique d'un maillage 3D une température combustible et température caloporteur.

2.2.1 Équations du TLP

Le code TLP est une modélisation simplifiée d'une cellule élémentaire représentative de tout ou partie de l'assemblage. Cette cellule élémentaire d'assemblage est discrétisée axialement en plusieurs niveaux. Chaque niveau axial est scindé en deux zones (ou de façon équivalente en deux nœuds) représentant le combustible et le caloporteur. La figure 2.4 illustre la modélisation par le code TLP d'une cellule élémentaire.

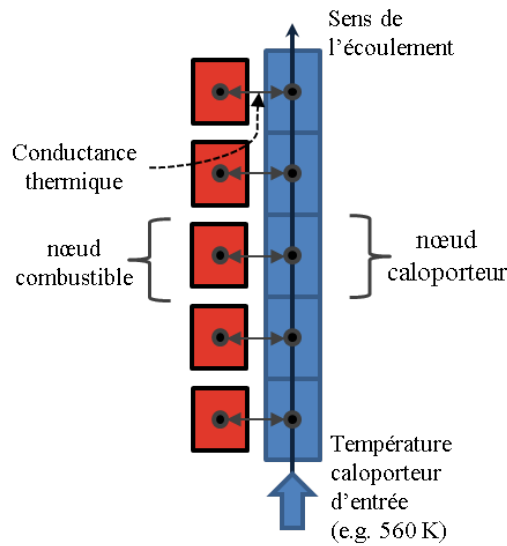


FIGURE 2.4: Schéma d'une cellule élémentaire d'assemblage tel que modélisée dans le code TLP.

A chaque niveau axiale, les zones combustible sont modélisées de façon ponctuelle, la température y est homogène. La conduction axiale dans le combustible est négligée devant la conduction radiale.

L'échange de chaleur entre le combustible et le caloporteur est modélisé par une simple résistance thermique. Dans la suite cette résistance thermique sera caractérisée par une valeur de conductance en $[W \cdot m^{-1}]$, qui correspond à l'inverse d'une résistance thermique. La présence de la gaine est incluse dans cette conductance thermique. Implicitement, on suppose alors que cette gaine est toujours en équilibre thermique avec le combustible et le caloporteur.

L'ensemble de ces approximations aboutit à une modélisation de la zone combustible par l'équation suivante :

$$(d \cdot C_p \cdot V)_{fuel}^z \frac{T_{fuel}^z}{dt} = P^z - G^z \cdot (T_{fuel}^z - T_{cool}^z)$$

Avec :

- T_{fuel}^z la température de la zone combustible (K) au niveau indiqué (z).
- d_{fuel} la densité du combustible ($kg \cdot m^{-3}$)
- C_p la capacité calorifique du combustible, ($J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$)
- V_{fuel} le volume de la zone combustible (m^3)
- P la puissance délivrée dans la zone combustible ($W \cdot m^{-3}$)
- G la conductance thermique ($W \cdot K^{-1}$)
- T_{cool}^z la température de la zone caloporteur (K) au niveau (z).

Dans ce modèle seule la capacité calorifique ($C_{p,fuel}$) dépend de la température du combustible.

Pour un niveau axial donné, le caloporteur est lui aussi considéré comme ponctuelle. Seule les valeurs moyennes (i.e. *bulk*) dans le volume de la zone caloporteur sont donc considérées.

On suppose un écoulement incompressible monophasique où le débit massique est conservé sur toute la hauteur de l'assemblage. Seule l'équation de conservation de l'énergie reste à ré-

soudre, sa version discrétisée s'écrit :

$$(d \cdot C_p \cdot V)_{cool}^z \frac{T_{cool}^z}{dt} = G \cdot (T_{fuel}^z - T_{cool}^z) - D_m \cdot C_{p,cool}^z \cdot (T_{cool}^z - T_{cool,inlet}^z)$$

$$T_{cool,inlet}^z = \frac{T_{cool}^z + T_{cool}^{z-1}}{2}$$

avec :

- d_{cool}^z la densité du caloporteur au niveau z ($kg \cdot m^{-3}$)
- $C_{p,cool}^z$ la capacité calorifique du caloporteur au niveau z ($J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$)
- V_{cool}^z le volume de la zone caloporteur au niveau z (m^3)
- D_m le débit massique dans l'assemblage ($kg \cdot s^{-1} \cdot m^{-3}$)
- $T_{cool,inlet}^z$ la température (K) du caloporteur en entrée de la zone axiale z.

Le calcul de la température d'entrée du caloporteur dans une zone s'appuie sur une simple interpolation linéaire entre les températures du caloporteur de la zone considérée (z) et de la zone qui la précède (z-1). Ici encore, seule la capacité calorifique est fonction de la température du caloporteur.

2.2.2 Détermination de la conductance thermique entre le combustible et le caloporteur

La valeur de la conductance entre la zone combustible et la zone caloporteur apparaît comme un paramètre central du modèle TLP. La suite de ce paragraphe expose un développement analytique permettant de fixer cette valeur de conductance.

Les équations utilisées dans les différentes zones d'une cellule élémentaire d'assemblage sont celles exposées dans le chapitre 1. Seul l'état stationnaire est ici considéré.

La résistance thermique exprime la résistance au passage d'un flux thermique en conduction entre deux points A et B. Cette résistance thermique dresse une analogie entre la loi d'Ohm en électronique et la loi de Fourier en thermique. Elle se définit comme :

$$(T_A - T_B) = \Delta T = R_{th} \cdot \Phi$$

Où

- T_A et T_B sont les températures au point A et B en (K).
- Φ est le flux de chaleur exprimé en (W) et qui correspond à l'intégrale surfacique d'un flux surfacique de chaleur : $\int \int k(T) \cdot \vec{grad}(T) \cdot \vec{d}S$.
- R_{th} la résistance thermique en ($K \cdot W^{-1}$).

Étant à l'état stationnaire la puissance délivrée dans tout ou partie du crayon (i.e. un niveau axial) est intégralement évacuée par le caloporteur. Ainsi on a l'égalité : $\Phi = P$ où P est la puissance dégagée dans le combustible.

La conductance thermique s'exprime simplement comme l'inverse de la résistance thermique. Il est possible d'exprimer une conductance équivalente totale pour plusieurs milieux mis en série et où le transfert thermique se fait par conduction. Cette conductance totale s'exprime alors comme :

$$G_{tot} = \frac{1}{\sum_{i \in milieu} \frac{1}{G_i}}$$

Pour exprimer la conductance totale entre le combustible et le caloporteur, il est donc nécessaire de calculer les conductances relatives à chaque milieu. Ces calculs sont proposés ci-dessous.

Dans le crayon : Le profil de température à l'équilibre correspond à un polynôme d'ordre 2.

$$T_{fuel,int} - T_{fuel,ext} = \Delta T_{fuel} = \frac{P \cdot R_{fuel}^2}{4k_{fuel}\pi R_{fuel}^2 H}$$

Avec :

- $T_{fuel,int}$ la température du combustible au centre de la pastille, (K).
- $T_{fuel,ext}$ la température du combustible sur la paroi de la pastille, (K).
- k_{fuel} la conductivité thermique du combustible, ($W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}$).
- H la hauteur l'assemblage, (m).

d'où l'expression de la conductance dans le combustible :

$$G_{combustible} = 4\pi k_{fuel} H$$

La conductance dans le combustible dépend donc de la conductivité thermique du combustible qui dépend de la température du combustible (mais également du burnup).

Dans le gap pastille/gaine : Les phénomènes d'échange thermique (complexes) dans le gap sont simplement modélisés par une conductance thermique (surfactive) notée h_{gap} exprimée en ($W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}$). L'écart de température dans le gap correspond à :

$$T_{fuel,ext} - T_{clad,int} = \Delta T_{gap} = \frac{P}{2\pi R_{gap} H h_{gap}}$$

Avec :

- $T_{clad,int}$ la température de la gaine sur sa paroi interne, (K).
- R_{gap} le rayon moyen du gap, (m).

d'où l'expression de la conductance thermique dans le gap :

$$G_{gap} = \pi R_{gap} h_{gap} H$$

Cette valeur de conductance est directement dépendante de la conductance thermique surfactive du gap. Le h_{gap} varie en fonction de la quantité de produits de fission gazeux présent dans le gap, mais également en fonction des interactions pastille/gaine qui évoluent en fonction du burnup. En conséquence il n'est pas possible d'évaluer simplement cette grandeur pouvant varier d'un ordre de grandeur sur la durée du cycle. L'ordre de grandeur communément accepté est de $h_{gap} = 10^4 W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}$, [30].

Dans la gaine : Pour une surface cylindrique la conductance thermique est un résultat classique [39] :

$$G_{clad} = \frac{\ln\left(\frac{R_{clad,ext}}{R_{clad,int}}\right)}{2\pi k_{clad} H}$$

avec :

- $R_{clad,int}$ le rayon intérieur de la gaine, (m).
- $R_{clad,ext}$ le rayon extérieur de la gaine, (m).
- k_{clad} la conductivité thermique de la gaine, ($W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}$).

Encore une fois on constate la dépendance de cette conduction thermique à la température de la gaine au travers de sa conduction thermique.

Dans le caloporteur : Les échanges entre la gaine et le caloporteur sont modélisés par un coefficient de transfert conducto-convectif noté h_{cc} et exprimé en $(W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1})$. Le flux de chaleur passant de la gaine au caloporteur est directement donné par la loi de Newton :

$$\frac{P}{2 \cdot \pi \cdot R_{clad,ext} \cdot H} = h_{cc} \cdot (T_{clad,ext} - T_{cool,bulk}) = h_{cc} \cdot \Delta T_{cool}$$

Avec $T_{cool,bulk}$ la température du caloporteur moyenne dans l'assemblage ou au niveau axial considéré, (K).

D'où l'expression de la conductance thermique associée à l'interface gaine caloporteur :

$$G_{cool} = 2 \cdot \pi \cdot R_{clad,ext} \cdot H \cdot h_{cc}$$

Cette conductance est dépendante du coefficient de transfert conducto-convectif, qui est lui-même dépendant de la température de caloporteur (en particulier en régime d'ébullition nucléée) et du débit massique.

Conductance totale du crayon : La conductance totale noté G_{rod} , du centre de la pastille au caloporteur correspond à :

$$T_{fuel,int} - T_{cool,bulk} = \Delta T_{tot} = \frac{P}{G_{rod}}$$

Soit :

$$G_{rod} = \frac{2\pi H}{\frac{1}{2k_{fuel}} + \frac{1}{h_{gap} \cdot R_{gap}} + \frac{\ln(\frac{R_{clad,ext}}{R_{clad,int}})}{k_{clad}} + \frac{1}{R_{clad,ext} h_{cc}}}$$

Cette expression permet d'apprécier les multiples dépendances de ce paramètre, notamment à la température de chacune des zones constitutives d'une cellule élémentaire. Pour des dimensions, une puissance et un champ de température typiques d'un REP, la valeur de G_{rod} varie entre de $110 W \cdot K^{-1}$ à $30 W \cdot K^{-1}$ selon les températures considérées (respectivement ici $T_{fuel} = 560 K$ et $T_{fuel} = 1600 K$) dans le combustible et la valeur de h_{gap} (respectivement $h_{gap} = 10^4 W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}$ et $h_{gap} = 10^3 W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}$) utilisées.

Notons qu'en pratique, TLP ne calcule que la température moyenne du combustible. Il serait donc plus juste de ne considérer qu'une partie de la conductance thermique de la pastille combustible et non celle allant du centre à la périphérie.

Dans la suite, on préférera parler de $G_{assemblage}$ ce qui correspond à $G_{rod} \times N_{rod}$ où N_{rod} est le nombre de crayons combustibles dans l'assemblage. Lors du découpage radial et axial, la conductance de l'assemblage est distribuée entre chaque zone proportionnellement au volume combustible qu'elle représente.

2.3 Basic Approach to ThermalHydraulics (BATH)

BATH est un code de thermohydraulique plus élaboré que TLP qui donne accès à une représentation plus fine du combustible permettant ainsi l'évaluation des critères de sûreté [28].

2.3.1 Hypothèses de modélisations et équations discrétisées

Les équations sont résolues dans une cellule élémentaire d'assemblage par la méthode des différences finies, précédemment utilisée pour la neutronique. Par souci de simplicité et en considérant l'étude de stabilité neutronique (voir annexe), le schéma d'intégration temporel choisi

est explicite d'ordre 1 (i.e. schéma d'Euler). En effet, dans la perspective d'un couplage avec la neutronique, le pas de temps sera nécessairement petit (imposé par la neutronique). Le recours à des schémas implicites, permettant des pas de temps plus large mais également plus couteux en calcul, n'est donc pas intéressant ici.

La modélisation par BATH d'une cellule combustible élémentaire est représentée par la figure 2.5. Le champ de température est résolu dans le combustible, dans la gaine et dans le caloporteur.

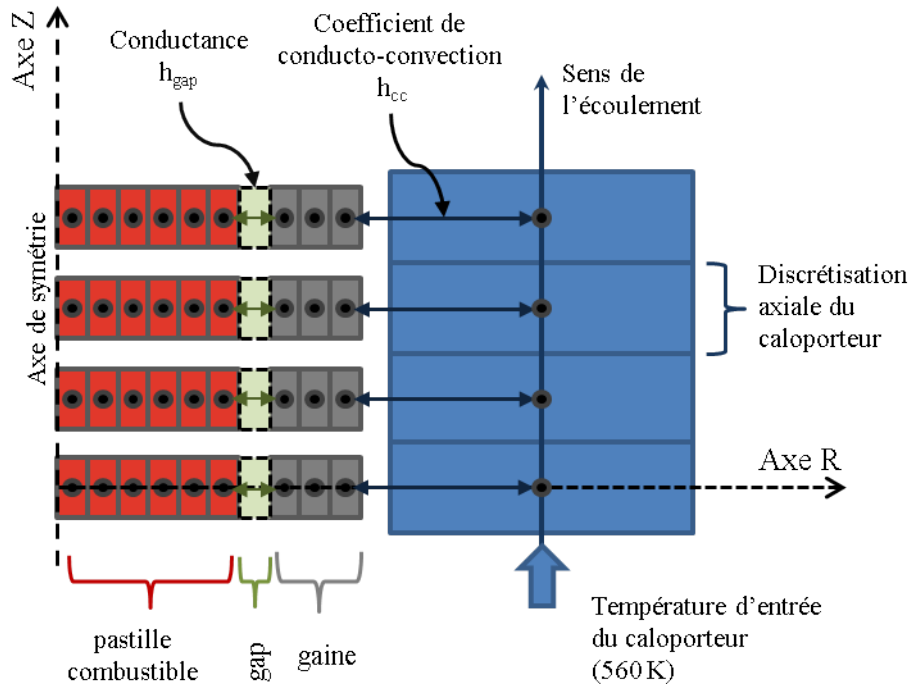


FIGURE 2.5: Discrétisation de la géométrie d'une cellule élémentaire d'assemblage dans la modélisation BATH.

Dans la suite de cette section, les équations discrétisées sont explicitées ainsi que les diverses hypothèses de modélisation dans les différentes zones.

Pour la modélisation du combustible et du caloporteur, une analyse de la stabilité du schéma numérique est proposée en annexe de ce chapitre ainsi qu'une comparaison à un cas analytique.

Enfin, toujours dans l'annexe de ce chapitre, BATH est comparé à COBRA-EN [40] sur le cas d'un assemblage de REP standard à puissance imposée.

La pastille combustible

Dans la pastille combustible seule l'équation de la chaleur est résolue. La géométrie de la pastille est idéalisée, elle est supposée parfaitement cylindrique. La pastille combustible est divisé en zones axiales supposées indépendantes les unes des autres ($\overrightarrow{\lambda grad(T)} \cdot \vec{e}_z \ll \overrightarrow{\lambda grad(T)} \cdot \vec{e}_r$). Du fait du couplage avec la neutronique, les discrétisations axiales envisagées sont de l'ordre de 20 niveaux.

Radialement la géométrie de la pastille suggère de se placer en coordonnées cylindriques. On suppose alors le problème axisymétrique, de ce fait on néglige les hétérogénéités de température entre sous-canaux. La puissance au sein d'un niveau axial est distribuée uniformément dans la pastille. Pour un réacteur de type REP, environ 88.4% de l'énergie de fission sont libérés directement dans le combustible, 2.5% dans le modérateur, 4.1% dans les structures du cœur

(non modélisées dans BATH exception faite des gaines) et 5% de l'énergie est irrécupérables car emportée par les neutrinos [26]. BATH fait l'hypothèse simplificatrice de libérer toute l'énergie de fission récupérable de façon homogène dans le combustible. Il est donc possible d'améliorer le modèle en introduisant des sources volumiques de puissance dans chaque zone prise en compte dans BATH, en particulier le caloporteur.

Selon les hypothèses formulées précédemment, l'étude d'un segment axial de pastille est ramenée à une configuration unidimensionnelle selon l'axe radial, comme illustré par la figure 2.6.

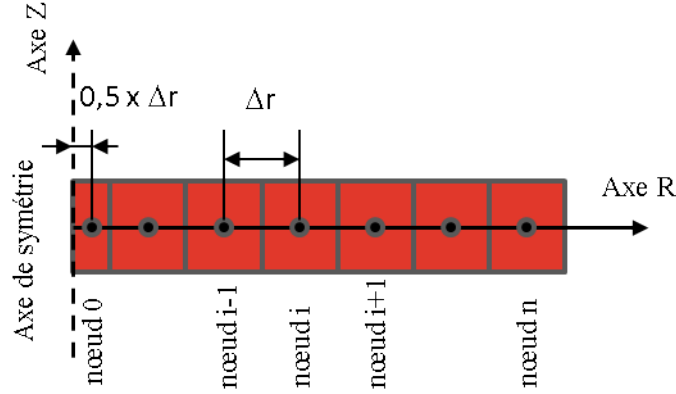


FIGURE 2.6: Discrétisation de la géométrie de la pastille combustible. Représentation 1D en coordonnées cylindriques.

L'équation de la chaleur exprimée en coordonnées cylindriques est discrétisée selon le schéma aux différences finies suivant :

$$\rho C_{p,i}^n \frac{(T_i^{n+1} - T_i^n)}{\Delta t} = \lambda_i^n \left(\frac{T_{i+1}^n + T_{i-1}^n - 2 \cdot T_i^n}{\Delta r^2} + \frac{1}{r_i} \cdot \frac{T_{i+1}^n - T_{i-1}^n}{2 \cdot \Delta r} \right) + \ddot{q} \quad (2.3)$$

La discrétisation spatiale choisie pour le terme de diffusion (i.e. laplacien) est alors d'ordre $\mathcal{O}(\Delta r^2)$. En pratique, le pas de temps utilisé est d'environ 10^{-4} s, ce qui autorise la simulation d'une cinquantaine de cellules radiales en partant du centre (cf. annexe).

Dans ce modèle, la densité du combustible est considérée comme constante puisque la déformation de la pastille n'est pas résolue. En revanche, la dépendance à la température de la capacité calorifique et celle de la conductivité thermique sont prises en compte en chaque nœud.

Tout comme en neutronique pour le coefficient de diffusion, la conductivité thermique λ est donc susceptible de varier d'un nœud à l'autre de la pastille. L'approximation DF est modifiée en conséquence selon la méthodologie suggérée dans [38] et adaptée au cas présent :

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(\overrightarrow{\lambda \operatorname{grad}(T)}) &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \cdot \lambda \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}(T)}) = \frac{\partial}{\partial r} (\lambda \overrightarrow{\operatorname{grad}(T)}) + \frac{\lambda}{r} \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}(T)} \\ \operatorname{div}(\overrightarrow{\lambda \operatorname{grad}(T)}) &\approx \frac{\lambda_{i+\frac{1}{2}} \cdot \left. \frac{dT}{dr} \right|_{i+\frac{1}{2}} - \lambda_{i-\frac{1}{2}} \cdot \left. \frac{dT}{dr} \right|_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta r} + \frac{\lambda_i}{r_i} \cdot \left. \frac{dT}{dr} \right|_i \\ &\approx \frac{\lambda_{i+\frac{1}{2}} \cdot \frac{T_{i+1} - T_i}{\Delta r} - \lambda_{i-\frac{1}{2}} \cdot \frac{T_i - T_{i-1}}{\Delta r}}{\Delta r} + \frac{\lambda_i}{r_i} \cdot \frac{T_{i+1} - T_{i-1}}{2 \cdot \Delta r} \\ &\approx \frac{\lambda_{i+\frac{1}{2}} \cdot T_{i+1} + \lambda_{i-\frac{1}{2}} \cdot T_{i-1} - (\lambda_{i+\frac{1}{2}} + \lambda_{i-\frac{1}{2}}) \cdot T_i}{\Delta r^2} + \frac{\lambda_i}{r_i} \cdot \frac{T_{i+1} - T_{i-1}}{2 \cdot \Delta r} \end{aligned}$$

avec

$$\begin{aligned}\lambda_{i+\frac{1}{2}} &= \frac{\lambda_i + \lambda_{i+1}}{2} \\ \lambda_{i-\frac{1}{2}} &= \frac{\lambda_{i-1} + \lambda_i}{2}\end{aligned}$$

L'interpolation linéaire d'un paramètre en un point milieu est d'ordre 2 en précision [38].

Le gap pastille/gaine

Le champ de température dans le gap n'est pas résolu du fait du fait de la complexité pour modéliser l'échange de chaleur dans cette zone. La présence du gap est modélisée par d'une conductance thermique qui intervient de la formulation des conditions limites, ce qui sera détaillé dans la suite. Cette modélisation suppose implicitement que le gap soit toujours à l'équilibre, ce qui est cohérent avec son faible volume et sa faible inertie thermique.

La gaine

Les équations dans la gaine sont similaires à celle du combustible hormis l'absence de puissance volumique. Les hypothèses de validité ainsi que la discrétisation par différences finies sont identiques :

$$\rho C_{p,i} \cdot \frac{(T_i^{n+1} - T_i^n)}{\Delta t} = \lambda_i \cdot \left(\frac{(T_{i+1}^n + T_{i-1}^n - 2 \cdot T_i^n)}{\Delta r^2} + \frac{1}{r_i} \cdot \frac{(T_{i+1}^n - T_{i-1}^n)}{2 \cdot \Delta r} \right)$$

Du fait de la faible épaisseur de la gaine et du pas de temps utilisé, cette région n'est représentée que par 7 nœuds radiaux. La variation de la conductivité thermique dans chaque cellule est gérée de la même façon que pour le combustible.

Le caloporteur

Les restes des équations de Navier-Stokes sont simplifiée par une série d'hypothèses qui permettent de ce restreindre uniquement à l'équation de conservation de l'énergie. Au sein d'un sous canal-élémentaire, BATH considère l'écoulement comme :

- celui d'un fluide parfait, les forces de viscosité sont donc négligées
- incompressible, cette hypothèse est valable pour les fluides dont la vitesse est très inférieure à celle du son (dans le même milieu). Cela implique également la conservation du débit volumique le long d'une ligne de courant.
- turbulent, dans les écoulements de types REP cette condition est remplie puisque $Re \approx 2 \times 10^5 \gg 2^3$. Cette hypothèse permet également de considérer qu'à un niveau axial donné le profil de vitesse est plat (en négligeant la couche limite en paroi de la gaine). Les grandeurs thermodynamiques seront homogènes pour une côte axiale donnée.
- unidimensionnel, ce qui est cohérent avec la faible valeur des courants transverses (intercanaux) en comparaison de la vitesse axiale (cf. [28]).
- à débit massique constant. Cette dernière contrainte combinée à l'incompressibilité permet de s'affranchir de la résolution des équations de la quantité de mouvement ainsi que de l'équation de continuité (nécessaire pour le calcul du champ de pression). Seules les propriétés dans le bulk⁶ sont donc calculées.
- monophasique, le fluide est considéré liquide quel que soit sa température. La densité est considérée comme constante le long de l'écoulement et ce en dépit de sa variation significative à l'approche de la température de saturation.

6. Pour rappel, le bulk correspond au volume du caloporteur sans les couches limites

- les couches limites thermique et hydrodynamique sont considérées comme établies. On supposera pour cela que la longueur d'établissement de ces couches limites sont négligeables devant la hauteur de la cellule élémentaire.

Le modèle du caloporteur de BATH n'inclut donc que la résolution de l'équation de conservation de l'énergie :

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T_{cool}}{\partial t} + v(z) \cdot \frac{\partial T}{\partial z} \right) \cdot dV = h_{cc} \cdot (T_{clad,ext}(z) - T_{cool}(z)) \cdot dS$$

Avec :

- T_{cool} la température du caloporteur (K)
- ρ la densité du caloporteur, considérée comme constante dans toute la cellule élémentaire et prise à sa valeur d'entrée
- C_p la capacité calorifique du caloporteur en $(J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1})$
- $v(z)$ la vitesse du caloporteur $(m \cdot s^{-1})$
- dV le volume de contrôle dans lequel est dressé le bilan d'énergie (m^3)
- dS la surface élémentaire d'échange (en m^2) entre la paroi et la gaine pour un volume dV donné
- $T_{clad,ext}$ la température extérieur de la gaine, prise à la même altitude que T_{cool} , (K)
- h_{cc} le coefficient d'échange conducto-convectif en $(W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1})$

Notons que le rapport $\frac{dS}{dV}$ peut s'écrire :

$$\frac{dS}{dV} = \frac{2\pi R_{clad,ext} \cdot dz}{S_{mouillée} \cdot dz} = \frac{P_{chauffant}}{S_{mouillé}} = \frac{4}{D_{chauffant}}$$

Avec :

- $R_{clad,ext}$ le rayon extérieur de la gaine (m)
- $S_{mouillée}$ la surface mouillée aussi appelée aire de passage (m^2)
- $P_{chauffant}$ le périmètre chauffant qui correspond au périmètre extérieur de la gaine (m)
- $D_{chauffant}$ le diamètre chauffant (m).

Dans la suite le produit $\rho v(z)$ sera désigné comme étant le flux massique noté F et exprimé en $kg \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$. D'après les hypothèses énoncées précédemment cette variable est une constante le long de l'écoulement.

Au final l'équation de conservation d'énergie s'écrit :

$$\rho C_p \frac{\partial T_{cool}}{\partial t} = \frac{4 \cdot h_{cc}}{D_{chauffant}} \cdot (T_{clad}(z) - T_{coolant}(z)) - F C_p \cdot \frac{\partial T_{cool}}{\partial z}$$

Équation discrétisée

L'équation de conservation de l'énergie est discrétisée par un schéma aux différences finies :

$$\rho C_{p,z}^n \frac{(T_z^{n+1} - T_z^n)}{\Delta t} = \frac{4 \cdot h_{cc}^n}{D_{chauffant}} (T_{cladding,I}^n - T_z^n) - F C_{p,z}^n \frac{(T_z^n - T_z^n)}{\Delta z}$$

Où :

- T_z^n désigne la température du caloporteur au nœud z et au pas de temps n .
- $T_{cladding,I}^n$ désigne la température de la gaine à la même côté z , sur le dernier nœud indicé I et au temps n .

La capacité calorifique ainsi que le coefficient de conducto-convection sont recalculés à chaque pas de temps selon la température du nœud courant et au pas de temps n .

Le terme d'advection $\vec{v} \cdot \overrightarrow{grad}(\rho C_p T)$ donne lieu à l'estimation d'une dérivée spatiale $\frac{\partial}{\partial z}$ qui est calculée par un schéma vers l'arrière d'ordre 1 en espace ($\mathcal{O}(\Delta z)$). La formule centrée, bien

que d'ordre supérieur (en $\mathcal{O}(\Delta z^2)$) est instable, de même que le schéma vers l'avant (d'ordre $\mathcal{O}(\Delta z)$) [38].

Notons que ce schéma pourrait être amélioré en utilisant une interpolation linéaire de la capacité calorifique dans le terme d'advection :

$$\vec{v} \cdot \overrightarrow{\text{grad}}(\rho \cdot C_p \cdot T) \approx F \cdot \frac{(C_{p,z} + C_{p,z-1})}{2} \cdot \frac{(T_z^n - T_z^{n-1})}{\Delta z}$$

sur le même principe que celui utilisé pour la variation de la conductivité thermique dans la gaine et le combustible.

Calcul du coefficient de conducto-convection (h_{cc})

Pour éviter la résolution du champ de vitesse et de température dans la couche limite, on utilise communément la loi de Newton pour approximer le courant thermique à l'interface gaine/caloporteur. Pour rappel, cette loi, introduite dans le chapitre 1, s'écrit :

$$\vec{q} = h_{cc} \cdot (T_{wall} - T_{bulk}) \vec{n}$$

Où :

- h_{cc} le coefficient de conducto-convection, ($W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}$)
- \vec{q} est le flux surfacique de chaleur entre la gaine et le caloporteur ($W \cdot m^2$)
- \vec{n} est le vecteur unitaire normal à la paroi
- T_{wall} est la température à la paroi de la gaine (K)
- T_{bulk} est la température du bulk (dans le caloporteur) (K)

Le coefficient de conducto-convection est estimé au moyen de corrélations sur le nombre de Nusselt qui s'exprime comme :

$$Nu = \frac{h_{cc}L}{\lambda}$$

Où :

- L correspond à une longueur caractéristique de l'échange de chaleur. Typiquement cette variable est assimilée au diamètre chauffant, exprimé en (m).
- λ la conduction thermique du liquide, en ($W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$)

Les corrélations utilisées dans BATH sont présentées ci-dessous. Elles sont valable pour des régimes d'écoulements turbulents entièrement développés hydrauliquement et thermiquement. La plus part de ces formules ont une précision comprise entre 10 et 20%, ce qui est en cohérence avec le niveau de modélisation de BATH.

La corrélation de Dittus-Boelter/McAdams [30]

Cette corrélation est la plus largement utilisée. Elle a été développée pour des écoulement internes (tubes circulaires) :

$$Nu = 0.023 \cdot Re^{0.8} \cdot Pr^{0.4}$$

L'exposant du nombre adimensionnel de Prandtl vaut 0.4 lorsque le flux de chaleur se fait depuis la gaine vers le caloporteur et 0.3 lorsque la direction du flux de chaleur est inversée. Cette corrélation est valide dans le domaine suivant :

$$\begin{cases} 0.7 < Pr < 120 \\ Re > 10^4 \\ \frac{L}{D} > 60 \end{cases}$$

- L la longueur du sous-canal (m)
- D le diamètre hydraulique (m)

Tous les nombres adimensionnels sont calculés à partir des propriétés thermiques du bulk. Les conditions d'écoulement en REP sont compatibles avec cette plage limite.

Corrélation Gnielinski (1976, amélioration de la corrélation de Petukhov)[26]

Cette corrélation est également largement utilisée pour de nombreux types de réacteur en écoulement turbulent :

$$Nu = \frac{(\frac{f}{8})(Re - 1000)Pr}{1 + 12.7\sqrt{(\frac{f}{8})(Pr^{\frac{2}{3}} - 1)}}$$

Elle prend en compte les frottements sur une paroi de faible rugosité au travers du facteur de frottement f qui pour un tube lisse s'exprime comme :

$$f = \frac{1}{(1.82 \log_{10}(Re) - 1.64)^2}$$

La plage de validité de la corrélation de Gnielinski est la suivante :

$$\begin{cases} 2300 \leq Re \leq 5 \cdot 10^6 \\ 0.5 < Pr < 200 \\ 200 < Pr < 2000 \end{cases}$$

Toutes les propriétés thermiques sont évaluées à la température du bulk. Plusieurs formulations simplifiées de cette équation existent en fonction de la nature du fluide. Dans BATH elle peut être utilisée telle quelle à la demande de l'utilisateur.

Comportement à l'atteinte de la température de saturation

Lorsqu'un nœud atteint la température de saturation, l'énergie apportée au système sert uniquement à accroître son enthalpie, augmentant ainsi la proportion de la phase vapeur. Quand l'enthalpie du caloporteur atteint l'enthalpie de saturation de la vapeur, le changement de phase est complet (i.e. disparition de tout le liquide) et la température augmente à nouveau ce qui donne lieu à une surchauffe de la phase vapeur.

Dans BATH le régime diphasique n'est pas modélisé. Cependant en situation accidentelle le caloporteur peut localement (ici dans le volume représenté par un nœud) atteindre la température de saturation. Dans ce cas, la température du nœud est bloquée à sa température de saturation. L'équation d'énergie continue d'être résolue mais en substituant la variable température à celle d'enthalpie :

$$\rho \frac{(H_z^{n+1} - H_z^n)}{\Delta t} = \frac{4 \cdot h_{cc}^n}{D_{chauffant}} (T_{cladding,I}^n - T_{sat}^n) - F \frac{(H_z^n - H_z^n)}{\Delta z}$$

Avec :

- H_z l'enthalpie du fluide en ($J \cdot m^{-3}$). Pour rappel l'enthalpie se définit comme $h(T) = \int_{T_0}^T C_p dT$
- T_{sat} la température de saturation du caloporteur (K). A 15.5 MPa elle vaut environ 617 K

Le correspondance entre température et enthalpie s'effectue au moyen d'une tabulation isobare prise à 15.5 MPa [41]. Dans le nœud situé au-dessus de celui à la température de saturation, le terme d'advection est également estimé avec la variable enthalpie, à savoir :

$$F \frac{(h_z^n - h_z^n)}{\Delta z}$$

au lieu de :

$$FC_{p,z}^n \frac{(T_z^n - T_z^n)}{\Delta z}$$

Cette façon de procéder ne rend pas le traitement de l'équation de l'énergie plus réaliste puisque la phase vapeur peut en réalité adopter une vitesse différente de la phase liquide et également impacter de façon significative (selon le type d'écoulement diphasique) le coefficient de conducto-convection. Cependant, à l'échelle d'une cellule d'assemblage, cela permet de continuer à conserver l'énergie sans utiliser des valeurs non physiques pour la températures caloporteur.

En cas de vaporisation totale, aucun retour aux équations en température n'est prévue pour simuler la surchauffe de la vapeur. Notons également que la vapeur apparue à cause d'une ébullition nucléée n'entraîne pas le passage des équations en température vers celles en enthalpie.

Calcul du Flux Thermique Critique

L'estimation du Flux Thermique Critique (FTC) également appelé DNB (*Departure From Nucleate Boiling*) et noté \ddot{q}_{DNB} ,⁷ est centrale dans l'analyse de sûreté des REP car une fois ce seuil franchi la gaine va subir une brusque augmentation de température pouvant mener à la fonte du matériau ou une oxydation accélérée (qui plus est exothermique). Dans BATH, l'effondrement du coefficient de conducto-convection (h_{cc}) pour un écoulement post-DNB n'est pas modélisé. Le calcul du flux critique est donc la seule façon de savoir si l'écoulement amorce un régime diphasique.

Du fait de la complexité des formules utilisées, seule la corrélation W-3 [42] (la plus usitée et la seule implémentée dans BATH) sera présentée.⁸ Elle a l'avantage d'avoir été développée pour un réseau de crayons (et non pour un écoulement interne dans un tube chauffant) :

$$\begin{aligned} \ddot{q}_{DNB}(z) = & \left((2.022 - 0.06238 \cdot p) + (0.1722 - 0.01427 \cdot p) \cdot e^{(18.177 - 0.5987 \cdot p) \cdot x_e} \right) \times \\ & ((2.326 \cdot G) \cdot (0.1484 - 1.596 \cdot x_e + 0.1729 \cdot x_e \cdot |x_e|) + 3271) \times \\ & \left((1.157 - 0.869 \cdot x_e) \cdot (0.2664 + 0.8357 \cdot e^{-124.1 \cdot D_e}) \right) \times \\ & (0.8258 + 0.0003413 \cdot (h_f - h_{in})) \end{aligned}$$

Avec (la dépendance des paramètres à la côte du sous-canal est explicitement spécifiée) :

$\ddot{q}_{DNB}(z)$ flux critique $kW \cdot m^{-2}$ à la côte z

p la pression en MPa . Elle doit être comprise entre 5.5 et 16 MPa

D_e le diamètre hydraulique, exprimé en m , compris entre 0.015 et 0.018 m

G le flux massique exprimé en $kg \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$, compris entre 1356 et 6800 $kg \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$

h_f, h_{in} respectivement l'enthalpie du liquide à la température de saturation et l'enthalpie à l'entrée du sous-canal, exprimée en $kJ \cdot kg$.

x_e le titre à l'équilibre thermodynamique, sans dimension, compris entre -0.15 et 0.15 , à la côte z .

Cette corrélation est valide si les conditions suivantes sont aussi respectées :

L longueur du sous-canal comprise entre 0.254 et 3.70 m

7. Valeur typique en condition stationnaire en REP : autour de 2500 +/- 500 $kW \cdot m^2$

8. À titre informatif d'autres corrélations permettant d'estimer le flux critique des écoulement en réseau peuvent être évoquées : GEXL (General Electric Quality vs Boiling Length Correlation), la corrélation Hench-Gillis plus souvent appelée EPRI-2, les tables de Groeneveld (Groeneveld look-up table).

$\frac{P_{heated}}{P_{wetted}}$ le rapport du périmètre chauffant (périmètre du crayon) sur le périmètre mouillé compris entre 0.88 et 1.0.

Dans une perspective d'amélioration, il serait envisageable de calculer ou d'imposer un gradient de pression constant pour tenir compte de la variation de pression le long du sous-canal.

La corrélation W-3 nécessite une estimation du titre thermodynamique ($x(z)$) défini comme :

$$x(z) = \frac{\dot{M}_{vap}}{\dot{M}_{vap} + \dot{M}_{liq}}$$

avec :

- $x(z)$ le titre thermodynamique à la côte z .
- \dot{M}_{vap} le débit massique vapeur moyenné en temps à la côte z .
- \dot{M}_{liq} le débit massique liquide moyenné en temps à la côte z .

Du fait de la difficulté à estimer cette variable on lui préfère bien souvent une approximation appelée titre à l'équilibre thermodynamique et noté x_{eq} . Ce titre à l'équilibre s'écrit [30] :

$$x_{eq}(z) = \frac{h(z) - h_l}{h_{fg}}$$

Avec :

$h(z)$ l'enthalpie du liquide à la côte z du sous-canal ($J \cdot kg^{-1}$).

h_l l'enthalpie liquide à la température de saturation ($J \cdot kg^{-1}$).

h_{fg} l'enthalpie de vaporisation du liquide, c'est à dire la différence de l'enthalpie de la phase vapeur à la température de saturation (h_g) et de l'enthalpie du liquide à la température de saturation (h_l), ($J \cdot kg^{-1}$).

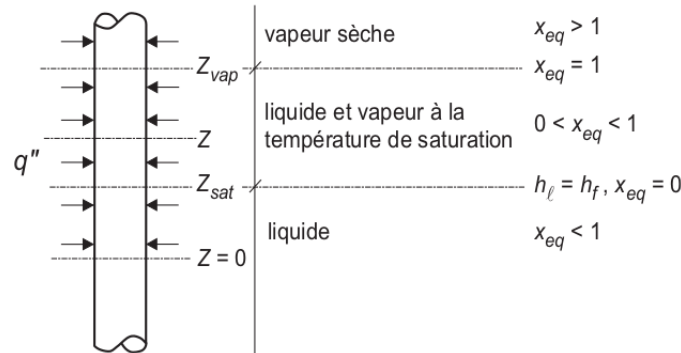


FIGURE 2.7: Écoulement à l'équilibre thermodynamique dans un tube chauffant [30].

Le titre à l'équilibre thermodynamique correspond à la proportion de vapeur présente à la température T_{sat} dans un liquide à la même température. Hors de l'équilibre thermodynamique, pour une même enthalpie, la vapeur pourrait être surchauffée ($T_{vap} > T_{sat}$) et/ou la température du liquide sous-saturée ($T_{l,bulk} < T_{sat}$).

Dans BATH, lorsque la température caloporteur d'un nœud est supérieure à la température de saturation du liquide alors l'équation de conservation d'énergie est résolue pour la variable enthalpie. La valeur d'enthalpie ainsi calculée est utilisée pour l'estimation du titre à l'équilibre thermodynamique et donc une valeur de flux critique (\dot{q}_{DNB}).

De façon analogue aux corrélations en écoulement monophasique, la corrélation W-3 peut être adaptée pour mieux correspondre à la situation étudiée. Il est ainsi possible de calculer des

facteurs correctifs pour tenir compte de la présence d'une paroi froide (tube guide présent dans le sous-canal étudié), ou de grilles de mélange.

Ce type de raffinement n'a pas de pertinence dans BATH puisque seul un crayon moyen est modélisé et que les pertes de pression et *a fortiori* les grilles ne sont pas modélisées.

En revanche, il est possible de tenir compte d'un facteur correctif, noté F, relatif à la non-uniformité du flux sur la hauteur du sous-canal. En effet, la corrélation W-3 a été développée pour des flux thermiques surfaciques uniformes axialement, ce qui n'est pas le cas dans un assemblage de REP. Le facteur correctif est appliqué à l'estimation du flux critique calculé en chaque nœud. Il tient compte du profil de puissance dans les nœuds précédents (dans le sens de l'écoulement) :

$$\ddot{q}_{DNB,non-uniform}(z) = \frac{\ddot{q}_{DNB,uniforme}(z)}{F(z)}$$

Où le flux thermique $\ddot{q}_{DNB,uniforme}(z)$ est calculé par la corrélation W-3 précédemment présentée.

Le facteur⁹ F se calcul en chaque nœud comme :

$$F(z) = \frac{C(z) \int_0^z \ddot{q}(z') e^{-C(z) \cdot (z-z')} dz'}{\ddot{q}(z) \cdot (1 - e^{-C(z) \cdot z})}$$

Ce qui dans le formalisme des différences finies s'approxime par :

$$F_z = \frac{C_z \sum_{z' \in [0; z]} h_{cc}^{z'} \cdot (T_{clad,ext,z'} - T_{cool,z'}) \cdot e^{-C_z \cdot (z-z')} \cdot \Delta z}{(h_{cc}^{z'} \cdot (T_{clad,ext,z} - T_{cool,z}) \cdot (1 - e^{-C_z \cdot z}))}$$

Avec :

- z la position du nœud considéré sur la hauteur du sous-canal (m)
- C_z un coefficient expérimental (interprété comme la « longueur de mémoire ») rendant compte de l'efficacité de l'échange d'énergie et de masse à l'interface entre la couche d'ébullition et le liquide sous-saturé, (m^{-1}).

Le coefficient C_z se calcule comme :

$$C_z = 185.6 \times \frac{(1 - x_e(z))^{4.31}}{F^{0.478}}$$

Avec :

- F le flux massique en ($kg \cdot m^2 \cdot s^{-1}$)
- $x_e(z)$ le titre thermodynamique à l'équilibre à la position z

2.3.2 Traitement numérique aux interfaces

Les schémas numériques précédemment développés sont tous explicites : ils permettent de passer du pas de temps t au pas de temps $t + 1$. L'évolution des nœuds situés à la frontière d'un domaine (i.e. combustible, gaine, caloporteur) est calculée non pas par intégration de sa dérivée mais en utilisant des conditions limites.

Les conditions limites doivent être respectées à chaque pas de temps t , ce qui implique que les membres de part et d'autre de l'égalité soient considérés au même pas de temps.

Dans la suite les conditions limites pour chaque interface sont toutes présentées et explicitées sous leur formes discrétisées. Elles forment un système d'équations qui doit être résolu dans un ordre précis relativement à l'intégration des nœuds hors interfaces.

9. Le facteur F est compris en ordre de grandeur entre 0 (exclu) et 10, sa valeur typique est environ de 5

Entrée dans la cellule élémentaire

En entrée du sous-canal, la température est imposée à T_{inlet} à la surface d'entrée du premier nœud du caloporteur.

Cette condition de bord est implémentée de la façon suivante :

$$\rho \cdot C_p \frac{T_0^{t+1} - T_0^t}{\Delta t} = \frac{4 \cdot h_{cc}^t}{D_{chauffant}} (T_{cladding}^t - T_0^t) - FC_p \cdot \frac{T_i^t - T_{inlet}}{\frac{\Delta z}{2}}$$

avec ρ_{inlet} , $C_{p,inlet}$ la masse volumique et la capacité calorifique prise à la température T_{inlet} .

Caloporteur/gaine

La condition limite appliquée entre l'extérieur de la gaine et le caloporteur est une condition de Neumann. Le flux thermique en conduction en sortie de la gaine est imposé égal à celui exprimé par la loi de Newton :

$$\lambda_{clad, R_c} \frac{\partial T_{clad}}{\partial r} \Big|_{(r=R_{clad, ext}, z)} = h_{cc} \cdot (T_{clad}(r = R_{clad, ext}, z) - T_{coolant}(z))$$

Ce qui s'exprime dans le formalisme des différences finies par :

$$\lambda_{clad, R} \frac{(T_{z, R-1}^{t+1} - T_{z, R}^{t+1})}{\Delta r} = h_{cc} \cdot (T_{z, R}^{t+1} - T_{z, cool}^{t+1})$$

Avec :

- $T_{z, R-1}$ la température dans l'avant-dernier nœud de la gaine et au niveau z .
- $T_{z, R}$ la température dans le dernier nœud de la gaine et au niveau z .

Préalablement, les températures au temps $t+1$ du caloporteur et du nœud $R-1$ de la gaine ont été calculées sur la base des dérivées estimées au temps t . La relation énoncée plus haut permet alors de calculer la température au nœud R de la gaine et au temps $t+1$:

$$\left(\frac{\lambda_{clad, R_c}}{\Delta r} + h_{cc} \right) \cdot T_R^{t+1} = h_{cc} \cdot T_{cool, z}^{t+1} + \frac{\lambda_{clad, R_c}}{\Delta r} \cdot T_{R-1}^{t+1}$$

$$T_R^{t+1} = \frac{h_{cc} \cdot T_{cool, z}^{t+1} + \frac{\lambda_{clad, R_c}}{\Delta r} \cdot T_{R-1}^{t+1}}{\frac{\lambda_{clad, R_c}}{\Delta r} + h_{cc}}$$

Centre de la pastille combustible

Au centre de la pastille combustible, la discrétisation du terme de diffusion thermique pose problème. En effet ce terme exprimé en coordonnées cylindrique et considéré au nœud ($i = 0$) nécessite l'existence d'un nœud indicé ($i = -1$) :

$$\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial T}{\partial r} \approx \frac{(T_{i+1} + T_{i-1} - 2 \cdot T_i)}{\Delta r^2} + \frac{1}{(i + \frac{1}{2}) \cdot \Delta r} \cdot \frac{(T_{i+1} - T_{i-1})}{2 \cdot \Delta r}$$

Pour rappel dans la discrétisation de la pastille combustible choisie, la position du nœud (0) ne coïncide pas avec le centre de la pastille (cf. figure 2.6) ce qui évite la question de la discrétisation du terme $\frac{1}{r}$ quand $r = 0$.

Il existe plusieurs façons de gérer l'intégration du nœud central de la pastille :

- Soit le courant de chaleur est imposé comme étant nul au centre de la pastille. La température de la pastille est donc considérée comme un extrémum local du champ de température. Cette condition s'exprime comme :

$$\begin{aligned}\vec{j}_{0 \rightarrow 1} &= 0 \\ \vec{j}_{0 \rightarrow -1} &= 0\end{aligned}$$

Ce qui implique :

$$\begin{aligned}\operatorname{div}(\overrightarrow{\lambda \operatorname{grad}}(T)) &= \lambda \Delta T \approx \frac{(j_{0 \rightarrow 1} - j_{-1 \rightarrow 0})}{\Delta r} = 0 \\ \frac{\partial T}{\partial r} &= 0\end{aligned}$$

Concrètement, l'intégration du nœud ($i = 0$) se résume alors à imposer l'égalité suivante :

$$T_0^{t+1} = T_1^{t+1}$$

- Soit on introduit un nœud « virtuel » indicé ($i = -1$) tel que :

$$T_{-1} = T_0$$

Cette solution impose la symétrie à la frontière intérieure du nœud ($i = 0$) ce qui rejoint l'hypothèse d'axisymétrie préalablement formulée dans la modélisation de crayon dans BATH. L'introduction du nœud virtuel règle la question de la discrétisation du laplacien mais pas celle de la dérivée radiale $\frac{dT}{dr}$. Cette dernière est alors exprimée au moyen d'une formule décentrée vers l'avant comme :

$$\frac{dT}{dr} \approx \frac{T_1^t - T_0^t}{\Delta r}$$

Le schéma numérique résultant n'est plus que d'ordre 1 en espace.

- Soit le schéma numérique est décentré au nœud ($i = 0$) pour éviter de faire intervenir un nœud inexistant :

$$\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{(T_2^t - 2 \cdot T_1^t + T_0^t)}{\Delta r^2} + \frac{1}{0.5 \times \Delta r} \cdot \frac{(T_1 - T_0)}{\Delta r}$$

Ce nouveau schéma numérique décentré vers l'avant est tiré de [38]. Il se déduit, comme toute formule de différences finies, d'une combinaison linéaire de développements limités au nœud ($i = 1$) et ($i = 2$). Notons que la dérivée première n'est plus que d'ordre $\mathcal{O}(\Delta r)$ contrairement à la formule du cas général.

La solution numéro 2 est celle utilisée dans BATH. A titre indicatif, pour une configuration de REP typique à puissance nominale, les deux premières solutions aboutissent à un écart sur la température centrale d'environ $2K$.

Notons que l'utilisation de conditions limites dont le schéma numérique est d'ordre inférieur ($\mathcal{O}(\Delta z)$) à celui employé dans les autres nœuds ($\mathcal{O}(\Delta z^2)$) conduit à dégrader la stabilité et la précision du schéma dans son ensemble.

Combustible/Gap/Gaine

Autour du gap, la continuité des flux thermiques de conduction aux interfaces des différents milieux s'écrit comme :

$$\begin{cases} \lambda_{clad} \left. \frac{dT_{clad}}{dr} \right|_{(r=R_{clad \ int, z})} = h_{gap} \cdot (T_{clad}(r = R_{clad \ int, z}) - T_{fuel}(r = R_{fuel, z})) & (a) \\ \lambda_{fuel} \left. \frac{dT_{fuel}}{dr} \right|_{(r=R_{fuel, z})} = h_{gap} \cdot (T_{fuel}(r = R_{fuel, z}) - T_{clad}(r = R_{clad \ int, z})) & (b) \end{cases}$$

Avec :

- R_{fuel} le rayon de la pastille combustible (m)
- $R_{clad\ int}$ le rayon interne de la gaine (m)

Ces équations sont utilisées pour mettre à jour les valeurs des nœuds aux interfaces. Ce système d'équations est dans un premier temps discrétisé pour la partie gaine :

$$\lambda_{cladding} \frac{dT_{clad}}{dr} \Big|_{(r=R_{cladding\ int}, z)} = h_{gap} \cdot (T_{cladding}(r = R_{cladding\ int}, z) - T_{fuel}(r = R_{fuel\ ext}, z))$$

$$\lambda_{clad} \frac{T_{clad,1}^{t+1} - T_{clad,0}^{t+1}}{\Delta r_c} = h_{gap} \cdot (T_{clad,0}^{t+1} - T_{fuel,R}^{t+1})$$

Avec :

- $T_{clad,0}$ la température dans le premier nœud de la gaine (dans la direction allant du centre de la pastille vers le caloporteur).
- $T_{clad,1}$ la température dans le second nœud de la gaine (K)
- $T_{fuel,R}$ la température dans le dernier nœud de la pastille combustible (K).
- Δr_c le pas d'espace utilisé dans la gaine (m)

La dépendance en axial (i.e. indice z) est ici omise, le système à résoudre étant le même pour chaque niveau.

Cette équation aboutit à l'expression de la température dans le premier nœud de la gaine au pas de temps $t + 1$ en fonction de la température du nœud suivant dans la gaine ainsi que celle du dernier nœud du combustible :

$$\left(\frac{\lambda_{clad}}{\Delta r_c} + h_{gap}\right) \cdot T_{clad,0}^{n+1} = h_{gap} \cdot T_{fuel,R}^{n+1} + \frac{\lambda_{clad}}{\Delta r_c} \cdot T_{clad,1}^{n+1}$$

De même l'équation de continuité du flux thermique côté combustible permet d'établir une relation assez similaire :

$$\lambda_{fuel} \frac{dT_{fuel}}{dr} \Big|_{(r=R_{fuel\ ext}, z)} = h_{gap} \cdot (T_{fuel}(r = R_{fuel\ ext}, z) - T_{cladding}(r = R_{cladding\ int}, z))$$

$$\lambda_{fuel} \frac{T_{fuel,R-1}^{t+1} - T_{fuel,R}^{t+1}}{\Delta r_f} = h_{gap} \cdot (T_{fuel,R}^{t+1} - T_{clad,0}^{t+1})$$

$$\left(\frac{\lambda_{fuel}}{\Delta r_f} + h_{gap}\right) \cdot T_{fuel,R}^{t+1} = h_{gap} \cdot T_{clad,0}^{t+1} + \frac{\lambda_{fuel}}{\Delta r_f} \cdot T_{fuel,R-1}^{t+1}$$

Où :

- $T_{fuel,R-1}$ la température combustible dans l'avant-dernier nœud de la pastille (m)
- Δr_f le pas d'espace utilisé dans le combustible (m)

Au final, la température du dernier nœud combustible ainsi que la température du premier nœud de la gaine dépendent l'une de l'autre ainsi que des valeurs de température des nœuds voisins. Le tout forme le système d'équations suivant :

$$\begin{cases} \left(\frac{\lambda_{clad\ R_c}}{\Delta r_c} + h_{gap}\right) \cdot T_{clad,0}^{t+1} = h_{gap} \cdot T_{fuel,R}^{t+1} + \frac{\lambda_{clad\ R_c}}{\Delta r_c} \cdot T_{clad,1}^{t+1} & (a) \\ \left(\frac{\lambda_{fuel, R_f}}{\Delta r_f} + h_{gap}\right) \cdot T_{fuel,R}^{t+1} = h_{gap} \cdot T_{clad,0}^{t+1} + \frac{\lambda_{fuel, R_f}}{\Delta r_f} \cdot T_{fuel,R-1}^{t+1} & (b) \end{cases}$$

Dont la solution est :

$$\Rightarrow \begin{cases} T_{clad,0}^{t+1} = \frac{h_{gap} \cdot \frac{\lambda_f, R_f}{\Delta r_f} \cdot T_{fuel,R-1}^{t+1} + \frac{\lambda_c, R_c}{\Delta r_c} \cdot (\frac{\lambda_f, R_f}{\Delta r_f} + h_{gap}) \cdot T_{clad,1}^{t+1}}{\frac{\lambda_f, R_f}{\Delta r_f} \cdot \frac{\lambda_c, R_c}{\Delta r_c} + h_{gap} \cdot (\frac{\lambda_f, R_f}{\Delta r_f} + \frac{\lambda_c, R_c}{\Delta r_c})} & (a) \\ T_{fuel,R}^{t+1} = \frac{h_{gap} \cdot \frac{\lambda_c, R_c}{\Delta r_c} \cdot T_{clad,1}^{t+1} + \frac{\lambda_f, R_f}{\Delta r_f} \cdot (\frac{\lambda_c, R_c}{\Delta r_c} + h_{gap}) \cdot T_{fuel,R-1}^{t+1}}{\frac{\lambda_f, R_f}{\Delta r_f} \cdot \frac{\lambda_c, R_c}{\Delta r_c} + h_{gap} \cdot (\frac{\lambda_f, R_f}{\Delta r_f} + \frac{\lambda_c, R_c}{\Delta r_c})} & (b) \end{cases} \quad (2.4)$$

Ces valeurs aux interfaces dépendent de celles aux nœuds voisins au temps $t+1$, cela implique donc le calcul préalable des nœuds hors interfaces.

2.3.3 Ordonnement des calculs dans BATH

La résolution des équations aux interfaces des différents milieux a souligné l'importance d'ordonner les calculs d'intégration des nœuds les uns par rapport aux autres. Dans BATH le flot de calcul de fait dans l'ordre suivant :

Algorithm 3 BATH

```

for  $z = Z_{max}$  to 0 do
    Calculer la dérivée de la température du caloporteur au nœud ( $z$ )
    Intégrer la température du caloporteur au nœud ( $z$ ) sur  $\Delta t$  ( $n \rightarrow n+1$ )
    for  $r = 0$  to  $R_{fuel} - 1$  do
        Calculer la dérivée de la température combustible du nœud ( $r,z$ )
    end for
    for  $r = 1$  to  $R_{clad} - 1$  do
        Calculer la dérivée de la température gaine du nœud ( $r,z$ )
    end for
    for  $r = 0$  to  $R_{fuel} - 1$  do
        Intégrer la température combustible du nœud ( $r,z$ ) sur  $\Delta t$ 
    end for
    for  $r = 1$  to  $R_{clad} - 1$  do
        Intégrer la température gaine du nœud ( $r,z$ ) sur  $\Delta t$ 
    end for
    Actualiser la température de la gaine à l'interface caloporteur/gaine en ( $R_{clad},z$ )
    Actualiser la température de la gaine à l'interface pastille/gaine en ( $0,z$ )
    Actualiser la température du combustible à l'interface pastille/gaine en ( $R_{fuel},z$ )
end for
    
```

Avec $z = 0$ et $z = Z_{max}$ respectivement le premier et le dernier niveau axial dans le sens de l'écoulement du caloporteur.

Le calcul de dérivée de la température du caloporteur à un niveau (z) ne nécessite que celle du niveau précédent. En parcourant les niveaux axiaux dans le sens inverse de l'écoulement il est donc possible d'intégrer directement les températures caloporteurs, ce qui permet également d'actualiser la température du nœud à l'interface gaine/caloporteur sans recourir à une boucle supplémentaire.

De plus cet ordre de résolution permet d'envisager une parallélisation immédiate du code, où chaque boucle **for** peut être distribuée entre différents *threads*.

L'état stationnaire s'obtient simplement en itérant la résolution du système d'équations jusqu'à satisfaire un critère attestant l'équilibre du système. Il est nécessaire de s'assurer que

chaque domaine de résolution soit à l'équilibre. Pour ce faire on définit les critères suivants :

$$C_{fuel,z} = \sum_{r=0 \rightarrow R_f} \left| \frac{dT_{fuel}}{dt} \right|_{r,z}$$

$$C_{clad,z} = \sum_{r=0 \rightarrow R_c} \left| \frac{dT_{clad}}{dt} \right|_{r,z}$$

$$C_{coolant} = \sum_{z=0 \rightarrow Z_{max}} \left| \frac{dT_{cool}}{dt} \right|_z$$

Avec :

- $C_{fuel,z}$ le critère de convergence du combustible au niveau (z).
- $C_{clad,z}$ le critère de convergence du combustible au niveau (z).
- $C_{coolant}$ le critère de convergence du combustible au niveau (z).

Le système est considéré à l'équilibre quand l'ensemble de ces critères sont inférieurs à une valeur imposée (en pratique $10^{-6} K \cdot s^{-1}$).

En annexe de ce chapitre figurent l'étude de stabilité associée aux schémas numériques utilisés dans BATH, une comparaison avec une résolution analytique pour chaque jeu d'équations résolues et enfin une comparaison avec le code COBRA-EN sur un assemblage typique de REP à l'état stationnaire.

2.4 Couplage neutronique/thermohydraulique

Cette section vise à expliciter la façon dont sont couplés les codes de neutronique et de thermohydraulique précédemment présentés.

Chaque nœud neutronique de la NDM est associé à un nœud thermique (i.e. combustible + caloporteur) de TLP ou de BATH. Les maillages de neutronique et de thermohydraulique sont donc superposés.

2.4.1 Influence de la neutronique sur la thermohydraulique

La thermohydraulique est couplée avec la neutronique par l'intermédiaire du taux de fission qui est directement proportionnel à la source de chaleur dans l'équation du combustible :

$$\ddot{q} = Q \cdot \sum_{g \in group} \Sigma_{fis,g} \cdot \phi_g \cdot \frac{V_{node NDM}}{V_{fuel}}$$

Avec :

- \ddot{q} la puissance volumique imposée dans le combustible ($W \cdot m^{-3}$)
- Q une constante de proportionnalité entre le taux de fission et la puissance produite, ($W \cdot fission^{-1}$)
- $V_{node NDM}$ correspond au volume associé au nœud, (m^3)
- V_{fuel} correspond au volume de combustible réellement présent dans $V_{node NDM}$, (m^3)

L'utilisation de la théorie de la diffusion impose d'homogénéiser neutroniquement l'assemblage. Dans le volume associé à un nœud « neutronique » tel qu'utilisé par la NDM, le combustible ne se distingue plus du caloporteur et la puissance produite par fission est considérée homogènement répartie au sein de ce volume.

Du point de vue de la thermique, il est nécessaire de distinguer le combustible du caloporteur. La puissance produite dans un nœud neutronique est donc ramenée au volume de combustible effectivement présent dans le nœud thermohydraulique associé.

La constante Q est initialement calculée de telle sorte qu'à une normalisation du flux neutronique donnée (en pratique, le flux est normalisé à 1 à l'état initial) soit associée la puissance cœur souhaitée :

$$Q = \frac{P_{core}}{\sum_{\forall node\ i} \sum_{\forall g \in group} \Sigma_{fis,g,i} \cdot \phi_{g,i} \cdot V_{node\ NDM,i}}$$

Une autre solution consiste à considérer la valeur énergétique d'une fission ($\approx 200\ MeV \cdot fission^{-1}$) afin de normaliser le flux neutronique pour aboutir à la puissance cœur voulue.

2.4.2 Influence de la thermohydraulique sur la neutronique

Les sections efficaces dépendent à la fois de la température combustible *via* l'effet Doppler, mais aussi de la température modérateur, principalement au travers de sa densité qui influence le ralentissement des neutrons. Dans la suite nous exprimerons la dépendance des sections efficaces au champ de température comme :

$$\Sigma_r(T_{fuel}, T_{cool}, d_{cool})$$

Avec :

- Σ_r la section efficace macroscopique associée à la réaction r .
- T_{fuel} la température effective du combustible (K).
- T_{cool} la température moyenne du combustible (K).
- d_{cool} la densité moyenne du modérateur ($kg \cdot m^{-3}$).

Dans la NDM, les sections efficaces sont considérées homogènes en chaque nœud. Il est donc nécessaire de condenser le champ de température dans la pastille auquel BATH¹⁰ donne accès en une seule valeur, dite « effective », utilisée pour estimer les sections efficaces.

Cette condensation des champs de températures doit tenir de la non-linéarité de l'effet Doppler avec la température. En effet, pour un profil de température à l'équilibre, une augmentation de température au centre de la pastille apporte plus d'antiréactivité par l'effet Doppler qu'une même augmentation de température en périphérie de la pastille [43]. La température effective est généralement approchée par la formule de Rowlands [44] :

$$T_{fuel,eff} = \frac{4}{9} \cdot T_{fuel,center} + \frac{5}{9} \cdot T_{fuel,surface}$$

Avec $T_{fuel,center}$ et $T_{fuel,surface}$ respectivement les températures au centre de la pastille et celle à sa surface.

Dans la littérature, le calcul des sections efficaces est le plus souvent effectué à l'échelle d'un assemblage entièrement réfléchi. Les codes utilisés pour cette tâche peuvent aussi bien être déterministes (APOLLO2 [45], WIMS [46]) que de type Monte Carlo (e.g. MCNP [47], TRIPOLI4 [48], Serpent2 [49]). Il est ensuite possible d'appliquer une correction dite de « spectre critique » sur les sections efficaces ainsi obtenues pour corriger l'approximation d'un milieu infini.

Une approche beaucoup plus simple et directe, permise par le code *Serpent 2*, est utilisée pour la génération de jeux de sections efficaces, homogénéisées spatialement et condensées à deux groupes d'énergie. Ces sections efficaces sont calculées assemblage par assemblage (ou éventuellement par groupe d'assemblages similaires, cf. méthode FCU chapitre 3) directement à l'échelle cœur, ce qui permet de prendre en compte les variations spatiales de flux et de spectre en cœur ainsi que l'influence neutronique des divers assemblages voisins. La dépendance aux températures est prise en compte par la constitution d'une tabulation des sections efficaces avec

10. La question ne se pose pas pour TLP puisqu'une seule température est disponible pour le combustible

les températures combustible et caloporteur. Les sections efficaces sont évaluées pour plusieurs températures combustible, sur un intervalle allant de 600 K à 1800 K par pas de 300 K. Dans un souci de simplicité, tous les assemblages du cœur se voient imposer la même température combustible, considérée comme uniforme pour tous les crayons, à chaque température considérée. Cette tabulation en température combustible est réalisée à température et densité de caloporteur fixées.

La procédure pour obtenir la tabulation des sections efficaces en fonction de la température du modérateur est similaire à la précédente. Ces sections efficaces sont évaluées sur une plage typique de température allant de 560 K à 620 K par pas de 20 K. La densité de caloporteur est adaptée à la température correspondante pour une pression de 155 bars ([41]). Il est également nécessaire de prendre en compte les effets de diffusion des neutrons thermiques sur les molécules d'eau via les tables $S(\alpha, \beta)$, également tabulées en température dans les bases de données nucléaires. Dans le modèle de cœur *Serpent2* utilisé pour le calcul des données de diffusion, la température modérateur est considérée uniforme à l'échelle du cœur, de même pour la température combustible qui est maintenue constante au cours de ces calculs.

Deux tabulations de sections efficaces sont ainsi obtenues. La première dépendant uniquement de la température combustible $\Sigma_r(T_f, T_{c0})$ et la seconde uniquement de la température du caloporteur $\Sigma_r(T_{f0}, T_c)$. On suppose alors que chaque section efficace de réaction r s'écrit en fonction de ces deux paramètres comme :

$$\Sigma_r(T_f, T_c) = \Sigma_r(T_{f0}, T_{c0}) + \Delta\Sigma_r(T_f, T_{c0}) + \Delta\Sigma_r(T_{f0}, T_c)$$

Avec :

- $\Sigma_r(T_{f0}, T_{c0})$ la section efficace calculée à la température combustible T_{f0} et à la température du modérateur T_{c0}
- $\Delta\Sigma_r(T_f, T_{c0})$ la partie dépendante de la section efficace Σ_r à la température du combustible.
- $\Delta\Sigma_r(T_{f0}, T_c)$ la partie dépendance de la section efficace Σ_r à la température du modérateur pour une température combustible donnée.

Cette formulation s'apparente au développement limité de la section efficace selon les deux variables T_f et T_c :

$$\begin{aligned} \Sigma_r(T_f, T_c) &= \Sigma_r(T_{f0}, T_{c0}) \\ &+ \underbrace{\frac{\partial \Sigma_r}{\partial T_f} \cdot \Delta T_f + \frac{\partial^2 \Sigma_r}{\partial^2 T_f} \cdot \Delta T_f^2 + \dots}_{\Delta\Sigma_r(T_f, T_{c0})} \\ &+ \underbrace{\frac{\partial \Sigma_r}{\partial T_c} \cdot \Delta T_c + \frac{\partial^2 \Sigma_r}{\partial^2 T_c} \cdot \Delta T_c^2 + \dots}_{\Delta\Sigma_r(T_{f0}, T_c)} \\ &+ \underbrace{\frac{\partial^2 \Sigma_r}{\partial T_f \partial T_c} \cdot \Delta T_f \cdot \Delta T_c + \dots}_{\text{négligés}} \end{aligned}$$

La formulation proposée revient donc à négliger les termes croisés. Physiquement ces termes croisés existent bien puisqu'en diminuant la température modérateur, le spectre neutronique change ce qui se répercute sur l'amplitude de l'effet Doppler.

A première vue l'effet mentionné est négligeable pour de faibles variations de la densité du modérateur (i.e. < 20% [15]). Néanmoins, une piste d'amélioration pourrait donc être la

construction de tables de sections efficaces où la température combustible et la température du modérateur varient simultanément, pavant ainsi un espace 2D.

Les contributions aux sections efficaces $\Delta\Sigma_r(T_f, T_{c0})$ en températures combustible et modérateur sont calculées comme des polynômes, sur la base des tabulations fournies par *Serpent 2* :

$$\Delta\Sigma_r(T_f, T_{c0}) = a_1 \cdot (T - T_{f0}) + a_2 \cdot (T - T_{f0})^2 + a_3 \cdot (T - T_{f0})^3 + \dots$$

Avec a_i le $i^{\text{ème}}$ coefficient du polynôme associé au monôme d'ordre i (i.e. $(T - T_{f0})^i$)

Les coefficients de ces polynômes sont calculés par la méthode des moindres carrés [50] :

$$\begin{pmatrix} \Sigma_r(T_1) - \Sigma_r(T_0) \\ \Sigma_r(T_2) - \Sigma_r(T_0) \\ \vdots \\ \Sigma_r(T_i) - \Sigma_r(T_0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (T_1 - T_0) & (T_1 - T_0)^2 & \cdots & (T_1 - T_0)^n \\ (T_2 - T_0) & (T_2 - T_0)^2 & \cdots & (T_2 - T_0)^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ (T_i - T_0) & (T_i - T_0)^2 & \cdots & (T_i - T_0)^n \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_i \end{pmatrix}$$

Avec :

— $\Sigma_r(T_i)$ la section efficace estimée à la $i^{\text{ème}}$ température (combustible ou caloporteur) de la tabulation créée avec *Serpent 2*. $\Sigma_r(T_0)$ étant commune aux tabulations en température combustible et caloporteur.

— a_i le $i^{\text{ème}}$ coefficient du polynôme, correspondant au terme $(T - T_0)^i$

que l'on écrira plus simplement comme :

$$\overrightarrow{\Delta\Sigma_r} = \overline{\overline{M}} \cdot \overrightarrow{a}$$

Les polynômes utilisés sont au minimum d'ordre 1. Il est préférable d'utiliser un ordre de polynôme inférieur au nombre de points disponibles dans chaque tabulation, car cela permet de lisser une partie de l'erreur statistique commise lors de la génération Monte Carlo des sections efficaces. De plus, un polynôme d'ordre trop élevé a plus de risque de présenter des oscillations non physiques entre les points d'interpolation ou en dehors du domaine d'interpolation. En pratique on se limitera à des polynômes d'ordre 1 à 3.

La matrice n'étant pas carrée, il est nécessaire pour résoudre le problème de multiplier l'égalité précédente par la matrice transposée (ici notée $\overline{\overline{M}}^t$) :

$$\overline{\overline{M}}^t \cdot \overrightarrow{\Delta\Sigma_r} = \overline{\overline{M}}^t \cdot \overline{\overline{M}} \cdot \overrightarrow{a}$$

L'algorithme classique de décomposition LU [50] est ensuite utilisé sur la matrice $\overline{\overline{M}}^t \cdot \overline{\overline{M}}$ pour la factoriser en un produit de matrices diagonales supérieure et inférieure. Cette décomposition en produit LU permet alors de remonter au vecteur des coefficients \overrightarrow{a} de chaque section efficace considérée.

La qualité de l'interpolation est ensuite mesurée par l'estimation du coefficient R^2 :

$$R^2 = 1 - \frac{\sum(\tilde{\Sigma}_r(T_i) - \overline{\Sigma_r})}{\sum(\Sigma_r(T_i) - \overline{\Sigma_r})}$$

Avec :

— $\overline{\Sigma_r}$ la moyenne arithmétique de la section efficace $\Sigma_r(T)$ pour toutes les valeurs de T dans la tabulation.

— $\tilde{\Sigma}_r(T_i)$ la valeur de la section efficace à la valeur T_i et estimée par interpolation polynomiale.

— $\Sigma_r(T_i)$ la valeur de la section efficace à la température T_i tel que calculée par *Serpent 2*

Si la valeur de R^2 est inférieure à 0.98, l'interpolation de la section efficace est jugée insatisfaisante et une interpolation d'ordre plus élevée est essayée.

2.4.3 Différentiation des pas de temps neutronique et thermohydraulique

L'analyse des pas de temps caractéristiques des équations de thermohydraulique et de neutronique révèle que ces deux physiques fonctionnent selon des cinétiques très différentes.

Chaque pas de temps caractéristique, noté τ , s'obtient grâce à une analyse dimensionnelle effectuée sur les équations discrétisées.

Pour les équations de thermique (dans la gaine ou le combustible), il correspond à :

$$\tau_{TH,f} \approx \frac{\rho \cdot C_p \cdot \Delta r^2}{\lambda}$$

Ce qui avec les propriétés thermiques d'un combustible UOX donne un pas de temps caractéristique d'environ 10^{-3} s

Dans le caloporteur, le pas de temps caractéristique s'apparente à :

$$\tau_{TH,c} \approx \frac{\rho \cdot C_p \cdot \Delta z}{v}$$

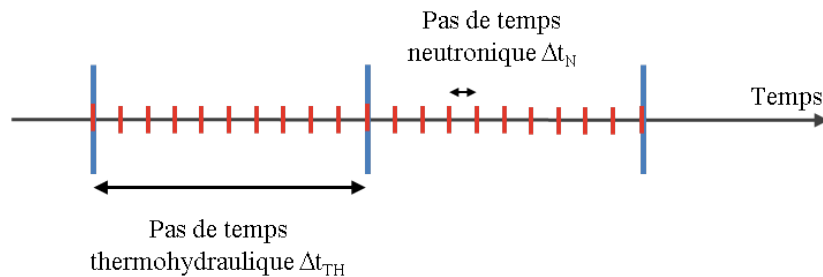
Il vaut approximativement 10^{-2} s pour un découpage en environ 20 zones axiales et la vitesse d'écoulement typique d'un REP (i.e. $v \approx 2.2 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$).

Le pas de temps caractéristique de la neutronique est beaucoup plus court. Selon la finesse du maillage considérée ce pas de temps correspond au minimum entre :

$$\tau_N \approx \min \in \left\{ \begin{array}{l} \frac{\Delta x^2}{vD} \\ \frac{1}{v \cdot (\nu \cdot \Sigma_f - \Sigma_a)} \end{array} \right.$$

Pour une discrétisation typique d'assemblage (environ 4 mailles radiales) et un combustible UOX en REP, le pas de temps caractéristique est d'environ 10^{-5} s en diffusion à un groupe. Avec l'approximation multi-groupes, la vitesse moyenne des neutrons est beaucoup plus importante dans les groupes rapides, ce qui diminue le pas de temps caractéristique de l'ensemble du système. Ainsi pour la NDM, qui utilise deux groupes d'énergie, le pas de temps caractéristique est compris entre 10^{-6} et 10^{-7} s.

Il y a donc un fort intérêt à dissocier les pas de temps pour la résolution de la neutronique et de la thermohydraulique. Concrètement la neutronique sera itérée de plusieurs pas de temps là où la thermohydraulique n'en fera qu'un seul comme l'illustre le schéma ci-dessous :



La puissance neutronique est susceptible de varier au sein d'un pas de temps thermohydraulique. Afin de conserver l'énergie totale délivrée au combustible, celle-ci est moyennée sur l'ensemble des pas de temps neutroniques avant d'être utilisée dans l'équation de la thermique du combustible :

$$\ddot{q} = Q \cdot \frac{\sum_{i \in [0; \frac{\Delta t_{TH}}{\Delta t_N}]} \Sigma_f \cdot \phi_i}{\Delta t_{TH}} \cdot \frac{V_{nodeN}}{V_{fuel \in node}}$$

Dans la NDM, le pas de temps neutronique (Δt_N) est fixé à 10^{-8} s, garantissant à la fois stabilité et précision. Le pas de temps utilisé par la thermohydraulique ne peut pas être aussi court que le suggère l'analyse dimensionnelle. En effet, aux moments du transitoire où il existe un fort déséquilibre entre la neutronique et la thermohydraulique (e.g. insertion de réactivité), l'évolution de la thermique est dominée par l'évolution de la puissance volumique, elle-même directement proportionnelle au flux neutronique.

L'utilisation d'un pas de temps de 10^{-5} s pour la thermohydraulique se montre sans conséquence sur les résultats issus du couplage. Cette dissociation permet ainsi l'économie d'un bon millier de calculs par pas de temps thermohydraulique, pour chaque nœud du maillage.

2.5 Validation sur le benchmark minicore

Cette section présente la validation du couplage entre la NDM et les différents modèles de thermohydraulique précédemment décrits (cf. en annexe [51]).

Le benchmark utilisé pour la validation de nos outils est tiré du projet Européen NURISP [52]. Il porte sur la modélisation d'un accident d'éjection de grappe dans un modèle réduit de cœur de type REP, désigné dans la suite sous l'appellation *minicore* (cf. figure 2.8). Mentionnons que ce benchmark est basé originellement basé sur un autre benchmark actuellement achevé et bien documenté, traitant d'un accident de dilution dans un cœur de REP MOX/ UO_2 [53].

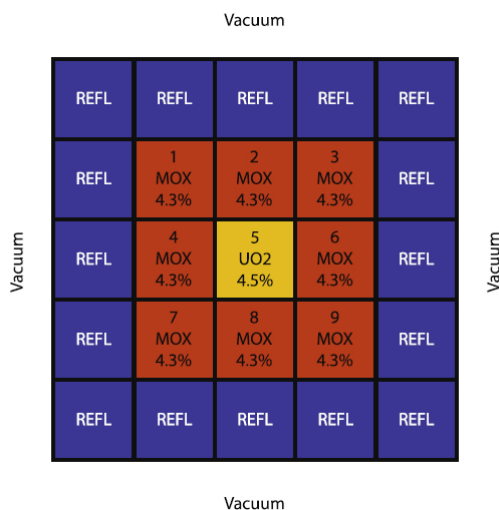


FIGURE 2.8: Coupe horizontale du minicore tel que défini dans [54].

Le minicore est constitué de 3x3 assemblages de type PWR entourés d'une épaisseur d'eau légère de même largeur que les assemblages. Le combustible de l'assemblage central est constitué d' UO_2 et celui des 8 assemblages périphériques de MOX. La définition précise des composition et des agencements des crayons combustibles au seins des assemblages se trouve dans l'article [55].

Le benchmark du minicore se décompose en deux parties :

- La première, appelée HFP (pour *Hot Full Power*) porte sur la mise à l'équilibre du minicore à pleine puissance.
- La seconde, appelée REA (pour *Rod Ejection Accident*) consiste en la simulation de l'éjection d'une grappe de contrôle initialement positionnée dans l'assemblage central. La puissance du cœur au moment de l'éjection est alors quasi nulle, d'où le qualificatif de HZP (*Hot Zero Power*) pour caractériser l'état initial du transitoire.

Bien que le cœur étudié soit de taille réduite, la configuration proposée reprend toutes les problématiques de la simulation d'accident exigeant et complexe d'un véritable REP. Les résultats de référence sur ce benchmark sont également tirés de l'article [55]. La première partie HFP est réalisée par deux couplages distincts : TRIPOLI4/SubChanFlow et DYN3D-FLICA. TRIPOLI4 étant un code neutronique Monte Carlo [48] et SubChanFlow [56] un code sous-canal résolvant les équations de conservation de la masse, de l'énergie et de la quantité de mouvement. Le code DYN3D [57] est un code résolvant l'équation de la diffusion en multi-groupe grâce à une méthode d'expansion nodale (i.e. imposition d'équations ad-hoc pour la résolution des courants neutronique partiel). FLICA [58] est un code de thermohydraulique sous-canal 3D pouvant mener des calculs diphasiques. Pour cela les 3 équations (masse, énergie et quantité de mouvement) sont résolues pour la phase liquide et une 4^{ème} équation est utilisée pour assurer la conservation de la masse de la phase gazeuse. Enfin des corrélations permettent d'estimer les débits de chaque phase.

Dans la partie REA, seuls les résultats du couplage TRIPOLI4/SubChanFlow sont disponibles. Durant ce transitoire, les sections efficaces utilisées sont issues du benchmark PWR MOX/UO₂ [53]. La tabulation des sections efficaces à deux groupes d'énergie a été conçue spécifiquement pour la simulation de ce benchmark par DYN3D. Cette tabulation utilise les températures combustible suivantes : 560 K, 973 K, 1373 K, 1170 K et les températures modérateur suivantes : 560 K, 580 K, 620 K. Les sections efficaces sont interpolées et utilisées dans la NDM selon la méthodologie préalablement présentée.

Pour l'ensemble des études de ce benchmark, le maillage représentant le minicore (réflecteur inclus) est constitué radialement de 4 nœuds par assemblage et de 17 niveaux axiaux. Cette division radiale est communément employée pour les réacteurs de types REP [59],[60]. La division axiale est calquée sur celle utilisée par la référence. En annexe de ce chapitre figure une étude sur la convergence numérique du maillage sur le cas du minicore.

2.5.1 État stationnaire à puissance nominale

Les spécifications du cœur à l'état nominal sont présentés dans le tableau 2.1.

Hauteur active du cœur	366 <i>cm</i>
Puissance cœur	100 <i>MW</i>
Température d'entrée	560 <i>K</i>
Flux massique	2885.30 <i>kg · m⁻² · s⁻¹</i>
Concentration bore	200 ppm

Tableau 2.1: Spécification de l'état *Hot Full Power* dans le minicore

Pour cette configuration, les sections efficaces du benchmark [53] ont été interpolées linéairement à 200 *ppm* de concentration en bore. L'état stationnaire au HFP est réalisé avec le couplage NDM/TLP. Le puissance du cœur implique une variation spatiale des sections efficaces qui à leur tour modifient la nappe de puissance. Le couplage fort entre neutronique et thermohydraulique impose une résolution itérée des deux physiques selon l'algorithme suivant :

Algorithm 4 Mise à l'équilibre couplée. Les boucles sont indicées par la lettre n . Les critères ϵ et ϵ' sont fixés à 10^{-10} . Pour rappel la correction de criticité est calculée par la méthode IRIS. La méthode de mise à l'équilibre de TLP est similaire à celle de BATH. La variable $T_{cool\ out}$ désigne la température de sortie du caloporteur. Cette dernière est moyennée entre les différents assemblages (fissiles) constitutifs du cœur

```

Initialisation des sections efficaces (champ de température arbitraire).
while  $\Delta(CC)\% > \epsilon$  and  $\Delta(T_{cool\ out})\% > \epsilon'$  do
    Mise à l'équilibre neutronique IRIS.
    Calculer la différence relative de la correction de criticité :  $\Delta(CC)\% = \frac{Cc^{n+1}-Cc^n}{Cc^n}$ .
    Actualiser la puissance dans chaque nœud combustible ( $P_{core} = 100\ MW$ )
    Mise à l'équilibre des nœuds TLP.
    Calculer la différence relative du  $\Delta(T_{cool\ core})\% = \frac{T_{cool\ out}^n - T_{cool\ out}^{n+1}}{T_{cool\ out}^n}$ 
    Actualiser les sections efficaces selon  $T_{fuel}$  et  $T_{cool}$  pour chaque nœud neutronique.
end while

```

Il faut en moyenne moins d'une dizaine d'itérations couplées pour atteindre un état d'équilibre entre neutronique et thermohydraulique

La conductance du modèle TLP a été fixée à $5 \times 10^4\ W \cdot K^{-1}$, ce qui est proche de la borne supérieure déterminée analytiquement ($\approx 3 \times 10^4\ W \cdot K^{-1}$). Cette valeur est le résultat d'une recherche paramétrique, dans un intervalle compris entre $[10^4; 5 \times 10^5]\ W \cdot K^{-1}$, permettant le meilleur accord avec les résultats de référence du benchmark. Notons qu'avec BATH c'est la grandeur h_{gap} qui aurait dû être ajustée puisque les spécifications du benchmark ne caractérisent pas l'état du gap dans la configuration HFP.

La figure 2.9 présente les résultats obtenus par le couplage NDM/TLP. Les résultats du couplage NDM/TLP se montrent très satisfaisants puisque très proches de ceux obtenus par d'autres couplages aux méthodes de résolution plus sophistiquées. Le couplage NDM/TLP rend bien compte du décalage de la distribution de puissance vers le bas du réacteur à cause des températures caloporteur plus basses. Les écarts sont particulièrement faibles avec le couplage TRIPOLI4/SubChanFlow. Sur le profil de puissance, la NDM sous-estime la puissance produite aux extrémités de l'assemblage, induisant une surestimation la puissance maximale d'approximativement 4.3%. Notons que les profils de puissance ont dû être normalisés à l'unité du fait d'une incohérence dans l'échelle utilisée par les résultats de référence. La température de sortie diffère d'environ 0.6 K par rapport à TRIPOLI4/SubChanFlow, là où le couplage DYN3D/FLICA montre une différence d'environ 3.7 K avec ce dernier. Cet écart pourrait être attribué à une répartition différente de la puissance entre les assemblages du minicore. La réactivité du minicore au HFP est estimée à environ 820 pcm pour le couplage TRIPOLI4/SubChanFlow contre environ 1770 pcm pour le couplage DYN3D/FLICA. La réactivité estimée par notre couplage est d'environ 936 pcm. Cette valeur est très satisfaisant puisque encadrée par les résultats des couplages de référence.

Cette première partie du benchmark a permis de vérifier notre implémentation du couplage et le bon fonctionnement de nos outils. Les résultats montrent un bon accord avec les références. Pour la simulation d'états stationnaires couplés, le modèle TLP s'avère donc suffisant. Rappelons cependant que la conductance du modèle a été ajustée dans ce but. Pour de futures études portant sur la conception de réacteurs innovants, une estimation pertinente de cette grandeur demeure problématique sans situation préalable permettant de fixer cette dernière.

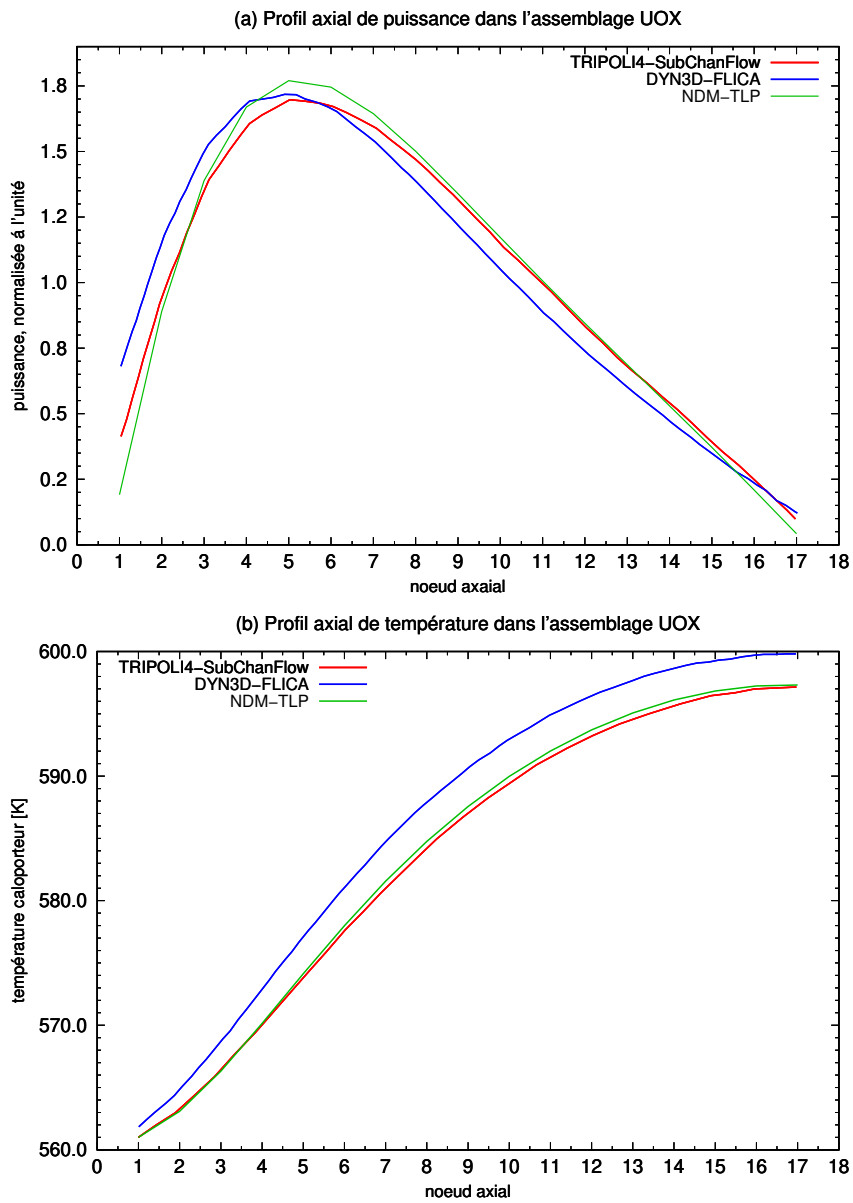


FIGURE 2.9: Profils axiaux de puissance et de température caloporteur dans l'assemblage central UOX du minicore à l'état de puissance nominale (HFP).

2.5.2 Accident d'éjection de grappe (REA)

L'état initial de l'accident d'éjection de grappe est défini dans le tableau 2.2.

Hauteur active du cœur	366 cm
Puissance cœur	1 W
Flux massique	2885.30 kg · m ⁻² · s ⁻¹
température d'entrée du caloporteur	560 K
Concentration en bore	645 ppm
Profondeur d'insertion initiale de la grappe de contrôle	232.433 cm
Temps de l'éjection	0.1 s

Tableau 2.2: Spécification de l'état initial du REA dans le minicore. Seul l'assemblage UOX est grappé.

Une grappe de contrôle est initialement insérée approximativement au deux tiers de la hauteur de l'assemblage central (UOX). Cette dernière est éjectée en 0.1 s à vitesse constante. Le transitoire est non protégé, il est simulé sur une durée de 0.2 s.

La concentration de bore critique est déterminée à environ 500 ppm. Cette valeur est déduite d'un calcul *Serpent 2* sur la base de la géométrie, des compositions de matériaux fournies ainsi que des conditions initiales du REA [55]. Les sections efficaces tirées de [61] sont utilisées aux tabulations à burnup nul et interpolées à cette concentration en bore.

Du fait de la très faible puissance initiale, la mise à l'équilibre du cœur n'est pas itérée entre neutronique et thermohydraulique. L'état stationnaire neutronique est atteint grâce à la méthode IRIS pour un champ de température considéré comme uniforme à 560 K. La nappe de puissance ainsi calculée sert à la mise à l'équilibre des différents canaux TLP. Notons que le réflecteur n'est simulé que du point de vue neutronique.

2.5.3 Modélisation de l'éjection de grappe en théorie de la diffusion

Neutroniquement, le déplacement de la grappe de contrôle nécessite l'utilisation de deux jeux de sections efficaces macroscopiques : un jeu dit barré, c'est-à-dire calculé dans un assemblage avec les grappes de contrôle entièrement insérées, et un jeu non barré, c'est-à-dire sans introduction des grappes de contrôle dans l'assemblage. Bien entendu, une tabulation en température combustible et caloporteur doit être disponible pour chacun des deux jeux de sections efficaces macroscopiques. Lors de l'éjection de la grappe de contrôle, les nœuds dont le volume est entièrement occupé par les grappes de contrôle utilisent les sections efficaces macroscopiques barrées, et vice-versa pour les nœuds non barrés.

Il reste un troisième type de nœud où la grappe de contrôle n'occupe qu'une fraction du volume. Cette zone du cœur est par définition hétérogène avec une zone barrée et non barrée. Pour modéliser cette hétérogénéité dans le formalisme de la diffusion tout en conservant le même maillage spatial, les sections efficaces doivent être réhomogénéisées à l'échelle du nœud. Cette interpolation entre les deux jeux de sections efficaces s'obtient par conservation du taux de réactions dans le volume total [62] :

$$\bar{\Sigma}_r = \frac{\phi_z^{rod} \cdot V_z^{rod} \cdot \Sigma_{r,z}^{rod} + \phi_z^{unr} \cdot V_z^{unr} \cdot \Sigma_{r,z}^{unr}}{\phi_z^{rod} \cdot V_z^{rod} + \phi_z^{unr} \cdot V_z^{unr}}$$

Avec

$$\begin{cases} \phi_z^{rod} = \frac{\phi_z \cdot V_z^{rod} + \phi_{z+1} \cdot V_{z+1}}{V_z + V_{z+1}} \\ \phi_z^{unr} = \frac{\phi_z \cdot V_z^{unr} + \phi_{z-1} \cdot V_{z-1}}{V_z + V_{z-1}} \end{cases}$$

Où :

- $\overline{\Sigma}_r$ la section efficace de la réaction r du nœud partiellement barré.
- ϕ_z le flux au nœud z
- V_z le volume associé au nœud z
- V_z^{rod} la partie barré du volume associé au nœud z .
- V_z^{unr} la partie non barré du volume associé au nœud z .
- $\Sigma_{r,z}^{rod}$ la section efficace macroscopique calculée dans un assemblage barré.

Dans ces notations, la dépendance aux températures combustible et caloporteur des sections efficaces macroscopiques grappées et non grappées est omise. De même cette étape est utilisée pour chaque groupe d'énergie considéré.

Le calcul des coefficients de diffusion passe par l'homogénéisation des sections efficaces de transport recalculées par la méthode ci-dessus.

Arrivé en haut de l'assemblage, la variable ϕ_z^{rod} est calculé comme :

$$\phi_z^{rod} = \frac{\phi_z \cdot V_z^{rod}}{V_z}$$

Il en va de même dans la situation inverse (i.e. ϕ_z^{unr}) où la grappe de contrôle est partiellement insérée dans le premier nœud (dans le sens de l'écoulement).

Cette modélisation induit lors de l'éjection (réciproquement de l'insertion) des grappes de contrôle des discontinuités dans la dérivée de la réactivité. Ce phénomène, appelée *rod cusping*, est lié à l'homogénéisation de la grappe de contrôle au sein du nœud [63]. En effet, si l'on considère le cas où la grappe est quasiment sortie du nœud, dans notre modèle numérique, celle-ci continue d'occuper tout le volume du nœud mais à une faible concentration. Or, sous cette forme homogène, la grappe de contrôle a un poids beaucoup plus important que dans une représentation hétérogène où l'effet spatial d'autoprotection va circonscrire l'efficacité de la grappe à une faible fraction du volume du nœud. La méthode de réhomogénéisation des sections efficaces précédemment présentée est l'une des plus efficaces pour la réduction du *rod cusping*. Cet effet présente de faibles conséquences sur les résultats [51].

2.5.4 Résultats du couplage NDM/TLP

Les résultats du couplage NDM/TLP sont présentés pour une conductance à l'échelle assemblage de $5 \times 10^4 W \cdot K^{-1}$ comme dans la première partie du benchmark (i.e. état stationnaire au HFP). La même valeur est considérée pour tous les assemblages du cœur en dépit de leurs différentes propriétés thermiques.

Ces résultats sont comparés à ceux du couplage TRIPOLI4/SubChanFlow dans la figure 2.10. Dans un premier temps, la physique du transitoire est expliquée puis les différences entre les couplages seront quantifiées.

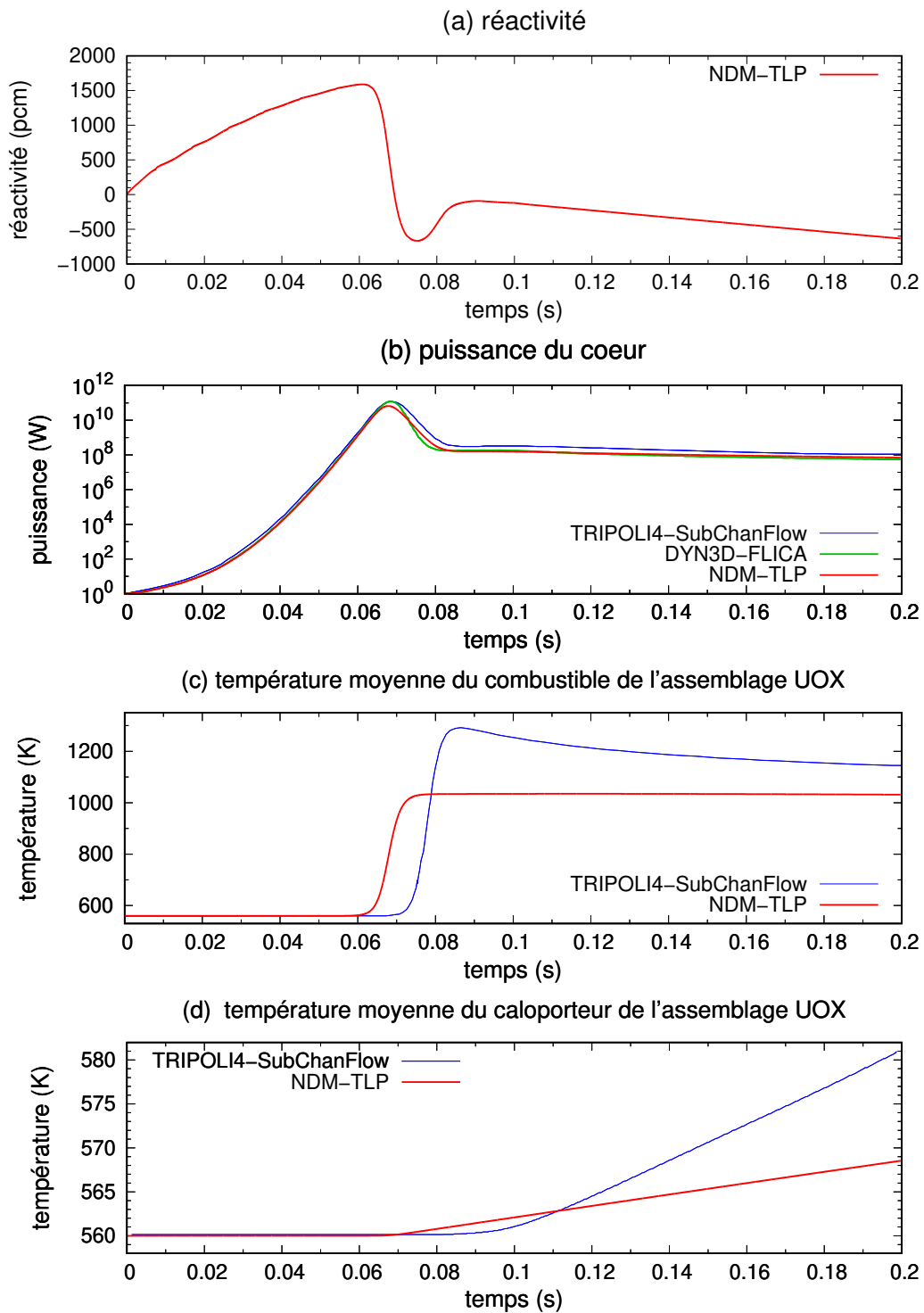


FIGURE 2.10: Principaux résultats obtenus avec le couplage NDM/TLP et comparés aux calculs TRIPOLI4/SubChanFlow sur l'accident d'éjection de grappe dans le minicore

Description du transitoire

L'accident d'éjection de grappe peut se décomposer en 4 phases :

phase 1 De $t = 0$ à $t = 0.6$ s. La première phase est dominée par la neutronique. La réactivité injectée en cœur est plus ou moins importante en fonction de l'importance neutronique

des zones traversées. Suite à cette insertion de réactivité, la puissance du cœur augmente de façon exponentielle. Durant cette phase, les puissances délivrées dans le combustible sont trop faibles pour permettre une chauffe du combustible (i.e. $\frac{\ddot{q}}{\rho_{fuel} \cdot C_{p,fuel}} \ll 1K \cdot s^{-1}$).

- phase 2 De $t = 0.6$ s à $t = 0.65$ s. Cette seconde phase est dominée par le couplage entre neutronique et thermohydraulique. Le niveau de puissance au sein des assemblages ($\geq 10^8$ W par assemblage) est suffisamment élevé pour permettre une augmentation significative de la température combustible. Une quantité d'énergie thermique importante est déposée rapidement dans la pastille, l'évolution du combustible s'apparente alors à celle d'un système adiabatique. Une fois le seuil Doppler franchi (i.e. ≈ 750 K), la contre-réaction du combustible entraîne une diminution rapide de la réactivité, supérieure à celle insérée par l'éjection en cours. La réactivité atteint alors un maximum et commence à diminuer jusqu'à devenir négative.
- phase 3 De $t = 0.65$ s à $t = 0.1$ s. Lorsque la réactivité devient inférieure à la proportion de neutrons retardés, la puissance atteint un maximum et diminue pour atteindre un pallier (en ordre de grandeur car le système est encore loin de l'équilibre). Dans le cas particulier du minicore, la grappe de contrôle n'a pas entièrement fini son éjection, ce qui explique la remontée de réactivité une fois le pic de puissance atteint. Cependant cette remontée de réactivité est trop faible pour induire d'autres changements aussi importants de puissance et de températures.
- phase 4 De $t = 0.9$ s à $t = 0.2$ s. Cette dernière phase est dominée par les transferts thermiques au sein des crayons. L'énergie emmagasinée par le combustible au cours du transitoire passe progressivement vers le caloporteur qui voit sa température augmenter. Du fait de la contre-réaction négative du caloporteur, la réactivité diminue proportionnellement à la chauffe du caloporteur. A terme le cœur se dirige vers un nouvel équilibre neutronique /thermohydraulique. Une fois l'excès d'énergie libérée pendant le transitoire évacuée, un nouveau niveau de puissance pourra être atteint, proche de celui du HFP.

L'ensemble de ces phases est répertorié dans le tableau 2.3 :

temps (s)	événements	valeurs
0.06	Fin de la phase 1 Fin de l'augmentation de la réactivité. Début de la montée en température du combustible	$\rho_{max} = 1590$ pcm $P_{tot} = 2.09 \times 10^9$ W $T_{fuel,UOX} = 564$ K
0.067	Phase 2 Pic de puissance Franchissement du seuil Doppler	$\rho = 448$ pcm $P_{tot} = 6.58 \times 10^{10}$ W $T_{fuel,UOX} = 787$ K
0.074	Phase 3 Minimum de la réactivité Maximum de la température combustible	$\rho = -667$ pcm $P_{tot} = 3.45 \times 10^9$ W $T_{fuel,UOX} = 1027$ K
0.01	Phase 4, fin de l'éjection de grappe Décroissance de la réactivité due à l'augmentation température du caloporteur	$\rho = -120$ pcm $P_{tot} = 1.54 \times 10^8$ W $T_{cool,UOX} = 562$ K

Tableau 2.3: Résumé des événements du REA pour le minicore calculé par la couplage NDM/TLP

Comparaison des résultats NDM/TLP aux calculs de référence TRIPOLI4/SubChanFlow et DYN3D/FLICA

Comparaison des puissances

Les puissances totales du cœur sont données par la figure 2.10. Pendant la phase 1, l'augmentation de puissance est très similaire entre les différents couplages, en particulier entre le couplage NDM/TLP et DYN3D/FLICA, ce qui prouve le bon fonctionnement de la NDM en cinétique. Le pic de puissance dans le couplage NDM/TLP intervient environ 3.2×10^{-4} s avant celui du couplage TRIPOLI4/SubChanFlow. Ce décalage temporel reste relativement faible.

Le maximum de puissance calculé par le couplage NDM/TLP correspond à 54% de celui calculé par couplage TRIPOLI4/SubChanFlow ce qui important compte tenu de l'écart de 0.5% constaté entre DYN3D/FLICA et TRIPOLI4/SubChanFlow .

Notons que pour les résultats de la référence (i.e. TRIPOLI4/SubChanFlow) la température moyenne du combustible semble augmenter une fois le pic de puissance franchi (voir la figure 2.10). Après examen, cette inconsistance a été identifiée comme une erreur dans les résultats de références qui a été confirmée par l'auteur du benchmark [55] et qui a ensuite pu être publiée [51]. Cette erreur correspond à un décalage de l'origine des temps pour les données portant sur la température (i.e. température combustible et caloporteur) par rapport à celles des grandeurs neutroniques (i.e. puissance).

Le niveau de puissance final est également inférieur dans le couplage NDM/TLP. Il ne représente que 63% de la valeur finale du couplage Tripoli4/SubChanFlow. En revanche, cette valeur est assez proche de celle donnée par le couplage DYN3D/FLICA (environ 25% de différence avec ce dernier couplage).

Les profils de puissance normalisés à divers instants de l'éjection de grappe sont donnés par la figure 2.11. Le retrait progressif de la grappe de contrôle apparaît clairement dans les figures 2.11 (a), (b) et (c). Une fois la grappe éjectée, le profil de puissance tend à reprendre sa forme fondamentale modulo le champ de température.

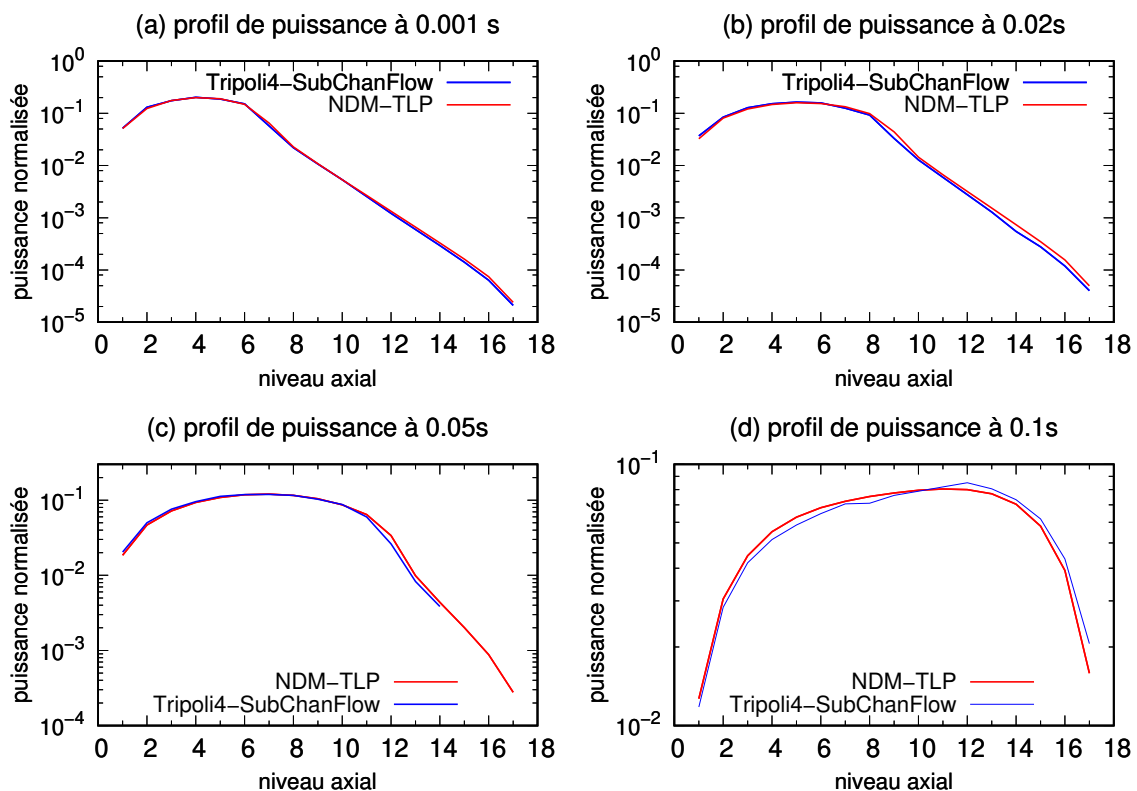


FIGURE 2.11: Évolution du profil de puissance dans l'assemblage du minicœur subissant l'éjection. Comparaison des résultats du couplage NDM/TLP à TRIPOLI4/SubChanFlow.

L'accord avec la référence est satisfaisant, cependant ce constat doit être nuancé puisque les profils de puissance ont été normalisés à l'unité du fait d'une erreur commise dans la référence [55] sur le niveau de puissance de l'assemblage éjecté (incohérent avec la puissance totale du cœur).

Comparaison des températures moyennes

La figure 2.12 présente l'évolution des températures moyennes dans chaque assemblage (cf. figure 2.8 pour la dénomination des assemblages). Les températures moyennes du caloporteur des différents assemblages sont déduites des évolutions de la densité moyenne du caloporteur présentée dans [55].

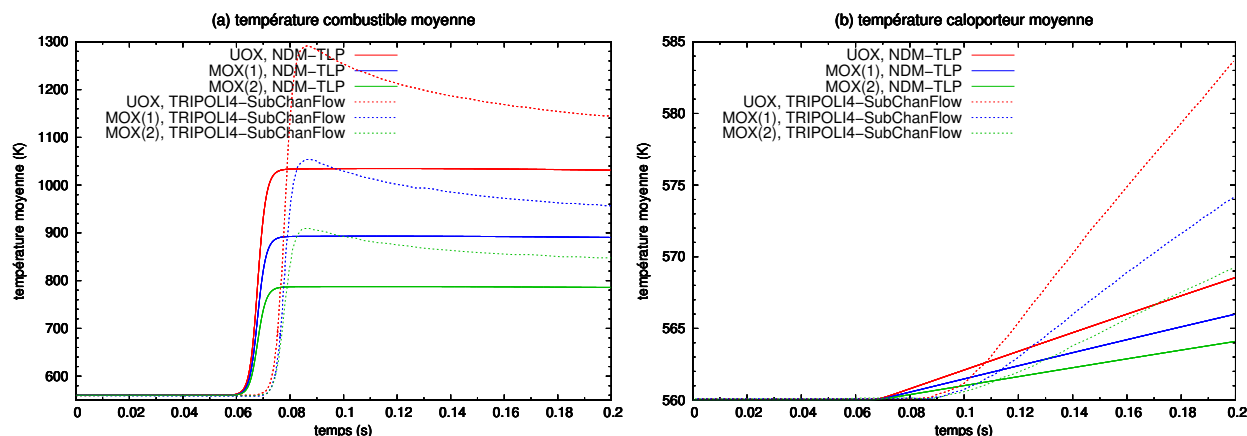


FIGURE 2.12: Évolution de la température moyenne dans les assemblages du minicœur au cours du REA. La localisation des assemblages MOX est donnée par la figure 2.8.

Outre le décalage temporel déjà mentionné, les différences sur les températures moyennes sont importantes. Les températures maximales dans l'assemblage éjecté sont séparées d'environ 250 K. De même, les températures finales dans le caloporteur sont séparées d'environ 12 K. Sans avoir accès l'évolution de la réactivité du couplage de référence, ni aux profils de température, il est difficile de comprendre l'origine de ces écarts.

Conclusions préliminaires

Neutroniquement, l'accord aux résultats de référence durant la phase 1 du transitoire se montre très satisfaisant. Dès lors que le couplage devient fort, les écarts avec la référence s'amplifient pour devenir non négligeables. Dans le couplage NDM/TLP, la puissance maximale est plus faible ainsi que les températures maximales au moment de la contre-réaction Doppler. En conséquence, deux hypothèses se dégagent pour expliquer les écarts avec la référence :

- Soit les sections macroscopiques, fournies par le benchmark [61], ne sont pas représentatives du minicœur et induisent une contre-réaction combustible plus fortes que celles obtenues par le calcul Monte Carlo. Cette hypothèse est réfutée par l'utilisation d'un second jeu de section efficace et donnant des résultats très similaires à ceux présentés [51].
- Soit la température utilisée par la neutronique dans les autres couplages est différentes de la température moyenne fournie par le modèle TLP. Ce qui est effectivement le cas puisque les couplages de référence ont une représentation fine du crayon leur permettant d'utiliser une température effective à la place d'une température moyenne. Une représentation plus fine du crayon et de ses échanges thermiques avec le caloporteur serait donc susceptible de réduire également l'écart sur les températures du caloporteur.

Cette dernière hypothèse est confortée par d'autres vérifications, menées sur le modèle d'éjection de grappe en diffusion ou sur la finesse du maillage, qui engendrent des écarts trop faibles pour expliquer ceux constatés avec la référence.

2.5.5 Apport d'une thermique plus réaliste : couplage NDM/BATH

L'évaluation du couplage NDM/TLP sur le benchmark minicore permet de comprendre que les outils académiques développés sont suffisamment précis pour rendre compte des principaux phénomènes physiques lors de l'éjection de grappe. À ce titre, ce couplage pourrait d'ores et déjà trouver une utilité dans des études comparatives entre divers concepts de réacteurs innovants, ou servir à des études de sensibilité de certains paramètres physiques (typiquement le h_{gap}). Cependant la précision, en particulier celle du modèle thermique, est insuffisante pour permettre l'évaluation des critères de sûreté accidentels, c'est pourquoi un second type de couplage est proposé, basé sur la NDM pour la neutronique et sur BATH pour une résolution plus raffinée de la thermique du combustible.

Les résultats de ce nouveau couplage sont obtenus pour le même maillage que celui précédemment utilisé dans la couplage NDM/TLP. La durée du calcul d'éjection de grappe dans le cas du minicore est alors d'environ 2 heures sur 4 processeurs Intel Xeon X5650 fonctionnant à 2.67GHz (avec parallélisation *openmp*). La conductance de gap est fixée à $h_{gap} = 10^5 \text{ W} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{m}^{-2}$ de façon à obtenir le meilleur accord avec les résultats de référence (en particulier sur la vitesse d'évolution de la température caloporteur).

Les résultats à l'échelle du cœur sont présentés dans la figure 2.13. Le raffinement spatial de la thermique du combustible permet d'utiliser une température effective à la place d'une température moyenne dans le calcul des sections efficaces, ce qui conduit à une baisse significative des écarts à la fois sur la neutronique et la thermohydraulique. La différence entre les couplages NDM/BATH et TRIPOLI4/SubChanFlow sur le maximum de puissance du cœur est ainsi réduit à 22%. L'écart temporel entre les deux pics de puissance est évalué à $8.6 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ ce qui est négligeable à l'échelle du transitoire. En revanche l'écart sur la puissance finale reste significatif puisque la valeur obtenue par NDM/BATH représente environ 50% de celle calculée par TRIPOLI4/SubChanFlow.

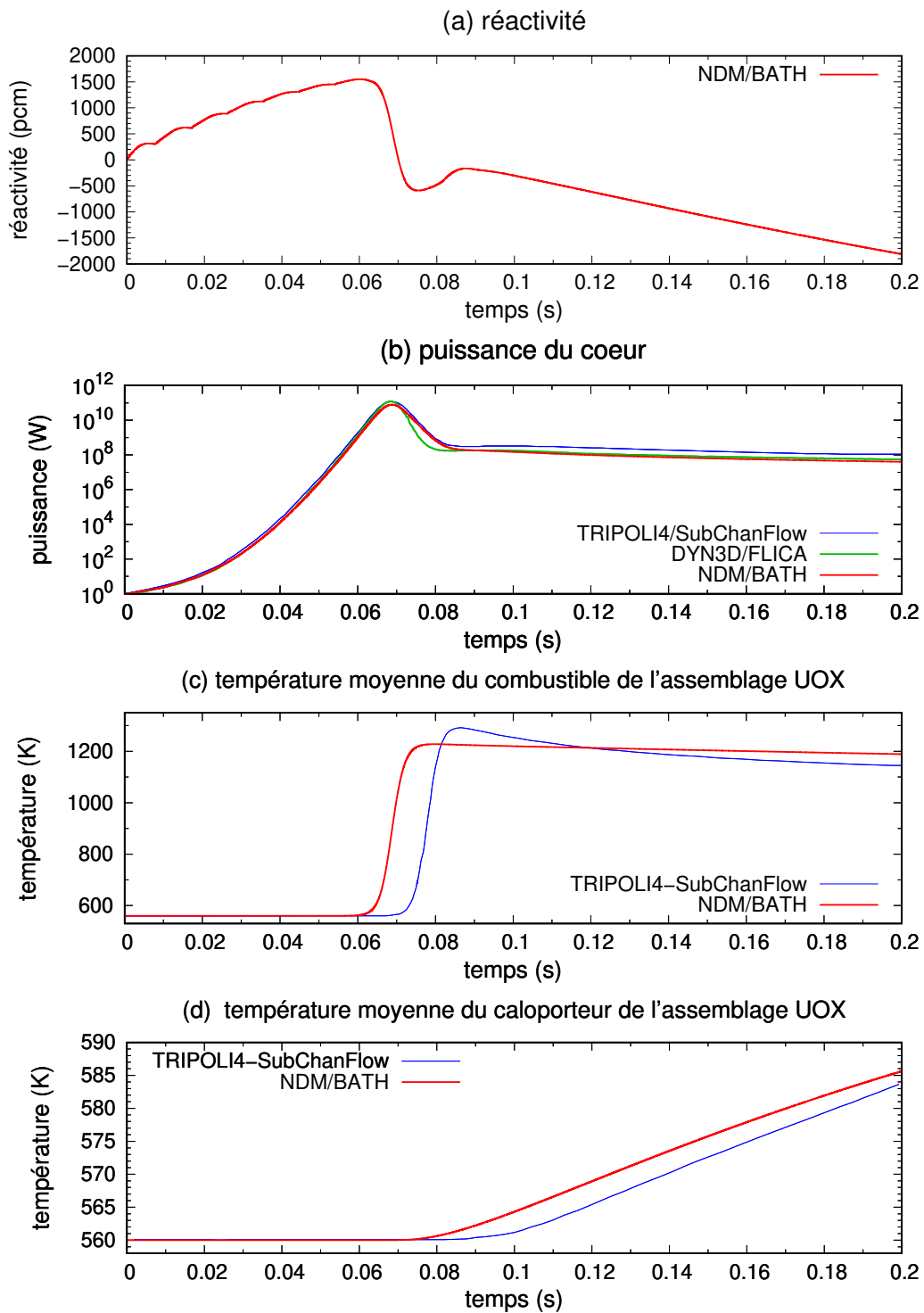


FIGURE 2.13: Principaux résultats de l'éjection de grappe dans le minicore obtenus par le couplage NDM/BATH et comparés aux résultats de référence du couplage TRIPOLI4/SubChanFlow.

Comme le montre la figure 2.14 (a), les températures moyennes combustible sont du même ordre de grandeur que celles fournies par la référence. La différence sur le maximum atteinte suite à la contre-réaction Doppler est réduite à 110 K contre 250 K dans le couplage NDM/TLP. Les écarts sur les températures moyenne du caloporteur dans l'assemblage UOX sont également

fortement réduits. Les pentes d'élévation de la température sont similaires, ce qui semble indiquer que la constante h_{gap} est correctement ajustée. Cependant, l'examen de la figure 2.14 (b) montre que cet accord n'est pas aussi bon pour les assemblages MOX dans lesquels l'augmentation de la température moyenne du caloporteur est plus rapide avec BATH.

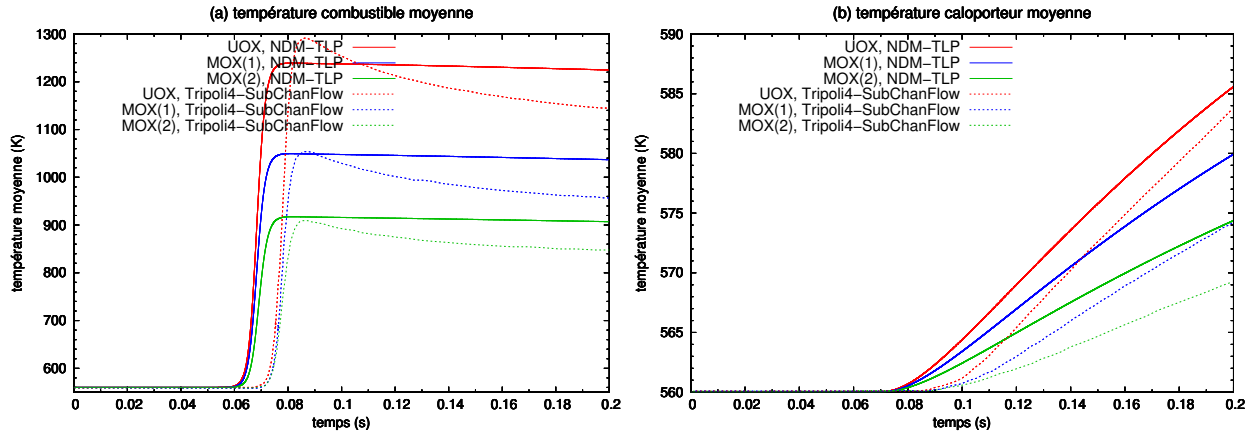


FIGURE 2.14: Évolution des températures moyennes dans les différents assemblages du minicore, calculée par divers couplages (cf. figure 2.8 pour la dénomination des assemblages).

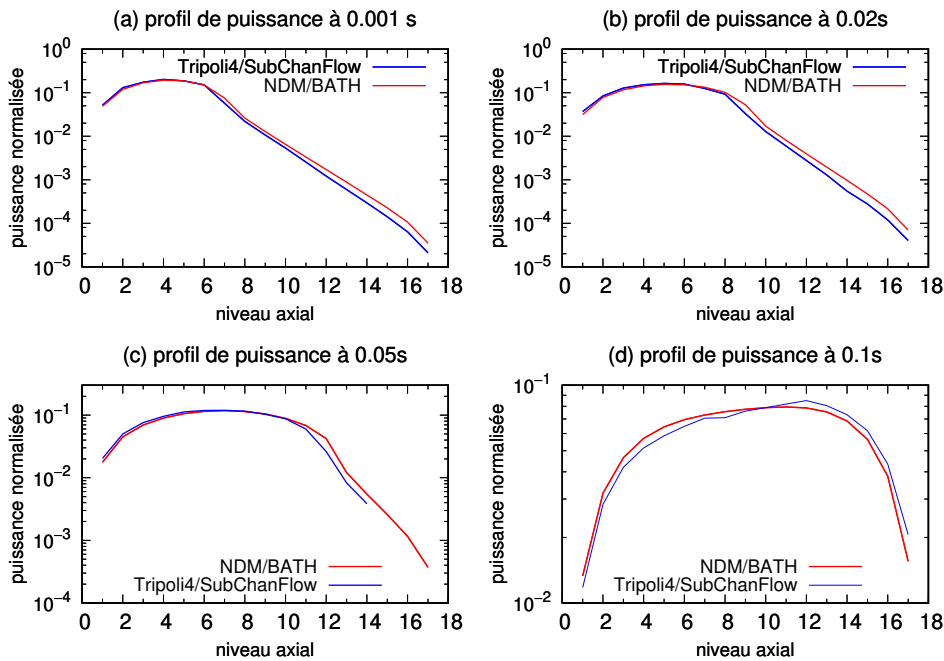


FIGURE 2.15: Évolution du profil de puissance dans l'assemblage du minicore subissant l'éjection de grappe. Comparaison des résultats du couplage NDM/BATH à TRIPOLI4/SubChanFlow.

La cinétique des températures moyennes combustible (cf. figure 2.14 (a)) semble très différentes entre les deux couplages malgré une évacuation de la chaleur sensiblement identique (i.e. même élévation de température caloporteur) et des profils de puissance également similaires (cf. figure 2.15). Un simple bilan d'énergie sur l'assemblage UOX révèle à nouveau une incohérence dans les résultats de référence. En effet, dans le couplage TRIPOLI4/SubChanFlow entre 0.085 s et 0.01 s, le combustible UOX perd en moyenne 40 K. Dans le même temps, la température

moyenne caloporteur augmente d'environ 1 K. Le rapport entre l'énergie perdue dans le combustible et celle gagnée dans la caloporteur est estimé à environ 13 sur la base des résultats de référence :

$$\frac{\rho_{fuel} \cdot C_{p,fuel} \cdot \Delta T_{fuel} \cdot V_{fuel}}{(\rho_{cool} * V_{cool} + D_{massique} \cdot \Delta t) \cdot C_{p,cool} \cdot \Delta T_{cool}} \approx 13$$

Ce résultat est en contraction avec le principe de conservation de l'énergie appliqué à l'assemblage qui impose un rapport proche de l'unité. Les raisons permettant d'expliquer ce sont une forte variation des propriétés thermiques (notamment du C_p) ou l'existence d'un matériau, comme la gaine, permettant de stocker temporairement cette énergie. BATH modélisant la gaine, il est peu crédible que l'énergie manquante ait exclusivement servie à l'échauffement de cette dernière. De même, la température de saturation n'est atteinte dans aucune partie du cœur¹¹ pendant le transitoire.

Cependant, il est difficile de confirmer ce raisonnement sans avoir simultanément accès aux profils axiaux de puissance¹², de température combustible et de température caloporteur du benchmark. Une évolution aussi rapide de la température combustible semble suggérer que la température présentée dans [55] ne correspond qu'à une partie de l'assemblage, voir même d'une zone précise de la pastille, comme sa surface, ce que semble confirmer les résultats de la figure 2.16.

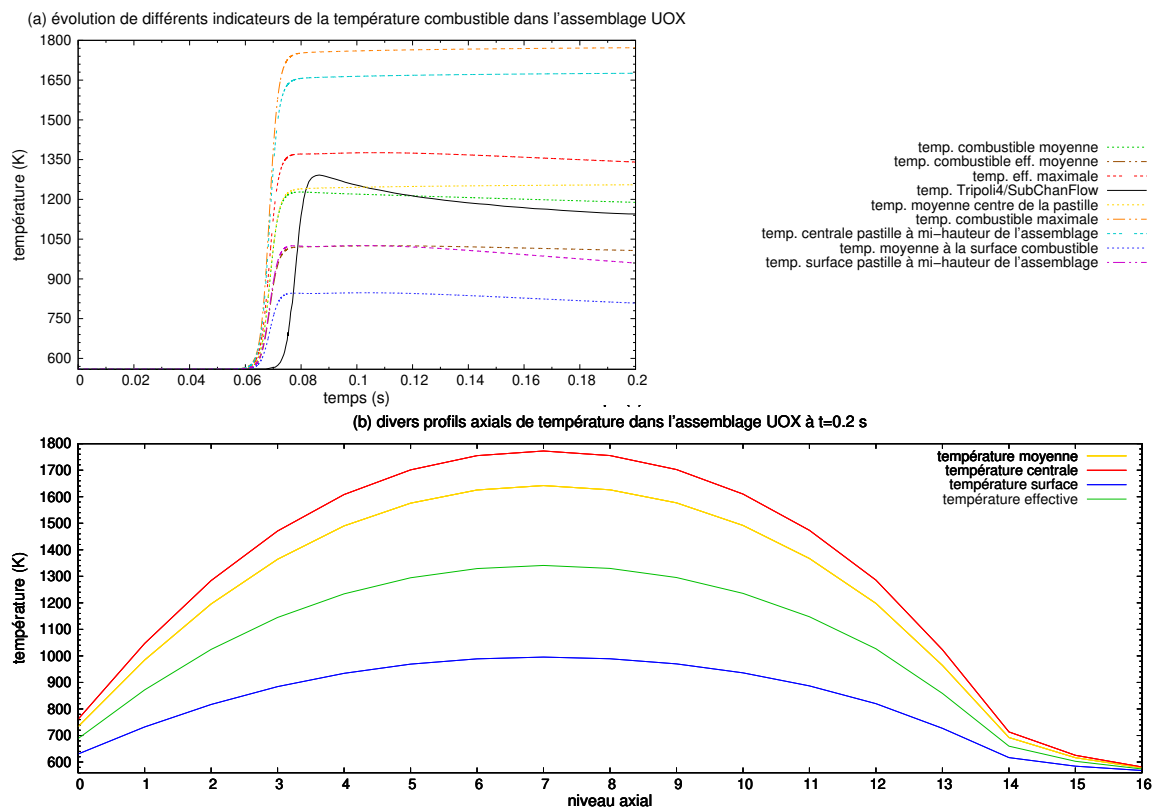


FIGURE 2.16: Évolution de température

11. La température du caloporteur reste bloquée à la température de saturation durant l'ébullition ce qui aurait permis d'expliquer la faible élévation de température du caloporteur

12. (en théorie plus élevée dans le cas du couplage TRIPOLI4/SubChanFlow comme indiqué dans la figure 2.13)

2.6 Conclusions

Ce chapitre a permis d'introduire les trois codes académiques développés au cours de cette thèse et destinés à l'évaluation de transitoires accidentels couplés en neutronique/thermohydraulique :

- NDM, une méthode résolvant les équations de la diffusion deux groupes sur un maillage cartésien 3D.
- TLP, un code 1D (résolution selon la direction axiale z) de thermique simplifiée.
- BATH, un code 2D (résolution selon les directions radiale r et axiale z) résolvant les équations de la thermique du combustible et de la gaine avec une modélisation simplifiée de la thermohydraulique monophasique.

Dans chacun de ces codes, les équations aux dérivées partielles sont résolues par un schéma aux différences finies et intégrées en temps de façon explicite. Les conditions limites et les méthodes de résolutions ont été décrites de façon exhaustive de façon à faciliter leur diffusion.

Ces outils de calcul couplés ont été validés sur le benchmark du minicore [55], [51]. La première partie de ce benchmark propose la simulation d'un état stationnaire à pleine puissance. Dans ce cadre, le couplage de la NDM au code TLP s'est montré pleinement satisfaisant, avec des résultats très proches de codes beaucoup plus sophistiqués. Cependant ces bons résultats dépendent d'une valeur de conductance thermique qu'il est difficile de déterminer précisément a priori. La seconde partie du benchmark implique la simulation d'un transitoire d'éjection de grappe. Pour cet exercice, le couplage NDM/TLP s'est révélé suffisant pour rendre compte de la physique du transitoire et extraire des tendances sur certaines variables. Cependant, ses résultats sont trop imprécis pour convenir à une analyse de sûreté basée sur des critères de sûreté précis, d'où l'utilisation du second couplage NDM/BATH.

Ce deuxième couplage a démontré l'utilité d'une représentation fine de la pastille combustible pour de tels transitoires. Cette représentation va en premier lieu permettre l'évaluation d'une température effective du combustible. Étant inférieure à la température moyenne du combustible, la température effective va retarder la contre-réaction du combustible et ainsi permettre d'atteindre un pic de puissance plus élevé, plus proche des résultats de la référence. Indirectement, cela souligne la sensibilité des résultats à la manière dont la température effective du combustible est calculée. En second lieu, la simulation de la conduction de chaleur au sein de la pastille va permettre une meilleure modélisation de l'échange de chaleur jusqu'au caloporteur. Encore une fois, ce transfert thermique reste conditionné par une valeur de conductance thermique ajustée, ici entre le combustible et la gaine (i.e. h_{gap}). Pour une valeur typique du h_{gap} , les températures moyennes dans l'assemblage subissant l'éjection se montrent très satisfaisantes (≈ 100 K dans le combustible et ≈ 5 K dans le caloporteur). Notons toutefois que les écarts à la référence restent non négligeables avec le couplage NDM/BATH, en particulier sur le niveau de puissance atteint en fin de transitoire (i.e. seulement 50% de la puissance finale du calcul de référence). Sans de plus amples informations sur les modèles ainsi que les valeurs des paramètres utilisés (e.g. h_{gap} , réactivité), il est difficile d'aller plus loin dans la compréhension de ces écarts et sur la façon d'améliorer de nos modèles.

Chapitre 3

Outils destinés à l'évaluation des performances du combustible des réacteurs innovants

Ce chapitre vise à introduire et expliquer le fonctionnement du code SMURE utilisé pour réaliser les études d'évolution du combustible à l'échelle assemblage comme à l'échelle cœur. SMURE s'appuie sur l'utilisation de codes Monte Carlo pour la résolution en transport de la neutronique. Le principe de la méthode Monte Carlo sera donc explicité avant de s'intéresser plus en détails aux principales hypothèses de résolution et simplifications utilisées dans SMURE.

Une compréhension approfondie des codes Monte Carlo et de SMURE a permis le développement d'une méthode originale dédiée à l'évolution de cœur et dont le principe est inspiré de la méthode classique d'évolution en « milieu infini ».

Le bon fonctionnement de cette méthode appelée FCU (*Full Core evolution with few Universes*) est vérifié sur le cas d'un cœur de SMR dont l'évolution est menée en parallèle avec la NDM, adaptée à cette occasion pour le calcul d'évolution.

Enfin, une estimation préliminaire des biais induits par des hypothèses simplificatrices utilisées dans la méthode SMURE-FCU est proposée en fin de chapitre sur le cas d'un assemblage dont l'évolution est considérée avec un détail axial.

3.1 Principe de SMURE

MURE (*MCNP Utility for Reactor Evolution*) [64], est une plateforme C++ dédiée au calcul d'évolution du combustible, écrite et maintenue collaborativement entre les équipes du LPSC et de l'IPNO. Elle permet, entre autres, la génération automatique de fichiers d'entrée Monte Carlo à partir de scripts génériques écrits en C++, ainsi que le couplage avec le code sous-canal COBRA-EN [28] pour la détermination d'états stationnaires couplés neutronique/thermohydraulique à l'échelle du crayon.

Récemment MURE a subi une importante refonte visant à rendre le code encore plus générique et qui a permis l'interfaçage avec un nouveau code Monte Carlo : *Serpent 2* [49]. À cette occasion MURE a été rebaptisé en SMURE pour *Serpent2/MCNP Utility for Reactor Evolution*. Mentionnons que ce travail de (re)-développement sous-tend une grande partie des travaux présentés dans ce manuscrit.

Très succinctement, SMURE permet un chaînage entre un code Monte Carlo et la résolution des équations d'évolution d'inventaires isotopiques, modélisées par les équations de Bateman. Le flot de calcul de SMURE est représenté schématiquement par la figure 3.1.

Pour une géométrie et un ensemble de compositions donnés, le code Monte Carlo est chargé de résoudre l'équation de Boltzmann afin d'estimer le flux et les taux de réactions pour chaque isotope dont l'évolution est considérée.

Les résultats neutroniques ainsi obtenus sont supposés valables sur la durée espaçant deux calculs Monte Carlo. L'évolution du flux au cours de l'irradiation est donc modélisée de façon quasi-statique.

Sur la base de ces résultats, les équations de Bateman sont résolues et un nouveau fichier d'entrée Monte Carlo, prenant en compte les nouvelles compositions isotopiques des matériaux évoluant, est généré pour le calcul neutronique du pas de temps suivant.

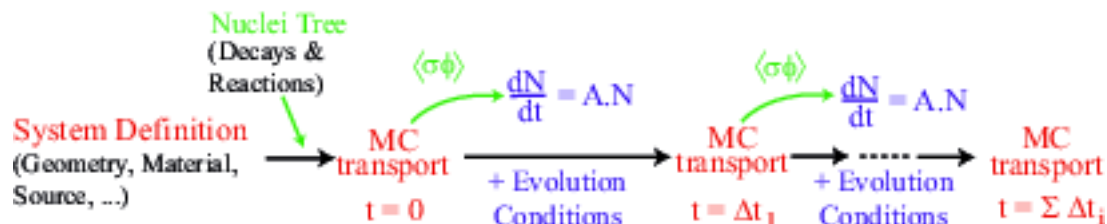


FIGURE 3.1: Schéma d'une évolution réalisée par SMURE. Illustration tirée de la documentation de SMURE [64].

3.1.1 Principe d'un code Monte Carlo

L'approche déterministe consiste à résoudre l'équation de Boltzmann (ou une approximation de cette équation) en fonction de l'espace, des directions de propagation, de l'énergie et du temps, dans le but de déduire la distribution des neutrons.

A contrario, l'approche Monte Carlo se propose de construire cette distribution neutronique en moyennant une large collection d'histoires de neutrons qui individuellement respectent toutes l'équation de Boltzmann. Les histoires de neutrons sont simulées en « sondant » aléatoirement les distributions statistiques élémentaires qui sous-tendent le transport des particules et leurs interactions. Ces deux grandes étapes sont explicitées dans la suite.

Organisation générale d'un code Monte Carlo

Un code Monte Carlo autorise la représentation de géométrie détaillée à partir de formes simples telles que des sphères, des cylindres ou des pavés droits.

Cette géométrie est habituellement divisée en objets appelés cellules. Les cellules « basiques » sont des structures composées d'un volume géométrique et d'un matériau. La définition de ce matériau inclut ses proportions isotopiques ainsi que sa densité.

Plusieurs cellules peuvent être regroupées en structures appelées univers. Les univers permettent de simplifier la description de géométries très régulières, comme le sont celles des assemblages, constitués des réseaux de crayons, ou celles des cœurs de réacteurs qui sont des réseaux d'assemblages.

Une gestion propre et efficace de la géométrie ainsi que des bases de données nucléaires constitue les principales difficultés dans l'élaboration d'un code Monte Carlo. A contrario, la simulation d'une histoire de neutron est relativement facile, ce qui en permet la simulation d'un grand nombre, typiquement de l'ordre de 10^5 à 10^8 selon la géométrie. Ce nombre important de particules est requis pour permettre au calcul d'être représentatif, cependant il reste dérisoire en comparaison des 10^8 *particules · cm⁻³* dans un réacteur. L'indépendance des histoires de chaque neutron permet une parallélisation des calculs qui, combinée à la récente augmentation

des moyens de calcul (CPU, RAM), rend les méthodes Monte Carlo de plus en plus abordables et populaires.

Simulation du transport des neutrons

Entre deux sites d'interactions, aucune force ne s'exerce sur le neutron. Son déplacement est donc considéré comme rectiligne uniforme¹, c'est pourquoi ce déplacement peut être considéré comme unidimensionnel selon un axe \vec{x} arbitraire.

Pour simuler le déplacement d'un neutron par la méthode Monte Carlo, il est nécessaire de commencer par exprimer la loi de probabilité déterminant la longueur des trajets entre deux interactions. La probabilité $dP(x)$ qu'un neutron, situé en x , interagisse avec un noyau sur un segment de longueur dx s'exprime naturellement grâce à la définition des sections efficaces macroscopiques :

$$dP(x) = \Sigma_{tot} \cdot dx$$

Avec :

- $dP(x)$ la probabilité que le neutrons interagisse avec un noyau entre x et $x + dx$.
- Σ_{tot} la section efficace totale du milieu (dans le voisinage de x).

Soit $\overline{P_{x_0}}(x)$ la probabilité de ne pas interagir entre le point d'origine du neutron x_0 et le point x . La probabilité $\overline{P_{x_0}}(x + dx)$ pour que le neutron n'interagisse pas entre x_0 et $x + dx$ correspond à la probabilité pour qu'il n'interagisse pas entre x_0 et x et qu'il fasse de même sur le segment dx , ce qui implique :

$$\overline{P_{x_0}}(x + dx) = \overline{P_{x_0}}(x) \times d\overline{P_x}(x)$$

Avec :

- $\overline{P_{x_0}}(x + dx)$ la probabilité que le neutron n'interagisse pas entre x_0 et $x + dx$
- $\overline{P_{x_0}}(x)$ la probabilité que le neutron n'interagisse pas entre x_0 et x
- $d\overline{P_x}(x)$ la probabilité qu'un neutron situé en x n'interagisse pas sur le segment dx

Or sur le segment dx , soit le neutron interagit, soit il n'interagit pas ce qui se traduit par :

$$d\overline{P_x}(x) + dP(x) = 1$$

En remplaçant dans l'expression précédente, il vient que :

$$\overline{P_{x_0}}(x + dx) = \overline{P_{x_0}}(x) \times (1 - dP(x))$$

Ce qui par un développement limité au 1^{er} ordre s'approxime en :

$$\overline{P_{x_0}}(x + dx) \approx \overline{P_{x_0}}(x) + d\overline{P_{x_0}}(x) = \overline{P_{x_0}}(x) \times (1 - dP(x))$$

D'où :

$$d\overline{P_{x_0}}(x) = -\overline{P_{x_0}}(x) \times dP(x) = -\overline{P_{x_0}}(x) \times (\Sigma_{tot} \cdot dx)$$

Après intégration, cela permet d'établir la loi de probabilité, aussi appelée PDF (*Probability Density Function*) et notée $dP_{x_0}(x)$, qu'un neutron continue son trajet depuis x_0 jusque x pour ensuite interagir entre x et $x + dx$:

$$P_{x_0}(x) = \overline{P_{x_0}}(x) \times \frac{dP}{dx}(x) = \Sigma_t \times e^{-\Sigma_{tot} \cdot (x-x_0)}$$

1. Le vecteur vitesse du neutron (= un vecteur direction $\vec{\Omega}$ + énergie cinétique) est donc constante sur chaque trajet.

Il s'agit donc bien de la loi de probabilité déterminant la longueur du trajet parcouru entre deux interactions. On appelle CDF (*Cumulative Density Function*) la primitive de la PDF. Cette dernière sera notée $F(x)$ et s'exprime comme :

$$F(X) = \int_{x_0}^X \Sigma_t \times e^{-\Sigma_{tot} \cdot (x' - x_0)} dx' = 1 - e^{-\Sigma_{tot} \cdot (X - x_0)}$$

Elle traduit la probabilité qu'un neutron parti de x_0 stoppe son trajet pour interagir dans le segment $[x_0; X]$. Sur une distance X infinie, le neutron finit forcément par interagir, ce qui se traduit par $\lim_{X \rightarrow \infty} F(X) \rightarrow 1$.

Cette propriété de la CDF est exploitée pour « tirer » une distance d'interaction du neutron, conforme à la PDF. Pour cela un nombre aléatoire ϵ compris entre $[0; 1]$ est généré. On cherche alors à calculer la distance d'interaction X à partir de laquelle on a $F(X) = \epsilon$, ce qui est relativement facile dans le cas d'une PDF analytiquement intégrable :

$$X - x_0 = \frac{-1}{\Sigma_{tot}} \cdot \ln(1 - \epsilon)$$

Cette méthode est appelée technique d'inversion.

En prenant en compte la dépendance de Σ_{tot} à l'énergie du neutron, cette manière de générer des longueurs de trajet entre deux interactions peut être adaptée à l'énergie de chaque neutron. Notons également que Σ_{tot} est différente d'un matériau à l'autre, ce qui pose problème lorsque le parcours aléatoirement généré sort du domaine d'origine pour passer à un domaine dont Σ_{tot} est différente. Une fois arrivé dans ce nouveau domaine, la longueur de la trace du neutron pourrait fortement varier par rapport à son estimation précédente. Il existe trois façons de gérer cette problématique :

- Soit une fois arrivé dans un nouveau matériau, le parcours du neutron est à nouveau tiré aléatoirement en accord avec le nouveau Σ_{tot} de la cellule.
- Soit une fois arrivé dans un nouveau matériau, la distance de parcours restante est recalculée en conservant la probabilité de non interaction dans le nouveau matériau [22].
- Soit un Σ_{tot} fictif commun à l'ensemble des cellules du cœur est utilisé. Cette section efficace macroscopique totale, notée Σ_{tot}^* , est calculée comme le majorant des Σ_{tot} sur tous les matériaux simulés. L'utilisation de cette méthode, appelée *Delta Tracking*, se traduit par le recours à des collisions fictives.

La première solution a l'inconvénient d'utiliser un nouveau tirage aléatoire pour chaque surface franchie ce qui alourdit très fortement le calcul pour des cellules « optiquement fines ».

Les deux premières solutions imposent également de connaître la position du neutron relativement aux surfaces des cellules pour savoir si elles sont franchies ou non, ce qui n'est pas une tâche triviale (en particulier pour des géométries complexes).

La troisième solution, permet un gain non négligeable en temps de calcul (environ un facteur 10), sauf dans le cas où une région a une section efficace totale beaucoup plus importante que les autres (cf. suite pour plus d'explications). C'est la solution privilégiée par le code *Serpent2*.

Simulation des interactions neutroniques

Une fois le neutron arrivé au lieu d'interaction, un nouveau tirage aléatoire a lieu pour déterminer le type de réaction subie en fonction des sections efficaces du milieu.

En supposant l'utilisation du *Delta Tracking*, il existe quatre types de réaction :

- les fissions, qui ont pour conséquence la création de nouveaux neutrons.
- les absorptions, à la suite desquelles le neutron disparaît.

- les collisions (élastiques ou inélastiques), aussi appelées diffusions. Elles vont permettre de changer l'énergie et la direction de propagation des neutrons.
- les collisions virtuelles, qui sont une conséquence de l'utilisation du *Delta Tracking*.

Si la réaction sélectionnée correspond à une collision virtuelle, l'état du neutron reste inchangé (vitesse et direction de propagation). Le neutron subit alors une nouvelle étape de transport jusqu'à son prochain lieu de collision.

La sélection d'un type de réaction doit permettre de respecter une loi de probabilité discrète. La probabilité de chaque réaction, notée P_r , s'estime simplement comme :

$$P_r = \frac{\Sigma_r}{\Sigma_{tot}}$$

Avec Σ_r la section efficace associée à une réaction de type r . La même technique d'inversion que celle précédemment présentée est utilisée. Cette dernière est illustrée par la figure 3.2. Il s'agit de tirer un nombre aléatoire ϵ entre $[0; 1]$. Ce nombre est encadré par deux valeurs de la CDF F , tel que :

$$F(r) < \epsilon \leq F(r + 1)$$

Avec r l'indice des différentes réactions possibles. La réaction sélectionnée correspond alors à celle indiquée par $r + 1$.

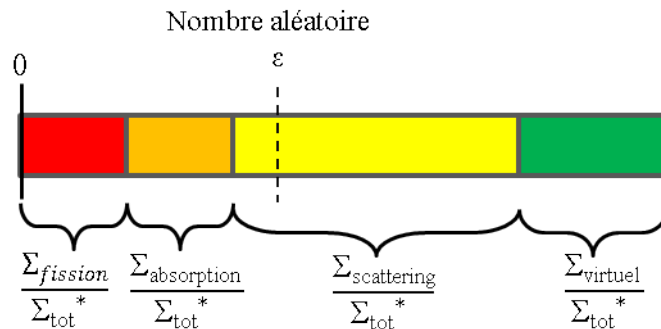


FIGURE 3.2: Sélection aléatoire d'une réaction respectant une densité de probabilité discrète.

Le même processus est utilisé ensuite pour sélectionner l'isotope sur lequel va réagir un neutron engagé dans une réaction de type r . La probabilité P_i de réagir sur un isotope, indicé i , correspond à :

$$P_i = \frac{\Sigma_{r,i}}{\Sigma_r}$$

Où $\Sigma_{r,i}$ représente la section efficace macroscopique de la réaction r sur l'isotope i .

S'ensuit à nouveau un tirage aléatoire pour choisir l'isotope à partir de la CDF. La sélection des isotopes de réactions est indispensable dans le cas du *scattering* et de la fission. En effet, dans le cas d'une diffusion anisotropique, l'angle polaire du neutron à l'issue de la collision est calculé selon une table de probabilité dépendante de l'isotope. De même, pour les réactions de fission où le nombre de neutrons créés dépend de l'isotope.

Sélectionner d'abord l'isotope puis le type de réaction qui a lieu sur celui-ci est parfaitement équivalente à la solution inverse.

Notions de génération et de source de fission

Une simulation Monte Carlo commence par suivre un groupe de N neutrons, appelé génération, dont on suppose une première répartition spatiale et énergétique.

Pour chaque neutron d'une génération les étapes de transport et d'interaction sont simulées jusqu'à la disparition de ce dernier. L'histoire d'un neutron peut se terminer de trois façons possibles :

- Soit la particule sort de la géométrie simulée. Il s'agit d'une fuite neutronique. Ces dernières s'appliquent lorsque aucune condition de bord particulière n'est imposée à la géométrie.
- Soit le neutron est capturé.
- Soit le neutron est utilisé pour fissionner un isotope.

Dans ce dernier cas, un nombre ν de neutrons est produit, en conformité avec le spectre d'évaporation des neutrons de l'isotope fissionnant. L'ensemble des positions et des vecteurs vitesses des neutrons nouvellement créés est stocké dans ce qu'on appelle la source de fission. Cependant, ces nouveaux neutrons ne sont pas immédiatement simulés.

Une fois toutes les histoires de la génération n achevées, la simulation de la nouvelle génération, appelée cycle, peut avoir lieu en partant de la source de fission qui vient d'être déterminée. Les neutrons issus de la fission de la génération n constituent donc les neutrons de la génération $n + 1$.

Les calculs successifs des premières générations permettent d'aboutir à une répartition spatiale (et énergétique) stable de la source de fission. Ces itérations initiales sont désignées sous le terme de cycles inactifs, leurs résultats ne sont pas comptabilisés. Par opposition, les résultats issus de la source de fission convergée, sont appelés cycles actifs. Leurs résultats sont représentatifs du mode fondamental du réacteur. Cela ne signifie pas que le réacteur est à l'équilibre neutronique puisque le k_{eff} qui s'estime simplement comme :

$$k_{eff} = \frac{n^{g+1}}{n^g}$$

avec n^g le nombre de neutrons à la génération g , peut être différent de 1.

Pour éviter de suivre un nombre de neutrons croissant dans le cas d'un système sur-critique ou d'annihiler la population de neutrons dans un cas sous-critique, le nombre de neutrons simulés par génération est maintenu constant. Pour ce faire, la source de fission est généralement échantillonnée aléatoirement jusqu'à simuler le nombre fixé de particules.

Notons que les différentes histoires de neutrons au sein d'une génération se déroulent selon leur propre temporalité. En effet rien n'oblige chaque histoire à avoir la même durée. Ainsi dans un vrai réacteur, à un instant t donné, les neutrons appartiennent à de multiples générations différentes qui ont cours en même temps. La méthode de calcul par génération n'est donc utile que pour le calcul de grandeurs à l'état stationnaire, c'est à dire lorsque le paramètre du temps peut être éliminé des équations.

Au lieu de fonctionner par générations, il est possible de simuler les histoires de neutrons en prenant en compte la dimension temporelle. Dans ce cas, la simulation des histoires d'une population de neutrons est restreinte entre les instants t et $t + \Delta t$. Si à la date $t + \Delta t$ le neutron n'a toujours pas disparu alors il est intégré à la source neutronique² servant de base au prochain pas de temps. Si au contraire, le neutron disparaît suite à une réaction de fission, ces neutrons « fils » sont simulés jusqu'à leurs disparitions ou jusqu'à la fin du pas de temps³. Pour débiter un nouveau pas de temps, la source neutronique construite au pas de temps précédent

2. La source neutronique est similaire à la source de fission mais inclut des neutrons qui ont préalablement bougé vis à vis de leur site de création.

3. On comprend alors que le pas de temps Δt doit être inférieure au temps de vie moyen des neutrons pour éviter une divergence dans le nombre de neutrons fils suivis

est échantillonnée⁴ de façon à suivre un nombre de neutrons « initiaux » similaires. Ce principe de calcul est à la base des calculs en Monte Carlo dynamique [49].

Estimateur Monte Carlo

En Monte Carlo, le flux ainsi que la densité neutronique ne sont pas directement résolus. Des estimateurs permettent de les reconstruire à partir des histoires simulées.

L'ensemble des collisions dans une cellule correspond simplement à toutes les réactions qui y ont lieu :

$$\phi_{cell} \cdot \Sigma_{tot} \cdot V_{cell} = c$$

- c l'ensemble des collisions dans une cellule.
- Σ_{tot} la section efficace totale de la cellule.
- V_{cell} le volume de la cellule.

Cette égalité permet donc d'estimer le flux comme :

$$\phi = \frac{c}{\Sigma_{tot} \cdot V_{cell}}$$

Les estimateurs de taux de réactions sont très similaires, excepté que seules les collisions aboutissant à un certain type de réaction sont comptabilisées.

Un autre estimateur appelé *Track Length Estimator*, essaye de remonter au taux de présence des neutrons dans un volume grâce à la longueur de leur trajet :

$$\phi = \frac{\sum_{\forall i \in cell} l_i}{V_{cell}}$$

Avec l_i la longueur du trajet parcouru par un neutron (i) dans la cellule.

Cet estimateur n'a pas besoin que le neutron interagisse avec le milieu pour apporter de l'information. A nombre de particules simulées égale, il est donc meilleur que l'estimateur par collisions. Cependant, cette méthode requiert la localisation des neutrons par rapport aux surfaces de chaque cellule, faisant perdre tout intérêt au *Delta Tracking*.

Fondement théorique de la méthode Monte Carlo : la loi des grands nombres et le théorème central limite

Du fait du nombre fini d'histoires simulées, les estimateurs Monte Carlo (i.e. ϕ_{cell} , k_{eff}) vont fournir des valeurs différentes d'une génération à l'autre. Ces valeurs générées à partir de nombres aléatoires sont des variables aléatoires qui obéissent à une loi de probabilité dont les paramètres sont a priori inconnus.

Dans la suite nous considérons une telle variable aléatoire, notée X (par exemple le k_{eff}). Appelons μ la moyenne et σ l'écart-type de la loi de probabilité à laquelle obéit la variable aléatoire X . Le tirage d'une valeur de X est notée X_n . Elle correspond au calcul de la variable X à partir des résultats de la simulation d'une génération de neutrons (ici la $n^{ième}$ génération).

L'équation de Boltzmann étant construite comme une somme de bilans moyens locaux, c'est la moyenne μ qui s'apparente à la valeur de X calculée à partir de la solution de l'équation de Boltzmann.

4. la taille de la population simulée par rapport à celle de la source neutronique constitue la nouvelle normalisation de la population neutronique. Le produit de ces facteurs de normalisation depuis la situation initiale à l'équilibre neutronique est proportionnelle à l'évolution de la puissance.

Pour calculer cette moyenne μ on met en place un estimateur, qui dans notre cas correspond simplement à la moyenne arithmétique sur l'ensemble des réalisations obtenues sur N générations :

$$\tilde{X}_N = \frac{\sum_0^N X_n}{N}$$

En considérant que μ est une grandeur finie et que chaque réalisation (i.e. génération) est évaluée selon les mêmes lois statistiques (ce qui est le cas puisque la source de fission est considérée comme stable et que les sections efficaces sont inchangées), la loi (forte) des grands nombres permet d'affirmer que :

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \tilde{X}_N \rightarrow \mu$$

Ce théorème indique l'existence d'une convergence entre l'estimateur et la variable désirée mais il ne dit rien de la façon dont s'opère cette convergence (et plus précisément de la vitesse de convergence). Cette information cruciale est apportée par le théorème central limite, second pilier de la méthode Monte Carlo. Ce théorème va permettre de déterminer la précision de l'estimateur, c'est à dire de quantifier la distance entre \tilde{X}_N et μ . Le théorème central limite établit que l'estimateur de la moyenne (qui est lui-même une variable aléatoire) tend vers la moyenne μ en suivant une loi normale (aussi appelée loi gaussienne) pour un nombre suffisamment grand de réalisations :

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\tilde{X}_N - \mu}{\frac{\sigma}{\sqrt{N}}} \rightarrow N(0, 1)$$

Où $N(0, 1)$ représente une loi de probabilité normale centrée réduite (i.e. de moyenne 0 et d'écart-type 1).

En pratique, on supposera que N est toujours assez grand (ce qui est généralement vrai dès que $N > 100$) pour assimiler la loi de probabilité sur l'estimateur (c'est à dire \tilde{X}_N et non X) à une loi normale. Sachant que \tilde{X}_N suit une loi normale, il est possible de calculer la probabilité p pour que μ soit comprise dans un intervalle de demi-largeur c autour d'une seule réalisation de \tilde{X}_N . Plus cet intervalle est grand et plus cette probabilité est élevée :

$$\tilde{X}_N - c \cdot \frac{\sigma}{\sqrt{N}} \leq \mu \leq \tilde{X}_N + c \cdot \frac{\sigma}{\sqrt{N}}$$

Par exemple, pour un tirage \tilde{X}_N donné, il existe $p = 95\%$ de chance que μ se trouve à $\pm c \cdot \frac{\sigma}{\sqrt{N}}$ de cette valeur, avec $c = 1.96$. L'intervalle ainsi formé se nomme intervalle de confiance. Il fournit à la fois une estimation de l'erreur faite lorsque \tilde{X}_N est assimilé à μ et une probabilité (communément interprétée comme le degré de confiance) que cette erreur soit bien déterminée. Pour réduire l'erreur (présumée) sur l'estimation de μ tout en maintenant le même degré de confiance sur la détermination de l'erreur, il n'y a d'autre choix que d'augmenter le nombre de générations simulées⁵. La réduction de l'erreur (ou convergence de \tilde{X}_N vers μ) se fait alors en $\frac{1}{\sqrt{N}}$.

Le calcul de l'incertitude statistique sur μ requiert la connaissance de σ qui est également un paramètre inconnu de la distribution de X . C'est pourquoi un nouvel estimateur de l'écart-type doit être calculé à partir des calculs des N générations simulées :

$$\tilde{\sigma}_N = \sqrt{\frac{\sum_1^N (X_n - \tilde{X}_N)^2}{N}}$$

5. Augmenter le nombre de neutrons simulés par génération est plus amène de réduire σ

De même que précédemment, la loi des grands nombres garantit la convergence de cet estimateur vers σ . Le théorème central limite vient préciser la manière et la vitesse avec laquelle se produit cette convergence.

Notons que l'utilisation de l'estimateur $\tilde{\sigma}_N$ pour approcher le calcul de l'erreur $c \cdot \frac{\sigma}{\sqrt{N}}$ commise sur μ induit une nouvelle erreur sur les bornes de l'intervalle de confiance. Cette nouvelle source d'erreur se traduit, au final, par une dégradation de la probabilité associée à l'intervalle de confiance.

3.1.2 Fonctionnement et hypothèses de résolution de SMURE

Équations de Bateman

Le calcul Monte Carlo donne accès au niveau de flux dans chacun des matériaux évoluant. Cette répartition du flux, à l'équilibre, est supposée valide pour une certaine durée précisée dans la suite. Sur la base de ces résultats, l'évolution de l'inventaire isotopique de chaque matériau évoluant est menée par SMURE, grâce à la résolution des équations de Bateman :

$$\begin{aligned} \frac{dN_i}{dt} = & \underbrace{\sum_{j \rightarrow i} \langle \sigma_{cap, j \rightarrow i} \cdot \phi \rangle N_j}_{\text{transmutation du noyau } j \text{ en } i \text{ par capture}} - \underbrace{\sum_{i \rightarrow j} \langle \sigma_{cap, i \rightarrow j} \cdot \phi \rangle N_i}_{\text{transmutation du noyaux } i \text{ en } j \text{ par capture}} \\ & + \underbrace{\sum_{j \rightarrow i} \lambda_j N_j}_{\text{décroissance du noyau } j \text{ en } i} - \underbrace{\lambda_i N_i}_{\text{décroissance du noyau } i \text{ (vers un autre isotope } j)} \\ & + \underbrace{\sum_{\forall j \text{ fissile}} \gamma_{ij} \cdot \langle \sigma_{fis, j} \cdot \phi \rangle N_j}_{\text{production de l'isotope } i \text{ suite à une fission}} \end{aligned}$$

Avec, dans un matériau évoluant donné :

- N_i la densité d'isotope i en $\text{noyaux} \cdot \text{cm}^{-3}$.
- $\langle \sigma_{cap, j \rightarrow i} \cdot \phi \rangle$ le produit condensé en énergie d'une section efficace microscopique de capture de l'isotope j et du flux, en $\text{barn} \cdot \text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ Cette réaction de capture transmute un isotope j en un isotope i .
- λ_i la constante d'un mode de décroissance associée à un isotope i , en s^{-1} .
- γ_{ij} le rendement de fission de l'isotope i lié à une fission de l'isotope j .
- $\gamma_{ij} \cdot \langle \sigma_{fis, j} \cdot \phi \rangle$ le produit condensé en énergie de la section efficace microscopique de fission de l'isotope j et du flux neutronique, en $\text{barn} \cdot \text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$

Chacun des termes de l'expression de la dérivée est optionnel suivant la nature de l'isotope N_i considéré.

L'équation de Bateman est posée pour chaque isotope d'un matériau évoluant formant ainsi un système linéaire, propre à chaque matériau, qui s'écrit matriciellement comme :

$$\frac{d\vec{N}}{dt} = \overline{\overline{M}} \cdot \vec{N}$$

Avec :

- \vec{N} le vecteur des compositions isotopiques (en nombre d'atomes) d'un matériau évoluant.
- $\overline{\overline{M}}$ la matrice relative aux équations de Bateman.

Les simplifications des équations, l'expression de leurs paramètres, ainsi que la méthode de résolution sont détaillées dans la suite.

Les différents niveaux de discrétisation en temps

La discrétisation en temps, illustrée figure 3.3, s'effectue selon trois échelles distinctes :

- Les pas de temps du couplage avec le code Monte Carlo :

A chacun de ces pas de temps, notés ΔT_u et fournis par l'utilisateur, SMURE réécrit un fichier d'entrée MC selon les compositions et les densités isotopiques des matériaux évoluant sont actualisés. Un nouveau calcul Monte Carlo est ensuite effectué pour réestimer le spectre et le niveau de puissance dans chacun de ces matériaux. Pour une évolution rapide (spectralement ou spatialement) du flux, les pas de temps devront être courts. Typiquement les premiers pas de temps sont de l'ordre du jour du fait de l'apparition et la mise à l'équilibre rapide des produits de fission à forte section efficace d'absorption tel que le Xénon 135. Ces pas de temps peuvent généralement être allongés au cours cycle car l'évolution du système tend vers un comportement linéaire.

- Les pas de temps d'intégration :

Entre chaque pas de temps Monte Carlo, les équations de Bateman sont intégrées pour chaque matériaux évoluant selon un algorithme Runge Kutta d'ordre 4 (cf. Chapitre Outils dédiés à la sûreté). Le pas de temps ΔT_u est subdivisé en plusieurs pas de temps Δt_{RK} .

- Les pas de temps variable RK :

Plus précisément, l'algorithme d'intégration utilisé est un RK45, ce qui signifie qu'à l'issue d'un pas de temps d'intégration deux estimations finales du vecteur isotopique d'un matériau sont fournies, une à l'ordre 4 et une autre à l'ordre 5. Ces deux estimations « finales » sont construites comme combinaisons linéaires de différentes estimations de la dérivée au sein du pas d'intégration. La différence entre ces deux estimations renseigne sur l'erreur (de troncature) commise sur un pas de temps. Si cette erreur est jugée trop importante, le pas de temps Δt_{RK} peut être subdivisé en une somme de pas plus petits notés δt_{RK45} .

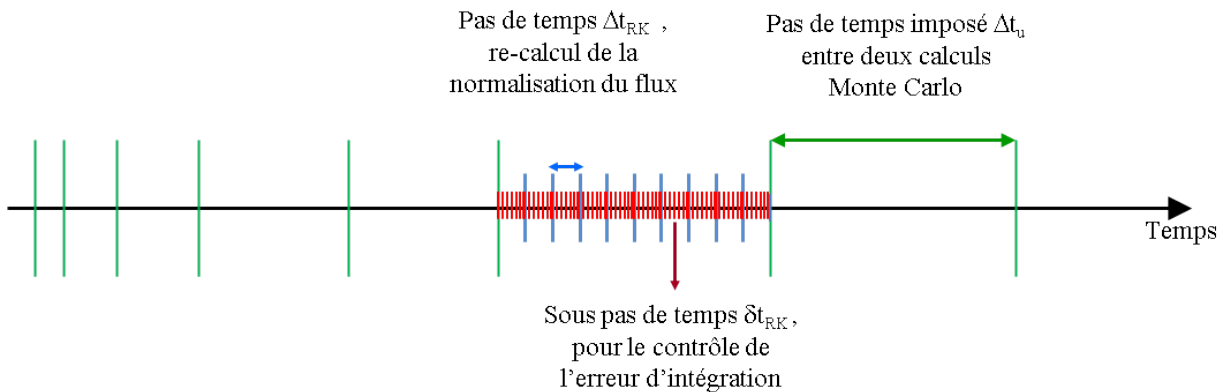


FIGURE 3.3: Les trois niveaux de discrétisation temporelle utilisés dans SMURE

Calcul des sections efficaces et normalisation du flux

La résolution des équations de Bateman nécessite de connaître la valeur du flux dans chaque matériau évoluant et de pouvoir exprimer les sections efficaces moyennes de capture de chaque isotopes : $\langle \sigma_{cap} \rangle$.

Dans chaque matériau évoluant, le flux est calculé avec un découpage énergétique en 17900 groupes par le code Monte Carlo.

Dans un premier temps cette valeur de flux nécessite d'être normalisée à la puissance neutronique que l'on souhaite imposer au système. Cette normalisation se calcule comme :

$$P = \Omega \cdot \sum_{\forall \text{ cellule } c} \sum_{\forall \text{ isotope fissile } i} Q_i \cdot V_c \cdot \int_{10^{-11}}^{10} \sigma_{fiss, i}(E) N_i \phi(E) dE$$

Avec :

- P la puissance neutronique, imposée à l'ensemble du système, (W)
- Ω le facteur de normalisation du flux
- Q_i l'énergie libérée par une fission de l'isotope i , ($J \cdot \text{fission}^{-1}$)
- $\sigma_{fiss, i}(E)$ la section efficace microscopique de fission, fonction de l'énergie du neutron incident, de l'isotope i , (cm^{-2})
- N_i la densité d'isotope i dans la cellule c , ($at. \cdot cm^{-3}$)
- V_c le volume de la cellule c , (m^3)
- $\phi(E)$ le flux neutronique, fonction de l'énergie, dans la cellule c , issue du calcul d'un code Monte Carlo, ($\text{neutron} \cdot cm^{-2} \cdot s^{-1}$)

L'énergie Q_i (environ 200 MeV) libérée par la fission d'un isotope fissile i , et considérée par SMURE comprend :

- l'énergie cinétique des fragments de fission (environ 82%)
- l'énergie des gamma prompt ($\approx 4\%$)
- l'énergie des neutrons ($\approx 2.5\%$), cette contribution est ensuite transmise aux matériaux lors du ralentissement des neutrons.
- l'énergie de la puissance résiduelle (soit $\approx 7\%$), elle inclut les désintégrations β et γ des produits de fission.

L'énergie emportée par les neutrinos ($\approx 5\%$) est irrécupérable. Cette façon de procéder considère que l'énergie résiduelle des produits de fission est relâchée immédiatement pendant la fission sans respecter le délais imposés par les constantes de désintégration. Cette approximation est satisfaisante si les temps d'irradiation sont importants devant celui de mise en place d'un état stationnaire dans la cascade de désintégration.

Notons que la constante de normalisation Ω dépend de l'abondance des isotopes fissiles. Ainsi, pour un spectre neutronique globalement inchangé au cours du fonctionnement d'un réacteur de puissance, le flux aura tendance à augmenter pour compenser la diminution de l'inventaire fissile. Cette variation du flux est prise en compte à l'échelle des pas de temps Δt_{RK} où la constante de normalisation Ω , commune à toutes les cellules, est recalculée. Implicitement c'est une hypothèse quasi-statique qui est formulée puisque la forme (i.e. répartition du flux spectrale et spatiale) est inchangée. Seule son amplitude est susceptible de varier au sein d'un pas de temps ΔT_u .

Pour l'estimation du produit entre la section efficace microscopique et le flux condensé en énergie, SMURE lit les sections efficaces directement dans les bases de données nucléaires pour ensuite calculer ce produit à partir du flux multi-groupe fourni par le code Monte Carlo :

$$\langle \sigma_{r, i} \cdot \phi \rangle = \Omega \cdot \int_{E_{min}}^{E_{max}} \sigma_{r, i}(E) \cdot \phi(E) dE$$

Avec :

- $\sigma_{r, i}(E)$ la section efficace microscopique de la réaction r sur l'isotope i , (cm^{-2})
- $\phi(E)$ le flux tabulé en énergie et préalablement calculé par simulation Monte Carlo

— Ω le facteur de normalisation du flux, recalculé à chaque pas de temps Δt_{RK} .

L'autre alternative consiste à laisser le code Monte Carlo calculer les sections efficaces microscopiques condensées en énergie pour chaque type de réactions et chaque isotope dont l'évolution est simulée. Cette méthode s'avère toutefois beaucoup plus coûteuse en temps de calcul (au minimum d'un facteur 10). L'approximation multi-groupe est donc préférée. Les groupes en énergie sont suffisamment fins pour négliger les effets d'autoprotection et faire en sorte que les conséquences sur l'évolution soient négligeables [15].

Simplification dans le système des équations de Bateman

Dans un souci d'optimisation du temps de calcul, quelques simplifications sont appliquées lors de la résolution des équations de Bateman. Dans un premier temps, l'arbre des filiations entre noyaux (lu directement dans les bases de données nucléaires) est simplifié. Les isotopes, notés I, aux temps de vie très courts (i.e. par défaut $\leq 1 h$) sont supprimés. La désintégration d'un noyau père de I aboutit alors directement à celle d'un noyau fils de I. De même les réactions mineures (i.e. $\sigma_{cap} \leq 10^{-2}$ barn), peu significatives au regard de l'évolution des inventaires ou de celle de la réactivité, sont négligées.

Enfin, la distribution des fragments de fission est réduite aux 58 principaux produits de fission. Cette dernière simplification a de faibles conséquences puisque 90% de l'antiréactivité apportée par les produits de fissions est représentée par seulement 25 isotopes [17]. Au final, il est nécessaire de simuler l'évolution d'une centaine d'isotopes par matériau combustible évoluant afin d'obtenir une représentation correcte de l'évolution de la réactivité au cours du temps.

L'ensemble de ces simplifications conduisent, lors de la réécriture du fichier Monte Carlo, à recalculer la densité de chaque matériau évoluant de façon à conserver la masse de chaque isotope :

$$d_m = \frac{\sum_i N_i^m \cdot M_i}{V_m}$$

Avec :

- d_m la densité du matériau m , en $g \cdot cm^{-3}$
- V_m le volume du matériau m , en cm^3
- N_i^m la densité de l'isotope i dans le matériau m , en mol
- M_i la masse molaire de l'isotope i , $g \cdot mol^{-1}$

3.2 Évolution cœur réalisée avec SMURE grâce à la méthode FCU

3.2.1 Retour sur la construction d'une géométrie en Monte Carlo

Pour bien comprendre comment l'évolution du combustible sera gérée à l'échelle assemblage puis à l'échelle cœur il est nécessaire de préciser la façon dont un code Monte Carlo construit une représentation du système étudié (cœur ou simple assemblage).

Précisons pour commencer la fonction des cellules. Ces dernières sont des objets élémentaires constitutifs de la géométrie globale. Elle sont définies par un volume et un contenu. Ce contenu est par défaut un matériau mais il peut également s'agir d'un univers.

La notion d'univers est centrale pour la construction de géométries complexes. Un univers représente l'intégralité des objets définis dans un espace (par défaut considéré en 3D). Ainsi la géométrie totale est elle-même comprise dans un univers que nous appellerons univers primordial. Un univers peut contenir soit un ensemble de cellules (il est alors nécessaire de préciser la nature

de l'extérieur de ces cellules (vides, matériau ou zone d'importance nulle)) soit un ensemble d'autres univers.

Concrètement, la construction la plus directe d'un assemblage de type REP suit les étapes suivantes :

- la définition des cellules constitutives des parties du crayon. Le crayon est un ensemble concentrique de cellules contenant le combustible (en plusieurs couches ou non), le gap, la gaine.
- la définition d'une maille élémentaire de l'assemblage. Il s'agit d'un univers contenant le crayon (un ensemble de cellules) et de la définition de l'extérieur de cette construction qui est remplie du caloporteur.
- la définition d'un réseau de crayons, c'est à dire un assemblage. Il s'agit également d'un univers composé d'une matrice d'univers qui renvoie chacun à une maille élémentaire du réseau.

La définition d'un cœur de réacteur (de type REP) implique uniquement un niveau d'imbrication supplémentaire. Le cœur est défini comme un réseau d'assemblages (i.e. une matrice d'univers) qui viennent remplir une cellule existant dans l'univers primordial.

Ce qui fait la force de la notion d'univers est la possibilité d'utiliser un même univers pour placer plusieurs fois la même structure à plusieurs endroits de la géométrie (par exemple remplir un assemblage par un seul type crayon, ou un cœur par un type seul assemblage.) Cette notion d'assemblages et plus précisément de matériaux ubiquitaires est à la base d' « astuces » permettant de réduire drastiquement le nombre d'inventaires isotopiques à évoluer.

3.2.2 La simulation d'assemblages en milieu infini

Un cœur standard de REP compte en moyenne environ 200 assemblages, qui contiennent chacun 264 crayons constitués eux-mêmes d'un empilement axial d'environ 272 pastilles. Au vu de ce simple dénombrement, il apparaît clairement que la simulation de l'évolution d'un cœur à l'échelle de la pastille ou du crayon reste en général inaccessible en un temps raisonnable du fait de la limitation des moyens informatiques.

C'est pourquoi, l'évolution des paramètres moyens du cœur (i.e. burnup, inventaire isotopique) est classiquement approximée par l'évolution d'un seul assemblage jugé représentatif. Cette simplification, utilisée aussi bien en méthode déterministe qu'en méthode Monte Carlo, nécessite d'appliquer des conditions de réflexions à la périphérie de cet assemblage lui permettant ainsi d'être critique. D'où la dénomination de ce type de modélisation, couramment appelée évolution en milieu infini (ou de façon abrégée simulation d'assemblage infini). Cette modélisation de l'évolution n'est pas entièrement satisfaisante pour plusieurs raisons :

- l'estimation de la réactivité ne tient pas compte des fuites du cœur. Cette valeur est donc supposée de façon ad-hoc (ou sur la base d'autres calculs). Elle est ensuite prise en compte comme un seuil minimal de réactivité, que nous appellerons seuil de réactivité et en dessous duquel le réacteur n'est plus considéré comme critique.
- le voisinage de l'assemblage évoluant n'est pas forcément représentatif du plan de chargement du cœur. De même la nappe de flux n'a pas forcément à être symétrique au sein de l'assemblage du fait des interactions avec ces voisins.
- le spectre de fuite n'est pas non plus respecté ce qui fausse également le spectre neutronique sur lequel est basé l'évolution.

En raison de toutes ces approximations, l'assemblage ainsi modélisé est beaucoup plus proche d'un assemblage au centre du cœur que de l'assemblage moyen. Une revue complète des biais de modélisation associés à la simulation d'assemblage en milieu infini est proposée dans [65].

Comme expliqué précédemment, la façon dont les assemblages sont construits en méthode Monte Carlo offre la possibilité de placer le même crayon à plusieurs emplacements de l'assemblage. La configuration ainsi simulée est proche de celle d'un crayon élémentaire entièrement réfléchi mais elle permet de tenir compte des « trous d'eau » laissés pour les tubes guides.

Le flux utilisé pour l'évolution de ce matériau ubiquitaire est celui calculé dans l'ensemble des positions qu'il occupe. Pour en tenir compte, SMURE pondère les équations de Bateman par le volume total occupé par le matériau dans l'assemblage. Au prochain pas de temps Monte Carlo, c'est donc une composition moyenne, dont l'évolution est basée sur l'estimation d'un flux moyen qui sera utilisée pour occuper l'ensemble des crayons.

Il a été montré dans [15] que considérer des matériaux différents en fonction de leurs positions dans l'assemblage induit des différences de l'ordre de 1% sur les inventaires finals des isotopes lourds. En conséquence, si l'on recherche un résultat moyen à l'échelle de l'assemblage, la simulation d'un seul crayon moyen est une très bonne approximation. Par ailleurs considérer le découpage d'un crayon en plusieurs ceintures concentriques de combustible fait apparaître des différences non négligeables, de l'ordre de 10% sur les inventaires isotopiques en fin de cycle, [66] et [15]. Ces différences entre de telles ceintures sont dues à l'effet d'autoprotection (aussi appelé dans ce cas précis *rim effect*). Cependant, une fois ramenée à l'échelle de l'assemblage, la différence entre une simulation où les crayons sont considérés homogènes et une évolution en plusieurs ceintures se traduit par des écarts de quelques pourcent sur les inventaires isotopiques.

En conclusion, pour un résultat moyen à l'échelle assemblage, la simulation de quelques compositions combustibles ubiquitaires (initialement différentes) s'avère suffisante. Cependant, assimiler les résultats d'une évolution en assemblage infini aux résultats moyens à l'échelle du cœur n'est pas satisfaisant car cela ne permet pas de représenter la complexité du plan de chargement cœur ainsi que les influences mutuelles des assemblages pendant l'évolution. D'où le développement d'une méthodologie innovante basée sur SMURE pour le calcul d'évolution à l'échelle cœur.

3.2.3 Extension à l'échelle cœur, la méthode FCU

Le calcul de l'évolution d'un cœur complet par SMURE repose sur le même principe que celui développé pour le calcul d'assemblage en milieu infini. Puisque seuls quelques matériaux évoluant⁶ sont nécessaires pour représenter correctement l'évolution moyenne d'un assemblage, seuls quelques assemblages (contenant eux-mêmes un nombre restreint de matériaux évoluant) sont nécessaires pour rendre compte de l'évolution d'un cœur complet.

Le principe de la méthode FCU (pour *Full Core evolution with few Universes*, [67]) consiste donc simplement à construire le cœur comme un réseau d'assemblages⁷ ubiquitaires.

A minima, un assemblage ubiquitaire occupe toutes les positions équivalentes par symétrie dans le cœur. Ainsi, pour un SMR de 89 assemblages, tel que proposé dans le chapitre 1 et considéré dans la suite, seuls 16 assemblages ubiquitaires sont nécessaires. Si ces derniers ne sont composés que d'un seul type de crayon, alors en pratique l'évolution de 16 matériaux différents est requise pour rendre compte de l'évolution du cœur. Cette méthodologie a déjà été appliquée dans [65] pour aider à la quantification des erreurs introduites par la modélisation d'assemblage en milieu infini.

Pour un cœur dont le nombre d'assemblages est plus important⁸ il peut s'avérer opportun de regrouper les assemblages au sein de groupes dont on estime a priori que les évolutions seront similaires. Un groupe (d'assemblages) évoluant est alors représenté en cœur par un unique

6. Un seul par défaut si l'assemblage est constitué d'un seul type de crayon.

7. C'est à dire une matrice d'univers indexant chacun un type d'assemblage.

8. ou si le nombre de crayons évoluant par assemblage est vraiment important

assemblage ubiquitaire, dont les compositions sont évoluées selon le flux moyen constaté à chaque pas de temps au sein de l'ensemble des volumes du groupe.

Par évolution similaire, on suppose que les assemblages au sein d'un groupe d'évolution remplissent les conditions suivantes :

- Qu'ils aient la même composition initiale.
- Qu'ils aient des historiques de puissance similaires.
- Qu'ils aient un voisinage neutronique similaire pendant tout l'évolution. Cette dernière condition implique donc des positions en cœur assez similaires.
- Qu'il n'y ait pas de gradient de flux trop important au sein de l'assemblage, auquel cas l'utilisation de quelques crayons par assemblage ne sera pas suffisante.

Cet « a priori » est parfois difficile à estimer car il dépend de la nature du combustible, de la présence de poisons consommables, des emplacements des assemblages en cœur, etc... C'est pourquoi en pratique, plusieurs maillages d'évolution (c'est à dire divers découpages en groupes évoluant) doivent être testés.

Enfin, précisons que toutes les évolutions cœur de ce manuscrit sont envisagées avec une homogénéité axiale de la composition combustible. En effet considérer des matériaux ubiquitaires différents pour chaque niveau axial du cœur porte le nombre de compositions évoluant au-delà des capacités de nos moyens de calcul. De plus la convergence de la source de fission en Monte Carlo sur de grandes dimensions axiales est beaucoup plus difficile à obtenir [68], obligeant à simuler un nombre très important de neutrons par génération.

3.3 Adaptation de la NDM au calcul d'évolution de cœur

Très succinctement, la réalisation d'une évolution par la NDM consiste en un enchaînement de calculs quasi-statiques, permettant d'estimer l'évolution de la nappe de puissance et du burnup en chaque nœud. Ces variables vont en retour modifier les sections efficaces des différents nœuds du cœur ainsi que la réactivité. Le réacteur n'est plus considéré comme critique une fois sa réactivité est devenue négative. L'évolution d'un cœur de réacteur par la NDM suit le flot de calcul présenté par l'algorithme 5.

Algorithm 5 Algorithme pour le calcul d'évolution par la NDM

```

while  $\rho > 0$  do
  IRIS : recherche de l'état stationnaire neutronique
  Calculer la réactivité.
  Calculer la carte de puissance massique en chaque nœud
  Calculer la largeur du pas de temps d'avancement :  $\Delta t_{evo}^j$ 
  Calculer le burnup en chaque nœud
  Interpoler les sections efficaces en chaque nœud selon leur niveau de puissance et leur burnup
end while

```

Le calcul neutronique réalisé par la NDM vise à trouver la nappe de flux à l'équilibre étant donné les jeux de sections efficaces qui s'appliquent en chaque nœud. Ce calcul permet également d'estimer le k_{eff} qui est simplement assimilé à l'inverse de la correction de criticité ($\frac{1}{\beta}$).

La carte de puissance est directement déduite de la carte du taux de fission. Chaque nœud de la géométrie est donc caractérisé par une valeur de puissance que l'on ramènera à la masse combustible associée au nœud :

$$P_{im} = \frac{P_i}{m_{fuel, i}}$$

Avec :

- P_{im} la puissance massique au nœud i .
- P_i la puissance au nœud i .
- $m_{fuel, i}$ la masse initiale de noyaux lourds contenue dans le volume associé au nœud i .

Préférer une grandeur intensive pour représenter la puissance permet de s'affranchir du degré de discrétisation spatial. Cela se révèle également nécessaire pour exploiter les bibliothèques de sections efficaces réalisées sur un élément de taille donné (e.g. typiquement l'assemblage).

Le calcul du flux est supposé suivre une évolution quasi-statique car l'évolution des compositions est lente devant la cinétique de mise à l'équilibre du flux. La nappe de puissance du cœur est considérée valable pour une durée δt_{evo}^j correspondante à un pas de burnup fixé, noté δBU . Ce pas de temps est donc recalculé pour chaque nouvelle carte de puissance comme :

$$\delta t_{evo}^j = \frac{\delta BU}{\max_{i \in (P_{i,m}^j)_{\forall i}}$$

Avec :

- $m_{fuel \in node}$ la masse initiale de métaux lourds présente dans le volume associé à un nœud du maillage neutronique.
- $P_{i,m}^j$ la puissance massique au nœud i et au pas de temps j
- $\max_{i \in (P_{i,m}^j)_{\forall i}}$ la puissance massique maximale dans l'ensemble des nœuds de la géométrie.

L'utilisation d'un pas de temps variable, basé sur le plus haut niveau de puissance, permet de s'assurer que l'hypothèse quasi-statique s'applique dans tout le cœur. En effet, plus la puissance d'un nœud est importante et plus ses sections efficaces (i.e le vecteur isotopique du combustible) sont amenées à changer fréquemment de tabulation. La durée pendant laquelle la nappe de flux peut être considérée comme valable est donc conditionnée par ces nœuds de forte puissance.

Notons cependant qu'il s'agit là d'un choix de développement. Il est parfaitement possible de travailler avec un ensemble de pas de temps imposé par l'utilisateur, de la même façon que SMURE.

Le burnup est ensuite calculé en chaque nœud comme :

$$BU_i = \sum_j P_{i,m}^j \cdot \delta t_{evo}^j$$

Une fois le niveau de puissance et de burnup déterminés, les sections efficaces de chaque nœud sont interpolées pour tenir compte des changements de compositions. A la différence de SMURE, les équations de Bateman ne sont pas résolues. Toute la physique associée à l'évolution de l'inventaire isotopique du combustible est condensée dans une tabulation de section efficaces macroscopiques à deux groupes en énergie préalablement calculée par SMURE sur des évolutions d'assemblages en milieux infini menées selon plusieurs niveaux de puissance.

Une tabulation uniquement en burnup n'est pas suffisante pour rendre compte de l'évolution de la nappe de puissance. Il est également nécessaire de prendre en compte le niveau de puissance utilisé lors de l'évolution SMURE. En effet, pour un burnup donné, des évolutions calculées pour des niveaux de puissance différents ne présentent pas les mêmes réactivités (ils ont donc des sections efficaces macroscopiques différentes). Ces écarts sont en partie dû à un niveau d'empoisonnement différent par les produits de fission. Considérons, par exemple, le cas du Xénon 135, dont le poids neutronique en réactivité est non négligeable (typiquement ≈ 1000 à 2000 pcm en REP), sa densité lorsqu'il atteint l'équilibre s'approxime comme [19] :

$$N_{135Xe}^\infty = \frac{(\gamma_{135I} + \gamma_{135Xe}) \cdot \Sigma_{fis, i} \cdot \phi_i}{\lambda_{135Xe} + \sigma_{cap}^{135Xe} \cdot \phi_i}$$

Avec :

- N_{135Xe}^∞ la densité isotopique du Xénon 135 à l'équilibre, ($at \cdot cm^{-3}$)
- γ_{135I} le rendement de fission en ^{134}I , le noyaux père du ^{135}Xe , (sans unité)
- γ_{135Xe} le rendement de fission en ^{135}Xe
- λ_{135Xe} la constante de décroissance du ^{135}Xe , (s^{-1})
- σ_{cap}^{135Xe} la section efficace microscopique de capture du ^{135}Xe , (barn)
- $\Sigma_{fis, i}$ la section efficace macroscopique au nœud i
- ϕ_i le flux au nœud i , (cm^{-1})

Le niveau d'équilibre du Xénon 135 dépend bien du niveau de flux et donc du niveau de puissance qui lui est proportionnel. Or la quantité de ^{135}Xe va influencer sa section efficace macroscopique moyenne d'absorption, qui à son tour modifie alors la répartition de puissance dans un calcul en diffusion. De même, pour un niveau de flux plus ou moins élevé, les captures sur certains isotopes vont modifier leur évolution et ainsi altérer la cascade de décroissance et en définitive le vecteur isotopique. La prise en compte du niveau de puissance est donc indispensable pour permettre une évolution réaliste de la nappe de flux.

De plus, soulignons qu'en toute rigueur, pour un pas de temps d'évolution supérieur à la constante de mise à l'équilibre des isotopes pouvant connaître une saturation, comme le ^{135}Xe , la puissance employée dans la tabulation des sections efficaces doit être celle du pas de temps actuel et non celle du pas de temps précédent. Cette erreur est rendue minime grâce à l'utilisation d'un faible pas de burnup.

En conséquence, les sections efficaces sont doublement interpolées, à chaque fin de pas de temps, à la fois selon leur burnup et selon leur niveau de puissance (massique). Cette interpolation s'effectue selon le principe représenté dans la figure 3.4.

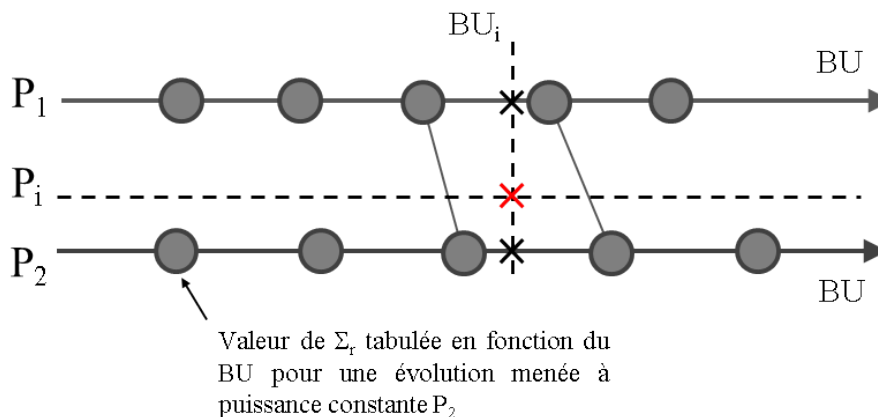


FIGURE 3.4: Schéma de la méthode d'interpolation linéaire des sections efficaces dans une tabulation en burnup et en puissance des sections efficaces macroscopiques. La puissance (massique) dans un nœud est désignée comme P_i et son burnup comme BU_i . Les sections efficaces sont d'abord interpolées linéairement au burnup voulu dans chaque tabulation en puissance, puis les valeurs qui viennent d'être calculées (désignées par des croix noires) sont à leur tour linéairement interpolées à la bonne puissance (croix rouges). Graphiquement, il apparaît qu'interpoler d'abord selon la puissance puis selon le burnup est équivalent.

L'interpolation a lieu selon une direction à la fois, c'est à dire soit selon la variable burnup soit selon le niveau de puissance. Par souci de simplicité seules des interpolations linéaires sont considérées. L'ordre des directions d'interpolation n'a pas d'importance (du fait de cette linéarité). L'option de considérer des sections efficaces constantes sur un pas en burnup/puissance a

été testée et s'est révélée non viable car elle induit de fortes irrégularités dans la résolution de la nappe de flux entre deux pas de temps.

3.4 Inter-comparaison FCU/NDM

Afin de vérifier le bon fonctionnement des outils destinés au calcul d'évolution de cœurs les méthodes FCU et la NDM sont comparées sur le cas d'un cœur de SMR.

3.4.1 Définition du cas de comparaison

Le cœur de SMR utilisé pour cette comparaison correspond à une configuration qui sera étudiée dans la suite dans les études de dimensionnement de SMR Th/U.

Il s'agit d'un cœur de 89 assemblages, composé d'assemblages initialement identiques. Ces assemblages sont définis comme des réseaux de 19x19 crayons combustibles dont 25 « trous d'eau » destinés aux tubes guides. Le combustible est constitué exclusivement de Th/U enrichi à 4.2 %at en ^{233}U .

Une représentation de cette configuration est donnée par la figure 3.5.

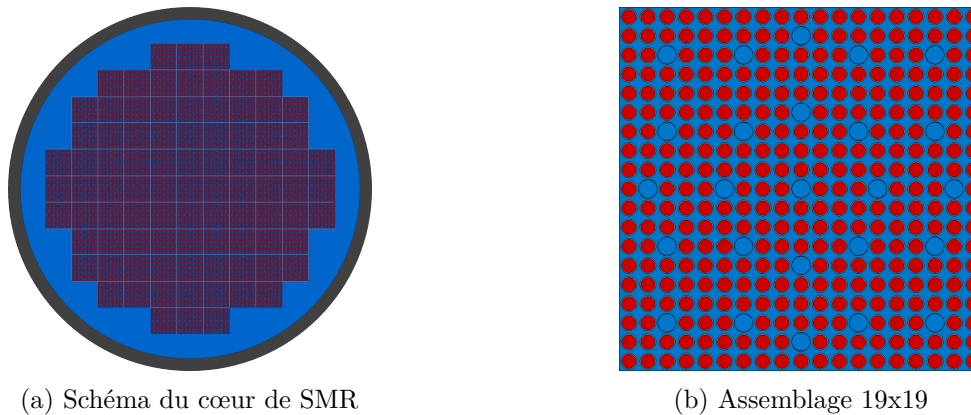


FIGURE 3.5: Représentation du cœur de SMR utilisé pour la comparaison SMURE/NDM

Le cœur est ceinturé d'une modélisation grossière du réflecteur. Axialement il est également réfléchi par une épaisseur d'eau (d'environ 20 cm) appelée plenum. Les spécifications des assemblages sont données par le tableau 3.1.

variable	valeur
Largeur de l'assemblage	21.42 cm
Hauteur de l'assemblage	230.0 cm
Hauteur plenum (supérieur et inférieur)	20 cm
Rayon des crayons combustibles	0.40945 cm
Rayon extérieur du gap	0.418 cm
Rayon extérieur de la gaine	0.475 cm
Combustible	Th/U
Enrichissement	4.2 %at.
Puissance cœur	900 MW_{th}
Température combustible	900 K
Température gaine	600 K
Température caloporteur	580 K
Densité caloporteur	711 $kg \cdot m^{-3}$

Tableau 3.1: Spécifications des assemblages utilisés dans le cœur de SMR pour la comparaison NDM / SMURE

L'évolution envisagée par la suite se fait sans moyens de gestion de la réactivité.

3.4.2 Vérifications préliminaires avec SMURE

Le maillage d'évolution utilisé par SMURE est représenté figure 3.6. Il s'agit du maillage le plus fin possible compte tenu des symétries du cœur. Les 16 assemblages évoluant ainsi définis sont chacun composé d'un seul crayon ubiquitaire. Au final, l'évolution de ce cœur de SMR est modélisé par l'évolution de 16 compositions combustibles.

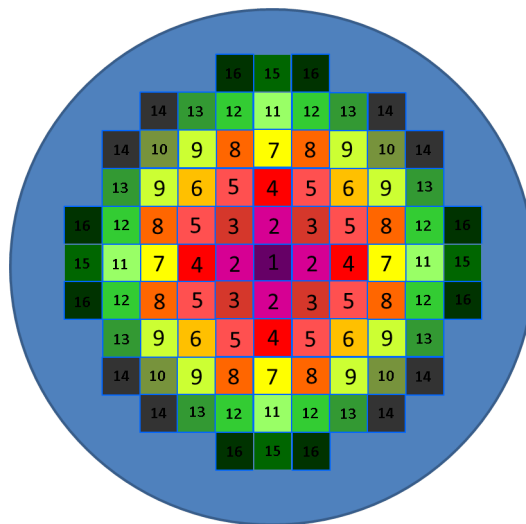


FIGURE 3.6: Maillage d'évolution utilisé par SMURE pour le calcul d'épuisement du combustible d'un cœur de SMR chargé en Th/U selon la méthode FCU. Chaque assemblage évoluant/ubiquitaire est indexé par un numéro allant de 1 à 16.

Cette première étude préliminaire vise à s'assurer que les pas de temps imposés dans SMURE entre deux calculs Monte Carlo sont suffisamment faibles pour être sans impact sur les résultats. Deux simulations sont proposées, l'une où le pas de temps maximal est fixé à 40 jours, comme

dans le cas d'une évolution en milieu infini, et une autre simulation où le pas de temps maximal est fixé à 15 jours.

Pour rappel, la taille des pas de temps (Δt_U) est progressivement allongée au fil de l'évolution. Cette taille dépend à la fois de la puissance volumique imposée et de la cinétique des différents isotopes pris en compte. Dans le cas d'un calcul à l'échelle cœur, la vitesse des redistributions de la nappe de puissance est également un critère déterminant.

Les résultats de cette évolution en termes de réactivité sont présentés par la figure 3.7.

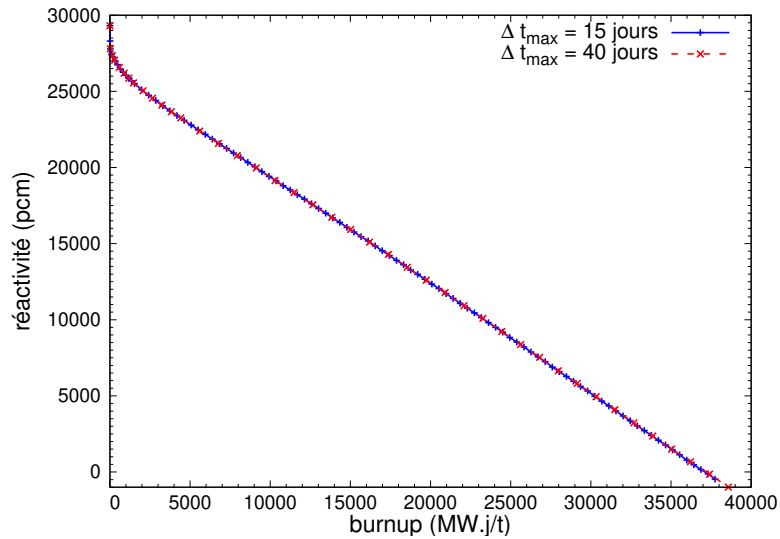


FIGURE 3.7: Sensibilité dans l'évolution de la réactivité à la taille des pas de temps utilisés pour l'évolution du cœur de SMR par SMURE grâce à la méthode FCU.

La différence de réactivité entre les deux courbes est au maximum de 100 pcm^9 , ce qui se traduit par un écart sur le burnup final d'environ 0.1 GW.j/ton . Ce constat est également vérifié à l'échelle des assemblages (cf. tableau 3.8) ce qui permet de s'assurer qu'il n'y a pas d'effet de compensation locale dans les évolutions de chaque assemblage aboutissant au même résultat global.

			34.70	25.04					34.61	25.01		
			43.78	40.40	32.36				43.60	40.27	32.29	
		45.12	44.74	42.82	36.37	25.04		44.96	44.57	42.67	36.28	25.01
	45.12	45.15	44.95	43.56	38.52	27.04	44.98	44.99	44.77	43.10	38.42	27.01

(a) Burnup final (GW.j/ton) pour une évolution (b) Burnup final (GW.j/ton) pour une évolution avec un pas de temps maximal de $\Delta t_{max} = 40$ jours. avec un pas de temps maximal de $\Delta t_{max} = 15$ jours.

FIGURE 3.8: Sensibilité du burnup final assemblage par assemblage vis à vis de la taille du pas de temps maximal imposé dans SMURE pour l'évolution d'un cœur de SMR réalisées grâce à la méthode FCU.

Ces différences non-significatives constatées laissent penser qu'un pas de temps maximal de 40 jours est suffisant même à l'échelle cœur. Cette conclusion n'est cependant valable que pour le cas présent.

9. L'incertitude statistique donnée par *Serpent2* sur le k_{eff} est de 20 pcm.

3.4.3 Modélisation par la NDM

Par souci de simplicité le cœur est représenté en 2D uniquement dans les directions radiales. Chaque assemblage est subdivisé radialement en 4 nœuds où les équations de la diffusion à 2 groupes sont résolues. Le cœur est également ceinturé d'un réflecteur en eau d'une épaisseur d'un assemblage. Aucun couplage avec la thermohydraulique n'est considéré.

Les sections efficaces sont calculées par SMURE sur un assemblage en milieu infini. Cette méthode de calcul ne tient pas compte des positions des assemblages au sein du cœur ni du spectre neutronique de fuite.

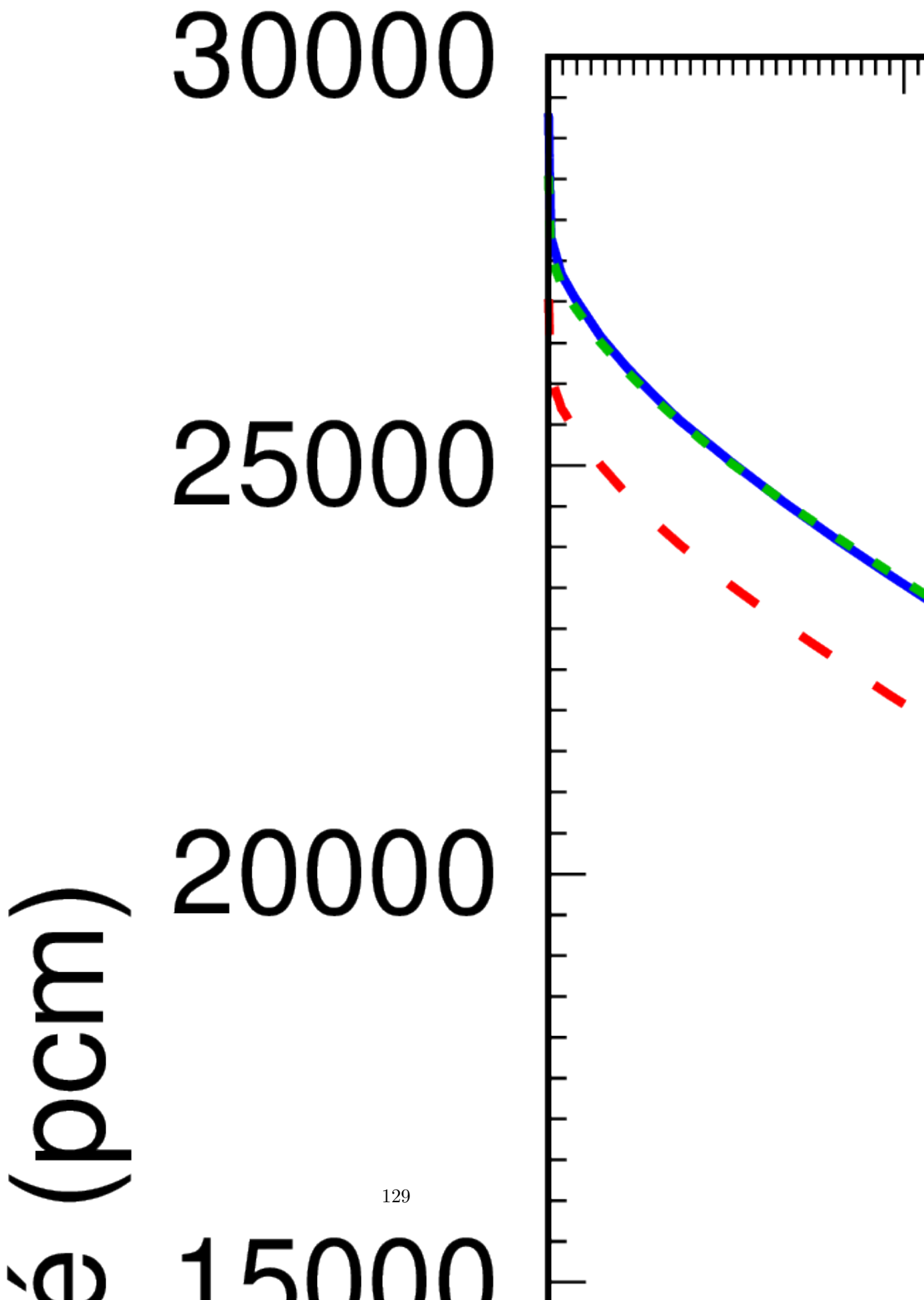
Les différents niveaux de puissance utilisés vont de 0.15 fois la puissance nominale (i.e. $\approx 10.11 MW_{th}$) à 2.1 fois la puissance nominale par pas de 0.05. Les simulations SMURE précédentes ont permis d'établir que la durée du cycle était approximativement de 1300 jours. Pour la construction des tables de sections efficaces macroscopiques en milieu infini, la durée de l'évolution est portée à 1500 jours afin de garantir à chaque nœud, quel que soit son historique de puissance d'être compris dans cette tabulation.

Soulignons que le degré de discrétisation du maillage est implicitement conditionné par la tabulation en puissance. En effet, plus le maillage sera fin et plus les zones périphériques (respectivement centrales) subiront des densités de puissance faibles (respectivement importantes). Pour un maillage fin (e.g. 9 nœuds par assemblage en 2D, ou pour considérer un maillage 3D), il sera donc nécessaire de considérer une gamme de niveaux de puissance plus large.

Au total la bibliothèque de sections efficaces ainsi constituée comporte plus de 1800 jeux de sections efficaces permettant de réaliser l'évolution d'un cœur constitué d'un seul type d'assemblage.

3.4.4 Comparaison des résultats NDM/FCU

L'évolution de la réactivité du cœur de SMR modélisé par FCU et par NDM est présentée figure 3.9. La différence dans les modélisations du cœur mène à un écart de la réactivité d'environ 1500 pcm. La valeur de cet écart peut être considérée comme fixe sur toute la durée de l'évolution.



Cet écart de réactivité implique un raccourcissement de la durée du cycle d'environ 50 jours par rapport au calcul FCU. Cela se traduit par une réduction du burnup finale d'environ 1.5 GW.j/ton de la simulation NDM en comparaison à la simulation FCU. Pour mieux comprendre l'origine de cet écart en réactivité, les profils initiaux (i.e. à $t = 0$ jour) de puissance et de flux calculés par la NDM et par SMURE (via *Serpent2*) sont comparés dans les tableaux de la figure 3.10.

Des disparités importantes de puissance sont constatées sur l'ensemble des assemblages. Au centre du cœur les différences de puissance entre le calcul FCU et NDM sont d'environ 5%. Cet écart s'élève jusqu'à 20% sur les assemblages périphériques où la niveau de puissance est plus faible.

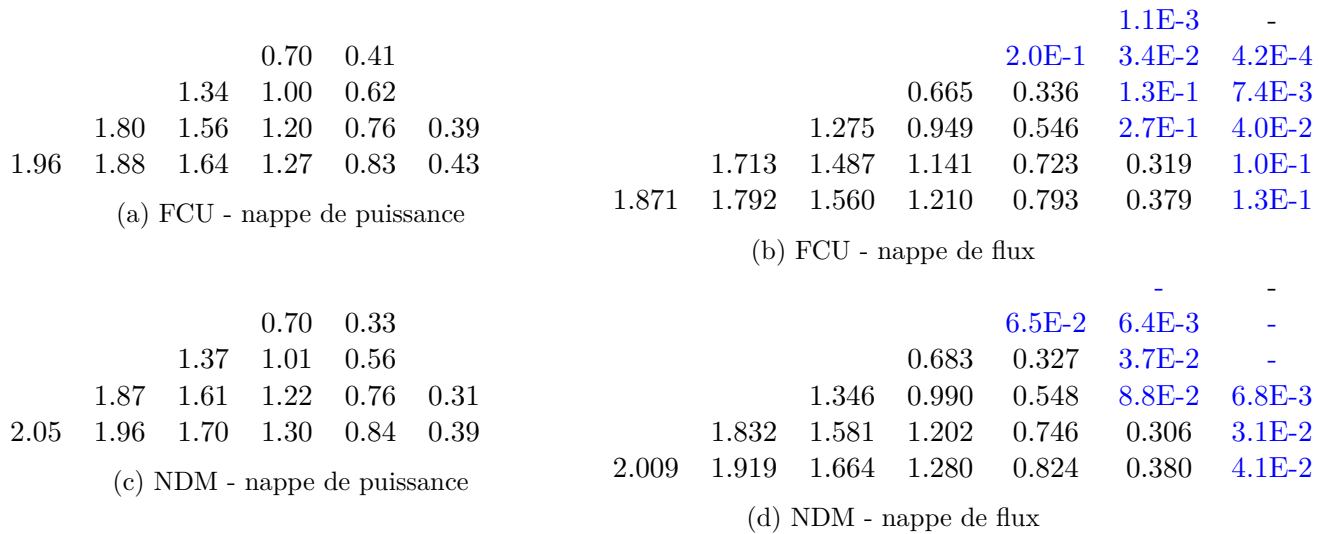


FIGURE 3.10: Comparaison des profils de puissance (normalisée à la puissance moyenne) et des profils de flux (normalisé au flux moyenne) dans le cœur de SMR, en début d'évolution (i.e. burnup = 0 GW.j/ton). Les valeurs de flux dans les zones du réflecteur sont représentées en bleu.

L'analyse des cartes de flux révèle des écarts encore plus importants, de l'ordre de 80%, dans les cellules constitutives du réflecteur. Cette comparaison met en lumière les limites de l'approximation de la diffusion neutronique. En effet (cf. annexe du chapitre 2), la longueur de diffusion d'un neutron rapide dans le réflecteur est plus grande que l'épaisseur de la zone ainsi que le montre le tableau 3.2.

type d'assemblage	groupe 1	groupe 2
combustible (Th/U)	10.6	1.93
réflecteur (eau légère)	44.9	2.90

Tableau 3.2: Longueurs de diffusion en (cm) dans le cœur du SMR Th/U.

Contrairement aux assemblages combustibles, l'approximation de la diffusion ne peut donc pas s'appliquer pour les neutrons rapides dans le réflecteur. Ce défaut de notre modélisation induit d'importantes différences dans la répartition du flux à la périphérie du cœur ce qui pénalise la résolution de la nappe de puissance.

Soulignons cependant que la simulation d'une configuration sans réflecteur n'aurait pas significativement réduit cet écart sur la réactivité puisque la condition limite utilisée en théorie de la diffusion (i.e. distance extrapolée), constitue également une approximation de celle implicitement utilisée dans le Monte Carlo (rayonnement de corps noir [17]). Enfin, rappelons que

le modèle du réacteur utilisé par FCU est tridimensionnel contrairement à la résolution de la NDM dans ce cas précis. L'écart de réactivité constaté entre la NDM et FCU est typique de celui entre une résolution déterministe et une résolution Monte Carlo [54].

Les tableaux de la figure 3.11 donnent un aperçu de l'évolution à la fois de la nappe de puissance et de la nappe de burnup assemblage par assemblage pour les simulations issues de FCU et de la NDM. On constate que l'évolution du cœur tend à l'aplatissement de la nappe de puissance, ce dont rendent bien compte les deux simulations. Les écarts de puissance ont tendance à se résorber en fin d'évolution pour ne plus représenter que quelques pourcent par assemblages. En conséquence l'évolution des burnups individuels de chaque assemblage reste en bon accord sur toute la durée de l'évolution, avec des différences finales inférieures à 2 GW.j/ton .

En conclusion, la comparaison FCU/NDM a mis en avant les difficultés rencontrées lors de la simulation d'une évolution par la NDM. Il est d'abord nécessaire de générer une large base de sections efficaces macroscopiques à la fois tabulées en burnup et en puissance. La dépendance des sections efficaces au niveau de puissance va limiter la finesse du maillage utilisé.

Les approximations de la diffusion neutronique ainsi que les écarts dans le modèle géométrique du cœur impliquent des différences significatives sur l'évaluation de la réactivité. Au cours du cycle la nappe de flux connaît un aplatissement important dû à un empoisonnement plus rapide des assemblages les plus chauds. Cette tendance, particulièrement marquée dans cette configuration, masque le développement possible des écarts de burnup entre assemblages dus à des distributions de puissance initialement différentes. D'autres comparaisons sont nécessaires pour s'assurer du bon accord entre FCU et la NDM.

Soulignons que sans une estimation de l'écart initial sur la réactivité, il n'est pas possible de corriger les résultats de la NDM pour améliorer l'estimation du burnup. L'ensemble de ces observations nous conduisent à préférer les évolutions FCU, plus directes, à celles de la NDM dont l'usage sera réservé au calcul des transitoires.

			0.908	0.621					8.6	5.5		
		1.217	1.096	0.839				13.1	11.0	7.8		
	1.264	1.253	1.181	0.960	0.616		14.9	14.1	12.4	9.2	5.4	
1.258	1.262	1.261	1.207	1.022	0.664	15.4	15.2	14.4	12.8	9.9	5.9	
(a) FCU - nappe de puissance à 350 jours						(b) FCU - nappe de burnup à 350 jours						
			0.946	0.567					8.9	5.0		
		1.228	1.125	0.811				13.2	11.3	7.5		
	1.260	1.255	1.201	0.997	0.558		14.8	14.1	12.6	9.5	4.8	
1.254	1.258	1.259	1.223	1.065	0.673	15.1	15.0	14.4	13.0	10.3	5.9	
(c) NDM - nappe de puissance à 350 jours						(d) NDM - nappe de burnup à 350 jours						
			0.972	0.721					18.5	12.6		
		1.141	1.098	0.918				25.6	22.7	17.1		
	1.115	1.137	1.138	1.015	0.727		27.5	26.8	24.7	19.7	12.5	
1.100	1.107	1.132	1.149	1.069	0.784	27.8	27.7	27.1	25.3	21.0	13.5	
(e) FCU - nappe de puissance à 710 jours						(f) FCU - nappe de burnup à 710 jours						
			1.007	0.681					19.3	11.7		
		1.147	1.112	0.893				25.7	23.2	16.6		
	1.128	1.143	1.143	1.042	0.680		27.3	26.7	25.0	20.4	11.5	
1.114	1.121	1.139	1.151	1.093	0.798	27.5	27.4	26.9	25.5	21.8	13.8	
(g) NDM - nappe de puissance à 710 jours						(h) NDM - nappe de burnup à 710 jours						
			0.997	0.777					27.8	19.6		
		1.103	1.086	0.947				36.2	33.0	25.9		
	1.066	1.090	1.107	1.032	0.785		37.8	37.3	35.3	29.3	19.6	
1.049	1.059	1.085	1.111	1.077	0.843	37.9	37.9	37.5	36.0	31.2	21.2	
(i) FCU - nappe de puissance à 1030 jours						(j) FCU - nappe de burnup à 1030 jours						
			1.016	0.740					28.9	18.4		
		1.112	1.091	0.922				36.4	33.6	25.2		
	1.098	1.108	1.111	1.041	0.741		37.8	37.3	35.6	30.3	18.2	
1.091	1.095	1.105	1.116	1.081	0.847	37.9	37.8	37.5	36.2	32.1	21.6	
(k) NDM - nappe de puissance à 1030 jours						(l) NDM - nappe de burnup à 1030 jours						
			0.999	0.788					34.9	25.2		
		1.102	1.079	0.941				44.0	40.6	32.5		
	1.084	1.094	1.094	1.019	0.792		45.3	45.0	43.0	36.6	25.2	
1.076	1.080	1.089	1.098	1.063	0.850	45.3	45.4	45.2	43.8	38.7	27.2	
(m) FCU - nappe de puissance à 1270 jours						(n) FCU - nappe de burnup à 1270 jours						
			1.009	0.763					36.1	23.7		
		1.103	1.078	0.926				44.2	41.3	31.7		
	1.102	1.104	1.098	1.030	0.764		45.5	45.1	43.4	37.6	23.5	
1.100	1.101	1.104	1.104	1.066	0.859	45.6	45.6	45.3	44.0	39.7	27.6	
(o) NDM - nappe de puissance à 1270 jours						(p) NDM - nappe de burnup à 1270 jours						

FIGURE 3.11: Comparaison FCU/NDM de la puissance (normalisée à la puissance moyenne) et du burnup exprimé en $GW.j/ton$, assemblage par assemblage, à différentes dates de l'évolution du cœur de SMR Th/U. Les dates choisies correspondent respectivement à des burnups cœur de $10.3 GW.j/ton$, $20.9 GW.j/ton$, $30.3 GW.j/ton$, $37.4 GW.j/ton$. La dernière date correspond (à 100 pcm près) à la fin du cycle.

3.5 Évaluation préliminaire de la précision des évolutions FCU

La section précédente a permis de s'assurer du bon fonctionnement de la méthode FCU. Cette section se propose de quantifier l'incidence de l'absence de discrétisation axiale pour lors de l'évolution d'un cœur complet en Monte Carlo.

Jusqu'à présent le combustible au sein d'un assemblage était supposé axialement homogène. En réalité, du fait d'un profil axial de puissance non uniforme, l'évolution du combustible dans les zones centrales de l'assemblage est plus rapide que celle des zones périphériques. Cette évolution hétérogène a pour conséquence une modification du profil de flux et donc du niveau de fuite pouvant au final influencer la longueur du cycle.

3.5.1 Discrétisation axiale du combustible

On se propose d'étudier l'évolution d'un seul assemblage, où des conditions de réflexion sont appliquées aux surfaces latérales et des conditions de vide aux extrémités axiales. Cet assemblage est simulé sans discrétisation axiale du combustible (comme c'est le cas dans la section précédente) et avec un découpage axial en 23 zones.

En première approche, le couplage à la thermique n'est pas considéré. Les conditions dans la partie haute et basse de l'assemblage sont donc identiques (cf. tableau 3.1). La symétrie de cette configuration permet, grâce à la méthode FCU, de réduire à 13 le nombre de matériaux évoluant. La hauteur de chaque zone axiale est alors de 10 cm comme usuellement recommandé [65]. La configuration ainsi simulée est représentée par la figure 3.12.



FIGURE 3.12: Configuration utilisée pour l'évolution axiale d'un assemblage (ici représenté horizontalement) composé de 19 crayons par côté et 25 tubes guides vides. L'assemblage est divisé en 13 univers évolutifs, chacun représenté par une couleur. Ces univers sont susceptibles d'occuper plusieurs places au sein de l'assemblage.

Comme le soulignent [28] et [65], la simulation d'évolution avec détail axial se heurte à deux grands écueils :

Le phénomène de *clustering* [69], [70] : Ce phénomène est avant tout un artefact statistique propre à la méthode Monte Carlo. Pour une source de fission initialement uniformément répartie et dans un milieu relativement homogène, les neutrons auront tendance à disparaître uniformément tandis que ceux créés resteront, en moyenne, relativement proches de leur site de naissance. Pour des géométries de grandes dimensions (devant le libre parcours moyen des neutrons), le transport neutronique n'est pas toujours suffisant pour que la population neutronique continue d'occuper tout le volume disponible. En conséquence la population de neutrons a tendance à se scinder en agrégats localisés de neutrons appelés « clusters » et dont la distribution n'est plus représentative d'une solution de l'équation de Boltzmann. En dépit de la formation de clusters, l'estimateur du k_{eff} semble converger alors que spatialement l'évolution aléatoire des clusters empêche toute convergence possible du flux (et donc de la source de fission). Pour se prémunir contre cet effet, un nombre suffisant¹⁰ de particules doivent être simulées. Dans notre

10. en première approximation N le nombre de particules doit être $N \gg (\frac{L}{\lambda})^3$, avec L la plus grande dimension de la géométrie et λ le libre parcours moyen d'un neutron.

cas, l'assemblage de SMR s'avère quasiment deux fois plus court qu'un assemblage classique de REP (N4), ce qui allège cette contrainte. Les résultats présentés dans la suite sont obtenus pour une statistique de 150 cycles inactifs puis 500 cycles actifs de 150000 neutrons.

Le renforcement de perturbations pendant l'évolution : Du fait de la nature stochastique de la résolution Monte Carlo, les niveaux de flux calculés dans chaque matériau évoluant sont toujours entachés d'une erreur. Deux cellules qui, compte tenu de la symétrie, devraient évoluer selon des niveaux de puissances identiques peuvent connaître un écart dans l'estimation Monte Carlo de leur niveau de puissance. Cet écart va induire une différence des compositions isotopiques lors du calcul de leurs évolutions. Au prochain calcul Monte Carlo, la cellule trop appauvrie en combustible verra son niveau de puissance déprécié à la faveur de celle dont le burnup a évolué moins rapidement. Ce déséquilibre dans les compositions induit donc un nouvel écart, non physique, dans la répartition de puissance. Si les pas de temps entre deux calculs Monte Carlo sont trop importants¹¹ alors ce phénomène oscillatoire s'amplifie au cours de l'évolution, faisant perdre à la simulation tout sens physique [28]. Au contraire pour des pas de temps plus faibles¹², on peut espérer que le mécanisme d'évolution permette de borner ces erreurs statistiques (i.e. l'évolution un peu plus rapide de la seconde cellule permet de compenser son retard sur la première). Dans notre cas la condition de symétrie entre le haut et le bas du réacteur est forcée grâce à l'utilisation de matériaux ubiquitaires. Cependant, pour prévenir toute évolution rapide du profil axial de puissance, le pas de temps maximal entre deux calculs Monte Carlo est fixé à 15 jours. Enfin, pour des raisons similaires à celles précédemment mentionnées, l'évolution axiale est réalisée avec une concentration de ^{135}Xe forcée à l'équilibre dans chaque cellule afin d'éviter le développement d'oscillations Xénon [43] non physiques susceptibles de fausser la résolution du profil axial de puissance.

Les principaux résultats sur le k_{eff} et la réactivité sont présentés dans la figure 3.13.

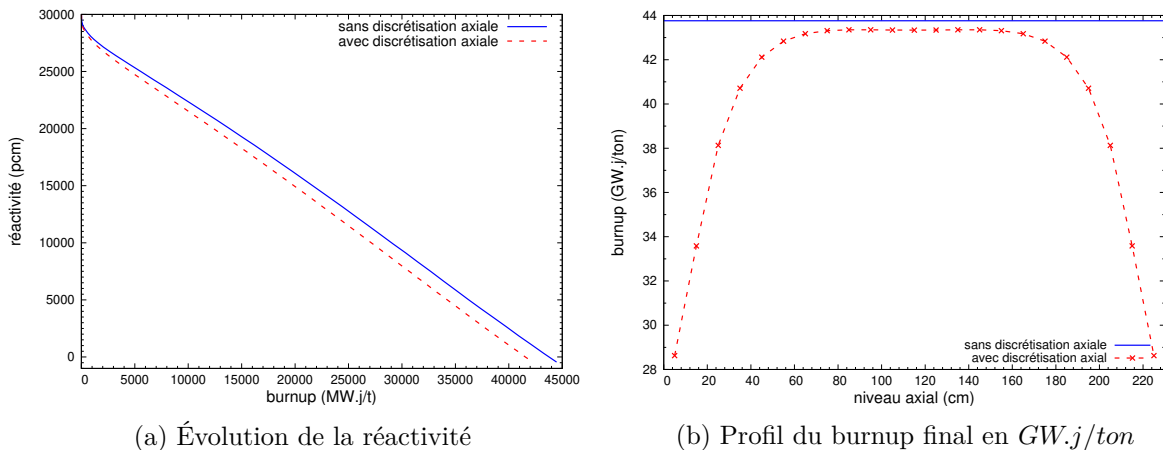


FIGURE 3.13: Comparaison des résultats d'une évolution menée par SMURE/FCU sur un assemblage en milieu infini avec et sans détail axial.

Le burnup final moyen, à l'échelle de l'assemblage, est d'environ 41.5 GW.j/ton contre

11. On retrouve là un thème récurrent en méthode numérique, à savoir la relation de stabilité entre la taille de la maille spatiale (inversement proportionnelle à l'incertitude statistique) et la taille du pas de temps.

12. Et sous réserve d'une statistique suffisante pour les erreurs d'estimations sur le flux restent faibles devant la valeur du flux.

43.8 $GW.j/ton$ dans une configuration homogène. Cela représente un raccourcissement de la longueur du cycle d'environ 80 jours soit 2.2 $GW.j/ton$. Cette estimation est cohérente avec les résultats de [65].

La perte de burnup constatée est relativement faible. Cela s'explique par un aplatissement rapide du profil axial de puissance, en approximativement 400 jours, comme le montre la figure 3.14. De ce fait, le burnup final est assez homogène au sein de l'assemblage et seule une faible fraction de l'assemblage connaît un burnup significativement réduit.

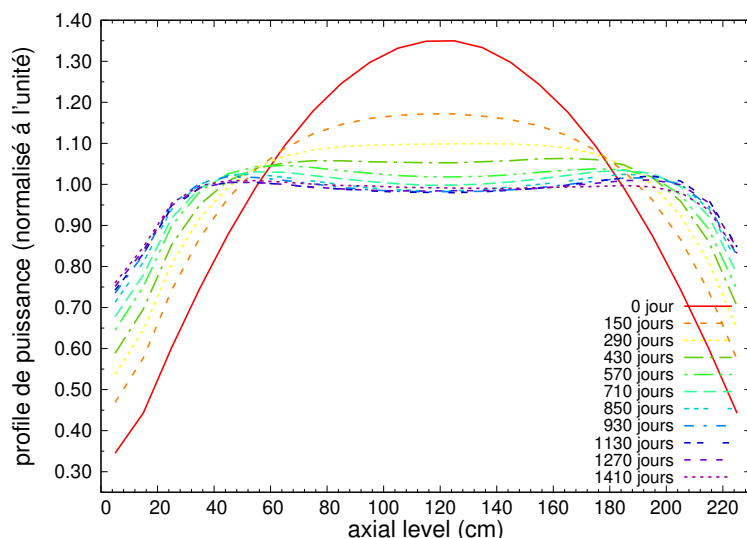


FIGURE 3.14: Évolution du profil axial de puissance pour un assemblage de SMR chargé en Th/U évoluant en milieu infini selon la méthode FCU. Le profil de puissance est normalisé à la puissance moyenne de l'assemblage (imposée constante au cours de l'évolution).

Notons que le profil de puissance n'est pas complètement symétrique, en particulier aux extrémités de l'assemblage. Cela indique une statistique trop faible lors de la résolution du profil de flux par la méthode Monte Carlo. Cependant ces imprécisions restent sans conséquence sur l'évolution puisque la symétrie de l'assemblage est imposée lors de l'évolution des matériaux.

3.5.2 Ajout des contre-réactions thermiques

En pratique, le profil axial de puissance est fortement influencé par le champ de température d'où cette seconde étude qui permet de s'assurer de la fiabilité de notre première estimation de l'omission du détail axial.

Le calcul est menée avec le même découpage axial que précédemment (i.e. 23 zones), mais du fait de la prise en compte du champ de température, la symétrie haut/bas de l'assemblage est perdue ce qui implique de suivre l'évolution de 23 matériaux différents.

Le champ de température dans chaque zone axiale est calculé par BATH (cf. chapitre 2). Avant chaque calcul Monte Carlo dédié à l'évolution, une série d'itérations entre BATH et le code Monte Carlo a lieu afin de déterminer l'équilibre neutronique/thermohydraulique. Le code Monte Carlo permet d'estimer la puissance en fonction des températures de chaque niveau axial. À partir de ce profil, BATH calcul dans chaque zone axiale les températures moyennes effectives du combustible, de la gaine ainsi que la densité et la température du caloporteur. Ces grandeurs sont ensuite actualisées dans le fichier d'entrée du calcul Monte Carlo suivant. Un h_{gap} constant de $10^4 W \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$ est utilisé pour toutes les cellules et ce quel que soit l'avancement du cycle. Les itérations neutronique/thermohydraulique sont stoppées lorsque la différence (en valeur absolue)

entre les profils axiaux de température caloporteur issus d'itérations successives est inférieure à 1 K.

Pour garder des temps de calcul acceptables, les itérations neutronique/thermohydraulique sont réalisées avec le même nombre de neutrons et de cycles que précédemment (150/500 cycles inactifs/actif de 150000 neutrons). En revanche, du fait de la perte de la symétrie lors de l'évolution, la statistique utilisée pour les calculs d'évolution est portée à 150/1000 cycles inactifs/actifs simulant chacun 200000 neutrons. L'incertitude obtenue sur chaque niveau axial est alors comprise entre 50 et 100 pcm contre 80 et 130 pcm avec la source neutronique précédemment utilisée.

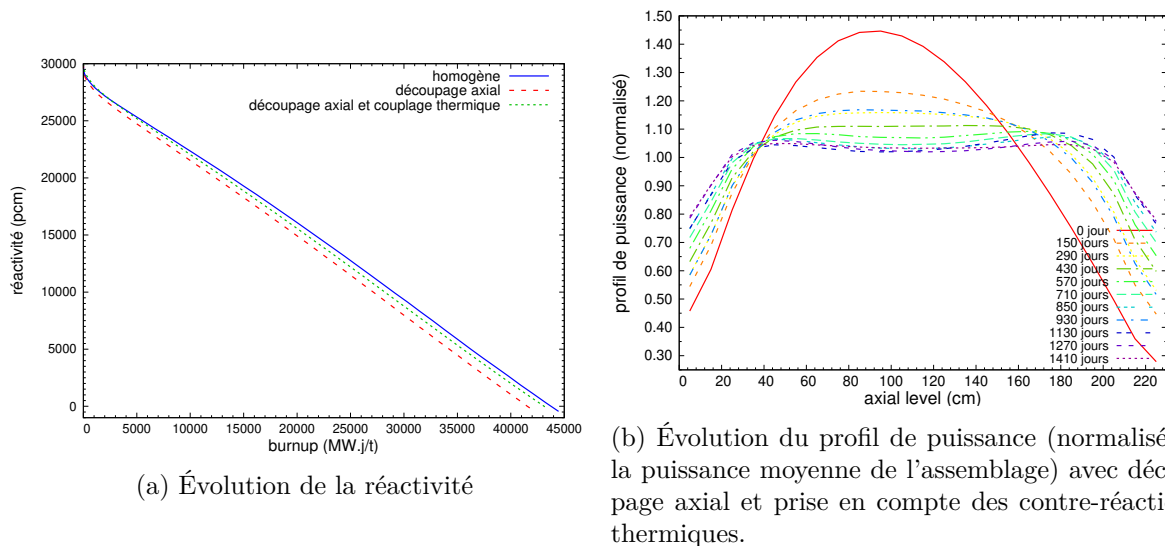


FIGURE 3.15: Comparaison des résultats d'une évolution menée par SMURE sur un assemblage en milieu infini pour diverses modélisations.

Comme le montre la figure 3.15 (a), l'estimation de réactivité de l'évolution avec détail axial et couplage thermohydraulique se rapproche de celle de l'évolution sans détail axial.

Sans couplage, la température du combustible et du caloporteur sont respectivement fixées à 900 K et 580 K sur toute la hauteur de l'assemblage. Pour le couplage avec BATH, la température effective du combustible varie entre 600 K pour les extrémités et 750 K pour le centre, comme le montre la figure 3.16. Cette baisse de la température combustible, ainsi que la nouvelle répartition de la température caloporteur, permettent de dégager une réactivité supplémentaire vis-à-vis de l'évolution avec détail axial, ce qui explique le rapprochement avec l'estimation du niveau de réactivité calculée pour la configuration homogène.

Tout comme l'évolution axiale précédente, le profil de température s'aplatit rapidement, voir figure 3.15 (b). Le fait que la partie basse du cœur soit plus froide a alors assez peu d'influence sur le reste de l'évolution.

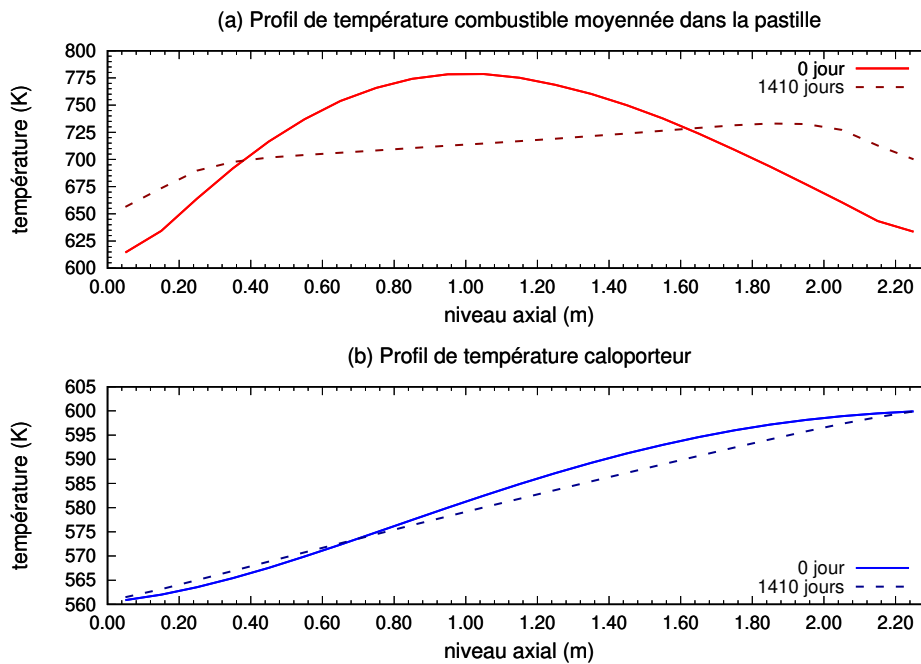


FIGURE 3.16: Évolution du profil axial de températures combustible et caloporteur pour un assemblé de SMR chargé en Th/U évoluant en milieu infini selon la méthode FCU.

L'estimation du burnup final de l'assemblage avec couplage thermique est de $42.8 \text{ GW}\cdot\text{j}/\text{ton}$, ce qui se rapproche du burnup final obtenu pour la simulation sans discrétisation spatiale ($43.8 \text{ GW}\cdot\text{j}/\text{ton}$). Le profil de burnup est légèrement décentré vers le bas de l'assemblage (cf. figure 3.17). Cette étude confirme l'évaluation de l'erreur commise par omission du détail axial lors de l'évolution du combustible.

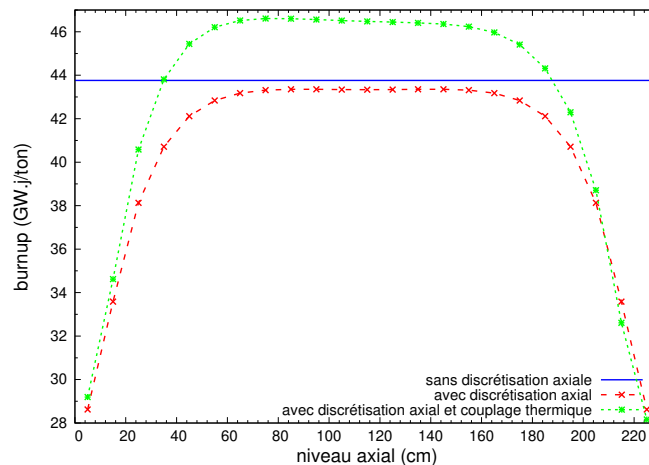


FIGURE 3.17: Profil axial de burnup final pour lors de l'évolution d'un assemblage de SMR Th/U en milieu infini avec et sans détail axial et contre-réaction thermiques.

En conclusion, la baisse de l'écart sur le burnup final doit être attribuée principalement à une mauvaise estimation du champ de température dans le cas d'un assemblage sans discrétisation axiale. L'évaluation des différences lors d'une évolution avec et sans détail axial n'est donc pas remise en question par la prise en compte du champ de température. Soulignons que la simulation

en milieu infini ne permet qu'une évaluation partielle de l'effet axiale sur l'évolution. En effet, il est possible qu'une évolution axialement hétérogène au sein d'un cœur complet puisse participer à des redistributions radiales de puissance plus rapides que celles constatées avec la méthode FCU.

3.6 Conclusions

Une compréhension approfondie de la méthode de calcul Monte Carlo ainsi que de l'outil d'évolution SMURE a permis de proposer une méthodologie innovante dédiée à l'évolution des cœurs de réacteur. La méthode FCU permet, moyennant quelques simplifications, la réalisation d'évolutions cœur en des temps de calcul raisonnables (de l'ordre de quelques jours) et en adéquation avec des moyens de calcul limités (maximum 32 CPU).

L'hypothèse simplificatrice principale dans la méthode FCU est l'utilisation de matériaux ubiquitaires, représentatifs de l'évolution moyenne d'un type de crayon au sein de plusieurs assemblages. Cette « astuce » de calcul combinée à une hypothèse d'homogénéité axiale de la composition combustible, dont la validité a été vérifiée, permet une réduction drastique du nombre de matériaux dont l'évolution est requise pour rendre compte de l'évolution du cœur.

En vue de vérifier la justesse de cette approche pratique de la FCU, la NDM a été adaptée au calcul d'évolution de cœur. Pour ce faire, toute la physique des équations de Bateman est encapsulée dans des bibliothèques de sections efficaces macroscopiques tabulées à la fois en puissance et en burnup. La génération de cette tabulation est effectuée par SMURE sur la base d'évolutions d'assemblages en milieu infini. Obtenir un calcul d'évolution précis nécessite l'utilisation d'une tabulation fine en puissance ce qui rend peu commode l'utilisation de ce moyen de calcul pour des études exploratoires de réacteurs innovants.

La comparaison des outils FCU et NDM s'effectue sur un cœur de SMR chargé d'un seul type d'assemblage et utilisant du combustible Th/U. L'accord entre les résultats se montre satisfaisant puisque, pour une date fixée, l'écart sur le burnup à l'échelle assemblage est d'au maximum 2 GW.j/ton . Les calculs neutroniques effectués en diffusion se montrent néanmoins trop imprécis pour fournir une estimation tangible des biais de calcul liés aux approximations de la méthode FCU. Soulignons que les résultats de la NDM sont, en définitive, sous-tendus par ceux d'évolutions SMURE. Une véritable validation de la méthode FCU reste donc à réaliser sur la base d'un benchmark (ou de données expérimentales pour une estimation plus tangible de la précision des résultats) mettant en œuvre des outils de calculs réellement indépendants.

Une étude préliminaire a également été menée afin de quantifier l'omission du détail axial lors de l'évolution. Elle est réalisée sur la comparaison de l'évolution d'un assemblage en milieu infini, avec et sans découpage axial. Du fait de l'aplatissement relativement rapide du profil de puissance, les différences en terme de burnup moyen sont limitées à environ 2 GW.j/ton . Bien que la prise en compte des contre-réactions thermiques dans l'évolution axiale ne remette pas en cause cette évaluation, l'influence du détail axial pourrait se révéler plus significative pour un groupe d'assemblages dont les niveaux de puissance diffèrent.

En définitive, une estimation prudente de la précision de la méthode FCU se situe entre 2 GW.j/ton et 4 GW.j/ton ¹³ pour des évolutions cœur d'environ 40 GW.j/ton , ce qui représente tout de même jusqu'à 10% du burnup final. Cependant, l'utilisation d'une chaîne de calcul plus conventionnelle, basée sur des calculs cœur déterministes, n'est sans doute pas beaucoup plus précise et semble beaucoup moins adaptée à nos besoins.

13. Chiffre issu de la comparaison FCU/NDM

Deuxième partie

Résultats et Analyses

Chapitre 4

Première application de la méthodologie de dimensionnement à un SMR chargé en Th/U

La première partie de ce chapitre développe l'intérêt du cycle thorium dans les réacteurs à eau légère. Elle s'attache à décrire et comprendre les ressorts du mécanisme de conversion, à la fois sur un plan théorique mais aussi sur plan pratique en évaluant les performances relatives à plusieurs niveaux de sous-modération.

La seconde partie est une première tentative d'application de notre méthodologie de dimensionnement sur un SMR, chargé en Th/U. Un pré-dimensionnement est opéré à l'échelle assemblage en milieu infini. Il permet de fixer un enrichissement ainsi que de fournir une évaluation des performances de sûreté. Une première approche de la gestion de la réactivité est également réalisée en considérant à la fois le bore soluble et divers poisons consommables.

Le passage à l'échelle cœur, grâce à la méthode FCU, permet d'introduire la contrainte du facteur de forme. Afin de garantir un refroidissement suffisant dans tout assemblage, un zonage à la fois de l'enrichissement et des poisons consommables devra être mis en place.

Enfin la dernière partie sera consacrée à l'évaluation des performances en sûreté des designs précédemment proposés. Il s'agira dans un premier temps de définir les conditions initiales des accidents, ici un REA, avant d'en évaluer les conséquences à l'échelle du cœur. Un passage en revue des principaux critères de sûreté, propres à ce type d'accident, est utilisé pour s'assurer objectivement de la fiabilité (ou non) du concept. Dans le cas des réseaux fortement sous-modérés, des pistes d'améliorations sont envisagées afin d'augmenter leurs marges de sûreté vis-à-vis des critères de thermohydraulique.

4.1 Intérêt du cycle thorium

4.1.1 Notion de cycle combustible

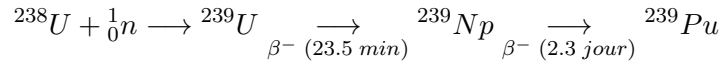
On appelle cycle un couple d'isotope fertile/fissile. Un isotope fissile est un isotope qui quel que soit l'énergie du neutron¹ incident peut fissionner. Dans la nature il n'existe que 4 noyaux fissiles :

isotope	^{233}U	^{235}U	^{239}Pu	^{241}Pu
$T_{1/2}$ (ans)	1.59×10^5	7.04×10^8	2.41×10^4	14.4

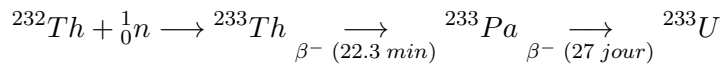
1. pas de seuil d'énergie à cette réaction

Compte tenu de leurs périodes de désintégration, seul l' ^{235}U est encore disponible de nos jours. Un isotope fertile est un noyau qui suite à une capture neutronique, donnera à l'issue d'une chaîne de décroissance radioactive un isotope fissile. Dans la nature il n'existe que deux cycles :

— le cycle : ^{238}U / ^{239}Pu :



— le cycle ^{232}Th / ^{233}U :

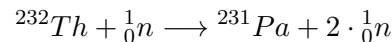


Historiquement l'intérêt s'est d'abord porté sur le cycle uranium/plutonium qui se met naturellement en place lorsque le combustible UOX est utilisé. Les neutrons produits par la fission de l' ^{235}U sont en partie capturés par l' ^{238}U qui au terme de sa chaîne de décroissance donne le ^{239}Pu . Le thorium n'est pas isotope fissile et l'uranium ^{233}U n'existe plus à l'état naturel. Pour démarrer le cycle thorium, il est donc nécessaire d'utiliser soit de l' ^{235}U soit du plutonium (239 ou 241). Dans la suite, l'aspect de mise en place du cycle thorium ne sera pas considéré. On supposera dans un premier temps avoir accès à un stock initial de ^{233}U pur.

Avantage du combustible thorié

Parmi les principaux arguments en faveur de l'utilisation du cycle thorium se trouvent :

- Son abondance. Le thorium est environ 3 fois plus abondant que l'uranium, il est également plus facile à extraire du minerai. Cependant il est présent en quantité beaucoup plus diluée que l'uranium ce qui oblige à traiter de plus gros volumes de roches.
- Le ^{232}Th ayant un nombre de nucléons moindre il faut plus de captures successives pour produire des actinides mineurs tel que l'américium (Am), le curium (Cm) ou le neptunium (Np). L'utilisation du thorium se traduit donc par une réduction significative de la production des actinides mineurs responsables d'une grande partie de la radiotoxicité du combustible irradié sur les temps longs. Cette affirmation doit cependant être nuancée. Le rendement de fission de l' ^{233}U est plus élevé d'un facteur trois pour le ^{90}Sr et d'environ 6 % pour le ^{137}Cs [71]. Or sur les temps courts (i.e première centaine d'années), la radiotoxicité est dominée par les produits de fission avec des temps de demi-vie de l'ordre de 30 ans soit principalement les deux isotopes précédemment cités. À ces échelles de temps, le thorium s'avère donc plus radiotoxique que le combustible issu de l'irradiation de l'uranium. La radiotoxicité du thorium repasse devant celle de l'uranium entre 4000 ans et 4×10^5 ans du fait de la production pendant l'irradiation de ^{231}Pa par la réaction :



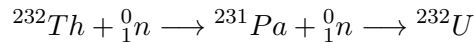
Cet isotope dont la demi-vie est de 32760 ans, est responsable de la majorité de la radiotoxicité dans le combustible thorié sur les échelles de temps longues [71], [72]. Au-delà de 4×10^5 ans la radiotoxicité du combustible uranium domine à nouveau celle du thorium. La réduction de la radiotoxicité est donc un critère relatif qui va dépendre du spectre neutronique pendant l'irradiation du combustible et de l'échelle de temps considérée.

- Placé sous forme d'oxyde comme le sont la plupart des combustibles en cœur, le ThO_2 présente un haut point de fusion à 3640 K, plus élevé que celui de l' UO_2 et du PuO_2 qui sont respectivement de 3120 K et de 2620 K [73]. Le ThO_2 possède également une meilleure conductivité thermique, d'environ 30% supérieure par rapport à celle de l' UO_2 à 1000 K[14]. Ces bonnes propriétés thermiques laissent présager un meilleur comportement du combustible en cas d'accident.

Inconvénient du combustible thorié

Plusieurs inconvénients viennent contre balancer les avantages du thorium :

- Le temps de vie relativement long du protactinium occasionne quelques effets indésirables :
 - Le cycle thorium met environ dix fois plus de temps que le cycle uranium pour aboutir à l'élément fissile. Il est nécessaire d'attendre une centaine de jours avant d'avoir un impact significatif de la conversion sur la réactivité.
 - Une fois le réacteur à l'arrêt, le protactinium continue à décroître augmentant ainsi au cours des mois suivants l'inventaire en ^{233}U . Cet phénomène, connu sous le nom d'effet protactinium, peut conduire à un retour en criticité du réacteur après son arrêt.
 - Du fait de son temps de vie en cœur et de sa section efficace microscopique non négligeable (≈ 10 barn), le protactinium peut subir des captures neutroniques. Plus le niveau de flux est élevé et plus la compétition entre sa décroissance et sa capture sont importantes. Dans un spectre de REP environ 2.5% des disparition du protactinium se font par des captures parasites [74].
- L'énergie libérée par la fission du ^{233}U est de 199 MeV contre 210.7 MeV pour la fission du ^{239}Pu [72]. Cette différence est non négligeable puisque pour une puissance donnée il sera nécessaire de fissionner 6% de ^{233}U en plus, se qui crée par la même occasion plus de produits de fission.
- Le ^{232}U est produit dans les réacteurs REP fonctionnant au combustible UOX ainsi qu'en RNR ou en CANDU, mais sa production est significativement plus importante dans les combustible thorié. Le ^{232}U provient de la réaction :



Il est à l'origine d'une chaîne de décroissance aboutissant au ^{208}Tl qui se désintègre lui même en ^{208}Pb en émettant un photon gamma de 2.6 MeV. Ce puissant rayonnement connaît une intensité maximale au bout de 10.2 ans [72]. Il rend le combustible thorié extrêmement dangereux à manier et nécessite une radioprotection renforcée pour l'aval du cycle. Vu sous l'angle de la prolifération cet inconvénient peut être tourné en avantage.

Prédisposition théorique du cycle Th/U à la régénération en spectre thermique

Pour justifier l'intérêt du cycle thorium face au cycle uranium dans les réacteurs REP, on retrouve souvent dans la littérature ([14], [72], [74]) le même raisonnement simplifié. Celui-ci fait l'analyse comptable, suite à une fission donnant ν neutrons, du nombre de neutrons encore disponibles une fois la réaction en chaîne maintenue et la régénération assurée. Seuls les noyaux fissiles et fertiles sont considérés.

Soit $\sigma_{U3,abs}$ $\sigma_{U3,fis}$ $\sigma_{U3,cap}$ les sections efficaces microscopiques respectivement d'absorption, de fission et de capture de l' ^{233}U . On supposera ici que $\sigma_{U3,abs} = \sigma_{U3,fis} + \sigma_{U3,cap}$. Pour une réaction d'absorption faite sur l'uranium 233, la probabilité d'avoir une fission s'exprime comme $\frac{\sigma_{U3,fis}}{\sigma_{U3,abs}}$. Pour s'assurer d'avoir une fission, plusieurs absorptions sont nécessaires. Plus précisément il faut en moyenne n absorptions, avec n tel que :

$$n \cdot \frac{\sigma_{U3,fis}}{\sigma_{U3,abs}} = 1$$

soit :

$$n = \frac{\sigma_{U3,abs}}{\sigma_{U3,fis}} = 1 + \frac{\sigma_{U3,cap}}{\sigma_{U3,fis}} = 1 + \alpha$$

où α est le rapport des sections efficaces de capture et de fission de l' ^{233}U . Le maintien de la réaction en chaîne exige donc de dépenser $1 + \alpha$ neutrons sur l' ^{233}U afin d'avoir une fission qui donnera la prochaine génération de neutrons.

Du point de vue du bilan isotopique, $1 + \alpha$ noyaux de ^{233}U ont subi une absorption et sont donc perdus. Pour les remplacer et ainsi atteindre la régénération, il est nécessaire de faire $1 + \alpha$ captures sur le fertile (et donc de perdre encore autant de neutrons) en supposant que la capture soit la seule réaction possible sur ce noyaux. Il reste donc au final N_d neutrons disponibles, avec N_d tel que :

$$N_d = \nu - \underbrace{(1 + \alpha)}_{\text{criticité}} - \underbrace{(1 + \alpha)}_{\text{régénération}}$$

Un nombre de neutrons disponibles négatif indique qu'il est strictement impossible d'atteindre la régénération. Le cas où $N_d > 1$ est une condition nécessaire mais pas suffisante pour que le système soit régénérateur. En effet, ce raisonnement fait l'hypothèse de pouvoir choisir les isotopes sur lesquels les neutrons vont réagir. En réalité, même en ne considérant que les isotopes fissiles et fertiles, il y a une compétition pour l'absorption entre les deux éléments qui n'est pas prise en compte dans ce raisonnement simplifié. De plus, ni les fuites ni les absorptions parasites dues aux matériaux de structures du cœur ne sont considérées. Les limitations de ce raisonnement analytique font que le nombre de neutrons disponibles est juste une indication théorique de l'efficacité de la conversion pour un cycle et un système donné.

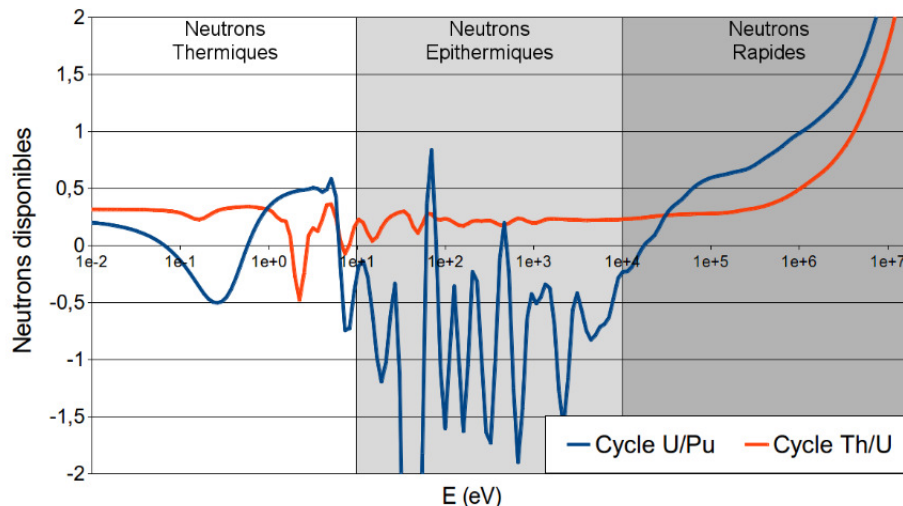


FIGURE 4.1: Nombre de neutrons disponibles après régénération en fonction de l'énergie pour les deux cycles fertile/fissile. Figure tirée de [74].

La figure 4.1 montre qu'en spectre thermique, le nombre de neutrons encore disponibles après avoir assuré la régénération et le maintien de la réaction en chaîne est positif en cycle thorium ce qui laisse espérer de bonnes performances en conversion. Dans [74], l'indicateur N_d est calculé en tenant compte du spectre neutronique d'un assemblage de REP standard. Ce nombre reste positif dans le cas du Th/U mais il est négatif en cycle U/Pu ce qui exclut toute possibilité de régénération. Notons également qu'en spectre rapide les deux cycles ont tous deux la possibilité d'être régénérateur même si le cycle U/Pu s'avère plus intéressant.

4.1.2 Les leviers de la conversion en cycle thorium dans les réacteurs à eau légère

Dans la suite on s'intéressera exclusivement au cycle thorium et au processus de conversion dans les réacteurs utilisant de l'eau légère. Bien que le fissile ^{233}U ne se trouve pas dans la nature, la question de sa provenance sera dans un premier temps écartée pour se concentrer

exclusivement sur les capacités intrinsèques du cycle Th/U. Le processus de conversion est caractérisé par le coefficient de conversion, abrégé en CR (pour *Conversion Ratio*). Cette variable se définit comme un rapport de taux de réaction :

$$CR = \frac{\text{fissile produit}}{\text{fissile consommé}} = \frac{\lambda_{233Pa} \cdot n_{233Pa} + \sigma_{U4,cap} \cdot n_{234U}}{\sigma_{U3,tot} \cdot n_{233U} + \sigma_{U5,tot} \cdot n_{235U}}$$

Avec :

λ_{233Pa} , la constante de décroissance du protactinium 233, soit environ 27 jours

n_{233Pa} , n_{233U} , n_{234U} , n_{235U} , respectivement la densité du ^{233}Pa , du ^{233}U , du ^{234}U et du ^{235}U , ($mol \cdot cm^{-3}$ ou $at. \cdot cm^{-3}$)

$\sigma_{U3,tot}$, $\sigma_{U5,tot}$, les sections efficaces microscopiques totale de l' ^{233}U et du ^{235}U , (*barn*).

$\sigma_{U4,cap}$, la section efficace microscopique de capture du ^{234}U , (*barn*)

En négligeant les contributions des noyaux d' ^{234}U et ^{235}U et en supposant le ^{233}Pa proche de l'équilibre, le CR peut se simplifier comme :

$$CR \approx \frac{\sigma_{Th,cap}}{\sigma_{U3,tot}} \cdot \frac{n_{232Th}}{n_{233U}}$$

Avec n_{232Th} la densité de ^{232}Th et $\sigma_{Th,cap}$ sa section efficace de capture.

Cette écriture permet de distinguer les deux principaux leviers d'amélioration de la conversion. Pour augmenter le CR il est possible de :

- Diminuer l'enrichissement fissile. Cela a pour effet d'augmenter le ratio $\frac{n_{232Th}}{n_{233U}}$ et donc par extension le CR. Cette solution est mise en œuvre lorsque l'on utilise une hétérogénéisation du combustible en deux zones. La première zone, appelée la *seed* (graine), est fortement enrichie et sert à alimenter une seconde zone fertile appelée la *blanket* (couverture fertile). La *blanket* est faiblement enrichie de façon à privilégier la conversion. L'hétérogénéité peut se situer à divers niveaux : entre crayons d'un même assemblage ou à l'échelle de plusieurs assemblages. Cette méthode a l'inconvénient d'introduire en cœur des zones ayant des densités de puissance très différentes. Ces disparités dans le facteur de forme imposent de diminuer l'élévation de la température moyenne du caloporteur en cœur.
- Durcir le spectre. Cette option joue sur le rapport $\frac{\sigma_{Th,cap}}{\sigma_{U3,tot}}$ qui est plus favorable en spectre épithermique et rapide. Le durcissement du spectre neutronique s'opère par la diminution du rapport de modération. Le rapport de modération, abrégé en RM, est défini comme le rapport du volume de modérateur sur le volume de combustible dans une cellule élémentaire du réacteur. Plus ce RM est faible et moins il y a de modérateur, les neutrons sont donc moins thermalisés, ce qui conduit au durcissement du spectre. Cette solution est principalement limitée par des considérations thermohydrauliques. Pour garantir une extraction de chaleur inchangée, le débit du caloporteur doit être augmenté, ce qui accroît les pertes de charges et rend l'écoulement moins uniforme, comme décrit dans [18].

Historiquement ces deux solutions ont chacune été envisagées, la plupart du temps conjointement, pour donner naissance à plusieurs concept de réacteurs ayant parfois abouti à des programmes expérimentaux couronnés de succès :

- Le Réacteur Convertible à Variation de Spectre (RCVS) est un concept de réacteur développé par Framatome dans les années 80. Il utilise des assemblages sous-modérés et le retrait progressif, au cours du cycle, de crayons fertiles pour gérer la réactivité [75].
- Le concept de réacteur SSCR (Spectrum Shift Control Reactor), testé dans le réacteur BR3/Vulcain dans les années 60 [76]. En début de cycle, le durcissement du spectre est opéré par un remplacement complet de l'eau légère du primaire par de l'eau lourde. Puis

au cours de l'évolution, la proportion d'eau légère mélangée à l'eau lourde est graduellement augmentée afin de compenser dynamiquement la baisse de réactivité.

- La solution la plus emblématique restant le réacteur LWBR (pour *Light Water Breeder Reactor*) de Shippingport qui a démontré expérimentalement la possibilité d'une haute conversion dans un réacteur à eau légère [77]. Les assemblages de ce concept sont également sous-modérés. De plus le cœur du réacteur est divisé en zones fissiles et fertiles de RM différent. Le LWBR est également caractérisé par sa gestion de la réactivité atypique, où la partie *seed* de certains assemblages était progressivement insérée en cœur pour compenser la baisse de réactivité.

Ces études démontrent que pour parvenir à la régénération du combustible, les réacteurs envisagés devaient s'éloigner fortement du concept des REP. Des méthodes de gestion de la réactivité innovantes doivent être mises en place pour améliorer l'économie de neutrons. Les designs complexes qui en découlent aboutissent à des burnups trop faibles pour susciter un intérêt industriel. A contrario, l'étude des Réacteurs à Eau Légère à Haut Facteur de Conversion (REL HFC) s'attache à modifier le moins possible le design des réacteurs déjà existants pour améliorer au mieux leur facteur de conversion. C'est dans ce cadre que se placent nos études de design de SMR fonctionnant au Th/U. Les REL HFC continuent d'être le sujet de recherches actives. Les configurations hétérogènes ont notamment été revisitées au travers du concept Radkowsky Thorium Reactor [78]. Néanmoins, le gain apporté par l'hétérogénéisation se révèle assez modeste au regard des difficultés occasionnées. La diminution du rapport de modération reste donc l'axe principal d'amélioration du facteur de conversion comme montré dans [13], [18] et [79].

Dans [80], l'auteur montre que porter le CR des REP de 0.7 à 0.85 permet de doubler l'utilisation de la ressource naturelle. Pour le thorium aucun objectif précis de la sorte n'est avancé. Néanmoins pour justifier la mise en place du cycle thorium dans les réacteurs à eau, les performances en conversion doivent être a minima équivalentes et dans l'idéal (significativement) supérieures. Cependant gardons à l'esprit que la question du niveau de conversion à atteindre n'est pas moins importante que la question du coût pour y parvenir. Les études de REL HFC se doivent donc d'identifier des concepts pertinents du point de vue de la conversion, de faire transparaître les pertes associées, en terme de burnup ou de marges de sûreté, et d'essayer dans la mesure du possible de statuer sur la pertinence du concept vis-à-vis des standards actuels. Dans la suite nous essayerons de nous conformer à ces impératifs.

4.1.3 Antagonisme burnup/conversion, un éclairage théorique du phénomène

Énoncé du « paradoxe »

Dans toutes les études sur les réacteurs à eau légère (cf. [13], [18], [79]) visant à atteindre un CR élevé, le burnup final est toujours modeste, de l'ordre de 15 à 25 $GW.j/ton$, contre 40 à 50 $GW.j/ton$ pour les burnup industriels. Ce constat peut paraître paradoxal puisque une partie significative du fissile est remplacée au cours du cycle. Une conversion élevée devrait à première vue coïncider avec des burnup élevés.

Un premier élément permettant de lever le paradoxe est apportée par l'analyse du CR précédemment menée. Pour obtenir le CR plus élevé possible il est préférable d'augmenter le rapport $\frac{n_{232Th}}{n_{233U}}$, ce qui signifie l'utilisation d'enrichissements faibles. La réserve de réactivité initiale étant faible, sans une conversion soutenue, la longueur du cycle est courte.

En pratique on constate qu'il faut choisir entre combustion ou conversion. Il est intéressant d'identifier la source de cet antagonisme pour comprendre comment obtenir le meilleur compromis entre ces deux aspects afin de conclure sur le potentiel des REL HFC au regard des attentes industrielles.

Modèle numérique

Le phénomène de conversion est intimement lié aux problématiques d'enrichissement, de réserve de réactivité et de burnup. Pour comprendre la mécanique de la conversion, un modèle numérique simplifié est implémenté. L'objectif de ce modèle est de mieux comprendre la dépendance entre la longueur du cycle (burnup) et le processus de conversion tout en permettant d'identifier et d'agir aisément sur des paramètres clefs.

Ce modèle consiste à simuler de façon minimaliste l'évolution d'un réacteur grâce au suivi des principaux isotopes impliqués dans le processus de conversion et ceux déterminant dans la longueur du cycle, à savoir : l' ^{233}U , le ^{232}Th , le ^{233}Pa . Les concentrations de ^{135}I , de ^{135}Xe , de ^{149}Sm et de ^{149}Pm sont également modélisées du fait de leurs importances dans l'évolution de la réactivité. Tous les autres produits de fissions sont pris en compte par la modélisation d'un seul isotope équivalent indicé ω (comme *waste*).

Les équations résolues sont :

$$\begin{aligned} \frac{dn_{U3}}{dt} &= -\sigma_{(U3,tot)} \cdot n_{U3} \cdot \phi + \lambda_{Pa3} \cdot n_{Pa3} \\ \frac{dn_{Th}}{dt} &= -\sigma_{(Th,tot)} \cdot n_{Th} \cdot \phi \\ \frac{dn_{Pa3}}{dt} &= (\sigma_{(Th(n,\gamma))} \cdot n_{Th} - \sigma_{(Pa3,tot)} \cdot n_{Pa3}) \cdot \phi - \lambda_{Pa3} \cdot n_{Pa3} \\ \frac{dn_{I5}}{dt} &= (\gamma_{I5} \cdot \sigma_{(U3,fis)} \cdot n_{U3} - \sigma_{(I5,tot)} \cdot n_{I5}) \cdot \phi - \lambda_{I5} \cdot n_{I5} \\ \frac{dn_{Xe5}}{dt} &= (\gamma_{Xe5} \cdot \sigma_{(U3,fis)} \cdot n_{U3} - \sigma_{(Xe5,tot)} \cdot n_{Xe5}) \cdot \phi + \lambda_{I5} \cdot n_{I5} - \lambda_{Xe5} \cdot n_{Xe5} \\ \frac{dn_{Pm9}}{dt} &= (\gamma_{Pm9} \cdot \sigma_{(U3,fis)} \cdot n_{U3} - \sigma_{(Pm9,tot)} \cdot n_{Pm9}) \cdot \phi - \lambda_{Pm9} \cdot \phi n_{Pm9} \\ \frac{dn_{Sm9}}{dt} &= (\gamma_{Sm9} \cdot \sigma_{(U3,fis)} \cdot n_{U3} - \sigma_{(Sm9,tot)} \cdot n_{Sm9}) \cdot \phi + \lambda_{Pm9} \cdot \phi n_{Pm9} - \lambda_{Sm9} \cdot n_{Sm9} \\ \frac{dn_w}{dt} &= (1 - (\gamma_{I5} + \gamma_{Xe5} + \gamma_{Pm9} + \gamma_{Sm9})) \cdot \sigma_{(U3,fis)} + \sigma_{(I5,tot)} \cdot n_{I5} \\ &\quad + \sigma_{(Xe5,tot)} \cdot n_{Xe5} + \sigma_{(Pm9,tot)} \cdot n_{Pm9} + \sigma_{(Sm9,tot)} \cdot n_{Sm9}) \cdot \phi \end{aligned}$$

Avec :

n_{U3} , n_{Th} , n_{Pa3} , n_{I5} , n_{Xe5} , n_{Pm9} , n_{Sm9} , n_w , respectivement les densités atomiques du ^{233}U , ^{232}Th , ^{233}Pa , ^{135}I , ^{135}Xe , ^{149}Pm , ^{149}Sm et ω (pour *waste*), un isotope fictif représentant l'ensemble des produits de fissions.

$\sigma_{(U3,tot)}$, $\sigma_{(U3,fis)}$, respectivement les sections efficaces microscopiques totale et de fission de l' ^{233}U fixées à une valeur de 66.26 et 59.0 barn

$\sigma_{(Th,tot)}$, $\sigma_{(Th(n,\gamma))}$, $\sigma_{(Th,fis)}$ respectivement les sections efficaces microscopiques totale, de capture et de fission du ^{232}Th fixées à une valeur de 1.1, 2.32×10^{-2} et 1.076 barn.

$\sigma_{(I5,tot)}$, $\sigma_{(Xe5,tot)}$, $\sigma_{(Pm9,tot)}$, $\sigma_{(Sm9,tot)}$, les sections microscopiques totales du ^{135}I , ^{135}Xe , ^{149}Pm , ^{149}Sm respectivement fixées à 7.6, 2.6×10^6 , 162 et 7800 barn.

γ_{I5} , γ_{Xe5} , γ_{Pm9} , γ_{Sm9} , les rendement de fissions des isotopes correspondant, respectivement fixés à 2.91×10^{-2} , 7.139×10^{-3} , 1.11×10^{-2} et 6.6×10^{-3}

λ_{Pa3} , λ_{I5} , λ_{Xe5} , λ_{Pm9} , λ_{Sm9} , les constantes de désintégrations des noyaux correspondants.

Les valeurs moyennes des sections efficaces sont gardées constantes au cours de l'évolution. Elles sont fixées sur la base d'une simulation d'évolution SMURE d'un assemblage 17x17 en milieu infini, fonctionnant avec le combustible Th/U enrichi à 3.0 at% en ^{233}U . La densité initiale

de noyaux lourds est également prise identique à celle comprise dans le volume combustible d'un assemblage 17x17. Le flux neutronique se déduit de la puissance imposée pendant l'évolution :

$$\phi = \frac{P}{Q \cdot (\sigma_{(Th,fis)} \cdot n_{Th} + \sigma_{(U3,fis)} \cdot n_{U3})}$$

Avec :

P , la puissance imposée en W.

Q , la puissance libérée en J par une fission, fixée à $3.184 \times 10^{-11} J \cdot fission^{-1}$

La puissance imposée est de 10.11 MW ce qui correspond à la puissance moyenne d'un assemblage d'un SMR de 89 assemblages produisant 900 MW_{th} (voir chapitre 1 pour les dimensions du SMR en question). Les équations d'évolution sont intégrées selon la méthode Runge-Kutta d'ordre 2 [50], pour un pas de temps très faible ($\approx 1 s$) devant la cinétique du système. L'évolution des inventaires est stoppée lorsque la réserve de réactivité du réacteur est épuisée, c'est à dire lorsque $k_{eff} < 1$ avec k_{eff} s'exprimant comme :

$$k_{eff} = \frac{\nu \cdot (\sigma_{(U3,fis)} \cdot n_{U3} + \sigma_{(Th,fis)} \cdot n_{Th})}{\Sigma_{réacteur} + \sum_i \sigma_{(i,tot)} \cdot n_i} \quad (4.1)$$

$$\begin{aligned} \sum_i \sigma_{(i,tot)} \cdot n_i &= \sigma_{(U3,tot)} \cdot n_{U3} + \sigma_{(Th,tot)} \cdot n_{Th} + \sigma_{(Pa3,tot)} \cdot n_{Pa3} \\ &+ \sigma_{(I5,tot)} \cdot n_{I5} + \sigma_{(Xe5,tot)} \cdot n_{Xe5} + \sigma_{(Pm9,tot)} \cdot n_{Pm9} \\ &+ \sigma_{(Sm9,tot)} \cdot n_{Sm9} + \sigma_{(w,tot)} \cdot n_w \end{aligned} \quad (4.2)$$

Avec :

k_{eff} , le facteur de multiplication effectif du réacteur.

$\Sigma_{réacteur}$, la section efficace macroscopique d'absorption des structures du réacteur (eau et gaine combustible), estimée à $2.62 \times 10^{-2} cm^{-1}$. Cette grandeur ne tient pas compte d'un éventuel taux de fuite neutronique.

$\sigma_{(w,tot)}$ la section efficace microscopique d'absorption du produit de fission représentatif

La section efficace du produit de fission ω est calculée de façon à reproduire approximativement la longueur d'un cycle issu d'un calcul infini mené avec SMURE sur l'assemblage précédemment décrit. Avec $\sigma_{(w,tot)} = 15$ barn, la longueur cycle est de 28850 $MW.j/ton$, ce qui surestime d'environ 700 $MW.j/ton$ le burnup final par rapport au calcul SMURE. Le CR final est alors de 0.80 dans cette modélisation simplifiée contre 0.79 dans la modélisation SMURE (voir figure 4.2). Sur la base de ces résultats, le modèle simplifié est jugé assez satisfaisant pour permettre d'identifier les clefs du mécanisme de conversion.

Les sections efficaces sont artificiellement modifiées de façon à mettre en avant la dépendance et l'importance du processus sur le burnup. Bien entendu, ces modifications n'ont aucun équivalent physique. Pour améliorer la conversion il a été choisi d'augmenter le terme $\sigma_{(Th,(n,\gamma))}$. En pratique la longueur du cycle est fixée par le niveau d'enrichissement, cependant l'analyse du CR a démontré que le niveau de conversion dépendait d'une compétition entre les noyaux fissiles et fertiles. Afin de ne pas interférer avec le processus de conversion, l'augmentation du burnup se fera via une diminution de la section efficace des produits de fission : $\sigma_{(w,tot)}$.

Résultats : les différents régimes d'évolution du CR

Quel que soit le niveau de CR, le processus de conversion participe au maintien de la criticité en réduisant la cinétique de consommation du fissile, il permet donc un gain en burnup plus ou

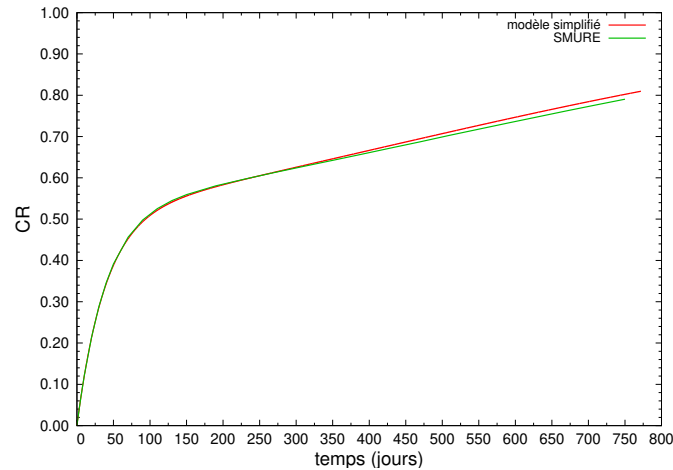


FIGURE 4.2: Évolution du CR d'un assemblage 17x17 chargé en Th/U enrichi à 3.0 at% en ^{233}U . Comparaison menée entre le modèle simplifié précédemment décrit et SMURE.

moins important. Réciproquement, la longueur du cycle a également un impact sur le niveau de conversion moyen en empêchant ou en permettant le développement de certains régimes du CR.

En effet on peut distinguer plusieurs régimes d'évolution du CR. Le premier régime, que l'on appellera « phase protactinium », consiste toujours en un accroissement rapide et quasi-linéaire du CR. Il correspond à la constitution d'un stock de protactinium ^{233}Pa inexistant à l'instant initial du cycle. Du fait de sa période de désintégration, d'approximativement 27 jours, ce stock de protactinium atteint un quasi équilibre à environ 100 jours (soit $\approx 3 \times \lambda_{Pa3}^{-1}$). L'évolution de la densité de ^{233}Pa est ensuite beaucoup plus lente et dépend soit de la quantité de ^{232}Th soit de la quantité de ^{233}U . La fin de ce régime est caractérisée par un changement de pente du CR (voir figure 4.2). Si la réserve de réactivité n'est pas suffisante pour aller au-delà de la constitution du stock de protactinium alors la conversion amènera un gain en burnup négligeable et ce quel que soit les dispositions prises pour favoriser la conversion. Notons que le CR atteint à la fin du régime protactinium est bien prédit par l'approximation de quasi-équilibre : $CR_{\text{éq}} \approx \frac{\sigma_{Th, cap}}{\sigma_{U3, tot}} \cdot \frac{n_{232Th}}{n_{233U}}$.

Il existe ensuite deux possibilités en fonction du CR atteint à la fin du premier régime :

- Soit le CR est supérieur à 1, le système est alors temporairement sur-générateur. À titre d'illustration, la figure 4.3 propose, à burnup équivalent, la simulation de deux situations : une fortement sur-génératrice et une autre faiblement sur-génératrice. Une fois le régime protactinium passé, le stock de fissile d' ^{233}U augmente significativement, ce qui entraîne également une augmentation temporaire² de la réactivité. Parallèlement, le stock de noyaux fertiles est consommé. Du fait de la dépendance du CR au rapport $\frac{n_{Th}}{n_{U3}}$, celui-ci ne peut que diminuer. Le système quitte alors son mode sur-générateur pour passer dans un régime sous-générateur ici désigné par le terme de « post-générateur ». Après avoir diminué le stock de fertile, la consommation de fissile du régime post-générateur permet au couple fissile/fertile de trouver un équilibre qui aboutit à une quasi-stabilisation du CR en dessous de l'unité.
- Soit le CR est inférieur à 1, le système est alors sous-générateur et c'est principalement le fissile qui est consommé. Puisque l'enrichissement fissile diminue, ce régime d'évolution est caractérisé par un CR croissant dû au rapport $\frac{n_{Th}}{n_{U3}}$ qui augmente. En pratique à cela peu s'ajouter un effet de thermalisation du spectre lié à la fois à la disparition de l' ^{233}U et à l'apparition des produits de fission qui vont dépeupler la partie épithermique du

2. Une seconde remontée de la réactivité due au mécanisme de conversion n'est pas possible puisqu'il s'agit d'un système d'équations d'ordre 1 dont aucun paramètre n'est périodique.

spectre neutronique [18]. Ce phénomène, se traduit par une dérive des valeurs moyennes des sections efficaces microscopiques, qui n'est pas prise en compte dans notre modèle simplifié. L'accroissement du CR peut se révéler non négligeable. Pour un combustible Th/U enrichi à 3 at% dans assemblage typique de REP, la première phase se termine avec un CR entre 0.5 et 0.6. Le second régime sous-générateur s'achève avec un CR d'environ 0.8, comme montré par la figure 4.2.

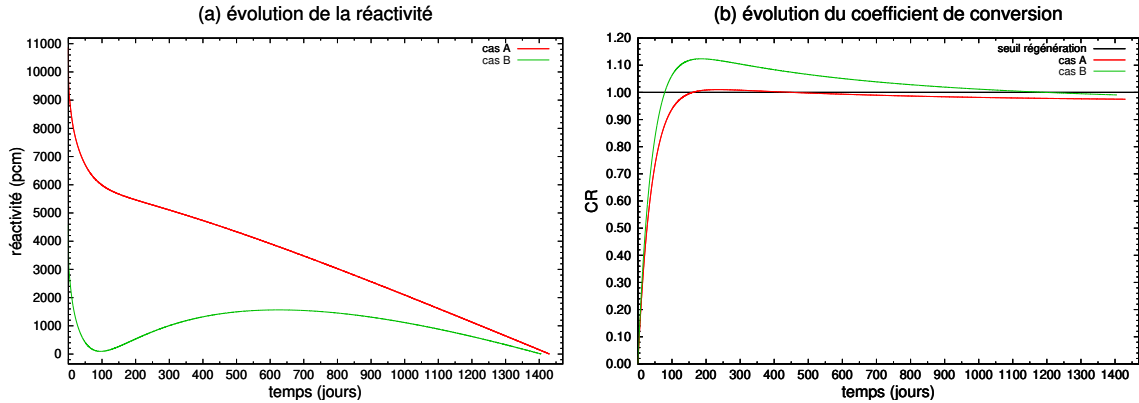


FIGURE 4.3: Le cas A est une configuration faiblement régénératrice obtenue en multipliant $\sigma_{Th,(n,\gamma)}$ par 1.9 et en multipliant la section efficace $\sigma_{tot,w}$ par 0.5. Le cas B, représente une configuration fortement surgénératrice obtenue en multipliant $\sigma_{Th,(n,\gamma)}$ par 2.17 et en multipliant la section efficace $\sigma_{tot,w}$ par 0.53. Le burnup final obtenue dans les deux configurations est de l'ordre de 53 GW.j/ton . Ces résultats sont obtenus avec le modèle numérique simplifié précédemment présenté.

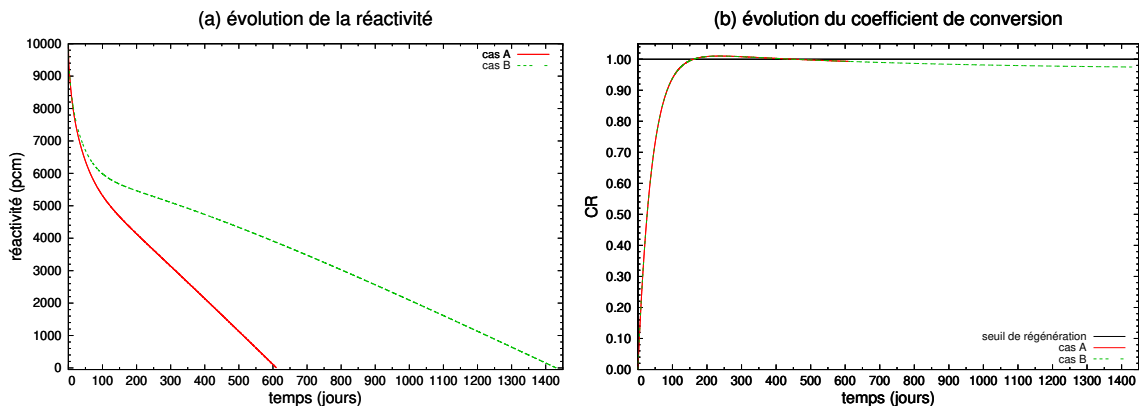


FIGURE 4.4: Évolution de la réactivité et du facteur de conversion d'un assemblage 17x17, enrichi à 3 at% en ^{233}U par un modèle simplifié d'évolution. La configuration A est obtenue par application d'un facteur 1.9 à la section efficace $\sigma_{Th,(n,\gamma)}$. La configuration B est obtenue en appliquant un facteur 1.9 à la section efficace $\sigma_{Th,(n,\gamma)}$ et un facteur 0.5 à la section efficace $\sigma_{tot,w}$.

La longueur du cycle est principalement déterminée par la compétition entre la vitesse de disparition du stock de fissile et l'accumulation des produits de fission (qui ne disparaissent pas malgré leur irradiation). Ainsi pour les configurations décrites figure 4.4, une diminution d'un facteur 2 de $\sigma_{w,tot}$ est amène de doubler le burnup et ce en dépit d'un haut niveau de conversion. La dépendance du burnup au CR n'est donc que partielle et en théorie le cycle peut s'arrêter

quel que soit le niveau de conversion ou le régime d'évolution du CR.³

Les concepts à haut facteur de conversion proposent généralement une gestion innovante de la réactivité qui permet en début de cycle d'utiliser les neutrons excédentaires pour alimenter le mécanisme de conversion. À mesure que la réactivité diminue, à cause de l'accumulation des produits de fission, de moins en moins de neutrons peuvent être alloués à la conversion d'où la mise en place de dispositifs complexes pour contrôler l'intensité de la conversion en cours de cycle (e.g retrait de barre absorbante). De même, le modèle simplifié permet de comprendre que diminuer le $\Sigma_{réacteur}$ permet, à enrichissement égal, de disposer d'une plus grande réserve de réactivité et donc de consacrer plus de neutrons sur une durée plus longue à la conversion. Il en est de même pour le taux de fuite du réacteur qui doit être minimisé. Enfin, appliquer une densité de puissance moins importante pendant l'évolution permet de stabiliser la quantité d'isotopes ^{135}Xe et ^{149}Sm à des niveaux plus bas, ce qui dégage à nouveau une marge de réactivité pouvant être mise à profit pour la conversion.

Conclusions

La variabilité du coefficient de conversion au cours du cycle rend toute valeur ponctuelle (telle que la valeur finale) non représentative de l'ensemble du cycle. Usuellement l'apport de la conversion au burnup est analysée au travers deux indicateurs [13] : le FIR (*Fissile Inventory Ratio*), qui correspond au rapport de la masse fissile finale sur la masse fissile initiale, et le burnup. Pour rendre la comparaison plus aisée entre deux systèmes, une nouvelle variable, appelée ICR pour *Integrated Conversion Ratio* ou en français rapport de conversion intégré, est introduite. Elle se définit comme :

$$ICR = \frac{\int_{\forall t} \text{production fissile}}{\int_{\forall t} \text{disparition fissile}}$$

Notons qu'en ne considérant que l'ICR, un système sous-générateur peut, du point de vue du cycle, se montrer tout aussi performant qu'un système temporairement sur-générateur.

Pour un poids neutronique donné des produits de fission, l'enrichissement est le sujet d'un compromis entre le burnup et la conversion [14]. Pour profiter de l'effet bénéfique de la conversion sur le burnup il faut un enrichissement suffisant pour dépasser le régime protactinium. Cependant un allongement du cycle trop important, qui a recours à des enrichissements de plus en plus élevés, va détériorer le rapport $\frac{n_{Th}}{n_{U3}}$ et donc l'ICR. Il existe donc un enrichissement optimal où la conversion est utilisée au mieux dans le but de produire de l'énergie. Pour caractériser cet optimum la variable de BU_{eff} (abrégé en BU_{eff}) est proposée. Elle se définit comme :

$$BU_{eff} = \frac{\text{énergie produite}}{\text{masse fissile, initiale} - \text{masse fissile, finale}}$$

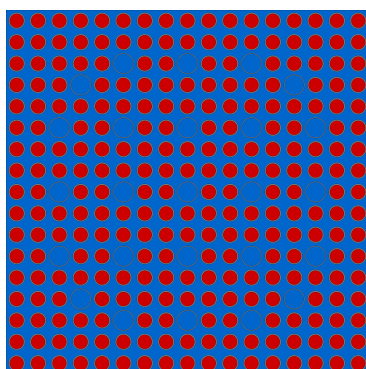
Le BU_{eff} correspond simplement au rendement énergétique du réacteur vis-à-vis de sa consommation nette de fissile. Cette variable permet de circonscrire une gamme d'enrichissement où la ressource fissile est la mieux utilisée physiquement, pour un réacteur donné. Cette configuration participe donc à l'économie des ressources fissiles. Elle suppose néanmoins qu'un recyclage du combustible soit possible afin d'extraire la matière fissile non consommée en fin de cycle.

3. En pratique, il existe un cas sur-générateur où le rebond en réactivité intervient au niveau du seuil de criticité. Pour une conversion un peu trop importante, la réactivité passe sous le seuil de criticité. Pour une conversion un peu moins importante, la réactivité ré-augmente avant de passer sous le seuil de criticité lui permettant de fonctionner significativement plus longtemps que dans le premier cas. Dans cette situation très particulière on observe donc un effet de seuil sur le burnup.

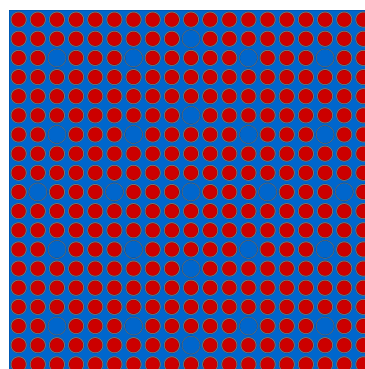
4.1.4 Exploration numérique de la haute conversion par sous-modération en cycle Th/U

Une exploration large et rapide du potentiel des réacteurs à eau légère pour la haute conversion et leurs performances en combustion associées est proposée. Cette étude se base sur un ensemble d'évolutions, calculées avec SMURE, pour différentes configurations d'assemblages en milieu infini et chargés en combustible Th/U. Comme expliqué précédemment, l'enrichissement doit faire l'objet d'un compromis car il altère les performances globales en conversion. Afin de cerner cette dépendance et les plages d'enrichissement les plus intéressantes, une large gamme d'enrichissement est considérée. Elle couvre des valeurs allant de 1 %at en ^{233}U à 11.5 %at par pas de 0.5 %at.

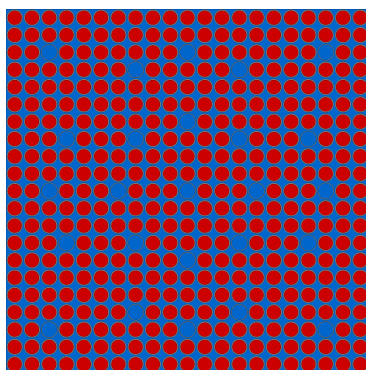
La sous-modération s'avère indispensable pour atteindre des niveaux intéressants d'ICR [14]. Pour circonscrire les niveaux de modération les plus intéressants dans le compromis conversion/burnup, plusieurs RM sont envisagés dans cet étude. La sous-modération est explorée graduellement en diminuant le pas du réseau d'un assemblage de REP dont les dimensions sont gardées identiques. L'assemblage standard de REP est composé de 17 cellules élémentaires par côtés, il est désignée dans la suite sous le terme d'assemblage 17x17. Des crayons sont ajoutés de part et d'autre de chaque côté de l'assemblage de manière à en conserver la symétrie. Le nombre de tubes guides est aussi conservé ainsi que leurs emplacements approximatifs. Ces dispositions aboutissent à deux nouvelles configurations, nommées 19x19 et 21x21 (cf. 4.5 (b) et (c)).



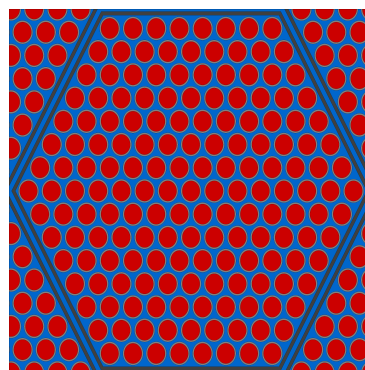
(a) Assemblage 17x17



(b) Assemblage 19x19



(c) Assemblage 21x21



(d) Assemblage hexagonal

FIGURE 4.5: Niveau de sous-modération explorés en eau légère pour atteindre la haute conversion

Avec un réseau carré et un nombre impair de crayons par côté d'assemblage, il n'est pas pos-

sible de poursuivre le processus de sous-modération puisque dans un assemblage 23x23 les gaines des crayons s'interpénètrent. Une dernière configuration est donc envisagée avec un maillage hexagonal, noté dans la suite HEX.

La compacité théorique d'un réseau est une notion utilisée en cristallographie pour rendre compte de la densité maximale d'occupation. Elle se définit simplement comme :

$$\text{compacité} = \frac{V_{\text{occupé}}}{V_{\text{total}}}$$

La compacité d'un réseau cubique est d'au maximum 78%, celle d'un réseau hexagonal est de 90%. Les réseaux hexagonaux sont donc plus indiqués pour atteindre de faibles rapports de modération. En conservant le boîtier d'un assemblage standard de VVER-400, 169 crayons combustibles sont placés sur 8 couronnes, (cf. figure 4.5, (d)). Le pas du réseau est alors de 1.09311 cm. Aucun tube guide n'est placé dans cet assemblage afin de minimiser le rapport de modération. Le rapport de modération ainsi obtenu est plus faible que dans l'assemblage 21x21 comme indiqué dans le tableau 4.1. Pour s'assurer d'un refroidissement convenable des assemblages hexagonaux dont le RM est inférieur à 0.8, l'article [81] montre qu'il est nécessaire de diminuer la densité de puissance dans le combustible et de modifier le débit massique du caloporteur de façon à limiter les pertes de charges. S'agissant d'une étude préliminaire dont le but est de donner estimation de l'apport asymptotique de la sous-modération à la conversion, nous ne tiendrons pas compte de ces considération thermohydrauliques lors de l'évolution de l'assemblage HEX.

configuration	17x17	19x19	21x21	HEX
RM	2.01	1.29	0.78	0.61

Tableau 4.1: Rapport de modération obtenu pour les différentes configurations sous-modératrices envisagées.

Les assemblages considérés sont ceux utilisés dans le SMR Th/U, leur hauteur est de 2.3 m. Les évolutions des différentes configurations sont menées par SMURE. Les faces latérales des assemblages sont réfléchies, un plenum supérieur et inférieur de 20 cm est appliqué aux extrémités axiales. La composition du combustible est considérée comme homogène dans tout l'assemblage.

Le niveau de puissance est imposé à 10.11 MW dans les réseaux carrés. L'augmentation du nombre de crayons dans les configurations 19x19 et 21x21 se traduit donc par une diminution de la densité de puissance par crayon. Dans l'assemblage hexagonal, la puissance imposée est d'environ 5.9 MW par assemblage, ce qui impose une densité de puissance par crayon équivalente à celle du cas 17x17.

Analyse de l'ICR

La figure 4.6 présente l'ICR obtenu pour les différents niveaux de sous-modération testés et selon différents enrichissements. Ces résultats confirment une amélioration de l'ICR grâce à la sous-modération. Pour un RM inférieur à celui de l'assemblage 21x21 il n'y a pas d'augmentation significative de l'ICR. Ce résultat à priori surprenant pourrait-être attribué à la présence des plena en eau ainsi qu'à l'application d'une puissance volumique différente, ce qui change le niveau d'empoisonnement durant l'évolution. Une sous-modération accrue ne présente donc plus de réel d'intérêt du point de vue de la conversion. Le durcissement du spectre due à la sous-modération entraîne une diminution des sections efficaces microscopiques moyennes ce qui explique le décalage des courbes de l'ICR vers des enrichissements plus importants avec l'utilisation de réseaux serrés.

L'effet négatif de l'enrichissement sur la conversion est également clairement mis en avant par cette étude. Un enrichissement minimal est requis pour passer la phase protactinium et parvenir à des niveaux de CR plus élevés. Mais très rapidement, l'enrichissement devient trop élevé. La dépendance du CR au rapport $\frac{n_{Th,(n,\gamma)}}{n_{U3,tot}}$ implique alors de faible valeur du CR pendant toute la durée du cycle. Les meilleures performances en conversion sont circonscrites dans une gamme étroite d'enrichissement comprise entre 1.5 à 3.0 at%.

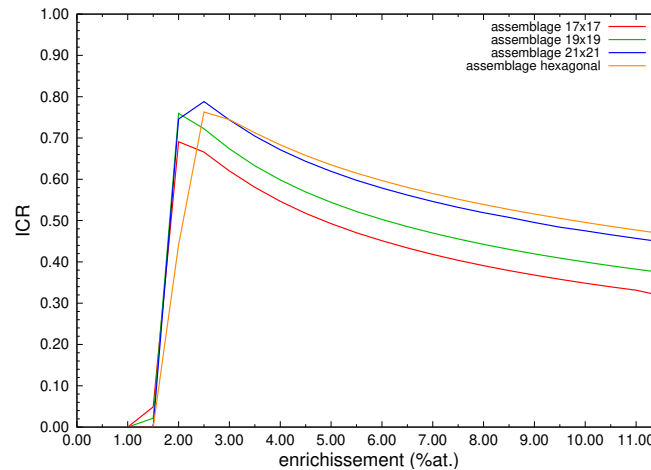


FIGURE 4.6: Rapport de conversion intégré (ICR) pour différents niveaux de sous-modération d'un assemblage REP et d'un assemblage hexagonal.

Dans un assemblage classique de REP fonctionnant à l'UOX, l'ICR est d'environ 0.55. L'utilisation du thorium permet donc une amélioration significative de la conversion dans la même gamme d'enrichissement. Cependant, en dépit de l'utilisation d'une sous-modération accrue, le « CR moyen » maximal constaté dans nos études, reste en dessous de l'objectif de 0.85 [80] permettant une économie de combustible significative à l'échelle du cycle. Enfin notons que les concepts les plus intéressants sont également ceux les plus problématiques du point de vue thermohydraulique.

Analyse du burnup effectif

L'analyse des performances en conversion doit nécessairement être mise en relation avec les performances en combustion. En effet si le rechargement est trop fréquent alors le gain obtenu sur la ressource combustible est perdue dans l'énergie dépensée pour le retraitement de cette dernière.

La figure 4.7 présente l'évolution du burnup et du BU_{eff} obtenus en fonction de l'enrichissement et du niveau de sous-modération. L'évolution du BU_{eff} est très similaire à celle de l'ICR ce qui illustre le lien fort entre ces variables. Les maxima de BU_{eff} sont plus élevés dans les configurations où la sous-modération est la plus importante. Les performances des configurations 21x21 et hexagonale sont très similaires, ce qui confirme qu'il existe un seuil au-delà duquel la sous-modération n'est plus efficace.

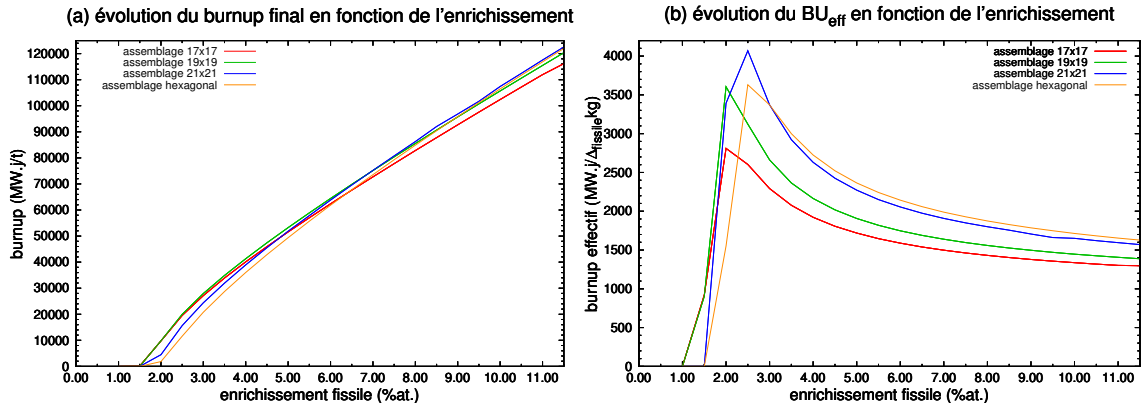


FIGURE 4.7: Burnup final et BU_{eff} pour différents niveaux de sous-modération d'un assemblage REP et d'un assemblage hexagonal.

Les régions les plus intéressantes en termes de conversion (entre 1 et 3 %at) correspondent à des burnups modestes, de l'ordre de 20 à 30 $GW.j/ton$. Or, les études réalisées sont faites en milieu infini où aucun seuil de fuite n'est appliqué. Il est donc à prévoir, dans un cas plus réaliste, une baisse significative de ces valeurs, de l'ordre de 15 à 20 $GW.j/ton$ comme indiquée dans [18].

En conclusion, dans le cas des REL HFC, il est nécessaire de choisir entre une forte conversion et une utilisation optimale du combustible ou des burnups élevés. Néanmoins, si l'on souhaite obtenir des burnups conventionnels, il existe un intérêt à utiliser des assemblages sous-modérés (e.g. 21x21) car leur utilisation de la ressource combustible est meilleure.

Importance de l'empoisonnement par les produits de fissions

En spectre thermique la perte de réactivité due aux produits de fission est la première source de l'épuisement de la réserve de réactivité, et ce devant l'épuisement du combustible comme le montre la figure 4.8.

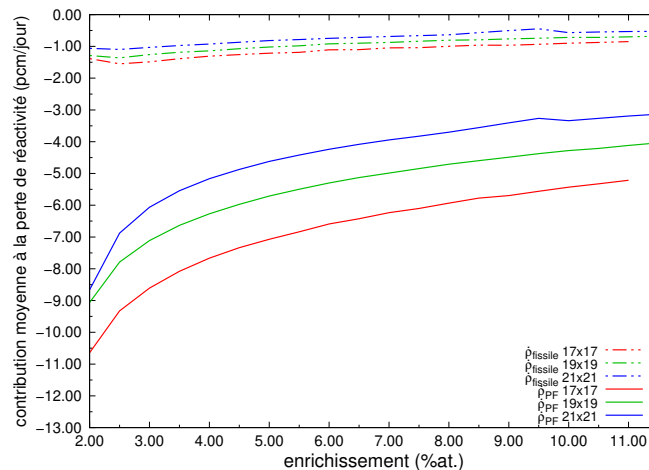


FIGURE 4.8: Variation de réactivité moyenne au cours du cycle imputable à la variation de la masse de fissile (i.e. ^{233}U) et de produits de fission. La contribution due au fissile est notée $\rho_{fissile}$, celle due aux produits de fission est notée ρ_{PPF} . La configuration d'assemblage est précisée à la suite.

La contribution à la baisse de réactivité due aux produits de fissions est calculée comme :

$$\left. \frac{d\rho}{dt} \right|_{PF} = \frac{\rho_{PF^{n+1}}^n - \rho_{PF^n}^n}{t^{n+1} - t^n}$$

Où :

$$k_{PF^n}^n = \frac{\nu \cdot \tau_{fission}^n}{\tau_{Abs,PF}^n + \tau_{Abs,PF}^n} \longrightarrow \rho_{PF^n}^n = \frac{k_{PF^n}^n - 1}{k_{PF^n}^n}$$

$$k_{PF^{n+1}}^n = \frac{\nu \cdot \tau_{fission}^n}{\tau_{Abs,PF}^n + \tau_{Abs,PF}^{n+1}} \longrightarrow \rho_{PF^{n+1}}^n = \frac{k_{PF^{n+1}}^n - 1}{k_{PF^{n+1}}^n}$$

Avec :

$\tau_{fission}^n$ le taux de fission au pas de temps n .

$\tau_{Abs,PF}^n$ le taux d'absorption au temps n qui n'est pas dû aux produits de fission.

$\tau_{Abs,PF}^n$ et $\tau_{Abs,PF}^{n+1}$ le taux d'absorption au temps n (respectivement au temps $n+1$) dû aux produits de fission.

$k_{PF^n}^n$ le coefficient de multiplication estimé au pas de temps n .

$k_{PF^{n+1}}^n$ le coefficient de multiplication estimé au pas de temps n mais avec le taux d'absorption dû aux produits de fission pris au pas de temps $n+1$.

$\rho_{PF^n}^n$ la réactivité estimée au pas de temps n .

$\rho_{PF^{n+1}}^n$ la réactivité estimée au pas de temps n mais avec le taux d'absorption dû aux produits de fission pris au pas de temps $n+1$.

t^n et t^{n+1} respectivement les pas de temps indicé n et $n+1$.

Il s'agit donc d'estimer la perte de réactivité qu'entraîne un changement dans l'inventaire de poisons consommables lors du passage d'un pas de temps à un autre. Cette perte de réactivité est relativement constante à l'échelle du cycle, c'est pourquoi seule sa valeur moyenne est donnée dans la figure 4.8.

Le procédé est similaire pour obtenir la contribution à la perte de réactivité liée à la diminution de l'inventaire en ^{233}U :

$$\left. \frac{d\rho}{dt} \right|_{U3} = \frac{\rho_{U3^{n+1}}^n - \rho_{U3^n}^n}{t^{n+1} - t^n}$$

Où :

$$k_{U3^n}^n = \frac{\nu \cdot (\tau_{U3,fission}^n + \tau_{U3,fission}^n)}{\tau_{U3,Abs}^n + \tau_{U3,Abs}^n} \longrightarrow \rho_{U3^n}^n = \frac{k_{U3^n}^n - 1}{k_{U3^n}^n}$$

$$k_{U3^{n+1}}^n = \frac{\nu \cdot (\tau_{U3,fission}^n + \tau_{U3,fission}^{n+1})}{\tau_{U3,Abs}^n + \tau_{U3,Abs}^{n+1}} \longrightarrow \rho_{U3^{n+1}}^n = \frac{k_{U3^{n+1}}^n - 1}{k_{U3^{n+1}}^n}$$

Avec :

$\tau_{fission}^n$ et $\tau_{U3,fission}^{n+1}$ le taux de fission au pas de temps n , respectivement $n+1$.

$\tau_{U3,Abs}^n$ et $\tau_{U3,Abs}^{n+1}$ le taux d'absorption de l' ^{233}U , respectivement au pas de temps n et $n+1$.

$\tau_{U3,fission}^n$ le taux de fission au pas de temps n qui n'est pas dû à l' ^{233}U .

$\tau_{U3,Abs}^n$ le taux d'absorption au temps n sans la contribution de l' ^{233}U .

En supposant un nombre de neutrons par fission ν identique pour tous les isotopes fissiles.

Augmenter l'ICR va permettre de diminuer la perte de réactivité liée à la diminution du stock de fissile en ralentissant cette dernière. Cependant, du fait de l'évolution à puissance constante et donc d'un taux de fission constant, les produits de fission s'accumulent et apportent continuellement la même quantité d'anti-réactivité. En durcissant le spectre grâce à la sous-modération, l'impact des produits de fission est diminué et des burnup plus élevés peuvent être atteints. En définitive, parvenir à une haute conversion dans les réacteurs à eau légère permet d'économiser la ressource fissile mais pas au profit du burnup. Pour augmenter ce dernier il est plus efficace d'agir sur le poids des produits de fissions.

4.1.5 Conclusions préliminaires

Cette série d'expériences numériques a permis de circonscrire les performances des réacteurs à eau légère sous-modérés dans le but d'atteindre une haute conversion. Il a été mis en avant qu'un ICR maximum d'environ 0.8 peut être atteint. Ces bonnes performances doivent cependant être nuancées. Elles sont atteintes dans des réseaux où la sous-modération est forte ce qui soulève des questions vis-à-vis de la thermohydraulique de ces systèmes notamment en situations accidentelles. De plus, les gammes d'enrichissements considérées pour atteindre ces performances en conversion impliquent de faibles valeurs de burnup, qui seraient d'autant plus réduites en considérant un seuil de fuite. Les principales causes de ces faibles taux de combustion, malgré la lente diminution du stock de fissile, sont à la fois :

- une faible réserve de réactivité initiale. Elle même liée à un faible enrichissement pour favoriser la conversion.
- un empoisonnement important par les produits de fission dans un spectre neutronique modéré.

La sous-modération joue également un rôle bénéfique sur ce dernier point en diminuant le poids des produits de fission. Cependant cette solution a montré ses limites. Pour parvenir à de meilleurs compromis burnup/conversion il est nécessaire de supprimer l'eau légère afin d'avoir un spectre nettement plus dur.

4.2 Dimensionnement d'un SMR Th/U : Étude préliminaire en assemblage infini

La sous-modération permet une amélioration significative de l'utilisation de la ressource fissile en favorisant le processus de conversion. Il convient à présent de s'intéresser aux répercussions de ce choix de design sur les principaux paramètres de sûreté à l'échelle cœur et en situation accidentelle pour être en mesure d'établir un bilan objectif et complet de ces options.

4.2.1 Système étudié et sélection de l'enrichissement

Plusieurs niveaux de modération sont envisagés pour les études de SMR. L'ensemble des assemblages étudiés sont représentés par la figure 4.9. Leurs dimensions sont similaires à celle d'un REP standard à l'exception de la hauteur qui est de 2.3 m conformément au pré-dimensionnement effectué au chapitre 1. Les positions relatives des tubes guides sont conservées au mieux. L'assemblage 17x17 correspond à la configuration standard rencontrée en REP. L'assemblage 15x15 sur-modère les neutrons, se rapprochant ainsi de l'optimum de modération.

Considérer une variation graduelle du rapport de modération est utile pour déterminer l'optimum entre un bénéfice en terme de conversion et les implications sur le comportement du cœur en conditions accidentelles.

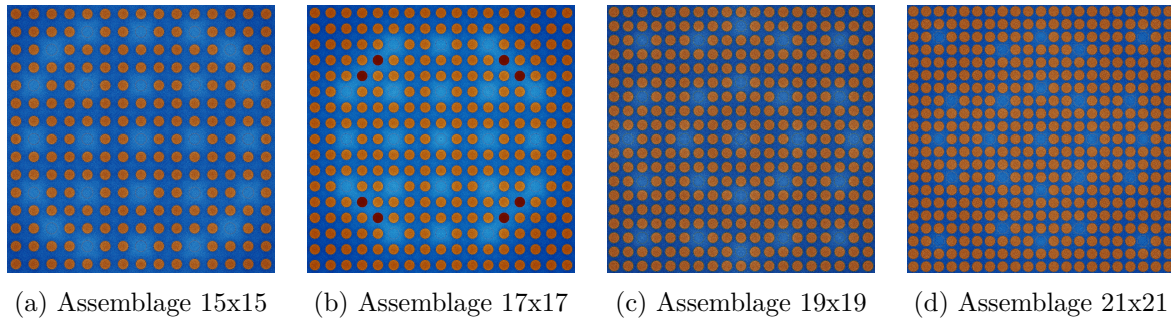


FIGURE 4.9: Configurations d'assemblages considérées pour le SMR Th/U.

Un enrichissement permettant d'atteindre un taux de combustion de 40 GW.j/ton est déterminé pour chaque configuration, voir tableau 4.2. Les évolutions sont menées avec SMURE en milieu infini. En dessous d'une réactivité de 3000 pcm, le réacteur n'est plus considéré comme critique. Cette redéfinition du seuil de criticité tient compte des fuites du cœur. Le seuil de fuite choisi correspond à une valeur classiquement utilisée en REP [13] [65]. Notons qu'en dépit d'un nombre plus important de crayons en cœur la puissance de ce dernier reste inchangée, ce qui explique que pour un burnup final identique, les temps de cycle (en nombre de jours) s'allongent pour des rapports de modérations décroissants.

configuration	15x15	17x17	19x19	21x21
enrichissement (%at.)	4.5	4.3	4.3	4.5
T_{cycle} (jours)	802	1077	1357	1657
BU_{eff} (GW.j/kg)	1.60	1.79	2.02	2.33
ICR (%)	0.45	0.51	0.57	0.62

Tableau 4.2: Enrichissement nécessaire pour atteindre un burnup de 40 GW.j/ton avec un seuil de fuite équivalent à 3000 pcm pour chaque rapport de modération envisagé.

La valeur de 40 GW.j/ton correspond aux performances moyennes atteintes par les REP du parc français [31]. En atteignant ce seuil, les SMR se montreraient aussi compétitifs que les REP actuels. Cependant ces performances s'avèrent bien plus difficiles à obtenir avec des SMR principalement à cause :

- De la taille réduite de ces réacteurs. Cette problématique est en partie résolue en utilisant des enrichissements plus élevés pour compenser le taux de fuite plus important du cœur.
- De leur gestion du combustible simplifiée. Dans les REP classiques le rechargement du combustible est fractionné (par tiers ou par quart). Lorsque le réacteur cesse d'être critique seul une partie du combustible est remplacée. Cet aspect sera plus étudié dans le chapitre 5. La majorité des concepts de SMR (dont celui présenté dans ce chapitre) envisage une gestion simplifiée du combustible, appelée *single batch*, où l'ensemble des assemblages est remplacé à la fin d'un cycle.
- L'utilisation d'une gestion *single batch* et la volonté d'atteindre un burnup élevé pose des difficultés en termes de quantité de réactivité à gérer. En effet, puisqu'en début de cycle l'ensemble des assemblages sont neufs, la quantité de réactivité au cours d'un cycle est plus importante que dans un REP classique.

4.2.2 Première approche des coefficients de température

Cette première étape de dimensionnement en milieu infini est l'occasion de vérifier, pour tous les rapports de modération envisagés, que les coefficients de température utilisés sont bien négatifs afin d'assurer la stabilité du réacteur vis-à-vis d'une augmentation des températures combustible et/ou caloporteur et ce à tout instant du cycle.

Fuel Temperature Coefficient (FTC)

L'importance de l'effet Doppler (voir chapitre 1), lié à une augmentation de température du combustible, sur la réactivité est quantifié au travers du coefficient de température ou FTC (pour *Fuel Temperature Coefficient*). Le FTC est calculé comme étant la différence de réactivité entre deux configurations où seule la température du combustible est modifiée.

La température du combustible est prise en compte de deux façons dans un calcul Monte Carlo :

- Grâce à des sections efficaces tabulées en température. Dans le cas présent la base ENDF/B-VII.1 est utilisée, les sections efficaces γ sont fournies aux températures suivantes : 600, 900, 1200, 1500 et 1800 K.
- Par une correction « à la volée » entre deux tabulations de sections efficaces. Le code *Serpent2* prend automatiquement en compte cet effet grâce à la routine *Doppler-broadening preprocessor routine* [82].

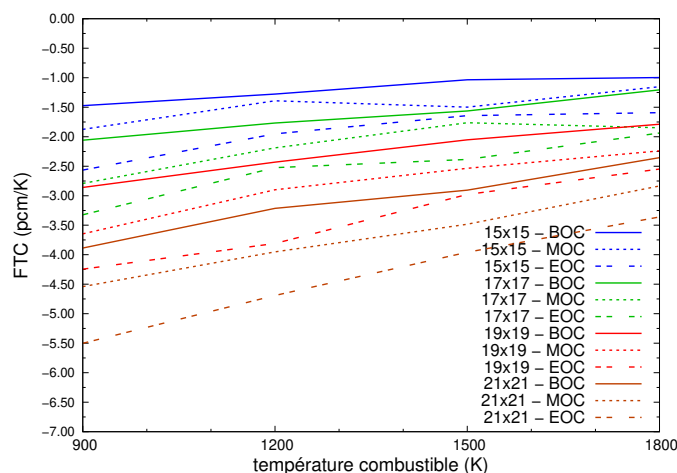


FIGURE 4.10: Contre réaction thermique du combustible à différents instants du cycle :

- en début de cycle, appelé *BOC* (pour *Beginning Of Cycle*) et correspondant à 0 $GW.j/ton$.
- en milieu de cycle appelé *MOC* (*Middle Of Cycle*) et correspondant à environ 20 $GW.j/ton$.
- en fin de cycle appelé *EOC* (*End Of Cycle*) et correspond à environ 40 $GW.j/ton$.

La figure 4.10 montre l'évolution du FTC en fonction de la température du combustible pour les quatre configurations envisagées à différents instants du cycle. Les ordres de grandeur constatés pour le FTC sont proches de ceux trouvés dans la littérature [13], [74], à savoir entre -2 et $-3 \text{ pcm} \cdot K^{-1}$. On constate une augmentation (en valeur absolue) significative du FTC avec la diminution du rapport de modération. Cet effet s'explique par un moins bon ralentissement des neutrons et donc une meilleure capture raisonnable et plus marginalement par la plus grande masse de combustible présente dans les assemblages sous-modérés.

Coolant Temperature Coefficient (CTC)

Le coefficient de contre-réaction du modérateur ou CTC (pour *Coolant Temperature Coefficient*) est défini comme la variation de réactivité consécutive à un changement de la température du modérateur. Cette variation provient principalement du fait de la diminution de densité du modérateur suite à son échauffement. En conséquence, les neutrons seront moins bien modérés favorisant ainsi des régions du spectre où le rapport fission sur capture évolue de façon défavorable (i.e CTC négatif).

Le CTC est calculé comme le rapport de la différence de réactivité sur la différence des températures du caloporteur entre deux configurations identiques où seules la température et la densité du modérateur sont modifiées.

La gamme de température explorée pour le calcul de CTC s'étend de 560 K à 617 K (soit la température d'ébullition du caloporteur à 155 bar) par pas de 10 K. Le changement de la température du caloporteur est pris en compte dans le code Monte Carlo à la fois :

- par la prise en compte de nouvelle tabulation en température pour les sections efficaces de l'eau (similaire au FTC).
- par la modification la densité de l'eau. Celle-ci est prise à sa valeur d'équilibre pour la température correspondante et pour une pression de 155 bars.
- Dans la cas d'une modération avec de l'eau il est également nécessaire de prendre en compte les effets (quantiques) de diffusion neutronique intervenant directement la molécule d'eau. Ce phénomène est pris en compte via les tables $S(\alpha, \beta)$ [28] disponibles dans ENDF/B-VII.1 à 550 K et 600 K.

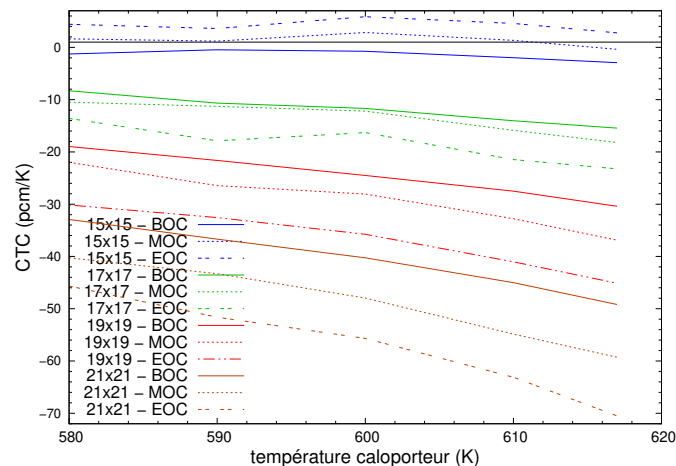


FIGURE 4.11: Évolution du CTC dans les différentes configurations d'assemblages envisagées pour le SMR Th/U et à divers instant du cycle.

La figure 4.11 présente l'évolution du CTC à divers instant du cycle pour les quatre configurations envisagées. Le CTC devient plus négatif pour des RM décroissants. Ceci s'explique par le décalage du spectre neutronique dans la partie des résonances épithermiques, défavorable pour le bilan neutronique. Le CTC est particulièrement faible dans le cas 15x15, environ $-1; \frac{pcm}{K}$ au BOC. Dans cette configuration, une augmentation de température permet d'atteindre un optimum, du point de vue du bilan neutronique, entre le pouvoir ralentissant du modérateur et ses absorptions parasites. En fin de cycle, le CTC du cas 15x15 est positif ce qui conduit à déprécier ce choix dans la suite.

Coolant Void Reactivity (CVR)

La CVR quantifie la variation de réactivité consécutive à une variation de la densité (uniquement) du modérateur. Cet indicateur renseigne sur le comportement neutronique du réacteur

en cas de brèche dans le circuit primaire ou d'un taux de vide important dû à une forte production de vapeur. Dans le cas des réacteurs très fortement sous-moderés ainsi que des réacteurs rapides, le caloporteur ne joue pratiquement plus le rôle de modérateur. En cas de disparition de ce dernier le spectre neutronique n'est que faiblement impacté, en revanche la diminution de l'absorption moyenne du milieu se traduit par un apport de réactivité. Pour d'autres raisons, évoquées dans [83], la CVR peut également devenir positive, pour des réacteurs fonctionnant avec un enrichissement trop élevé ou un vecteur trop dégradé en plutonium.

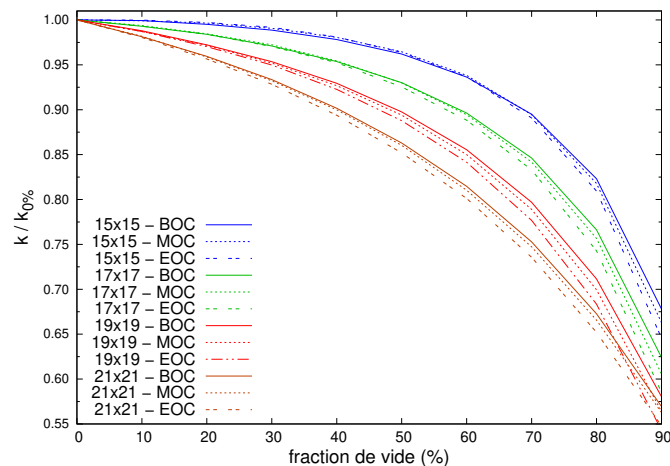


FIGURE 4.12: Évolution du k_{eff} de l'assemblage suite à un changement de la densité du caloporteur. Les facteurs de multiplication sont normalisés pour être égaux à 1 à une température de 580 K et une densité correspondante de $612 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$. Cette normalisation permet la comparaison des résultats dans les différentes configurations et à différents instants du cycle.

La CVR est calculée dans chaque type d'assemblage à partir d'une configuration initiale où la température du modérateur est fixée à 580 K et à la densité à la valeur correspondante. On fait ensuite varier la densité du modérateur de 100% à 10% de sa valeur d'origine par pas de 10% tandis que la température du modérateur reste fixée à 580 K. Les résultats sont présentés figure 4.12. Aucune des configurations étudiées ne présente un risque de surpuissance en cas de vidange du caloporteur. Les configurations à faible rapport de modération sont encore une fois celles qui présentent les caractéristiques neutroniques les plus satisfaisantes.

4.2.3 Gestion de la réactivité

Une première approche de la gestion de la réactivité est menée à l'échelle assemblage infini afin d'en estimer la difficulté, de déterminer les moyens à mettre en œuvre pour y parvenir et de donner une première estimation de l'impact de cette contrainte sur les performances en combustion.

L'utilisation d'un cœur entièrement chargé en combustible frais implique de compenser une grande quantité de réactivité en début de cycle. Le bore soluble est préféré en premier lieu pour sa simplicité d'utilisation, sa flexibilité et son action homogène sur le cœur. Ce dernier point est particulièrement important puisque les évolutions à l'échelle cœur seront simulées avec une résolution spatiale à l'échelle de l'assemblage, sans discrétisation axiale.

En dépit de ces qualités, de nombreuses et récentes études [84], [85], [86], cherchent à éliminer le bore des moyens de gestions de la réactivité. Ce choix de conception est avant tout justifié par des considérations économiques (réduction des coûts) que sont :

- la simplification du design : cela épargne la conception d'un circuit de borication, ainsi que la chaîne d'instrumentation et de monitoring dédiée au bore.
- la réduction des effluents : la concentration de bore est amenée à varier d'environ 2000 ppm à 50 ppm au cours du cycle. Cette variation de concentration est obtenue par dilution de l'eau du circuit primaire, ce qui génère un grand volume d'effluents au cours du cycle.
- la simplification des opérations de pilotage : en particulier si la compensation de l'usure du combustible est faite de façon passive (voir dans la suite les poisons consommables).
- la réduction des problématiques de corrosion : Pour compenser l'introduction d'acide borique (i.e bore soluble) dans l'eau du circuit primaire, de l'hydroxyde de lithium ($LiOH$), également appelé « lithine », y est ajouté afin de maintenir le pH du primaire neutre et ainsi de limiter la corrosion [87]. Le lithium présent dans le circuit primaire est enrichi à 99% en 7Li , ce qui a pour but d'éviter les captures neutroniques sur le 6Li et la production de tritium (3He). Le tritium est un élément radioactif volatil dont le rejet dans l'environnement libère $37 TBq \cdot GW^{-1} \cdot an^{-1}$ [88]. L'élimination du bore permettrait donc une diminution des rejets radioactifs dans l'environnement.
- une amélioration de la sûreté : comme expliqué dans la suite, l'élimination du bore permet de ne pas dégrader le coefficient modérateur. Un CTC élevé (en valeur absolue) améliore la stabilité du cœur lors de transitoire. Cette forte contre-réaction permet aussi d'envisager une façon piloter les cœurs, basée sur de faibles variations de la température moyenne du caloporteur (appelé « stretch »).

Cependant, se passer de bore nécessite la mise en place de solutions complexes car les autres moyens conventionnels de gestion de la réactivité agissent de façon locale ce qui pose des problèmes de redistribution de puissance et de points chauds en cœur (détaillés dans la suite du chapitre).

Gestion par bore soluble : détermination d'une concentration maximale

La quantité de bore soluble est limitée en cœur afin de maintenir un CTC négatif. Lorsque le caloporteur s'échauffe, il se dilate et sa densité diminue. Dans un assemblage où le volume modérateur est constant, la quantité d'eau sera donc moindre. La quantité de bore présent dans l'assemblage sera donc également diminuée⁴.

Du point de vue neutronique deux effets entre alors en compétition :

- Une diminution de la réactivité liée à la diminution de la densité du modérateur (i.e. CTC négatif) et à une moins bonne modulation des neutrons.
- Une augmentation de la réactivité liée à la diminution de la quantité de bore présente dans l'assemblage.

La concentration de bore maximale correspond au point où ces deux effets se compensent parfaitement et où suite à une élévation de la température du modérateur la variation de réactivité est proche de zéro. Au dessus de cette concentration l'effet de la disparition du bore domine et la contre réaction du caloporteur devient positive.

Un calcul analytique simple permet d'estimer grossièrement la concentration maximale de bore. Celui-ci repose sur un ensemble de bilans en masse et en réactivité, ici mené sur un assemblage⁵ supposé entièrement réfléchi. À une variation de la densité du caloporteur, due à un changement de température, est associée une variation de la masse du caloporteur présent

4. mais la concentration reste inchangée

5. ce raisonnement est plus général, il aurait pu être mené à l'échelle coeur.

dans l'assemblage et donc de la masse en bore dans cet assemblage :

$$\begin{aligned}\delta m_{calo} &= \delta d_{calo} \cdot V_{assemblage} \\ \delta m_{bore} &= C_b \cdot \delta d_{calo} \cdot V_{assemblage}\end{aligned}$$

Avec :

m_{calo} la masse de caloporteur dans l'assemblage.

δm_{calo} la variation de masse modérateur dans l'assemblage suite à une variation de la température du modérateur.

d_{calo} la densité de caloporteur avant la variation de température.

δd_{calo} la variation de la densité du caloporteur consécutive à la variation de température du modérateur.

m_{bore} la masse de bore dissoute dans le caloporteur dans le volume de l'assemblage.

δm_{bore} la variation de masse du bore dans l'assemblage suite à une variation de la température du modérateur.

C_b la concentration massique en bore soluble.

$V_{assemblage}$ le volume de l'assemblage.

A cette variation de la densité caloporteur est aussi associée une variation de la réactivité comportant deux contributions, celle du modérateur et celle liée à la perte du bore :

$$\delta \rho = \frac{\partial \rho}{\partial d} \cdot \delta d_{calo} + \frac{\partial \rho}{\partial m_{bore}} \cdot \delta m_{bore}$$

Où $\delta \rho$ est la variation de réactivité totale consécutive à une augmentation de la température du modérateur.

La dépendance au terme m_{bore} apparaît naturellement dans ce problème, cependant l'usage commun préfère exprimer les quantités de bore en concentration (massique), c'est à dire en fonction de C_b d'où la ré-écriture du terme :

$$\frac{\partial \rho}{\partial m_{bore}} = \frac{\partial \rho}{\partial C_b} \cdot \frac{\partial C_b}{\partial m_{bore}}$$

Or

$$m_{bore} = C_b \cdot d_{calo} \cdot V_{assemblage}$$

d'où :

$$\frac{\partial C_b}{\partial m_{bore}} = \frac{1}{d_{calo} \cdot V_{assemblage}}$$

et donc :

$$\delta \rho = \frac{\partial \rho}{\partial d_{calo}} \cdot \delta d_{calo} + \frac{\partial \rho}{\partial C_b} \cdot C_b \cdot \frac{\delta d_{calo}}{d_{calo}}$$

De part sa définition la concentration de bore critique est atteinte lorsque $\delta \rho = 0$ soit :

$$\frac{\partial \rho}{\partial d} + \frac{\partial \rho}{\partial C_b} \cdot \frac{C_{b,max}}{d_{calo}} = 0$$

D'où le résultat :

$$C_{b,max} = \frac{\alpha_{calo}}{\alpha_{bore}} \cdot d_{calo}$$

Avec :

$C_{b,max}$ la concentration massique maximale de bore, exprimé dans la suite en (ppm).

α_{calo} le coefficient de contre-réaction du caloporteur en densité, c'est à dire $\frac{\partial \rho}{\partial d}$ en $(pcm \cdot m^3 \cdot kg^{-1})$.

α_{bore} l'efficacité moyenne du bore, c'est à dire $\frac{\partial \rho}{\partial C_b}$ exprimée dans la suite en $(pcm \cdot ppm^{-1})$.

Les estimations obtenues par ce raisonnement simplifié ne sont qu'indicative mais elles permettent de mieux cibler la gamme des concentrations en bore à sonder. La concentration maximale est obtenue à l'issue d'une étude paramétrique menée avec *Serpent2*. Pour une C_b , la température du modérateur est élevée de 560 K à 610 K par pas de 10 K. La densité du modérateur est ajustée à la température correspondante. Le résultat de ces simulations est donné à titre d'exemple dans la figure 4.13 pour le cas 17x17. L'utilisation de méthode la Monte Carlo pour mener ce calcul requiert une statistique importante car la différence de réactivité entre deux pas en température est censée tendre vers zéro lorsque la concentration critique est atteinte. Dans notre cas, 70000 neutrons sources répartis en 750 cycles actifs sont utilisés ce qui correspond à une incertitude statistique sur le k_{eff} d'environ 10 pcm.

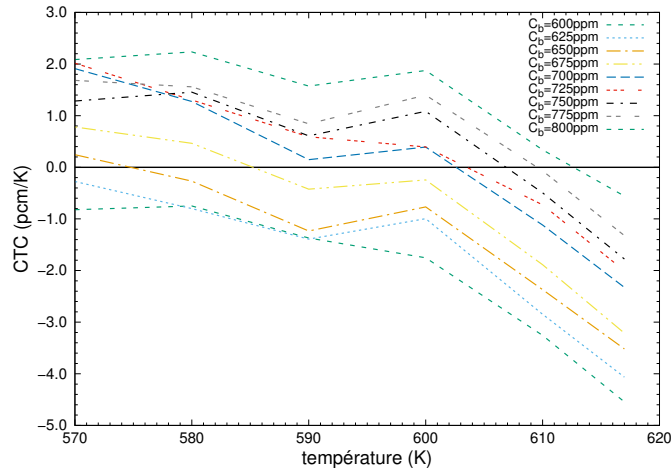


FIGURE 4.13: CTC pour plusieurs concentration en bore calculés dans la configuration 17x17. Les CTC sont calculés comme étant la variation de réactivité entre deux calculs successifs où la température du modérateur est augmentée de 10K. A cette augmentation de température est associée une modification de la densité modérateur.

La figure 4.13 indique une transition dans le signe du CTC lors du passage de 675 ppm à 700 ppm de bore. Le tableau 4.3 donne, pour chaque configuration, les concentrations critiques en bore, calculées selon la même méthode, ainsi que son efficacité :

configuration	15x15	17x17	19x19	21x21
α_{bore} (pcm/ppm)	-6.9	-4.5	-2.7	-1.5
$C_{b,max}$ (ppm)	65 ± 10	700 ± 25	2550 ± 100	8750 ± 200

Tableau 4.3: Efficacité moyenne du bore et concentration maximale de bore pour les différentes configurations d'assemblage envisagées.

Dans un REP classique le bore a une efficacité d'environ -8 pcm/ppm [31], l'utilisation du thorium et de réseaux sous-modérés dégrade fortement cette valeur. En conséquence les concentrations de bore utilisées sont beaucoup plus importantes dans notre cas. A titre de comparaison dans un REP UOX la concentration de bore maximale est d'environ 2000 ppm [31]. Toujours pour un REP classique, en supposant un rechargement fractionné par tiers, la réactivité totale en début de cycle est d'environ 17000 pcm, le bore soluble est alors présent à

une concentration de 1500 ppm ce qui compense plus de 70% de la réactivité initiale, le reste étant géré par les différents groupes de barres (comptant pour environ 7000 pcm) [31].

Dans le cas de SMR fonctionnant en *single batch*, la gestion de la réactivité est bien plus difficile. Au vu des concentrations maximales déterminées et de l'efficacité réduite du bore, une faible proportion de l'excès de réactivité initial pourra être compensé par le bore soluble. Dans le cas 15x15, le bore ne compte au maximum que pour 500 pcm, ce qui exclut toute possibilité de gestion de la réactivité de cette façon. La quantité d'anti-réactivité apportée par le bore est d'au maximum environ 4000, 6000 et 13000 pcm dans les configurations 17x17, 19x19 et 21x21, ce qui représente respectivement 12%, 20% et 50% de la quantité de réactivité initiale. Il est donc impératif d'envisager d'autres moyens de contrôle.

Dans la suite de ce chapitre l'option 15x15 ne sera plus considérés en raison de son CTC positif en fin de cycle et de son incompatibilité avec la gestion par bore soluble.

Nécessité des poisons consommables (BP) pour atteindre des burnups standards dans les SMR en *single batch*

Les poisons consommables (abrégié en BP pour *Burnable Poisons*) sont des isotopes ayant une forte section efficace d'absorption, qui sont introduits volontairement en cœur de façon à augmenter la section efficace d'absorption du milieu et ainsi ramener la réactivité proche de zéro. Au fil de leur irradiation (i.e capture neutronique), les poisons consommables se dégradent en des isotopes moins neutrophages d'où leur qualification de consommable. Avec la diminution de l'inventaire en BP, l'anti-réactivité apportée par ces derniers diminue ce qui compense en partie l'empoisonnement par les produits de fission.

Les poisons consommables sont ici envisagés en complément du bore soluble. L'objectif de cette section est de dimensionner les BP pour compenser l'excédent de réactivité qui n'a pu être géré avec le bore soluble. Plus concrètement, il s'agit de circonscrire la réactivité dans ce qui sera appelé une bande de manœuvrabilité. Cette bande de manœuvrabilité est délimitée par un seuil inférieur correspondant au seuil de fuite et à partir duquel le système n'est plus considéré comme critique. La limite supérieure de la bande de manœuvrabilité correspond à la quantité maximale de réactivité pouvant être gérée par le bore soluble.

Présentation rapide du gadolinium

Le gadolinium est une terre rare utilisée depuis les années 70 en REP pour limiter les concentrations en bore soluble. Le gadolinium est constitué d'un vecteur de 7 isotopes stables donnés dans le tableau 4.4. La quasi totalité de l'antiréactivité apportée par le gadolinium provient du ^{155}Gd et du ^{157}Gd . Pour le ^{157}Gd la section efficace microscopique est d'environ $\sigma_{abs,th} \approx 254000$ barn à 2200 m/s. Cette dernière s'élève à $\sigma_{abs,th} \approx 51000$ barn (toujours à 2200 m/s) pour le ^{155}Gd . Ces deux isotopes offrent également une bonne couverture des régions épithermiques du spectre grâce au recouvrement de leurs résonances.

isotope	^{152}Gd	^{154}Gd	^{155}Gd	^{156}Gd	^{157}Gd	^{158}Gd	^{160}Gd
(%)	0.2	2.15	14.73	20.47	15.68	24.87	21.90

Tableau 4.4: Vecteur isotopique naturel du gadolinium, extrait de [89]

Le gadolinium est utilisé dans les crayons combustibles sous la forme de Gd_2O_3 . Cet oxyde est directement mêlé (plus exactement « co-broyé ») dans des crayons combustibles à support en uranium naturel ou appauvri voire faiblement enrichi. Les teneurs utilisées sont en général inférieures à 12 wgt% bien que des teneurs allant jusqu'à 16 wgt% aient déjà été utilisées expérimentalement. La teneur maximale théorique se situe à environ 25 wgt% [90]. Dans les

REP du parc français le gadolinium est utilisé dans une gamme variant entre 7 wgt% et 9 wgt% pour environ 8 à 20 crayons empoisonnés, permettant ainsi l'adéquation entre la cinétique de disparition des poisons et la longueur des cycles [31].

L'ajout de Gd_2O_3 affecte les propriétés thermiques des crayons empoisonnés :

- L'oxyde de gadolinium a une densité d'environ 7.4 g/cm^3 contre environ 10.5 g/cm^3 pour l' UO_2 . Le densité combustible d'un crayon empoisonné doit donc être diminuée en conséquence.
- Le point de fusion du gadolinium sous sa forme oxydée est de 2340 K soit 25% plus basse que celle de l' UO_2 . Cependant, des études ont montré [89] que pour des teneurs comprises entre 0 wgt% et 12 wgt% en gadolinium, le point de fusion de l'UOX n'est que faiblement affecté par la présence du gadolinium.
- La capacité calorifique de l'oxyde de gadolinium est supérieure à celle de l'UOX d'environ 10%.
- L'addition de gadolinium va diminuer la conductivité thermique de l' UO_2 d'environ 15% et ce principalement en dessous de 1500 K.

Dans une première approche, les modifications des propriétés thermiques du combustible ne seront pas considérées dans les différents calculs thermohydrauliques à venir. En revanche, il est nécessaire de prendre compte la diminution de la densité du combustible dans les crayons empoisonnés pour ne pas fausser les calculs de neutronique ainsi que les évolutions des inventaires combustibles. La compatibilité physico-chimique du Gd_2O_3 avec le ThO_2 est supposée identique à celle de l' UO_2 comme le suggère [91]. Les études d'évolution présentées dans la suite sont réalisées avec SMURE/ *Serpent2* sur un assemblage en milieu infini. Les crayons empoisonnés partagent tous la même composition, dont l'évolution est réalisée à partir du flux moyen calculé dans l'ensemble de ces crayons. Les problématiques de placement des crayons empoisonnés au sein de l'assemblage ne seront pas abordées, cependant on veillera à répartir les crayons le plus homogènement possible afin d'éviter les effets d'ombre.

Dans un souci de clarté et de concision, la recherche d'un empoisonnement satisfaisant ne sera détaillée que pour le cas 17x17, les résultats finals obtenus seront directement donnés pour les configurations 19x19 et 21x21.

Utilisation classique d'un poison consommable

Une fois choisi la nature du poison consommable il ne reste que deux paramètres libres à fixer : la teneur du poison consommable (abrégé en W) et le nombre de barres empoisonnées (abrégé en R).

La quantité d'antiréactivité initialement apportée est principalement fonction du nombre de crayons empoisonnés [89]. Ce constat n'est valable qu'au premier ordre car il y a bien une augmentation du poids des crayons empoisonnés (i.e de leur antiréactivité) lorsque la teneur en gadolinium augmente. La cinétique de disparition du poison consommable est relativement indépendante du nombre de crayons combustibles comme le montre la figure 4.14 (b).

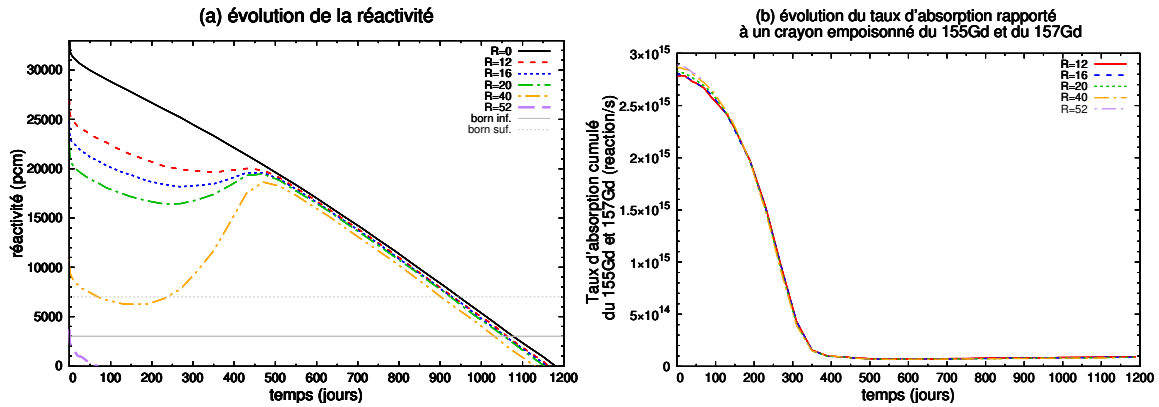


FIGURE 4.14: Évolution d'un assemblage 17x17 comportant avec un nombre variable de crayons empoisonnés au gadolinium à une teneur de 8 wgt%. Les seuils en réactivité inférieur et supérieur délimitent la bande de manœuvrabilité du bore soluble.

D'après [89], un crayon empoisonné à 8% wgt dans un assemblage classique de REP a une anti-réactivité initiale d'environ 700 pcm. Pour un combustible thorié et pour la même teneur en Gd, le poids du crayon est plus proche de 600 pcm. Cette moindre efficacité du crayon thorié s'explique par un spectre neutronique plus dur en début de cycle. Cet effet est également renforcé par l'utilisation d'un enrichissement fissile plus élevé qu'en REP. L'influence du spectre neutronique sur l'antiréactivité apportée par un crayon empoisonné au Gd est illustrée tableau 4.5.

configuration	17x17	19x19	21x21
poids (pcm)	620	450	210

Tableau 4.5: Poids initial d'un crayon empoisonné à 10 wgt% en gadolinium selon le rapport de modération de l'assemblage.

La teneur en poison consommable (W) est le paramètre principal pour contrôler la cinétique de disparition des poisons consommables ainsi que le montre la figure 4.15 (b). Une forte teneur en Gd permet à ce dernier de rester actif plus longtemps. Pour les valeurs typiquement employées en REP, à savoir entre 8 wgt% et 12 wgt% l'empoisonnement est effectif jusqu'à environ 30 $GW.j/ton$. Dans le configuration 17x17 en combustible thorié, pour la même gamme de concentration en Gd, l'empoisonnement s'estompe entre 17 et 25 $GW.j/ton$. Des teneurs plus importantes en Gd sont donc requises pour convenir à la longueur du cycle.

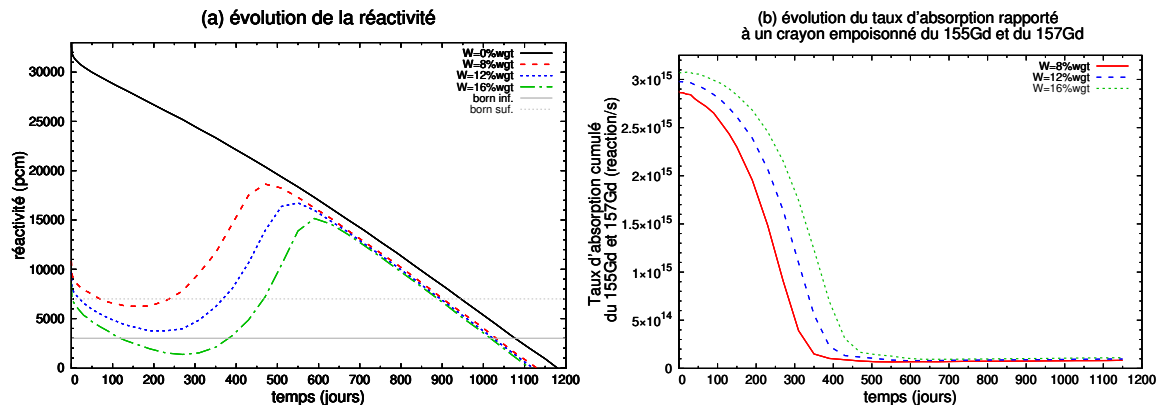


FIGURE 4.15: Évolution d'un assemblage 17x17 empoisonné sur 40 crayons combustibles dans des teneurs variables en gadolinium. Les seuils en réactivité inférieur et supérieur délimitent la bande de manœuvrabilité du bore soluble.

Stratégie naïve d'empoisonnement

L'utilisation de poisons consommables a ici pour objectif de circonscrire la réactivité dans la bande de réactivité relativement étroite du cas 17x17. Pour rappel, la bande de manœuvrabilité est définie comme un intervalle de réactivité au sein duquel le réacteur peut être rendu critique grâce à l'ajout de bore soluble dans le modérateur. Cette bande de manœuvrabilité est délimitée par une limite inférieure qui correspond à un seuil de fuite en dessous duquel le cœur (ou l'assemblage représentatif) est considéré comme sous-critique. La limite supérieure de la bande de manœuvrabilité correspond à la concentration maximale en bore soluble pour garantir un CTC négatif (ou nul). Par ailleurs, on supposera que l'ajout de poisons consommables n'a pas d'influence sur l'efficacité du bore soluble ni les concentrations maximales préalablement déterminées ; auquel cas il sera nécessaire d'itérer entre le dimensionnement des poisons consommables et la détermination de la limite supérieure de la bande de manœuvrabilité.

La première étape du dimensionnement des poisons consommables consiste à ramener la réactivité initiale à l'intérieur de la bande de manœuvrabilité. Connaissant le poids approximatif d'un crayon, environ quarante crayons empoisonnés sont nécessaires dans la configuration 17x17. La teneur des crayons doit ensuite être fixée afin de maintenir la réactivité dans la bande de manœuvrabilité durant toute la durée du cycle (soit $40GW.j/ton$).

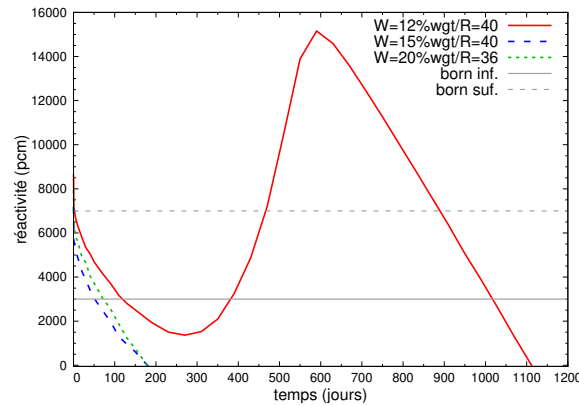


FIGURE 4.16: Démonstration de l'impossibilité de trouver une unique combinaison W/R permettant de circonscrire la réactivité de l'assemblage 17x17 dans la bande de manœuvrabilité pendant toute la durée du cycle. La bande de manœuvrabilité du bore est délimitée par sa borne supérieure et inférieure.

Ces considérations permettent d'explorer un nombre restreint de couples W/R. Comme le montre la figure 4.16, l'utilisation d'un nombre approprié de crayons empoisonnés (≈ 40) avec de fortes teneurs (ici 15 wgt% et 20 wgt%) aboutit à une perte précoce de criticité, du fait de la lente de la combustion des poisons. L'utilisation d'une teneur moins forte, présentée dans le cas $W = 12$ wgt% et $R = 40$, n'est pas plus satisfaisante puisque les poisons disparaissent avant que la réactivité rentre de par elle-même dans la bande de manœuvrabilité grâce à l'usure du combustible.

Il n'est donc pas possible de gérer la réactivité avec un seul couple W/R car la cinétique d'évolution résultante ne présente pas assez de souplesse pour convenir à une bande étroite sur des temps longs. Plusieurs cinétiques de combustion, pouvant s'échelonner sur différentes périodes de temps, sont nécessaires. Pour ce faire il existe deux possibilités soit : considérer plusieurs couples W/R, soit considérer d'autres types de poisons consommables. Ces deux voies ont été explorées dans la suite.

Utilisation de deux nouveaux poisons consommables : l'Erbium et l'IFBA

Deux nouveaux poisons sont considérés : l'erbiun qui est une terre rare et l'IFBA pour *Integral Fuel Burnable Absorber* un type de poison envisagé dans le cadre des REP sans bore :

L'erbiun fait partie de la famille des lanthanides au même titre que le gadolinium. Contrairement au gadolinium il n'a jamais été utilisé dans les REP à l'échelle industrielle, il constitue donc une alternative plus originale. Il s'utilise également sous la forme d'un oxyde, l' Er_2O_3 , qui est mixé de façon homogène avec l'oxyde d'uranium (ou ici l'oxyde de thorium). Les propriétés thermiques, mécaniques et chimiques de l'erbiun sont similaires à celles du gadolinium. Son addition dans le combustible entraîne donc des conséquences comparables à celle du gadolinium sur les propriétés thermiques du combustible. Le vecteur isotopique de l'erbiun est donné tableau 4.6. Contrairement au gadolinium qui est un poison à deux composante (le ^{155}Gd et le ^{157}Gd), l'essentiel de l'antiréactivité provient de l'erbiun provient du ^{167}Er . L' ^{166}Er peut se transformer après capture neutronique en ^{167}Er , ce qui en fait son précurseur.

isotope	^{162}Er	^{164}Er	^{166}Er	^{167}Er	^{168}Er	^{170}Er
proportion (%)	0.14	1.6	33.4	22.9	27.0	15.0
$\sigma_{Abs,Th}$ (barn)	19	13	40	670	1.95	5.7

Tableau 4.6: Vecteur isotopique naturel de l'erbium et propriétés neutroniques associées. Les sections efficaces de l'erbium sont données pour une énergie de neutron incident de $2200\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ [89].

Le vecteur isotopique de l'erbium présente une famille de résonances étendues sur une large gamme d'énergie, pour cette raison son taux absorption et donc son apport d'anti-réactivité est beaucoup plus constant au cours du cycle. De plus son utilisation n'induit pas de forte variation dans le spectre neutronique. Du fait de sa section efficace d'absorption moindre, l'erbium est idéal pour gérer la réactivité sur des cycles longs (en comparaison du gadolinium). Sa teneur pondérale optimale est très réduite, entre 0.5 et 2 wgt%, ce qui permet d'éviter une importante quantité de résidus en fin de cycle. Pour avoir un effet comparable à celui du gadolinium, un nombre conséquent de crayons empoisonnés est requis, typiquement une centaine, voire l'ensemble des crayons de l'assemblage. Cet aspect constitue un avantage car le poison étant réparti de façon homogène, la distribution de flux sera moins perturbée ce qui évitera les problématiques des points chauds dans l'assemblage. Pour la même teneur de 2 wgt% en erbium, les crayons ont un poids d'environ -62 pcm pour un combustible ThO_2 contre environ -66 pcm en UO_2 , l'empoisonnement est effectif jusqu'à environ $20\text{ GW}\cdot\text{j}/\text{ton}$.

Le crayon IFBA ici utilisé consiste en une couche de ZrB_2 , enrichie en à 90 % en ^{10}B [92], placée directement sur la pastille combustible comme illustrée figure 4.17. Cette forte teneur a pour conséquence un poids relativement élevé d'environ 940 pcm dans la configuration 17x17. L'épaisseur de l'IFBA est comprise entre 70 et $130\ \mu\text{m}$ ce qui équivaut à 2 / 3 livres parcours moyens d'absorption. Une forte épaisseur d'IFBA crée un effet d'autoprotection important qui permet un apport d'anti-réactivité sur une période de temps longue, supérieure à $35\text{ GW}\cdot\text{j}/\text{ton}$.

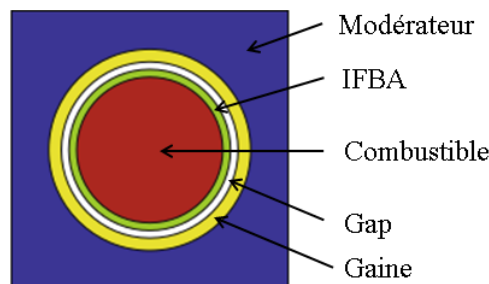


FIGURE 4.17: Représentation du concept IFBA dans une cellule élémentaire de combustible, extrait de [55].

Résultats du dimensionnement des poisons consommables et discussion sur la pénalité induite par leur usage

Pour maintenir la réactivité dans la bande de manœuvrabilité pendant toute la durée du cycle, les différences de cinétique de combustion du gadolinium, de l'erbium et de l'IFBA sont mises à contribution. Le gadolinium est utilisé pour le court terme, l'erbium pour le moyen terme et l'IFBA pour une composante continue sur le très long terme. Cependant l'utilisation

simultanée de plusieurs poisons consommables n'est pas triviale, trouver « à la main » une combinaison adéquate nécessite plusieurs itérations. En effet, l'empoisonner de quelques crayons supplémentaires par un certain type de poisons consommables va obliger à revoir les quantités préalablement fixées pour les autres BP afin de maintenir le résultat dans la bande de manoeuvrabilité et ce à tout moment. Le problème est donc non linéaire.

Pour le cas 17x17, les trois poisons consommables présentés ont été utilisés. Dans le cas des configurations 19x19 et 21x21, la réserve de réactivité à compenser est moindre et le bore soluble peut jouer un rôle plus important. C'est pourquoi seul l'utilisation du gadolinium s'est révélée nécessaire. Cependant 2 couples W/R ont été considérés afin de bénéficier d'une certaine souplesse dans la disparition du Gd. Les résultats sont présentés figures 4.18.

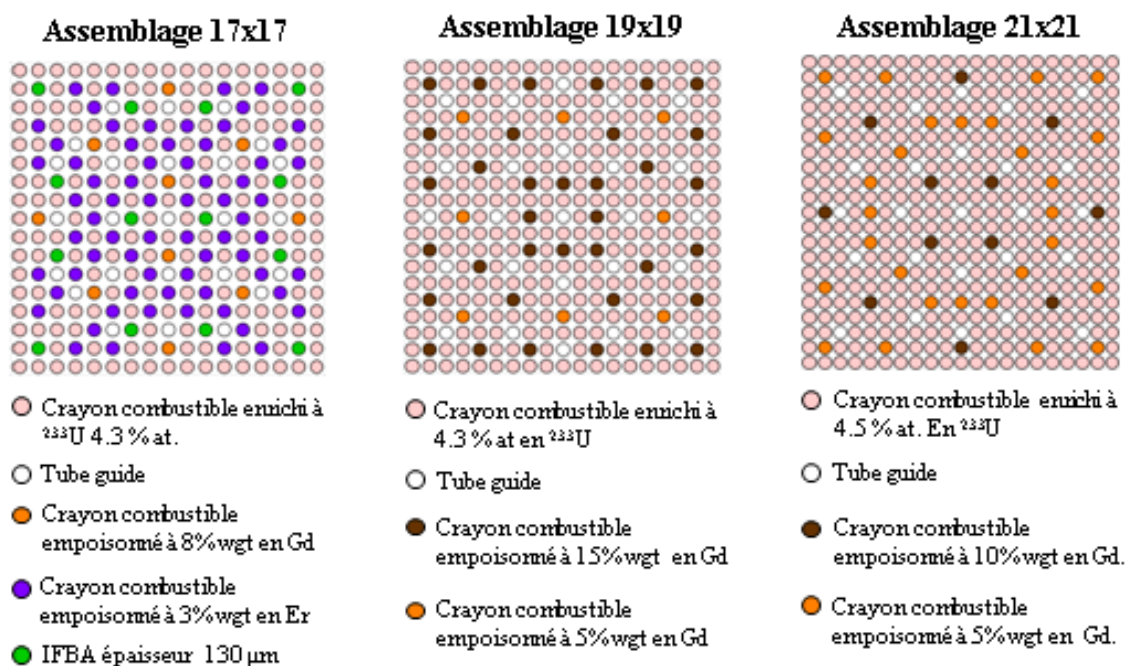


FIGURE 4.18: Représentation, pour les différentes configurations, des assemblages empoisonnés permettant de maintenir la réactivité dans la bande de manoeuvrabilité définie par l'utilisation maximale du bore soluble et un seuil de fuite fixé.

La configuration 17x17 utilise 10 crayons empoisonnés au gadolinium, 68 crayons empoisonnés à l'erbium et 14 crayons munis d'IFBA. La configuration 19x19 utilise 36 crayons empoisonnés à forte teneur en gadolinium (i.e 15 wgt%) et 8 crayons empoisonnés avec une plus faible teneur pondérale (i.e 5 wgt%). Le cas 21x21 utilise quant à lui 12 crayons empoisonnés au Gd à 10 wgt% et 28 crayons empoisonnés également au Gd à la teneur de 5 wgt%. Les résultats en terme d'évolution de la réactivité sont donnés figure 4.19.

La figure 4.19 permet de constater une perte significative en burnup du fait de l'utilisation de poisons consommables. Cette pénalité en burnup est liée à une consommation imparfaite des poisons en fin de cycle. L'introduction de poisons consommables dans un crayon combustible va également réduire la masse de combustible dans ce dernier. Ce défaut de masse fissile est en partie responsable de la baisse de burnup. Pour les raisons précédemment citées, la perte de burnup sera plus importante pour de fortes teneurs en poisons consommables. Signalons que la pénalité résiduelle est plus faible avec le gadolinium que pour l'erbium [89]. Ceci provient des sections efficaces de capture élevées beaucoup plus élevées du gadolinium ainsi qu'à sa cinétique de disparition rapide devant la longueur du cycle. Ces observations viennent conforter notre

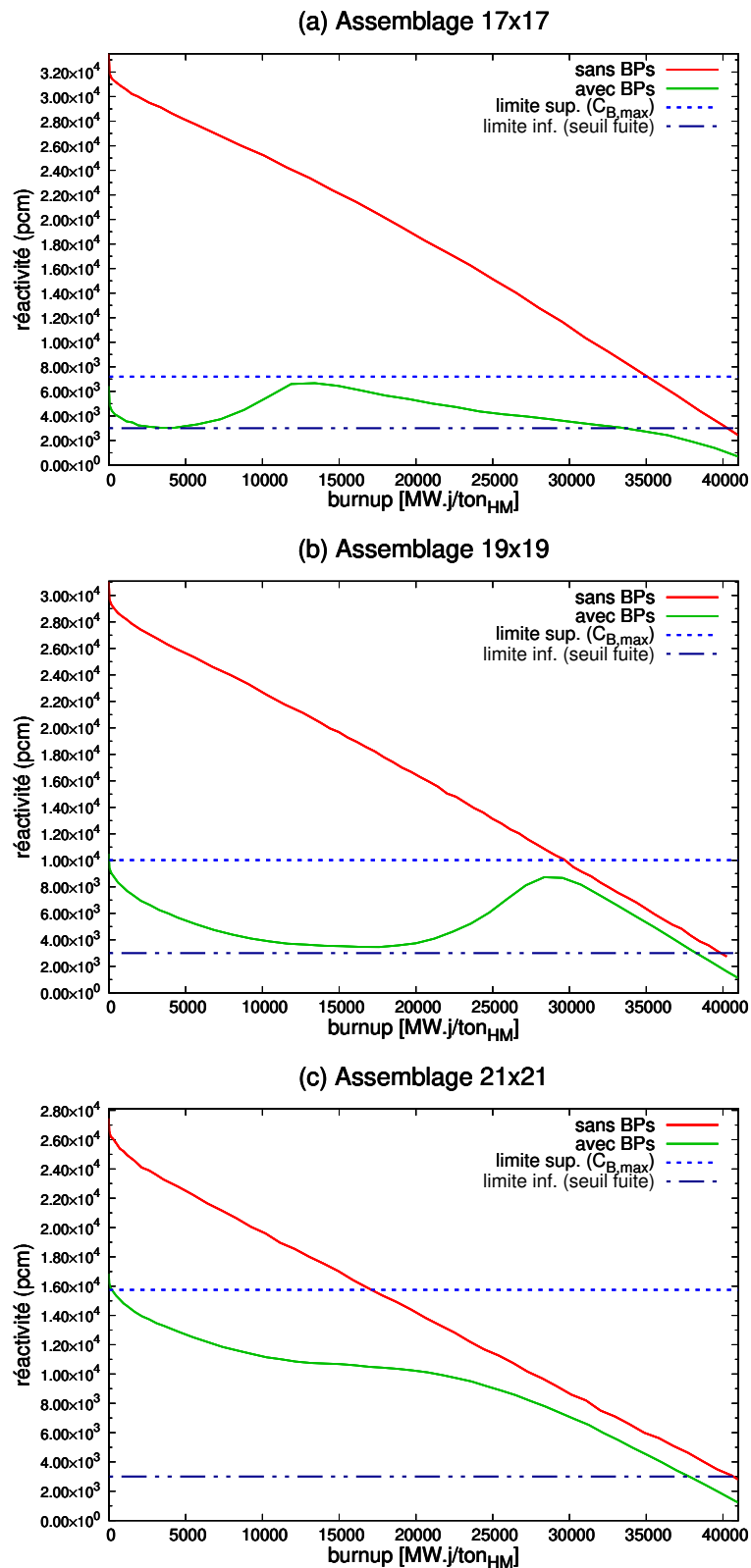


FIGURE 4.19: Évolution de la réactivité avec empoisonnement par poisons consommables dans les trois configurations d'assemblage envisagées pour le SMR Th/U.

choix d'utiliser le gadolinium pour la gestion de la réactivité des configurations 19x19 et 21x21.

Les pertes de performances sur le burnup sont exprimées dans le tableau 4.7, elles représentent une diminution de l'ordre de 5% à 10% du burnup cible. Cette perte significative pose la question de l'optimisation de l'empoisonnement.

configuration	17x17	19x19	21x21
perte de burnup $GW.j/ton$	-6.6	-1.7	-2.6

Tableau 4.7: Perte en burnup lié à l'introduction de poisons consommables, pour chaque configuration.

Dans le cadre de cette étude préliminaire menée en assemblage infini, l'objectif était principalement de trouver des combinaisons d'empoisonnement effectives vis-à-vis de la forte contrainte imposée par la bande de manoeuvrabilité. Il est certainement possible de trouver des combinaisons de poisons consommables plus judicieuses, qui minimisent la perte de burnup et l'amplitude des variations de la réactivité. Une réflexion sur les méthodes et outils adaptés à cette problématique est proposée dans le chapitre suivant. Bien que non optimaux, les empoisonnements proposés fournissent cependant le bon ordre de grandeur de la perte en burnup à laquelle conduit un contrôle de la réactivité par poisons consommables, dans des SMR en *single batch* et pour l'obtention de burnup standards.

4.3 Études avancées à l'échelle cœur

4.3.1 Méthode FCU, détermination d'un maillage d'évolution

La méthode FCU (*Full Core evolution with few Universes*) a été introduite dans le chapitre 3, dédié à l'évaluation des performances du combustible. Elle permet l'évolution d'un cœur complet grâce à SMURE moyennant quelques approximations. Dans les calculs d'assemblages en milieux infinis jusqu'à présent utilisés, seules l'évolution d'un nombre restreint de compositions est calculée. Pour ce faire, on considère que tous les crayons de l'assemblage partagent la même composition et que celle-ci est déplétée selon le flux moyen calculé dans l'ensemble des crayons.

Pour rappel, la méthode FCU transpose ce principe à l'échelle cœur où chaque type d'assemblage est constitué d'un nombre restreint de matériaux évoluant. Le code Monte Carlo (ici *Serpent2*) résout la neutronique du cœur, ce qui permet d'avoir accès au spectre dans chaque matériau évoluant ainsi qu'au niveau de flux dans ces mêmes matériaux. À partir de ces données, SMURE réalise l'évolution grâce à l'estimation des sections efficaces microscopiques des milieux évoluant et la résolution des équations de Bateman.

De la même façon que les compositions des crayons peuvent être mutualisées au sein d'un assemblage, elles peuvent l'être au sein d'un groupe d'assemblages partageant la même composition initiale et étant soumis à des niveaux de flux similaires à chaque instant du cycle.

Cette étude préliminaire se propose de quantifier l'influence du maillage d'évolution utilisé dans la méthode FCU sur l'évolution du cœur de SMR Th/U.

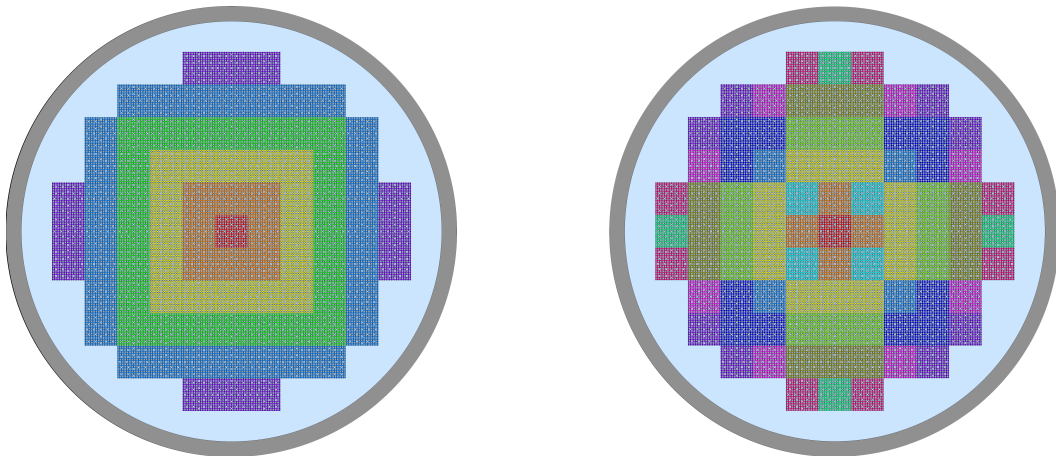
Pour plus de réalisme, un réflecteur simplifié a été ajouté. Ce réflecteur « schématique » est constitué d'une lame d'eau, ceinturant le cœur, de l'épaisseur d'un assemblage et d'une « cuve » constituée d'acier A508 CI3, d'une épaisseur de 20 cm. La complexité relative au cloisonnement interne inférieur n'est donc pas respectée. Axialement, un plenum supérieur et inférieur, en eau d'une épaisseur de 20 cm, entoure le cœur ce qui constitue encore une fois une simplification des géométries réalistes décrites dans [27]. Une fois parvenus en dehors de la cuve, les neutrons ne

sont plus suivis par le code Monte Carlo. Ces approximations sont suffisante pour rendre compte de l'effet du réflecteur sur le bilan neutronique.

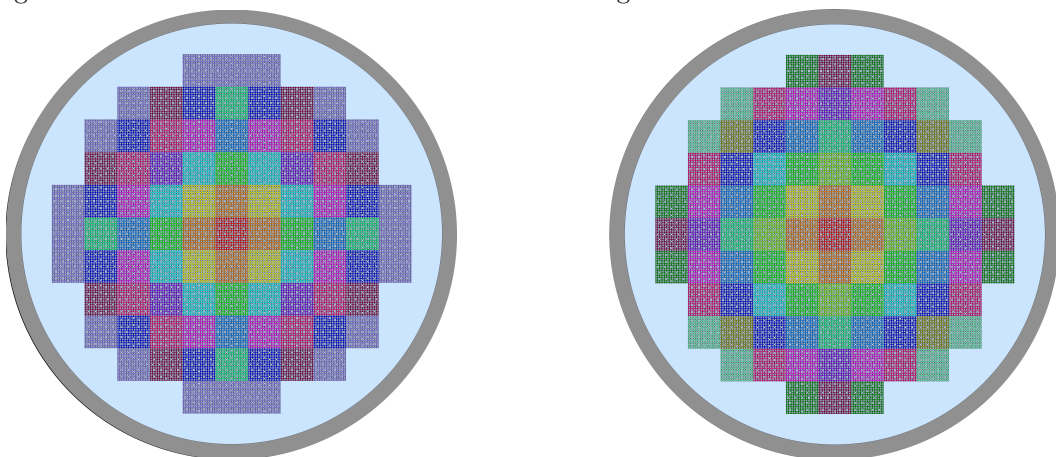
Cette étude est menée sur un cœur chargé en assemblages 19x19. L'évolution s'effectue à une puissance constante imposée de 900 MW_{th} . Afin d'exacerber les différences entre les maillages d'évolution considérés (voir suite), les assemblages du cœur sont uniformément chargés en poisons consommables comme défini dans la figure 4.18.

Le cœur de SMR considéré dans ce document est constitué de 89 assemblages. Il existe donc grâce au jeu des symétries au maximum 16 assemblages différents qu'il est possible de faire évoluer individuellement. Ces 16 groupes d'assemblages constituent le maillage le plus raffiné qu'il est possible d'utiliser avec la méthode FCU. Ce maillage est représentée dans la figure 4.20 (d). L'évolution qui en découle est considérée comme notre cas de référence.

En opérant des rapprochements entre assemblages dont on estime que l'évolution sera similaire (i.e. $\Delta P = 5\%, 10\%$), d'autres maillages d'évolution, plus grossiers, peuvent être proposés, voir figure 4.20 (a),(b),(c).



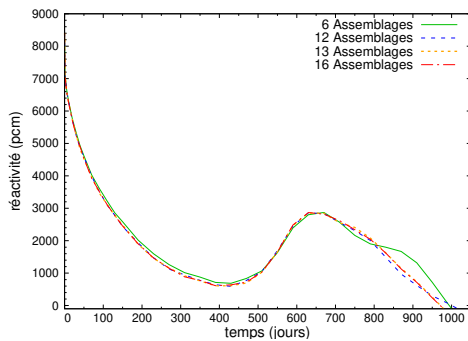
(a) Maillage d'évolution du cœur à 6 groupes d'assemblages (b) Maillage d'évolution du cœur à 12 groupes d'assemblages



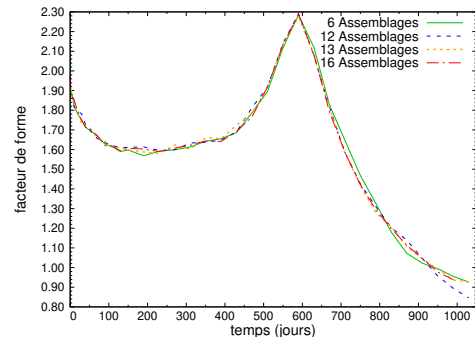
(c) Maillage d'évolution du cœur à 13 groupes d'assemblages (d) Maillage d'évolution du cœur à 16 groupes d'assemblages

FIGURE 4.20: Différents maillages d'évolution testés pour le calcul d'évolution du SMR Th/U avec la méthode SMURE/FCU. Chaque couleur désigne un groupe d'assemblage partageant la même composition au cours de l'évolution et évoluant selon un flux moyenné sur des positions de ce groupe.

L'évolution de la réactivité ainsi que du facteur de forme de l'assemblage central du cœur sont donnés figure 4.21 (a) et (b). Dans un cœur chargé de façon homogène en combustible, le flux adopte le profil du mode fondamental. Dans cette configuration quasi cylindrique la dépendance radiale du flux suit donc une fonction de Bessel de première espèce d'ordre 0. Les assemblages centraux connaissent un flux plus important, ils épuisent donc plus rapidement leur inventaire fissile, ce qui dégrade leur bilan neutronique (i.e. k_∞). En réponse à cette détérioration des sections efficaces macroscopiques au centre du cœur, le profil du flux s'aplatit. C'est ce que montre la diminution du facteur de forme (radiale) de l'assemblage central, qui pour rappel se définit comme de rapport de la puissance de l'assemblage sur la puissance moyenne du cœur, entre 0 et 500 jours.



(a) Évolution de la réactivité du cœur.



(b) Evolution du facteur de forme dans l'assemblage central du cœur.

FIGURE 4.21: Évolution d'un SMR constitué d'assemblages 19x19 identiques, empoisonnés en gadolinium dans les proportions définies par la figure 4.18. Plusieurs maillages d'évolutions sont testés pour simuler l'épuisement du combustible en cœur grâce à la méthode SMURE/FCU.

Dans un cœur sans poison consommable, cette tendance à l'aplatissement de la nappe de flux se poursuit jusqu'à la fin de l'évolution. Au contraire, dans le cas présent, les poisons consommables sont éliminés plus rapidement au centre du cœur à cause des disparités dans la répartition du flux. La remontée de réactivité entre 500 et 700 jours est une conséquence de cette disparition localisée des poisons consommables. Dans les assemblages du centre, le bilan neutronique devient alors plus favorable que chez leurs voisins en périphérie, ce qui provoque une remontée de puissance dans ces assemblages comme le montre la figure 4.21 (b). L'épuisement du combustible vient ensuite mitiger cette remontée de point chaud.

D'importantes disparités sont observées sur l'évolution de la réactivité, jusqu'à 700 pcm⁶, en fin de cycle en fonction du maillage d'évolution choisi. Un maillage d'évolution grossier ne permet pas de modéliser correctement l'évolution de la nappe de puissance du cœur lorsque celle-ci varie localement de façon importante. En effet, des assemblages qui devraient connaître une évolution rapide, du fait leur niveau élevé de flux, voient leur cinétique ralentie à cause de l'utilisation, dans leur calcul de déplétion, d'un flux moyenné sur un ensemble de positions aux puissances significativement différentes. Cette erreur dans l'évolution des compositions se propage ensuite sur l'estimation de la nappe de flux au pas d'évolution suivant, ce qui lui permet s'entretenir voir s'amplifier au fil des calculs. Pour des raisons assez similaires, il convient avec la méthode FCU de ne pas utiliser des pas de temps d'évolution trop importants entre deux estimations de la nappe de puissance au risque de fausser l'évolution des inventaires. C'est particulièrement le cas dans cet exemple où le flux connaît des variations très rapides et très localisées.

6. L'incertitude sur le k_{eff} indiquée par *Serpent2* est alors d'environ 20 pcm

La figure 4.24 présente les burnups finals obtenus, assemblage par assemblage, pour les différents maillages d'évolution testés.

		34.2	21.6					30.0	14.5		
		43.8	34.2	21.6				40.6	30.0	21.3	
	30.7	43.8	34.2	21.6	14.5		47.6	44.9	38.4	26.8	13.9
48.9	30.7	43.8	34.3	21.6	14.5	49.0	48.3	44.9	38.4	26.8	15.4
	(a) 6 groupes d'assemblages						(b) 12 groupes d'assemblages				
		24.2	13.7					22.3	13.7		
		39.2	31.4	20.3				39.2	31.4	20.3	
	46.1	43.1	36.3	24.2	13.7		46.2	43.1	36.4	24.8	13.3
47.8	47.1	44.2	38.0	27.0	13.7	47.7	47.0	44.2	40.0	27.0	14.6
	(c) 13 groupes d'assemblages						(d) 16 groupes d'assemblages				

FIGURE 4.22: Burnup final, exprimé en $GW.j/ton$, assemblage par assemblage pour l'évolution d'un SMR composé de 89 assemblages 19x19 chargés en combustible Th/U empoisonné au gadolinium. Évolution calculée par SMURE/FCU avec différents maillages de déplétion.

Les différences restent modestes d'un assemblage à un autre pour les différents maillages d'évolution considérés. Elles sont les plus importantes dans les assemblages à la périphérie du cœur où elles valent jusqu'à $10 GW.j/ton$. Cependant ces imprécisions n'affectent que faiblement la valeur du burnup final moyen du cœur qui est surestimée d'environ $0.5 GW.j/ton$ dans les cas à 6 et 12 groupes d'assemblages. Avoir un maillage grossier en évolution n'est donc pas très pénalisant dès lors que l'on s'intéresse uniquement à des variables à l'échelle du cœur complet. Rappelons que le calcul de comparaison de SMURE/FCU à la NDM présenté dans le chapitre 3 aboutissait aux mêmes conclusions. Dans la suite de ce document, le maillage d'évolution à 13 assemblages sera préféré puisqu'il s'avère suffisant pour rendre compte de façon précise de la variation la réactivité au cours du cycle, ce qui est nécessaire dans la perspective de préciser la gestion de la réactivité utilisée. Soulignons que dans le cadre de la simulation de petits cœurs, il n'y pas un fort intérêt à restreindre le nombre de groupe d'assemblage évoluant. Le temps de calcul gagné par l'utilisation d'un maillage grossier est difficile à estimer car il faut tenir compte de la statistique moindre qu'un tel maillage autorise dans les calculs Monte Carlo.

4.3.2 Zonage de l'enrichissement

Les cœurs sont uniformément chargés par les assemblages empoisonnés définis dans la figure 4.18. Le maillage d'évolution utilisé comporte 13 groupes d'assemblages pour les cœurs 19x19 et 21x21. Le maillage d'évolution du cœur 17x17 est plus grossier et comporte uniquement 9 groupes d'assemblages.

Comme démontré dans l'étude précédente sur les maillages d'évolution (voir figure 4.21(b)), le facteur de forme radial initial, à l'échelle inter-assemblage, est très élevé, environ 1.9. Cette répartition du flux est causée par le chargement uniforme des cœurs. Un calcul analytique simple, présenté dans le chapitre 1, basé sur un bilan énergétique dans le caloporteur d'une cellule élémentaire (i.e. $F\Delta H$), permet de fixer la valeur maximale du facteur de forme radial à 1.55 [93], [94]. Au dessus de 1.55 fois la puissance nominale, le caloporteur atteint la température de saturation en sortie du cœur, ne laissant aucune marge de sûreté en cas d'accident. Pour rappel cette limite est indépendante du rapport de modération de l'assemblage car le débit massique du caloporteur est choisi de façon à atteindre une élévation de température de 40K en cœur dans une cellule élémentaire soumise à la puissance moyenne.

L'enrichissement de chaque assemblage est modifié de façon à s'opposer à la tendance naturelle du flux d'adopter un profil radial en fonction de Bessel (i.e J_0). Au centre du cœur, l'enrichissement est donc être diminué et inversement pour les assemblages en périphérie. Un profil d'enrichissement linéaire, décroissant depuis de la périphérie vers le centre, répond à ces attentes. Pour que le zonage de l'enrichissement affecte peu le burnup final, la masse totale de fissile en cœur doit être conservée. De plus, pour éviter une trop forte augmentation des fuites du cœur et ainsi préserver la longueur du cycle, l'enrichissement de la dernière ceinture périphérique reste inchangé.

Les assemblages réunis au sein du même groupe d'évolution (i.e univers) partagent le même enrichissement. Le profil linéaire appliqué tient alors compte de la distance moyenne du groupe d'assemblage au centre du cœur comme exprimé par la formule ci dessous :

$$\epsilon(\bar{r}) = \alpha \cdot (\langle \bar{r} \rangle - \bar{r}) + \bar{\epsilon}$$

Avec :

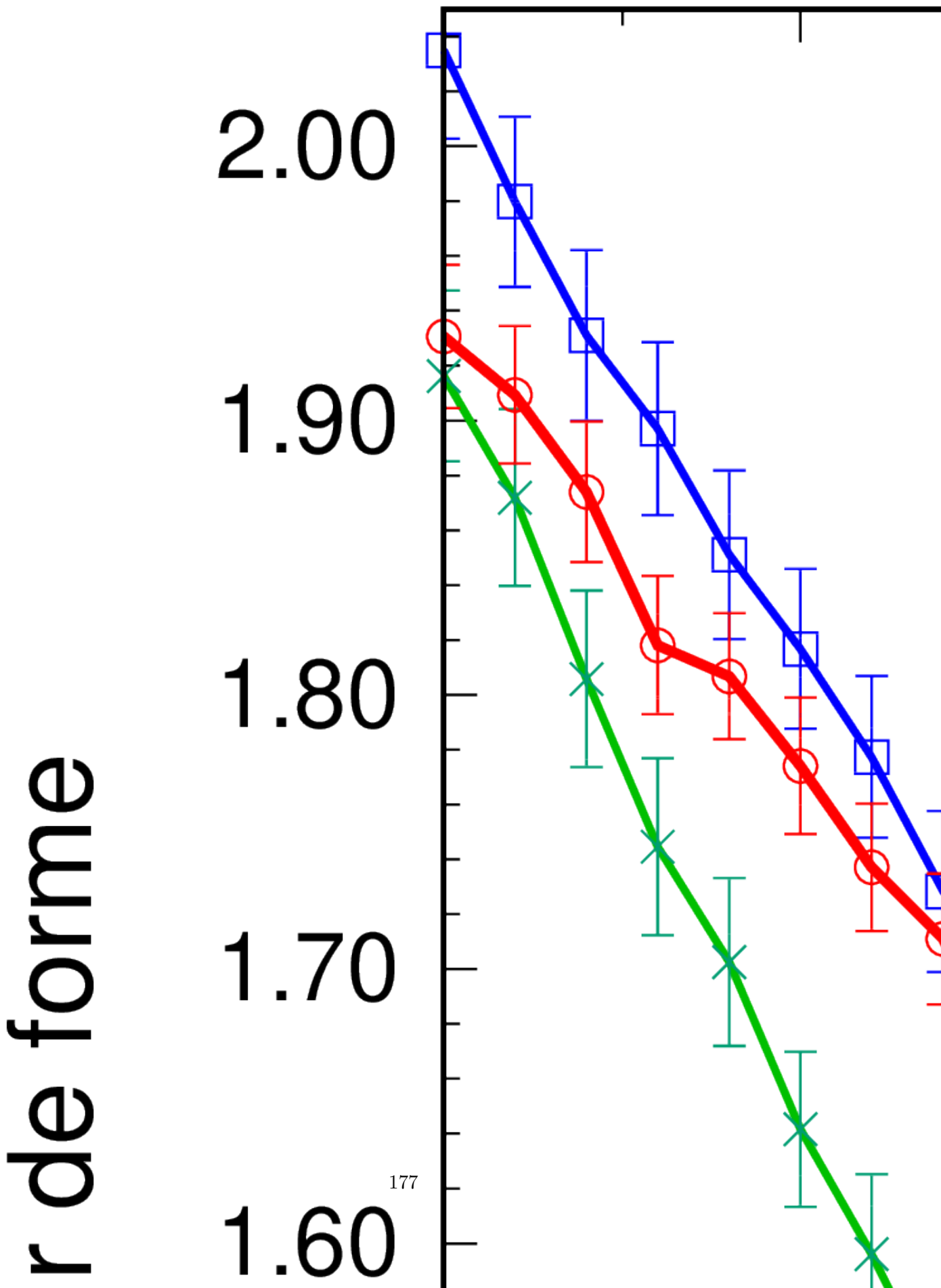
\bar{r} , la distance radiale moyenne d'un groupe d'assemblage au centre du cœur.

$\langle \bar{r} \rangle$, la distance moyenne au centre du cœur pour tout assemblage exceptés ceux situés à la périphérie et dont l'enrichissement n'est pas modifié.

$\bar{\epsilon}$, l'enrichissement moyen.

$\epsilon(\bar{r})$, l'enrichissement commun aux assemblages d'un univers dont la distance moyenne au centre du cœur est de \bar{r} .

Le seul paramètre libre restant est la pente de la droite. Une étude paramétrique est menée avec *Serpent2* sur la configuration de début de cycle pour déterminer la valeur optimale de ce paramètre α . L'espace des valeurs possibles pour α est parcouru à partir de 0, par pas de $-4.67 \times 10^{-4} \text{ \%at} \cdot \text{cm}^{-1}$, sur une cinquantaine d'incrémentations laissant ainsi les enrichissements varier dans une gamme d'environ 3 at% à 5 at%. Les résultats de cette étude paramétrique sont présentés dans la figure 4.23.



Dans le cas du cœur 17x17, on observe une remontée du facteur de forme quand la pente devient inférieure à $\alpha = -1.17 \times 10^{-2}$ (soit après le 25^{ème} pas). Ce phénomène est en réalité un artefact dû au maillage d'évolution plus grossier employé dans le cas du cœur 17x17. Puisque l'enrichissement est commun au sein d'un univers, il existe une valeur de pente où l'enrichissement devient trop localisé au sein d'une couronne d'assemblage ce qui provoque la remontée du facteur de forme.

Le profil choisi pour le cœur 17x17 est celui pour lequel le facteur de forme sera minimal, ce qui correspond au 23^{ème} pas sur la figure 4.23. Les cœurs 19x19 et 21x21 ne connaissent pas un minimum aussi marqué. Les pentes choisies pour le profil linéaire correspondent au pas 31 et 30 pour le cœur 19x19 et 21x21. Du point de vue du facteur de forme, il n'y a pas d'intérêt à prendre un gradient d'enrichissement plus élevé, de plus ces configurations pourraient mener à une augmentation du taux de fuite au cours du cycle. Le zonage d'enrichissement utilisé et les facteurs de forme radiaux obtenus sont présentés dans les tableaux 4.24.

			1.06	0.60					4.96	4.30		
			1.30	1.25	0.93				4.31	4.63	4.96	
		1.09	1.22	1.24	0.98	0.53		3.89	4.12	4.35	4.58	4.30
0.95	1.04	1.19	1.24	1.03	0.55		3.66	3.89	4.12	4.35	4.58	4.58
(a) facteur de forme radial en cœur 17x17						(b) enrichissement du cœur 17x17 (%at.)						
			0.95	0.53					4.61	4.20		
			1.32	1.20	0.87				4.22	4.44	4.69	
		1.13	1.28	1.30	1.01	0.50		3.81	4.05	4.32	4.61	4.20
0.92	1.05	1.24	1.32	1.08	0.54		3.40	3.69	3.98	4.27	4.56	4.20
(c) facteur de forme radial en cœur 19x19						(d) enrichissement du cœur 19x19 (%at.)						
			0.90	0.58					4.62	4.50		
			1.28	1.15	0.85				4.22	4.45	4.71	
		1.18	1.27	1.25	0.98	0.57		3.79	4.04	4.32	4.62	4.50
1.01	1.12	1.26	1.28	1.05	0.60		3.37	3.67	3.97	4.27	4.57	4.50
(e) facteur de forme radial en cœur 21x21						(f) enrichissement du cœur 21x21 (%at.)						

FIGURE 4.24: Gradients d'enrichissement appliqués dans les différents SMR Th/U considérés et facteur de forme radial à l'échelle assemblage obtenus au BOC.

Le facteur de forme maximal constaté en début de cycle est d'environ 1.30 ce qui laisse une marge confortable vis à vis de la limite thermohydraulique. Le cœur 21x21 permet d'atteindre des facteurs de forme radiaux encore plus intéressants, d'environ 1.25, grâce à son spectre plus dur. Cependant cette étude sur le début de cycle n'est pas suffisante car il est nécessaire de vérifier que le critère est respecté sur toute la longueur du cycle. De plus, seule la puissance moyenne à l'échelle de l'assemblage a été considérée. Il faudrait également s'assurer qu'à l'échelle intra-assemblage aucun crayon n'atteint la température de saturation.

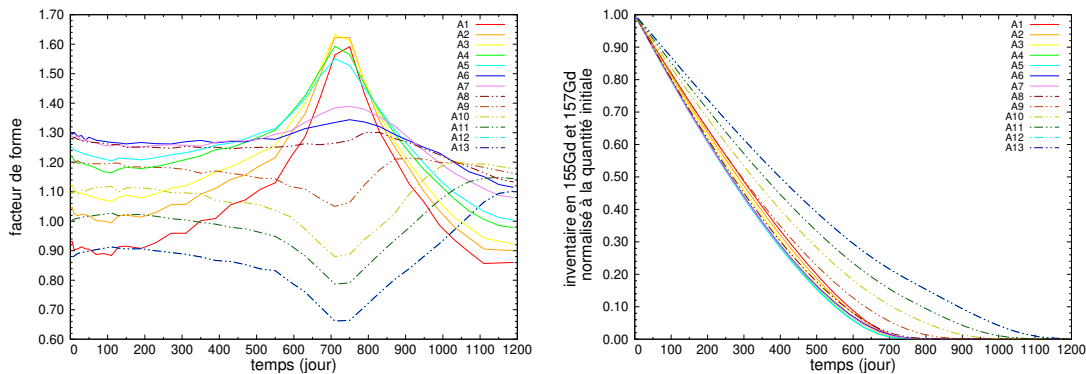
4.3.3 Rétro-action des poisons consommables sur le facteur de forme

Consommation hétérogène des poisons consommables

Le zonage de l'enrichissement a été appliqué à chaque configuration de cœur, pour des assemblages dont l'empoisonnement, dimensionné en milieu infini (voir figure 4.18), est identique. Il a ainsi été vérifié que le facteur de forme radial en début de cycle est inférieur aux limites permises par la thermohydraulique. Il est à présent nécessaire de s'intéresser à l'évolution de cette variable sur toute la durée du cycle.

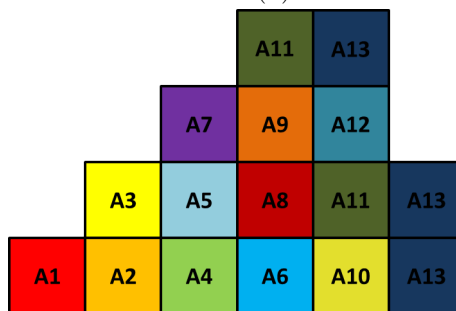
Bien que les disparités dans la nappe de flux aient été lissées, elles restent suffisamment importantes pour provoquer une consommation hétérogène des poisons consommables. Ce phénomène entraîne deux problèmes :

- La cinétique d'épuisement des poisons consommables est accélérée dans les assemblages soumis à une forte densité de puissance. Ces assemblages vont donc éliminer leurs poisons consommables plus rapidement que dans le reste du cœur. En conséquence, leur k_∞ sera plus important que celui de leur voisinage ce qui est à l'origine d'une remontée importante du facteur de forme, aussi appelée remontée de point chaud. Ce phénomène a déjà été illustré figure 4.21 (b). L'application d'un zonage de l'enrichissement, voir la figure 4.25, va mitiger l'augmentation du facteur qui atteint alors la valeur de maximale de 1.6 au lieu de 2.3, sans toutefois résoudre le problème puisque les valeurs atteintes restent au dessus du critère du $F\Delta H$.
- Le dimensionnement des poisons consommables et leur cinétique de disparition sont adaptés pour une certaine durée de cycle et pour un niveau de puissance donné. Comme le montre la figure 4.25 (b), les assemblages fortement irradiés éliminent leur inventaire de poisons consommables bien avant la fin du cycle. Au contraire, dans les assemblages périphériques où la densité de puissance est faible, l'élimination des poisons consommables est tardive, ce qui confine la production de puissance au centre du cœur et prive ce dernier de ressource fissile. Cela se traduit par une diminution notable du burnup (ce dernier point sera illustré dans la suite).



(a) Évolution du facteur de forme

(b) Évolution des inventaires en gadolinium.



(c) Schéma du maillage d'évolution utilisé pour le cœur 19x19

FIGURE 4.25: Évolution du facteur de forme radial inter-assemblage dans le cœur 19x19 et représentation de la cinétique de disparition des inventaires des deux principaux isotopes du gadolinium.

En conclusion, tant pour des raisons de sûreté que de performances en combustion, il est nécessaire d'adapter l'empoisonnement à chaque position assemblage, ou dans notre cas à chaque « univers évoluant ».

Première tentative de correction « à la main » des poisons consommables

En première tentative, les teneurs des poisons consommables (et respectivement l'épaisseur des couches d'IFBA) sont ajustées de façon proportionnelle à la puissance produite dans chaque assemblage au BOC. Le nombre de crayons empoisonnés reste inchangé. De façon à conserver le bon apport d'antiréactivité au cours du cycle et ainsi rester dans la bande de manœuvrabilité, la masse totale des poisons consommables est conservée à l'échelle du cœur. Implicitement, on fait l'hypothèse que le zonage des poisons consommables va prévenir de fortes redistributions de puissance, ce qui permet de s'assurer que la nappe de puissance utilisée au BOC (et pour le zonage des BP) reste valide pendant toute la durée de l'évolution. Le résultat de cet ajustement est donné par le tableau 4.26.

Une façon plus rigoureuse de traiter ce problème aurait été de redimensionner les poisons consommables sur un assemblage en milieu infini en fonction des différents niveaux de puissance imposés pendant l'évolution. Il faut alors veiller à ce que l'apport d'antiréactivité ait la même cinétique d'évolution dans tous les assemblages afin de ne pas provoquer une remontée de point chaud.

Bien que cette façon de procéder n'ait pas de solide fondement théorique, les résultats qui en découlent sont satisfaisants comme l'illustre la figure 4.27.

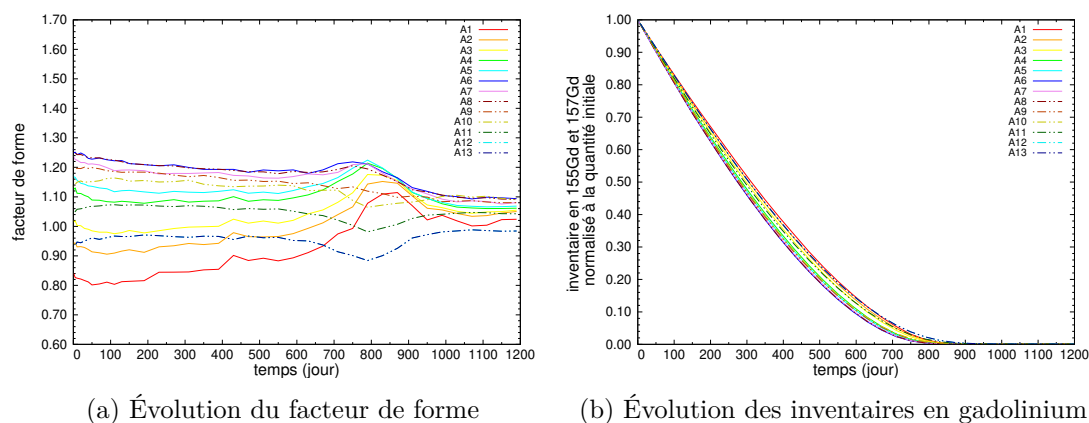


FIGURE 4.27: Évolution du facteur de forme inter-assemblage dans le cœur 19x19 et représentation de la cinétique de disparition des inventaires des deux principaux isotopes du gadolinium. Le cœur a alors subi un zonage de l'enrichissement puis un zonage des poisons consommables en fonction de la puissance moyenne de chaque univers.

L'examen des inventaires de gadolinium univers par univers montre que le zonage des poisons consommables a joué son rôle en permettant à ces derniers de disparaître quasiment à la même vitesse dans chaque assemblage. Les résultats peuvent cependant être encore optimisés. En effet, il subsiste une dispersion dans les dates de disparitions des poisons consommables qui sont comprises entre 750 et 850 jours. Cette dispersion se manifeste par une faible remontée de point chaud, localisée au centre du cœur vers 850 jours, comme le montre la figure 4.27 (b). En dépit de cet événement, notons que la tendance naturelle de la nappe de puissance est à l'aplatissement. Les facteurs de formes maximaux atteints au cours du cycle sont donnés tableau 4.8 pour chaque configuration de SMR Th/U étudiées. Ces valeurs sont bien en dessous des limites préalablement fixées.

			5.73	4.89	
			2.56	2.14	
			111	93	
			7.03	6.80	5.73
			3.04	2.96	2.56
			131	128	111
	6.70	6.56	6.91	6.27	4.89
	2.88	2.98	2.99	2.70	2.14
	125	130	129	117	93
6.48	6.70	6.56	6.91	6.27	4.89
2.75	2.88	2.98	2.99	2.70	2.14
119	125	129	129	117	93

(a) Concentrations exprimées en wgt% des 10 crayons Gadolinium (rouge), des 68 crayons d'Erbium (bleu) et des 14 crayons d'IFBA (vert, exprimé en μm) de chaque groupe d'assemblages du cœur 17x17.

			12.04	8.74				4.13	3.79		
			4.01	2.91				8.27	7.58		
	15.00	13.88	11.20				4.85	4.37	4.00		
	5.00	4.63	3.73				9.71	8.75	7.92		
14.73	15.00	14.76	12.03	8.74		5.03	5.02	4.77	4.13	3.79	
4.91	5.00	4.92	4.01	2.91		10.0	10.0	9.55	8.27	7.58	
14.26	14.47	15.00	15.00	12.94	8.74	5.04	5.01	5.04	4.90	4.15	3.79
4.75	4.82	5.00	5.00	4.31	2.91	10.0	10.0	10.0	9.81	8.30	7.58

(b) Concentrations exprimées en wgt% des 36 crayons à forte teneur Gd (rouge), des 8 crayons à faible teneur Gd (orange) de chaque groupe d'assemblages du cœur 19x19.

(c) Concentrations exprimées en wgt%, des 28 crayons à faible teneur en Gd (rouge), des 10 crayons à forte teneur en Gd (orange) de chaque groupe d'assemblages du cœur 21x21.

FIGURE 4.26: Zonage des poisons consommables dans chaque groupes d'assemblage de chaque configuration cœur considérée pour le SMR Th/U.

configuration	17x17	19x19	21x21
facteur de forme maximal	1.23	1.25	1.17
date d'occurrence (jour)	350	0	950

Tableau 4.8: Facteur de forme inter-assemblages maximale constaté et date à laquelle celui-ci survient au cour du cycle, pour les trois configurations de SMR Th/U considérées avec zonage de l'enrichissement et des poisons consommables.

4.3.4 Conséquences des zonages sur le burnup et la gestion de la réactivité

Après s'être assuré du respect du critère sur le facteur de forme, il convient de vérifier qu'en dépit des modifications apportées sur les poisons consommables, la réactivité reste comprise dans la bande de manoeuvrabilité. La figure 4.28 démontre que c'est bien le cas. Le seuil inférieur de la bande de manoeuvrabilité est redéfini comme étant le seuil de criticité du cœur. Sur les premiers pas de temps (i.e. en deçà de 5 jours), la réactivité est, dans toute les configurations de SMR envisagées, au dessus de la limite supérieure de la bande de réactivité. Le bore soluble seul ne

permet donc pas de rendre le cœur critique en début de cycle. Les barres de contrôle restent indispensables pour contrôler la réactivité à minima pendant la période de mise à l'équilibre du xénon 135. Notons que sans le zonage des poisons consommables, le cœur 19x19 devient sous-critique d'environ -300 pcm entre 10 et 15 $GW.j/ton$, la modification de l'empoisonnement était donc indispensable.

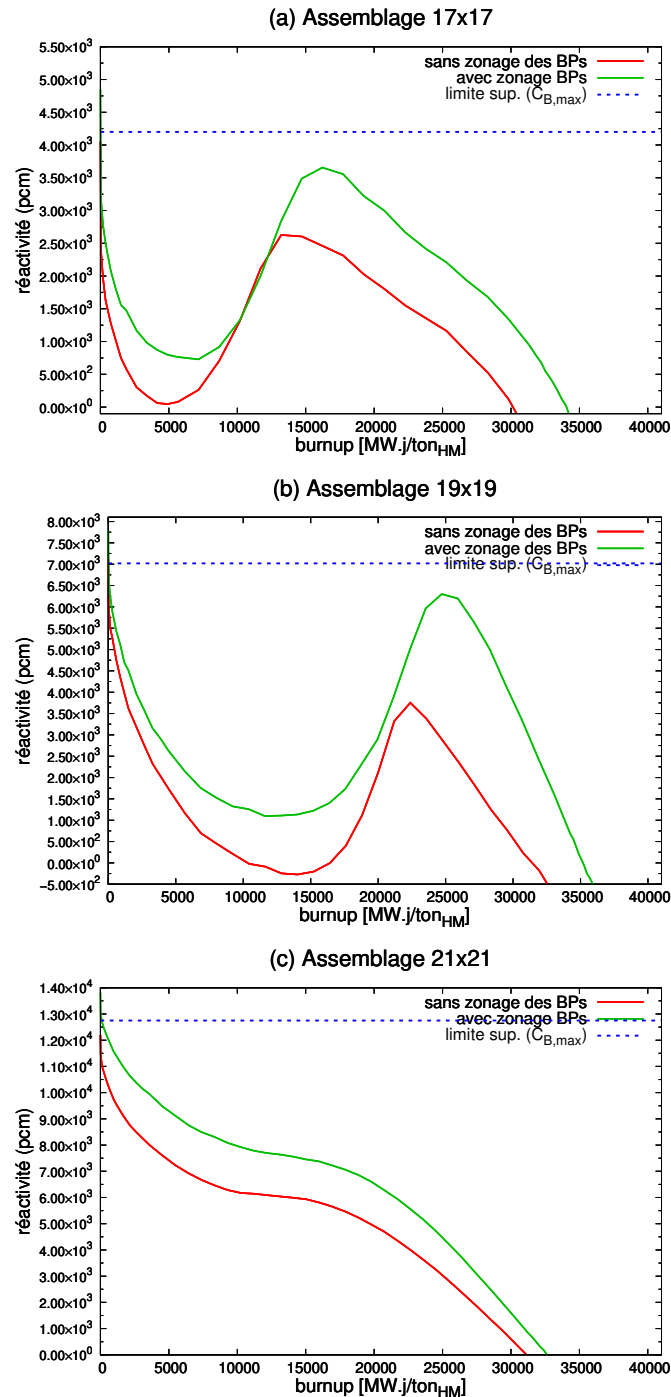


FIGURE 4.28: Évolution de la réactivité au cours du cycle, sans et avec zonage des poisons consommables (BP), pour les différentes configuration de SMR Th/U considérées

De façon générale, le zonage des poisons consommables a rapproché leur cinétique de dis-

partition de celle espérée suite au dimensionnement en milieu infini. Le ré-équilibrage de la distribution des poisons consommables permet en particulier de ramener le burnup final vers les valeurs attendues. Une mauvaise répartition des BP peut être responsable de la perte d'environ 5 GW.j/ton , comme c'est le cas dans le cœur 17×17 , ce qui souligne l'importance de cet aspect de la conception du cœur.

Des écarts importants demeurent entre les estimations en cœur et celles prédites en milieu infini. En particulier dans le cas du réseau 21×21 où le burnup final à l'échelle cœur est d'environ 33 GW.j/ton contre 38 GW.j/ton à l'échelle assemblage. Cette différence s'explique principalement par la sous-estimation du niveau de fuite pris en compte à l'échelle assemblage. Pour rappel ce dernier était de 3000 pcm , or comme le montre la figure 4.29, il aurait dû être proche de 5000 pcm . En considérant rétrospectivement les résultats à l'échelle assemblage en milieu infini avec le bon seuil de fuite, on retrouve des résultats très similaires à ceux des simulations à l'échelle cœur.

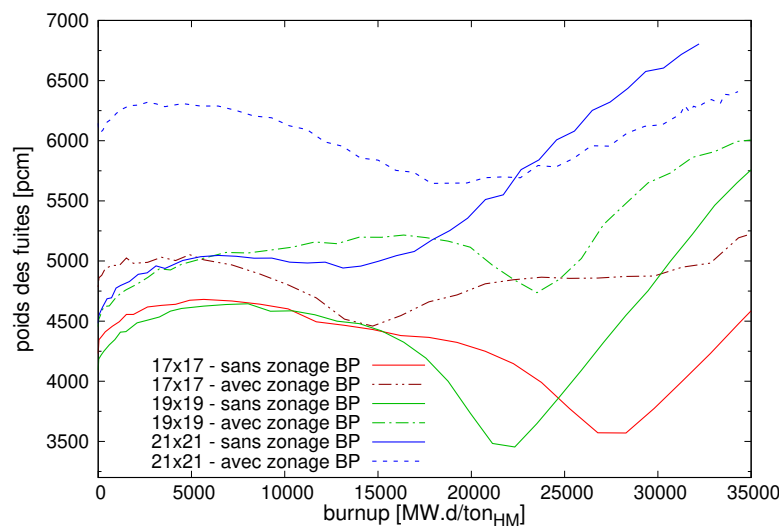


FIGURE 4.29: Évolution de la proportion de fuite du cœur au cours du cycle, sans et avec zonage des poisons consommables (BP), pour les différentes configurations de SMR Th/U considérées. Le taux de fuite est estimé à la surface de la zone fissile du cœur et non à la surface du réflecteur, ce qui est plus cohérent avec une comparaison des résultats en milieu infini.

Au contraire, le burnup final constaté dans le cas du cœur 17×17 montre un bon accord entre l'estimation cœur et celle en milieu infini et ce en dépit de la sous-estimation du taux de fuite à l'échelle assemblage. Cette coïncidence s'explique par une compensation d'erreurs entre la sous-estimation des fuites et un effet de thermalisation du spectre en cours de cycle (liée à l'utilisation du Th/U) qui est plus marqué dans le cas du réseau 17×17 .

En conclusion, les zonages d'enrichissement et de BP sont nécessaires afin de mieux correspondre au pré-dimensionnement à l'échelle en milieu infini. Leur influence sur le burnup final est minime. Une meilleure connaissance du taux de fuite à l'échelle cœur aurait permis de mieux coller au burnup cible. L'ordre de grandeur de la pénalité résiduelle des poisons consommables calculé en milieu infini est confirmé à l'échelle du cœur.

4.3.5 Suivi du bore soluble et du champ de température pendant l'évolution

Un dernier raffinement, permettant de tester la sensibilité à la concentration en bore et au champ de températures, est apporté aux calculs cœur.

Le suivi en bore est réalisé en déterminant, préalablement à chaque pas de temps, la concentration en bore permettant au cœur d'être critiqué à plus ou moins 200 pcm près. Cette concentration critique est déterminée itérativement par une série de calculs *Serpent2*.

Le suivi en température est réalisé par un couplage simple entre SMURE et BATH. Le code BATH calcule et applique un champ de température à l'équilibre dans chaque univers évoluant selon la carte de puissance estimée au pas de temps précédent. Aucun détail axial n'est introduit afin de rester cohérent avec la simplification d'une composition homogène sur toute la hauteur du crayon. Ce sont donc également des températures moyennées (du combustible, de la gaine et du caloporteur), qui sont appliquées dans chaque assemblage. Cette étape comprend notamment la modification des densités du caloporteur aux températures correspondantes. Pour être plus rigoureux le calcul du champ de température aurait dû être itéré avec le calcul neutronique [28]. Cependant, en tant que première estimation de l'influence du champ de température sur l'évolution, cette approche se montre suffisante.

Suivi en bore

Le programme de concentration en bore au cours du cycle est donné dans la figure 4.30 pour l'ensemble des configurations de SMR Th/U considérées. Dans le cas des cœurs 17x17 et 19x19, l'utilisation de concentrations initiales en bore légèrement supérieures aux limites maximales précédemment déterminées s'avère nécessaire pour rendre le cœur critique. Ce problème vient souligner une lacune dans notre stratégie de gestion de la réactivité. En effet, aucun contrôle de la réactivité n'est prévu pour pallier la variation rapide de réactivité lors de la mise à l'équilibre du xénon. Ce constat avait déjà été formulé précédemment et s'était conclu par le recourt nécessaire à des barres de pilotage.

Bien que les concentrations critiques aient été dépassées, ces configurations seront quand même utilisées pour les tests en conditions accidentelles (i.e REA).

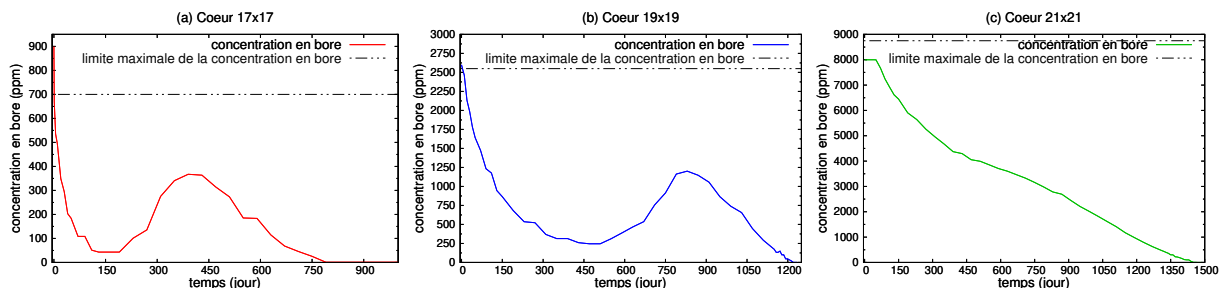


FIGURE 4.30: Évolution de la concentration en bore nécessaire afin de maintenir le cœur critique (à ± 200 pcm près) au cours du cycle dans chaque cas.

Suivi en température

Les températures moyennes maximales atteintes au cours du cycle sont données dans le tableau 4.10. Ces maxima ont systématiquement lieu en début de cycle, ce qui confirme la mitigation de la remontée de point chaud par le zonage des poisons consommables.

configuration	température combustible (K)	température gaine (K)	température caloporteur (K)
17x17	1150	620	611
19x19	1014	617	612
21x21	762	610	602

Tableau 4.9: Températures moyennes maximales combustible et gaine et température de sortie du caloporteur constatées au cours du cycle.

Dans le cas des assemblages 17x17 et 19x19, les températures atteintes par le caloporteur en sortie d'assemblage laissent une marge assez réduite à l'ébullition, d'environ 5 K. En fin de cycle, les températures maximales du caloporteur sont de plus proche de 605 K. Les températures de combustibles sont satisfaisantes car éloignées des températures de fusion. De même pour les températures de gaine qui sont bien inférieures aux températures de fusion du zircaloy (à savoir 1440 K) et ne présage pas d'une oxydation anormalement rapide (au delà de 900 K).

Le DNBR a également été vérifié, voir figure 4.31. Deux estimations du DNBR sont proposées :

- la première à l'échelle d'un assemblage. Le calcul du DNBR est alors basée sur l'estimation du facteur de forme inter-assemblage maximal fournie tableau 4.8. Elle suppose une nappe de puissance plate à l'intérieur de l'assemblage. Ce cas permet d'apprécier la marge au DNB à l'échelle moyennée d'un assemblage.
- la seconde à l'échelle du crayon. Un calcul de reprise de l'assemblage le plus chaud est mené en milieu infini pour estimer le facteur de forme (radial) intra-assemblage. Les crayons les plus chauds sont toujours situés à côté d'un tube guide. Le facteur de forme intra-assemblage permet d'estimer le facteur de forme radial maximal défini comme : $F_{intra-assemblage} \times F_{inter-assemblage}$, avec F le facteur de forme à l'échelle indiquée en indice. Le calcul du DNBR à l'échelle crayon s'appuie sur ce facteur de forme total. Cette nouvelle estimation du DNBR permet d'apprécier la marge à l'ébullition nucléée de l'assemblage le plus chaud en tenant compte des disparités de la nappe de puissance intra-assemblage.

configuration	17x17	19x19	21x21
Facteur de forme intra-assemblage	1.23	1.13	1.15
Facteur de forme radial maximal	1.50	1.41	1.34
Nombre de crayons concernés	12	48	48

Tableau 4.10: Facteur de forme intra-assemblage obtenu dans l'assemblage le plus chaud par un calcul de reprise en milieu infini mené avec *Serpent2*. Le facteur de forme radial maximal correspond au produit des facteurs de forme (radial) maximal intra et extra assemblage. Le nombre de crayons concernés indique le nombre de crayons dont le facteur de forme est similaire (à 0.1 près) au facteur de forme maximal.

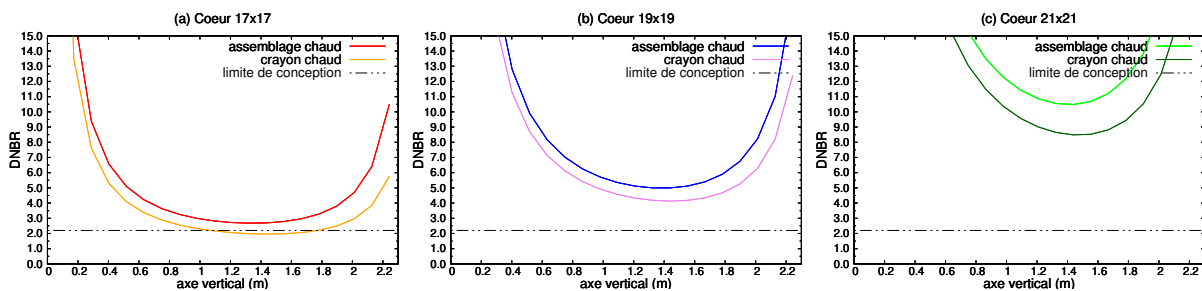


FIGURE 4.31: DNBR dans l'assemblage le plus chaud et dans le sous-canal du crayon le plus chaud de cet assemblage. Le DNBR est calculé pour les facteurs de formes maximaux constatés au cours du cycle.

Le DNBR est calculé par BATH en supposant un profil de puissance axial cosinusoidale. Cette hypothèse n'est pas représentative du cas le plus pénalisant. En effet, l'utilisation de barres de contrôle peuvent rendre la distribution de puissance plus piquée.

Les résultats obtenus pour le cas 21x21 montre une très forte marge à ébullition nucléée (cf. figure 4.31). Celle-ci s'explique par la faible densité de puissance volumique des crayons combustibles dans cette configuration. Cependant ces bonnes performances à l'état stationnaire ne préfigure pas du comportement en situation accidentelle. La marge au DNBR est également très satisfaisante dans le cas du cœur 19x19 puisque le crayon le plus chaud se situe bien au-dessus du critère de conception retenu [26]. Dans le cas du cœur 17x17, l'assemblage le plus chaud remplit en moyenne le critère de conception mais sur certains crayons (environ 12), la marge à l'ébullition nucléée peut s'avérer insatisfaisante. Sur ces mêmes crayons on constate que le facteur de forme, de 1.5, est très proche de la limite thermohydraulique. Rappelons que le placement des poisons consommables à l'échelle assemblage n'a pas été optimisé et peut donc constituer une source d'amélioration pour le design.

4.3.6 Bilan sur les performances cycle des SMR thoriés sous-modérés

Après s'être assuré du respect des principaux critères de sûreté (facteur de forme, DNBR) mais aussi de la faisabilité de la gestion de la réactivité, ce paragraphe propose une synthèse des performances cycle en fonction des niveaux de sous-modération utilisés et de la prise en compte successive des contraintes de dimensionnement.

L'ensemble des configurations utilisées pour modéliser l'évolution des SMR Th/U sont désignées dans la suite par les lettres suivantes :

- A** : simulation assemblage en milieu infini.
- B** : simulation assemblage en milieu infini avec poisons consommables.
- C** : simulation cœur avec zonage de l'enrichissement, sans zonage des poisons consommables.
- D** : simulation cœur avec zonage de l'enrichissement et zonage des poisons consommables.
- E** : simulation cœur avec zonage de l'enrichissement et des poisons consommables, suivi en bore et suivi du champ de température.

Comme le montre le tableau 4.11, les performances en conversion (voir ICR) du cas 17x17 sont très similaires à celles d'un REP UOX, ce qui souligne la nécessité de la sous-modération pour rendre l'utilisation du Th/U pertinente [13]. L'essentiel de la perte en burnup, en comparaison à la valeur cible, provient de l'insertion des poisons consommables. La combinaison de poisons consommables utilisée peut certainement être optimisée, cependant une importante quantité de poisons restera nécessaire du fait de l'étroitesse de la bande de manoeuvrabilité, elle même causée *in fine* par le faible CTC du combustible Th/U dans un réseau 17x17.

configuration	A	B	C	D	E
burnup $GW.j/ton$	40.2	33.3	29.8	34.0	32.8
ICR	0.56	0.51	0.51	0.52	0.52
^{231}Pa (g/FA)	19.3	20.0	18.8	19.8	20.3
^{232}U (g/FA)	13.6	11.6	10.0	12.1	11.8
^{233}U (% masse initiale)	47	55	60	55	57
^{234}U (g/FA)	1175.5	1030.1	949.6	1052.0	1055.3
^{235}U (g/FA)	197.6	148.2	137.7	162.1	141.0
^{236}U (g/FA)	22.6	13.6	11.7	15.4	12.7

Tableau 4.11: Principales observables en fin de cycle pour les configurations utilisant un réseau 17x17.

Le cœur 19x19 est un cas intermédiaire qui permet une amélioration significative de la conversion, voir tableau 4.12. Contrairement au cas 17x17, l'introduction des poisons consommables

s'accompagne par une faible perte en burnup d'environ 1 GW.j/ton . Pour rappel, cette différence s'explique principalement par la plus grande largeur de la bande de manœuvrabilité dans la configuration 19x19. Dans ces conditions, il est plus facile de trouver une combinaison « optimale » de poisons consommables. La perte la plus importante sur le burnup se situe lors du passage à l'échelle cœur, elle est essentiellement due à une sous-estimation du niveau de fuites à l'échelle assemblage. Le suivi de la concentration en bore n'a pas d'impact significatif sur l'évolution contrairement aux deux autres cas.

configuration	A	B	C	D	E
burnup (MW/j/t)	39.8	38.7	31.4	35.3	35.6
ICR	0.60	0.59	0.57	0.58	0.59
^{231}Pa (g/FA)	28.5	30.3	27.4	28.8	29.9
^{232}U (g/FA)	21.2	22.2	17.6	19.7	21.0
^{233}U (% quantité initiale)	53	56	63	58	59
^{234}U (g/FA)	1546.1	1516.3	1311.4	1419.0	1450.5
^{235}U (g/FA)	286.0	279.8	223.1	248.3	262.2
^{236}U (g/FA)	30.8	28.0	21.4	24.5	26.8

Tableau 4.12: Principales observables en fin de cycle pour les configurations utilisant un réseau 19x19. Se référer à la liste ci-dessus pour comprendre la dénomination des cas envisagés.

Le cas 21x21 est celui qui permet le mieux d'apprécier l'influence bénéfique de la sous-moderation sur la conversion, comme l'indique le niveau d'ICR dans le tableau 4.13. Un meilleur niveau de conversion facilite la gestion de la réactivité en diminuant la réserve de réactivité nécessaire pour parvenir au burnup cible. L'introduction de poisons consommables est responsable d'une perte d'environ 2 GW.j/ton , supérieure au cas 19x19, et qui peut certainement être diminuée par une optimisation du dimensionnement des poisons. La principale contribution à l'écart entre le burnup cible et le burnup final provient de la sous-estimation des fuites à l'étape cœur. Celles-ci sont plus importantes dans le réseau 21x21 du fait de l'augmentation de la composante rapide du spectre. Notons que l'utilisation de bore soluble va contribuer à un durcissement supplémentaire du spectre, ce qui va à la fois augmenter le burnup (d'environ 2 GW.j/ton) et la conversion. Cependant, l'avantage de fonctionner avec un spectre durci doit être nuancé. En effet, la production d'isotopes indésirés est également plus importante. C'est le cas ici pour la quantité d' ^{232}U produite, qui une fois rapportée à la masse de combustible fissile en assemblage est environ 50% plus élevée dans le cas 21x21 que dans le cas 17x17.

configuration	A	B	C	D	E
burnup (MW/j/t)	39.6	37.7	30.3	32.6	34.8
ICR	0.65	0.64	0.62	0.63	0.66
^{231}Pa (g/FA)	44.1	43.8	33.6	40.8	43.87
^{232}U (g/FA)	29.8	28.0	21.6	23.4	28.1
^{233}U (% masse initiale)	62	64	70	67	69
^{234}U (g/FA)	2027.2	1935.5	1637.0	1732.5	1862.5
^{235}U (g/FA)	393.9	367.1	279.3	302.1	353.5
^{236}U (g/FA)	37.9	33.1	22.7	25.2	35.2

Tableau 4.13: Principales observables en fin de cycle pour les configurations utilisant un réseau 21x21.

L'utilisation d'un zonage d'enrichissement a indirectement permis de sonder les bénéfices

d'un plan de chargement hétérogène avec des zones fertiles faiblement enrichies au centre du cœur, et fissiles fortement enrichies et proches de la périphérie. Cela se traduit pour des taux de conversion (CR) accrue au centre, supérieur à 0.7, comme le =montre la figure 4.32.

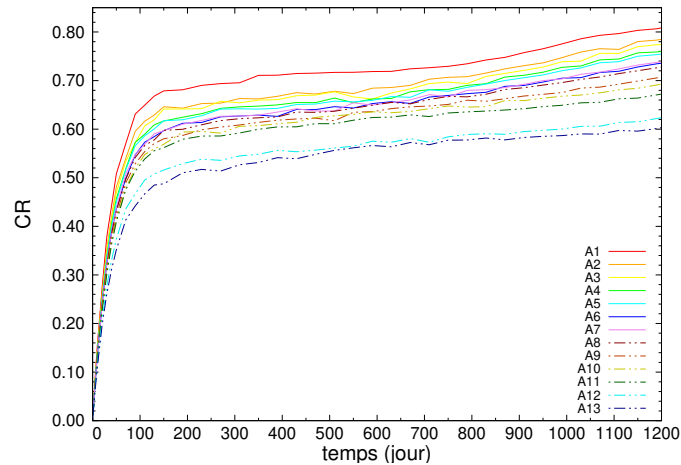


FIGURE 4.32: Taux de conversion (CR) assemblage par assemblage pour l'évolution du cœur 21x21 (configuration E). La nomenclature des assemblages est donnée figure 4.25 (c).

A la périphérie du cœur (voir groupes d'assemblages A12 et A13), la présence d'un réflecteur d'eau légère va dégrader significativement le taux de conversion du fait d'une plus forte thermalisation. Un gain de conversion peut être espéré par l'utilisation d'un réflecteur lourd en acier. En dépit de ce zonage, optimal du point de vue du facteur de forme, le bilan moyen à l'échelle cœur ne laisse pas présager un accroissement significatif des performances en conversion puisque l'ICR dans le cas A et E est quasiment identique.

Enfin, pour mieux coller au burnup cible, une nouvelle itération des différentes étapes de conception pourrait être entreprise. Un meilleur enrichissement initial peut être déterminé en prenant en compte un taux de fuites à l'échelle cœur plus réaliste et fonction du rapport de modération. Un léger sur-enrichissement est également nécessaire pour anticiper la pénalité résiduelle due aux poisons consommables et qui représente approximativement 2 GW.j/ton .

4.4 Évaluation de la sûreté des concepts de SMR Th/U sous-modérés sur le cas d'un accident d'éjection de grappe

4.4.1 Définition de l'état initial

Les spécifications de l'accident d'éjection de grappe sont reprises du benchmark *minicore* (cf. chapitre 2) :

- Le transitoire commence avec un cœur critique.
- Le cœur est à puissance nulle, c'est à dire 10^{-6} fois la puissance nominale [53].
- Le cœur est considéré comme isotherme, à la température d'entrée du caloporteur, soit 560 K. Du fait des très bas niveaux de puissance dans les assemblages, le couplage entre la neutronique et la thermique est faible. Cette situation facilite la mise à l'équilibre des deux physiques en évitant les itérations inter-codes.
- L'éjection de la grappe de contrôle a lieu en 0.1 s. En dépit de l'utilisation d'assemblages deux fois plus courts qu'en REP ce temps caractéristique est conservé.
- La conductance thermique utilisée pour modéliser le *gap* entre le combustible et la gaine est fixé à $10^5 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}$ en conformité avec l'ordre de grandeur établi dans le benchmark

minicore. La configuration simulée correspond donc à un gap ouvert entre la gaine et le combustible, ce qui maximisera l'estimation du flux en paroi de la gaine durant le transitoire. Mentionnons qu'une pratique courante consiste à faire la mise à l'équilibre avec un gap fermé, de façon à maximiser l'énergie initiale contenu dans le combustible, puis à imposer au début du transitoire une valeur de conductance très grande de façon à simuler un cas pessimiste vis-à-vis du critère d'ébullition nucléée.

Le transitoire simulé est non protégé ce qui signifie qu'aucun moyen de contrôle permettant de mitiger les conséquences de l'accident ne sera simulé. De plus, les moyens de contrôle extérieurs interviennent en générale après 1 seconde or le transitoire n'est simulé que sur 0.4 s (soit 4 fois le temps d'éjection), ce qui s'avère suffisant pour obtenir une quasi stabilisation des principaux paramètres du cœur.

Sélection de l'instant du cycle

En REP UOX, la proportion de neutrons retardés évolue à la baisse au cours du cycle du fait de l'apparition du ^{239}Pu dont le β_{eff} est plus faible que celui de ^{235}U comme le montre le tableau 4.14. Afin de se placer dans le cas le plus pénalisant, les accidents d'insertion de réactivité se déroulent en général au EOC, ce qui permet donc de minimiser β_{eff} .

Isotope	^{232}Th	^{233}U	^{235}U	^{238}U	^{239}Pu	^{241}Pu
Fraction de neutrons retardés en fi- lière thermique (pcm)	2507	296	615	1766	226	550

Tableau 4.14: Fraction de neutrons retardés pour les principaux isotopes contribuant à la fission dans le combustible [95].

Comparativement à un combustible UO_2 , l'utilisation du thorium et en particulier du fissile ^{233}U va diminuer la proportion de neutrons retardés (voir tableau 4.14) mais également changer son évolution. En effet, dans un combustible thorié, de ^{235}U est produit au cours du cycle. Cet isotope, dont le β_{eff} est plus important que celui de ^{233}U , apporte une contribution non négligeable au taux de fission en cœur comme le montre le tableau 4.15. La thermalisation du spectre (voir section efficace microscopique de fission de ^{233}U) qui a lieu pendant l'évolution, va également favoriser la proportion de fissions obtenues sur le ^{232}Th . Ces effets restent cependant très tenus et se traduisent par une augmentation de β_{eff} d'environ 10 à 20 pcm au cours du cycle, comme indiqué dans le tableau 4.16.

Configuration	17x17		19x19		21x21	
	BOC	EOC	BOC	EOC	BOC	EOC
fission ^{235}U (%)	-	2.8	-	2.4	-	1.9
fission ^{232}Th (%)	1.6	1.7	1.9	2.0	2.2	2.5
$\bar{\sigma}_{fis}^{233}\text{U}$ (barn)	36.8	56.4	28.3	41.5	21.6	26.0

Tableau 4.15: Contribution au taux de fission des isotopes ^{235}U et ^{232}Th et évolution de la section efficace de fission (moyennée en énergie) du ^{233}U au BOC et au EOC.

Configuration	BOC (0 GW.j/ton)	MOC (20 GW.j/ton)	EOC (≈ 35 GW.j/ton)
17x17	325	334	342
19x19	329	337	343
21x21	336	344	349

Tableau 4.16: Valeur du β_{eff} (issue de l'estimateur *Serpent2* ADF_IFP_IMP_BETA_EFF), donné en pcm, à différent instant du cycle en fonction du niveau de modération.

Pour simuler un transitoire REA, se placer au BOC semble plus indiqué afin de maximiser les conséquences de l'accident. Pour confirmer cette hypothèse, l'éjection de grappe sera simulée, dans la suite, à deux instants du cycle au BOC et EOC.

Mise à l'équilibre en état d'attente à chaud

Au BOC

La concentration en bore soluble est fixée de façon à rendre le cœur critique dans l'état de pleine puissance. Ces concentrations, calculées dans l'évolution cœur avec suivi de la concentration en bore, sont données par la figure 4.33.

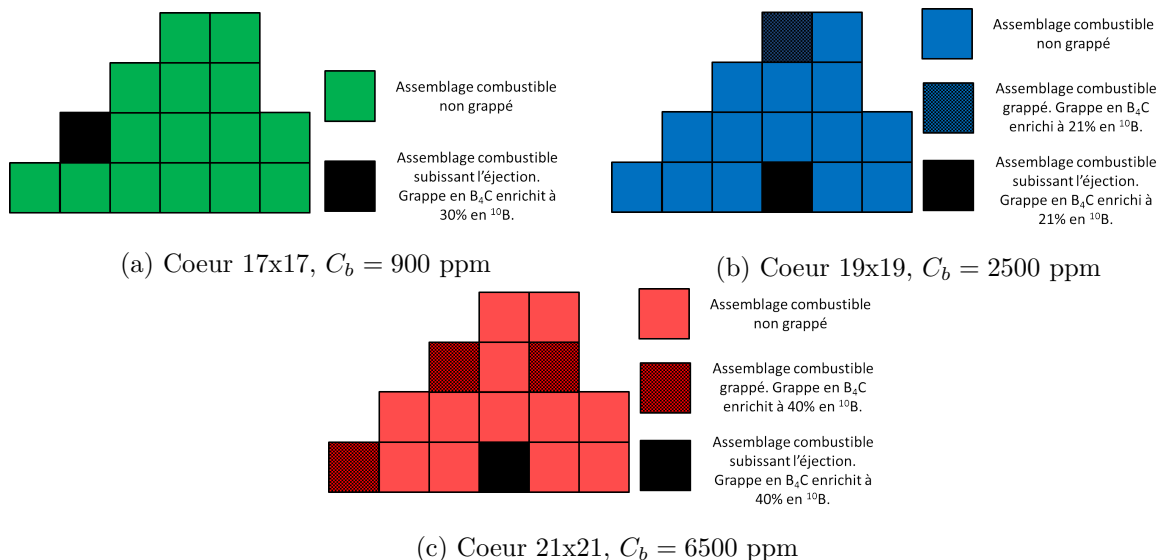


FIGURE 4.33: Configuration utilisée pour l'éjection de grappe au BOC dans les différents SMR Th/U considérée. Seul un huitième du cœur est représenté.

La concentration en bore du cas 21x21 a été revue à la baisse en anticipation d'une contre-réaction positive du modérateur (cf. section 4.4.2)

Pour compenser la réactivité excédentaire d'une configuration plus froide qu'en condition nominale, des grappes de contrôle sont introduites en cœur. Ces grappes sont constituées de B_4C . Par défaut la concentration en ^{10}B utilisée est la proportion isotopique naturelle, c'est à dire $\approx 21\%at$. Les barres de contrôle sont placées en priorité sur les assemblages les plus chauds. Ces emplacements sont redéterminés après chaque nouveau placement d'une grappe de contrôle.

Enfin, les grappes de contrôle ont dû être enrichies en ^{10}B dans certaines configurations, comme dans le cas 21x21, en partie pour compenser le manque de bore soluble mais également du fait d'un spectre plus dur qui rend les barres de contrôles moins efficaces.

Au EOC

À la fin du cycle, le cœur a épuisé sa réserve de réactivité. Il est considéré comme critique mais avec une concentration en bore nulle. Le refroidissement global du cœur en HZP permet de dégager une marge de réactivité qui est à nouveau compensée par l'insertion de grappes de contrôle en B_4C . Les configurations accidentelles considérées sont représentées par la figure 4.34. Les grappes de contrôle sont positionnées selon la même méthodologie que pour le BOC.

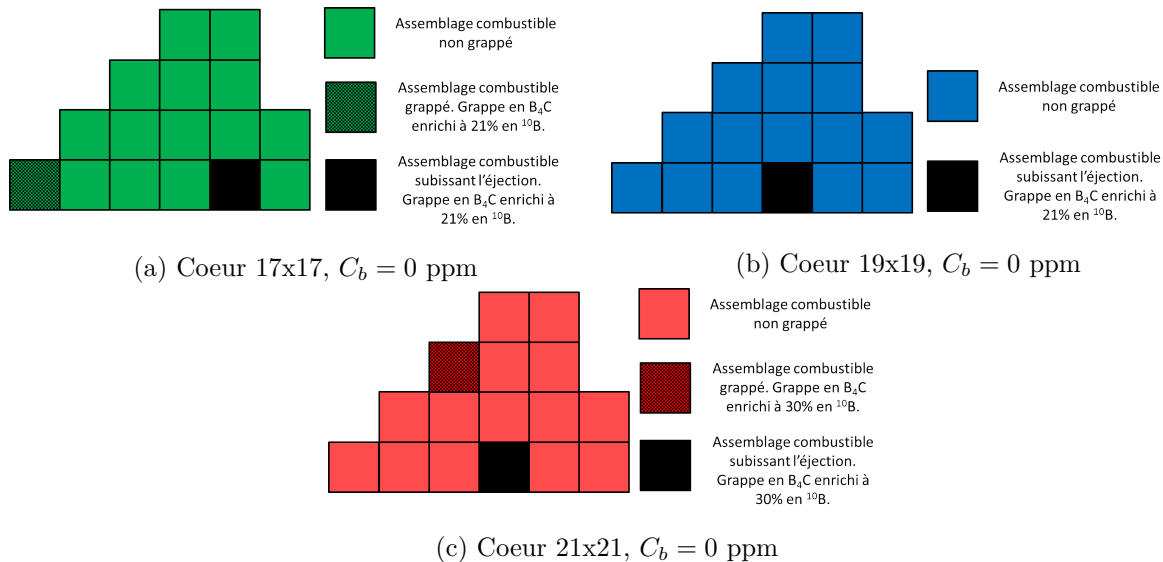


FIGURE 4.34: Configuration utilisée pour l'éjection de grappe au EOC dans les différents SMR Th/U considérée. Seul un huitième du cœur est représenté.

Il s'avère que la proportion de ^{10}B contenue dans les barres de contrôle utilisées en REP est plutôt de l'ordre de 60 at%, [96]. De ce fait nos grappes de contrôle ont un poids en réactivité plus faible que la normale. Pour pallier ce défaut, deux barres de contrôle seront éjectées simultanément dans le cas 17x17 et 19x19. La seconde barre de contrôle éjectée correspond à l'emplacement grappé symétrique le plus proche. Il a été montré que c'est cette configuration qui aboutit à la plus grande insertion de réactivité. Les résultats relatifs à l'éjection d'une seule grappe de contrôle laisse d'importante marge de sûreté, ils ne sont donc pas présentés ci-dessous mais sont disponibles dans l'annexe de ce chapitre.

Le calcul des transitoires est réalisé via le couplage NDM/BATH. Le cœur de SMR est représenté par maillage cartésien comportant 20 niveau axiaux. Les assemblages sont subdivisés radialement en quatre parties. Le réflecteur est également représenté comme une couronne périphérique uniquement constituée d'eau, de l'épaisseur d'un assemblage et ceinturant le cœur. Sa température est gardée constante à 560 K pendant toute la durée du transitoire. Les sections efficaces sont produites et interpolées selon la méthodologie décrite dans le chapitre 2.

La suite de cette section s'attache d'abord à présenter les résultats à l'échelle du cœur avant de passer en revue les critères de sûreté locaux, spécifiques à l'accident de REA.

4.4.2 Résultats du transitoire : revue des paramètres globaux à l'échelle cœur

Après avoir expliqué la physique de l'accident d'éjection de grappe sur le cas du cœur 17x17, l'analyse de transitoire de REA sur les cœurs 19x19 et 21x21 se montrera plus concise et ne s'attardera que sur leurs spécificités.

Cœur 17x17

Les résultats à l'échelle cœur pour cette double éjection de grappe dans la configuration du cœur 17x17 sont donnés figure 4.35.

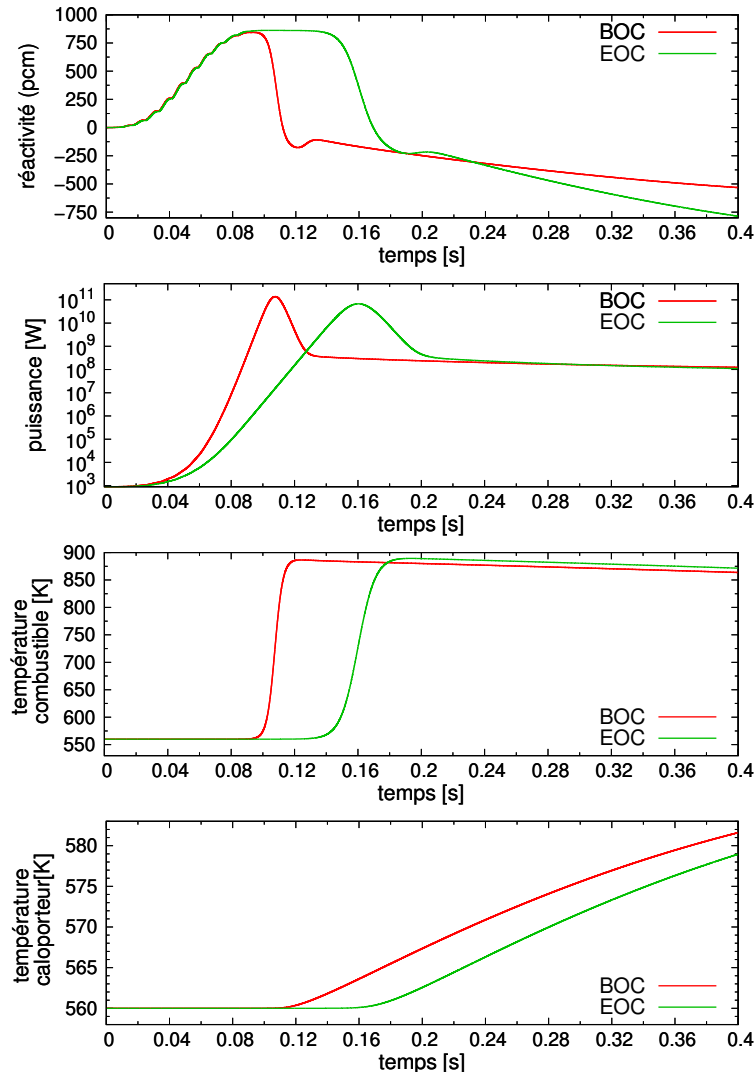


FIGURE 4.35: Résumé de l'éjection des deux grappes de contrôle dans le cœur 17x17. Les températures combustible et caloporteur données sont celles d'un des assemblages subissant l'éjection de grappe. Elles sont moyennées sur tout l'assemblage.

De 0.0 à 0.088 s : L'insertion de réactivité reste faible jusqu'à environ 0.02 s puisque les zones du cœur libérées des grappes de contrôle ont une importance neutronique faible. Pour les mêmes raisons, la réactivité commence à se stabiliser vers 0.09 s et ce alors qu'il reste encore 10% de la hauteur des grappes à éjecter. Notons que la double éjection des grappes de contrôle a des conséquences très similaires dans les deux configurations envisagées tant sur la cinétique d'insertion de la réactivité que sur la quantité insérée. Les maxima de réactivité atteints sont de 850 pcm et de 870 pcm respectivement dans les cas du BOC et du EOC. Dans cette première phase, la puissance ne fait qu'augmenter en réponse à l'insertion de réactivité sans que cela ne déclenche de contre-réactions.

De 0.088 s à 0.096 s pour le BOC et 0.088 s à 0.136 s pour le EOC : La réactivité

atteint un plateau, assez court dans le cas du BOC, d'approximativement 0.05 s et environ 15 fois plus long dans le cas du EOC. L'éjection de grappe est terminée, la réactivité ne peut donc plus augmenter, mais elle ne peut pas non plus diminuer puisque le niveau de puissance à 0.1 s est trop faible pour atteindre le seuil Doppler. La fin de ce plateau est caractérisée par l'atteinte d'une puissance cœur d'environ 10^{11} W soit environ 100 fois la puissance nominale et qui correspond à une puissance d'environ 10^9 W dans l'assemblage éjecté.

Le faible écart entre les β_{eff} des configurations BOC et EOC (environ 20 pcm) ne suffit pas à expliquer la différence dans la vitesse d'évolution de la population neutronique. Pour s'en convaincre un modèle rudimentaire de cinétique point couplé à une thermique adiabatique du combustible est implémenté. Les équations résolues sont données en annexe de ce chapitre. La cinétique d'insertion de la réactivité est respectée grâce à une modélisation sous la forme d'une courbe sigmoïde⁷. Les paramètres neutroniques sont calculés avec *Serpent2* dans l'assemblage subissant l'éjection. Les niveaux de puissance initiaux ainsi que le poids de la grappe éjectée sont également calculés de la même façon. Les résultats obtenus par ce modèle simplifiés sont présentés dans la figure 4.36.

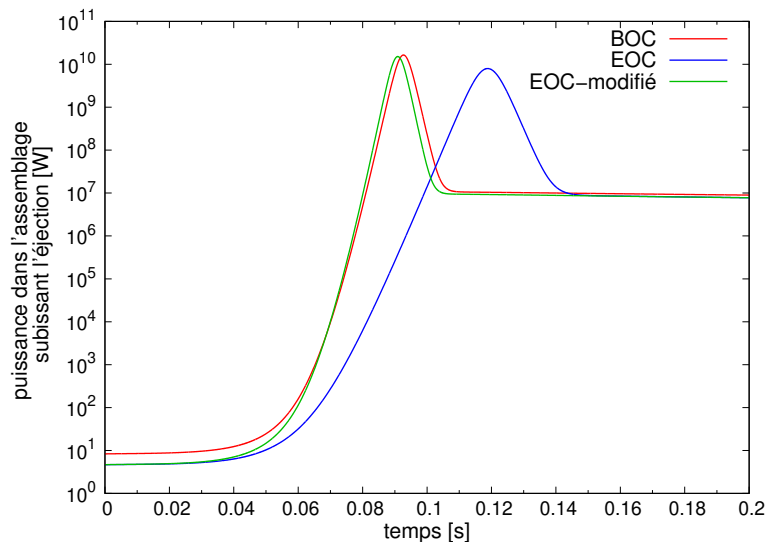


FIGURE 4.36: Évolution de la puissance dans un des assemblages éjectés du cœur 17x17. La simulation est réalisée avec un modèle rudimentaire de cinétique point. Le cas « EOC-modifié » correspond à la configuration où tous les paramètres neutroniques (i.e β_i , poids de la barre, etc..) sont ceux calculés au EOC excepté le temps de génération (Λ_{eff}) qui correspond à celui du BOC.

L'évolution de la puissance dans l'assemblage éjecté, obtenue par cinétique point, est cohérente avec les résultats du couplage NDM/BATH. Cependant, la simplification extrême du modèle implique des écarts, en particulier sur les puissances maximales atteintes qui sont environ 7 fois moindre avec la cinétique point. Le pic de puissance dans le cas du BOC et du EOC sont séparés d'approximativement 0.03 s en cinétique point contre 0.05 s dans la simulation NDM/BATH. Le modèle simplifié mis en place est donc suffisant pour rendre compte de cette différence de cinétique entre les deux configurations. Une troisième simulation est entreprise avec le modèle de cinétique point. Dans cette configuration appelée « EOC-modifié », tous les paramètres neutroniques du EOC sont conservés à l'exception du temps de génération (noté Λ_{eff}) qui est pris identique à celui du BOC. En dépit de l'utilisation de fractions de neutrons

7. c'est-à-dire de la forme $\frac{1}{1+e^{-\lambda \cdot t}}$

retardés différentes, on constate que la réponse temporelle de la puissance est alors très similaire entre le cas BOC et le cas « EOC-modifié ».

En conclusion la différence de comportement entre les configurations BOC et EOC s'explique dans le formalisme de la cinétique point par la différence des temps de génération. Comme le montre le tableau 4.17, le Λ_{eff} au EOC est plus du double que celui au BOC. Pour une insertion de réactivité identique il faudra donc deux fois plus de temps pour parvenir au même niveau de puissance. Cette augmentation du temps de génération a pour origine le thermalisation du spectre en cours de cycle, spécifique au combustible Th/ ^{233}U , déjà mise en évidence précédemment.

Configuration	BOC	EOC
$\Lambda_{eff} (s^{-1})$	1.11×10^{-5}	2.40×10^{-5}

Tableau 4.17: Temps de génération au BOC et au EOC dans la configuration 17x17.

De 0.096 s à 0.120 s pour le BOC et de 0.135 s à 0.19 s pour le EOC : La puissance dans les assemblages atteint un seuil suffisant ($\approx 10^8$ W) pour provoquer une augmentation significative de température combustible. Cette dernière fait chuter la réactivité via la contre-réaction négative du combustible, la puissance arrête alors de croître mais reste à un niveau suffisamment élevé pour continuer la chauffe du combustible. L'injection d'antiréactivité se poursuit jusqu'à rendre cette dernière négative. En conséquence, le niveau de puissance diminue suffisamment pour que la température combustible se stabilise. Les températures moyennes maximales atteintes sont alors de 850 K et 830 K respectivement pour le BOC et l'EOC. Cette différence de température se justifie entre autres par un meilleur FTC au EOC.

De 0.12 s à 0.13 s pour le BOC et de 0.19 s à 0.20 s pour le EOC : Suite à la contre-réaction du combustible la réactivité atteint un minimum situé à environ -100 pcm dans les deux cas. S'en suit une faible reprise de la réactivité malgré la fin de l'éjection. Cette dernière s'explique par l'évolution du profil de température radial du combustible au seins du crayon après cette période de chauffe. Rappelons que dans BATH, pour un niveau de discrétisation axial donné, la puissance est répartie radialement de façon uniforme dans le crayon. Une partie de l'énergie emmagasinée par le combustible est donc rapidement transmise à la gaine dont l'impact sur la réactivité est considéré comme nul. En conséquence, la température moyenne combustible, utilisée pour simuler la dépendance des sections efficaces macroscopiques, diminue et la réactivité augmente dans ce cas d'environ 50 pcm.

De 0.13 s à 0.4 s pour le BOC et de 0.2 s à 0.4 s pour le EOC : L'énergie emmagasinée par le combustible passe progressivement au caloporteur dont l'augmentation de température devient significative. Du fait de la contre-réaction négative du caloporteur, la réactivité diminue et ce jusqu'à la fin de la simulation. Comme attendu, la contre-réaction du modérateur est plus importante pour l'EOC du fait de l'absence de bore soluble. Les températures moyennes finales dans le caloporteur de l'assemblage éjecté correspondent aux températures de fonctionnement nominales. Cette première analyse globale laisse espérer que l'ébullition est évitée en cœur. Les valeurs négatives de réactivité à la fin de la simulation impliquent également une baisse continue et régulière de la puissance.

Cœur 19x19

La figure 4.37 présente les principaux résultats à l'échelle cœur de l'accident de double éjection de grappe au BOC et au EOC dans le cas du cœur 19x19. L'accident du EOC présente

de fortes similitudes avec ceux décrits précédemment, l'analyse du transitoire se concentrera donc principalement sur la configuration au BOC qui est plus atypique.

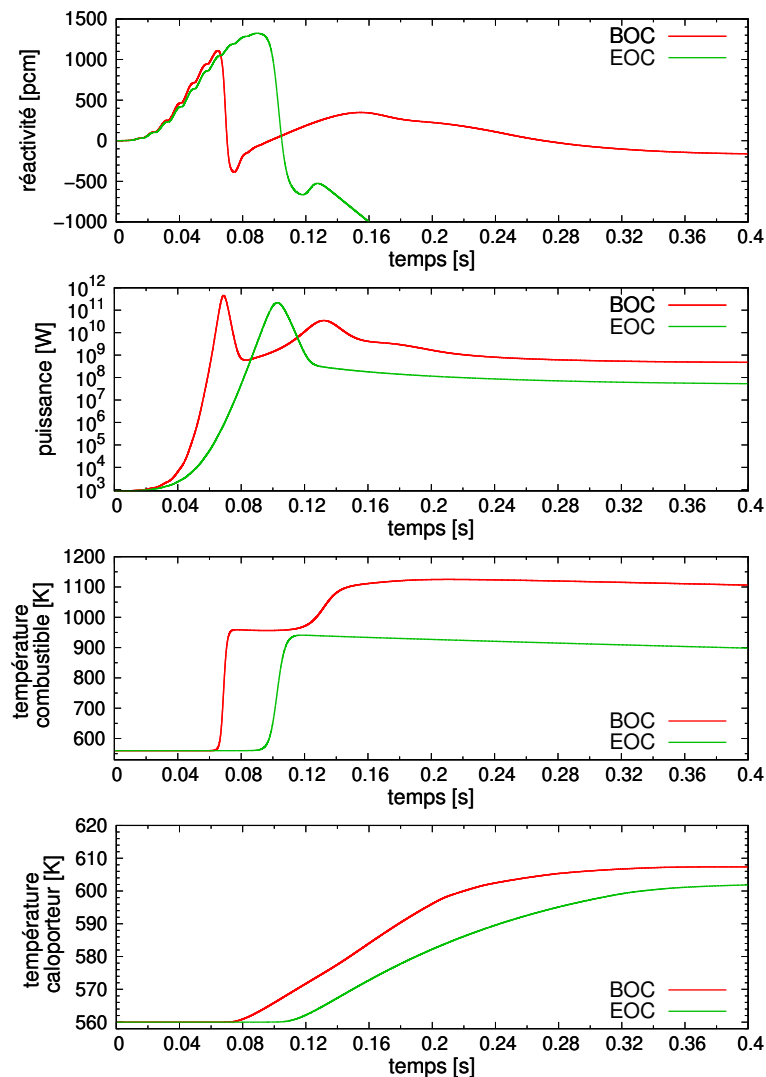


FIGURE 4.37: Résumé de l'éjection des deux grappes de contrôles dans le cœur 19x19. Les températures combustible et caloporteur sont données pour l'un des assemblages subissant l'éjection de grappe. Elles sont moyennées sur tout le volume de l'assemblage.

De 0.0 à 0.06 s dans le cas du BOC et du EOC : Le REA débute de façon conventionnelle par une insertion graduelle de réactivité, fonction de l'importance neutronique des zones libérées des grappes de contrôle. Les poids des grappes éjectées dans les configurations BOC et EOC ne diffèrent que de 100 pcm. Notons que les réactivités injectées sont plus importantes dans la configuration 19x19 que dans la configuration 17x17.

De 0.06 s à 0.08 s dans le cas du BOC : À 0.064s la réactivité atteint sa valeur maximale (1100 pcm) ce qui donne lieu 0.05 s plus tard à un pic de puissance de 4.5×10^{11} W. Dans cette configuration la réactivité n'a pas le temps de se stabiliser sous la forme d'un plateau puisque l'évolution de la puissance, bien plus rapide que dans le cas 17x17, permet de déclencher l'échauffement du combustible et les contre-réactions thermiques avant même que les grappes de contrôle aient fini d'être éjectées.

La puissance maximale atteinte dans l'assemblage éjecté est de 8.8×10^9 W. L'instant de

ce maximum coïncide avec celui à l'échelle du cœur. La température moyenne du combustible est alors de 750 K (valeur couramment retenue pour le seuil Doppler). La puissance maximale atteinte est plus importante que dans le cœur 17x17, en partie du fait de la plus grande quantité de réactivité injectée mais également à cause d'une masse combustible plus importante du réseau 19x19. L'assemblage possède donc plus d'inertie thermique ce qui lui permet d'atteindre des puissances plus importantes avant d'enclencher les contre-réactions neutroniques. C'est précisément cet aspect qui va entraîner les problèmes d'évacuation de la chaleur.

Dans le cas du EOC, le pic de puissance survient 0.034 s après celui du BOC. La puissance maximale y est environ deux fois moins importante (2.2×10^{11} W). On notera qu'au moment du pic de puissance, la température combustible dans l'assemblage éjecté est aussi de 750 K.

Bien que la réactivité insérée soit montée jusqu'à 1400 pcm dans la configuration EOC, la cinétique d'évolution est encore une fois bien plus lente qu'au BOC. Cette différence s'explique comme dans le cas du cœur 17x17 par d'importantes disparités dans le temps de génération, voir tableau 4.18, elles-mêmes dues à une thermalisation du spectre en cours de cycle.

Configuration	BOC	EOC
Λ_{eff} (s)	6.88×10^{-6}	1.86×10^{-5}

Tableau 4.18: Temps de génération effectif au BOC et au EOC dans la configuration 19x19.

Les températures moyennes combustible atteintes sont au terme de l'éjection ($t = 0.1$ s) de 950 K au BOC contre 935 K au EOC soit 100 K plus élevées que dans le cas du cœur 17x17. Encore une fois on constate une remontée de la réactivité liée à l'évolution du profil radial de la température combustible aux instants proches de 0.8 s. La fin de l'éjection contribue également à cette nouvelle augmentation de la réactivité. Le niveau de puissance a suffisamment décliné pour stopper la chauffe du combustible et donc l'apport d'antiréactivité. La température du caloporteur commence alors à subir une élévation de température significative (2 K).

De 0.08 à environ 0.12 s pour le BOC : le transitoire au BOC entre dans une phase plus atypique. L'éjection de grappe se termine à 0.1 s et pourtant la réactivité continue d'augmenter. Cette remontée de réactivité est causée par l'échauffement du caloporteur entre 560 K et 570 K. Le modérateur exhibe donc une contre-réaction positive ce qui laisse penser que la concentration limite de bore soluble a été franchie. Cet effet n'est pas présent au EOC du fait de l'absence de bore. Une vérification effectuée avec *Serpent2* révèle que dans la configuration du cœur 19x19 où les barres de contrôle sont totalement extraites (et donc les tubes guides remplis d'eau borée), la contre-réaction du modérateur est quasi nulle (cf. figure 4.38).

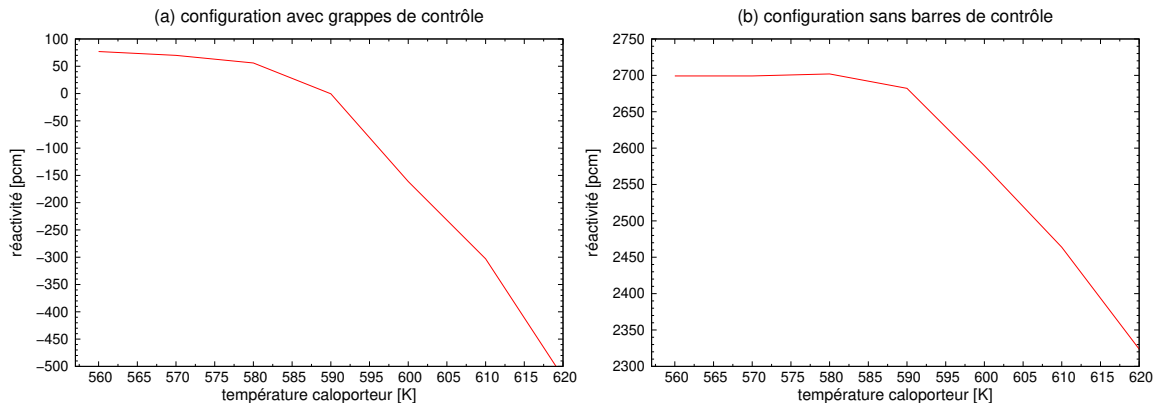


FIGURE 4.38: Évolution de la réactivité du cœur 19x19 dans la configuration avec les barres de contrôles insérées ou extraites, en fonction de la température du caloporteur. La densité du caloporteur est adaptée en fonction de la température de ce dernier. Les calculs sont réalisés avec *Serpent2* avec une erreur statistique d'environ 10 pcm sur la réactivité.

Dans le pire des cas, c'est à dire en comptabilisant l'incertitude statistique, le calcul Monte Carlo indique un CTC de l'ordre de 1 pcm/K, le calcul effectué avec NDM/BATH fait plutôt état d'un CTC d'environ 20 pcm/K à l'échelle cœur. Cet écart s'explique en partie par le fait que *Serpent2* base son estimation du CTC sur un flux dans sa forme fondamentale. L'utilisation d'un flux non relaxé, comme lors d'un transitoire, permet de privilégier les contre-réactions de certaines zones du cœur dont le CTC pourrait être positif. Une autre partie de l'explication est liée aux incertitudes sur les sections efficaces macroscopiques utilisées par la NDM, et ce en dépit de la statistique importante utilisée⁸ pour les calculer. L'incertitude la plus importante est rapportée pour l'estimation de $\Sigma_{scatt}^{1 \rightarrow 2}$, elle est comprise entre 20 et 50 pcm (à titre de comparaison, l'incertitude sur le Σ_{abs}^2 est comprise entre 13 et 33 pcm). Ce désaccord met en lumière l'impossibilité de simuler un effet fin par un calcul trop approché.

De 0.12 à environ 0.22 s pour la configuration du BOC : Le passage à une réactivité positive entraîne une nouvelle augmentation de la puissance cœur. Celle-ci atteint un second maximum local de 414 pcm à $t = 0.12$ s. Une fois encore, ce sont les contre-réactions du combustible qui permettent d'infléchir l'évolution de la réactivité. Du fait de la faible quantité de réactivité insérée la cinétique de ce sur-accident est plutôt lente. La puissance atteint un second pic de 3.46×10^{10} W à $t = 0.132$ s. Contrairement aux cas précédents, l'augmentation de près de 300 K du combustible ne suffit pas à rendre la réactivité négative. Au contraire cette dernière connaît un troisième maximum de 250 pcm à $t = 0.166$ s dû au chauffage tardif du caloporteur dans des assemblages plus éloignés des éjections. Cette nouvelle augmentation à de faibles conséquences sur l'évolution de la puissance du cœur.

Après $t = 0.14$ s, la puissance totale diminue bien que la réactivité soit encore positive. Là encore le formalisme de la cinétique point est suffisant pour expliquer ce phénomène contre-intuitif au premier abord. Lors de l'éjection de grappe la population de précurseurs a crû beaucoup moins vite que la population de neutrons (puisque $\rho > \beta$). Ainsi, lorsque la réactivité diminue et redevient inférieure à la fraction de neutrons retardés (i.e. fin du régime sur-critique prompt dû aux contre-réactions combustible), alors le taux de créations de neutrons ($= \frac{\rho n}{\Lambda_{eff}} + \lambda \cdot c$) peut devenir inférieur à la fraction de neutrons « perdue » dans la création de précurseurs ($= \frac{\beta_{eff} n}{\Lambda_{eff}}$).

8. 5000 cycles actifs de 100000 neutrons ce qui aboutit à une incertitude statistique sur le k_{eff} inférieure à 6 pcm.

Cela explique la diminution de la population neutronique le temps que cette dernière s'équilibre avec la population des précurseurs.

De 0.22 à environ 0.4 s uniquement pour le BOC : Après $t = 0.22$ s la réactivité continue de chuter alors que la température du combustible est stable et que la température du modérateur augmente. Cette situation indique qu'au-dessus de 590 K le modérateur est à nouveau caractérisé par un CTC négatif. La fin de la simulation permet d'estimer ce dernier à environ $-12 pcm \cdot K^{-1}$ ce qui est assez proche du résultat donné par *Serpent2* (voir figure 4.38). On peut remarquer une discontinuité dans la pente de la température moyenne du caloporteur de l'assemblage éjecté. Celle-ci est due au fait que plusieurs nœuds axiaux dans l'assemblage ont atteint la température de saturation du caloporteur. Pour rappel, le code BATH ne gère pas les écoulements diphasiques et bloque donc l'évolution de la température du caloporteur à sa température de saturation quand celle-ci est atteinte. Le même phénomène peut être observé au EOC vers $t = 0.34$ s.

Cœur 21x21

Pour rappel, dans la simulation du cœur 21x21 au BOC la proportion de bore a été ramenée à 75 % de la concentration maximale, c'est-à-dire 6500 ppm afin de prévenir les sur-accidents comme dans le cas du cœur 19x19. En compensation, des grappes de contrôle ont été ajoutées afin de débiter l'accident dans une configuration critique.

Une seule grappe de contrôle est éjectée dans le cas du cœur 21x21. Les résultats sont présentés figure 4.39. Seules les spécificités de l'accident par rapport aux cas précédents seront détaillées.

A 0.057 s dans le cas du BOC : La réactivité atteint un maximum de 1010 pcm contre 1300 pcm au EOC. Cette différence dans le poids de la barre éjectée peut être attribuée à la plus forte teneur en ^{10}B dans la grappe éjectée au BOC (pour rappel 40% de ^{10}B dans le bore) contre 30% de ^{10}B dans le bore de la grappe au EOC. En terme de réactivité insérée, l'éjection d'une seule grappe de contrôle dans le cœur 21x21 est équivalente à la double éjection dans les autres cas.

A 0.18 s dans le cas du BOC et 0.28 s dans le cas du EOC : La puissance en cœur atteint son maximum. Celui-ci s'élève à 4.4×10^{11} W dans le cas du BOC. La puissance maximale est environ 3 fois moindre dans le cas du EOC (1.45×10^{11} W). La différence de cinétique entre les deux configurations trouve toujours la même origine dans la variation du spectre (cf. tableau 4.19).

Configuration	BOC	EOC
$\Lambda_{eff} (s^{-1})$	4.81×10^{-6}	1.36×10^{-5}

Tableau 4.19: Temps de génération effectif au BOC et au EOC dans la configuration 19x19.

Bien que les niveaux de puissance maximale soient similaires à l'échelle cœur dans les cas 19x19 et 21x21, la puissance dans l'assemblage éjecté est environ 1.4 fois plus élevée dans le cas 21x21 (1.23×10^{-8} W). Rapportée au nombre de crayons combustible dans l'assemblage, cette puissance reste tout de même 1.13 fois plus importante dans le réseau 21x21. Les températures

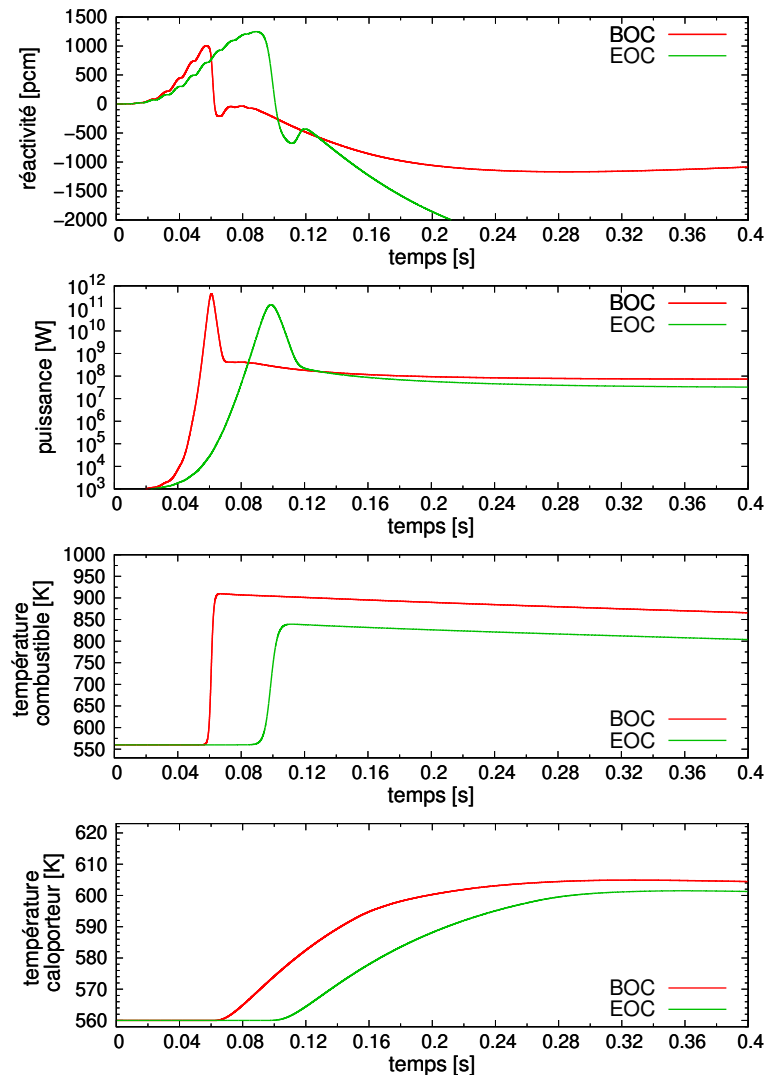


FIGURE 4.39: Résumé de l'éjection des deux grappes de contrôle dans le cœur 21x21. Les températures combustible et caloporteur données sont celles de l'assemblage subissant l'éjection de grappe. Elles sont moyennées sur tous l'assemblage.

moyennes combustible dans l'assemblage éjecté sont au moment des pics de puissance respectivement de 731 et 700 K au BOC et EOC ce qui correspond bien encore une fois au seuil Doppler.

A 0.067 s dans le cas du BOC et 0.11 s dans le cas du EOC : La température moyenne du combustible connaît un maximum de 910 K et de 840 K respectivement dans le cas du BOC et du EOC. Les températures moyennes du combustible sont donc inférieures à celles constatées dans l'accident du cœur 19x19 alors même que la puissance constatée dans l'assemblage éjectée est plus importante dans le cas 21x21. Ce paradoxe est levé en considérant la largeur du pic de puissance, et donc l'énergie utilisée pour la chauffe du combustible, qui est plus importante dans le cas 19x19.

Suite au saut de la température combustible, la puissance diminue. L'éjection n'étant pas terminée, la réactivité ré-augmente vers $t = 0.8$ s dans le cas du BOC. Cette reprise de la réactivité est très faible, bien qu'il reste encore 20 % de la hauteur de la grappe de contrôle à éjecter.

Dans le cas du EOC, une reprise de la réactivité a également lieu vers $t = 0.11$ s, bien après la fin de l'éjection et qui ne peut donc être attribuée qu'au transfert de chaleur du combustible vers la gaine.

A 0.18 s dans le cas du BOC et 0.28 s dans le cas du EOC : Au moins une zone axiale du caloporteur atteint la température de saturation comme le montre la rupture de pente dans l'évolution de la température moyenne du caloporteur. Les températures moyennes atteintes par le caloporteur de l'assemblage éjecté sont en fin de transitoire de 605 et 601 K respectivement au BOC et EOC. Notons que la marge prise vis-à-vis de la concentration maximale de bore a été suffisante pour éviter les problèmes de CTC positif.

4.4.3 Revue des critères locaux de sûreté

Le passage en revue des critères de sûreté est indispensable pour conclure objectivement sur la résilience d'un design de réacteur face à un certain type de transitoire. L'analyse des résultats à l'échelle cœur a permis de démontrer que la configuration au BOC était systématiquement la plus pénalisante, c'est pourquoi la confrontation aux différents critères de sûreté ne sera uniquement sur cette configuration.

Rappel des critères locaux

Pour l'accident d'éjection de grappe, la littérature [97], [59], retient principalement 4 grands critères de sûreté qui sont :

La fraction de combustible fondu doit être inférieure à 10% du volume de la pastille.

L'un des enjeux de ce critère étant de conserver la tenue mécanique des pastilles combustibles.

L'énergie déposée dans une pastille doit être inférieure à $200 \text{ cal} \cdot \text{g}^{-1}$ (soit $832 \text{ J} \cdot \text{g}^{-1}$).

L'objectif étant ici d'empêcher la fragmentation du crayon combustible. Il existe pour simplifier deux types de rupture : la rupture simple qui correspond à la fissuration de la gaine et la rupture par fragmentation du crayon. Le second cas doit absolument être évité car la dispersion des fragments de pastille sur-chauffés dans l'eau crée les conditions d'une explosion vapeur. Notons que cette valeur d'énergie déposée décroît significativement avec le burnup [93].

La température de la gaine doit être inférieure à 1755 K, ce qui correspond à la température de fusion d'une gaine en zircaloy. Cette limite n'est valide que pour les transitoires très courts (inférieurs à 1 s). Sur des temps plus long la limite est beaucoup plus stricte (1477 K) afin de limiter l'oxydation de la gaine. De manière générale, l'épaisseur d'oxyde doit toujours être inférieure à 17% de l'épaisseur totale [27].

Le nombre de crayons subissant une crise d'ébullition doit être inférieur à 10 %.

Par ébullition on entend soit une crise d'ébullition par caléfaction ou DNBR, soit l'atteinte de la température de saturation du caloporteur dans une partie de l'assemblage.

Dans le cœur 17x17

La figure 4.40 présente les températures maximales atteintes dans chaque assemblage au cours du transitoire. Le maximum correspond toujours à la température au centre de la pastille pour un niveau axial donné. Les températures les plus élevées sont relevées à $t = 0.4$ s. Suite à la chauffe radialement uniforme du crayon, la température centrale ne cesse d'augmenter pendant

le transitoire à cause du processus de conduction qui tend à relaxer le profil de température vers sa forme d'équilibre (polynôme d'ordre 2). L'augmentation de la température centrale ralentit une fois le pic de puissance passé. Les valeurs données dans la figure 4.40 sont donc proches du maximum absolu atteint sur toute la durée de l'évènement.

La température maximale en cœur est de 1053 K ce qui est très éloigné du point de fusion du ThO_2 qui est d'environ 3640 K [71].

Dans l'assemblage le plus chaud, ici un de ceux adjacent à celui subissant l'éjection, une élévation de l'enthalpie du combustible de $89.7 J \cdot g^{-1}$ est calculée, ce qui représente environ 10.8 % de la limite avant fragmentation du crayon. Notons cependant que l'élévation d'enthalpie devrait être calculée localement, c'est à dire pour chaque niveau axiaux. Rétrospectivement, le facteur de forme axial dans l'assemblage le chaud est estimé à environ 1.6. La prise en compte d'un facteur de forme volontairement pessimiste, de 3.0, permet d'estimer qu'au point le plus chaud du crayon l'élévation d'enthalpie ne représente qu'environ 25% du critère de sûreté. Le risque de fragmentation du crayon semble donc minime.

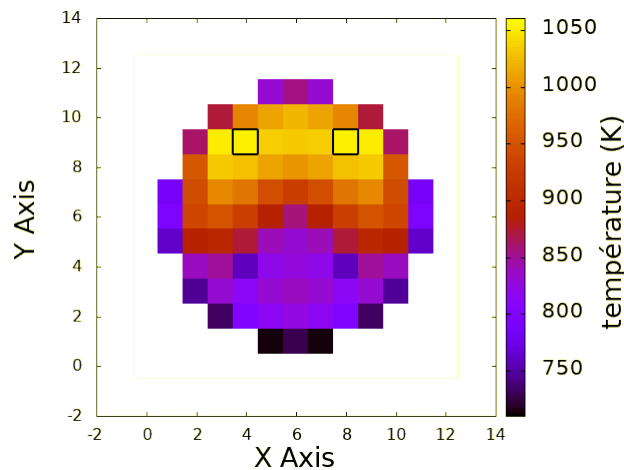


FIGURE 4.40: Température combustible maximale constatée dans le crayon le plus chaud représentatif de chaque assemblage (i.e. sans moyenne axiale) lors REA sur cœur 17x17 au BOC. Les assemblages subissant l'éjection de grappe sont encadrés en noir.

La température maximale de gaine est de 735 K, ce qui encore une fois est en dessous du critère de sûreté. La carte des températures maximales de gaine se déduit directement de celles des températures combustible maximales (figure 4.40).

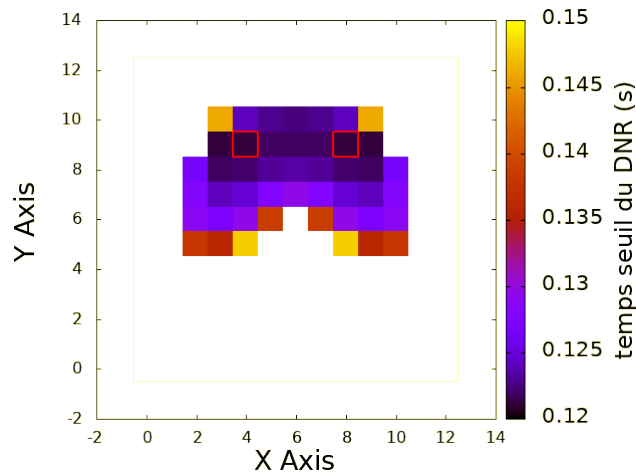


FIGURE 4.41: Instant à partir desquels le critère de MDNBR (1.3) est franchi pour au moins un niveaux axiaux de l'assemblage. Les assemblages subissant l'éjection de grappe sont encadrés en rouge.

La figure 4.41 permet de constater qu'environ 52% des assemblages ont un MDNBR qui franchit le seuil de 1.3. Pour rappel, cela signifie qu'il existe au moins un niveau axial de l'assemblage qui entre en ébullition nucléée sur la paroi de la gaine. Ce nouveau régime d'échange est instable, dans un premier temps il améliore le coefficient d'échange conducto-convectif permettant un transfert de chaleur plus rapide entre la gaine et la caloporteur, mais rapidement la densité de bulles en paroi augmente et forme un film de vapeur qui isole thermiquement la gaine du caloporteur. Cette dernière subit alors une brusque augmentation de température qui provoque la ruine du crayon combustible. Malheureusement, BATH ne tient pas compte de l'évolution du coefficient d'échange pendant cette phase, lors de l'apparition de l'ébullition nucléée, le calcul devient donc très approximatif.

Le critère dernier critère de sûreté n'est donc pas satisfait. Cependant, dans toute maille du cœur, la température du caloporteur reste en dessous de la température de saturation.

Dans le cœur 19x19

La température combustible maximale atteinte dans le cas du cœur 19x19 est d'environ 1560 K, voir figure 4.42, ce qui écarte le risque de fusion même partielle du combustible. L'élévation d'enthalpie, considérée à l'échelle de l'assemblage, représente 20% du critère de sûreté. La marge vis à vis de la fragmentation est suffisamment importante pour supposer que le critère est aussi respecté localement. La température maximale de gaine est de 735 K, écartant ainsi le risque de fonte ou d'oxydation accélérée du combustible.

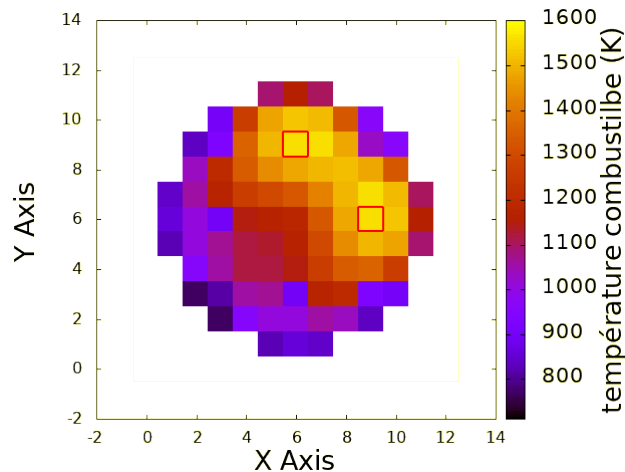
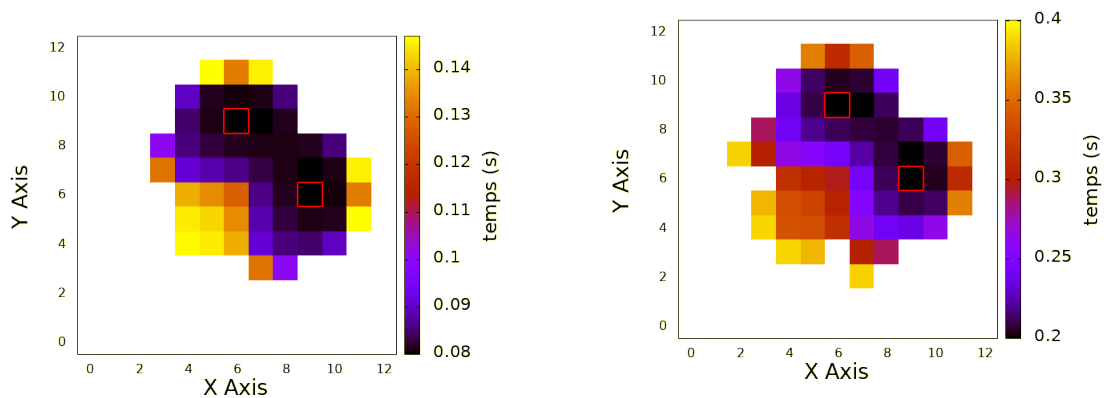


FIGURE 4.42: Instants à partir desquels le critère de MDNBR est franchi dans au moins des un niveau axiale de l'assemblage. Les assemblages subissant l'éjection sont distingués par un encadrés.

Les valeurs extrêmes atteintes dans le combustible laissent des marges de sûreté importantes et ce en dépit du sur-accident lié à la contre-réaction positive du modérateur. Pour ce qui est du caloporteur les conclusions sont très différentes comme le montre la figure 4.43. Approximativement 62% des assemblages subissent une ébullition nucléée, ce qui dépasse largement la tolérance de 10 % du nombre total d'assemblage combustible. Les temps de déclenchement de l'ébullition nucléée peuvent être scindés en deux groupes cf. figure 4.43), le premier où l'ébullition se produit consécutivement à l'éjection de grappe, c'est à dire avant 0.1 s et le second groupe où le MDNBR est franchi après 0.12 s, c'est à dire suite au sur-accident. Le premier groupe représente une proportion de 41 % des assemblages combustible. Ainsi, même sans le sur-accident lié au dépassement de la concentration maximale en bore, le design de cœur 19x19 ne remplit pas les critères de sûreté.



(a) Instants partir desquels le critère de MDNBR est franchi dans au moins des un niveau axiale de l'assemblage. Les assemblages subissant l'éjection sont encadrés en rouge.

(b) Instants à partir desquels au moins un des niveaux axiaux de l'assemblage atteint la température de saturation du caloporteur. Les assemblages subissant l'éjection sont encadré en rouge.

FIGURE 4.43: Critère de sûreté relatif au modérateur dans le cas du REA dans le cœur 19x19 au BOC.

Comme l'illustre la figure 4.43 (b), une proportion encore plus importante d'assemblages,

environ 68%, atteignent la température de saturation du modérateur. Ces assemblages sont ceux dont la température combustible maximale dépasse les 1050 K dans la figure 4.42.

Dans le cœur 21x21

La température maximale au centre d'une pastille est de 1252 K, ce maximum est atteint en fin de transitoire dans l'assemblage éjecté. Cette température est très inférieure à la température de fusion du ThO_2 , le premier critère de sûreté est donc respecté.

L'élévation d'enthalpie dans l'assemblage le plus chaud est d'environ $94.3J \cdot K^{-1}$ ce qui représente seulement 11.2% de la limite de fragmentation. Même en considérant le point le plus chaud de l'assemblage le critère de sûreté reste très éloigné.

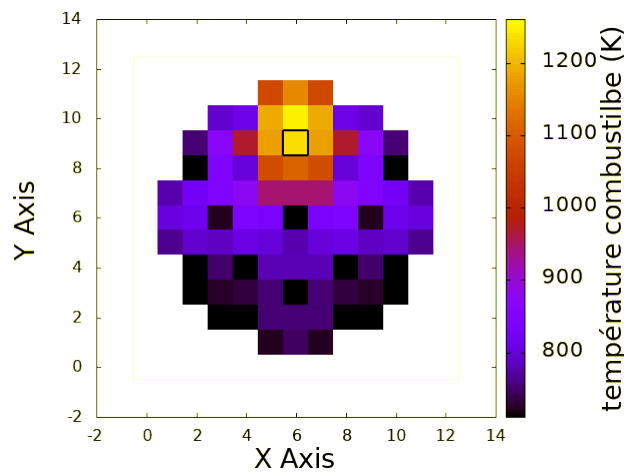


FIGURE 4.44: Date à partir de laquelle le critère de DNB est franchi dans pour au moins des un niveau axiale de l'assemblage. L'assemblage subissant l'éjection est distingué par un encadrement noir.

La température maximale de gaine est de 772 K ce qui est là encore très inférieur à la température de fusion de la gaine.

Environ 8.9 % des assemblages passent sous le seuil du MDNBR, respectant ainsi le dernier critère de sûreté. Cependant, 19% des assemblages finissent par atteindre (entre $t = 0.15$ s et $t = 2.9$ s après éjection), au moins partiellement, la température de saturation du caloporteur. Ces assemblages correspondent à ceux ayant dépassés la température de 950 K dans la figure 4.44.

Le cœur 21x21 est la configuration où les niveaux de puissance subis par les assemblages sont les plus importants au cours du transitoire. Du fait de la masse importante de combustible présent dans ces assemblages, l'élévation de température des crayons laisse des marges de sûreté confortables. En revanche, l'utilisation d'un réseau serré diminue significativement la masse d'eau susceptible d'évacuer l'excès d'énergie libéré pendant le transitoire, ce qui implique qu'un nombre significatif d'assemblages atteignent la température de saturation du caloporteur.

4.4.4 Apport de la sûreté au design

Au terme de cette analyse des performances de sûreté, aucun des designs de SMR développés ne satisfait complètement les critères de sûreté. Il est difficile de conclure si c'est un élément de la conception du réacteur qui en est responsable ou si cela est dû à une définition trop pénalisante

des conditions de l'accident à savoir le recours aux concentrations maximales en bore et l'éjection simultanée de deux grappes de contrôle.

De manière générale les critères de sûreté relatifs au combustible ou à la gaine sont toujours respectés. Les points faibles des designs proposés ont trait au comportement du caloporteur.

Dans le cas du cœur 17x17, plus de la moitié des assemblages connaissent une phase de DNB. Pour être certain que le régime d'ébullition nucléée n'aboutit pas à la ruine des crayons, il est nécessaire de pouvoir modéliser le comportement diphasique du caloporteur, ce que ne permettent pas encore nos outils de simulation.

Dans le cas de l'accident sur le cœur 19x19, les mêmes problématiques d'ébullition nucléée sont constatées consécutivement à l'éjection de grappe. L'origine du sur-accident a clairement été identifiée comme étant un CTC positif provoqué par l'utilisation d'une concentration en bore trop élevée. En théorie, le modérateur aurait dû avoir un effet nul sur la réactivité ce qui aurait été sans incidence sur le reste du transitoire. En pratique, nos outils de simulation se sont révélés trop approchés pour rendre compte de cet effet fin. En conclusion, pour garder des outils de dimensionnement simples, il faut conserver des marges de sûreté suffisantes. Cela se traduit par l'utilisation de concentrations en bore bien en dessous du maximum physique autorisé. Cette nouvelle contrainte nous oblige à revoir le dimensionnement des poisons consommables et accentue la problématique, déjà délicate, de la gestion de la réactivité dans les SMR *single batch*.

Dans le cas du cœur 21x21, la concentration de bore est limitée à 75 % de sa valeur maximale, ce qui se traduit par l'utilisation de plus de grappes de contrôle dans la situation initiale du REA. Cela doit également nécessiter un retour sur la stratégie envisagée pour la gestion de la réactivité. L'éjection d'une seule grappe de contrôle, plus conventionnelle, va circonscrire spatialement l'augmentation de puissance, ce qui en comparaison des autres REA simulés diminue la proportion d'assemblages franchissant le seuil d'ébullition nucléée. Cependant la densité de puissance atteinte localement est aussi plus importante. L'utilisation d'un réseau serré va alors poser des problèmes d'évacuation de la chaleur, ce qui a pour conséquence une élévation généralisée de la température du caloporteur jusqu'à la température de saturation.

Première tentative d'amélioration du cœur 21x21 : augmentation du flux massique

Une première tentative pour permettre au cœur 21x21 de passer le dernier critère de sûreté (nombre d'accident en crise de DNB < 10%) serait d'augmenter le flux massique en cœur. C'est l'étude qui est proposée dans la suite. Un cas enveloppe est considéré au travers du doublement du flux massique. Ce choix technologique laisse deux grandes options :

- Soit la puissance totale du cœur est maintenue constante. Cela implique alors de diviser par deux l'élévation de température en cœur. La température de la source chaude étant moins élevée le rendement thermodynamique de la centrale est diminué.
- Soit l'élévation de température du caloporteur en cœur est conservée (i.e 40 K), ce qui double la puissance produite en cœur. La puissance volumique moyenne du combustible est alors de $420 \text{ W} \cdot \text{cm}^{-3}$ ce qui est au dessus de la valeur de conception de $320 \text{ W} \cdot \text{cm}^{-3}$.

Seule la première option est donc viable.

La puissance des pompes s'exprime en première approximation comme :

$$P_{\text{pompes}} = \Delta p A_c \bar{u}_z$$

Avec :

- P_{pompes} la puissance des pompes, (W)
- Δp les pertes de charges dans le circuit, (Pa)
- A_c la surface moyenne de passage du fluide, (m^2)

— \bar{u} la vitesse moyenne du fluide dans le circuit, ($m \cdot s^{-1}$)

Les pertes de charges dans le circuit primaire se décompose en pertes de charge régulières et pertes de charge singulières. Les pertes de charge régulières sont liées au frottement du caloporteur sur les paroi :

$$\Delta p_{reg} = 2 \frac{H}{D_h} f \rho \bar{u}_z^2$$

avec :

- Δp_{reg} la perte de charge régulière, Pa
- H la longueur parcourue par le fluide en contact avec la paroi, (m)
- D_h le diamètre hydraulique, (m)
- f le coefficient de perte de charge linéaire, sans unité
- ρ la masse volumique du caloporteur, ($kg \cdot m^{-3}$)
- \bar{u}_z^2 la vitesse moyenne du fluide, ($m \cdot s^{-1}$)

Le coefficient de perte de charge linéaire est généralement exprimé grâce au diagramme de Moody qui tient compte à la fois du nombre de Re et de la rugosité de la paroi [26].

Au premier ordre, les pertes de charge régulières sont donc proportionnelles à la hauteur du cœur (et la longueur du circuit) ainsi au carré de la vitesse. Les pertes de charges singulières s'expriment comme :

$$\Delta p_{sing} = \sum_{\forall \text{ singularité}} \frac{1}{2} K_s \rho \bar{u}_z^2$$

avec K_s le coefficient de perte de charge singulière. Celle-ci est propre a chaque singularité et sa valeur est généralement déduite expérimentalement. Plusieurs « singularités » sont rencontrées dans le circuit primaire parmi lesquelles l'entrée et la sortie du cœur, les grilles de mélanges dans les assemblages, les angles des conduites, etc. Les pertes de charges singulières associées au cœur sont environ deux fois plus importantes que celles associées pertes de charges singulières [25].

Au premier ordre toutes les pertes de charges sont proportionnelle au carré de la vitesse. La puissance des pompe est donc proportionnelle au cube de la vitesse moyenne dans le circuit. Un doublement du débit massique entraine donc une multiplication par 8 de la puissance consacrée au pompage. Cet aspect contribue donc inévitablement à la diminution du rendement du réacteur. Les résultats obtenus pour ce nouveau transitoire sont présentés figure 4.45.

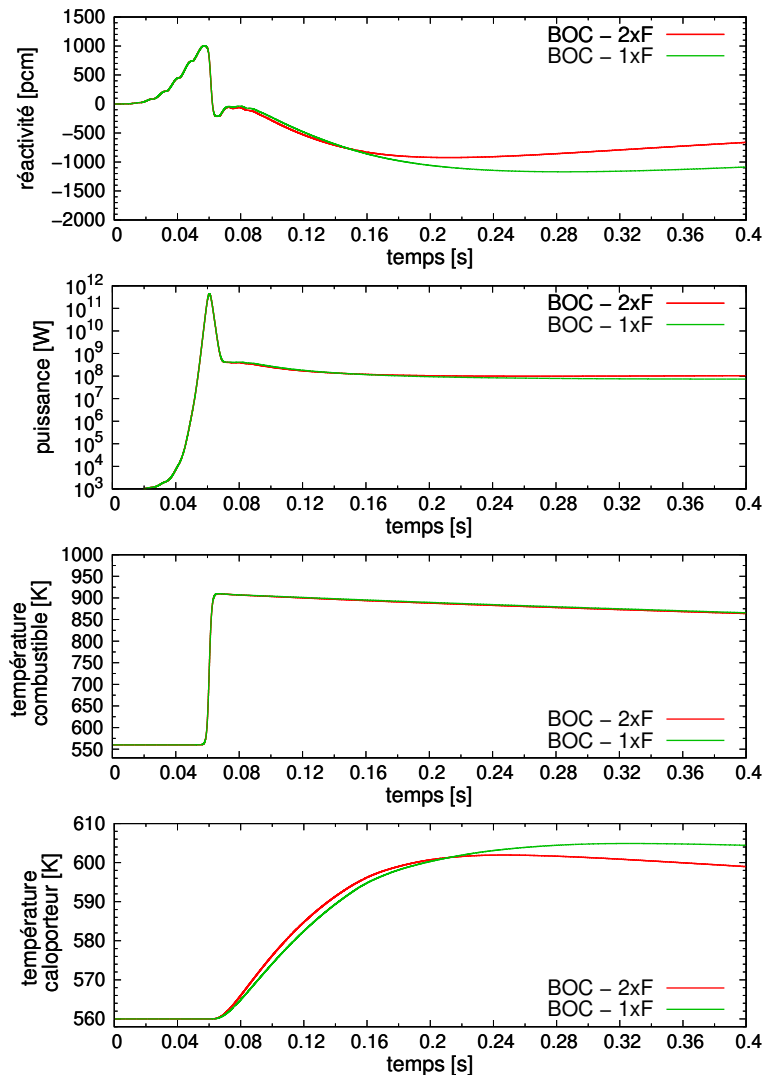


FIGURE 4.45: Éjection d'une grappe de contrôle au BOC dans le cœur 21x21. Les courbes désignées par « BOC - 1xF » correspondent aux résultats précédemment présentés. Les courbes désignées par « BOC - 2xF » correspondent au cas où le débit massique par assemblage a été doublé. Les températures combustible et caloporteur données sont celles de l'assemblage subissant l'éjection de grappe.

L'augmentation du débit massique est sans conséquence sur la première partie du transitoire (i.e l'éjection) et sur la contre-réaction combustible qui s'ensuit. Puisque la section de passage du caloporteur est inchangée, c'est la vitesse du fluide qui a été augmentée. Cela se répercute par une augmentation du coefficient de conducto-convection, responsable des échanges de chaleur à l'interface gaine/caloporteur. Le transfert de chaleur étant meilleur, le caloporteur va s'échauffer plus rapidement. Le nombre d'assemblages subissant une crise d'ébullition nucléée est abaissé à environ 4.5%, ce qui correspond grossièrement aux assemblages proches voisins de celui éjecté (inclus). Le franchissement du critère du MDNBR est retardé d'environ 0.05 s.

La chaleur étant plus vite évacuée du crayon, la température maximale de gaine est diminuée d'environ 30 K. La température maximale du combustible reste inchangée ce qui est cohérent puisque le refroidissement du combustible n'intervient qu'une fois la température maximale passée.

L'augmentation du débit massique va également permettre de diminuer la proportion d'as-

semblages atteignant la température d'ébullition : elle s'élève ici à seulement 13.5% du nombre total d'assemblage contre 19% précédemment. Une augmentation du débit massique n'a donc pas permis de passer sous le seuil des 10%, néanmoins comme l'indique la diminution de la température moyenne du caloporteur dans l'assemblage éjecté, le refroidissement est suffisamment efficace pour espérer évacuer rapidement le bouchon chaud ainsi formé.

Seconde tentative d'amélioration du cœur 21x21 : augmentation de la hauteur du cœur

La hauteur active du cœur est portée de 2.3 m à 3.66 m, ce qui correspond à la hauteur des assemblages dans le benchmark *minicore* (cf. chapitre 2). Cette modification est faite en gardant le flux massique constant, ce qui préserve le $\Delta T_{caloporteur}$ et donc la puissance totale du cœur. Cela implique une densité de puissance dans le combustible environ 60% moindre.

L'augmenter la hauteur active du cœur est moins préjudiciable pour le rendement de la centrale que l'augmentation du débit massique. En effet, les pertes de charges régulières sont directement proportionnelles à la hauteur. Augmenter la hauteur implique certainement l'utilisation de plus de grilles de mélange ce qui n'augmente qu'une partie des pertes de charge singulières. Une estimation pessimiste serait de dire que la puissance des pompes est augmentée proportionnellement à l'augmentation de hauteur soit d'environ 60% dans le cas présent.

L'augmentation de la hauteur active du cœur permet l'utilisation d'un volume de caloporteur plus important, avec en première intention la volonté de réduire le nombre d'assemblages qui atteignent la température de saturation.

Les sections efficaces calculées sur la géométrie standard du SMR 21x21 sont reprises pour la simulation de ce nouveau cas. Une discrétisation en 18 niveaux axiaux est utilisée, ce qui induit l'utilisation d'un pas d'espace d'environ 20 cm proche de celui utilisé par le précédent maillage. La discrétisation radiale par assemblage est inchangée. Le temps d'éjection reste de 0.1 s. La simulation d'éjection de grappe n'est réalisée que sur le cas du BOC.

Dans la suite, la configuration standard (i.e de hauteur 2.3 m) est désignée sous le terme $1 \times H$ et celle où la hauteur du cœur est augmentée à 3.66 m sous le terme $2 \times H$. Les résultats de cette nouvelle étude sont présentés dans la figure 4.46.

La hauteur étant plus importante dans le cas $2 \times H$, le flux axial en cœur est plus plat. L'importance neutronique des différents niveaux axiaux est plus équitablement répartie. En conséquence, lors de l'éjection de grappe, des zones d'importances neutroniques plus grandes sont libérées plus rapidement. Cela a pour effet d'accélérée la cinétique d'évolution de la réactivité comparativement au cas $1 \times H$.

Bien que les réactivités atteintes soient similaires, 1038 pcm contre 1006 pcm respectivement dans le cas $2 \times H$ et $1 \times H$, la différence dans la vitesse d'insertion de la réactivité implique une puissance maximale du cœur environ 50% plus importante (6.5×10^{11} W) dans le cas $2 \times H$. Les deux pics de puissance sont alors séparés d'environ 6 μs .

La puissance maximale atteinte dans l'assemblage éjecté est également plus importante dans le cas $2 \times H$, elle vaut environ 2×10^{10} W. Cependant, le facteur de forme étant plus réduit dans ce dernier cas, la chauffe du combustible est plus uniforme (axialement). Cela se traduit par une contre-réaction plus rapide pour un échauffement global du combustible moins important. Les températures maximales constatées dans le combustible et la gaine dans le cas $2 \times H$ sont très proches de celles données précédemment dans le cas $1 \times H$.

Environ 8.9 % des assemblages franchissent le seuil de l'ébullition nucléée. Les assemblages concernés sont les mêmes dans les deux configurations. L'augmentation de la hauteur du cœur n'a donc eut aucune incidence sur ce critère. Environ 23.6 % des assemblages de la configuration $2 \times H$ atteignent la température de saturation contre 19% dans le cas $1 \times H$.

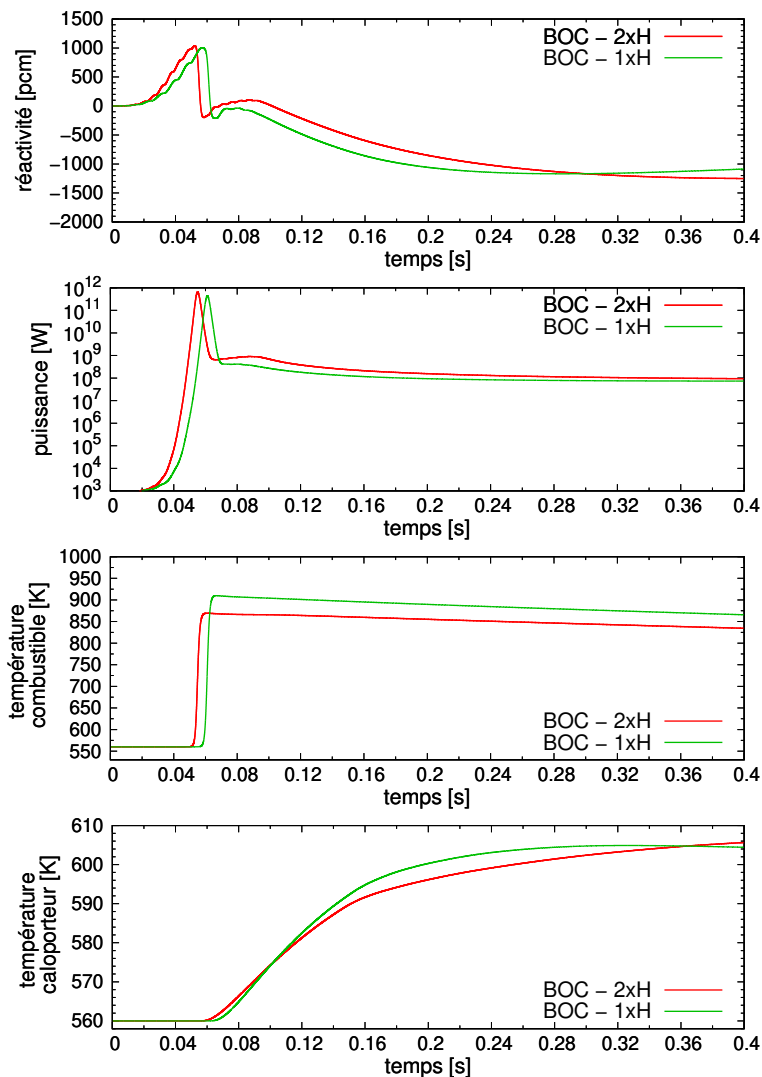


FIGURE 4.46: Éjection d'une grappe de contrôle au BOC dans le cœur 21x21. Les courbes désignées par « BOC - 1xH » correspondent aux résultats précédemment présentés. Les courbes désignées par « BOC - 2xH » correspondent au cas la hauteur du cœur est augmentée à 3.66 m. Les températures combustible et caloporteur données sont celles de l'assemblage subissant l'éjection de grappe.

En conclusion, augmenter la hauteur active du cœur sans modifier le flux massique ne permet pas d'amélioration significative sur les critères thermohydrauliques malgré des températures moyennes de combustible plus basses.

En annexe de ce chapitre est présentée une dernière étude combinant les deux leviers d'amélioration explorés à savoir la hauteur active du cœur (portée à 3.66 m) et le flux massique (doublé). Les résultats à l'échelle du cœur sont sensiblement identiques à ceux présentés dans le dernier cas. Toutefois l'augmentation du débit massique permet d'éviter une crise d'ébullition nucléée dans tous les assemblages du cœur. La proportion d'assemblage parvenant à la température de saturation est alors de 19 %, ce qui est similaire au cas standard.

Aucune de nos tentatives d'amélioration du cœur 21x21 n'est parvenue à éviter l'apparition d'un régime d'écoulement diphasique dans une proportion significative d'assemblages. L'éjection de grappe implique une production de puissance trop importante devant la capacité thermique

des canaux de refroidissement du réseau 21x21. L'atteinte de la température de saturation dans les assemblages les plus chauds semble inévitable. L'augmentation du flux massique permet alors de limiter dans le temps ce régime d'écoulement diphasique grâce à un remouillage rapide des crayons. Cependant cela implique en régime nominal une forte diminution de la puissance volumique. Une autre perspective d'amélioration serait de diminuer le poids des grappes de contrôle de façon à mitiger l'accident. Mais cette solution ne garantit pas la résilience du système face d'autre type d'accident comme par exemple des APRP (Accident de Perte de Réfrigérant Primaire).

Nos outils ne permettent pas de simuler les régimes d'écoulement diphasique. Or en première approche ces derniers semblent inévitables dans le cas du réseau 21x21. L'étude détaillée de cette configuration en conditions accidentelles semble donc à proscrire pour le moment.

4.5 Conclusions sur la méthodologie de conception et le potentiel des SMR Th/U

En dépit de ce que suggèrent des analyses optimistes basées sur les seules données nucléaires, l'atteinte de la surgénération dans les réacteurs à eau légère reste une tâche difficile. Un objectif plus raisonnable consiste à s'intéresser à la haute conversion par le biais de modifications légères du design des REP actuels. À cette fin, des études préliminaires menées avec SMURE en assemblage infini ont montré que la sous-modération était un levier indispensable. L'amélioration de la conversion permet bien entendu d'optimiser l'utilisation de la ressource combustible, cependant il a pu être démontré qu'atteindre de hauts niveaux de conversion implique des burnups modestes en comparaison de ceux des REP actuels. Les principales causes de ce constat sont la nécessité de fonctionner avec une faible réserve de réactivité et le poids important des produits de fissions dans un spectre neutronique dont la composante thermique reste non négligeable.

Pour comprendre de façon concrète les implications de l'utilisation du thorium en cœur, tant sur les performances en combustion que sur la sûreté, la conception d'un cœur de SMR fonctionnant au Th/U est proposée. Un burnup ambitieux de 40 GW.j/ton est visé de façon à être aussi compétitif que des REP moyen du parc français. Plusieurs niveaux de sous-modération sont considérés lors du design en vue de déterminer le niveau de conversion optimum auquel il est possible prétendre tout en respectant les critères élémentaires de sûreté des REP.

L'étape de pré-dimensionnement à l'échelle assemblage, en milieu infini, a permis une première estimation des coefficients de contre-réactions thermiques qui ce sont révélées meilleures dans le cas des réseaux sous-modérés. Elle a également mis en lumière une réduction importante du CTC comparativement à un combustible UOX. Cet effet a des répercussions sur la concentration maximale de bore soluble qu'il est possible de diluer avant d'aboutir à une contre-réaction positive du caloporteur. L'efficacité réduite du bore ainsi que les faibles niveaux de concentration maximales posent un réel problème sur les moyens à employer pour gérer la réactivité des SMR chargés en thorium. Ce problème est accentué par le fonctionnement en *single batch*.

Pour mieux évaluer la compétitivité du concept, nous avons tenu à détailler sa gestion de la réactivité. Il a été choisi de compenser l'excès de réactivité en priorité par le bore soluble, dans la limite de sa concentration maximale. Rétrospectivement, la prise en compte d'une marge de sécurité vis-à-vis de la concentration maximale aurait été un choix de conception plus avisé. L'utilisation de poisons consommables s'est révélée indispensable pour contraindre la réactivité dans la bande de manoeuvrabilité du bore au cours du cycle. Il a été démontré que l'utilisation d'un seul couple nombre de crayons empoisonnés / teneur des crayons empoisonnés (R/W) en poisons consommables était insuffisant pour parvenir à cet objectif.

Le manque de souplesse dans la cinétique de combustion d'un BP a pu être compensé par

l'utilisation de plusieurs types de poison dans le cas du réseau 17x17. Pour les réseaux sous-modérés 19x19 et 21x21, la gestion de réactivité est facilitée par une bande de manoeuvrabilité moins étroite que dans le cas 17x17. Une solution plus simple, impliquant plusieurs couples (R/W) d'un seul type de poison consommable, a donc pu être mise en œuvre. La présence résiduelle de poisons consommables en fin de cycle entraîne une pénalité sur le burnup final de l'ordre de 2 GW.j/ton . Cette perte peut-être minimisée par un meilleur dimensionnement des poisons consommables. Cela vient souligner l'absence d'une méthodologie précise pour définir un vecteur d'empoisonnement optimal du point de vue de la gestion de la réactivité et du burnup final.

Pour respecter le critère imposé sur le facteur de forme à l'échelle cœur, les zonages à la fois de l'enrichissement et des poisons consommables se sont révélés nécessaires et efficaces. Ces zonages ont, en définitive, assez peu de conséquences sur le burnup final du cœur. L'essentiel des écarts sur les performances en combustion entre les estimations en milieu infini et à l'échelle cœur proviennent de la sous-estimation du taux de fuite à l'échelle assemblage.

Le zonage des poisons consommables a été particulièrement utile pour rendre applicable à l'échelle cœur le pré-dimensionnement effectué en milieu infini. Cependant une méthodologie claire et fiable reste encore là encore à définir pour parvenir à une combustion homogène des BP en cœur ce qui participera à l'aplanissement de la nappe de puissance.

Le suivi en bore soluble durant l'évolution entraîne un durcissement du spectre dans le cas du cœur 21x21, responsable de différences significatives dans le vecteur isotopique final du combustible. Les grappes de contrôle se montrent encore, à ce stade du design, indispensables pour la gestion de la réactivité. Afin de conserver des méthodes d'évolution simples, on cherchera autant que possible à éviter la simulation de ces grappes. Cela permet l'économie d'une évolution du combustible avec le détail axial et le dimensionnement/positionnement des différents groupes de barres.

Notons que l'utilisation de poisons consommables à l'échelle cœur est susceptible d'introduire de forte redistribution de puissance. L'utilisation de la méthode FCU dans ce contexte mériterait une vérification plus poussée (par exemple sur le benchmark BEAVRS [98]) afin de s'assurer que la pixellisation de l'évolution à l'échelle de plusieurs assemblages rende compte de façon précise de l'évolution de la réactivité.

La simulation des transitoires d'éjection de grappe s'est révélée très riche d'enseignements.

Elle a mis en lumière quelques caractéristiques communes, relative à l'utilisation du $\text{Th}/^{233}\text{U}$ et liée à la thermalisation du spectre neutronique en cours de cycle. Cet effet implique une cinétique d'évolution de la puissance beaucoup plus rapide au BOC, ce qui en fait l'instant le plus pénalisant du cycle. L'usage d'un réseau sous modéré abonde dans le sens d'un durcissement du spectre au BOC, réduisant encore plus le temps de génération.

La question de la définition des conditions initiales de l'accident apparaît comme cruciale puisqu'elle va grandement conditionner la validation ou non des critères de sûreté. En effet, il ressort de ces études qu'il n'est pas pertinent de vouloir simuler le cas le plus pénalisant possible si ce dernier n'est représentatif d'aucune configuration « réelle » du cœur. Plus spécifiquement, il apparaît que les marges de sûreté nécessaires pour valider le design dans les configurations les plus pénalisantes possibles sont trop importantes. Les configurations simulées doivent donc gagner en réalisme. Cela passe par le dimensionnement de groupe de grappes de contrôle (e.g. groupe d'arrêt d'urgence, groupe de compensation de puissance, groupe de régulation en température, [31]) dont les rôles et les dispositions sont clairement définis [93]. La simulation du REA vient ensuite valider ou non les choix de conception fait à la fois sur le cœur mais aussi sur ces moyens de contrôle.

L'intérêt des accidents présentés dans ce chapitre réside principalement dans la comparaison qu'ils offrent entre plusieurs options de design d'un même cœur. Bien que les assemblages à réseaux serrés soient ceux qui possèdent la plus grande inertie thermique, du fait de leur masse combustible plus importante, ils sont également ceux qui connaissent les plus hauts niveaux de puissance et donc les températures combustible les plus élevées. Dans l'ensemble des configurations simulées, les critères de sûreté relatifs au combustible ou à la gaine restent loin des limites définies pour ces accidents. Cependant, afin d'estimer au mieux ces critères un effort supplémentaire doit être fait sur la localisation du point chaud.

Les principales difficultés rencontrées par les designs étudiés consistent à éviter la crise d'ébullition ainsi que l'atteinte de la température de saturation dans un trop grand nombre d'assemblages. Dans la situation d'une double éjection de grappe, respecter la proportion maximale d'assemblages en écoulement diphasique semble impossible. Le cœur 21x21 étant le cas le plus proche de satisfaire ce dernier critère thermohydraulique, plusieurs tentatives d'amélioration ont donc été testées pour y parvenir. Bien que coûteuse pour le rendement énergétique de la centrale, l'augmentation du flux massique a un impact bénéfique sur le nombre d'assemblages subissant une crise d'ébullition nucléée. Cependant, au regard de l'importante quantité d'énergie transmise à un inventaire réduit en eau, la température de saturation semble inévitable pour un grand nombre d'assemblages.

Le CTC positif du cas 19x19 illustre la nécessité de prendre une marge de sûreté vis-à-vis de la concentration maximale de bore. D'un point de vue méthodologique, cela souligne que les outils volontairement simples qui ont été mis en place ont une précision limitée ne permettant pas de rendre compte de ces phénomènes fins. Pour raffiner nos concepts de cœur et leur description, il est également nécessaire d'améliorer les outils de calcul.

Cette conclusion reste aussi valable pour les évaluations thermohydrauliques du cœur. Comme l'a montré l'analyse des critères de sûreté du REA, les systèmes sous-modérés sont au dessus, voir dans le meilleur des cas, proche de la limite du nombre d'assemblage en écoulement diphasique. Or, pour des raisons de simplicité, BATH se limite uniquement aux écoulements monophasique. Dès lors que le critère de sûreté est franchi nos outils de simulation ne permettent plus de simuler le cœur de façon représentative, ce qui par ailleurs empêche d'estimer correctement le nombre de crayons en ébullition.

En conclusion,

- si l'utilisation d'outils simples est privilégiée alors il est nécessaire de se placer loin des limites de sûreté en prenant d'importantes marges lors des étapes de conception.
- si l'objectif est d'optimiser le design d'un cœur, cela implique de réduire les marges de sûreté. Cela nécessitera des outils d'autant plus précis qu'on sera proche des limites.

Dans la perspective d'une conception approchée, en vue de multiples comparaisons d'options innovantes⁹, nos outils simplifiés ne sont compatibles qu'avec des limites de sûreté « renforcées ». Ainsi, dans le cas du REA simulé par NDM/BATH, le critère sur le nombre d'assemblages en écoulement diphasique devrait être passé à 0%. Il a alors été démontré que l'utilisation de réseaux fortement sous-modérés ne peuvent satisfaire à cette limite. Ce qui implique soit d'utiliser des outils plus précis pour continuer l'étude de ce système, soit d'étudier un autre système dont les marges intrinsèques sont plus importantes.

9. dont l'effet n'est pas trop fin.

Chapitre 5

Raffinement méthodologique et application à un SMR chargé en Th/Pu

L'organisation de ce chapitre suit les étapes de la méthodologie de conception préalablement mise en place.

Dans un premier temps, des calculs préliminaires à l'échelle d'un assemblage sont menés afin de cibler un enrichissement satisfaisant du point de vue du compromis burnup/conversion. Cette étape permet, entre autre, une première vérification des contre-réactions de températures. Le développement d'une méthodologie générale (nommée AGE), dédiée au dimensionnement des poisons consommables, y est présenté. Elle conduira à la définition d'une gestion de la réactivité avec un faible inventaire en bore soluble. Une étude préliminaire de l'apport d'une gestion par batch est également proposée.

L'étape de dimensionnement à l'échelle du cœur s'attachera au contrôle du facteur de forme radial. Ce dernier sera facilité par l'adaptation de l'empoisonnement du combustible à chaque type d'assemblage grâce à la méthode AGE.

Enfin, le dernier axe de ce chapitre portera sur l'étude de sûreté du SMR Th/Pu, toujours sur le cas d'un transitoire de REA. Certaines lacunes, constatées sur le dimensionnement du SMR ThU, lors de la définition des conditions initiales du transitoire y seront comblées par le recours à des calculs de carte d'importance. L'examen des critères de sûretés, propres au REA, se fera sur deux configurations de cœurs, avec et sans bore.

5.1 Intérêt du combustible Th/Pu

Le chapitre précédent s'attachait à identifier des utilisations pertinentes du combustible Th/U en SMR, sans jamais s'intéresser à la provenance de cet élément fissile. Or l'uranium 233 n'existe pas à l'état naturel du fait de sa demi-vie (d'environ 159200 ans), faible devant l'échelle des temps géologiques. Il est donc nécessaire de synthétiser préalablement cet élément par irradiation de ^{232}Th .

Une voie de génération régulièrement évoquée et étudiée [14, 13, 15] consiste à utiliser un combustible Th/Pu pour produire l' ^{233}U . Elle présente deux intérêts majeurs :

- la pérennisation d'une ressource partiellement périssable.
- l'utilisation d'une matière devenue encombrante.

Ces points sont plus amplement discutés ci-dessous.

Ces dernières décennies, le plutonium s'est vu doucement glisser du statut de ressource fissile valorisable à celui de déchet particulièrement encombrant car responsable de plus de 90% de la radiotoxicité à long terme. Le report à une date indéfinie de la construction de réacteurs rapides a conduit à l'accumulation d'un important stock de plutonium. En effet, un REP typique produit environ 250 kg de plutonium par GWé.an [74], [99]. Au bout de 40 ans de fonctionnement, le parc français cumule donc près de 300 tonnes de plutonium. Ce chiffre est à mettre en relation avec la vingtaine de tonnes de Pu nécessaire pour démarrer un RNR de 1 GWé. Les quantités de plutonium en réserve sont donc suffisantes pour amorcer la construction d'un parc de RNR (au besoin surgénérateurs) à l'échelle industrielle. Pour des raisons liées à la prolifération et à la sûreté, il serait même préférable de diminuer ce stock.

L'utilisation du plutonium se justifie à la fois économiquement (le stockage a un coût) mais également physiquement car le second isotope fissile du plutonium, le ^{241}Pu a une demi-vie d'une quinzaine d'années. Après 10 ans de stockage la qualité du vecteur plutonium s'est donc fortement dégradée ce qui diminue le potentiel énergétique du plutonium. Pire encore, le ^{241}Pu se désintègre en ^{241}Am un actinide mineur particulièrement radiotoxique.

Pour ces raisons, et bien que l'utilisation du plutonium en spectre thermique soit moins intéressante qu'en spectre rapide, son utilisation a été introduite en REP sous la forme du MOX (pour Mélange d'Oxyde ou en anglais *Mixed Oxydes*). Les assemblages MOX sont constitués du plutonium issus des assemblages UOX et d'un support en uranium appauvri ou en uranium naturel. Leur introduction en cœur ne s'est pas fait sans difficultés du fait des différences entre le combustible plutonium et uranium.

Pour un réseau de crayons géométriquement identiques, le combustible plutonium présente un spectre neutronique plus dur que celui de l'uranium du fait d'une absorption accrue autour de 1 eV. Ce durcissement va rendre les moyens de gestion de la réactivité conventionnels en REP (bore soluble, barres de contrôle, poisons consommables) moins efficaces. C'est notamment cette raison [17] qui va limiter la proportion d'assemblages MOX à 50% dans les REP (en pratique cette proportion est abaissée par prudence à 30%). L'utilisation de cœur mixte, c'est à dire utilisant à la fois du combustible UOX et MOX, fait surgir d'autres complications. Cela entraîne un pic de puissance à l'interface des assemblages UOX/MOX. Cette remontée de puissance côté MOX est due à l'apport de neutrons thermiques en provenance de l'UOX. Elle peut-être endiguée par un zonage de l'enrichissement en plutonium à l'intérieur de l'assemblage MOX [54].

Le comportement en transitoire accidentel est lui aussi significativement impacté. L'utilisation du plutonium va diminuer la fraction totale de neutrons retardés. Le ^{239}Pu , isotope fissile majoritaire du plutonium, a un β_{eff} de 230 pcm alors que dans l' ^{235}U la proportion totale des neutrons retardés est de 620 pcm.

Enfin, l'introduction d'isotopes avec une réaction de fission à seuil (au delà du MeV), que sont le ^{240}Pu et le ^{242}Pu , va fortement contraindre l'utilisation du plutonium en REP. En cas de perte complète du caloporteur, le spectre peut se durcir suffisamment pour que ces réactions à seuil jouent un rôle non négligeable dans le bilan neutronique et permettent un regain de réactivité. Cet effet de contre-réaction positif du vide sera d'autant plus important que l'enrichissement en plutonium sera élevé. Une CVR positive peut-être évitée si le vecteur plutonium n'est pas trop dégradé (faible qualité fissile) et si l'enrichissement en plutonium est limité.

Cette dernière condition va poser des contraintes sur le multi-recyclage des MOX en REP. Un MOX de second cycle verra d'une part sa concentration en isotopes fissiles diminuer et sa concentration en ^{242}Pu augmenter. La réutilisation de ce combustible, nécessitera donc d'accroître son enrichissement en plutonium, ce qui peut mener à une CVR positive.

La possibilité de faire un cœur 100% MOX tel que le propose l'EPR (*European Pressurize Reactor*) devrait alléger certaines des contraintes de conception telles que celles liées au facteur de forme intra-assemblage. Pour autant, cela ne résout pas la problématique du plutonium puisqu'au maximum un tiers du MOX [10] sera consommé par ce mono-recyclage. Parvenir à un multi-recyclage du plutonium en REP serait un premier pas vers la stabilisation (voir la diminution) du stock et fait l'objet de nombreuses recherches actuelles [74].

En outre, la viabilité économique du retraitement sous forme de MOX est régulièrement contestée. La fabrication du MOX est plus délicate que celle de l'UOX car il faut composer avec la radioactivité d'un combustible déjà irradié. De plus, les assemblages MOX sont plus complexes à fabriquer du fait de leur zonage en enrichissement. Un autre argument en faveur de l'utilisation du MOX est que sa fabrication participe à l'amélioration du retraitement et du conditionnement des déchets. De plus, le surcoût actuel de la fabrication du MOX doit être vu comme un investissement d'avenir dans l'hypothèse de la construction de réacteurs rapides.

L'utilisation d'une matrice de ^{232}Th offre l'avantage de stopper la production du plutonium. De plus le plutonium est partiellement converti en ^{233}U qui contrairement au ^{241}Pu est stable à l'échelle humaine. Ces raisons font de l'étude du recyclage en Th/Pu une voie de recherche de premier intérêt et très active [74]. Dans ce contexte, le travail d'un dimensionnement de SMR fonctionnant en Th/Pu sera utile pour évaluer les capacités de ces petits cœurs à participer à la stabilisation du stock de plutonium.

5.2 Étude préliminaire en assemblage infini

Les dimensions des crayons, des trous et des assemblages sont gardées identiques à celle d'un REP typique. L'étape de pré-dimensionnement du cœur conduit donc aux mêmes résultats que pour le cas du Th/U, à savoir un cœur de 89 assemblages de 2.30 m de hauteur. L'utilisation d'un combustible Th/Pu unique n'impose pas de zonage de l'enrichissement intra-assemblage.

Afin de donner une portée plus générale aux résultats d'évolution en assemblage infini, aucun seuil de réactivité n'a été pris en compte pour modéliser les fuites du cœur. Cela permet d'apprécier, pour le combustible et les configurations considérées, les performances théoriques maximales en terme de conversion et de taux de combustion.

Les géométries des assemblages étant fixées, le seul levier de conception restant est l'enrichissement. Usuellement, l'enrichissement du Pu est de l'ordre de 6-7% (à comparer au 3 à 4 % de l'UOX) afin de compenser les captures stériles (240 - 242). L'enrichissement ayant un lien étroit avec le burnup et la conversion, une large gamme est envisagée allant du minimum nécessaire à la criticité jusqu'à la valeur de 20% (maximum prescrit par les traités de non-prolifération). L'évolution est faite avec SMURE sur une géométrie où l'assemblage est entièrement réfléchi radialement, avec des conditions de vide aux extrémités axiales. Seule l'évolution d'une composition moyenne, commune à tous les crayons, est réalisée jusqu'à une date où la configuration cesse d'être critique.

5.2.1 Choix du vecteur isotopique du plutonium

Le design d'un SMR fonctionnant en Th/Pu peut servir divers objectifs qui sont :

- L'élimination d'un maximum de plutonium (burnup maximum).
- La production d'un maximum ^{233}U pour son utilisation ultérieure en Th/U (conversion maximale).
- Une dégradation minimale de la qualité du plutonium, défini comme le pourcentage d'isotopes fissiles au sein du vecteur plutonium, pour une possible réutilisation ultérieure. Il s'agit alors de trouver un optimum entre la consommation et la conversion.

Le vecteur plutonium utilisé correspond au plutonium issu du retraitement d'un assemblage UOX enrichi à 3.5% at., ayant atteint un burnup de 33000 MW.j/ton et après 5 ans de refroidissement [15]. La composition isotopique de ce vecteur est donnée dans la tableau 5.1.

^{238}Pu	^{239}Pu	^{240}Pu	^{241}Pu	^{242}Pu	^{241}Am
1.56	60.32	23.21	8.87	5.14	0.90

Tableau 5.1: Composition isotopique en %mol. d'un vecteur plutonium issu du refroidissement pendant 5 ans d'un combustible UOX enrichi à 3.5% at. en ^{235}U et ayant atteint un taux de combustion de 33 000 MW.j/ton

Ce plutonium « jeune », de bonne qualité (environ 70% d'éléments fissiles) n'est pas le plus contraignant puisqu'il évite le recours à des enrichissements trop élevés pouvant mener à une CVR positive.

Comme dans le chapitre Th/U, plusieurs rapport de modération, voir tableau 5.2, sont envisagés comme marge à la conception. Puisque notre intérêt se porte principalement aux aptitudes en conversion des assemblages, seul des réseaux sous-modérés sont considérés.

nom de la configuration	17x17	19x19	21x21
Rapport de modération	2.01	1.29	0.78

Tableau 5.2: Rapport de Modération envisagés pour la conception de réseau Th/Pu.

Efficacité énergétique du combustible Th/Pu

Pour de faibles enrichissements¹, le burnup varie de façon linéaire avec la quantité de matière fissile initiale. L'information apportée par cette variable est principalement utile pour répondre à un objectif précis en terme d'énergie à extraire. En revanche, elle ne permet de distinguer une région à privilégier pour une utilisation optimale du combustible.

C'est pourquoi une nouvelle observable a été introduite dans le chapitre précédent : le burnup effectif (noté BU_{eff}). Pour rappel, cette variable exprime « le taux de change » du plutonium en énergie. Plus précisément, c'est la masse du plutonium fissile perdue au cours du cycle pour la quantité totale d'énergie qui a pu être extraite. Plus le BU_{eff} est élevé, plus l'utilisation de la ressource, ou rendement, est optimale, à condition que cette dernière puisse être recyclée. Cette variable a l'avantage de prendre en compte le phénomène de conversion.

1. tant qu'il n'y a pas encore d'effet d'autoprotection [17]

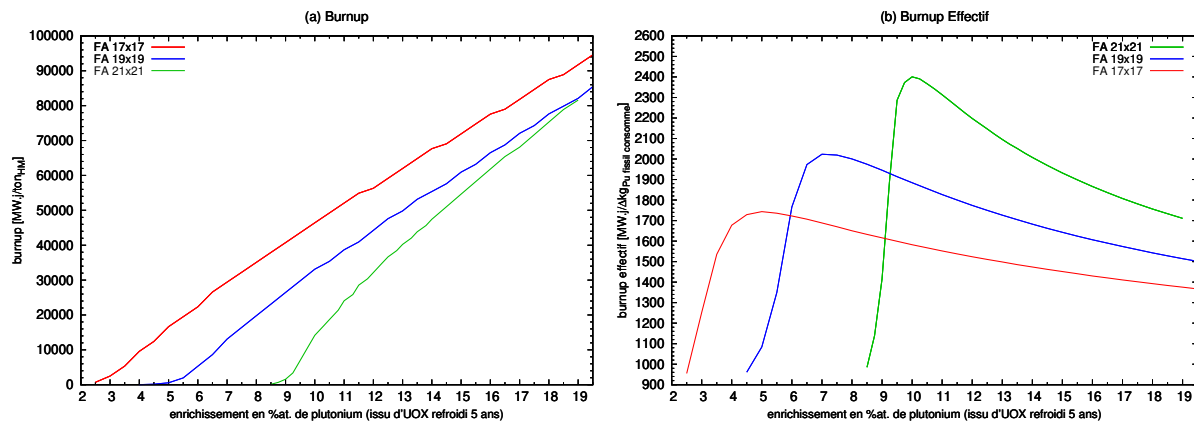


FIGURE 5.1: Paysage des performances énergétiques du combustible Th/Pu, pour différents enrichissements. Évolution réalisée en assemblage infinie et pour différents rapports de modération.

En fonction du scénario envisagé le BU_{eff} peut être calculé différemment, ainsi dans la figure 5.1, seul le plutonium est considéré dans le calcul de la masse fissile consommée.

Le meilleur conversion du réseau 21x21 explique que son BU_{eff} soit de 50% supérieur à celui d'un assemblage 17x17. Se placer au BU_{eff} optimal peut impliquer des temps de cycle plus court que ceux usuellement constatés, ici de l'ordre de 20 $GW.j/ton$. L'efficacité d'utilisation du combustible est en pratique modulée par des contraintes économiques, comme le coût du rechargement et le coût du retraitement qui peuvent, en l'absence de tension sur les ressources fissiles, pousser à augmenter le burnup, jusqu'au maximum de la résistance à l'irradiation des matériaux par exemple. Ce méta-optimum, appelé optimum technico-économique ([31]), fixe actuellement le burnup à environ 50 $GW.j/ton$, cependant, cette valeur peut-être amenée à varier en fonction des types de réacteurs qui composent le parc et de la rareté des ressources fissiles.

Rendement de conversion

Pour profiter à de futures études, les performances en conversion sont analysées de façon large en considérant la conversion en ^{233}U seul ainsi que celle de tous les principaux isotopes fissiles (cf. figure 5.2).

Les performances en conversion sont quantifiées au travers de la variable ICR (*Integrated Conversion Coefficient*) introduite dans le chapitre Th/U. Pour rappel cette variable est définie comme le rapport entre l'intégrale du taux de création d'un ou de plusieurs isotopes fissiles sur l'intégrale de leurs taux de disparition. La figure 5.2 présente les performances en conversion en terme d'ICR pour les différentes configurations étudiées.

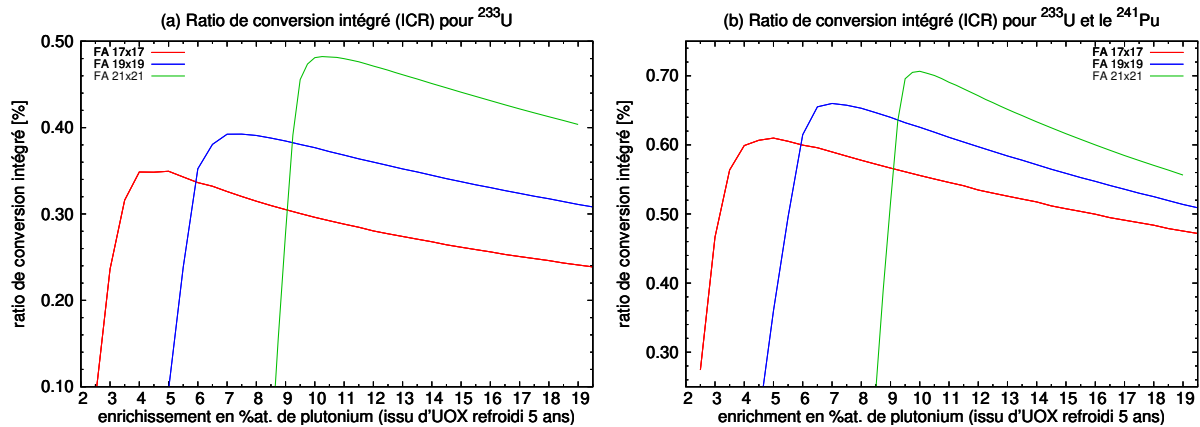


FIGURE 5.2: Ratio de conversion intégré sur toute la longueur du cycle (ICR, Integrated Conversion Ratio), calculé pour différents enrichissements en plutonium et pour différents rapports de modération

La figure 5.2 (a), permet de conclure que la transition vers un autre cycle fissile a pour conséquence un rendement de conversion vers le ^{233}U bien moindre que ceux constatés en Th/U (le cycle U/Pu en REP étant entre 50 et 60% pour la conversion du plutonium). Moins de 50% des atomes fissiles disparus sont remplacés par la création d'un atome d' ^{233}U .

La prise en compte de la régénération du ^{241}Pu augmente significativement les performances en conversion qui sont alors plus proche de celles constatées en Th/U. Un facteur de conversion particulièrement intéressant est noté dans le cas du réseau 21x21 pour un enrichissement de 10.5% at. (correspondant à un burnup de 18700 MW.j/ton). L'utilisation du plutonium participe au durcissement du spectre, ce qui permet d'améliorer le ICR. Cependant, malgré l'utilisation de réseau sous-moderé, la haute conversion ($ICR \approx 0.85$) ne semble pas accessible en REP pour le combustible Th/Pu.

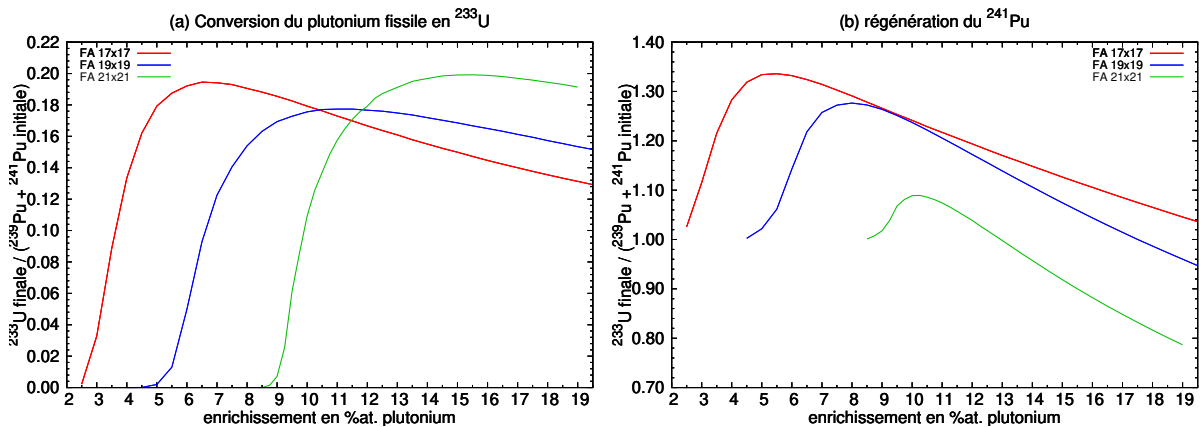


FIGURE 5.3: La figure (a) représente la quantité de ^{233}U finale obtenue en fin de cycle par rapport à la quantité de plutonium fissile initialement présente. La figure (b) représente le rapport entre la quantité de ^{241}Pu finale et sa quantité initiale.

La figure 5.3 (a) montre que la production de ^{233}U représente au maximum 20% de la quantité d'isotope fissile du plutonium. Ce maximum correspond à des gammes d'enrichissement un peu plus élevées que celles maximisant le ICR (cf. figure 5.2). Notons que le maximum du réseau 19x19 est un peu moins important que celui du réseau 17x17 et 21x21.

L'absence d' ^{238}U n'empêche pas la régénération du vecteur plutonium. Plusieurs mécanismes sont à l'œuvre pour créer le ^{241}Pu mais aussi le ^{239}Pu :

- Plusieurs voies de synthèse co-existent pour la régénération du ^{239}Pu :
 - $^{238}\text{Pu} + \frac{1}{0}\text{n} \longrightarrow ^{239}\text{Pu}$
 - $^{240}\text{Pu} + \frac{1}{0}\text{n} \longrightarrow ^{239}\text{Pu} + \frac{1}{0}\text{n}$
 - $^{241}\text{Am} \longrightarrow \alpha ^{237}\text{Np} + \frac{1}{0}\text{n} \longrightarrow ^{238}\text{Np} \longrightarrow \beta ^{238}\text{Pu} + \frac{1}{0}\text{n} \longrightarrow ^{239}\text{Pu}$
 - des captures successives sur les isotopes de l'uranium. Des quantités décroissantes sont générées d' ^{234}U , ^{235}U et ^{236}U par l'intermédiaire du cycle thorium.
- La génération de ^{241}Pu provient essentiellement de : $^{240}\text{Pu} + \frac{1}{0}\text{n} \longrightarrow ^{241}\text{Pu}$

La quantité de ^{239}Pu créée est de l'ordre de 1% de celle initialement présente. La masse de ^{241}Pu créée est bien plus significative, comme le montre la figure 5.3 (b). Pour un enrichissement typique de MOX (environ 8 at.%), les assemblages 17x17 et 19x19 sont mêmes surgénérateurs pour cet isotope. Cette évolution du vecteur isotopique a une incidence dans la cas d'un recyclage à long terme (typiquement le temps d'attente pour l'émergence des RNR). La qualité du plutonium en fin de cycle, représentée figure 5.4 est alors susceptible de baisser d'une dizaine de pourcent. A fortiori, l'utilisation du thorium ne va donc pas permettre de consommer le ^{241}Pu qui est la partie périssable du plutonium.

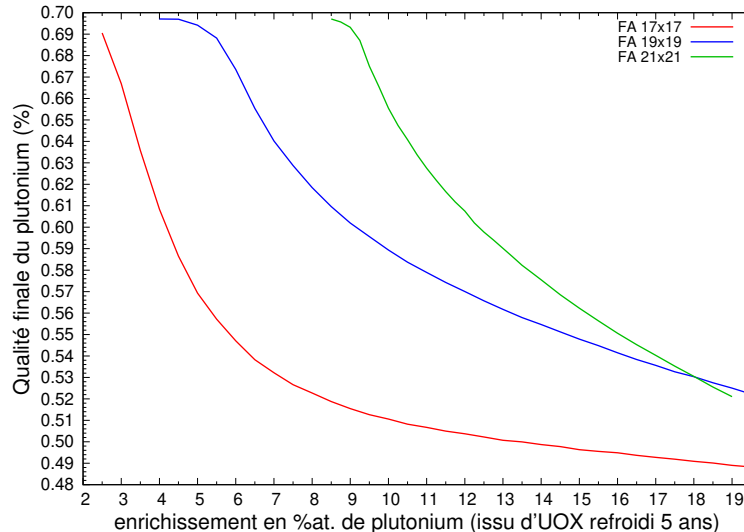


FIGURE 5.4: Qualité fissile du plutonium (en %) en fin d'évolution pour différents enrichissements initiaux et différents rapports de modération.

Digression sur l'impact d'un parc pré-existant sur le design du réacteur

Les paragraphes précédents ont établi qu'en fonction de l'objectif du réacteur (i.e. conversion ou combustion), des observables spécifiques doivent être définies afin de sélectionner un enrichissement optimal. Cependant à terme, l'objectif d'un parc de réacteurs sera toujours d'utiliser au mieux la ressource fissile pour produire le plus d'énergie possible². Pour savoir s'il vaut mieux privilégier la conversion ou l'incinération il peut être intéressant de considérer les performances des réacteurs du parc déjà existant.

Par exemple dans le scénario esquissé, il s'agit de dimensionner une strate de réacteurs (indiquée n) fonctionnant au Th/Pu pour fonctionner en symbiose avec une strate de réacteurs (indiquée n+1) fonctionnant au Th/U. L'évolution des réacteurs Th/Pu a ceci de particulier qu'elle est caractérisée par un triplé final : énergie extraite, plutonium fissile restant (^{239}Pu ,

2. On s'intéresse ici uniquement à un parc de réacteurs de puissance.

^{241}Pu) et uranium fissile restant (^{233}U) dépendant de l'enrichissement initial. En fonction des performances d'incinération (i.e BU_{eff}) de la strate $n + 1$ il peut être intéressant d'adapter le comportement du réacteur de la strate n pour soit privilégier sa propre production d'énergie ou sa production de fissile.

Dans cette stratégie de conception, il est donc question d'optimiser le parc dans son ensemble du point de vue de l'utilisation des ressources fissiles, c'est à dire le BU_{eff} total, pris sur toutes les strates de réacteurs :

$$BU_{eff,tot} = BU_{eff,n} + ICR \cdot BU_{eff,n+1}$$

Les études de cœur Th/U ont montré que l'on peut s'attendre à un BU_{eff} d'approximativement de $2000 \frac{MW.j}{\Delta kg}$ (cas des assemblages 17x17). Si la configuration Th/Pu choisie permet un BU_{eff} significativement meilleur alors l'importance de la conversion/production d' ^{233}U est marginale. En revanche, si le rendement énergétique du fissile de la strate Th/U et de celle Th/Pu est similaire alors l'indicateur du $BU_{eff,tot}$ permet de déterminer à quel point il est avantageux de sacrifier ou non une partie du BU_{eff} de la strate Th/Pu au profit de la conversion (ICR).

Évaluation des contre-réactions thermiques

La figure 5.5 montre la contre-réaction en température du combustible en fonction (FTC) de son enrichissement au BOC. Celle-ci est calculée comme la pente issue d'une régression linéaire pour des valeurs de réactivités calculées à températures combustibles dans une gamme [600; 1500] K par pas de 300 K. Le FTC (*Fuel Temperature Coefficient*) est de l'ordre de $-2.5 \frac{pcm}{K}$. Cette valeur correspond aux estimations trouvées dans la littérature [15]. La valeur absolue du FTC augmente avec la densité de combustible dans l'assemblage, elle même inversement proportionnelle au rapport de modération. En revanche le FTC diminue avec l'enrichissement. Ce phénomène (similaire dans un combustible UOX) est dû à la réduction de la densité du ^{232}Th dont les résonances contribuent majoritairement au FTC.

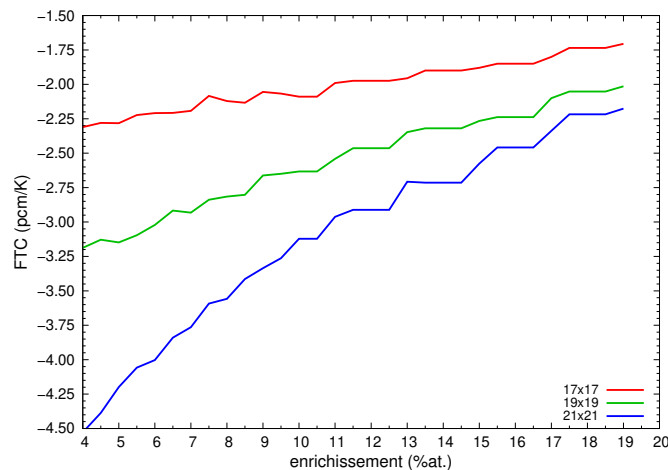


FIGURE 5.5: FTC moyen en (pcm/K) en fonction de l'enrichissement.

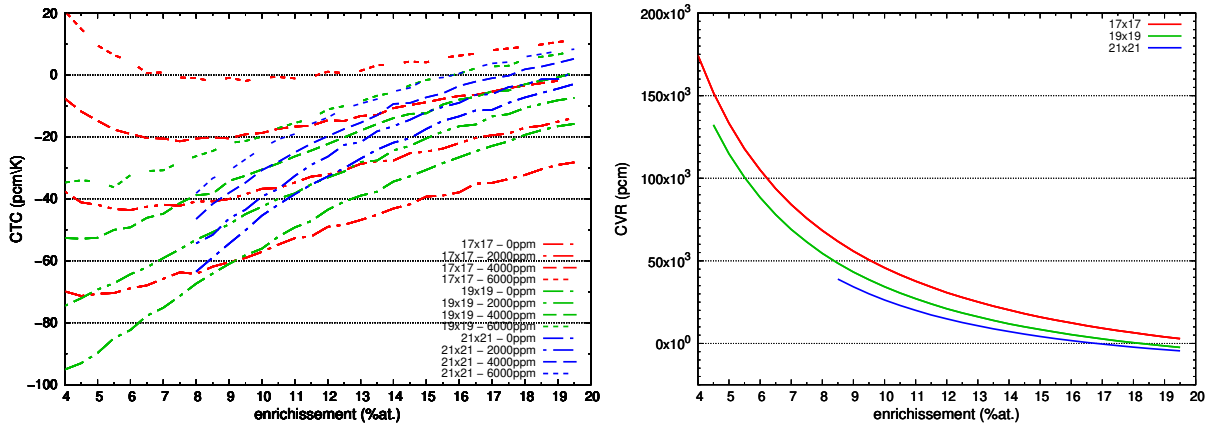


FIGURE 5.6: CTC et CVR en fonction de l'enrichissement et du niveau de modération.

Le coefficient de température modérateur (CTC) est également évalué comme la pente moyenne issue d'une régression linéaire menée entre 560 K et 620 K par pas de 10 K. Pour chaque température du caloporteur, la densité est ajustée à la valeur correspondante pour une pression de 15.5 MPa. En fonction des tabulations disponibles, les tables de « scattering » sur l'hydrogène dans l'eau légère sont également adaptées. Le CTC est, par abus de langage, gradué en $\frac{pcm}{K}$ mais il comprend également l'effet en densité. La figure 5.6 synthétise les résultats moyens obtenus pour différents niveaux d'enrichissement.

Comme le montre la figure 5.6, un CTC positif peut être atteint sans bore pour des enrichissements de l'ordre de 20%at., en accord avec [15] et [100]. La plage de température utilisée pour le calcul du CTC correspond à une variation de densité d'environ 20%. Le durcissement de spectre qui en résulte n'est pas assez important pour sonder l'impact des fissions à seuil des isotopes ^{240}Pu et ^{242}Pu . Il est nécessaire pour cela de diminuer la densité du caloporteur d'au moins 80%. Les effets les plus importants sur le spectre sont constatés sur les derniers 10% de la densité du modérateur. La CVR est donc calculée comme la différence de réactivité entre une configuration où la température du caloporteur est fixée à 580 K (et la densité à sa valeur correspondante) et une autre configuration où la température est à 580 K mais avec une densité nulle. Le résultat, présenté 5.6 montre que dans le cas du réseau 21x21, dont le spectre est initialement plus dur, une CVR positive peut être rencontrée dès 15% d'enrichissement.

Le plutonium « jeune » issu de l'UOX ne pose pas de fortes contraintes sur l'enrichissement en comparaison à d'autre type de plutonium, du fait de sa proportion restreinte en isotopes pairs. Cependant l'ajout de bore vient considérablement diminuer la marge du CTC. La figure 5.6 (b) indique qu'au delà de 4000 pcm le CTC est fortement réduit, voir positif pour des enrichissements élevés. Sans autre moyen de gestion de la réactivité, des quantités importantes de bore soluble sont à prévoir du fait de sa très faible efficacité avec le combustible Th/Pu, (cf. figure 5.7).

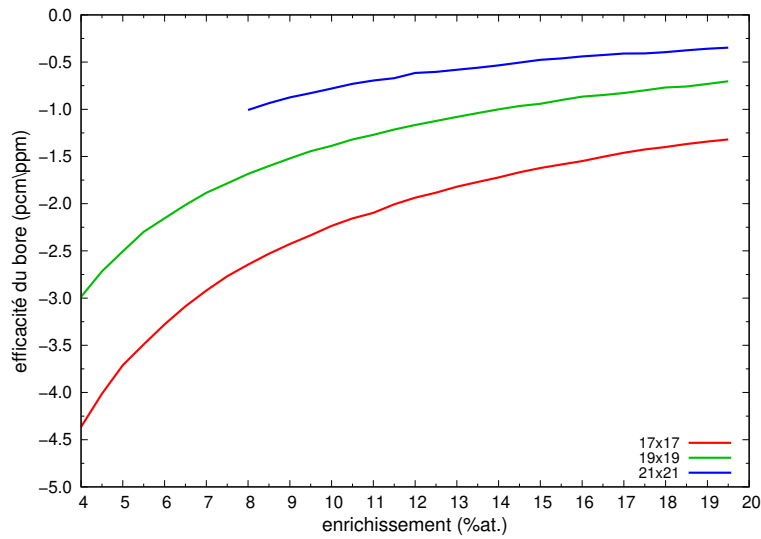


FIGURE 5.7: Efficacité du bore en fonction de l'enrichissement et du niveau de modération.

Choix du système étudié

Dans la suite, seul le réseau 19x19 sera étudié, le réseau 17x17 nécessitant des enrichissements trop importants pour atteindre des burnup significatifs, tandis que les contre réactions thermiques et la faible efficacité du bore dans le réseau 21x21 laissent présager une conception trop difficile.

Dans le paragraphe qui suit, on entend par rendement de production la proportion d' ^{233}U finale rapportée à la quantité initiale d'isotope fissile. En milieu infini, le rendement de production optimale se trouve à un enrichissement de 11.5 %at. Ainsi près de 18% de plutonium fissile présent initialement est converti en ^{233}U (voir figure 5.3 (a)), pour un burnup de 41 GW.j/ton . La prise en compte d'un seuil de réactivité de 4000 pcm pour modéliser les fuites du cœur va significativement dégrader ces résultats. Le burnup constaté est alors bien plus modeste, environ 25 GW.j/ton . La proportion finale d' ^{233}U représente 12% de l'inventaire fissile en début de cycle. De manière plus générale, le raccourcissement de la durée de cycle va diminuer les performances en burnup et conversion (i.e ICR). Les plages d'enrichissements optimaux sont alors décalées vers de plus fortes teneurs. Dans le cas du 19x19, le meilleur rendement en production est constaté vers 16 %at d'enrichissement en plutonium pour d'environ 13.5% de la masse fissile initial « convertie » en ^{233}U . Il en est de même pour le BU_{eff} dont la plage optimale est décalée vers 17 %at d'enrichissement pour diminution d'environ 25% des performances de production par rapport au cas sans fuites. Cette forte sensibilité aux fuites indique qu'une bonne utilisation du Th/Pu modéré en eau légère nécessite d'avoir un cœur de grandes dimensions. Cela permettrait à la fois d'obtenir de meilleures performances combustible (conversion et incinération), de limiter l'enrichissement et donc de garder une marge sur les coefficients de température.

On s'intéressera dans la suite au design d'un cœur utilisant des assemblages 19x19, enrichis à 11.5%at en plutonium. Ce choix d'enrichissement a été motivé par des considérations sur :

- le niveau de réactivité initiale ($\rho \approx 11500$ pcm) ce qui permet de jauger la difficulté de la gestion en réactivité.
- les contre-réactions thermiques qui deviennent insuffisantes voire positives entre 15 et 20 %at.
- les performances thermiques de l'assemblage déjà éprouvées et qui ne semblent pas rédhibitoires en situation accidentelle.

Ces caractéristiques préfigurent d'un design de cœur sans difficulté insurmontable, ce qui a permis de proposer de nouveaux développements méthodologiques. Avec plus de temps, il serait bien sûr possible d'itérer cette méthodologie de design afin de s'approcher au plus des performances combustibles optimales tout en veillant à conserver des marges de sûreté suffisantes en cas de situations accidentelles.

5.2.2 Gestion de la réactivité par un continuum de poisons consommables

Le chapitre précédent sur le dimensionnement de cœur Th/U a mis en avant la nécessité de minimiser l'inventaire en bore pour garantir des performances de sûreté optimales. Afin d'améliorer la gestion de réactivité par les poisons consommables il était nécessaire de mettre en place une méthodologie à la fois moins empirique et plus fiable dans sa capacité à borner l'évolution de la réactivité mais également plus optimale vis à vis des pénalités induites sur la longueur de cycle.

Principe de la méthode

L'empoisonnement d'un cœur par un poison neutronique se fait en jouant sur deux degrés de liberté : le pourcentage d'empoisonnement des crayons et le nombre de crayons empoisonnés à cette concentration. Au premier ordre, la concentration du poison va déterminer la durée pendant laquelle l'empoisonnement sera effectif tandis que le nombre de crayons empoisonnés va déterminer la quantité totale d'antiréactivité injectée dans le système.

On appellera poids du poison X la quantité d'antiréactivité $\rho_w^X(t)$ à chaque instant du cycle, associée à un crayon empoisonné pour une concentration massique ω . La méthode originale ici présentée repose sur l'idée d'utiliser un panel de poisons consommables pour décomposer la réactivité sur un ensemble de poids ρ_w^X . Cette gradation des teneurs de poisons consommables permet une dissipation de l'anti-réactivité apportée par ces derniers beaucoup plus continue au cours du cycle d'où l'emploi du terme « continuum ».

À chaque poids est associé un nombre N_w^X de crayons empoisonnés à la teneur ω tel que :

$$\rho_{min} < \rho(t) - \sum_{\forall X, \forall \omega} N_w^X \cdot \rho_w^X(t) < \rho_{max}$$

Avec :

- $\rho(t)$ la réactivité du système (assemblage en milieu infini ou cœur) sans poison consommable.
- ρ_{min} et ρ_{max} les bornes de réactivité inférieure et supérieure dans lesquelles on cherche à circonscrire la réactivité.

L'intérêt de cette décomposition est d'adapter au mieux l'empoisonnement en fonction des variations de réactivité qui ont lieu au cours de l'évolution. L'utilisation de nombreux crayons très faiblement empoisonnés, à cinétique de combustion rapide, permet de compenser les variations de réactivité consécutives à l'apparition du Xénon. L'utilisation d'un empoisonnement graduel va également minimiser le nombre de crayons à forte teneur de poison, principaux responsables de l'antiréactivité résiduelle.

Contrairement à des décompositions classiques, comme celle en séries de Fourier, l'ensemble des poids ρ_w^X pour ω appartenant à un intervalle de concentration, ne forment pas une base orthogonale. Cette difficulté a nécessité le développement d'outils spécifiques qui seront décrits dans la suite.

Rien dans le principe exposé ci-dessus ne contraint à se limiter à un seul poison. Cependant, pour des raisons de simplicité, seul le Gadolinium, bénéficiant d'un REX conséquent en REP, sera considéré dans la suite. Dans la suite l'indice X sera donc omis. Comme cela a déjà été

évoqué, le gadolinium (abrégié Gd) peut être incorporé dans les oxydes sur une large gamme de concentration (jusqu'à 25% massique).

Construction d'une bibliothèque de crayons empoisonnés

La première étape de cette méthodologie est la construction d'une base de vecteurs d'empoisonnement. Le nombre de teneurs différentes qu'il est nécessaire d'envisager dépend principalement de la largeur de la bande de manœuvrabilité. Comme évoqué précédemment, la gamme d'empoisonnement doit être suffisamment riche pour s'adapter aux différentes cinétiques d'évolution de la réactivité.

Chaque poids $\rho_\omega(t)$ est estimé par une simulation d'évolution SMURE en milieu infini. Une seule teneur ω est testée à la fois pour un nombre N_ω adéquat de crayons empoisonnés, c'est à dire une centaine pour des teneurs de l'ordre de 0.25 wt% à la dizaine de crayons pour des empoisonnements de l'ordre de 3 wt%. Tous les crayons empoisonnés (respectivement non empoisonnés) partagent la même composition durant l'évolution qui est réalisée avec flux moyen de l'ensemble des positions occupées. Le placement des crayons empoisonnés n'est pour le moment pas optimisé, cependant il est important qu'ils soient répartis uniformément afin de minimiser les effets d'ombre.

Le poids en antiréactivité dû au remplacement d'un crayon non empoisonné par un crayon empoisonné est calculé comme :

$$\rho_\omega(t) = \frac{\rho_{sans\ poison}(t) - \rho_{empoisonné}}{N_\omega(t)}$$

Avec :

- $\rho_\omega(t)$ la réactivité associée au remplacement d'un crayon non empoisonné par un autre crayon empoisonné à une concentration ω
- $\rho_{sans\ poison}(t)$ la réactivité en fonction du temps calculée dans un assemblage sans poisons.
- $\rho_{empoisonné}(t)$ la réactivité en fonction du temps calculée dans un assemblage avec N crayons empoisonnés à une concentration ω .

Une statistique non négligeable est nécessaire pour calculer, en Monte Carlo, une différence de réactivité entre deux configurations. C'est particulièrement vrai dans le cas de teneurs réduites où l'antiréactivité apportée est faible. Dans cette étude chaque calcul est consisté à suivre 50000 neutrons répartis en 1000 cycles actifs (et 200 inactifs). Les différents poids ainsi obtenus sont donnés figure 5.8.

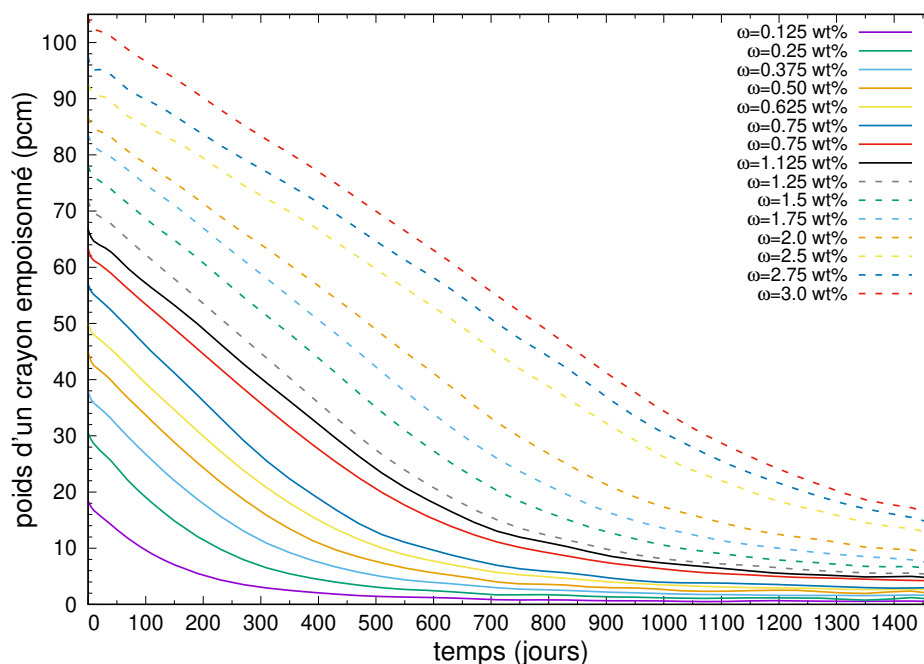


FIGURE 5.8: Poids d'un crayon empoisonné fonction pour différentes teneur d'empoisonnement de ω

Il est inutile d'utiliser des enrichissements supérieurs à 3 wt% car le temps de combustion du Gd est alors supérieur à la longueur du cycle. En effet, pour un enrichissement supérieur, le poids du crayon empoisonné n'atteint pas sa valeur asymptotique (i.e. antiréactivité résiduelle) en fin de cycle. De plus, 100 crayons à cette concentration suffisent pour compenser intégralement la réactivité au BOC. Il a également été vérifié que le poids d'un crayon ainsi obtenu est relativement indépendant du nombre de crayons empoisonnés utilisé dans l'assemblage, (cf. figure 5.9). Cette simplification affecte surtout les poids de crayons sur les premiers pas temps ce qui pourrait poser des problèmes lorsque la bande de manœuvrabilité est étroite.

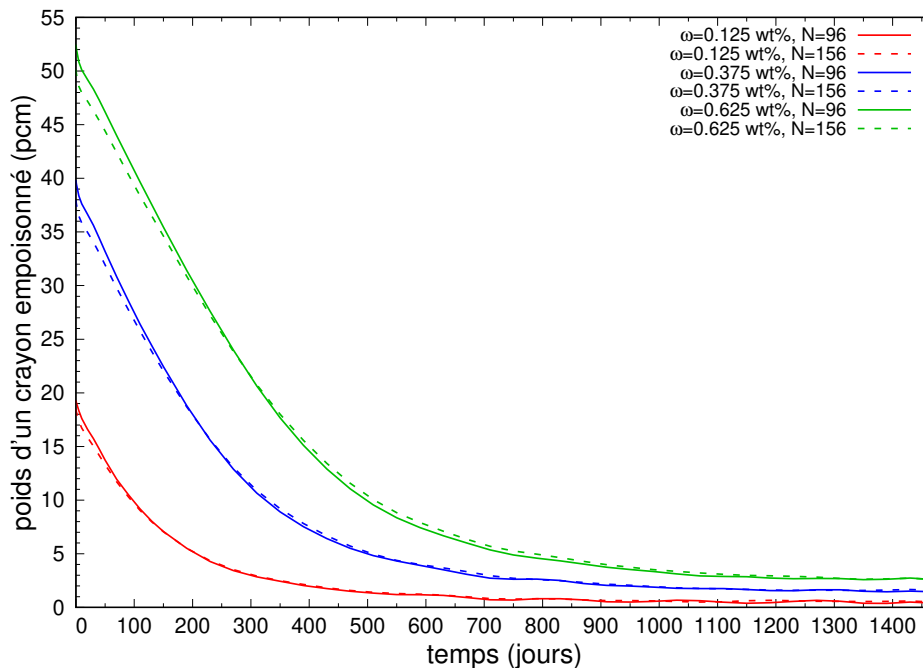


FIGURE 5.9: Poids d'un crayon $\rho_\omega(t)$, en fonction du nombre de crayons empoisonnés utilisé dans l'assemblage. La teneur en Gd est désignée dans la légende par la lettre ω et le nombre de crayons empoisonnés par la lettre N.

Comme le montre les figures 5.8 et 5.8, le poids des crayons adopte une forme assez caractéristique qui peuvent être approximée par la fonction :

$$\rho_\omega(t) = (\rho_{inf} - \rho_0) \cdot erf\left(\frac{t}{\tau}\right) + \rho_0$$

Avec :

- erf la fonction erreur.
- ρ_{inf} la réactivité asymptotique, c'est à dire l'antiréactivité résiduelle constatée en fin d'évolution.
- ρ_0 la réactivité à $t=0$.
- τ un constante de temps spécifique de la cinétique d'incinération pour la concentration ω .

Notons que ce premier modèle pourrait être à l'occasion complété par les expressions a priori linéaires de $\rho_0(\omega)$, $\rho_{inf}(\omega)$ et $\tau(\omega)$.

Développement d'algorithmes dédiés à l'utilisation d'un continuum de poisons consommables

L'utilisation de la bibliothèque des ρ_ω requiert de trouver un vecteur \vec{N}_ω optimal vis à vis du burnup final mais permettant de respecter les contraintes imposées sur l'amplitude de variation de la réactivité. Le fait que les ρ_ω ne constituent pas une base orthogonale rend caduque les méthodes classiques d'algèbre linéaire. En effet, si l'on souhaite optimiser un vecteur \vec{N}_ω où la réactivité est déjà dans la bande de manoeuvrabilité, l'ajout de crayons à la teneur ω' doit être compensée par le retrait de crayons à des teneurs $\omega < \omega'$ afin de conserver la réactivité dans la bande de manoeuvrabilité. Le rôle des crayons de faibles teneurs étant déjà assuré, dans une certaine mesure, par les nouveaux crayons ajoutés. Pour trouver cette combinaison optimale

de crayons empoisonnés un algorithme génétique, nommé AGE (pour Algorithme Génétique d'Empoisonnement) a été développé.

La deuxième difficulté rencontrée est le placement de ces crayons qui peuvent devenir très nombreux. Un second algorithme génétique, nommé AGP (pour Algorithme Génétique de Placement), sera dédié à ce problème.

AGE pour la détermination du nombre de crayons associé à une teneur en poison

L'absence de méthode mathématique directe (du type inversion de matrice) pour obtenir le vecteur \vec{N}_ω , oblige à reconsidérer ce problème sous l'angle combinatoire pour lequel les algorithmes génétiques sont généralement utilisés. L'algorithme développé suit les étapes classiques mises en place pour cette méta-heuristique [101], [102] :

1. Génération d'une population initiale d'individus caractérisés par un génome c'est à dire un vecteur de caractéristiques, ici le nombre de crayons à la teneur ω .
2. La sélection : seul un nombre restreint d'individus est retenu en fonction de leur adéquation à un critère de sélection calculé à partir de leur génome. Plusieurs type de sélections sont possibles, dans notre cas, seul la sélection par rang a été utilisée. Elle consiste à sélectionner les k premiers éléments selon leur degré d'adéquation quantifié par un score (ou note) aussi appelée *fitness*. Les « clones³ » sont éliminés pour optimiser l'exploration des solutions. C'est à partir des « survivants » que sera construit la prochaine génération.
3. L'évolution : À partir des individus « survivants » de la génération (n-1) une nouvelle population (la génération n) est créée. Le génome des nouveaux individus est construit selon deux modalités, chacune caractérisée par une probabilité d'occurrence p et (1-p) :
 - la mutation : c'est la variation aléatoire d'un ou plusieurs gènes dans la gamme des valeurs possibles pour cette caractéristique.
 - le croisement : le nouvel individu généré aura alors une proportion x des gènes de l'individu père et une proportion (1-x) des gènes de l'individu mère. La variable x pouvant être fixée ou aléatoire.

La probabilité de mutation (p) est dépendante du problème traité, dans notre cas elle a été fixée à 10%.

Il est également possible d'inclure une troisième possibilité de génération où le génome d'un nouvel individu est entièrement construit de façon aléatoire, comme c'est le cas à l'initialisation. Cette autre possibilité est utile pour continuer à sonder l'espace des variables dans le cas où la population reste confinée sur un optimum local.

Communément une dizaine de nouveaux individus sont générés par les survivants, c'est à dire les individus sélectionnés à la génération (n). Dans les cas d'un croisement, chaque mère aura 7 enfants. Les pères sont sélectionnés en suivant une distribution gaussienne suivant leur classement. Les survivants de la population (n-1) sont inclus et mis en compétition dans la nouvelle génération (n).

Au final après la simulation de n générations, l'individu le mieux classé est considéré comme la meilleure solution au problème posé. Le processus de mutation/sélection garanti de trouver des optima locaux mais il ne donne pas l'assurance de trouver l'optimum global. Cependant, pour les applications envisagées, cette restriction n'est pas réhibitoire.

L'AGE a pour objectif de trouver un vecteur \vec{N}_ω de crayons empoisonnés pour minimiser l'antiréactivité résiduelle (et donc le burnup) tout en incluant la réactivité dans la bande de manoeuvrabilité. Pour ce faire, un « individu » est assimilé à une configuration possible d'empoisonnement de l'assemblage. Le génome de ces individus s'exprime simplement comme

3. individu possédant un génome identique

un vecteur de nombres entiers où chaque coordonnée correspond au nombre de crayons empoisonnés à la teneur ω pour un set préétabli de teneurs. Afin de conserver la symétrie de l'assemblage, ces nombres de crayons seront toujours des multiples de 4. De plus le nombre de crayons empoisonnés est limité à 336 (soit $19 \times 19 - 25$ trous d'eau).

La réactivité résultant de cet empoisonnement est estimée comme :

$$\tilde{\rho}(t) = \rho(t) - \sum_{\forall \omega} N_{\omega} \cdot \rho_{\omega}(t)$$

Où N_{ω} est la composante ω (correspondant à la teneur ω), du vecteur \vec{N}_{ω} .

Le vecteur poison recherché est celui qui permettra de contraindre au mieux la réactivité dans un intervalle $[\rho_{min}; \rho_{max}]$. L'adéquation d'un individu est calculée par la fonction de fit qui s'exprime comme :

$$fitness = \int_{\forall t / \tilde{\rho} < \rho_{inf}} \rho_{inf} - \tilde{\rho}(t) dt + \int_{\forall t / \tilde{\rho} > \rho_{sup}} \tilde{\rho}(t) - \rho_{sup} dt$$

Avec :

- $\rho(t)$ la réactivité, obtenue d'une précédente simulation, sans poison consommable.
- $\tilde{\rho}$ la réactivité « prédite » avec la présence de poison consommable.
- ρ_{ω} la réactivité d'un seul crayon empoisonné à une teneur ω en Gd.
- N_{ω} le nombre de crayon empoisonné à la teneur ω en poison consommable.
- ρ_{inf} et ρ_{sup} , respectivement la borne inférieure et supérieure de la bande de manœuvrabilité.

Le processus d'évolution va privilégier les individus qui minimisent la note (*fitness*), c'est à dire le temps passé en dehors de la bande de manœuvrabilité. Les meilleures solutions sont améliorées itérativement au cours des générations successives.

AGP pour le positionnement des crayons empoisonnés

En fonction des concentrations considérées à l'étape précédente, le nombre de crayons empoisonnés peut-être important, typiquement de 100 à 200 crayons. Il est apparu nécessaire d'automatiser le placement des crayons au sein des assemblages empoisonnés. Ce placement est réalisé de façon à minimiser le facteur de forme intra-assemblage. Pour cela, les crayons empoisonnés sont répartis de la façon la plus homogène possible dans l'assemblage en maximisant leur distance avec les autres crayons empoisonnés.

L'approche initialement adoptée pour résoudre ce problème d'optimisation est de le transposer à une situation physique analogue. Les crayons empoisonnés (les seuls représentés) sont alors considérés comme des électrons, libres de se déplacer au sein de l'assemblage et soumis à l'interaction coulombienne de leurs voisins. Des conditions de symétrie sont appliquées sur les surfaces latérales de l'assemblage (représenté en 2D). Malgré l'utilisation d'un schéma d'intégration de Verlet (conservant l'énergie) d'ordre 3 et l'utilisation de petits pas de temps (10^{-6} s), l'accumulation d'erreurs de calcul brise la symétrie initiale de la configuration. Or pour un nombre de crayons empoisonnés important la relaxation du système nécessite de nombreuses itérations (de l'ordre de 10^8 pas de temps).

Les difficultés numériques associées à la modélisation de phénomènes physiques (simulation à N particules chargées) ont finalement conduit à résoudre ce problème d'optimisation par un nouvel algorithme génétique, les algorithmes génétiques étant particulièrement efficaces (voir inévitables) pour des problèmes d'ordre combinatoire.

L'objectif de cet algorithme est de répartir pour tout ω les N_{ω} crayons empoisonnés dans l'assemblage. Pour ce faire, l'assemblage est découpé en « familles », c'est à dire des ensembles de positions considérées symétriquement équivalentes. Les positions correspondant aux tubes guides ne sont pas considérées. Deux types de familles ont été définies :

- Les familles de « type 4 ». Elles correspondent à un ensemble de 4 positions situées sur les axes du repère et sur les diagonales.
- Les familles de « type 8 ». Elles rassemblent 8 positions construites à partir de la symétrie en $\frac{1}{8}$ des assemblages. Ces positions ne se situent pas sur des axes de symétries.

Toutes les positions au sein d'une famille sont déductibles les unes des autres par application des symétries possibles dans l'assemblage. Une représentation d'un tel découpage est donnée figure 5.10 :

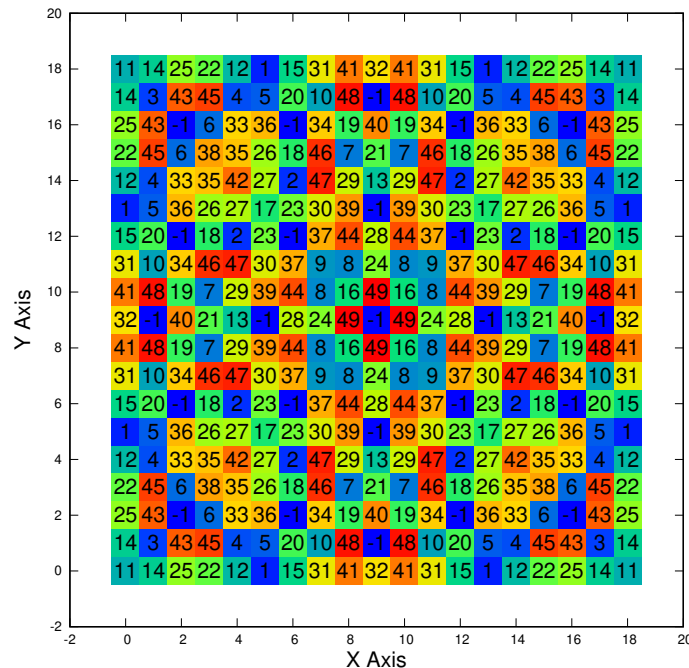


FIGURE 5.10: Découpage d'un assemblage 19x19 en familles de type 4 et familles de type 8. Chaque famille est représentée par une couleur et un numéro (distribué aléatoirement). Les trous d'eau sont désignés par l'indice -1.

Le génome d'un individu correspond ici à l'ensemble des familles occupées par les crayons empoisonnés. L'empoisonnement ω est unique au sein d'une famille. La fonction de *fit* s'inspire de ce qui avait été fait en première tentative dans la simulation analogue à N particules chargées. Il s'agit de minimiser un potentiel associé à une configuration d'assemblage. Ce potentiel est calculé comme :

$$V = \sum_{\forall j \in \text{assemblage}} \sum_{\forall i \text{ visible par } j} \frac{\delta_{ij}}{\sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2}}$$

Avec :

$j \in \text{assemblage}$ l'ensemble des crayons empoisonnés présents dans l'assemblage.

$i \text{ visible}$ tous les crayons empoisonnés vu par le crayon j .

(x, y) les coordonnées d'un crayon empoisonné.

δ_{ij} un coefficient valant 1 si les crayons i et j ont un empoisonnement différent et 2 pour un empoisonnement identique.

Les conditions utilisées sur les bords de l'assemblage sont des conditions de réflexions. En pratique, ces conditions de réflexion sont réalisées par le positionnement de 8 assemblages identiques autour de celui simulé. Ainsi les crayons empoisonnés ont un horizon, c'est à dire une distance au-delà de laquelle ils ne perçoivent plus un autre crayon empoisonné, d'un assemblage. L'inverse

de la distance entre deux crayons i et j est pondérée différemment en fonction de leur teneur ω . Cette subtilité permet une répartition plus uniforme des différents teneurs d’empoisonnement dans l’assemblage. Ainsi les crayons ayant une cinétique de combustion identique ne seront pas localisés dans la même région.

Vérification à l’échelle assemblage

Les développements proposés précédemment sont vérifiés sur le cas de l’assemblage 19x19 enrichi à 11.5 at% . La prédiction de la réactivité par l’AGE est vérifiée grâce à une évolution SMURE pour la même combinaison de poisons consommables. La réactivité est contrainte dans une bande de manœuvrabilité relativement étroite de [4000; 5000] pcm grâce à l’utilisation d’une palette de crayons telle que définie dans la figure 5.8.

Pour rappel, AGE va prédire une courbe de réactivité en fonction d’un vecteur d’empoisonnement \vec{N}_ω . Ce vecteur d’empoisonnement est alors optimisé afin de respecter les contraintes sur la réactivité (i.e bande de manœuvrabilité) et d’atteindre le plus grand burnup possible. La combinaison de crayons empoisonnés ainsi calculée est donnée dans le tableau 5.3

wg%	0.125	0.25	0.75	1.0	1.125
nombre de barres	6	48	64	8	8

Tableau 5.3: Vecteur d’empoisonnement au gadolinium optimisé par algorithme génétique pour contraindre la réactivité d’un assemblage 19x19 enrichi à 11.5 at% en Th/Pu dans une bande de réactivité de [4000; 5000] pcm.

La figure 5.11 montre que cette combinaison de crayons empoisonnés remplit son rôle en contraignant la réactivité dans le domaine voulu. Seul, un franchissement de la borne supérieure d’environ 50 pcm est constaté. Cette figure permet également de conclure que la prédiction de réactivité utilisée par l’algorithme génétique est satisfaisante. L’écart entre la réactivité calculée par l’algorithme génétique et SMURE étant d’au maximum 100 pcm (au début de l’évolution). Le succès de cette prédiction vient certainement du fait que les différences entre les spectres neutroniques de la simulation SMURE et ceux des simulations à la base de la bibliothèque des poids ρ_ω sont faibles.

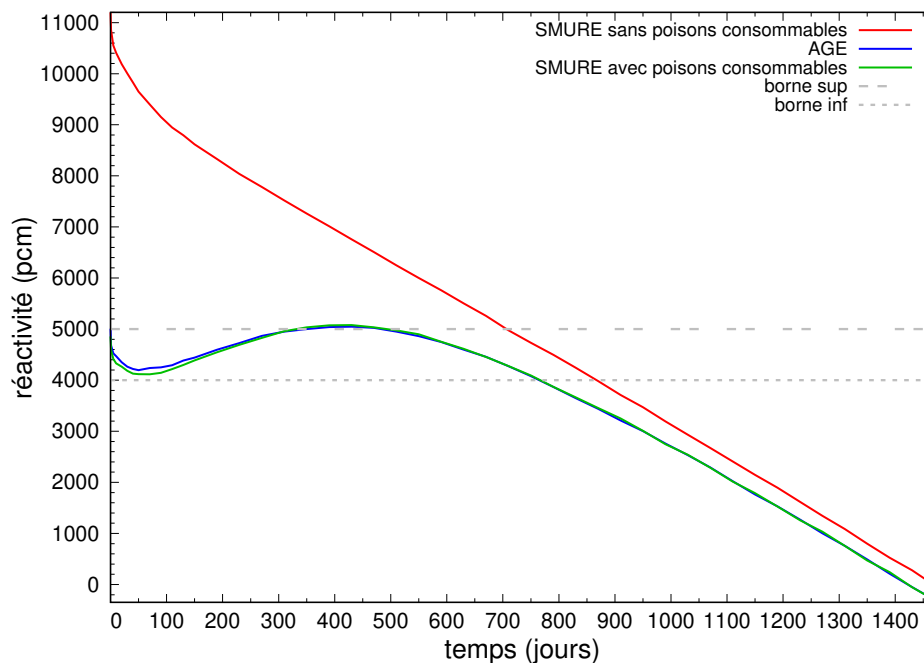


FIGURE 5.11: Évolution de la réactivité pour un assemblage 19x19 enrichi à 11.5 at% et empoisonné au gadolinium pour satisfaire une bande de manœuvrabilité de [4000;5000] pcm. La réactivité, calculée en assemblage infini est estimée de deux façons. Un premier calcul est réalisé par SMURE pour un assemblage avec et sans poison consommable. Un second calcul présente la prédiction de la réactivité par l'AGE.

L'apport du placement des barres par l'AGP a également été quantifié. Pour le vecteur d'empoisonnement précédemment défini, deux placements ont été testés. La première configuration est construite en commençant par occuper les groupes d'emplacements définis figure 5.10 dans un ordre préalablement déterminé et non-optimal. Le second placement maximise la distance entre tous les crayons empoisonnés grâce à l'algorithme génétique. Les configurations ainsi obtenues sont présentées ci-dessous ainsi que les facteurs de formes intra-assemblages calculés avec *Serpent2* sur le premier pas de temps où le facteur de forme est le plus important :

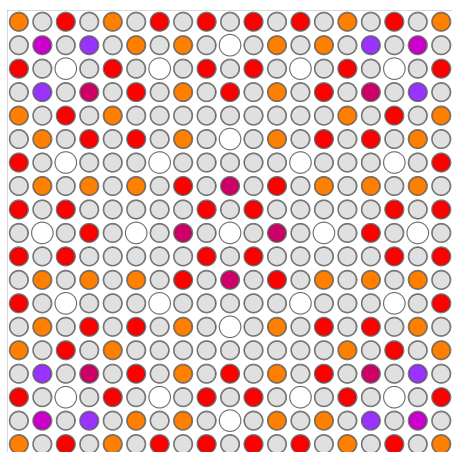


FIGURE 5.12: Assemblage 19x19 avec 132 crayons empoisonnés à 5 concentrations différentes. Placement dans un ordre déterministe non optimisé.

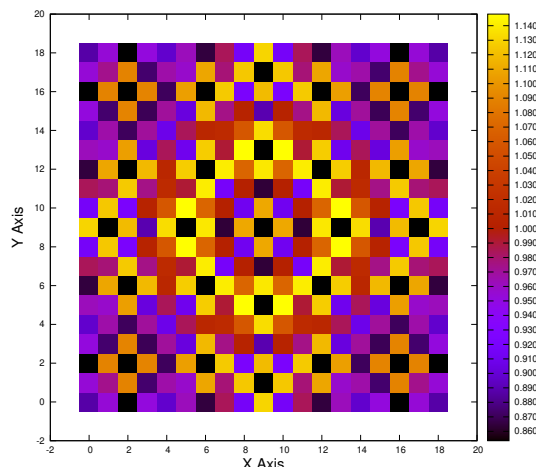


FIGURE 5.13: Carte de puissance intra-assemblage, normalisée à la puissance moyenne. Placement dans un ordre déterministe non optimisé.

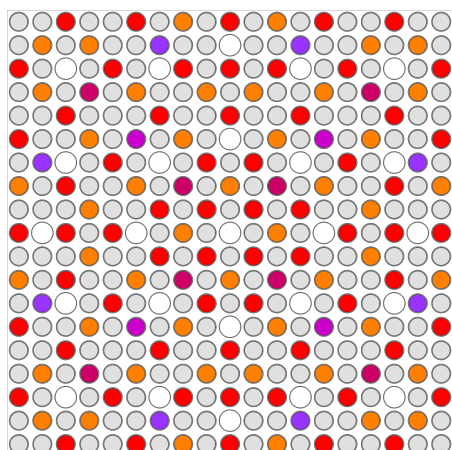


FIGURE 5.14: Assemblage 19x19 avec 132 crayons empoisonnés à 5 concentrations différentes. Placement optimisé par algorithme génétique

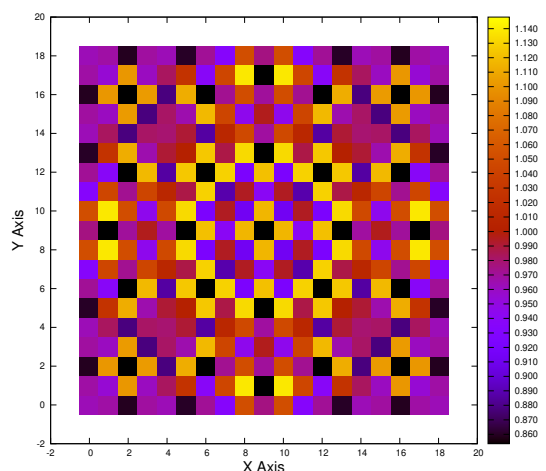


FIGURE 5.15: Carte de puissance intra-assemblage, normalisée à la puissance moyenne. Placement optimisé par algorithme génétique

Les figures 5.13 et 5.15 montrent que l'optimisation aboutit bien à une nappe de puissance à la fois plus plate et plus uniforme. En effet, les facteurs de forme minimal et maximal sont respectivement de 0.85 et 1.15 dans le cas non optimisé contre respectivement 0.86 et 1.14 dans le cas optimisé. La dispersion est aussi moindre, dans le cas optimisé elle vaut $\sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=0}^N (x_i - \bar{x})} = 0.075$ contre 0.088 dans l'autre cas.

Les crayons les plus chauds sont systématiquement situés près des trous d'eau. Une réduction plus importante du facteur de forme peut donc être espérée en privilégiant ces emplacements pour les crayons empoisonnés⁴. Cette amélioration pourrait être prise en compte dans l'AGP en multipliant, par exemple, la contribution au potentiel total d'un crayon proche d'un trou d'eau par un facteur inférieur à 1.

4. Il faudrait certainement le prendre en compte dans le calcul des $\rho_\omega(t)$

5.3 Apport d'un rechargement fractionné

Les SMR sont principalement envisagés en « mode batterie », c'est à dire que l'ensemble des assemblages fissiles sont renouvelés lorsque le cœur est épuisé. La seconde stratégie, conventionnellement utilisée en REP, consiste à ne renouveler qu'une partie des assemblages en cœur. Selon la gestion choisie seule une fraction (le plus souvent un tiers ou un quart) des assemblages les plus vieux est remplacée par des assemblages neufs. Il existe donc, lors d'un rechargement fractionné, des assemblages de différente durée de séjour en cœur. Cette durée est comptée en nombre d'irradiations également appelés *batches* (que l'on traduit en français par lots de rechargement).

Le fractionnement d'un cœur permet une meilleure utilisation du combustible (i.e. augmentation du burnup). La réactivité apportée par de nouveaux assemblages va permettre de prolonger la combustion des assemblages les plus anciens. L'amplitude maximale de réactivité est réduite ce qui permet un allègement des moyens de contrôle (e.g. bore, poisons consommables). En contre partie, la longueur d'un batch peut être fortement raccourcie selon le fractionnement choisi. Il y a donc un compromis entre le coût occasionné par les arrêts/rechargements répétés du réacteur et le gain d'une économie de combustible ; c'est l'optimum technico-économique [31]. Une autre difficulté associée au rechargement fractionné est le placement en cœur d'assemblages qui ont un taux d'irradiation et donc un comportement neutronique différent. La problématique complexe des plans de chargement ne sera pas abordée mais son traitement est indispensable lors du passage à l'échelle cœur pour garantir un facteur de forme maximum en accord avec les contraintes thermohydrauliques.

Cette section propose une première évaluation du gain apporté en terme de burnup pour la configuration préalablement étudiée, c'est à dire un réseau 19x19 enrichi à 11.5 at%. Dans un premier temps, le calcul en évolution avec SMURE sera adapté au rechargement fractionné. Puis dans un second temps, c'est la méthodologie de dimensionnement des poisons consommables qui sera rendu compatible avec un calcul de type « 2-batches ».

5.3.1 Méthodologie d'évolution 2-batches en milieu infini

Les études préliminaires présentées pour le calcul en rechargement fractionné seront menées sur des motifs en milieu infini. Seules les caractéristiques du cycle à l'équilibre seront considérées et non l'ensemble des étapes physiques pour y parvenir. Par cycle à l'équilibre on entend l'ensemble des compositions combustibles (C_1, C_2, \dots, C_n), indicées par le numéro du batch, telles qu'à la fin d'une irradiation la composition C_n devienne exactement la composition C_{n+1} .

Les motifs sont construits de façon à prendre en compte l'influence mutuelles des différentes compositions au cours des cycles d'irradiation. Pour ce faire, une configuration en damier est utilisée (c.f figures 5.16 et 5.17). Le traitement de cette configuration par SMURE est similaire à celui réalisé lors d'une évolution de cœur. Radialement des conditions périodiques sont appliquées au motif d'assemblage.

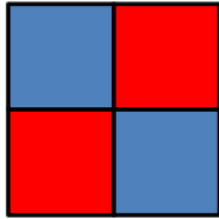


FIGURE 5.16: Schéma du motif simulé pour un rechargement fractionné en 2-batches. Chaque carré représente un assemblage, la couleur correspond au cycle d'irradiation. Une condition de périodicité est appliquée sur les bords du motif.

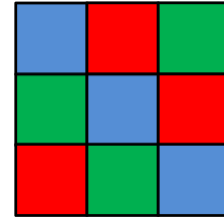


FIGURE 5.17: Schéma du motif simulé pour un rechargement fractionné en 3-batch. Chaque carré représente un assemblage, la couleur correspond au cycle d'irradiation. Une condition de périodicité est appliquée sur les bords du motif, de ce fait l'attribution d'un batch à une position donnée est sans importance.

La composition de chaque assemblage au batch (n) est commune. L'évolution d'une composition (n) se fait avec un flux moyenné au divers emplacements des assemblages au batch (n). Grâce à cette configuration en damier, aux conditions de périodicité, et à l'évolution d'une composition moyenne, tout assemblage a dans son voisinage direct tous les types possibles d'assemblages et ce dans des proportions équivalentes. Ainsi l'évolution des assemblages se fait dans un environnement neutronique moyen représentatif du cœur à chaque instant.

Par construction, le calcul d'évolution par rechargement fractionné est un problème itératif. En effet, dans la situation d'un calcul 2-batch, au début d'un nouveau cycle d'irradiation, il est nécessaire de connaître la composition du 2^{nd} batch pour pouvoir calculer correctement l'évolution du 1^{er} batch, permettant ensuite de retrouver la composition du 2^{nd} batch initialement utilisée. La première difficulté consiste donc à trouver une estimation correcte de la composition du 2^{nd} batch pour démarrer le calcul itératif.

Cette première estimation est calculée grâce à une évolution classique d'assemblage en milieu infini. Une méthode communément utilisée, pour modéliser simplement une évolution multi-batches à partir d'une évolution en assemblage infini, consiste à considérer la réactivité totale du cœur (ou ici du motif) comme la moyenne des réactivités apportée par chaque assemblage [13], [18], [17] :

$$\rho_{coeur}(t) = \frac{\sum_{\forall batch\ i} \rho_i^\infty(t)}{N_{batch}} - \rho_{fuite}$$

Avec :

N_{batch} , le nombre de batches considérés.

$\rho_{coeur}(t)$, l'estimation de la réactivité totale du motif.

ρ_{fuite} , le seuil de fuite appliqué au motif en milieu infini.

$\rho_i^\infty(t)$, la réactivité du batch i estimée directement à partir d'un calcul assemblage infini.

Pour un batch donné, la réactivité au temps t est estimée à partir de l'évolution en assemblage infinie comme :

$$\rho_{batch\ i}^\infty(t) = \frac{k^\infty(t + i \cdot T_{batch}) - 1}{k^\infty(t + i \cdot T_{batch})}$$

Avec T_{batch} la durée d'un batch, solution de l'équation $\rho_{coeur}(T_{batch}) = 0$

Implicitement ce raisonnement postule que la puissance est équitablement répartie entre tous les assemblages et ce en dépit de leurs contributions inégales à la réactivité du cœur. Les

contributions en réactivité de chaque batch sont supposées être égales à leurs réactivités en milieu infini ce qui implique une certaine similarité neutronique des assemblages aux différents batches. Si l'évolution de la réactivité est en plus supposée linéaire alors il est possible d'estimer le burnup final après (n) batches comme [17] :

$$BU_{final} = \frac{2 \cdot n}{n + 1} \cdot BU_1$$

Avec :

n , le nombre total de cycle.

BU_1 , le burnup obtenu en milieu infini en single batch.

BU_{final} , le burnup final obtenu après (n) batch.

Cette modélisation simplifiée donne une première estimation de la durée d'un batch (T_{batch}) et permet donc de remonter à la composition du 1^{er} batch à cette date. Cette composition est alors considérée comme une première estimation de la composition initial du 2^{ème} batch. Une série d'évolution est ensuite menée en vue de corriger et de converger la composition initial du 2^{ème} batch. L'algorithme employé est le suivant :

Algorithm 6 Principe de mise à l'équilibre des compositions de chaque cycle

```

while  $\int |\rho_{coeur}^n - \rho_{coeur}^{n-1}| dt > \epsilon$  do
  for all batch  $i$  do
    Composition Initiale $[i + 1] \leftarrow$  Composition Finale $[i]$ 
  end for
  calcul SMURE : refroidissement (évolution à puissance nulle).
  calcul SMURE : évolution du motif jusqu'à  $\rho_{coeur} = \rho_{fuite}$ .
  calcul d'un nouveau vecteur de pas de temps d'évolution
end while

```

Le critère de convergence de la boucle principale n'est ici qu'une première proposition. L'évaluation des différences entre les vecteurs isotopiques de chaque cycle entre chaque itération serait peut-être plus pertinente. En pratique, cette procédure est répétée sur environ une quinzaine d'itérations. L'étape de refroidissement, d'une durée de 22 jours, est nécessaire pour faire décroître les isotopes comme le ^{135}Xe ou le ^{149}Sm qui ont une forte contribution dans le bilan de la réactivité. Enfin, pour faire converger l'algorithme il est nécessaire de recalculer le vecteur des pas de temps d'évolution, en fonction des résultats de l'itération précédente. Cet ajustement va permettre d'affiner les pas de temps aux dates proches de la fin de l'évolution (i.e. $\rho_{coeur} = \rho_{fuite}$). Cela permet d'avoir une composition de fin de cycle la plus exacte possible et évite les oscillations dues à la prise en compte d'un composition un peu avant (e.g. $\rho_{coeur} = 4200$ pcm) ou un peu après (e.g. $\rho_{coeur} = 3800$ pcm) la perte de la criticité.

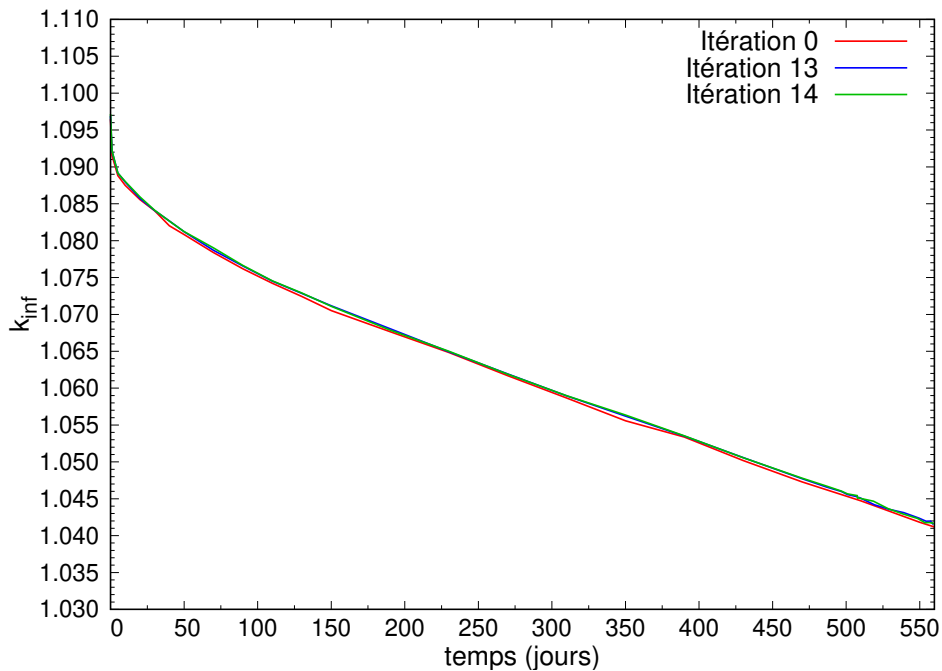


FIGURE 5.18: Évolution de la réactivité pour l'évolution d'un motif 2-batch en assemblage 19x19 enrichi à 11.5 at%. La première et les dernières itérations sont représentées. Le seuil de criticité est fixé à 4000 pcm (soit $k_{inf} = 1.04167$).

La figure 5.18 donne l'évolution de la configuration 19x19 en gestion 2-batches. La composition du second batch fourni par le calcul en assemblage infini se montre très satisfaisante puisque l'évolution de la réactivité qui en découle est très proche de celle issue d'un calcul itéré, avec une différence moyenne d'environ 100 pcm. Cette convergence quasi instantanée sur la composition initiale du second batch s'explique par une répartition de puissance très homogène au sein du motif. Les assemblages du premier batch produisent environ 3% de puissance de plus que les assemblages du second batch, pour une puissance totale imposée en évolution à 4×10.11 MW. Dans le cas d'une évolution 2-batch, le motif en damier se révèle donc très proche de la modélisation à un seul assemblage infini. Il est probable que pour une évolution avec un fractionnement plus important ou que la prise en compte d'un véritable plan de chargement à l'échelle cœur complet rende cette méthodologie plus pertinente.

Le burnup atteint grâce à ce fractionnement 2-batch est de 31400 MW.j/ton , ce qui représente une augmentation de 25% par rapport au cas single batch. Le modèle de réactivité linéaire laisse supposer une augmentation plus importante de l'ordre de 33%. La longueur du cycle est réduite à 560 jours⁵, contre 870 jours dans le cas sans fractionnement ce qui implique un rechargement 1.5 fois plus fréquent. Seules des considérations économiques peuvent trancher entre une économie de combustible et une économie sur les opérations de renouvellement du cœur.

5.3.2 Application de poisons consommables à une gestion multi-batch

La prise en compte des poisons consommables peut fortement influencer les premières estimations de burnup. En particulier, le soin apporté dans le dimensionnement de la quantité de poisons peut aboutir à une forte dispersion des résultats. L'objectif de cette étude est donc

5. L'estimation assemblage infini donne dans ce cas une longueur de cycle de 564 jours et donc un burnup identique

d'adapter la méthodologie de dimensionnement des poisons consommables pour parvenir à une gestion optimale de la réactivité dans un calcul multi-batch.

L'estimation de l'effet en terme de réactivité des poisons consommables et de ses répercussions sur les compositions d'équilibre des poisons consommables n'est pas triviale. En effet, l'introduction ou la modification du vecteur de poisons consommables (\vec{N}_ω) utilisé pour le premier batch va venir perturber l'équilibre des compositions isotopiques C_1 et C_2 . Un ajout de poisons consommables peut, par exemple, entraîner une diminution de la longueur de cycle. La composition C_2 en début d'évolution sera donc différente à la fois de part la présence d'une quantité plus importante de poisons consommables résiduels mais également du fait d'une perte de criticité survenue plus tôt. La prise en compte de cette nouvelle composition C_2 dans une nouvelle itération du calcul d'évolution va à son tour modifier la longueur du cycle, ce qui conduira à ré-évaluer la composition initiale C_2 pour la prochaine itération, ainsi de suite.

L'ajustement des poisons consommables dans un calcul multi-batch est donc par nature un problème complexe, non linéaire et fortement itératif. A priori, il est nécessaire pour chaque vecteur d'empoisonnement \vec{N}_ω envisagé d'itérer les calculs d'évolution afin de trouver l'équilibre des compositions de chaque cycle. Sous réserve de quelques hypothèses fortes mais adaptées au cas envisagé, l'algorithme génétique d'évolution (AGE) peut être modifié pour fournir un vecteur d'empoisonnement pertinent sans un recours massif à des calculs d'évolutions en Monte Carlo.

Adaptation de l'AGE pour un calcul multi-batch

Il a été montré que dans le cas particulier d'un motif 2-batch en milieu infini, la réactivité totale s'approxime bien par la formule :

$$\rho_{tot}(t) = \sum_{\forall cycle i} \theta_i \cdot \rho_i^\infty(BU(t))$$

Avec :

ρ_i^∞ la réactivité en fin du $i^{\text{ème}}$ batch, calculée en assemblage infini.

θ_i la contribution des assemblages au $i^{\text{ème}}$ batch à la réactivité totale.

On suppose alors que les contributions en réactivité peuvent être simplement moyennées pour remonter à la réactivité totale. Il est possible de considérer des poids, ici notés θ_i , qui reflètent l'importance neutronique d'un type d'assemblage. Cette pondération est nécessaire dans le cas où la nappe de flux est fortement déséquilibrée. La réactivité $\rho_i^\infty(BU(t))$ peut se calculer à partir d'une simulation en assemblage infini. Le passage par une tabulation en burnup est pertinent si les assemblages produisent une puissance significativement différente en fonction de leur cycle d'irradiation.

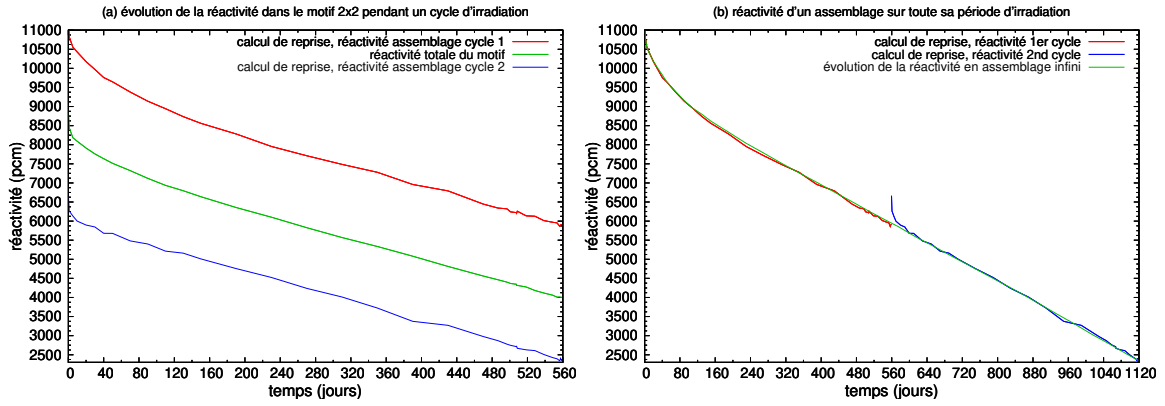


FIGURE 5.19: La figure (a) montre l'évolution la réactivité d'un motif 2-batch composé d'assemblages 19x19. Les contributions en réactivité des assemblages du premier et du second batch sont obtenues par des calculs de reprise en milieu infini. La figure (b) montre la contribution en réactivité sur cycle complet dans le motif. Elle est comparée à un calcul d'évolution d'un seul assemblage en milieu infini et en single batch sur la même période de temps.

La figure 5.19 (a) montre une reconstruction de la réactivité totale selon cette modélisation. Les contributions $\rho_i^\infty(BU(t))$ ont été calculées grâce par un calcul de reprise en milieu infini à partir compositions du motif 2x2 pour chaque pas de temps. La contribution à la réactivité totale est en moyenne équitablement partagée entre les assemblages de premier et de second batch, ce qui est cohérent avec la faible différence de puissance inter-assemblage précédemment relevée. Dans la suite, les θ_i sont donc fixés à 0.5.

En première approximation, on supposera que l'ajout de poisons consommables ne va pas modifier la distribution de puissance (ni d'importance neutronique) et que la réactivité totale peut toujours s'exprimer comme la somme des contributions infinies diminuée du poids des poisons consommables. La réactivité totale s'écrit donc, dans le cas d'un calcul 2-batch, comme :

$$\begin{aligned} \rho_{tot}(t) = & \theta_1 \cdot \left\{ \rho^\infty(BU_1(t)) + \sum_{\forall \omega} N_\omega \cdot \rho_\omega(BU_1(t)) \right\} \\ & + \theta_2 \cdot \left\{ \rho^\infty(BU_{1,f} + BU_2(t)) + \sum_{\forall \omega} N_\omega \cdot \rho_\omega(BU_{1,f} + BU_2(t)) \right\} \end{aligned}$$

Avec :

$BU_1(t)$ le burnup atteint à la date t par l'assemblage dans son premier batch.

$BU_2(t)$ le burnup atteint à la date t par l'assemblage dans son second batch.

$BU_{1,f}$ le burnup final atteint à la fin du premier batch, c'est à dire $BU_1(T_{cycle})$ où T_{batch} est la durée du batch.

$BU_{1,f} + BU_2(t)$ le burnup total d'un assemblage à la fin de son second batch, en comptabilisant également le burnup de son premier batch.

ρ_ω l'antiréactivité apportée par un crayon empoisonné au Gd à la concentration ω , précédemment défini comme le poids.

N_ω le nombre de crayons empoisonné au Gd à la concentration ω .

ρ^∞ la réactivité de l'assemblage considérée sur l'ensemble de ses cycles batch, c'est à dire :

$$\begin{cases} \rho^\infty(t) = \rho_1^\infty(t) \quad \forall t < T_{cycle} \Leftrightarrow \forall t \quad t q \quad BU_1(t) < BU_{1,f} \\ \rho^\infty(t) = \rho_2^\infty(t) \quad \forall t > T_{cycle} \Leftrightarrow \forall t \quad t q \quad BU_2(t) > 0 \end{cases}$$

Une représentation graphique de cette variable est donnée par la figure 5.19 (b).

La notation ici utilisée a pour but d'expliciter la dépendance des variables utilisées à la durée du batch ($\Leftrightarrow BU_{1,f}$).

Cette modélisation pose principalement trois problèmes, elle nécessite de :

- connaître le $BU_{1,final}$, or celui-ci dépend fortement du vecteur poison dont l'impact sur la longueur du cycle n'est a priori pas connu.
- savoir calculer les valeurs ρ_ω et ρ^∞ pour n'importe quel burnup, puisque $BU_{1,final}$ est susceptible de varier en fonction du vecteur d'empoisonnement testé.
- de prendre en compte le refroidissement du combustible entamant son second batch.

Comme expliqué précédemment, l'estimation de $BU_{1,f}$ ne peut être faite que par un calcul itératif. L'algorithme implémenté est le suivant :

Algorithm 7 Algorithme itératif pour le calcul de la durée des batch

```

while  $\frac{|BU_{1,f}^n - BU_{1,f}^{n-1}|}{BU_{1,f}^n} > \epsilon$  do
  for all  $t \in$  pas de temps tabulés do
     $\rho_{tot}(t) = \sum_{\forall cycle\ i} \theta_i \cdot \{\rho^\infty(BU_{i-1,f} + BU_i(t)) - \sum_{\forall \omega} N_\omega \cdot \rho_\omega(BU_{i-1,f} + BU_i(t))\}$ 
  end for
   $BU_{1,f} \leftarrow BU_1(t)$  à  $t$  quand  $\rho_{tot}(t) = \rho_{seuil}$ 
end while
    
```

L'estimation de la réactivité totale nécessite de pouvoir calculer ρ^∞ ainsi que ρ_ω au second batch à tout instant $T_{batch} + t$ ($\Leftrightarrow BU_{1,f} + BU_2(t)$). Bien que les pas de temps soient tabulés et la puissance fixée, la durée du batch est susceptible de varier en fonction du vecteur d'empoisonnement testé. Il n'est donc pas possible de se servir directement d'une tabulation fixe de ρ^∞ en fonction du temps.

C'est pourquoi la réactivité du second batch est calculée par interpolation polynomiale à la quelle vient s'ajouter une contribution tabulée modélisant le refroidissement et le retour en puissance (i.e. ré-apparition du ^{135}Xe).

La composante polynomiale est calculée par interpolation des valeurs ρ^∞ sur une plage de temps où son comportement est approximativement linéaire (i.e $t > 40$ jours après le début du second batch).

La composante rapide, tabulée, est calculée par sous-traction de la courbe ρ^∞ et de la composante linéaire pour des temps courts (inférieurs à 40 jours après le début du second batch) :

$$\rho_{fast}(t) = \rho_2(t) - \rho_{polynomial\ fit}(t)$$

Avec :

ρ_{fast} , la composante rapide de la réactivité (tabulée).

ρ_2 , la réactivité du 2^{nd} cycle, obtenue par un calcul de reprise en milieu infini.

$\rho_{polynomial\ fit}$, une fonction polynomiale ajustée sur ρ_2 pour $t > 40$ jours.

La prise en compte de cette composante rapide est indispensable pour le dimensionnement du vecteur de poisons consommables. Sans cela, pour un ensemble donné de crayons empoisonnés, la réactivité totale sur les premiers instants pourrait être faussement évaluée comme étant en dehors de la bande de manoeuvrabilité.

Cette composante rapide est ensuite considérée comme nulle au delà d'une certaine durée (i.e. 40 jours).

Implicitement, cette méthode fait l'hypothèse que la chute brutale de réactivité, due au refroidissement et au retour en puissance, ne dépend pas de l'inventaire isotopique de l'assemblage.

De plus, cela suppose que le niveau de puissance produit dans un assemblage de second batch ne sera pas impacté par la présence de poisons consommables et la réduction de la durée des batch. Ces hypothèses semblent justifiées si la durée du batch avec poison consommable n'est pas trop différente de celle sans poisons, ce qui est la situation recherchée. Au final, la réactivité de second batch s'estime comme :

$$\forall t > T_{cycle} : \rho^\infty(BU_{1,f} + BU_2(t)) = \rho_{polynomial\ fit}^\infty(BU_{1,f} + BU_2(t)) + \rho_{fast}(BU_2(t)) + \sum_{\forall \omega} N_\omega \cdot \rho_\omega(BU_{1,f} + BU_2(t))$$

La bibliothèque d'antiréactivité apportée par un crayon empoisonné à la teneur ω est interpolée directement « à la volée », au burnup demandé.

Contrôle de la réactivité par empoisonnement au Gadolinium dans un calcul 2-batch

On se propose de valider cette première adaptation de l'AGE au calcul *multi-batch* sur le cas du motif 2-batch.

L'objectif en terme de gestion de la réactivité est de contraindre cette dernière dans une bande de manœuvrabilité étroite de [4000; 5000] pcm. L'AGE est utilisé pour trouver un vecteur d'empoisonnement optimal vis-à-vis de contraintes imposées sur la réactivité et de façon à maximiser le burnup. L'unique différence avec le cas d'application précédent de l'AGE vient de la façon dont la réactivité totale (d'un motif cette fois) est estimée. Le vecteur d'empoisonnement issu de cette optimisation est donné par le tableau 5.4.

% wgt	0.125	0.25	0.375	0.5	0.625	0.75
nombre de barres	184	8	16	20	12	16

Tableau 5.4: Vecteur d'empoisonnement au gadolinium optimisé par l'AGE pour contraindre la réactivité dans une bande de réactivité de [4000; 5000] pcm pour un motif d'assemblage 19x19 enrichi à 11.5 at% en Th/Pu avec une gestion 2-batch.

De nombreux crayons faiblement enrichis sont utilisés pour tempérer l'évolution initialement rapide de la réactivité à la fois dans le premier et le second batch. La composante d'antiréactivité à long terme est complexe à anticiper du fait des rétroactions qu'elle induit sur la longueur du cycle.

La composition initiale du second batch est obtenue suivant la méthode déjà définie : par l'intermédiaire d'une simulation assemblage infini réalisée avec le vecteur d'empoisonnement du tableau 5.4. Cette étape permet une première vérification du vecteur d'empoisonnement dans des conditions où les hypothèses de calculs utilisées par l'AGE sont vérifiées.

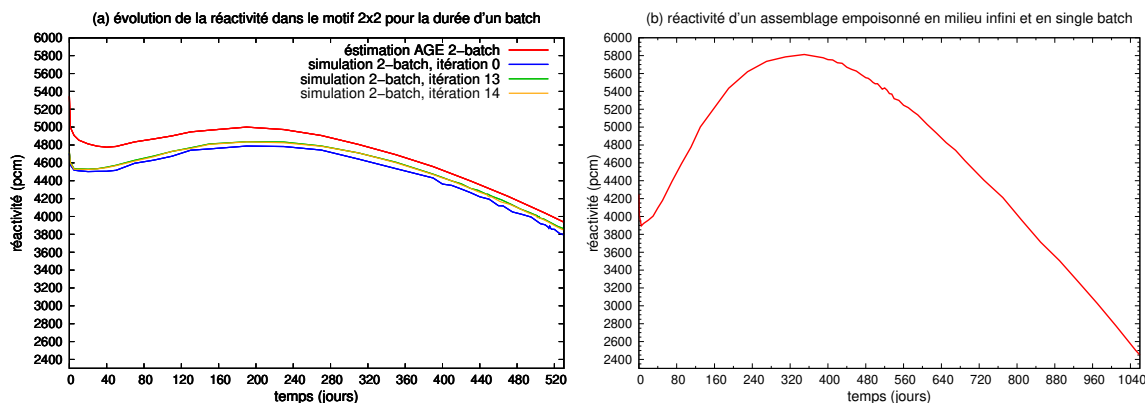


FIGURE 5.20: Évolution de la réactivité d'un motif à l'équilibre des compositions pour une gestion 2-batch (figure (a)). La figure (b) représente l'évolution en milieu infini d'un assemblage du motif, avec le même empoisonnement, et sur une durée équivalente à l'ensemble du cycle.

La figure 5.20 (a) présente l'évolution de la réactivité du motif 2x2. La prédiction analytique utilisée par l'AGE surestime la réactivité totale d'environ 300 pcm. Les approximations telles que celle utilisant une tabulation en réactivité de la composante rapide de la réactivité (ρ_{fast}) peuvent expliquer les différences importantes sur les premiers pas de temps du cycle. L'hypothèse d'une contribution égale à la réactivité totale, quels que soient le temps d'irradiation ($\theta = 0.5$), contribue à l'écart de 100 pcm constaté jusqu'à la fin du cycle.

L'algorithme multi-batch appliqué à l'évolution d'un motif par SMURE permet bien de parvenir à l'équilibre des compositions du cycle. Le vecteur d'empoisonnement proposé par l'AGE est validé par la simulation SMURE. Il respecte bien les critères imposés sur l'évolution de la réactivité. Cependant, le résultat n'est probablement pas optimal puisqu'en se rapprochant de la limite supérieure moins de poison consommable aurait été nécessaire et une longueur de cycle plus grande aurait pu être espérée.

Au final, l'ajout d'un continuum de crayons empoisonnés au Gd diminue la longueur du cycle d'environ 50 jours. Le burnup final obtenue, pour une gestion de réactivité avec un faible inventaire en bore, est d'environ 29 $GW.j/ton$, ce qui équivaut à une perte de 9% du burnup par rapport à une configuration sans poisons consommables.

Conclusions sur le multi-batch

Cette première étude sur un cas simplifié démontre la possibilité d'adapter les outils dédiés à l'évolution (méthode FCU) et à la gestion de la réactivité (AGE) aux problématiques du rechargement fractionné. Le gain apporté sur le burnup d'un fonctionnement par batch est estimé à environ 25%, mais au prix d'un rechargement 1.5 plus fréquent.

Bien que nécessitant un dimensionnement plus complexe, les poisons consommables ont permis de faire respecter de fortes contraintes sur l'évolution de la réactivité. Même si le vecteur d'empoisonnement obtenu peut être encore optimisé, on peut d'ores et déjà s'attendre à une perte de l'ordre de 10% sur le burnup. Le bénéfice d'une gestion 2-batch s'en retrouve donc diminué, le gain sur le burnup n'est plus que de 14% pour un rechargement 1.7 fois plus fréquent par rapport à une évolution en single batch. Un fractionnement plus important serait sans doute nécessaire pour obtenir un gain plus significatif sur les performances.

Enfin, il a pu être constaté dans les configurations envisagées que les calculs d'assemblages en milieu infini (et single batch) sont suffisants pour obtenir un ordre de grandeur correct sur le valeur de burnup et les compositions finales en faisant l'approximation d'une évolution linéaire de la réactivité. L'ensemble de ces conclusions restent à vérifier à l'échelle cœur où

les disparités de puissance sont plus importantes. C'est dans ces configurations complexes que les outils développés pour le calcul multi-batch seront susceptibles de se montrer les plus de pertinences.

5.4 Études avancées de cœur

Cette section quantifie l'impact des contraintes de sûreté imposées à l'échelle cœur sur les performances attendues en burnup et en conversion de ^{233}U . Le cœur utilisé a les mêmes caractéristiques géométriques que celui utilisé en Th/U. La suite du dimensionnement ne considère que les assemblages 19x19 initialement enrichis à 11.5 at% en Th/Pu dans un cœur à 89 assemblages fonctionnant en single batch.

L'évolution du cœur est réalisée grâce à la méthode FCU. Pour ce faire, le cœur est discrétisé en 13 groupes d'assemblages, voir figure 4.20, au sein desquels la composition initiale du combustible est identique. Cette composition commune évolue selon le flux moyen calculé sur l'ensemble des positions de chaque groupe.

5.4.1 Aplatissage du profil radial de puissance du cœur

L'aplatissage de la nappe de puissance en cœur est principalement motivé par des contraintes thermohydrauliques. En condition nominale, une nappe de puissance trop déséquilibrée entraîne une ébullition en sortie de cœur pour certains sous-canaux et dans une moindre mesure des températures de gaines trop élevées ce qui provoque une oxydation accélérée. Pour un échauffement moyen du caloporteur de 40 K sur la hauteur active du cœur, le facteur de forme radial doit être inférieur à 1.55 (voir Chapitre 1). Pour rappel, il est possible d'outrepasser ce critère si l'on accepte une diminution du $\Delta T_{cœur}$ par le biais d'une augmentation du flux massique en cœur (débit des pompes). Le rendement énergétique du réacteur en est donc doublement pénalisé. L'aplatissage de la nappe de puissance en cœur est aussi motivée par la volonté d'utiliser le combustible le plus homogènement possible.

La même stratégie que pour les cœurs Th/U est appliquée pour contrôler le facteur de forme radial. Une dépendance de l'enrichissement de chaque univers à sa distance au centre du cœur est introduite.

Pour étoffer l'analyse précédemment conduite en Th/U, deux profils radiaux d'enrichissement ont été testés : le premier profil est linéaire, comme dans le cas du Th/U et le second est polynomial.

La dépendance linéaire est construite de telle sorte que l'enrichissement moyen reste de 11.5 at%. L'enrichissement de la ceinture d'assemblages la plus périphérique est également fixé à 11.5 at% pour éviter d'accroître les fuites. Le respect de ces contraintes conduit à exprimer l'enrichissement d'un univers de la façon suivante :

$$\epsilon(\bar{r}_u) = \alpha \cdot (\langle \bar{r} \rangle - \bar{r}_u) + \bar{\epsilon}$$

Avec :

- \bar{r}_u la distance (radiale) moyenne d'un univers au centre du cœur.
- $\langle \bar{r} \rangle$ la distance moyenne au centre du cœur de tous les assemblages excepté ceux situés à la périphérie (dont l'enrichissement n'est pas modifié).
- $\bar{\epsilon}$ l'enrichissement moyen soit 11.5 at% en plutonium.
- $\epsilon(\bar{r}_u)$ l'enrichissement commun aux assemblages d'un univers (indexé u) dont la distance moyenne au centre du cœur est \bar{r}_u .

Compte tenu des conditions imposées (enrichissement fixé à la périphérie de cœur et enrichissement moyen constant), le polynôme utilisé pour le second profil d'enrichissement est

nécessairement d'ordre 3 :

$$\left\{ \begin{array}{l} \epsilon(\bar{r}) = \alpha \cdot \bar{r}^3 + \beta \cdot \bar{r}^2 + \delta \\ \beta = \alpha \cdot \frac{\sum_{\forall u} \bar{r}_u^3 - N \cdot \langle \bar{r} \rangle^3}{N \cdot \langle \bar{r} \rangle^2 - \sum_{\forall u} \bar{r}_u^2} \\ \delta = \frac{\bar{\epsilon} \cdot (N \cdot \langle \bar{r} \rangle^2 - \sum_{\forall u} \bar{r}_u^2) + \alpha \cdot \langle \bar{r} \rangle^2 \cdot (\langle \bar{r} \rangle \cdot \sum_{\forall u} \bar{r}_u^2 - \sum_{\forall u} \bar{r}_u^3)}{N \cdot \langle \bar{r} \rangle^2 - \sum_{\forall u} \bar{r}_u^2} \end{array} \right.$$

Avec :

- \bar{r}_u la distance moyenne d'un univers (indexé u) au centre du cœur.
- $\langle \bar{r} \rangle$ la distance moyenne au centre du cœur pour tous les assemblages.
- $\bar{\epsilon}$ l'enrichissement moyen, fixé à 11.5 at%.
- $\epsilon(\bar{r})$ l'enrichissement dans chaque univers, fonction de la distance moyenne de l'univers par rapport au centre du cœur
- N le nombre d'assemblages en cœur.

Pour les deux profils d'enrichissement envisagés, il n'y a qu'un seul paramètre libre noté α . Pour la dépendance linéaire, la variation du coefficient est limitée au segment $[-1.09 \times 10^{-4}; 0]$ at%/cm, ce qui restreint les enrichissements des assemblages à l'intervalle $[2; 15.7]$ at%. La borne supérieure de 15 at% a été choisie afin de garder une marge confortable au CTC (≈ -20 pcm/K avec 4000 pcm de bore).

Dans le cas d'un profil cubique, les variations envisagées pour le coefficient α sont comprises dans le segment $[-3.76 \times 10^{-7}; 0]$ at%/cm³, ce qui permet des enrichissements compris dans l'intervalle $[2; 14.26]$ at%. La borne inférieure sur le paramètre α évite l'utilisation d'enrichissement inférieur à 2 at%⁶, limitant ainsi les zones de très faible puissance. La plage d'enrichissement tolérée est quasiment identique à celle utilisée pour le profil linéaire ce qui rend comparable les deux profils.

Des plages d'une largeur totale de $|\alpha_{min}|$ sont explorées sur une centaine de pas. Le performance de ces profils d'enrichissement sont jugés par la valeur du facteur de forme radial (F_R) qu'ils permettent d'obtenir au BOC. L'état initial du cycle étant supposé le plus contraignant du fait de la tendance naturellement du profil de puissance s'aplatir au cours du cycle. Cette hypothèse sera vérifiée dans la suite. Comme pour l'étude des cœur Th/U, le facteur de forme radial est calculé comme le rapport de la puissance d'un assemblage sur la puissance moyenne d'un assemblage en cœur.

6. en milieu infini l'assemblage n'est plus critique à partir de 4 at%

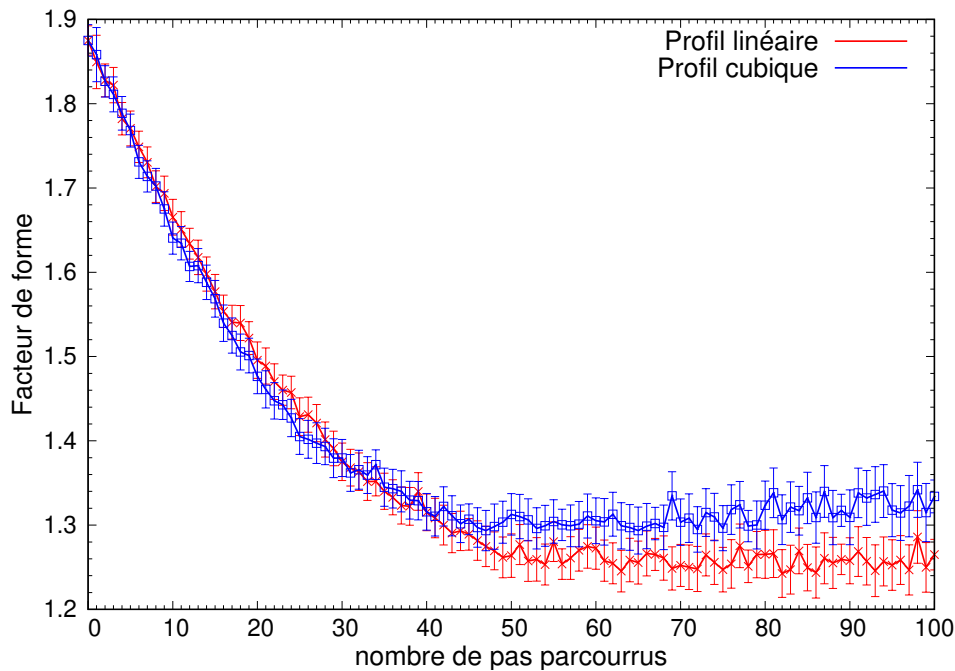


FIGURE 5.21: Facteur de forme radial maximal en cœur au BOC en fonction du paramètre α utilisé dans les profils d'enrichissement. Le paramètre α parcourt une intervalle allant de 0 à α_{min} par pas de $-\frac{|\alpha_{min}|}{100}$. α_{min} correspondant respectivement à -1.09×10^{-4} at%/cm dans le cas du profil linéaire et -3.76×10^{-7} at%/cm³ dans le cas du profil cubique.

Le zonage de l'enrichissement se montre très efficace pour aplanir la nappe de flux comme l'indique la figure 5.21. Il permet de passer d'une configuration où le facteur de forme radial est initialement de 1.86 à des configurations bien en dessous du critère thermohydraulique, avec des facteurs de forme de l'ordre de 1.3. Pour les deux profils considérés, l'évolution du facteur de forme est caractérisée par un plateau (aux incertitudes de calcul près) lorsque α atteint environ $0.5 \times \alpha_{min}$. Aucun avantage réel ne semble se dégager de l'utilisation d'un profil polynomial par rapport à un profil d'enrichissement linéaire.

Sans restriction sur l'enrichissement maximal ou minimal, des pentes plus importantes peuvent être envisagées. Notons que dans le cas du profil linéaire, lever la contrainte d'un enrichissement fixé en périphérie permet d'atteindre des facteurs de formes de l'ordre de 1.20.

Plusieurs profils d'enrichissement (i.e. pour $\alpha \in [\alpha_{min}; 0.5 \times \alpha_{min}]$) montrent donc des performances d'aplatissement de la nappe de flux équivalentes. L'étude de l'évolution du cœur permet de départager ces différentes possibilités. Trois profils linéaires sont envisagés. Ils sont caractérisés par leur valeur de α fixé respectivement à $0 \times \alpha_{min}$, $0.5 \times \alpha_{min}$ et α_{min} . Un dernier profil, polynomial, est également considéré pour s'assurer de l'avantage du profil linéaire sur toute la durée du cycle.

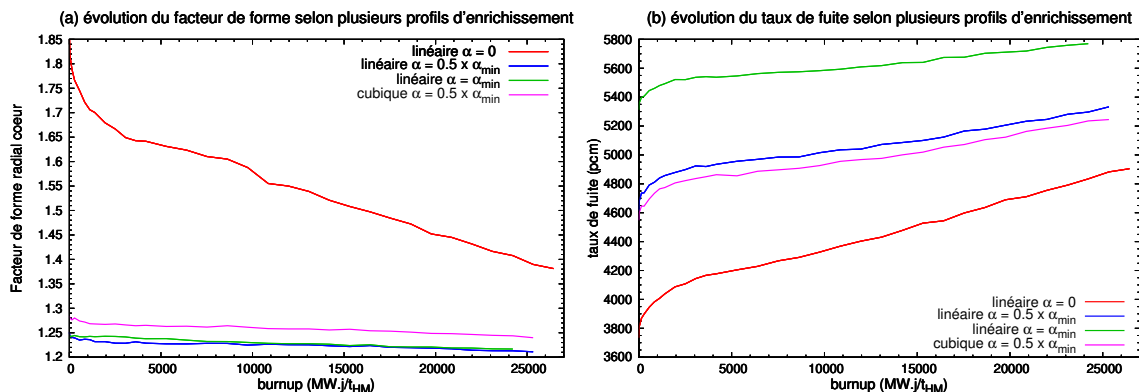


FIGURE 5.22: La figure (a) présente l'évolution du facteur de forme radial au cours du cycle pour différente pente de profil d'enrichissement. La figure (b) correspond au taux de fuite à l'échelle coeur (exprimé en pcm), au cours du cycle pour les différents profils d'enrichissement considérés.

Profil	Linéaire $\alpha = 0$	Linéaire $\alpha = \alpha_{min}$	Linéaire $\alpha = 0.5\alpha_{min}$	Cubique $\alpha = 0.5\alpha_{min}$
Burnup ($MW.j/ton$)	26450	25250	25700	26050

Tableau 5.5: Impact du profil d'enrichissement sur la valeur du burnup final.

Comme le montre la figure 5.22 (a), plus l'enrichissement à la périphérie est important et meilleur est le facteur de forme radial du coeur et ce sur toute la durée de l'évolution. Cependant les fuites sont elles aussi plus importantes (cf. figure 5.22 (b)), ce qui se répercute *in fine* sur le burnup final (cf. tableau 5.5).

La perte de burnup induite par le zonage de l'enrichissement est de l'ordre de 1 GW.j/ton , soit une diminution de 3 % par rapport au cas sans zonage. Cette faible pénalité s'explique par le fait que le processus d'évolution s'achemine naturellement vers un aplanissement de la nappe de flux et ce d'autant plus rapidement que le facteur de forme initial est élevé (voir l'évolution du cas $\alpha = 0$).

La situation $\alpha = 0.5 \times \alpha_{min}$ du profil linéaire semble être une solution optimale du compromis entre le burnup et le facteur de forme radial. En effet, rapprocher le facteur de forme de la limite thermohydraulique serait très pénalisant en situation accidentelle pour un gain en burnup faible. A contrario, accentuer le profil d'enrichissement n'apporte pas de gain significatif sur le facteur de forme radial.

Bien que la masse totale de fissile ait été conservée, le burnup final obtenu à l'échelle coeur s'avère légèrement supérieur à celui obtenu à l'échelle à l'échelle assemblage : $BU_{final,coeur} \approx 26450$ contre $BU_{final,inf} \approx 24200 \text{ MW.j/ton}$. Et ce alors même que le seuil de fuite utilisé en assemblage infini ait été sous-estimé (voir 5.22, (b)). La figure 5.23 permet de comprendre que la présence du réflecteur va accroître la partie thermique du spectre des assemblages périphériques. Cet effet est responsable d'une augmentation d'environ 10% de la section efficace de fission de ^{233}U à l'échelle du coeur et pendant toute la durée du cycle (19 barn en coeur en fin de cycle contre $\approx 17 \text{ barn}$ en milieu infini).

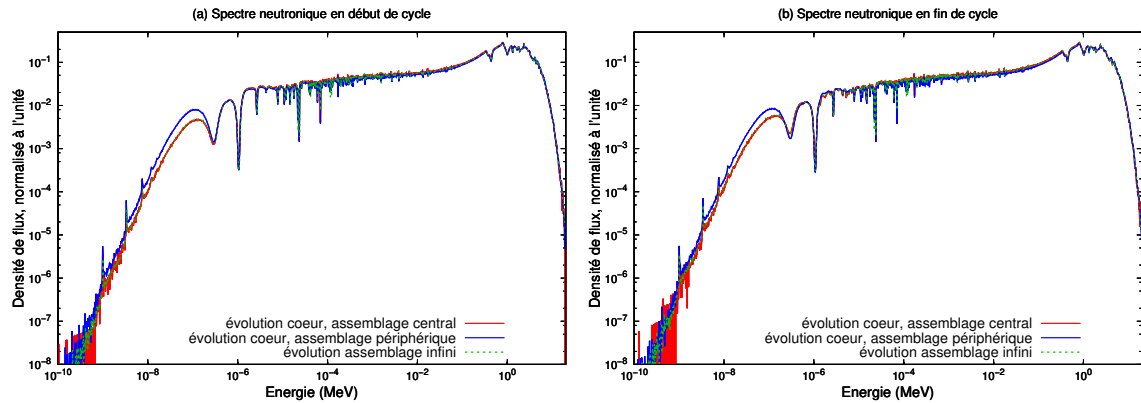


FIGURE 5.23: Comparaison du spectre neutronique entre une évolution cœur et une évolution assemblage infini, en début (a) et en fin (b) de cycle.

En conclusion, l'impact du zonage sur les performances en combustion s'avère plutôt minime. En comparaison, le passage d'une évolution en milieu infini à une évolution en cœur engendre des écarts deux fois plus importants (dans notre cas environ 2 GW.j/ton). Des effets complexes comme une meilleure modération en périphérie du cœur ou l'augmentation du taux de fuites au cours du cycle, rendent la prédiction des différences entre les évolutions de milieux finis ou infinis impossible. L'étape cœur est donc indispensable pour confirmer les ordres de grandeurs fournis par les études précédentes.

5.4.2 Adaptation de l'empoisonnement à chaque univers en évolution

Le profil d'enrichissement linéaire avec $\alpha = 0.5\alpha_{min}$ permet d'obtenir un facteur de forme radial inférieur à 1.25 sur toute la durée de l'évolution. L'objectif de cette section est de conserver cet aplatissement de la nappe en ajoutant la gestion de la réactivité par poison consommable.

Il n'est pas possible de calculer directement un vecteur d'empoisonnement (\vec{N}_ω), sur la base d'un calcul en assemblage infini, et de l'appliquer uniformément à tous les assemblages du cœur. En effet, en raison de la non-uniformité de la nappe de puissance, les cinétiques d'incinération sont différentes d'un assemblage à l'autre (ici regroupés en univers). La faible incinération des zones périphériques laisse présager une consommation réduite du gadolinium qui se traduira à terme par une remontée du facteur de forme au centre du cœur. L'empoisonnement de chaque univers évoluant doit donc être adapté afin de conserver la même répartition de flux pendant toute la durée du cycle.

Pour dimensionner localement des vecteurs d'empoisonnement, la quantité de réactivité à compenser doit être connue dans chaque univers et à chaque instant. Par défaut, seule la réactivité totale du cœur est connue, c'est une variable globale du système étudié. Il est possible de définir une réactivité locale en considérant uniquement les taux de réaction au sein de l'assemblage. Elle s'exprime comme :

$$\frac{\tau_{Fission}}{\tau_{Absorption} + Fuite}$$

Avec :

- $\tau_{Fission}$, le taux de fission dans l'assemblage.
- $\tau_{Absorption}$, le taux d'absorption dans l'assemblage.
- $Fuite$, les fuites neutroniques (algébriques) constatées à la surface de l'assemblage.

Lorsque le réacteur est dans son mode fondamental, la réactivité globale du cœur est égale à la réactivité locale vue par chaque assemblage. Pour s'en convaincre considérons le cas d'un réacteur critique (donc $\rho = 0.0 \text{ pcm}$) dans son mode fondamentale. Si la réactivité locale n'était

pas nulle, comme pour celle du cœur, alors la population neutronique continuerait de croître (respectivement de diminuer) localement ce qui est en contradiction avec une distribution neutronique spatiale à l'équilibre (i.e. le mode fondamental). Cependant, le fait que chaque zone du cœur soit en équilibre neutroniquement ($\Leftrightarrow \rho_{local} = 0$) n'implique pas une uniformité des taux de réactions. Ce sont les courants neutroniques qui vont permettre d'atteindre cet équilibre local en réactivité.

La réactivité est donc commune à tous les assemblages à chaque instant, mais pas pour chaque burnup comme le montre la figure 5.24. Prendre en compte ces différentes cinétiques d'incinération est indispensable pour dimensionner un vecteur d'empoisonnement optimale. Pour ce faire, la réactivité considérée par l'AGE est simplement tabulée en fonction du burnup de l'univers. La bibliothèque des antiréactivités (figure 5.8) apportées par un crayon empoisonné à la teneur ω en gadolinium est interpolée aux mêmes valeurs de burnup.

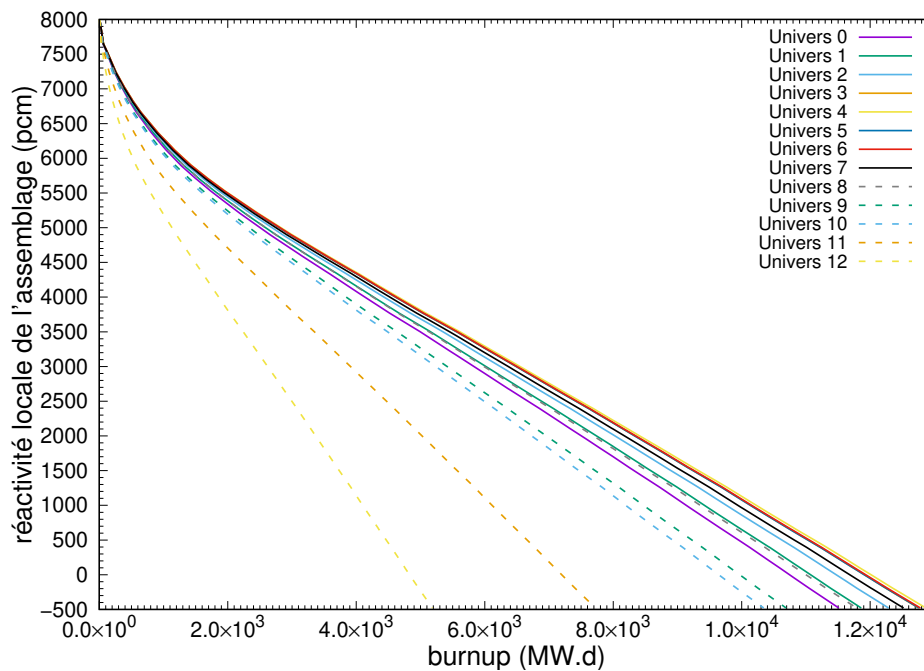


FIGURE 5.24: Évolution de la réactivité au cours du cycle de chaque univers évoluant du cœur.

À chaque instant les vecteurs d'empoisonnement de chaque assemblage doivent apporter une contribution d'antiréactivité similaire. Si ce n'est pas le cas alors on crée une différence de réactivité entre deux assemblages, ce qui va induire une redistribution de puissance et donc une éventuelle dégradation du facteur de forme. Le maintien de la nappe de puissance initiale est également nécessaire pour conserver la pertinence des vecteurs d'empoisonnement dimensionnés par l'AGE.

Les vecteurs d'empoisonnement univers par univers issus de l'optimisation par l'AGE sont donnés par le tableau 5.6. Ils garantissent un apport d'antiréactivité qui contraint la réactivité dans une bande de manœuvrabilité de $[0; 2000]$ pcm, sur toute la longueur du cycle en fonction de la cinétique de combustion de chaque univers.

	% wgt Gd	0.125	0.25	0.375	0.5	0.625	0.75	1.0	1.125	1.25	1.5
nombre de crayons	Univers 0	8	32	8	20	20	16	4	20	8	
	Univers 1	52	8	4	8	8	28	8	28	4	
	Univers 2	68	12	4		4	24	8	24		12
	Univers 3	72				8	20	20	16	4	12
	Univers 4	16	8	20			28	20	20	4	8
	Univers 5	44	12	4		12	16	16	24		12
	Univers 6	28	12	12		16	16	8	24	4	12
	Univers 7	28	24	12		4	12	12	28	16	
	Univers 8	52	24		4	8	24		28	12	
	Univers 9	64	28		16	12	20		28		
	Univers 10	48	4	8	48	16	24		12		
	Univers 11		144		48						
Univers 12	324	12									

Tableau 5.6: Vecteur d’empoisonnement optimisé selon l’historique de puissance des univers évoluant, de façon à contraindre la réactivité globale du cœur dans une bande de manœuvrabilité de $[0; 2000]$ pcm.

Une bande de manœuvrabilité plus étroite aurait l’avantage d’éviter des redistributions de puissance importantes. En contre-partie, elle nécessite l’utilisation d’une plus grande quantité de poisons consommables, ce qui implique des pénalités résiduelles plus importantes sur le burnup.

Il serait envisageable d’utiliser des bandes de manœuvrabilité différentes pour chaque univers. On pourrait imaginer, par exemple, laisser la réactivité libre d’évoluer sur une plage large (e.g. $[0; 4000]$ pcm) en périphérie du cœur. La différence de réactivité induite localement pourrait alors, dans une certaine mesure, contribuer à l’aplatissement de la nappe de puissance.

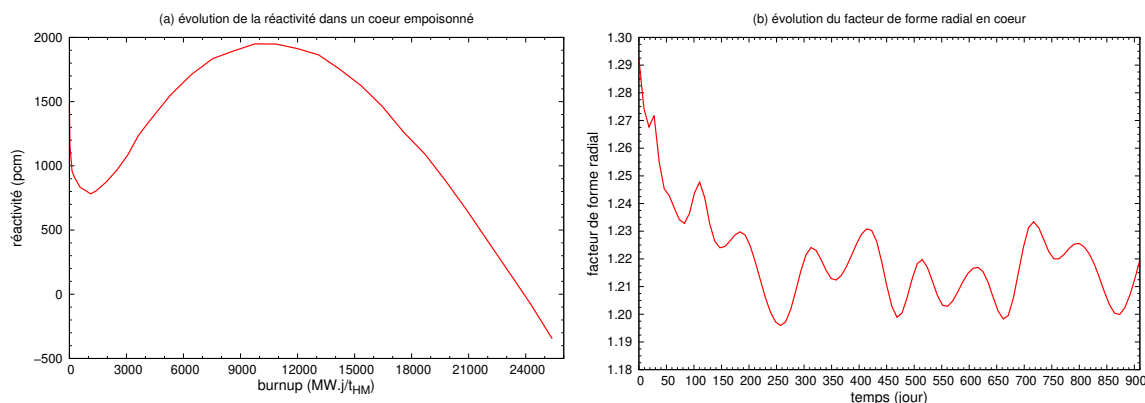


FIGURE 5.25: Évolution de la réactivité (a) et du facteur de forme radial maximal (b) du cœur Th/Pu dont l’enrichissement et les poisons consommables ont préalablement été optimisés.

La figure 5.25 présente l’évolution du cœur Th/Pu où l’enrichissement et l’empoisonnement ont été adapté univers par univers (cf. tableau 5.6). L’objectif de gestion de la réactivité par poison consommable est rempli : la réactivité totale du cœur est parfaitement comprise dans la bande de manœuvrabilité voulue, sur toute la durée du cycle. Malgré des valeurs un peu plus élevée en début de cycle, les résultats concernant le facteur de forme sont également très satisfaisants (voir [103]). Le burnup final obtenu par cette configuration est de 23900 MW.j/ton , soit une réduction d’environ 7% de l’énergie extraite du combustible par rapport à la configuration sans poisons consommables. Cette perte de performances est conforme à l’ordre de grandeur des

pertes déjà constatées ($\lesssim -10\%$ du burnup final).

5.4.3 Évaluation thermohydraulique du cœur

Le flux massique est fixé $2400 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$ de façon à obtenir une élévation de la température moyenne du caloporteur du cœur de 40 K à partir d'une température d'entrée de 560 K , (voir Chapitre 1).

L'objectif de cette étude est l'évaluation du MDNBR du cœur à chaque instant du cycle. Les calculs sont réalisés par BATH en utilisant la corrélation $W3$ sur le crayon le plus chaud en cœur.

La détermination de la puissance du crayon le plus chaud est faite en deux étapes :

- Dans un premier temps le facteur de forme radial à l'échelle des assemblages (i.e facteur de forme *extra-assemblages*) est calculé à chaque instant du cycle. Ce résultat est celui présenté figure 5.25 (b).
- Dans un second temps, suite à l'identification des assemblages les plus chauds, un calcul de reprise (avec la composition de l'assemblage à cette date du cycle) est mené en milieu infini afin de déterminer le facteur de forme radial *intra-assemblage* (i.e crayon le plus chaud).

Le passage par un calcul d'assemblage infini se montre nécessaire car le calcul en Monte Carlo d'une carte de puissance crayon par crayon du cœur requiert des temps de calcul trop importants. Cette simplification fait implicitement l'hypothèse de courants neutroniques identiques sur les faces latérales de l'assemblage, ce qui n'est pas forcément le cas en cœur. Il est donc possible que l'estimation du facteur de forme intra-assemblage soit minorée. De même il est envisageable que le crayon le plus chaud ne se trouve pas dans l'assemblage le plus chaud. Sous réserve de ces hypothèses, la puissance du crayon le plus chaud est calculée à chaque instant comme :

$$\ddot{q}(t) = \langle \ddot{q} \rangle \cdot F_{max \text{ extra-assemblage}}(t) \cdot F_{max \text{ intra-assemblage}}(t)$$

Avec :

$\ddot{q}(t)$ la puissance (estimée) du crayon le plus chaud à l'instant t .

$\langle \ddot{q} \rangle$ la puissance moyenne d'un crayon en cœur.

$F_{max \text{ extra-assemblage}}(t)$ le facteur de forme radial extra-assemblage, permet de cibler l'assemblage le plus chaud à la date t .

$F_{max \text{ intra-assemblage}}(t)$ le facteur de forme radial intra-assemblage, obtenu par un calcul de reprise en milieu infini de l'assemblage le plus chaud à la date t .

Comme montré dans le chapitre 3, obtenir une information sur le profil de puissance axial du cœur s'avère relativement complexe car cela nécessite au minimum de prendre en compte :

- l'évolution du combustible sur plusieurs niveaux, ce qui augmente drastiquement le nombre de compositions évoluant.
- la contre-réaction thermique induite par un écoulement verticale (i.e. le bas du cœur est plus froid que le haut du cœur) [43].
- l'utilisation éventuelle de barres de contrôle pouvant déformer localement la nappe de flux.

Il également nécessaire de s'assurer de la convergence axiale de la source de fission. Dans un souci de simplicité et s'agissant d'un design préliminaire de cœur, le profil de puissance axiale est supposé cosinusoidale. Cette hypothèse est conservative en l'absence d'utilisation de barres de contrôle susceptibles de déformer axialement le profil de flux.

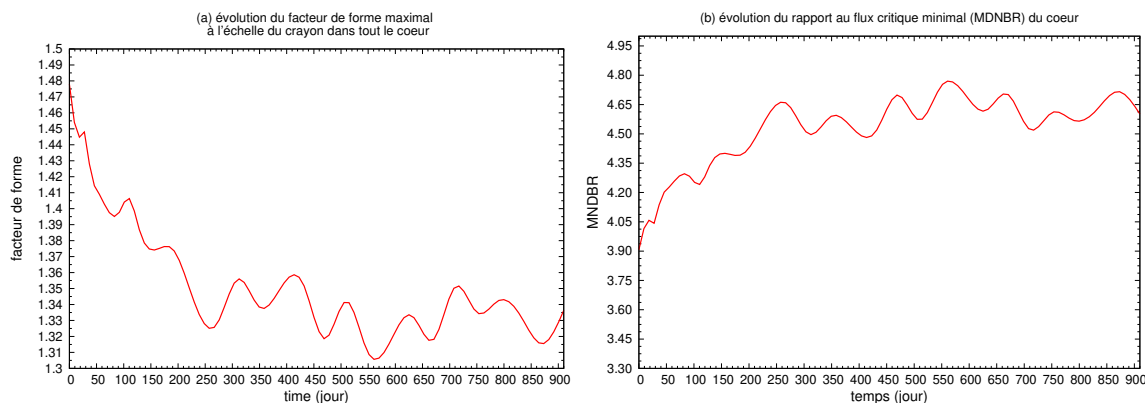


FIGURE 5.26: Évolution du MDNBR minimal du cœur ainsi que du facteur de forme maximal à l'échelle du crayon.

La figure 5.26 indique qu'en début de cycle, la température du caloporteur dans le canal du crayon le plus chaud doit être proche de la température de saturation en sortie de cœur (pour rappel le facteur de forme limite est 1.55). En effet, c'est au BOC que le facteur de forme intra et extra assemblage sont tout deux maximums (respectivement 1.29 et 1.14). La simulation BATH confirme qu'en sortie cœur la marge à la saturation n'est que de 6 K dans ce sous-canal.

Le MDNBR est satisfaisant sur toute la durée du cycle puisqu'il est inférieur à la valeur de design préconisée, à savoir 2.2 [26]. Les valeurs obtenues sont similaires à l'analyse de [104]. Ce résultat positif confirme qu'une hauteur de cœur plus importante n'est pas nécessaire.

5.4.4 Évolution avec bore et contre-réaction thermique moyennée

Un dernier raffinement est apporté à l'évaluation du cœur Th/Pu grâce à une évolution prenant en compte un suivi en bore de la réactivité et une évolution des températures moyennes des assemblages. Le suivi en bore permet le maintien de la réactivité dans une bande de $[0 : 200]$ pcm. Cette réactivité résiduelle pourrait être rendue aussi petite que souhaitée à condition d'avoir la puissance de calcul nécessaire pour y parvenir.

Cette simulation permet de s'assurer que l'évolution des températures et la prise en compte du bore soluble jouent un rôle mineur sur les performances de combustion. Comme dans le cas des cœurs Th/U, l'ajustement de la concentration en bore est faite par une série de calculs Monte-Carlo. Le champ de température, uniforme au sein de chaque assemblage, est grossièrement estimé par BATH à partir des puissances moyennées constatées dans chaque univers.

La figure 5.27 présente une carte de température du cœur au moment où les températures sont le plus élevées, c'est à dire au BOC. Pour chaque instant du cycle, ces températures restent loin des critères de sûreté préconisés. Les températures combustibles sont bien inférieures au seuil de fusion. De même, les températures de la gaine ne sont pas assez élevées pour laisser craindre une oxydation anormalement rapide. Comme dit précédemment, certains assemblages voient leur température caloporteur de sortie cœur relativement proche de la température de saturation (marge $\approx 5\text{ K}$) en début de cycle. La tendance à l'aplanissement de la nappe de flux avec l'évolution du combustible permet une réduction des températures maximales constatées.

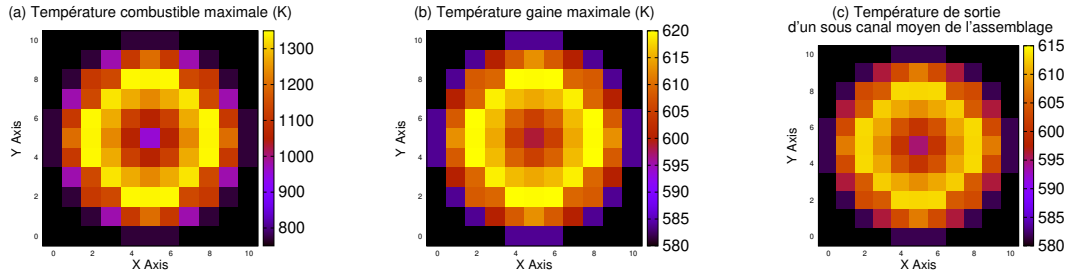


FIGURE 5.27: Températures maximales constatée dans un crayon (et sous-canal) moyen représentatif de l'assemblage au BOC

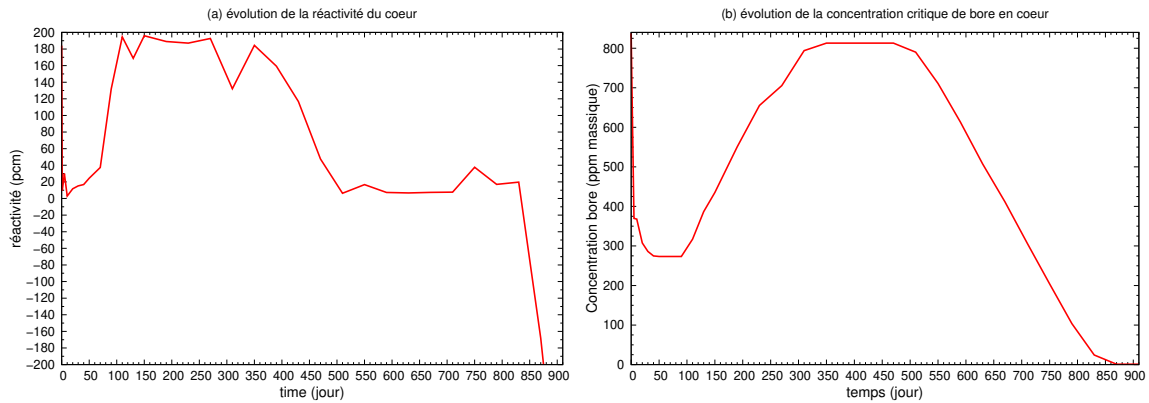


FIGURE 5.28: Évolution de la réactivité et de la quantité de bore critique.

La figure 5.28 montre qu'une quantité maximum de 850 ppm (massique) en bore est nécessaire au cours du cycle. Cette concentration peut paraître élevée au vu de la quantité de poisons consommables déjà utilisée, mais l'efficacité du bore pour ce type de combustible n'est que de $-2.4 \frac{pcm}{ppm}$ soit 2 à 3 fois moindre qu'avec un combustible UOX [103]. Le profil de concentration bore (figure 5.28, b) est similaire au profil de réactivité avec poisons consommables (voir figure 5.25), ce qui laisse présager d'une efficacité du bore relativement constante. Il donc envisageable de prévoir la concentration de bore critique directement à partir des courbes de réactivité sans bore plutôt que recourir à des itérations de calculs Monte Carlo.

Pour la concentration maximale de bore utilisée au BOC, la contre réaction modérateur est vérifiée à l'échelle cœur. Le CTC pour chaque assemblage est calculé comme :

$$\frac{\rho_{T_{coolant}+\Delta T}^{\infty} - \rho_{T_{coolant}}^{\infty}}{\Delta T}$$

Avec ρ^{∞} la réactivité « infini » de l'assemblage définit comme $\frac{\tau_{génération}}{\tau_{absorption}}$ où les taux de réactions sont pris uniquement dans l'assemblage considéré. Cette formulation supprime l'impact des courants neutroniques (i.e taux de fuites) pour donner accès à la contre-réaction individuelle de chaque assemblage. Une augmentation de température est systématiquement associée à modification de la densité prise à la température correspondante pour une pression de 155 bars.

La contre-réaction globale du cœur est négative dans la plage de température envisagée, à savoir [560; 620] K. Elle vaut en moyenne $-34 \frac{pcm}{K}$. L'analyse du CTC local se montre plus contrastée comme l'atteste la figure 5.29. L'assemblage centrale a systématiquement le CTC le plus négatif ($< -30 \frac{pcm}{K}$) tandis que la périphérie est caractérisée par des CTC plus faible

de l'ordre $-4 \frac{pcm}{K}$. Ce coefficient devient même positif sur certains assemblages périphériques dans la gamme de température caloporteur comprise de 580 K à 600 K. Ce changement de comportement est, probablement, en partie imputable à l'utilisation d'une nouvelle tabulation en température des tables de *scattering* de l'hydrogène dans l'eau. Il serait intéressant de vérifier qu'un CTC localement et temporairement positif ne puisse être la cause de dommages importants localisés sur ces assemblages.

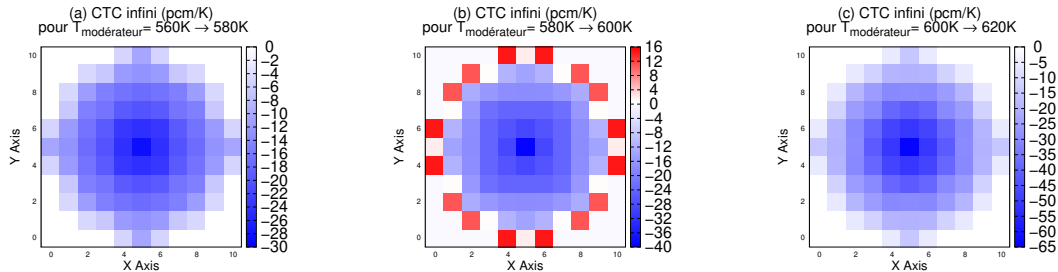


FIGURE 5.29: Évolution du coefficient de température modérateur « infini » au BOC pour différents niveaux de température/densité.

La prise en compte de la nappe de température moyenne et du suivi en bore change légèrement la valeur du burnup final qui est alors de 23200 MW.j/ton . Cette faible diminution, d'environ 500 MW.j/ton , n'est probablement pas significative au vu de la précision de la méthodologie de calcul utilisée (cf. chapitre 2). Quand aux performances en conversion, au final seulement 12% de la masse initial de plutonium fissile est convertie en ^{233}U ce qui est similaire au chiffre avancé dans l'étude préliminaire en assemblage infini. Le vecteur isotopique final est donné dans le tableau 5.7. Comme dans l'évolution en milieu infini, le cœur est surgénérateur pour l'isotope ^{241}Pu . Sans ré-utilisation rapide du combustible, la décroissance du ^{241}Pu va continuer à alimenter le stock d'américium 241 qui a déjà augmenté de plus de 50% lors de l'irradiation.

isotope	^{241}Am	^{242}Pu	^{241}Pu	^{240}Pu	^{239}Pu	^{238}Pu	^{236}U	^{235}U	^{233}U
variation %	52.2	2.2	15.9	-4.0	-35.0	2.14	0.01	0.08	11.8

Tableau 5.7: Vecteur isotopique final des principaux noyaux lourds exprimé comme la variation entre les quantités finales et initiales (e.g. $\frac{n_{\text{final}} - n_{\text{initial}}}{n_{\text{initial}}}$). Pour les isotopes non présents en début d'évolution, à savoir le ^{236}U , le ^{235}U et le ^{233}U , la quantité finale est exprimée comme un pourcentage de la quantité initiale de plutonium fissile (i.e. ^{239}Pu et ^{241}Pu)

Les performances modestes à la fois en burnup et en conversion sont à relativiser. Rappelons qu'il s'agit d'un petit cœur (89 assemblages, deux fois moins hauts, contre 205 pour un REP-1400 MWé) où le taux de fuites est presque deux fois plus important que dans celui d'un REP classique. De plus, ce SMR fonctionne en *single batch*. L'utilisation d'un rechargement fractionné par quart pourrait conduire à doubler ce burnup ([31]). Enfin, tout en conservant ce mode de fonctionnement, il est toujours possible d'augmenter l'enrichissement mais au détriment : d'une diminution de la conversion en ^{233}U , d'une diminution du CTC et d'une complexification accrue de la gestion de la réactivité.

5.5 Apport de la sûreté au design

Le dimensionnement à l'échelle cœur ainsi que les analyses thermohydrauliques ont pour objectif de quantifier les marges de sûreté en fonctionnement normal. Il convient de vérifier si ces marges restent suffisantes en situation accidentelle. Cette section examine ces aspects sur un accident d'éjection de barres de contrôle.

5.5.1 Définition de la situation accidentelle choisie

État d'attente à chaud au BOC

L'état initial est dimensionné de façon à exacerber les conséquences de l'accident. La simulation du pire cas possible ayant pour but de se passer de la simulation de tous les cas possibles.

L'étude des états stationnaires à divers instants du cycle montre que la situation où les marges de sûreté sont les plus réduites se trouvent au BOC à la différence des REP classiques. En effet, c'est à ce moment de l'évolution que le facteur de forme est le plus élevé. Au vu de la faible évolution des quantités d'isotopes ^{242}Pu et ^{240}Pu (voir tableau 5.7), la dégradation du CTC au cours du cycle devrait être relativement limitée. Le BOC est donc aussi l'instant du cycle où le CTC est le plus faible du fait de la quantité de bore requise pour rendre le cœur critique. C'est aussi la configuration où le β_{eff} est la plus faible (cf. figure 5.30), [103].

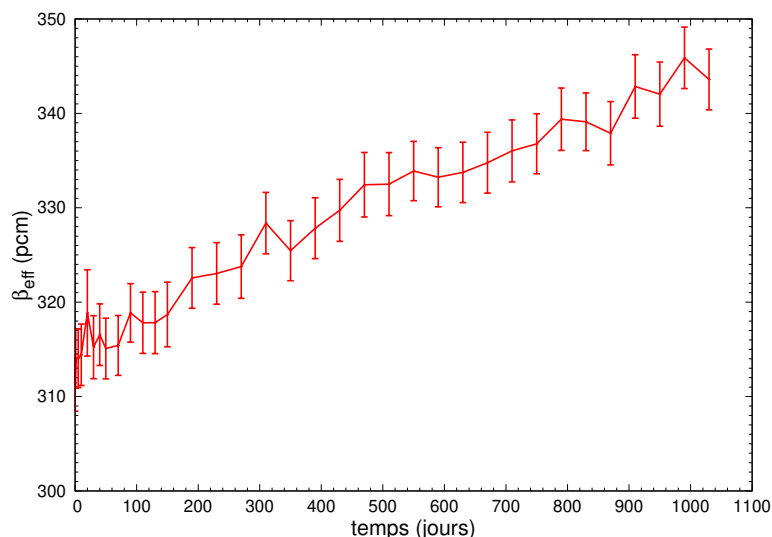


FIGURE 5.30: Évolution du β_{eff} du cœur Th/Pu au cours du cycle. Les évaluations de β_{eff} sont calculées par *Serpent2* au travers de l'estimateur `ADJ_IFP_IMP_BETA_EFF`.

L'éjection de grappe est préférentiellement réalisée à l'état d'attente à chaud [97], aussi appelé *Hot Zero Power* (HZP). Dans cette situation le couplage entre neutronique et thermique est faible. En effet la puissance neutronique, conventionnellement fixée à 10^{-6} de la puissance nominale, est négligeable devant l'inertie thermique du combustible⁷. Le combustible est quasiment à la même température que le caloporteur (560 K). Notons que cette situation isotherme a l'avantage de faciliter la mise à l'équilibre du couplage NDM-BATH.

En cas d'insertion de réactivité, un couplage faible laisse le temps à la population neutronique de passer dans une cinétique sur-critique prompte avant que les contre-réactions thermiques ne

7. Pour augmenter la température du combustible d'1 K il est nécessaire de fournir une puissance d'environ $3 \times 10^6 \text{ W} \cdot \text{m}^{-3}$

se manifestent. Les pics de puissance atteints localement seront alors plus importants que ceux obtenus dans une configuration pleine puissance, ce qui pose des contraintes plus fortes sur la variation d'enthalpie dans les crayons combustible mais aussi sur le rapport de flux critique.

Mise à l'état critique du cœur

Du fait de sa puissance thermique négligeable, le cœur en état d'attente à chaud est plus froid qu'en condition nominale. La réactivité qui reste à compenser pour rendre le cœur critique dans cette configuration est d'environ 3500 pcm.

Pour y parvenir, des grappes de contrôles sont insérées symétriquement en cœur, sur 4 ou 8 assemblages simultanément. Les positions qui vont maximiser les conséquences de l'accident sont celles où les poids neutroniques des grappes seront les plus importants. Le flux adjoint aussi appelé importance est la grandeur qui va permettre d'identifier ces positions. Physiquement, l'importance d'un neutron situé dans un volume donné du cœur correspond au rôle que va jouer sa descendance dans la réaction en chaîne [17].

Calcul du flux adjoint par matrice de fission

Le calcul du flux adjoint peut se faire de façon déterministe (en transport ou en diffusion) par résolution de l'équation adjointe du flux.

L'équation adjointe consiste à prendre les opérateurs adjoints (c'est à dire la transposée des matrices de chaque opérateur) de chaque terme dans l'équation de la diffusion (respectivement du transport).

L'équation de la diffusion, à l'équilibre et à 2 groupes en énergie s'écrit matriciellement :

$$\left(\underbrace{\begin{pmatrix} D_1 \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} & 0 \\ 0 & D_2 \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} \end{pmatrix}}_{\text{Opérateur } \bar{L}} + \underbrace{\begin{pmatrix} \nu_1 \cdot \Sigma_{fiss}^1 & \nu_2 \cdot \Sigma_{fiss}^2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}}_{\text{Opérateur } \bar{F}} - \underbrace{\begin{pmatrix} \Sigma_{abs}^1 & 0 \\ 0 & \Sigma_{abs}^2 \end{pmatrix}}_{\text{Opérateur } \bar{A}} + \underbrace{\begin{pmatrix} -\Sigma_{scatt}^{1 \rightarrow 2} & \Sigma_{scatt}^{2 \rightarrow 1} \\ \Sigma_{scatt}^{1 \rightarrow 2} & -\Sigma_{scatt}^{2 \rightarrow 1} \end{pmatrix}}_{\text{Opérateur } \bar{S}} \right) \cdot \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Avec :

- \bar{L} l'opérateur de diffusion.
- \bar{F} l'opérateur de fission.
- \bar{A} l'opérateur de d'absorption.
- \bar{S} l'opérateur de *scattering*.

Son équation adjointe s'écrit donc comme :

$$(\bar{L}^\dagger + \bar{F}^\dagger - \bar{A}^\dagger + \bar{S}^\dagger) \cdot \vec{\phi}^\dagger = \vec{0}$$

Où \dagger symbolise l'opération de transposition.

Les opérateurs de diffusion et d'absorption sont auto-adjoints puisque leurs matrices sont diagonales à valeur dans \Re . Si on néglige le terme $\nu_1 \cdot \Sigma_{fiss}^1$, ce qui est une approximation valable en REP, alors les neutrons de l'équation adjointe apparaissent dans le groupe 2 et remontent les groupes en énergie. Ce constat est à l'origine de l'interprétation répandue selon laquelle l'équation adjointe consiste à suivre l'histoire des neutrons remontant le temps, [17].

Il apparaît clairement que la NDM pourrait être facilement adaptée pour traiter le calcul de l'équation adjointe. Néanmoins ce n'est pas cette solution qui a été privilégiée car elle nécessite le traitement des sections efficaces à deux groupes pour chaque configuration de cœur envisagée. Pour un calcul rapide d'une carte d'importance, le formalisme des matrices de fission a été préféré [105].

Dans la mesure où les grappes de contrôles sont insérées entièrement, un découpage 2D du cœur⁸, est suffisant. Puisqu'il s'agit ici d'un calcul intermédiaire, il est mené grossièrement avec une résolution à l'échelle de l'assemblage. Le cœur est divisé en volumes N constituant ainsi un vecteur. Chaque élément j de la ligne i de la matrice de fission se calcule comme le taux de fissions détecté dans le volume j du cœur suite à l'évolution sur une génération d'une source de fission placée dans le volume i .

Les matrices de fissions se calculent de façon directe et naturelle en Monte Carlo. *Serpent2* autorise la définition d'une source de neutrons à partir d'un spectre de fission donné (ici celui du ^{239}Pu est utilisé). Cette source de fission est distribuée de façon aléatoire au sein du volume de contrôle défini, ici un assemblage indexé i . La propagation de la source de fission est menée directement en Monte Carlo sans chercher à atteindre le mode fondamental. Le calcul s'arrête une fois que tous les neutrons sources ont disparu, c'est dire après une génération. Au cours de ce calcul toutes les fissions sont répertoriées assemblage par assemblage. Cet unique calcul Monte Carlo permet de remplir une seule ligne de la matrice de fission, il doit être reconduit dans chaque volume fissile du cœur.

Une fois la matrice de fission obtenue elle permet d'accéder au flux fondamental défini comme :

$$\overline{M}_{fis} \cdot \vec{\phi}_0 = k_{eff} \cdot \vec{\phi}_0$$

Avec :

\overline{M}_{fis} , la matrice de fission.

$\vec{\phi}_0$, le flux fondamental où chaque coordonnée du vecteur correspond à au flux dans un volume discrétisé du cœur.

k_{eff} , le coefficient de multiplication effectif qui est également la plus grande des valeurs propres.

Le flux fondamental est le vecteur propre associé à la plus grande des valeurs propres. Cette « première » valeur propre correspond au k_{eff} . Pour obtenir $\vec{\phi}_0$ il serait possible de trouver numériquement les valeurs propres de la matrice puis de résoudre le système pour en déduire le vecteur propre d'intérêt. L'algorithme de la puissance itérée [106], beaucoup plus simple et directe, est ici employé. Son principe est le suivant :

Algorithm 8 Algorithme de la puissance itérée [106]

```

 $\vec{\phi}_0^n = \frac{\vec{1}}{N}$ 
while  $\|\vec{\phi}_0^{n+1} - \vec{\phi}_0^n\| > \epsilon$  do
     $\vec{\phi}_0^n = \vec{\phi}_0^{n+1}$ 
     $\vec{\phi}_0^{n+1} = \overline{M}_{fis} \cdot \vec{\phi}_0^{n+1}$ 
     $\vec{\phi}_0^{n+1} = \frac{\vec{\phi}_0^{n+1}}{\|\vec{\phi}_0^{n+1}\|}$ 
end while

```

L'algorithme de la puissance itérée repose sur le fait qu'après n itérations la plus grande des valeurs propres va « écraser » les composantes des vecteurs propres associées à de plus petites valeurs propres. Cet algorithme est particulièrement efficace dans la recherche du flux fondamental puisque k_{eff} est la seule valeur propre positive, tous les autres modes sont donc censés disparaître d'eux-mêmes lorsque le système est relaxé.

8. Dont la représentation Monte Carlo est dépendant en 3D

Le bon fonctionnement de notre implémentation de la méthode de la matrice de fission est testé pour retrouver la distribution de flux dans le cas du SMR Th/Pu. La solution obtenue pour le flux fondamentale est comparée à celle donnée par un calcul de criticité obtenue avec *Serpent2*. Les résultats de cette comparaison sont représentés par la figure 5.31.

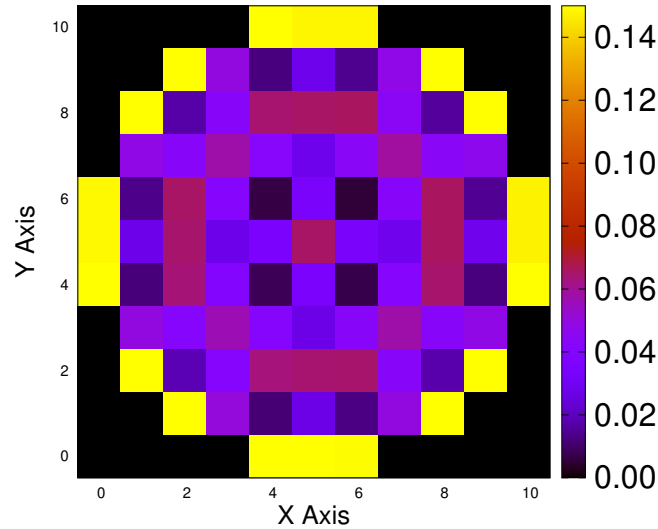


FIGURE 5.31: Différence relative sur la source de fission (taux de fission) entre un calcul *Serpent2* direct et la solution obtenue par matrice de fission.

La comparaison entre une résolution directe de la source de fission et celle obtenue par matrice de fission s'avère aussi satisfaisante, en termes de précision, que l'utilisation de la théorie de la diffusion avec une erreur moyenne de 5%. Les différences sont particulièrement importantes à la périphérie du cœur, là où la variation du flux en amplitude et en énergie sont les plus importantes du fait de la présence du réflecteur. Une meilleure précision pourrait être atteinte en raffinant davantage le découpage du cœur.

Le vecteur adjoint est le vecteur propre associé à la plus grande valeur propre de l'opérateur adjoint. Dans le formalisme des matrices de fission, l'opérateur adjoint est simplement la transposée de la matrice de fission. Le flux adjoint se calcule de façon similaire au flux direct comme :

$$\overline{\overline{M_{fis}}}^\dagger \cdot \vec{\phi}_0^\dagger = k_{eff} \cdot \vec{\phi}_0^\dagger$$

Avec :

$\overline{\overline{M_{fis}}}^\dagger$ la transposée de la matrice de fission.

$\vec{\phi}_0^\dagger$ le flux adjoint où chaque coordonnée correspond à un volume discrétisé du cœur.

L'algorithme de la puissance itérée est également utilisé pour résoudre ce système. La carte d'importance au BOC associée au cœur Th/Pu sans grappe de contrôle ainsi obtenue est donnée figure 5.32. Les positions où l'importance est la plus élevée indiquent les emplacements susceptibles d'impacter le plus négativement la criticité du cœur en cas d'insertion de grappes absorbantes. Réciproquement, ce sont également les positions où le retrait des grappes de contrôle va insérer le plus de réactivité lors de leur éjection.

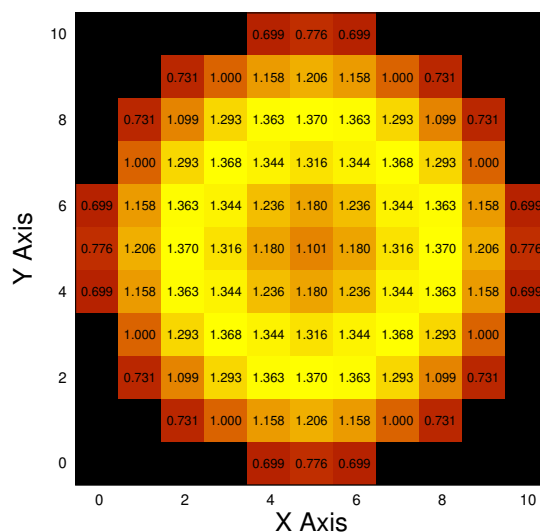


FIGURE 5.32: Carte d'importance du cœur Th/Pu. L'importance totale du cœur est normalisée à l'unité. Sa valeur en % est donnée assemblage par assemblage.

Des grappes de contrôle en B_4C sont insérées sur les quatre positions d'importance maximale. La proportion isotopique naturelle du ^{10}B dans le bore est d'environ 20%. Mis sous forme de crayons absorbants, le bore est enrichi à hauteur de 60 % en REP, voir 90% pour les réacteurs expérimentaux ou fonctionnant en spectre rapide [96]. Toujours dans un soucis de maximiser le poids des barres qui seront ensuite éjectées, une rapide étude de sensibilité à l'enrichissement en ^{10}B est conduite sur les grappes insérées. Les résultats sont présentés dans le tableau 5.8.

enrichissement $\frac{^{10}B}{^{10}B+^{11}B}$	20%	60%	80 %	90%
réactivité (pcm)	2251 ± 30	1919 ± 30	1808 ± 30	1841 ± 30

Tableau 5.8: Sensibilité de la réactivité du cœur à l'enrichissement des barres de contrôle en ^{10}B pour l'insertion de 4 grappes de contrôle.

Au dessus de 80% d'enrichissement en ^{10}B , l'autoprotection empêche toute augmentation significative du poids des grappes de contrôle. La différence entre des grappes enrichies à 60% et à 80% est trop faible pour justifier l'utilisation d'une valeur différente de celle d'un REP conventionnel. Dans le cœur Th/U, les enrichissements utilisés sont plus proches de 40%. Il faut donc s'attendre à une plus forte insertion de réactivité dans le cas présent.

Les 4 premières grappes insérées ont un poids d'environ 400 pcm chacune. Pour achever de rendre le cœur critique, approximativement 2000 pcm doivent encore être compensés. Deux possibilités s'offrent à nous : soit ajouter d'autres barres de contrôle, soit utiliser du bore soluble. Ces deux options sont considérées dans la suite.

Mise à l'état critique uniquement par insertion de grappes de contrôle

Une carte d'importance est recalculée à partir de cette nouvelle configuration cœur, incluant les 4 grappes de contrôle, afin de déterminer les prochains emplacements où seront insérées les grappes suivantes. Cela implique de réitérer le calcul de chaque ligne de la matrice de fission pour chaque volume fissile considéré. Sur la base de la carte d'importance ainsi déterminée, voir figure 5.33 (b), 4 nouvelles grappes de contrôle sont placées sur les positions d'importance maximale. La

configuration de cœur obtenue est alors considérée comme critique avec une réactivité résiduelle de 37 pcm (± 28 pcm).

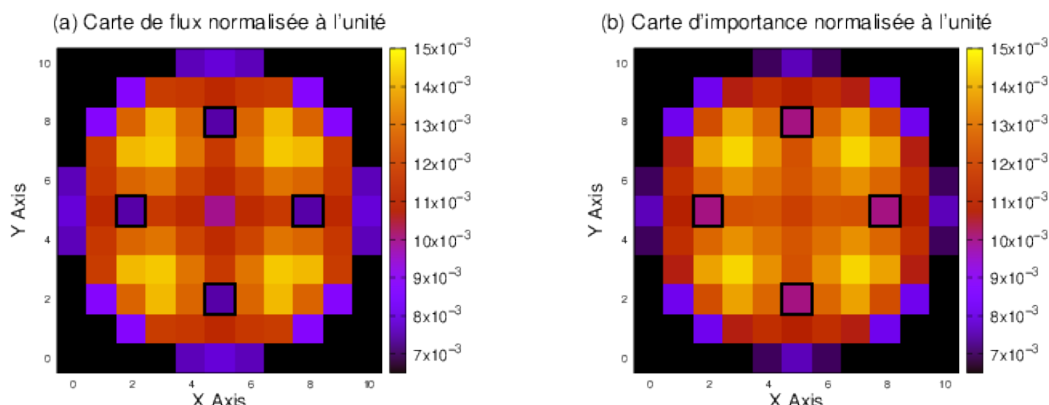


FIGURE 5.33: Carte de flux (a) et d'importance (b) du cœur Th/Pu, normalisée toute deux à l'unité, après insertion de 4 grappes de contrôles. Les emplacements déjà grappés sont encadrés en noir.

La carte d'importance (voir figure 5.33) est moins contrastée que celle du flux ce qui démontre un couplage fort entre les assemblages proches voisins. Notons qu'en première approximation, si les grappes de contrôle avaient été placées sur les assemblages les plus chauds, comme fait pour les cœurs Th/U, les résultats auraient été identiques.

Pour identifier la grappe à éjecter pendant l'accident, il est nécessaire de calculer une dernière carte d'importance à partir de la configuration du cœur où les 8 groupes de barres sont insérées. Le résultat est présenté figure 5.34. Les conséquences de l'accident seront maximisées par l'éjection d'une des 4 premières grappes insérées du fait de leur importance (1.045×10^{-3}), légèrement supérieure, comparée à celle du second groupe de grappes de contrôle (1.041×10^{-3}).

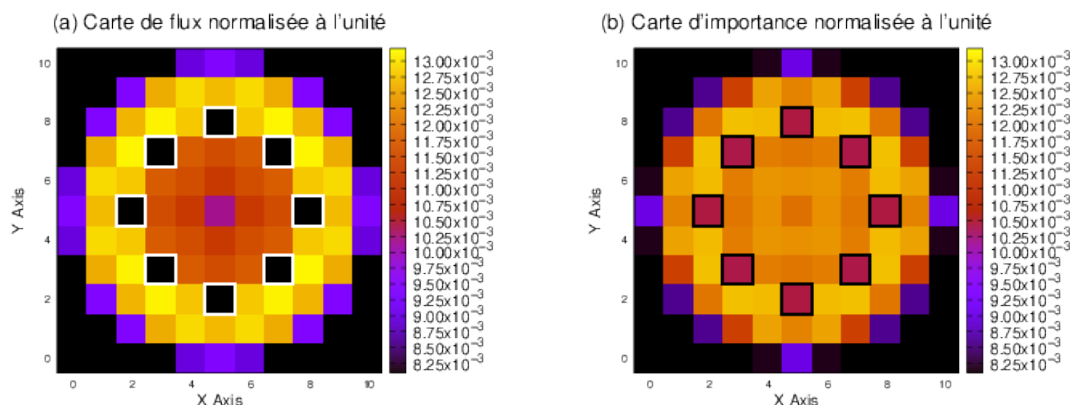


FIGURE 5.34: Carte de flux et d'importance du cœur Th/U après insertion de 8 grappes de contrôle. Les emplacements grappés sont repérés par un encadrement de leur position.

Paradoxalement, l'insertion de grappes de contrôle ne va pas dégrader le facteur de forme radial (c.f. figure 5.33 et 5.34). Cela s'explique par le fait que les assemblages les plus chauds sont systématiquement ceux qui ont été grappés. Ne restent alors que les assemblages dont la contribution à la source de fission est similaire, ce qui se traduit par un aplatissement de la nappe de flux. Ainsi dans la configuration à 8 groupes de barres, le facteur de forme radial du

cœur⁹ n'est plus que de 1.17 contre 1.25 sans grappe de contrôle. Cette constatation donne une piste d'optimisation pour parfaire le zonage de l'enrichissement. Les écarts de puissance entre assemblages proches voisins sont toutefois plus abrupts dans une configuration avec grappes de contrôle.

Mise à l'état critique par utilisation de bore soluble

L'ajout de 1200 ppm de bore soluble suffit, en plus des 4 grappes de contrôle déjà insérées, à rendre le cœur critique avec une réactivité résiduelle calculée par *Serpent2* de -33 pcm (± 29 pcm). Cette concentration est similaire à celle d'un REP en début de cycle en état d'attente à chaud. Du fait de l'insertion d'une quantité non négligeable de bore, cette configuration se prête mieux à l'évaluation des marges de sûreté vis-à-vis des contre-réactions du modérateur. De plus le facteur de forme radial du cœur, d'environ 1.25, est plus élevé dans cette configuration que celle précédemment définie.

5.5.2 Résultats du transitoire d'éjection de grappe

Par la suite, on désignera sous le nom de configuration A, la situation initiale où 8 grappes de B_4C enrichi à 60 at.% en ^{10}B sont utilisées pour rendre le cœur critique. La configuration B correspond à la situation où seul 4 grappes de contrôle sont insérées, la criticité étant atteinte par l'addition de 1200 ppm de bore soluble. La figure 5.35 propose une dénomination pour désigner les assemblages en cœur. La position éjectée est la même dans les deux configurations, il s'agit de l'assemblage 18A.

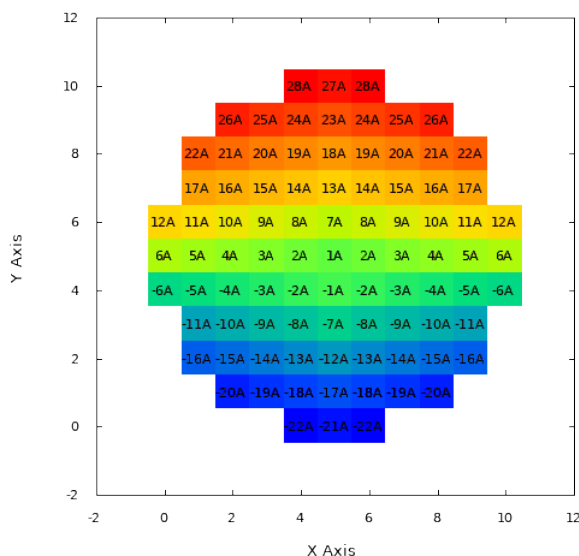


FIGURE 5.35: Indexation des assemblages en cœur pour l'accident d'éjection de grappe.

Les sections efficaces utilisées par la NDM sont calculées par *Serpent2* selon la même méthodologie et sur les mêmes plages de températures que celles employées pour les cœurs Th/U. Le transitoire est calculé par le couplage NDM/BATH sur un maillage où les assemblages sont discrétisés en 4 cellules radialement et en 12 niveaux axialement. À partir de l'équilibre initial, l'éjection se fait en 0.1 s. Le comportement du cœur est simulé sur 0.4 s.

9. évalué à l'échelle des assemblages

Résultats de l'éjection à l'échelle du cœur

Les résultats de l'éjection de grappe à l'échelle du cœur sont présentés figure 5.36. Le cas B s'avère être le moins contraignant, la réactivité insérée y est approximativement deux fois moindre que dans la configuration A. En conséquence le cœur B met environ 0.01 s de plus pour atteindre le seuil Doppler. La puissance maximale atteinte est relativement similaire dans les deux configurations. Elle est de 3.32×10^{11} W dans le cas A contre 2.00×10^{11} dans le cas B.

Comme attendu, la contre-réaction modérateur est beaucoup plus forte dans le cas A du fait de l'absence de bore soluble. Bien que l'éjection ait lieu près de la périphérie du cœur, aucune contre-réaction positive du caloporteur n'a été observée, contrairement à ce qu'avait suggéré l'analyse des contre-réactions à l'état stationnaire (cf. figure 5.29).

Les conséquences en terme de températures dans l'assemblage éjecté sont très différentes entre les deux configurations. Dans le cas A, les températures combustible et modérateur atteintes en fin de transitoire sont légèrement supérieures à celles rencontrées à l'état stationnaire à puissance nominale. A contrario, l'échauffement dans le cas B laisse une marge à l'ébullition encore très importante.

L'examen de ce bilan macroscopique semble indiquer une réponse satisfaisante du cœur dans les deux configurations. Les niveaux de puissance finale, inférieur à 7% de la puissance nominale, suggèrent que les états les plus critiques du point de vue de la sûreté ont été passés. L'observation de critères de sûreté plus locaux va permettre de préciser ces résultats.

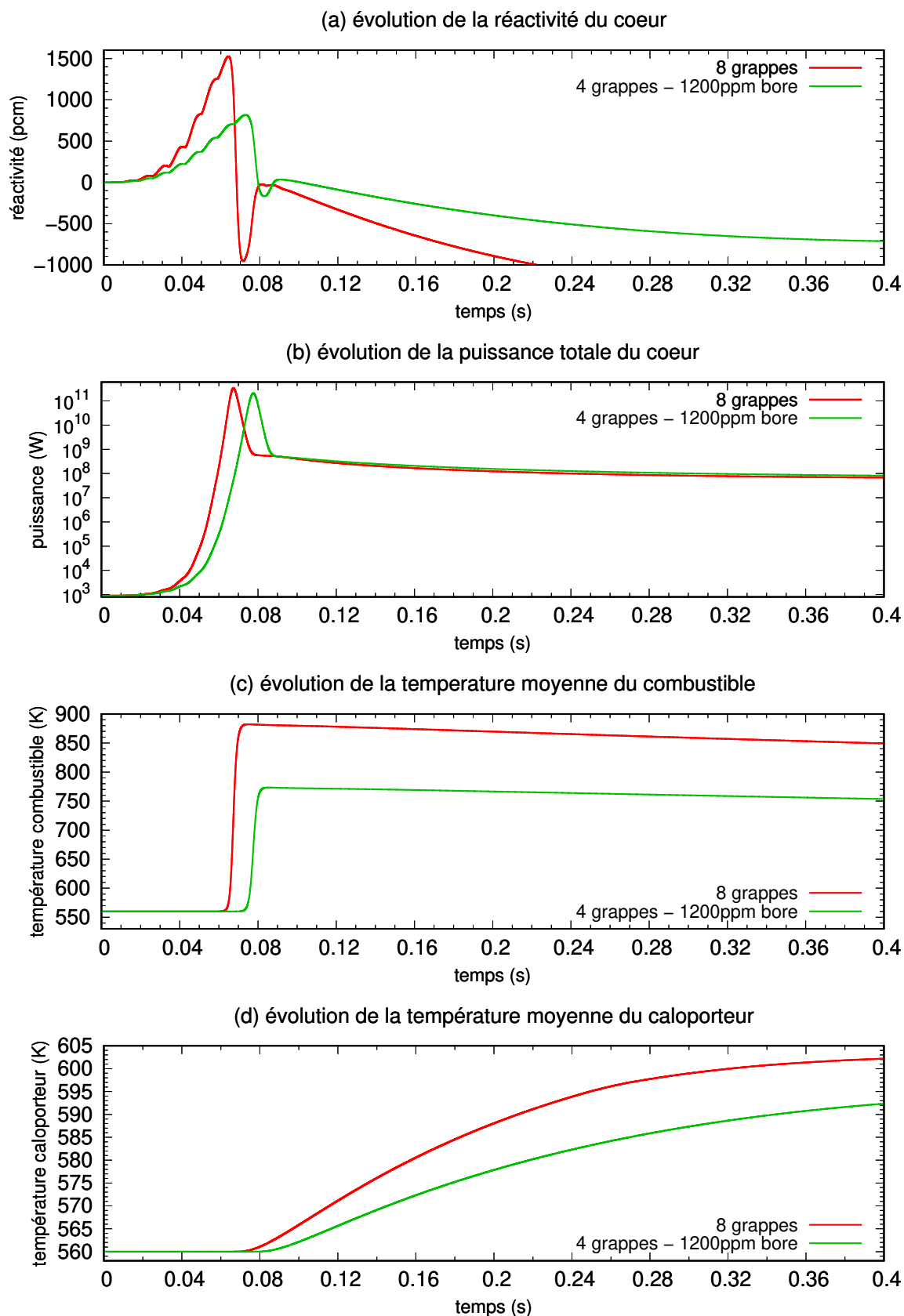


FIGURE 5.36: Principaux paramètres coeur lors de l'éjection de grappe. Les températures combustible et caloporteur sont des valeurs moyennes calculées dans l'assemblage (18A) dont la grappe de contrôle est éjectée.

Examen des critères de sûreté locaux

L'étude de l'évolution du facteur de forme radial au cours du transitoire permet de mieux apprécier les différences de comportement entre les cas A et B. Elles renseignent sur la cinétique de propagation de la perturbation et le nombre d'assemblages impactés. Dans les assemblages ainsi identifiés, il convient d'étudier les principaux paramètres thermohydrauliques pour savoir s'il franchissent les critères de sûreté. De façon plus anecdotique, le facteur de forme total peut s'avérer utile pour simuler avec un modèle plus simple, de type cinétique point, cet accident très local.

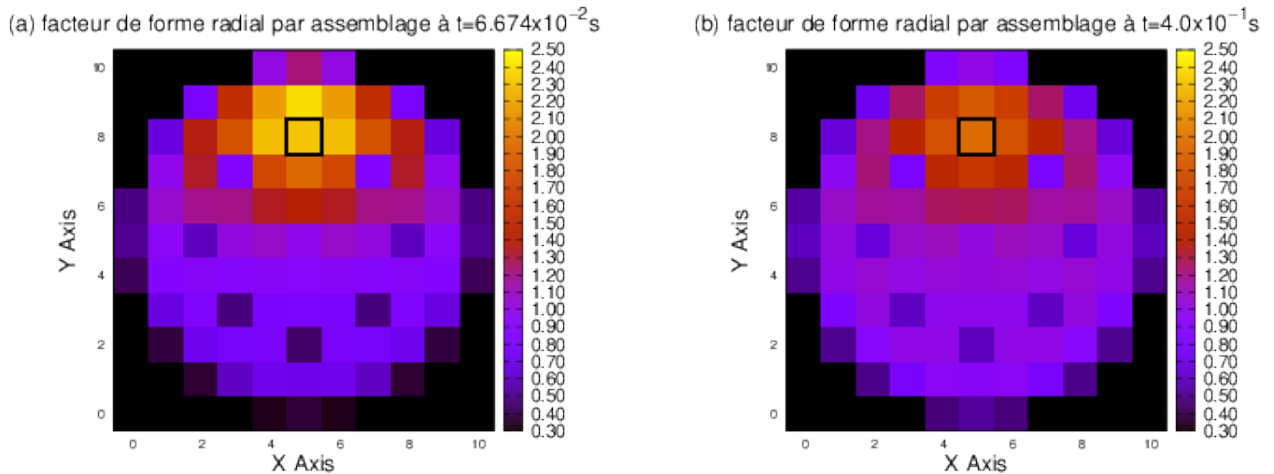


FIGURE 5.37: Facteur de forme à l'instant de puissance maximale (a) et en fin de transitoire (b) pour le cœur subissant une éjection de grappe dans la configuration A. L'assemblage (18A) subissant l'éjection est encadré en noir.

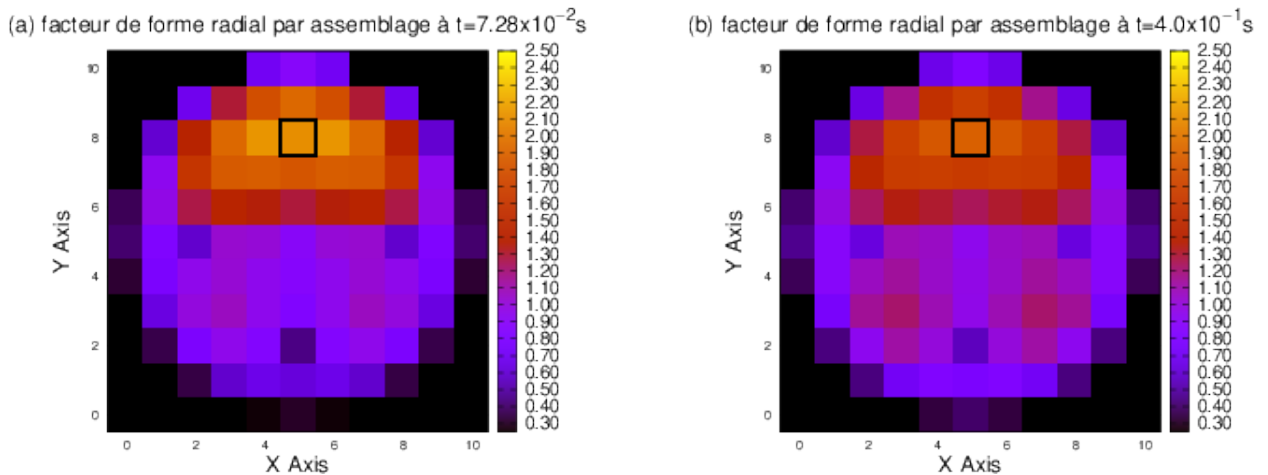


FIGURE 5.38: Facteur de forme radial à l'instant de puissance maximale (a) et en fin de transitoire (b) pour le cœur subissant une éjection de grappe dans la configuration B. L'assemblage (18A) subissant l'éjection est encadré en noir.

Les figures 5.37 et 5.38 présentent un instantané du facteur de forme radial à l'échelle assemblage, au moment où la puissance du cœur est maximale et au temps final du transitoire (i.e $t = 0.4$ s). Le facteur de forme maximal atteint est supérieur à 2.6 dans le cas A contre 2.15 dans le cas B. Ce maximum n'a jamais lieu dans l'assemblage éjecté (18A) mais dans un assemblage

adjacent : 23A dans le cas A et 19A dans le cas B (cf. figure 5.35 pour la dénomination des assemblages). Ce constat souligne l'importance de simuler le cœur en entier pour estimer au mieux les marges à la sûreté [107].

La présence de grappes de contrôle dans les positions 15A de configuration A empêche la propagation de la perturbation du flux neutronique. Dans la configuration B cette perturbation s'étend sur quasiment la moitié du cœur (cf. figure 5.38). La différence dans l'amplitude des facteurs de forme radial maximal explique qu'en dépit de niveaux de puissance cœur comparables (voir figure 5.36), l'accident est plus sévère dans le cas A que dans le cas B.

La figure 5.39 donne l'évolution du facteur dans les assemblages 18A, 19A, 23A et 27A. L'accroissement du facteur de forme se fait selon une pente similaire dans les assemblages adjacents à l'éjection. Le temps de propagation des neutrons est donc plus court que celui de la vitesse d'éjection. La chute du facteur de forme coïncide avec la contre-réaction du combustible, elle permet une relaxation temporaire du flux (diminution du facteur de forme). Notons que cette contre-réaction ne se produit pas au même instant dans tous les assemblages.

Dans la configuration B, aucune ré-augmentation du forme dans l'assemblage 27A n'est constatée suite à l'échauffement du caloporteur en fin de transitoire et ce malgré la présence de 1200 ppm de bore et ce que laissait présumer l'étude du CTC (légèrement positif quand $T_{cool} \approx 600$ K) à l'état stationnaire.

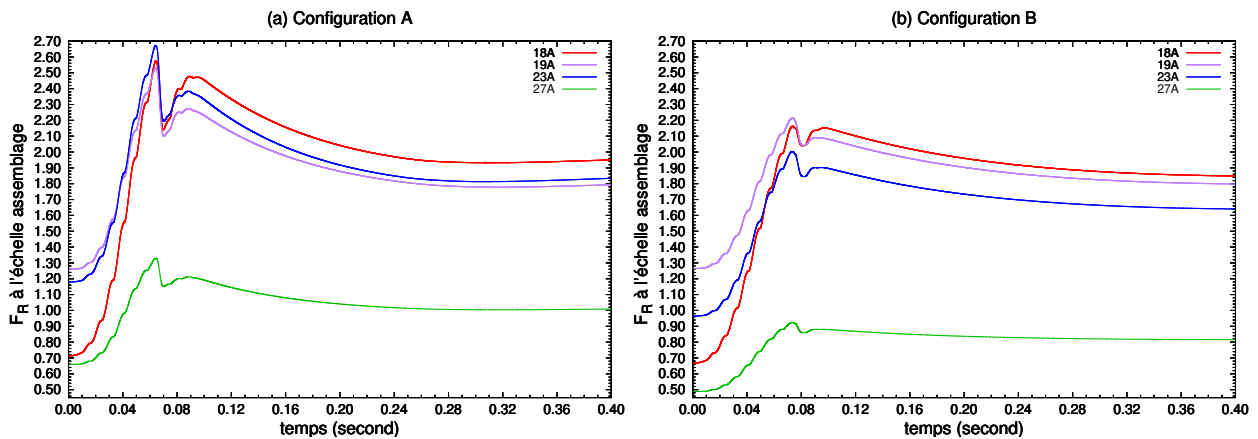


FIGURE 5.39: Évolution du facteur de forme dans les assemblages 19A, 23A, 27A dans le visionnage direct de celui subissant l'éjection de grappe (18A), dans la configuration de cœur A (figure (a)) et la configuration de cœur B (figure (b)).

Cette analyse locale du déroulement de l'accident a permis de mettre en lumière les assemblages les plus sévèrement impactés par l'éjection de grappes. Dans la suite, les principaux critères de sûreté, spécifiques au REA et déjà énoncé dans le chapitre Th/U, sont passés en revue.

Dans le combustible

Les températures de combustible maximales constatées au centre de la pastille sont proches de 1170 K dans le cas A, contre 931 K dans le cas B. Elles sont atteintes en fin de transitoire. Bien que la température moyenne du combustible peuvent être considérée comme stable à partir de $t = 0.08$ s, voire en baisse, le profil de température radial n'est pas encore à l'équilibre et la température au centre de la pastille continue d'augmenter. Ce phénomène avait déjà été constaté dans les cœurs Th/U. Cependant cette augmentation est minime et ne laisse pas présager un dépassement de la température de fusion (≈ 2800 K).

Le second critère concerne l'élévation de l'enthalpie du combustible. Au cours d'un transitoire rapide comme un REA, l'augmentation d'enthalpie doit être inférieure à environ $200 \frac{cal}{g}$ dans de l' UO_2 (soit $\approx 836 J \cdot g^{-1}$) [31] pour un combustible neuf.

Ce critère vise à prévenir la fragmentation des pastilles combustibles sous l'effet d'un dépôt d'énergie trop important. Cette valeur est supposée valable (au moins en ordre de grandeur) dans le cas du combustible Th/Pu. Notons que ce seuil est susceptible de décroître significativement, à environ $100g \cdot cal^{-1}$, pour un combustible irradié [93].

Au *HZP*, le cœur est initialement isotherme. Considérer uniquement les assemblages les plus chauds est suffisant pour vérifier le respect de ce critère. Dans le cas d'un cœur à puissance non nulle, puisque les températures moyennes du combustible sont différentes d'un assemblage à l'autre, le critère doit être vérifié dans chaque assemblage [107]. Dans la configuration A et respectivement la configuration B, l'élévation d'enthalpie correspond à environ 13 % et 8 % du critère de sûreté. Mentionnons cependant que ces grandeurs sont calculées à l'échelle de quart d'assemblages, s'assurer du respect stricte de ce critère de sûreté requiert une évaluation de l'élévation d'enthalpie crayon par crayon.

Gaine

La température d'une gaine en zircaloy est limitée à 1755 K pour un transitoire rapide [27]. Au-delà de cette température, généralement réduite à 1500 K pour conserver une certaine marge de sûreté, le zircaloy subit un emballement de sa réaction d'oxydation (exothermique). Dans le cas A, la température de gaine maximale atteinte dans les assemblages 18A et 23A, est d'environ 760 K, à l'instant $t = 1.19 \times 10^{-2}$ s. Pour la cas B, le maximum de la température de la gaine est d'environ 680 K à l'instant $t = 1.317 \times 10^{-2}$ s dans l'assemblage 19A. Ces températures sont bien en dessous du critère mentionné.

DNBR

La corrélation W^3 est utilisée par BATH pour évaluer le rapport au flux critique. Quel que soit le niveau axial, si le RFTC local est inférieur à 1.3^{10} alors le crayon est susceptible d'entré en crise d'ébullition (voir chapitre 1). Pour rappel, on considère que le cœur satisfait au critère de sûreté si moins de 10% des crayons subissent une crise d'ébullition (i.e $MDNBR < 1.3$) [97].

Dans le cas B, aucun assemblage ne subit de crise d'ébullition. Pour les assemblages les plus chauds, à savoir les 19A et le 18A, la valeur minimale atteinte est respectivement de 2.44 et 2.25, ce qui correspond aux limites des valeurs de conception à puissance nominale.

Dans le cas A, les assemblages suivants entrent en ébullition :

Assemblage	13A	18A	19A	23A	24A
temps (s)	9.19×10^{-2}	8.25×10^{-2}	8.72×10^{-2}	8.23×10^{-2}	8.34×10^{-2}

Tableau 5.9: Assemblages et instants auxquelles le critère de départ d'ébullition nucléée est atteint dans la configuration de cœur A (8 grappes de contrôle insérées)

Notons que dans le cas de l'assemblage 13A, le maillage spatial est suffisamment fin pour conclure que seule la moitié des crayons connaissent une ébullition nucléée. Au total environ 8% des crayons du cœur sont concernées par l'ébullition nucléée, ce qui est en dessous du critère fixé.

10. seuil fonction de la corrélation

Température de saturation

La température de saturation au sein d'un nœud du caloporteur peut être atteinte de deux façons : soit suite à un chauffage continu du caloporteur, soit suite à une crise d'ébullition (DNB). Dans ce dernier cas, la modélisation de BATH est insatisfaisante puisque le passage à un régime d'ébullition nucléée modifie significativement la valeur du coefficient de conducto-convection. Enfin rappelons que quel que soit la température du caloporteur, BATH suppose un écoulement monophasique. Lorsque la température de saturation est atteinte, l'équation de conservation d'énergie cessent d'être résolue en température (ce faisant la valeur du nœud est bloquée à la température de saturation) au profit de la variable enthalpie.

Dans le cas A, aucun assemblage, en totalité ou en partie, n'atteint la température de saturation. Dans le cas B, tous les assemblages qui avaient précédemment atteint le flux critique connaissent, après un délais allant de 1.5×10^{-2} s à 2.25×10^{-2} s, une température de caloporteur supérieure à la température de saturation (i.e 617.74 K à 15.5 MPa) dans au moins un de leur niveau axial. À partir de 2.40×10^{-1} s, les modèles monophasiques utilisés pour calculer l'évolution de la configuration de cœur A ne sont donc plus valides.

Conclusions

Dans le cas B, les conséquences de l'éjection de grappe sont minimales du fait d'une plus faible quantité de réactivité insérée et d'une nappe de puissance globalement plus plate (notamment du fait d'un nombre plus restreint de grappes de contrôle en cœur) à tout instant du transitoire. Les conditions thermohydrauliques rencontrées au cours du transitoire sont du même ordre de grandeur que celles d'un état stationnaire à puissance nominale. La configuration de cœur B passe donc l'ensemble des critères de sûreté.

Dans la situation A, les températures atteintes dans le combustible et dans la gaine sont bien inférieures à celles imposées par les critères de sûreté. En revanche, les contraintes thermohydrauliques se montrent beaucoup plus restrictives. Le cœur remplit le critère imposé sur le nombre de crayons où un départ d'ébullition nucléée est toléré. Un calcul plus poussé est nécessaire en fin de transitoire pour s'assurer que le passage à un écoulement diphasique ne vienne pas dégrader significativement les températures des crayons combustibles.

5.6 Conclusions sur le potentiel des SMR Th/Pu

Ce chapitre a permis de parfaire notre méthodologie de conception en apportant une estimation complète des performances et de la sûreté des SMR fonctionnant en combustible Th/Pu.

Ces SMR sont dimensionnés avec le double objectif de consommer le plutonium issu du retraitement d'UOX et de synthétiser l'isotope fissile ^{233}U pour amorcer l'utilisation du cycle thorium. Des études préliminaires menées en milieu infini ont permis de déterminer des plages d'enrichissement où soit l'utilisation du combustible soit la production de ^{233}U est optimale. Un réseau 19x19 a été choisi pour le compromis offert entre les performances d'utilisation du combustible et les performances attendues en situation accidentelle. Un point de fonctionnement modeste, correspondant à un enrichissement de 11.5 at% , a été sélectionné. Le burnup atteint pour un seuil de fuite estimé à 4000 pcm est de 25000 $\text{MW}\cdot\text{j}/\text{ton}$. Dans cette configuration, la production d' ^{233}U est équivalente à 12% de la quantité initiale de plutonium fissile.

Les coefficients de contre-réaction thermiques trahissent une dégradation des performances de sûreté pour un enrichissement croissant. La préservation d'un CTC négatif ainsi que d'une CVR négative impose une borne supérieure d'environ 18 at% à l'enrichissement. Le bore soluble montre une efficacité réduite (comparativement au cas UOX) d'environ -2 pcm/ppm. Dans une perspective d'une gestion de la réactivité, des quantités importantes de bore sont requises, ce

qui entraîne une forte dégradation du CTC. Le recours aux poisons consommables est donc indispensable. Seul le gadolinium a été considéré dans cette étude.

Une méthodologie innovante (AGE) a été développée pour déterminer un empoisonnement optimal vis à vis de contraintes strictes portant à la fois sur l'amplitude de la réactivité au cours du cycle et la pénalité résiduelle induite par les poisons consommables. Cette méthode est basée sur la modulation des teneurs en poisons consommables ainsi que du nombre de crayons empoisonnés. Après avoir été testée et validée avec SMURE, AGE s'est révélée très satisfaisante offrant ainsi une méthodologie claire et générale pour la résolution des problématiques d'empoisonnement. Le placement des crayons empoisonnés, problème corolaire de l'utilisation de poisons consommables, a également été adressé par le développement de l'AGP¹¹. En *single batch*, l'utilisation optimale de poisons consommables entraîne une perte inférieure à 10% du burnup initial.

Une première approche du rechargement fractionné est réalisée sur un calcul 2-batch. Il s'agit de démontrer à la fois la possibilité d'adapter la méthode AGE à ce type de calcul mais également de quantifier l'apport d'un rechargement fractionné en termes de performances du combustible. Bien que AGE puisse encore être amélioré pour ce cas précis, l'intérêt d'un calcul à seulement deux batches s'est révélé en définitive assez limité, le burnup n'étant augmenté que de 14 % pour un rechargement 1.7 fois plus fréquent. Un plus grand bénéfice est à prévoir pour un fractionnement plus important mais au détriment d'une complexité accrue (plan de chargement, empoisonnement, etc...) qui est en contradiction avec l'impératif des SMR.

Les études préliminaires en milieu infini ont ensuite été transposées à l'échelle d'un cœur complet. Un zonage de l'enrichissement permet d'aplatir la nappe de puissance du cœur pour éviter l'échauffement d'un sous-canal jusqu'à la température de saturation. Un profil d'enrichissement linéaire, tel qu'utilisé dans les cœurs Th/U, s'avère être un compromis optimal à la fois du point de vue de la minimisation du facteur de forme (1.25) mais également des performances du combustible en maintenant un taux de fuites raisonnable.

Pour conserver ce faible facteur de forme tout en résolvant le problème de gestion de la réactivité, l'empoisonnement a dû être dimensionné assemblage par assemblage. La méthode AGE a permis de prévenir toute redistribution de puissance liée à une évolution non homogène ainsi que de maintenir la réactivité du cœur dans une bande de manœuvrabilité réduite de [0;2000] pcm. Grâce à cette optimisation fine, la quantité de bore maximale nécessaire au cours du cycle n'est plus que de 800 ppm, ce qui est comparable au cas REP classique. Une gestion par grappes de contrôle est également envisageable du fait de la quantité réduite de réactivité qu'il reste à compenser au cours du cycle.

L'impact du passage à l'échelle cœur ainsi que de l'empoisonnement s'est révélé minime. Le burnup final obtenu est de 23200 MW.j/ton soit une baisse de l'ordre de 7% par rapport à l'ordre de grandeur donné par les simulation en milieu infini. Le bilan isotopique finale montre une consommation d'environ 35% du ²³⁹Pu mais également une augmentation d'environ 16 % de la quantité de ²⁴¹Pu, ainsi qu'une production d'²³³U équivalente à 12% de la masse fissile initiale. Le concept de SMR fonctionnant au Th/Pu présente donc en définitive des performances d'incinération du plutonium assez standard [108], qui reste bien en deçà de celles obtenues pour des cœurs plus importants [109], [103]. Une forte dégradation du vecteur plutonium est à prévoir en cas de stockage. De plus la production d'²³³U reste modeste, il faudrait respectivement 3.4 et 4.2 SMR fonctionnant en Th/Pu pour alimenter un seul SMR fonctionnant en Th/U avec respectivement un réseau 17x17 ou un réseau 19x19.

Une première analyse des critères de sûreté du réacteur est menée sur l'état stationnaire pour chaque instant du cycle. Elle a permis de constater que le MDNBR du cœur varie au cours du cycle à entre 3 et 4 ce qui est bien au dessus des critères de conception.

11. Algorithme Génétique de Positionnement

Enfin, le comportement en situation accidentelle a été évalué dans le cas d'une éjection de grappe. Afin de rendre cet accident le plus pénalisant possible, le placement des grappes de contrôle est optimisé selon leur importance neutronique. Cette grandeur est calculée par la méthode des matrices de fissions itérées. Deux situations ont été envisagées, l'une où l'état critique HZP est atteint uniquement grâce à 8 grappes de contrôle (cas A) et l'autre via le recours à 4 grappes de contrôle et à du bore soluble (cas B). Ces deux situations mènent à des comportements en transitoire très différents. L'utilisation uniquement de barres de contrôle va permettre de circonscrire la perturbation en cœur mais conduit également à des facteurs de forme beaucoup plus élevés et donc des marges thermohydrauliques moins importantes. Le fonctionnement avec un faible inventaire en bore (rendant l'utilisation de nombreuses grappes de contrôle indispensable) n'est donc pas sans conséquence sur la sûreté du réacteur. Bien que l'accident A soit le plus pénalisant, les deux configurations satisfont les critères de sûreté attendus pour les REP en REA.

Ce chapitre aura permis de démontrer la capacité de nos outils à concevoir un design de réacteur réaliste, satisfaisant les principaux critères de sûreté valables en REP. De meilleures performances en conversion ou burnup peuvent être espérées en augmentant l'enrichissement du combustible à environ 15 at%. Ce nouveau point de fonctionnement implique l'utilisation de poisons consommables à plus forte teneur et donc une anti-réactivité résiduelle et une pénalité sur le burnup plus importantes. Cela nécessite également un gradient d'enrichissement plus important pour le zonage en cœur ainsi que des performances en transitoires moindres du fait de la dégradation des coefficients de température. L'ensemble des rétro-actions de ces différentes étapes de conception illustre l'intérêt d'une méthode de conception la plus exhaustive possible.

Conclusions et perspectives

L'objectif de cette thèse était dans un premier temps la mise en place d'outils de simulation dédiés à la conception de réacteurs innovants.

A cette fin, la méthode FCU, basée sur l'utilisation de la plateforme C++ SMURE, a été proposée pour permettre le calcul d'évolution d'un cœur complet sous réserve de quelques hypothèses simplificatrices. Des vérifications préliminaires ont été menées, en comparaison avec une approche classique basée sur un code de diffusion, afin de vérifier le bon fonctionnement de cette méthode ainsi que pour évaluer le poids de certaines de ces hypothèses. Au cours de cette comparaison la méthode FCU s'est révélée à la fois plus souple et pratique d'utilisation et probablement plus précise, même si pour s'en assurer une véritable validation par des outils indépendants reste nécessaire. Cette étape indispensable sera également l'occasion de quantifier les biais de cette méthode et ainsi de définir les marges qu'il est nécessaire de prendre pour garantir le respect des critères de conception.

Des outils dédiés à la sûreté ont dû être développés pour calculer le comportement des cœurs en situation accidentelle. L'évaluation de la neutronique est calculée par la NDM sur une représentation 3D du cœur. La NDM repose sur l'approximation robuste de la diffusion neutronique qui est un excellent compromis entre précision et complexité. Elle donne accès à la nappe de puissance du cœur ensuite utilisée par BATH pour en déduire le champ de température au sein de crayon représentatif en chaque nœud du maillage. Le couplage entre les deux disciplines est indispensable pour rendre compte de la véritable cinétique du cœur mais également pour l'évaluation des critères de sûreté qui sont essentiellement de nature thermique. Ces outils couplés ont été vérifiés et validés sur le benchmark d'éjection de grappe du *minicore*. La comparaison à des méthodes de calcul bien plus sophistiquées s'est révélée pleinement satisfaisante, en particulier du point de vue de la thermique où les écarts restent très réduits (au maximum 100 K dans le combustible et 10 K dans le caloporteur) au vu de la violence du transitoire.

Après la mise en place de ces outils et leur vérification, ils ont pu être intégrés au sein d'une méthodologie de conception des cœurs principalement axée sur la neutronique. Cette méthodologie a été appliquée à la question très actuelle du dimensionnement des SMR. Pour enrichir les analyses déjà nombreuses sur le sujet, des combustibles plus exotiques ont été envisagés à savoir le Th/U et le Th/Pu.

Lors de la conception du SMR Th/U, l'utilisation de plusieurs niveaux de modération ont été considérés, ce qui a permis une amélioration significative du niveau de conversion dans le cas des réseaux sous-modérés. Cependant nous avons montré, conformément aux résultats de la littérature, que la recherche de la haute conversion exclut les hauts burnups du fait de l'empoisonnement important par les produits de fissions en spectre thermique.

Un burnup ambitieux (car similaire à ceux des cœurs de REP) a été choisi à la conception,

ce qui a mis en lumière les difficultés associées à la gestion de la réactivité pour les concepts fonctionnant en *single batch*.

Le faible CTC des configurations envisagées pose une limite plus stricte qu'un combustible UOX sur la concentration maximale de bore. En conséquence l'utilisation simultanée de plusieurs types de poisons consommables s'est révélée indispensable pour s'accommoder de la longueur du cycle. À cette occasion le dimensionnement des poisons consommables dans les réseaux sous-modérés s'est révélé beaucoup plus aisé en raison de la moindre réserve de réactivité nécessaire pour l'obtention d'un burnup donné.

La contrainte sur le facteur de forme radial a été respectée à l'échelle cœur grâce à l'utilisation d'un zonage radial de l'enrichissement. L'application directe de l'empoisonnement par poisons consommables élaboré à l'échelle assemblage est à l'origine d'une remontée de facteur de point chaud à l'échelle cœur. En conséquence la proportion de poisons consommables a elle aussi dû être zonée pour tenir compte des hétérogénéités de la nappe de puissance. Ces difficultés ont permis d'illustrer les connexions profondes qui existent entre les étapes de gestion de la réactivité et d'aplanissement de la nappe de flux.

L'évaluation de la sûreté du cœur a été réalisée sur un transitoire d'éjection de grappe. Ce dernier a permis de constater que l'avantage des réseaux sous-modérés en conversion est contrebalancé par leur plus faible temps de génération (i.e. Λ_{eff} , et anecdotiquement β_{eff}) et surtout par leur difficulté à évacuer l'excédent de chaleur accumulé pendant le transitoire et ce malgré les concessions thermohydrauliques qui ont pu être envisagées. Cette phase de la conception a donc mis en évidence la nécessité de limiter le poids en réactivité des grappes de contrôle, en particulier pour les réseaux sous-modérés. Ce constat implique de finaliser l'étape de la gestion de réactivité par le dimensionnement des grappes de contrôles (i.e. marge d'antiréactivité), éventuellement assorti de leurs programmes d'insertion (i.e. pilotage), de façon à pouvoir proposer des configurations accidentelles plus réalistes.

Le dimensionnement du SMR Th/Pu a été réalisé avec par un objectif double : la maximisation de la consommation du plutonium et la production de la plus grande quantité possible d' ^{233}U . Toutefois, malgré l'absence d' ^{238}U , la consommation de la partie périssable du plutonium, à savoir le ^{241}Pu , s'est révélée faible voire impossible (i.e. accroissement du stock).

En réponse aux difficultés rencontrées sur les précédents designs, une méthodologie innovante, l'AGE, dédiée au dimensionnement des poisons consommables a été développée. Cette dernière se base sur l'utilisation d'un algorithme génétique qui optimise le nombre de crayons à insérer dans l'assemblage pour un ensemble de teneurs d'empoisonnement préalablement fixé. Les résultats à l'échelle d'un assemblage en milieu infini se sont révélés très satisfaisants puisque le dimensionnement des poisons consommables a permis de contraindre l'évolution de la réactivité dans une bande de seulement 1000 pcm de large.

La possibilité d'adapter à la fois la méthode d'évolution (FCU) et celle d'empoisonnement (AGE) à des calculs à plusieurs batches a été démontrée sur la cas d'une configuration simplifiée en milieu infini. Le gain apporté par un rechargement fractionné à deux batches a ainsi pu être quantifié de façon préliminaire. Celui-ci s'avère trop faible pour justifier de la complexité induite par le rechargement fractionné.

Lors du passage à l'échelle cœur la méthode AGE a su être adaptée de façon à tenir compte des hétérogénéités de puissance entre assemblages. Ce faisant, elle garantit à la fois une bonne compensation de la réserve de réactivité et le maintien du facteur de forme radial bien en dessous des critères de conception à chaque instant du cycle, le tout pour une quantité d'empoisonnement résiduelle minimale. La possibilité d'utiliser les poisons consommables pour appuyer l'aplanissement de la nappe de puissance reste à explorer même si le besoin ne s'en est pas fait sentir dans nos études. En revanche il serait pertinent d'essayer de restreindre le nombre de teneurs utilisées

et d'observer l'impact de ce choix sur la possibilité de contraindre fortement ou non l'évolution de la réactivité.

L'analyse de sûreté de ce concept a également comporté la simulation d'un REA. Le placement des grappes de contrôle a été optimisé, grâce à un calcul d'importance, de sorte à maximiser le poids de la grappe éjecté. Cette méthode s'est avérée assez comparable au placement des grappes de contrôle sur les assemblages les plus chauds. L'utilisation de bore soluble en remplacement des grappes de contrôle permet de diminuer le poids des barres insérées. Cela a pour conséquence une forte mitigation des conséquences de l'accident lors de l'éjection de la grappe.

De nombreuses options innovantes, suggérées dans la littérature, dont certaines sont très prometteuses (e.g. gaine en SiC, crayon annulaire, accroissement du diamètre des crayons, eau lourde, etc...), restent à examiner. Il est clair qu'une évaluation à l'échelle d'un cœur complet aussi bien en dynamique qu'en cinétique revêt un grand intérêt. Signalons cependant qu'elle est ultimement limitée par la connaissance des critères de conception et de sûreté qui sont associés à ces options. Ces critères dépendent eux-mêmes d'autres disciplines (e.g. thermomécanique) non abordées dans ce manuscrit et restent parfois inconnus jusqu'à la mise en place d'expériences.

Insistons également sur le fait que l'utilisation d'outils numériques simplifiés pose des limites sur le type de systèmes (et des phénomènes) qui peuvent être examinés. Ces contraintes sont incluses dans des marges prises par rapport aux critères de sûreté. Ces mêmes marges ne peuvent qu'être estimées au travers de comparaisons avec des codes plus précis ou avec des résultats expérimentaux.

L'application de notre méthodologie de conception a permis d'entrevoir quelques pistes d'amélioration parmi lesquelles le dimensionnement des grappes de contrôle, la nécessité de prendre en compte le détail axial lors des analyses thermohydrauliques, ainsi que la simulation d'autres types d'accident dimensionnant pouvant tester d'autres points du design.

L'ultime étape de conception reste la prévision du coût de l'électricité produite par un type de réacteur innovant permettant ainsi de conclure sur sa viabilité économique. A l'échelle du physicien, cette analyse est conduite en dernier recours au travers d'études de scénarios dont le but est de calculer les inventaires de matières à l'échelle du parc, ce qui renseigne sur la viabilité physique d'un type de gestion et donne des indications sur le coût du combustible.

Enfin, remarquons que la pression économique fait peser des contraintes qui sont de nos jours aussi déterminantes pour la conception du cœur que l'est la sûreté. Le recul apporté par ce travail nous permet de réaliser que ces mêmes contraintes qui poussent à maximiser les rendements des centrales sont celles qui conduisent à rogner les marges de sûreté et en conséquences à complexifier drastiquement le design des cœurs. Il pourrait donc être opportun d'essayer l'approche inverse où les performances sont volontairement réduites (burnup limité, pression du primaire revue à la baisse, absence de pilotage limité), ce qui permettrait le choix de matériaux moins onéreux, de cuves moins épaisses, des systèmes de sûreté plus légers et *in fine* des centrales plus économiques en dépit de leur moins bon rendement thermodynamique. Une telle approche « inversée » suppose d'ajouter à l'étude multi-physique des systèmes un couplage à l'économie, avec une analyse systématique des coûts de chaque option.

Annexe A

Outils dédiés à l'analyse de sûreté

Cette annexe du chapitre « Outils dédiés à l'analyse de sûreté » présente un ensemble d'études permettant de s'assurer de la validité des outils utilisés. Pour la NDM sont proposés :

- une étude de la stabilité des schémas différences finies appliquées à la résolution de l'équation de la diffusion.
- une étude sur la convergence du maillage (2D) de neutronique
- une étude comparative sur différent algorithmes d'intégration temporelle.
- une possibilité d'améliorer le traitement numérique de l'opérateur de diffusion.

Pour le code BATH sont proposés :

- une étude de la stabilité des schémas en différences finies appliquées aux équations thermohydrauliques modélisant le sous-canal d'un assemblage.
- une étude de validation de BATH sur le code COBRA-EN

A.1 Analyse de stabilité de la NDM

A.1.1 Équation de la diffusion et schéma aux différences finies

Pour plus de lisibilité l'équation de la diffusion est considérée à 1-groupe en énergie et sur 1 dimension d'espace. L'écriture de l'équation de la diffusion neutronique est également simplifiée de la façon suivante :

$$\frac{dn}{dt} = F\Delta n + \frac{n}{\tau}$$

Avec :

- n la densité de neutron à la position x et à l'instant t , en ($neutrons \cdot cm^{-3} \cdot s^{-1}$).
- $F = D \cdot v > 0$ la diffusivité des neutrons en ($cm^2 \cdot s$).
- $\tau^{-1} = (\frac{\nu}{k}\Sigma_f - \Sigma_a) > 0$ le taux de création de neutrons en (s^{-1}).

Le flux neutronique est considéré nul à l'extérieur du réacteur en l'absence de toutes sources externes. Les conditions limites sont donc des conditions de Dirichlet. Dans toute la suite du document l'exposant (n) dénombre le numéro du pas de temps, tandis que l'indice (i) est utilisé pour discrétisation spatiale.

A.1.2 Propriétés des schémas numériques

Les différents schémas étudiés sont des schémas aux différences finies. Les opérateurs différentiels sont estimés comme des combinaisons de développements limités, tronqués à partir d'un certain ordre, ce qui détermine leurs degrés de précision. L'erreur de troncature (qui correspond

au reste du développement limité) peut-être majorée par une fonction, directement proportionnelle au pas d'espace (respectivement de temps) élevée à l'ordre du développement limité. Cette erreur est notée $\mathcal{O}(\Delta x^n)$ pour une fonction développée selon la variable x jusqu'à l'ordre n .

Un schéma aux différences finies est dit *consistant* dès lors que l'erreur de troncature tend à s'annuler avec le raffinement du pas d'espace (respectivement de temps). En pratique tout schéma d'ordre 1 ou plus est consistant. Plus un schéma est d'ordre élevé et plus la convergence de son maillage sera rapide lors de la diminution des pas d'espace et respectivement de temps.

Un schéma numérique est dit stable si la solution de l'EDP calculée numériquement reste bornée quelle que soit le nombre de pas d'intégration en temps effectué. La stabilité numérique peut parfois être conditionnée par la valeur des pas de temps (et indirectement d'espace), le schéma est alors dit conditionnellement stable. En pratique, les erreurs d'arrondi dues à la représentation des nombre réels sur ordinateur (dont la précision est limitée) introduisent à chaque pas de calculs des perturbations dans la résolution numérique. Lorsque le schéma est instable, ces erreurs sont amplifiées au fil des itérations ce qui conduit à la divergence de la solution numérique.

L'objectif d'un schéma numérique est de résoudre numériquement une équation différentielle qui modélise le comportement d'une observable physique. Outre la validité de la modélisation physique, il est indispensable de s'assurer que le traitement numérique des équations permet bien d'aboutir à la solution analytique du système. C'est précisément le propos du *théorème de Lax* :

Pour un problème linéaire aux valeurs initiales, la solution numérique d'un schéma itératif en temps exprimé par différences finies converge vers la solution exacte si le schéma est consistant et stable.

Comme mentionné précédemment, tout schéma en différences finies d'ordre 1 ou plus est consistant. Démontrer la stabilité d'un schéma numérique peut parfois s'avérer difficile, en particulier pour les schémas d'ordre élevé ou non linéaire. Le reste de ce chapitre s'attache à démontrer l'instabilité des schémas numériques conventionnels, basés sur les différences finies, lorsqu'ils sont appliqués à la diffusion neutronique. Ces résultats restent confirmés lors de la prise en compte de plusieurs raffinements de l'équation de la diffusion neutronique. La dernière partie de cette section montre que l'intégration des contre-réactions thermiques est indispensable pour assurer la stabilité numérique.

A.1.3 Schéma explicite : Euler explicite d'ordre 1

En première approche l'analyse de stabilité est menée selon la méthode classique proposée par Von Neumann. Cette dernière s'intéresse à l'évolution d'une perturbation à partir de la solution de l'équation discrétisée notée \tilde{n}_i^N . En pratique, des erreurs, notées ϵ_i^n , s'ajoutent en chaque nœud, à chaque itération du fait de l'encodage des nombres réels avec une précision limitée.

La densité de neutron en chaque instant peut donc s'exprimer comme : $n_i^N = \tilde{n}_i^N + \epsilon_i^n$. En injectant cette relation dans l'expression de la dérive on trouve l'équation d'évolution de l'erreur numérique. Pour savoir si les perturbations vont s'amplifier et faire diverger la solution, la méthode de Von Neumann propose de décomposer l'erreur en série de Fourier afin d'exprimer le facteur d'amplification de l'erreur entre deux pas de temps.

Cette méthodologie est appliquée au cas simple de l'intégration par méthode d'Euler explicite, d'ordre 1 ($\mathcal{O}(\Delta t)$). La dérivée temporelle est exprimée grâce à la résolution du pas de temps précédent :

$$\frac{n_i^{N+1} - n_i^N}{\Delta t} = F \cdot \frac{(n_{i+1}^N + n_{i-1}^N - 2 \cdot n_i^N)}{\Delta x^2} + \frac{n_i^N}{\tau} \quad (\text{A.1})$$

Avec :

- Δt le pas en temps, (*s*)
- Δx le pas en espace, (*cm*)

La première étape de la méthode de Von Neumann consiste à exprimer l'équation d'évolution des perturbations :

$$\frac{\tilde{n}_i^{N+1} + \epsilon_i^N - \tilde{n}_i^N - \epsilon_i^N}{\Delta t} = F \cdot \frac{(\tilde{n}_{i+1}^N + \epsilon_{i+1}^N + \tilde{n}_{i-1}^N + \epsilon_{i-1}^N - 2 \cdot \tilde{n}_i^N - 2 \cdot \epsilon_i^N)}{\Delta x^2} + \frac{\tilde{n}_i^N + \epsilon_i^N}{\tau} \quad (\text{A.2})$$

Par construction les vecteurs $\vec{\tilde{n}}^N$ et $\vec{\tilde{n}}^{N+1}$ satisfont le système d'équations algébriques (A.1) ce qui permet d'obtenir une équation d'évolution de l'erreur numérique $\vec{\epsilon}^N$:

$$\frac{\epsilon_i^{N+1} - \epsilon_i^N}{\Delta t} = F \cdot \frac{(\epsilon_{i+1}^N + \epsilon_{i-1}^N - 2 \cdot \epsilon_i^N)}{\Delta x^2} + \frac{\epsilon_i^N}{\tau} \quad (\text{A.3})$$

Notons que si l'équation comptait des termes constants, tel que des sources ou des puits, ceux-ci sont éliminés par les composantes $\vec{\tilde{n}}^N$ et $\vec{\tilde{n}}^{N+1}$ qui satisfont l'équation discrétisée. Ainsi les termes constants ne permettent pas aux erreurs numériques de s'amplifier.

La seconde étape de l'analyse de Von Neumann consiste à décomposer l'erreur en série de Fourier :

$$\epsilon(x, t) = \sum_m \epsilon_m(t) e^{j \cdot k_m \cdot \Delta x}$$

Avec :

- m , l'indice des modes, il est compris dans l'intervalle $[1; \frac{L}{\Delta x}]$, où L est la longueur du réacteur 1D.
- k_m le nombre d'onde dont les valeurs vont de $[\frac{\pi}{L}; \frac{\pi}{\Delta x}]$
- $\epsilon_m(t)$ l'amplitude du mode m dépendant du temps.

Comme montré plus loin, l'évolution de ϵ_i^N correspond en générale à une suite géométrique c'est pourquoi l'évolution de l'amplitude d'un mode est souvent supposer de la forme :

$$\epsilon_m(t) = \epsilon_m e^{a \cdot t}$$

où a est un nombre réel. Notons que l'utilisation de la méthode de Von Neumann ne permet pas de prendre en compte les conditions de bords.

Un schéma est dit stable si l'équation algébrique de l'erreur numérique n'autorise pas le développement d'une suite géométrique croissante. En conséquence, s'il existe au moins un mode pouvant croître, alors le schéma est instable. L'évolution du mode m de la perturbation s'écrit comme :

$$\frac{\epsilon_i^{N+1} - \epsilon_i^N}{\Delta t} = F \cdot \frac{(e^{j \cdot k_m \cdot \Delta x} \epsilon_i^N + e^{-j \cdot k_m \cdot \Delta x} \epsilon_i^N - 2 \epsilon_i^N)}{\Delta x^2} + \frac{\epsilon_i^N}{\tau}$$

d'où :

$$\frac{\epsilon_i^{N+1}}{\epsilon_i^N} = G(k_m \Delta x) = 1 + \frac{\Delta t}{\tau} - \frac{4F \Delta t}{\Delta x^2} \cdot \sin^2\left(\frac{k_m \Delta x}{2}\right)$$

On définit $|G(k_m \Delta x)|$ comme le gain ou le module d'amplification de l'erreur. On pose $\beta = k_m \cdot \Delta x$ avec β variable continue parcourant $[0; \pi]$.

Le maximum du module de G est donné au point où sa dérivée s'annule :

$$\frac{dG}{d\beta} = \frac{-4F \Delta t}{\Delta x^2} \cdot \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) \cdot \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) = 0$$

$$\implies \beta \in \{0, \pi\}$$

La valeur la plus proche de $\beta = 0$ correspond à $k_m \Delta x = \frac{\pi \Delta x}{2L}$, d'où :

$$G_{max} = 1 + \frac{\Delta t}{\tau} - \frac{4F \Delta t}{\Delta x^2} \sin^2\left(\frac{\pi \Delta x}{2L}\right) \quad (\text{A.4})$$

En supposant une discrétisation fine, ce qui sera nécessaire pour obtenir la convergence du schéma numérique vers la solution analytique, on a : $\Delta x \ll L$ d'où :

$$G_{max} = 1 + \frac{\Delta t}{\tau} - \frac{4F \Delta t}{\Delta x^2} \left(\frac{\pi \Delta x}{2L}\right)^2 \quad (\text{A.5})$$

Il est alors possible que le module d'amplification soit strictement inférieur à 1 si :

$$\nu \Sigma_f - \Sigma_{abs} - \frac{Dv}{\pi^2 L^2} \leq 0 \quad (\text{A.6})$$

Cette condition s'apparente à la condition physique de stabilité du réacteur (i.e. la criticité) :

$$k_{eff} = \frac{\nu \Sigma_f}{\Sigma_{abs} + B_{geo}^2 D} = 1$$

avec B_{geo} le laplacien géométrique qui s'exprime dans le cas d'une géométrie 1D cartésienne comme :

$$B_{geo}^2 = \left(\frac{\pi}{L}\right)^2$$

Une condition nécessaire pour que le schéma numérique soit stable est donc qu'il modélise un phénomène qui lui-même est physique stable. En conséquence, l'application du schéma d'Euler explicite à un système sous-critique s'avère stable numériquement (mais plus physiquement puisqu'il n'est pas critique). Au contraire le schéma sera d'autant plus instable lorsqu'il modélise un réacteur sur-critique. Ce constat pose problème pour la simulation de transitoire long (devant le temps caractéristique d'évolution de l'erreur).

Dans la NDM, la criticité est imposée par la correction critique calculée itérativement lors de la mise à la procédure de mise à l'équilibre. Du fait du caractère itératif de la méthode, il subsiste toujours une erreur sur la correction de criticité (en plus de l'erreur dû à l'encodage des nombres). Cette erreur résiduelle, de l'ordre de 10^{-11} pcm, permet le développement d'instabilités numériques sur les temps longs (de l'ordre de quelques secondes). Notons que c'est l'opération de normalisation (effectuée à chaque itération) qui permet à la méthode IRIS de converger malgré le développement des instabilités. Enfin, on remarquera que contrairement au cas classique de la diffusion pure (sans source « auto-dépendante »), aucune condition n'a été placée sur la valeur des pas en temps [38].

Calcul matricielle de stabilité

Une façon plus rigoureuse de démontrer la stabilité d'un schéma numérique consiste à calculer les valeurs propres de la matrice d'évolution de l'erreur. Cette dernière se déduit de la première étape de la méthode de Von Neumann :

$$\vec{\epsilon}^{N+1} = \begin{pmatrix} 0 & \ddots & \ddots & & \ddots & 0 & & & \\ \dots & 0 & \frac{Dv \Delta t}{\Delta x^2} & \left(1 + (\nu \Sigma_f - \Sigma_{abs}) v \Delta t - \frac{2Dv \Delta t}{\Delta x^2}\right) & \frac{Dv \Delta t}{\Delta x^2} & 0 & \dots & & \\ & & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & \end{pmatrix} \vec{\epsilon}^N \quad (\text{A.7})$$

Si la plus grande des valeurs propres, en valeur absolue, de cette matrice est supérieure à l'unité alors il existe un vecteur de l'erreur pouvant se développer au fil des itérations. La plus grande

valeur, que l'on notera dans suite λ_{max} , s'apparente alors au module de l'erreur identifié dans la méthode de Von Neumann. Le calcul des valeurs propres d'une matrice est analytiquement difficile et fastidieux, c'est pourquoi elles sont calculées numériquement grâce au logiciel *sagemath* [?].

Dans la suite du document, les études de stabilisée se limitent au cas d'un réacteur 1D de longueur $L = 300$ (cm). Les données utilisées sont calculés par le code Monte-Carlo *Serpent 2* sur un assemblage standard de REP N4 entièrement réfléchit :

$$\begin{aligned}\nu \cdot \Sigma_f &= 3.06805 \times 10^{-2} \text{ [cm}^{-1}\text{]} \\ \Sigma_a &= 2.23939 \times 10^{-2} \text{ cm}^{-1}\text{]} \\ v &= 2.255808 \times 10^6 \text{ [cm} \cdot \text{s}^{-1}\text{]} \\ D &= 1.31857 \text{ [cm]}\end{aligned}$$

Les valeurs propres sont évaluées pour plusieurs pas de temps et d'espace. La figure A.1 présente l'évolution de l'écart à l'unité de la plus grande valeur propre de la matrice, c'est à dire : $\lambda_{max} - 1$

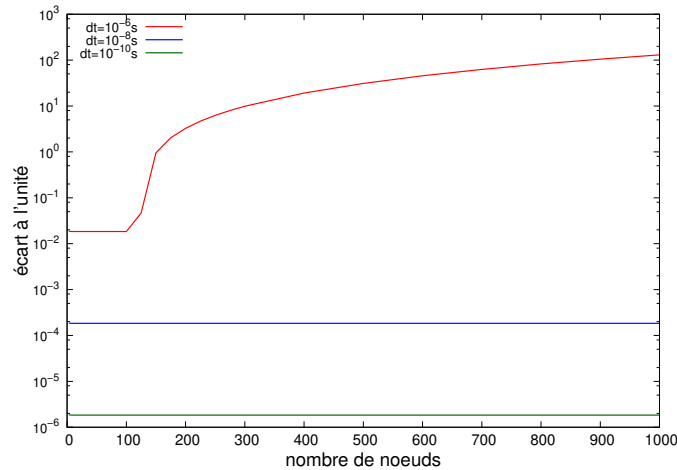


FIGURE A.1: Évolution du module de l'erreur en fonction de la discrétisation appliquée au cœur ainsi que de différent pas de temps. Seul l'écart à l'unité de la plus grande valeur propre est représenté.

Pour l'ensemble des pas de temps considérés la plus grande des valeurs propres du système est toujours supérieure à l'unité. L'erreur va donc croître au fil des itérations, le schéma est instable. Comme l'a montré l'analyse de stabilité de Von Neumann, l'écart à l'unité du module d'amplification de l'erreur est proportionnel au pas de temps.

Lors de l'utilisation d'un pas de temps de 10^{-6} s, il existe une certaine discrétisation du maillage à partir de laquelle l'évolution de l'erreur est « explosive ». « expérimentalement » on constate bien une divergence très rapide du schéma numérique, en quelques itérations, là où plusieurs milliers d'itérations sont nécessaire dans les autres cas. Le pas de temps à partir duquel la divergence devient « explosive » est relativement bien prédit par la limite de stabilité d'un schéma purement diffusif :

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{Dv}$$

L'utilisation d'un pas d'espace plus fin tend à diminuer l'instabilité du schéma numérique à la condition que le pas de temps soit suffisamment petit. Encore une fois la nécessité d'utiliser

un pas d'espace le plus petit possible a déjà été soulevée par les calculs analytiques. De même, il ressortait de l'analyse par la méthode de Von Neumann que le système est d'autant plus proche de la stabilité numérique lorsqu'il est critique. La figure A.2 confirme encore une fois ce résultat.

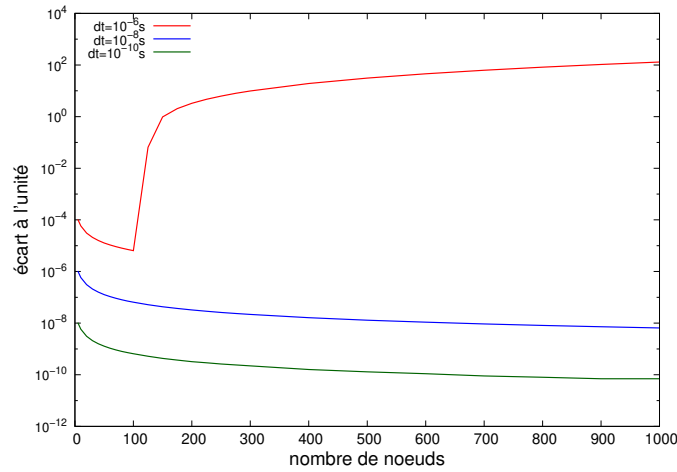


FIGURE A.2: Évolution de l'amplitude de la plus grande valeur propre (notée λ) en fonction de la discrétisation appliquée au cœur ainsi que de différent pas de temps. Seul l'écart à l'unité est représenté : $\lambda_{max} - 1$. La section efficace de fission est ici normalisée par la valeur théorique du k_{eff} afin de se ramener au RCA.

Les données de diffusion utilisées pour nos exemples proviennent d'un assemblage de type REP en début de cycle. La réserve de réactivité y est donc très importante. Le k_{eff} de notre cœur 1D peut s'exprimer simplement grâce à la théorie de la diffusion monocinétique comme :

$$k_{eff} = \frac{\nu \Sigma_f}{\Sigma_{abs} + DB_{geo}^2} \approx 1.3612$$

On se ramène au réacteur critique associé en divisant le nombre de neutrons produit par fission (ν) par cette valeur de k_{eff} qu'on appellera ici correction critique et notée CC .

La figure A.2 présente l'évolution de la plus grande valeur propre en fonction des différents pas de temps et d'espace. Dans le cadre d'une résolution numérique, la correction de criticité issue de la théorie de la diffusion monocinétique n'est pertinente que pour les maillages très fins. En effet, lors de l'utilisation d'un maillage grossier, les fuites seront mal estimées, éloignant la distribution neutronique calculée de celle théorique. En conséquence, la correction critique n'y est pas adaptée, c'est pourquoi le module d'amplification de l'erreur paraît plus grand lors de l'utilisation de maillage grossier.

Correction de criticité et stabilité

Pour confirmer le lien entre stabilité et correction critique, on se propose d'appliquer une correction de criticité fonction du maillage avant de calculer la plus grande valeur propre du système. Le système discrétisé est ramené à la criticité par l'imposition d'une correction critique déduite par un calcul directe, c'est à dire non itératif. Par définition, le réacteur est à l'équilibre lorsque la dérivée en chaque nœud est nulle :

$$\frac{d\vec{n}^N}{dt} = \overline{\overline{M}} \cdot \vec{n}^N = 0$$

La correction de criticité est donc la valeur qui permet au système suivant de connaître une solution non triviale :

$$\overline{\overline{M}} \cdot \vec{n}^N = 0$$

L'existence d'une solution non triviale est elle même conditionnée par l'existence d'une valeur propre nulle de la matrice d'évolution $\overline{\overline{M}}$. La correction critique, telle que définie précédemment, correspond à la constante par laquelle on divise ν et qui permet d'obtenir une valeur propre nulle.

En théorie, il suffit de calculer le polynôme caractéristique de $\overline{\overline{M}}$. L'expression de ce dernier dépend de CC par l'intermédiaire de $\frac{\nu}{CC}$. Les racines du polynôme caractéristique (i.e. les valeurs propres) dépendent donc également de CC . Cette variable doit donc être ajustée afin d'obtenir une valeur propre nulle.

En pratique, le calcul analytique du polynôme caractéristique et de ces valeurs propres est trop difficile. Les valeurs propres sont donc calculées numériquement pour une valeur CC donnée. La dépendance à la correction critique s'exprime au travers de certains coefficient de la matrice $\overline{\overline{M}}$.

La figure A.3 illustre la méthode numérique permettant de calculer la correction critique. La variation de CC permet de faire apparaître plusieurs zéros dans la fonction du déterminant (noté det) de la matrice $\overline{\overline{M}}$. Pour rappel, la valeur du déterminant correspond au produit des valeurs propres de la matrice (i.e. $det(\overline{\overline{M}}) = \prod \lambda_i$).

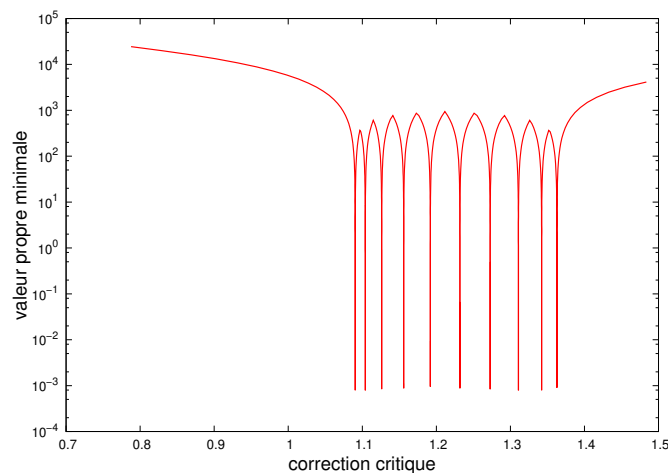


FIGURE A.3: Valeur propre minimale de la matrice d'évolution $\overline{\overline{M}}$ associée à une discrétisation de 10 nœuds en cœur, en fonction de la correction critique appliquée.

Connaissant la valeur théorique analytique de la correction critique, on en déduit que la correction critique du système discrétisé correspond au premier zéro de $det(\overline{\overline{M}})$.

L'accord entre la correction critique calculée par la méthode IRIS et la méthode matricielle est excellente puisque la différence entre ces deux estimations de l'ordre de 10^{-10} . On préfère cependant l'utilisation de la méthode IRIS qui est beaucoup plus simple à mettre en œuvre, qui à l'avantage de calculer en parallèle la nappe de flux à l'équilibre (bien que celle-ci puisse également être déduite par la méthode matricielle puisqu'il s'agit d'un vecteur propre), le tout pour des temps de calcul comparables.

Une fois la correction critique appliquée, la plus grande valeur propre (en valeur absolue) de la matrice d'évolution des perturbations est calculée numériquement. La figure A.4 montre une réduction significative de l'écart à l'unité, même pour les maillages grossiers.

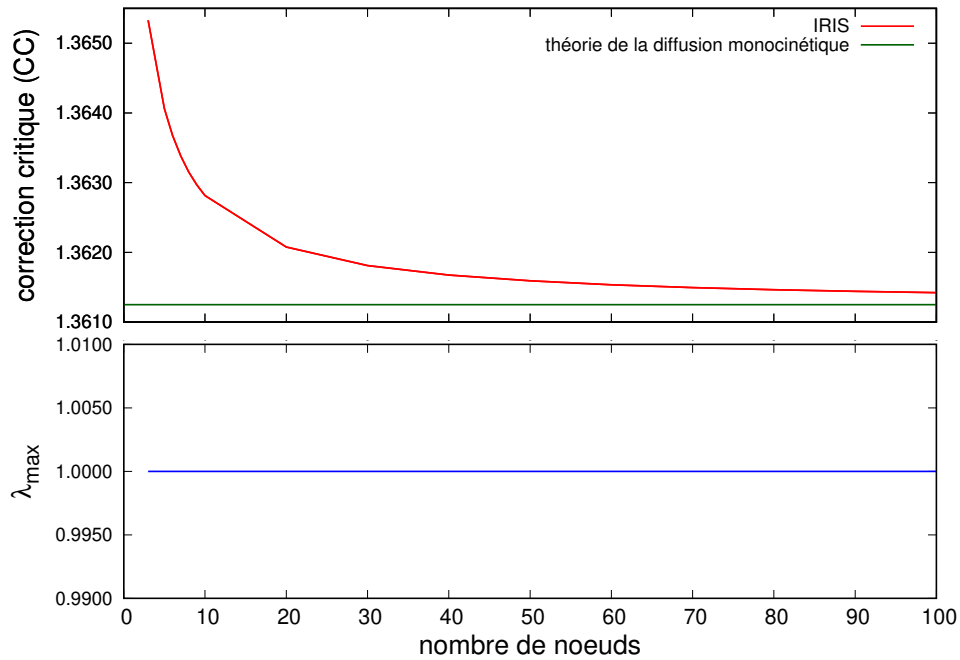


FIGURE A.4: Evolution de la plus grande valeur propre, en valeur absolue, en fonction du nombre de nœuds pour le maillage d'un cœur 1D. La matrice d'évolution de l'erreur est construite après application d'une correction critique permettant de ramener le système à la criticité. Le pas de temps utilisé est de 10^{-8} s.

La correction de criticité est ici calculée itérativement pour une réactivité résiduelle de 10^{-11} pcm par la méthode IRIS. Dans le cas limite une correction critique parfaitement ajustée permet de faire tendre la plus grande valeur propre vers 1. Dans la figure A.4, cette correction de criticité est suffisamment bien ajustée pour que le module d'amplification de l'erreur soit égale à l'unité avec une précision inférieure à 10^{-15} .

Conclusion préliminaire

La diffusion neutronique a la particularité de comporter un terme source proportionnel à la densité locale de neutrons. Ce terme source, correspondant à $(\nu\Sigma_f - \Sigma_{abs})\phi$ dans la théorie monocinétique, est nécessairement positif pour la majorité des nœuds puisqu'il permet de compenser les fuites et ainsi de maintenir une population neutronique stable (i.e. c'est la criticité). D'un point de vue numérique, cette rétroaction positive est un problème puisqu'elle permet aux erreurs de croître.

Tous les termes de l'équation de la diffusion sont directement proportionnels au niveau du flux dans le nœud (i.e. absence de terme constant), ce qui implique que l'équation d'évolution des perturbations est identique à celle de l'évolution du flux. En conséquence, le module d'amplification de l'erreur est similaire au k_{eff} . Le schéma d'Euler explicite est numériquement stable uniquement pour les cas sous-critiques. Il devient asymptotiquement stable dans le cas critique.¹

En pratique, du fait de la détermination approximative de la correction de criticité il restera toujours une possible instabilité « résiduelle ». Cette dernière est aussi gênante que la réactivité résiduelle à l'issue de la mise à l'équilibre. Elle n'a d'importance que pour une durée simulée longue devant le pas de temps utilisé, c'est à dire typiquement de quelques secondes.

1. Pour rendre le schéma stable numériquement dans le cas critique (voir sur-critique), on peut imaginer l'utilisation de source fixe pour remplacer une partie de la source de fission.

Notons que le lien entre criticité et convergence numérique existe également avec la méthode de calcul Monte Carlo dynamique. En effet, lors de la simulation d'un cas sur-critique, le nombre de neutrons source est censé augmenter à chaque étape. Pour un calcul à nombre de neutrons source constant, la précision statistique du Monte Carlo se dégrade d'autant plus vite que la réactivité est importante, et inversement dans un cas sous-critique.

A.1.4 Schéma implicite : Euler implicite d'ordre 1

Le schéma implicite diffère du schéma explicite de par l'expression de la dérivée temporelle qui est estimée au pas de temps $N + 1$ (cf. équation A.8). L'application de ce schéma à toute la géométrie aboutit à un système d'équations sur la densité de neutrons au pas de temps suivant : n_i^{N+1} . Il s'agit alors de trouver une distribution n_i^{N+1} tel qu'en revenant un pas de temps Δt en arrière on retrouve la distribution n_i^N . Bien que plus élégante cette méthode a pourtant la même précision (ordre $\mathcal{O}(\Delta t)$) que la précédente.

$$\frac{n_i^{N+1} - n_i^N}{\Delta t} = F \cdot \frac{(n_{i+1}^{N+1} + n_{i-1}^{N+1} - 2 \cdot n_i^{N+1})}{\Delta x^2} + \frac{n_i^{N+1}}{\tau} \quad (\text{A.8})$$

La méthode d'Euler implicite est pédagogiquement connue pour présenter une plus grande stabilité que le schéma explicite voir même une stabilité inconditionnelle dans le cas d'un schéma diffusif pur. Cet avantage est compensé par la nécessité d'inverser la matrice d'évolution du système à chaque pas de temps, ce qui présente une complexité et un coût computationnel non négligeable. À précision égale (Δt identique) un schéma implicite sera donc plus lent qu'un schéma explicite.

Approche analytique : analyse de Von Neumann

Comme précédemment, la stabilité du schéma d'Euler implicite est en premier lieu analysée analytiquement grâce à la méthode de Von Neumann. La densité de neutrons en chaque nœud est décomposée en somme de deux contributions : la solution discrète \tilde{n}_i^N et l'erreur numérique ϵ_i^N :

$$\frac{\tilde{n}_i^{N+1} + \epsilon_i^{N+1} - \tilde{n}_i^N - \epsilon_i^N}{\Delta t} = F \cdot \frac{(\tilde{n}_{i+1}^{N+1} + \epsilon_{i+1}^{N+1} + \tilde{n}_{i-1}^{N+1} + \epsilon_{i-1}^{N+1} - 2 \cdot \tilde{n}_i^{N+1} - 2 \cdot \epsilon_i^{N+1})}{\Delta x^2} + \frac{\tilde{n}_i^{N+1} + \epsilon_i^{N+1}}{\tau}$$

d'où :

$$\frac{\epsilon_i^{N+1} - \epsilon_i^N}{\Delta t} = F \cdot \frac{(\epsilon_{i+1}^{N+1} + \epsilon_{i-1}^{N+1} - 2 \cdot \epsilon_i^{N+1})}{\Delta x^2} + \frac{\epsilon_i^{N+1}}{\tau}$$

Le gain d'amplification d'une composante de l'erreur ainsi commise se déduit grâce à sa décomposition en série de Fourier :

$$G(k_m \Delta x) = \frac{\epsilon_i^{N+1}}{\epsilon_i^N} = \frac{1}{1 + \frac{4 \cdot F \cdot \Delta t}{\Delta x^2} \cdot \sin^2(k_m \Delta x) - \frac{\Delta t}{\tau}}$$

Le gain maximum s'obtient pour la plus petite fréquence, c'est à dire lorsque $k_{m=1} \Delta x = \frac{\pi \Delta x}{2L}$. En supposant encore une fois une discrétisation fine du maillage (i.e. $\Delta \ll L$), on aboutit que le schéma est à la limite stable lorsque le cœur est critique tout comme dans le cas d'une intégration par la méthode d'Euler explicite.

Approche numérique : valeur propre du système matriciel

Ces résultats théoriques sont confirmés sur le cas du cœur 1D précédemment utilisé. L'évolution de l'erreur s'écrit matriciellement comme :

$$\frac{\vec{\epsilon}^{N+1} - \vec{\epsilon}^N}{\Delta t} = \overline{\overline{M}} \cdot \vec{\epsilon}^{N+1}$$

d'où :

$$(\overline{\overline{Id}} - \Delta t \cdot \overline{\overline{M}}) \cdot \vec{\epsilon}^{N+1} = \vec{\epsilon}^N$$

Le vecteur de l'erreur au pas de temps $N + 1$ correspond donc à la résolution du système suivant :

$$\vec{\epsilon}^{N+1} = (\overline{\overline{Id}} - \Delta t \cdot \overline{\overline{M}})^{-1} \cdot \vec{\epsilon}^N = \overline{\overline{A}}^{-1} \cdot \vec{\epsilon}^N$$

Si $\overline{\overline{A}}^{-1}$ possède au moins une valeur propre supérieur à 1 alors il existe un vecteur propre dont la croissance sera géométrique au fil des itérations.

La plus grande valeur propre est notée λ_{max} , l'évolution de l'écart de cette dernière à l'unité est présentée dans la figure A.5 en fonction de la discrétisation du maillage et de quelque valeur de pas de temps.

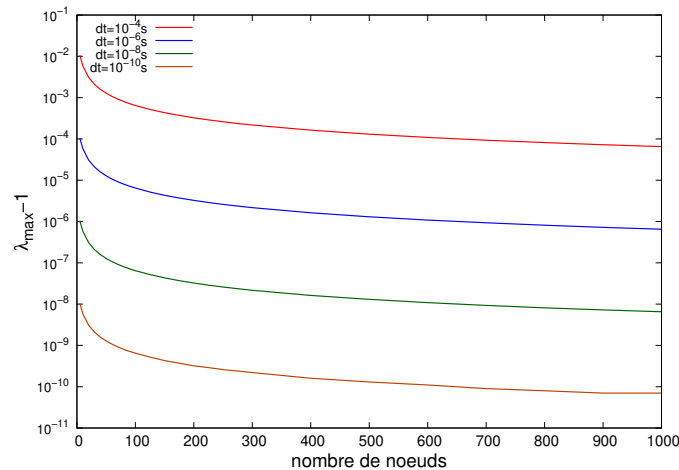


FIGURE A.5: Évolution de la plus grande valeur, représentée comme $\lambda_{max} - 1$ de la matrice d'évolution de l'erreur en fonction de la discrétisation du maillage et du pas de temps utilisé pour une intégration par d'Euler implicite.

La correction de criticité appliquée est en première approche celle donnée par la théorie de la diffusion monocinétique, ce qui explique la plus forte instabilité des maillages grossiers.

La méthode d'Euler implicite permet d'utiliser des pas de temps plus importants sans que la divergence ne devienne « explosive ». Pour les pas de temps fins, le schéma d'Euler implicite ne montre pas une instabilité significativement plus faible que le schéma d'Euler explicite.

En conclusion, les schémas implicites bien que moins instables pour les pas de temps larges ne permettent pas de garantir la stabilité de la résolution numérique. Cette dernière est encore une fois subordonnée à la stabilité physique du cœur (i.e. $k_{eff} = 1$).

A.1.5 Schémas d'ordre élevé

L'objectif de ce paragraphe est de démontrer qu'augmenter l'ordre de l'intégration temporelle ne permet pas de rendre le schéma plus stable. Pour ce faire deux types de schéma numérique sont considérés :

θ -schéma ou schéma semi-implicite

Ce schéma consiste à combiner les estimations des dérivées des schémas d'Euler implicite et explicite (cf. équations A.9). La dérivée temporelle est calculée comme une moyenne de la dérivée vers l'avant (estimation en $N + 1$) et de la dérivée vers l'arrière (estimation en N).

$$\frac{n_i^{N+1} - n_i^N}{\Delta t} = \theta \cdot \left(F \cdot \Delta n + \frac{n}{\tau} \right) \Big|_i^N + (1 - \theta) \cdot \left(F \cdot \Delta n + \frac{n}{\tau} \right) \Big|_i^{N+1} \quad (\text{A.9})$$

$$\frac{n_i^{N+1} - n_i^N}{\Delta t} = \left[\theta \cdot \left(F \cdot \frac{(n_{i+1}^N + n_{i-1}^N - 2 \cdot n_i^N)}{\Delta x^2} + \frac{n_i^N}{\tau} \right) \right] + \left[(1 - \theta) \cdot \left(F \cdot \frac{(n_{i+1}^{N+1} + n_{i-1}^{N+1} - 2 \cdot n_i^{N+1})}{\Delta x^2} + \frac{n_i^{N+1}}{\tau} \right) \right]$$

Dans le cas où $\theta = \frac{1}{2}$, cela aboutit à un schéma d'ordre 2 appelé schéma de Crank-Nicolson.

Approche analytique : analyse de Von Neumann

Durant l'analyse de stabilité par la méthode de Von Neumann, le paramètre θ est laissé libre de varier dans l'intervalle $[0; 1]$. Cette dernière conduit à l'expression du module d'amplification des modes de l'erreur suivant :

$$\frac{\epsilon_i^{N+1}}{\epsilon_i^N} = \frac{1 + \theta \cdot \left(\frac{\Delta t}{\tau} - \frac{4 \cdot F \cdot \Delta t}{\Delta x^2} \cdot \sin^2(k_m \Delta x) \right)}{1 + (1 - \theta) \cdot \left(\frac{4 \cdot F \cdot \Delta t}{\Delta x^2} \cdot \sin^2(k_m \Delta x) - \frac{\Delta t}{\tau} \right)}$$

Encore une fois cette expression semble au mieux tendre vers 1.

Approche numérique : valeur propre du système matriciel

La stabilité du schéma de Crank-Nicolson est évaluée dans le cas du cœur 1D. L'équation d'évolution de l'erreur mène au système matriciel suivant :

$$\frac{1}{2} \left(\overline{Id} - \Delta t \cdot \overline{M} \right) \cdot \vec{\epsilon}^{N+1} = \frac{1}{2} \left(\overline{Id} + \Delta t \cdot \overline{M} \right) \cdot \vec{\epsilon}^N =$$

d'où :

$$\vec{\epsilon}^{N+1} = \left(\overline{Id} - \Delta t \cdot \overline{M} \right)^{-1} \cdot \left(\overline{Id} + \Delta t \cdot \overline{M} \right) \cdot \vec{\epsilon}^N = \overline{A} \vec{\epsilon}^N$$

La figure A.6 représente l'évolution de $\lambda_{max} - 1$ pour différent granularité du maillage et différent pas de temps. Le nombre de neutrons produit par fission (ν) est divisé par la correction critique issue de la théorie de la diffusion monocinétique.

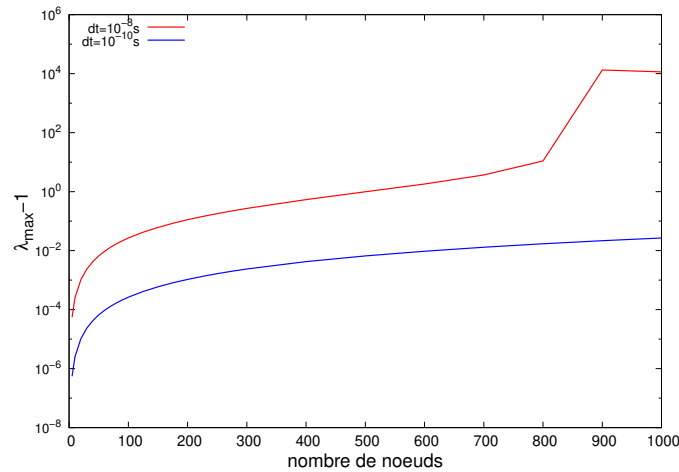


FIGURE A.6: Évolution de la plus grande valeur, représentée comme $\lambda_{max} - 1$ de la matrice d'évolution de l'erreur en fonction de la discrétisation du maillage et du pas de temps utilisé pour une intégration de Crank-Nicolson.

L'instabilité du schéma de Crank-Nicolson évolue de façon radicalement différente par rapport à celle des schémas d'Euler. Cette dernière a tendance à croître avec la discrétisation du maillage. Notons qu'en dépit d'une intégration d'ordre 2, ce schéma nécessite des pas de temps bien plus faibles pour une discrétisation spatiale donnée.

Runge Kutta d'ordre 2 (RK2)

Les schémas de type Runge Kutta consistent à cumuler plusieurs estimations de la dérivée temporelle (calculées en cascade de façon explicite) afin de pouvoir en augmenter la précision. Dans le schéma Runge Kutta d'ordre 2 (RK2), une première estimation du vecteur de la densité de neutron est calculé au temps $t_i + \frac{\Delta t}{2}$. Ce calcul intermédiaire permet ensuite d'estimer la dérivée entre les instants N et $N + 1$ afin d'intégrer le vecteur de la densité neutronique sur Δt :

$$\begin{cases} n_i^* = n_i^N + \frac{\Delta t}{2} \cdot \left. \frac{dn}{dt} \right|_i^N \\ n_i^{N+1} = n_i^N + \Delta t \cdot \left. \frac{dn^*}{dt} \right|_i \end{cases} \quad (\text{A.10})$$

Le schéma (RK2) permet bien une intégration d'ordre 2 en temps. En effet si l'on remplace l'expression de n_i^* dans la dérivée utilisée pour aller du pas de temps N au pas de temps $N + 1$, il vient :

$$\frac{dn^*}{dt} = \frac{d}{dt} \left(n_i^N + \frac{\Delta t}{2} \cdot \left. \frac{dn}{dt} \right|_i^N \right) = \frac{dn_i^N}{dt} + \frac{\Delta t}{2} \cdot \left. \frac{d}{dt} \frac{dn}{dt} \right|_i^N \quad (\text{A.11})$$

d'où :

$$n_i^{N+1} = n_i^N + \Delta t \cdot \left. \frac{dn}{dt} \right|_i^N + \frac{\Delta t}{2} \cdot \left. \frac{d^2 n}{dt^2} \right|_i^N$$

Ce qui correspond aux premiers termes d'un développement de Taylor, tronqué à l'ordre 2.

Approche analytique : analyse de Von Neumann

L'analyse de Von Neumann s'avère plus fastidieuse à appliquer au schéma de type RK :

$$\frac{n_i^{N+1} - n_i^N}{\Delta t} = F \cdot \frac{(n_{i+1}^* + n_{i-1}^* - 2 \cdot n_i^*)}{\Delta x^2} + \frac{n_i^*}{\tau}$$

$$\frac{n_i^{N+1} - n_i^N}{\Delta t} = F \cdot \frac{(n_{i+1}^N + \frac{\Delta t}{2} \cdot \frac{dn}{dt} \Big|_{i+1}^N + n_{i-1}^N + \frac{\Delta t}{2} \cdot \frac{dn}{dt} \Big|_{i-1}^N - 2 \cdot (n_i^N + \frac{\Delta t}{2} \cdot \frac{dn}{dt} \Big|_i^N))}{\Delta x^2} + \frac{1}{\tau} \cdot (n_i^N + \frac{\Delta t}{2} \cdot \frac{dn}{dt} \Big|_i^N)$$

En remplaçant les expressions des dérivées par formulation en différence finie il vient que :

$$\begin{aligned} \frac{n_i^{N+1} - n_i^N}{\Delta t} &= \left(\frac{F}{\Delta x^2} + \frac{F\Delta t}{\tau\Delta x^2} \right) \cdot (n_{i+1}^N - 2 \cdot n_i^N + n_{i-1}^N) \\ &+ \left(\frac{F}{\Delta x^2} \right)^2 \cdot \frac{\Delta t}{2} \cdot (n_{i+2}^N - 4 \cdot n_{i+1}^N + 6 \cdot n_i^N - 4 \cdot n_{i-1}^N + n_{i-2}^N) \\ &+ \left(\frac{1}{\tau} + \frac{\Delta t}{2\tau^2} \right) \cdot n_i^N \end{aligned}$$

En décomposant la densité neutronique de chaque nœud en une somme de la valeur à l'équilibre : \tilde{n}_i et de l'erreur numérique : ϵ_i^N , on en déduit que l'équation d'évolution de l'erreur est identique à celle de la densité neutronique du fait de l'absence de terme source. La décomposition en série de Fourier de l'erreur permet d'exprimer le module d'amplification de l'erreur de chaque mode comme étant :

$$\begin{aligned} G(k_m\Delta x) &= \left(1 + \frac{\Delta t}{\tau} + \frac{\Delta t^2}{2\tau^2} \right) - 4 \cdot \left(\frac{F\Delta t}{\Delta x^2} + \frac{F\Delta t^2}{\tau\Delta x^2} \right) \cdot \sin^2\left(\frac{k_m\Delta x}{2}\right) \\ &- 2 \cdot \left(\frac{F\Delta t}{\Delta x^2} \right)^2 \cdot \left(\sin^2(k_m\Delta x) + 8 \cdot \sin^2\left(\frac{k_m\Delta x}{2}\right) \right) \end{aligned}$$

Encore une fois, seule la condition de criticité permet de limiter le module de l'erreur à l'unité dans un cas où $\tau > 1$.

Approche numérique : valeur propre du système matriciel

La matrice d'évolution de l'erreur fait intervenir de nouveaux termes tri-diagonaux du fait de l'utilisation des nœuds n_{i+2} et n_{i-2} . Le calcul des valeurs propres de cette matrice est effectué sur le même cœur 1D où une correction de criticité approximative, issue de la théorie monocinétique de la diffusion, a été appliquée.

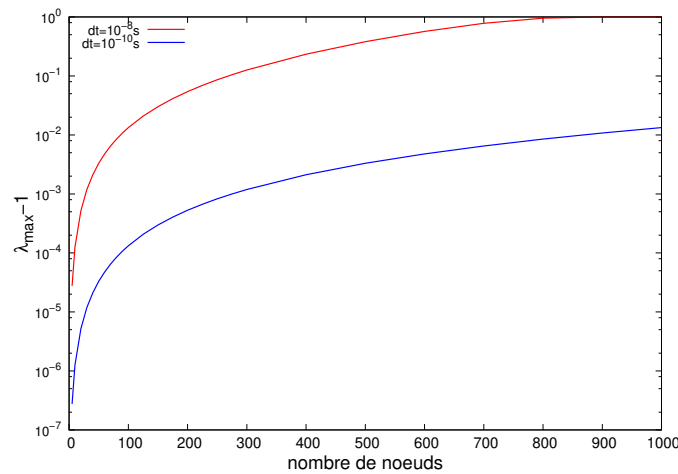


FIGURE A.7: Évaluation de l'écart de la plus grande valeur propre à l'unité, pour un schéma d'intégration RK2, selon différent pas de temps et discrétisation du maillage spatial.

La figure A.7 confirme que les algorithmes d'intégration d'ordre 2 semblent plus prompts à diverger lors de l'augmentation de la discrétisation spatiale.

A.1.6 Conclusion sur la relation entre stabilité et algorithme d'intégration

L'évolution de l'erreur numérique est identique à celle du flux. En conséquence, le schéma est asymptotiquement stable lorsque le système est critique. Pour un système sous-critique, l'erreur numérique aura tendance à se résorber d'elle même au fil des itérations.

Le choix de l'algorithme d'intégration a peu d'importance du point de vue de la stabilité. Notons toutefois que le schéma purement implicite présente la possibilité d'utiliser des pas de temps plus importants sans risquer une divergence « explosive ». De façon surprenante, aucun avantage ne se dégage de l'utilisation de schémas d'ordre 2. Ceux-ci qui s'avèrent d'autant plus instables pour des discrétisations spatiales importantes.

L'utilisation d'un jeu de sections efficaces critiques s'avère centrale pour la simulation de la diffusion neutronique. Dans la majorité des exemples numériques précédemment utilisés, le nombre de neutrons produits par fissions a été divisé par la correction de critique prédite par la théorie de la diffusion monocinétique. Cependant la valeur de la CC est dépendante de la finesse du maillage. En conséquence, les jeux de sections efficaces utilisés sont légèrement sur-critiques (puisque la CC théorique est inférieure à la CC numérique pour un maillage donné), ce qui explique que tous les schémas numériques testés se soient révélés instables.

A.1.7 Enrichissement (physique) de l'équation de la diffusion

Le lien étroit qui existe entre la stabilité physique et numérique du système incite à observer l'effet des principaux raffinements de l'équation de la diffusion neutronique sur la stabilité des schémas numériques. Trois principaux raffinements sont étudiés dans la suite : la prise en compte des précurseurs, la prise en compte de groupes en énergie et l'influence des contre-réactions thermiques. Ces raffinements sont considérés indépendamment les uns des autres.

Prise en compte des précurseurs

L'étude des réacteurs à combustible solide est ici privilégiée. Dans ce contexte, le système d'équations neutroniques considéré est le suivant :

$$\begin{cases} \frac{dn}{dt} = D \cdot v \cdot \Delta n + ((1 - \beta) \cdot \nu \Sigma_f - \Sigma_a) \cdot v \cdot n + \lambda p \\ \frac{dp}{dt} = \beta \cdot \nu \Sigma_f \cdot v \cdot n - \lambda p \end{cases} \quad (\text{A.12})$$

Avec :

- β la proportion de neutrons retardés à l'issue d'une fission (pcm)
- λ la constante de décroissance des précurseurs (s)
- p la densité de précurseurs ($precurseurs \cdot cm^{-1}$)

Seule une famille de précurseurs est ici considérée. S'agissant d'un schéma à plusieurs niveaux, l'analyse de Von Neumann ne peut être appliquée c'est pourquoi l'approche matricielle est privilégiée.

Un schéma d'Euler explicite est retenu pour l'intégration en temps. Les équations discrétisées s'écrivent alors comme :

$$\begin{cases} \frac{n_i^{N+1} - n_i^N}{\Delta t} = D \cdot v \cdot \frac{(n_{i+1}^N - 2 \cdot n_i^N + n_{i-1}^N)}{\Delta x^2} + ((1 - \beta) \cdot \nu \Sigma_f - \Sigma_a) \cdot v \cdot n_i^N + \lambda p_i^N \\ \frac{p_i^{N+1} - p_i^N}{\Delta t} = \beta \cdot \nu \Sigma_f \cdot v \cdot n_i^N - \lambda p_i^N \end{cases} \quad (\text{A.13})$$

Les variables en chaque nœud sont décomposées comme la somme de la solution à l'état stationnaire du système d'équations discrétisés et d'une erreur numérique, notée ϵ_i^N pour la densité de neutrons et δ_i^N pour la densité de précurseurs :

$$\begin{cases} n_i^N = \tilde{n}_i + \epsilon_i^N \\ p_i^N = \tilde{p}_i + \delta_i^N \end{cases} \quad (\text{A.14})$$

En partant de l'état stationnaire, l'équation de l'évolution de l'erreur est la même que le système d'équations ???. Matriciellement ce système s'écrit comme :

$$\begin{pmatrix} \epsilon \\ \vdots \\ \delta \\ \vdots \end{pmatrix}^{N+1} = \begin{pmatrix} M & D & & & & & & & R \\ D & M & D & & & & & & R \\ & D & M & D & & & & & R \\ & & D & M & & & & & R \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ F & & & & & 1-R & & & \\ & F & & & & & & & 1-R \\ & & F & & & & & & 1-R \\ & & & F & & & & & 1-R \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \epsilon \\ \vdots \\ \delta \\ \vdots \end{pmatrix}^N$$

Avec :

$$\begin{cases} M = 1 + ((1 - \beta)\Sigma_f - \Sigma_a)v\Delta t - \frac{2Dv\Delta t}{\Delta x^2} \\ D = \frac{Dv\Delta t}{\Delta x^2} \\ R = \lambda\Delta t \\ F = \beta\Sigma_f v\Delta t \end{cases}$$

S'il existe au moins une valeur propre plus grande que l'unité en valeur absolue alors l'amplitude du vecteur propre associé diverge. Le schéma numérique associé est donc instable.

La valeur du β est fixée à 693 pcm et la valeur de λ à 8.068 s^{-1} . Ces valeurs sont issues du même calcul d'assemblage REP UOX que celui initialement introduit.

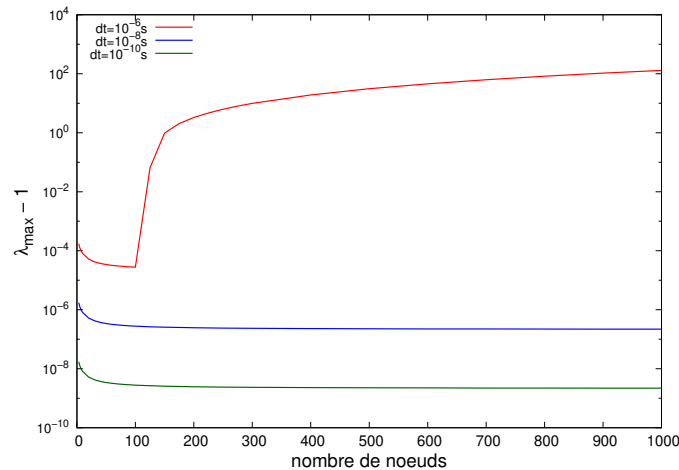


FIGURE A.8: Évolution de l'écart de la plus grande valeur propre à l'unité (notée λ_{max}), pour un schéma d'intégration d'Euler explicite. Différents pas de temps et discrétisations du maillage spatial sont testés.

La plus grande valeur propre du système est calculée avec l'application de la correction de criticité théorique pour ce réacteur 1D. A l'équilibre, l'équation des précurseurs peut être

éliminée de celle de la diffusion neutronique, la présence des précurseurs ne change donc pas la valeur de la correction critique théorique. La figure A.8 indique l'évolution de la plus grande valeur propre du système, notée λ_{max} , en fonction de la discrétisation spatio-temporelle. Les résultats de l'étude de stabilité avec et sans précurseurs sont très similaires, (cf. figure A.2). En conclusion, l'ajout des précurseurs n'a pas d'impact significatif sur la stabilité numérique du schéma. Ce dernier semble de moins en moins instable à mesure que les données de diffusion permettent d'atteindre une critique stricte.

Prise en compte d'une structure en énergie

Pour la modélisation de cœur de type REP, l'approximation à 2 groupes en énergie est communément retenue. L'analyse numérique de cette modélisation à 2 groupes est donc indispensable pour comprendre l'influence du découpage en énergie sur la stabilité des schémas numériques. Les équations de la diffusion neutronique à 2 groupes, utilisés dans la NDM, sont rappelées ci dessous :

$$\begin{cases} \frac{dn_1}{dt} = D_1 \cdot v_1 \cdot \Delta n_1 + (\nu \Sigma_{f1} - \Sigma_{a1} - \Sigma_{1 \rightarrow 2}) \cdot v_1 \cdot n_1 + (\nu \Sigma_{f2} + \Sigma_{a2 \rightarrow 1}) \cdot v_2 \cdot n_2 \\ \frac{dn_2}{dt} = D_2 \cdot v_2 \cdot \Delta n_2 - (\Sigma_{a2} + \Sigma_{s2 \rightarrow 1}) \cdot v_2 \cdot n_2 + \Sigma_{1 \rightarrow 2} \cdot v_1 \cdot n_1 \end{cases} \quad (\text{A.15})$$

Avec $\Sigma_{g \rightarrow g'}$ la section efficace de diffusion du groupe g vers le groupe g' . L'indice « 1 » désigne le groupe des neutrons rapides tandis que l'indice « 2 » réfère au groupe thermique.

Cette étude considère uniquement un schéma d'Euler explicite pour l'intégration temporel. La discrétisation des équations par la méthode des différences finies est donc la suivante :

$$\begin{cases} \frac{n_{1,i}^{N+1} - n_{1,i}^N}{\Delta t} = D_1 \cdot v_1 \cdot \frac{(n_{1,i+1}^N + n_{1,i-1}^N - 2 \cdot n_{1,i}^N)}{\Delta x^2} + (\nu \Sigma_{f1} - \Sigma_{a1} - \Sigma_{1 \rightarrow 2}) \cdot v_1 \cdot n_{1,i}^N + \nu \Sigma_{f2} \cdot v_2 \cdot n_{2,i}^N \\ \frac{n_{2,i}^{N+1} - n_{2,i}^N}{\Delta t} = D_2 \cdot v_2 \cdot \frac{(n_{2,i+1}^N + n_{2,i-1}^N - 2 \cdot n_{2,i}^N)}{\Delta x^2} - \Sigma_{a2} \cdot v_2 \cdot n_{2,i}^N + \Sigma_{1 \rightarrow 2} \cdot v_1 \cdot n_{1,i}^N \end{cases} \quad (\text{A.16})$$

Le schéma étant à deux niveaux, l'analyse de stabilité est menée matriciellement. Les densités neutroniques en chaque nœud et dans chaque groupe en énergie sont décomposées comme la somme d'une erreur numérique et de la solution du système d'équations discrétisées. Du fait de l'absence de terme source, l'équation d'évolution de l'erreur est encore une fois identique à celle de la densité neutronique :

$$\begin{pmatrix} \epsilon_i^1 \\ \vdots \\ \epsilon_i^2 \\ \vdots \end{pmatrix}^{N+1} = \begin{pmatrix} A_1 & B_1 & & & & & & & & C_2 \\ B_1 & A_1 & B_1 & & & & & & & C_2 \\ & B_1 & A_1 & B_1 & & & & & & C_2 \\ & & B_1 & A_1 & B_1 & & & & & C_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ C_1 & & & & & & A_2 & B_2 & & \\ & C_1 & & & & & B_2 & A_2 & B_2 & \\ & & C_1 & & & & B_2 & A_2 & B_2 & \\ & & & C_1 & & & B_2 & A_2 & B_2 & \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \epsilon_i^1 \\ \vdots \\ \epsilon_i^2 \\ \vdots \end{pmatrix}^N$$

Avec :

$$\begin{cases} A_1 = 1 + (\nu\Sigma_{f1} - \Sigma_{a1} - \Sigma_{s1\rightarrow2} - \frac{2D_1}{\Delta x^2}) \cdot v_1 \cdot \Delta t \\ B_1 = \frac{D_1}{\Delta x^2} \cdot v_1 \cdot \Delta t \\ C_1 = \Sigma_{s1\rightarrow2} \cdot v_1 \cdot \Delta t \\ A_2 = 1 - (\Sigma_{a2} + \Sigma_{s2\rightarrow1} + \frac{2D_2}{\Delta x^2}) \cdot v_2 \cdot \Delta t \\ B_2 = \frac{D_2}{\Delta x^2} \cdot v_2 \cdot \Delta t \\ C_2 = (\nu\Sigma_{f2} + \Sigma_{s2\rightarrow1}) \cdot v_2 \cdot \Delta t \end{cases}$$

La recherche des valeurs propres de la matrice d'évolution de l'erreur est réalisée numériquement. Le cas envisagé correspond toujours à un réacteur 1D (comme représenté dans la matrice du système). Les données de diffusions, présentées dans le tableau A.1, sont calculées toujours sur la base d'un assemblage de type REP N4 par le code *Serpent2*.

groupe	$\nu\Sigma_f (cm^{-1})$	$\Sigma_a (cm^{-1})$	$\Sigma_{sg\rightarrow g'} (cm^{-1})$	$D (cm)$	$v (cm \cdot s^{-1})$
1	$7.40454 \cdot 10^{-3}$	$9.84476 \cdot 10^{-3}$	$1.72395 \cdot 10^{-2}$	1.50466672	$1.720759 \cdot 10^7$
2	$1.49812 \cdot 10^{-1}$	$8.67264 \cdot 10^{-2}$	0.0	$3.671828155 \cdot 10^{-1}$	$4.149533 \cdot 10^5$

Tableau A.1: Jeux de sections efficaces à 2 groupes en énergie d'un assemblage typique de REP N4

Le système est approché de la criticité grâce à l'application de la correction de criticité issue de la théorie de la diffusion à 2 groupes. Cette dernière correspond à la valeur par laquelle il faudrait diviser ν afin de ramener un réacteur plaque à la criticité pour un jeu de sections efficaces donné :

$$Cc = \frac{(B_{geo}^2 D_2 + \Sigma_{a2}) \nu \Sigma_{f1} + \nu \Sigma_{f2} \Sigma_{s1\rightarrow2}}{B_{geo}^4 D_1 D_2 + B_{geo}^2 D_2 \Sigma_{a1} + (B_{geo}^2 D_1 + \Sigma_{a1}) \Sigma_{a2} + (B_{geo}^2 D_2 + \Sigma_{a2}) \Sigma_{s1\rightarrow2}}$$

Avec B_{geo} le laplacien géométrique définit comme : $B_{geo} = \frac{\pi}{L}$, où L est la largeur du réacteur.

Les résultats obtenus sont présentés figure A.9. Dans le groupe 1, la vitesse des neutrons est de plusieurs ordres de grandeur plus élevée que celle des neutrons du groupe 2. L'évolution d'une partie de la population neutronique (i.e. le groupe rapide) est sensiblement plus rapide, ce qui nécessite l'utilisation d'un pas de temps inférieur à 10^{-8} s dans le cas d'un maillage fin (i.e. $\Delta x < 1$ cm).

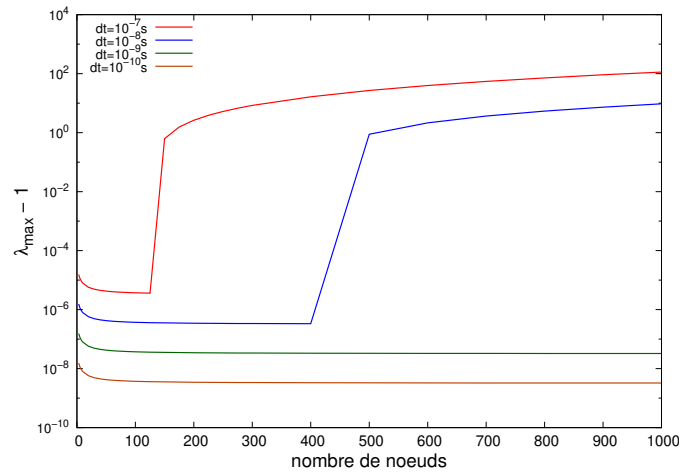


FIGURE A.9: Évolution de l'écart à l'unité de la plus grande valeur propre (en valeur absolue) de la matrice d'évolution de l'erreur, en fonction du maillage spatio-temporel.

Là encore, la stabilité numérique du système repose entièrement sur la criticité de ce dernier. En effet, lorsque la correction de criticité est légèrement surestimée (à 10^{-3} près), la plus grande valeur propre du système passe en dessous de l'unité. Le système alors rendu sous-critique devient numériquement stable.

Prise en compte des contre-réactions thermiques

Dans l'ensemble des modélisations étudiées, la stabilité numérique de l'équation de la diffusion est subordonnée au fait que le système soit physique convergent ou, dans le cas limite, qu'il soit critique. Pour un système sur-critique et en l'absence de contre-réactions, le flux ainsi que l'erreur sur le flux divergent. Ce constat est cohérent avec le théorème de Lax-Milgram :

Il est possible de s'assurer qu'un système algébrique $u(x,t)$, discrétisé en I pas Δx pour la variable x et en N pas Δt pour la variable t , soit stable sur une durée T s'il existe $K \in \mathbb{R}^+$ tel que $\forall m \in [0; N]$ et pour $\forall i \in [0; I]$ on ait $\|u(i \cdot \Delta x, m \cdot \Delta t)\| \leq K \cdot \|u\|_{max}$. Avec $\|u\|$ désignant les valeurs (absolues) initiales $\|u(x, 0)\|$ et où les conditions limites sont imposées sur toutes la durée du transitoire : $\|u(x_{boundary}, t)\|$.

Autrement dit, s'il est possible de majorer l'amplitude de la variable calculée (i.e. flux) alors il existe une condition de stabilité pour le système algébrique. Physiquement, le flux est borné grâce à l'existence de contre-réactions thermiques négatives.

Un modèle théorique simplifié est proposé pour vérifier l'aspect stabilisateur des contre-réactions thermiques sur le schéma numérique (cf. figure A.10).

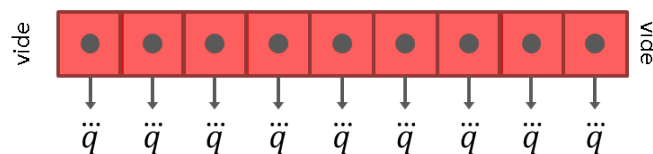


FIGURE A.10: Modélisation d'un couplage neutronique/thermohydraulique sur un cœur 1D refroidit de façon homogène.

Ce dernier consiste en un réacteur 1D, où la diffusion à 1 groupe est résolue en chaque nœud. Le taux de fission local est proportionnel à l'énergie déposée en chaque nœud. Ces derniers sont

également caractérisés par une température. Le refroidissement des nœuds est modélisé par une source froide constante noté \ddot{q} . La température du nœud contre-réagit sur la section efficace de fission.

Les conditions limites du système sont pour la neutronique des conditions de bords où le flux est nul (i.e. condition de vide). L'équilibre thermique suppose que chaque nœud produise la même puissance volumique, égale au puis de chaleur \ddot{q} . Notons qu'en pratique l'évacuation de la chaleur se fait plus couramment à température imposée plutôt qu'à flux (ou puissance) imposée.

Le système d'équations modélisant ce cœur théorique est le suivant :

$$\begin{cases} \frac{dn}{dt} = D\Delta vn + (\nu \cdot (\Sigma_f - \alpha(T - T_0)) - \Sigma_a) \cdot vn \\ \rho C_p \frac{dT}{dt} = Q(\Sigma_f - \alpha(T - T_0)) \cdot vn - \ddot{q} \end{cases} \quad (\text{A.17})$$

avec :

- α le coefficient de contre-réaction en température, ($cm^{-1} \cdot K^{-1}$)
- T la température d'un nœud, (K)
- T_0 la température de référence d'un nœud, (K)
- ρ la masse volumique d'un volume associé à un nœud, ($kg \cdot cm^{-3}$)
- C_p la capacité calorifique du volume associé à un nœud, ($J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$)
- Q énergie libérée pour une quantité fixée de neutron (normalisée arbitrairement), ($J \cdot fission^{-1}$)
- \ddot{q} la source froide imposée en chaque nœud, ($J \cdot cm^{-3}$)

Seule la section efficace de fission est supposée dépendre de la température. Cette dépendance est supposée linéaire. Dans la suite le terme :

$$\Sigma_f - \alpha(T - T_0)$$

est abrégé en :

$$\begin{aligned} \Sigma_{f1} - \alpha T \\ \text{avec } \Sigma_{f1} = \Sigma_f + \alpha T_0 \end{aligned}$$

Le système d'équations ainsi posé est discrétisé dans le formalisme des différences finies, en utilisant l'intégration d'Euler explicite :

$$\begin{cases} \frac{n_i^{N+1} - n_i^N}{\Delta t} = \frac{Dv}{\Delta x^2} (n_{i+1}^N - 2n_i^N + n_{i-1}^N) + (\nu \cdot (\Sigma_{f1} - \alpha T_i^N) - \Sigma_a) \cdot vn_i^N \\ \rho C_p \left(\frac{T_i^{N+1} - T_i^N}{\Delta t} \right) = Q(\Sigma_{f1} - \alpha T_i^N) \cdot vn_i^N - \ddot{q} \end{cases} \quad (\text{A.18})$$

En posant l'équilibre de ce système (i.e. dérivée nulle), il est possible de montrer la relation suivante :

$$\begin{cases} \frac{Dv}{\Delta x^2} (n_{i+1}^\infty - 2n_i^\infty + n_{i-1}^\infty) + \frac{\ddot{q}}{Q} - \Sigma_a \cdot vn_i^\infty \\ n_i^\infty = \frac{\ddot{q}}{Q(\Sigma_{f1} - \alpha T_i^\infty) \cdot v} \end{cases} \quad (\text{A.19})$$

Où T_i^∞ et n_i^∞ sont les températures et densités de neutrons à l'équilibre en chaque nœud. Notons que à l'état stationnaire, la densité de neutrons est découplée de la température et vice-versa. Le terme source dans l'équation neutronique est constant et ne dépend que du terme d'extraction de chaleur imposé au système. A priori, puisque les termes constants ne jouent pas de rôle dans la stabilité numérique (cf. analyse de Von Neumann), le schéma de la diffusion neutronique couplé est équivalent à celui d'une diffusion pure. Or la diffusion pure est conditionnellement stable pour un schéma d'Euler explicite.

Pour vérifier la stabilité de ce schéma, on considère partir d'un état d'équilibre, les valeurs de température et de densité de neutron sont alors décomposées en somme de la solution d'équilibre et d'une erreur numérique :

$$\begin{cases} n_i^N = n_i^\infty + \epsilon_i^N \\ T_i^N = T_i^\infty + \eta_i^N \end{cases}$$

Dans l'équation d'évolution de la densité neutrons cette décomposition s'exprime comme :

$$\begin{aligned} & \frac{n_i^\infty - n_i^\infty}{\Delta t} + \frac{\epsilon_i^{N+1} - \epsilon_i^N}{\Delta t} = \\ & \frac{Dv}{\Delta x^2} (n_{i+1}^\infty - 2n_i^\infty + n_{i-1}^\infty) + \frac{Dv}{\Delta x^2} (\epsilon_{i+1}^N - 2\epsilon_i^N + \epsilon_{i-1}^N) + \\ & \nu \left((\Sigma_{f1} - \alpha T_i^\infty) v n_i^\infty + (\Sigma_{f1} - \alpha T_i^\infty) v \epsilon_i^N - \alpha \cdot v \cdot \eta_i^N n_i^\infty - \alpha \cdot v \cdot \eta_i^N \epsilon_i^N \right) \\ & - \Sigma_a \cdot v n_i^\infty - \Sigma_a \cdot v \epsilon_i^N \end{aligned}$$

En s'appuyant sur l'équation d'équilibre, que respecte le vecteur n_i^∞ , l'équation neutronique en un nœud se simplifie comme :

$$\frac{\epsilon_i^{N+1} - \epsilon_i^N}{\Delta t} = \frac{Dv}{\Delta x^2} (\epsilon_{i+1}^N - 2\epsilon_i^N + \epsilon_{i-1}^N) + \nu \left((\Sigma_{f1} - \alpha T_i^\infty) v \epsilon_i^N - \alpha \cdot v \cdot \eta_i^N n_i^\infty - \alpha \cdot v \cdot \eta_i^N \epsilon_i^N \right) - \Sigma_a \cdot v \epsilon_i^N$$

L'équation est ensuite linéarisée en considérant que le terme $\eta_i^N \epsilon_i^N$ est du second ordre et qu'il peut être négligé. Formellement, la décomposition de n_i^N en $n_i^\infty + \epsilon_i^N$ correspond dans la théorie des perturbations à un développement perturbatif tronqué au premier ordre autour de la solution d'équilibre. Le même calcul peut être mené pour l'équation de la température. Le système d'évolution des perturbations au premier ordre correspond finalement à :

$$\begin{cases} \frac{\epsilon_i^{N+1} - \epsilon_i^N}{\Delta t} = \frac{Dv}{\Delta x^2} (\epsilon_{i+1}^N - 2\epsilon_i^N + \epsilon_{i-1}^N) + (\nu(\Sigma_{f1} - \alpha T_i^\infty) - \Sigma_a) v \epsilon_i^N - \nu \alpha \cdot v \cdot \eta_i^N n_i^\infty \\ \rho C_p \left(\frac{\eta_i^{N+1} - \eta_i^N}{\Delta t} \right) = Q \left(\Sigma_{f1} - \alpha \cdot v \cdot T_i^\infty \epsilon_i^N - \alpha \cdot v \cdot \eta_i^N n_i^\infty \right) \end{cases} \quad (\text{A.20})$$

En remplaçant T_i^∞ par son expression dépende de n_i^∞ , le système d'équation d'évolution des perturbations se simplifie en :

$$\begin{cases} \frac{\epsilon_i^{N+1} - \epsilon_i^N}{\Delta t} = \frac{Dv}{\Delta x^2} (\epsilon_{i+1}^N - 2\epsilon_i^N + \epsilon_{i-1}^N) + \left(\nu \frac{\ddot{q}}{Q \cdot v \cdot n_i^\infty} - \Sigma_a \right) v \epsilon_i^N - \nu \alpha \cdot v \cdot \eta_i^N n_i^\infty \\ \rho C_p \left(\frac{\eta_i^{N+1} - \eta_i^N}{\Delta t} \right) = Q \left(\frac{\ddot{q}}{Q \cdot n_i^\infty} \epsilon_i^N - \alpha \cdot v \cdot \eta_i^N n_i^\infty \right) \end{cases} \quad (\text{A.21})$$

Ce qui peut être matriciellement s'écrit comme :

$$\begin{pmatrix} \epsilon_i \\ \vdots \\ \eta_i \\ \vdots \end{pmatrix}^{N+1} = \begin{pmatrix} A_1 & B_1 & & & & & C_2 & & & & \\ B_1 & A_1 & B_1 & & & & & C_2 & & & \\ & B_1 & A_1 & B_1 & & & & & C_2 & & \\ & & B_1 & A_1 & B_1 & & & & & C_2 & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \\ C_1 & & & & & & A_2 & & & & \\ & C_1 & & & & & & A_2 & & & \\ & & C_1 & & & & & & A_2 & & \\ & & & C_1 & & & & & & A_2 & \\ & & & & C_1 & & & & & & A_2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \epsilon_i \\ \vdots \\ \eta_i \\ \vdots \end{pmatrix}^N$$

Avec :

$$\begin{cases} A_1 = 1 + (\nu \frac{\ddot{q}}{Q \cdot v \cdot n_i^\infty} - \Sigma_a - \frac{2D}{\Delta x^2}) \cdot v \cdot \Delta t \\ B_1 = \frac{D \cdot v \cdot \Delta t}{\Delta x^2} \\ C_1 = \frac{\ddot{q} \cdot \Delta t}{\rho C_p n_i^\infty} \\ A_2 = 1 - \frac{Q \cdot \alpha \cdot v \cdot n_i^\infty \cdot \Delta t}{\rho C_p} \\ C_2 = \nu \cdot \alpha \cdot v \cdot n_i^\infty \Delta t \end{cases}$$

Avec le vecteur n_i^∞ solution du système :

$$\begin{pmatrix} D & E & & & \\ E & D & E & & \\ & E & D & E & \\ & & E & D & E \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \vdots \\ n_i^\infty \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{-\nu \ddot{q}}{Q} \\ \vdots \\ \frac{-\nu \ddot{q}}{Q} \end{pmatrix}$$

Où :

$$\begin{cases} D = -(\Sigma_a + \frac{2 \cdot D}{\Delta x^2}) \\ E = \frac{D}{\Delta x^2} \end{cases}$$

L'étude des valeurs propres de la matrice des perturbations au premier ordre est analytiquement difficile, c'est pourquoi la poursuite de cette étude est menée numériquement sur un exemple concret. Les données de diffusions utilisées pour le réacteur 1D ainsi que les propriétés thermiques sont données dans le tableau A.2. Elles sont choisies de manière à modéliser au plus près le cas d'un REP. Notons que la constante Q qui permet le passage du taux de fission à la source volumique de puissance ne correspond pas à la valeur physique ($\approx 1.6 \times 10^{-13} \text{ J} \cdot \text{fission}^{-1}$). Le choix de la valeur de Q a une incidence uniquement sur l'amplitude des densités neutroniques.

variables	ν	$\Sigma_a \text{ (cm}^{-1}\text{)}$	$\Sigma_f \text{ (cm}^{-1}\text{)}$	$D \text{ (cm)}$	$v \text{ (cm} \cdot \text{s}^{-1}\text{)}$	$\alpha \text{ (cm}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}\text{)}$	$T_0 \text{ (K)}$
valeurs	2.5	2.2394×10^{-2}	1.2272×10^{-2}	1.3186	2.25581×10^6	5×10^{-4}	1000
variables		$\rho \text{ (kg} \cdot \text{cm}^{-3}\text{)}$	$C_p \text{ (J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}\text{)}$	$\ddot{q} \text{ (W} \cdot \text{cm}^{-3}\text{)}$	$Q \text{ (J} \cdot \text{fission}^{-1}\text{)}$		
valeurs		10^4	320	300.0	1.0837×10^{-2}		

Tableau A.2: Données de diffusion et données thermiques utilisées pour le couplage théorique simplifié.

Le calcul des valeurs propres est réalisé avec le logiciel *sagemath*. La matrice des perturbations est construite après avoir résolu le système donnant accès au vecteur \vec{n}^∞ . L'écart à l'unité de la plus grande des valeurs propres en fonction des pas de temps et du pas d'espace est présenté figure A.11.

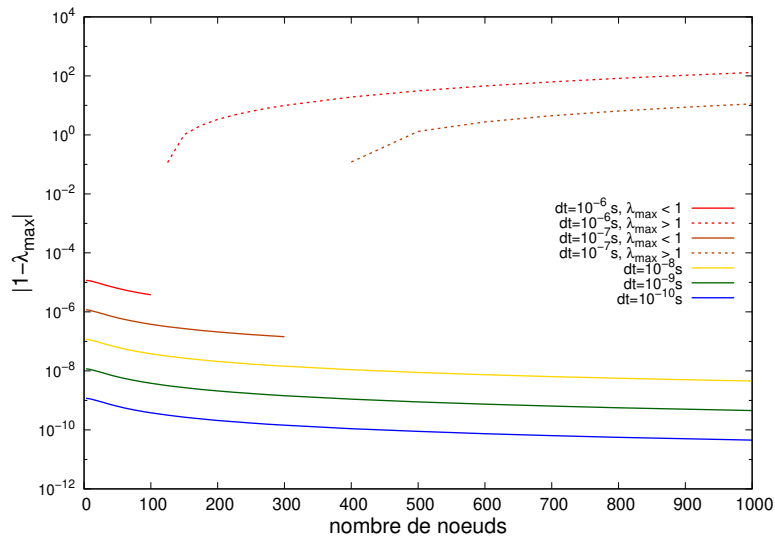


FIGURE A.11: Évolution de l'écart à l'unité de la plus grande valeur propre de la matrice d'évolution des perturbations au premier ordre d'un cœur 1D couplé en neutronique/thermohydraulique, en fonction des pas de temps et d'espace. Notons que dans cette étude la plus grande des valeurs propres est en dessous de l'unité.

La plus grande des valeurs propres du système se trouve juste en dessous de l'unité, **le schéma couplé est donc stable**. Cette stabilité est toutefois conditionnelle car lorsque le maillage spatial devient trop fin par rapport au pas de temps utilisé, le schéma diverge (cf. condition de stabilité d'un schéma diffusif pur). L'utilisation d'un faible pas de temps a tendance à rendre le schéma plus stable. A contrario, le raffinement spatial tend à rapprocher la plus grande valeur propre de l'unité. Notons que l'application d'une correction de criticité n'est pas nécessaire dans ce modèle, en effet l'excès (ou le défaut) de réactivité lié aux données de diffusion est compensé par l'ajustement des températures de chaque nœud.

La figure A.12 rend compte de l'évolution de la plus grande valeur propre en fonction du paramètre α qui représente la force du couplage entre la neutronique et la thermique. Pour un $\alpha = 10^{-6} \text{ cm}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$, il sera nécessaire d'avoir un écart de température $T - T_0$ d'environ 1000 K pour diminuer significativement la section efficace de fission. L'étude montre que plus le couplage est fort, plus le schéma est stable. Cependant, dans le cas d'un couplage relativement faible, le schéma ne perd pas ses propriétés de stabilité.

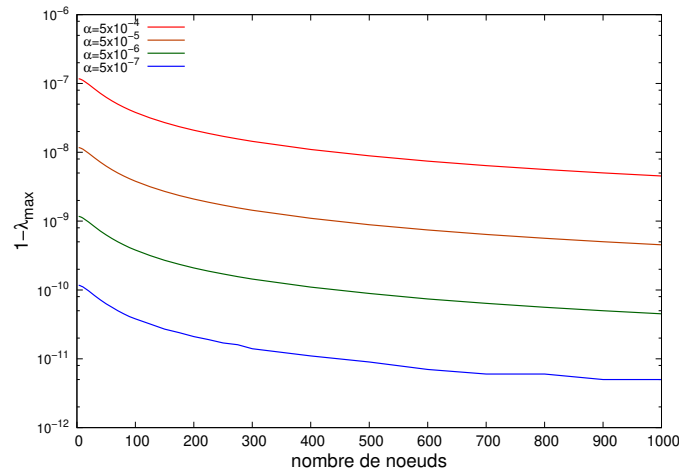


FIGURE A.12: Évolution de la plus grande valeur propre en fonction de l'intensité du couplage (paramètre α du modèle) et de la discrétisation spatiale. Le pas de temps est ici fixé à 10^{-8} s.

La stabilité du schéma numérique développé est vérifiée « expérimentalement » en implémentant le modèle numérique précédemment décrit. Le cœur considéré a ici une largeur de 200 cm, représentée par 40 nœuds. Le pas de temps utilisé est de 10^{-8} s. Dans un premier temps l'état stationnaire du cœur est recherché en laissant les températures et le flux libres d'évoluer de façon à compenser l'excès (respectivement le défaut) de réactivité initial.

La figure A.13 présente l'évolution, durant la mise à l'équilibre, de la réactivité, de la densité moyenne de neutron sur l'ensemble du cœur ainsi que la température moyenne du cœur. Comme le montre le portrait de phase densité neutronique/température, le système converge naturellement vers son point d'équilibre et ce en l'absence de normalisation (des flux et des températures) ce qui tend à montrer qu'il n'existe pas d'instabilités fortes.

Notons la faible inertie de la neutronique en comparaison de la thermique. La densité neutronique moyenne évolue sur plusieurs ordres de grandeur alors que la plage d'évolution de la température moyenne est de l'ordre de quelques kelvins.

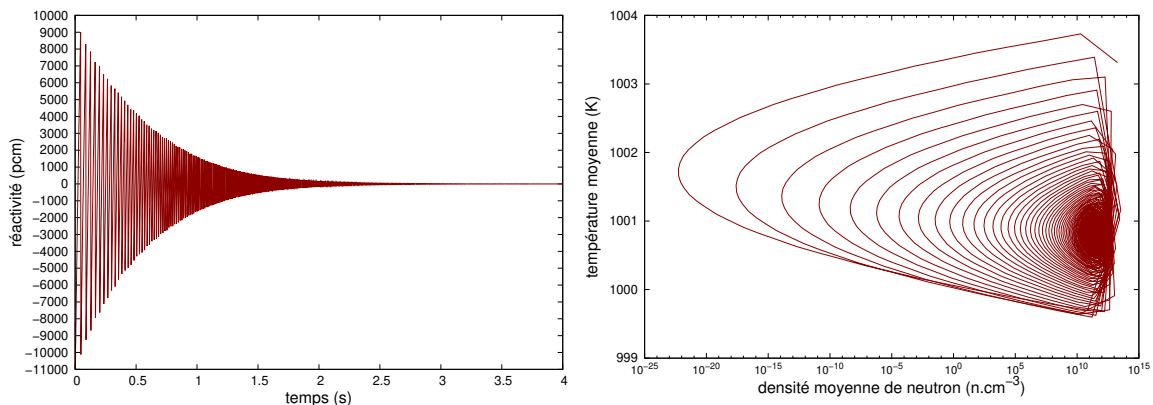


FIGURE A.13: Mise à l'équilibre du cœur 1D avec couplage théorique simplifié neutronique/thermohydraulique. Résultats obtenus avec $Q = 1.6 \times 10^{-13} \text{ J} \cdot \text{fission}^{-1}$

Le système est considéré à l'équilibre lorsque la réactivité est inférieur à 10^{-10} pcm, ce qui représente un temps de mise à l'équilibre d'environ 7 s. Une fois l'équilibre atteint, le système est à nouveau laissé libre d'évoluer sur une durée de 100 s soit 10^{10} itérations. Ce temps long de simulation laisse à des faibles instabilités numériques (i.e. $\lambda_{\max} - 1 = 10^{-10}$) l'opportunité de se

développer.

Toutes les 1 secondes, le profil de flux et de température est comparé à celui obtenue à l'issue de la mise à l'équilibre. La différence moyenne sur les nœuds d'un profil est calculée comme :

$$\bar{\epsilon} = \frac{\sum_{i=0}^{I=40} \frac{|n_i^N - n_i^0|}{n_i^0}}{I}$$

Dans un premier temps le cœur achève sa mise à l'équilibre jusqu'à obtenir une réactivité positive d'environ 9.48×10^{-9} pcm. Pour un même système sans contre-réactions thermiques mais qui utilise une correction de criticité (calculée itérativement), la réactivité cesse d'évoluer dès que la correction de criticité est fixée. Le faible écart (positif) à la criticité conduit sur des temps longs au développement des instabilités numériques et donc à la divergence du flux.

Une seconde après la mise à l'équilibre, la différence (i.e. $\bar{\epsilon}$) sur les profils de densité neutronique et de température se stabilise respectivement à : 2.69×10^{-06} et 2.06×10^{-13} . Ces différences sont calculées avec une précision de 10^{-17} digits. Elles restent inchangées durant les 99 autres secondes de l'évolution.

Les erreurs numériques n'ont pas cessé de se produire à chaque itération, mais le schéma numérique empêche leur développement. Dans cette configuration de cœur, cela implique une réactivité résiduelle qui n'est pas exactement nulle. En conclusion, cette « expérience numérique » a permis de constater la stabilité numérique du schéma proposé.

A.1.8 Conclusion sur la stabilité des équations de la diffusion neutronique pour les méthodes aux différences finies

L'application de l'analyse de stabilité de Von Neumann à l'équation de la diffusion révèle que l'évolution de l'erreur numérique est identique à celle du flux. Ainsi, seul les cas convergents physiquement sont numériquement stables. La criticité apparaît comme un cas limite où l'erreur numérique est conservée sans jamais disparaître.

Il a été mis en avant que ce n'est pas le schéma d'intégration temporel qui est à l'origine de l'instabilité mais plutôt la présence d'un terme source non constant, directement proportionnel au flux (i.e. $\nu \Sigma_f \phi$). Pour les méthodes explicites, l'utilisation d'un pas de temps supérieurs au pas de temps maximum d'un schéma purement diffusif conduit à une divergence brutale du système.

Bien que la méthode IRIS permette de ramener un cœur à la criticité, la correction de criticité ainsi calculée reste entachée d'une erreur qui implique la présence d'une réactivité résiduelle. En pratique, cette réactivité résiduelle ne constitue pas un réel problème pour la simulation de transitoires tant que les changements en réactivité sont plus importants que cette dernière et/ou que les durées simulées ne sont pas trop longues (inférieur à la seconde). En théorie cependant, il est important de prouver qu'il existe un schéma numérique stable pour modéliser le réacteur afin de s'assurer que les équations discrétisées sont bien une approximation des équations continues.

La stabilité physique et numérique étant confondue dans le cas particulier de l'équation de la diffusion neutronique, il est nécessaire d'introduire des contre-réactions négatives (i.e. stabilisatrices) afin de rendre le schéma stable. Physiquement ce rôle est occupé par le couplage à la thermique. Nos études ont permis de démontrer sur un cas particulier la stabilité du schéma couplé lorsque ce dernier est proche de l'équilibre. Cette stabilité conditionnelle, est renforcée dans le cas d'un couplage fort entre neutronique et thermique. Enfin, mentionnons que ce travail vient à la fois compléter et confirmer l'analyse menée sur la cinétique point que l'on peut trouver dans la littérature [110].

A.2 Étude de la convergence spatiale du maillage de la NDM sur la configuration du minicore

Lorsque le schéma numérique est stable, la convergence du maillage spatio-temporel (i.e. $\Delta x \rightarrow 0$ et $\Delta t \rightarrow 0$) assure que la solution numérique tend vers la solution analytique de l'équation. Dans cette étude nous nous proposons de déterminer le degré de discrétisation nécessaire pour considérer le maillage comme convergé.

La sensibilité au découpage en énergie est également évaluée grâce à l'utilisation de jeux de sections efficaces à 1 groupes, 2 groupes, 4 groupes et 8 groupes respectivement noté 1G, 2G, 4G, 8G. Les bornes des intervalles des groupes d'énergie du découpage 4G et 8G correspondent aux découpages »CASMO 4-groupes structure » et »CASMO 8-groupes structure », prédéfinis dans *Serpent2*.

Le second objectif de cette étude est d'estimer la précision d'une résolution par différences finies de l'équation de la diffusion vis-à-vis d'un calcul en transport mené par *Serpent2*.

A.2.1 Étude sur une représentation 2D du minicore

La configuration utilisée est celle du minicore où les grappes de contrôles sont pleinement insérées dans l'assemblage UOX. Les résultats comparés correspondent à la nappe de flux assemblage par assemblage. ON considère la solution fournie par *Serpent2* comme étant la solution de référence. Les résultats de la NDM sont obtenus à partir des sections efficaces calculées par *Serpent2* dans chaque assemblage. Par soucis de simplicité, seule une modélisation 2D (autant pour la NDM que pour *Serpent2*) est utilisée.

Après avoir normalisé les nappes de flux à l'unité, la différence entre les résultats de la NDM et ceux de *Serpent2* est évaluée par la variable erreur calculée comme :

$$err_{tot} \% = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^N \frac{|\phi_{NDM}^i - \phi_{Serpent}^i|}{\phi_{Serpent}^i}$$

avec :

- $err_{tot} \%$ la différence totale moyenne entre les deux nappes de flux.
- N le nombre d'assemblages du cœur (les réflecteurs sont alors considérés comme des assemblages).
- ϕ_{NDM} le flux total de chaque assemblage calculé par la NDM. Il correspond à la somme des flux dans chaque groupe d'énergies et en chaque nœud constitutif de l'assemblage, ($neutron \cdot cm^{-2} \cdot s^{-1}$).
- $\phi_{Serpent}$ le flux total calculé dans l'assemblage par *Serpent2*, ($neutron \cdot cm^{-2} \cdot s^{-1}$).

La figure A.14 présente l'erreur moyenne total à l'échelle du cœur complet (figure (a)), uniquement sur l'assemblage du centre (figure (b)) ainsi que celle dans l'ensemble des zones périphériques (ici le réflecteur, figure (d)). Comme le montre l'ensemble de ces figures, l'erreur diminue très fortement lors du passage de 1×1 nœuds par assemblage à 2×2 nœuds. L'effet est particulièrement notable pour la modélisation à 2 groupes en énergie où l'erreur globale atteint un minimum de 2%. Cependant ce bon accord est sans doute fortuit car issue d'une compensation d'erreur entre la grossièreté du maillage et les approximations de la diffusion à 2 groupes. En effet, lorsque la discrétisation croît, l'erreur augmente à nouveau fortement avant de se stabiliser. Cela tend à montrer que ce bon accord n'est que transitoire et que le maillage n'est pas convergé avec 2×2 nœuds par assemblage. De plus, rien ne garantit que ce maillage non convergé reste le meilleur lors de transitoires ou dans différents états du cœur (e.g. grappes, évolution, à froid, etc...) Enfin, rappelons que c'est lorsque le maillage est le plus fin que les schémas en différences finies s'approchent au plus près de la solution analytique des équations.

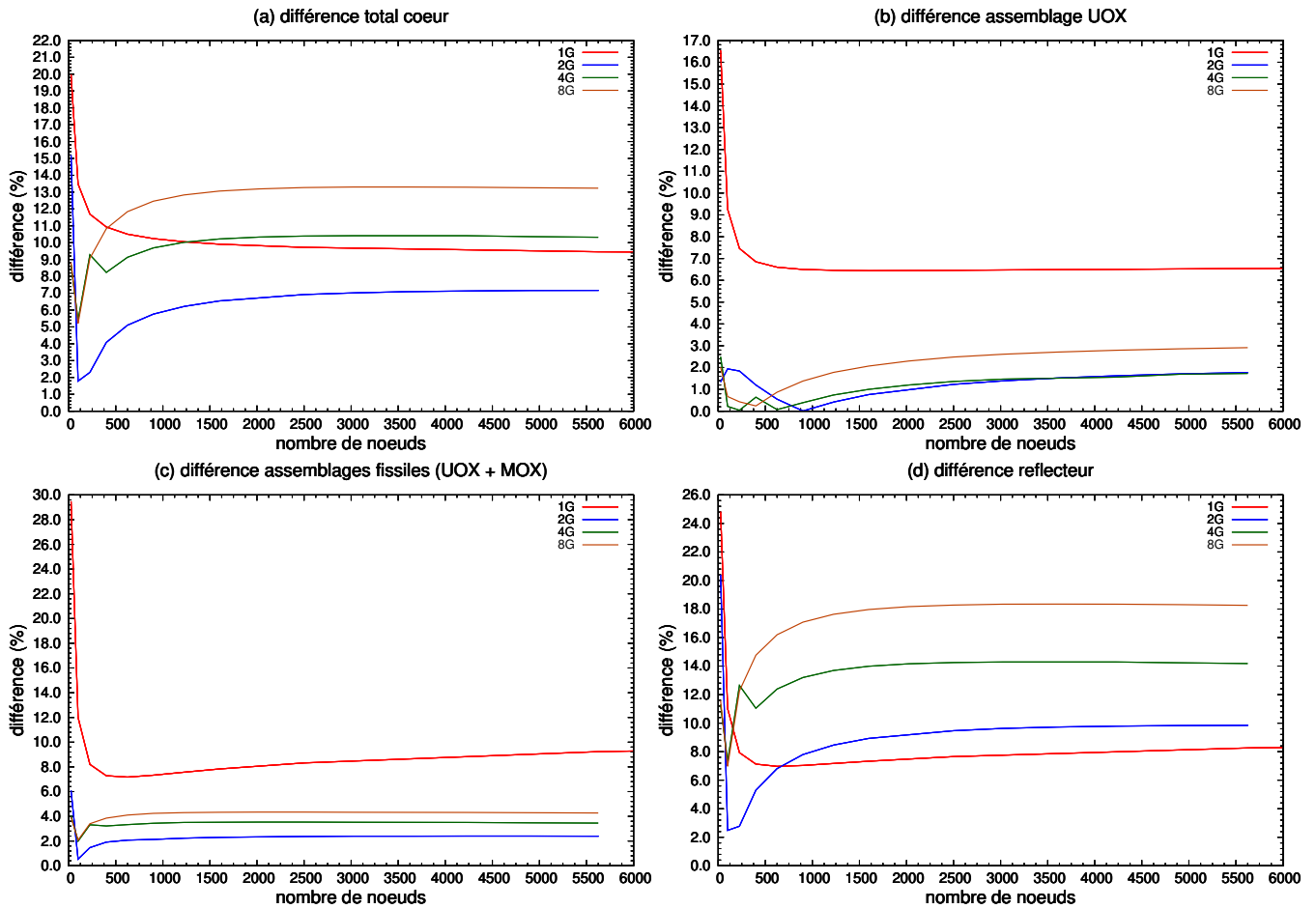


FIGURE A.14: Différence relative sur le flux à l'échelle assemblage entre une simulation *Serpent2* et un calcul NDM pour différents maillages spatiaux et différents découpages en énergie.

A partir d'environ 6×6 nœuds par assemblages (soit 900 nœuds sur les figures A.14) le maillage peut être considéré comme convergé. Mais ce n'est qu'à partir de 10×10 nœuds par assemblages (soit 2500 nœuds sur les figures A.14) que le maillage semble réellement convergé. Pour le découpage 1G le raffinement du maillage a été poussé jusqu'à 20×20 nœuds par assemblages pour s'assurer de cette convergence. Asymptotiquement, l'utilisation de la diffusion avec respectivement 1G, 2G, 4G, 8G groupes en énergie entraîne respectivement environ 9%, 7%, 10%, 13% d'erreur moyenne par rapport à un calcul en transport,

La figure A.14 (d) montre que la différence sur le flux commise dans la région du réflecteur est de plus en plus importante lors du raffinement des groupes en énergie (jusqu'à environ 20% pour un calcul à 8 groupes). Comme le montre l'examen des longueurs de migration (cf. tableau A.3), c'est dans la théorie monocinétique que s'appliquent le mieux les hypothèses de la diffusion. Lors de l'utilisation d'une structure fine en énergie, la longueur de migration, c'est à dire la longueur caractéristique entre deux diffusions, devient plus grande que la taille de la zone représentée par le jeu de section efficace. Ainsi, pour ces groupes rapides, la zone simulée devient trop petite pour pouvoir considérer que les neutrons aient un mouvement d'ensemble diffusif.

groupe	zone	Longueur de migration du groupe rapide au groupe thermique, (cm)							
1G	UOX	7.70							
	MOX	7.40							
	REFL	8.05							
2G	UOX	12.2				1.71			
	MOX	11.3				1.14			
	REFL	44.8				2.90			
4G	UOX	27.8	22.6	5.18		1.71			
	MOX	26.6	22.4	4.68		1.14			
	REFL	110	223	18.0		2.90			
8G	UOX	27.9	22.7	5.16	5.27	2.96	2.14	1.61	0.97
	MOX	26.6	22.5	5.00	3.61	1.42	1.02	1.19	0.85
	REFL	111	223	26.8	9.77	5.96	4.35	3.15	1.85

Tableau A.3: Longueur de diffusion ($\sqrt{\frac{D}{\Sigma_{abs}}}$) calculée pour différents découpages énergétiques des trois types de zones du minicore.

Ces considérations indiquent que l'utilisation d'un découpage à deux groupes en énergie est optimale sur la configuration du minicore. Une discrétisation énergétique plus fine n'est pas pertinente puisqu'elle ne respecte plus les conditions de validité de la diffusion. Les zones ainsi mal modélisées en multigroupe conduisent à dégrader la nappe de flux du cœur jusqu'à la rendre moins précise que celle d'une simulation à seul groupe d'énergie.

A.2.2 Cas idéalisé : minicore UOX

L'analyse de la longueur de migration a révélé que la théorie de la diffusion neutronique n'est pas adaptée pour le calcul du flux dans le réflecteur. Cette nouvelle étude se propose de quantifier le degré de précision de la théorie de la diffusion neutronique sur un cas idéal vis-à-vis de ses approximations. Comme précédemment divers degrés de raffinement du maillage sont considérés ainsi que plusieurs découpages en énergie.

La configuration étudiée, appelée minicore UOX dans la suite, est présentée par la figure A.15. Le minicore UOX est un cœur carré de 25 assemblages identiques. L'assemblage UOX utilisé est défini tel que celui présenté dans la version originale du minicore [54]. Les grappes de contrôle sont entièrement insérées dans ces assemblages. L'étude est menée pour une représentation 2D du cœur.

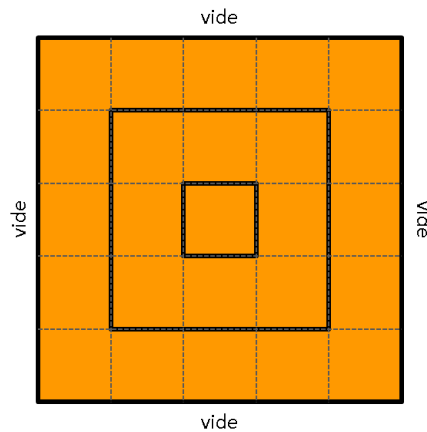


FIGURE A.15: Représentation schématique du minicœur UOX. L'ensemble des assemblages du minicœur (réflecteurs inclus) a été remplacé par des assemblages de types UOX (tel que défini dans le benchmark [54]), avec grappe de contrôle entièrement insérée.

La figure A.16 permet de constater que sur un cœur très homogène (i.e. un seul type d'assemblage) l'utilisation de plusieurs groupes d'énergie apporte un gain en précision modeste (moins de 0.5% d'amélioration des différences sur l'ensemble du cœur pour un maillage convergé). Ce constat souligne qu'un découpage énergétique fin a surtout pour des géométries complexes composés de milieux neutroniquement différents.

Comme précédemment, une convergence grossière du maillage est constatée pour un découpage d'environ 7×7 nœuds (soit environ 1500 nœuds en cœur) par assemblage. On y constate alors une erreur de l'ordre de 4 – 5%, du même ordre de grandeur que l'erreur asymptotique constaté une fois le maillage complètement convergé.

Soulignons que le bon accord précédemment constaté pour le cas 2G avec une discrétisation de 2×2 nœuds par assemblage n'est pas retrouvé dans cette configuration. Cela confirme que ce résultat était issu de compensation d'erreurs.

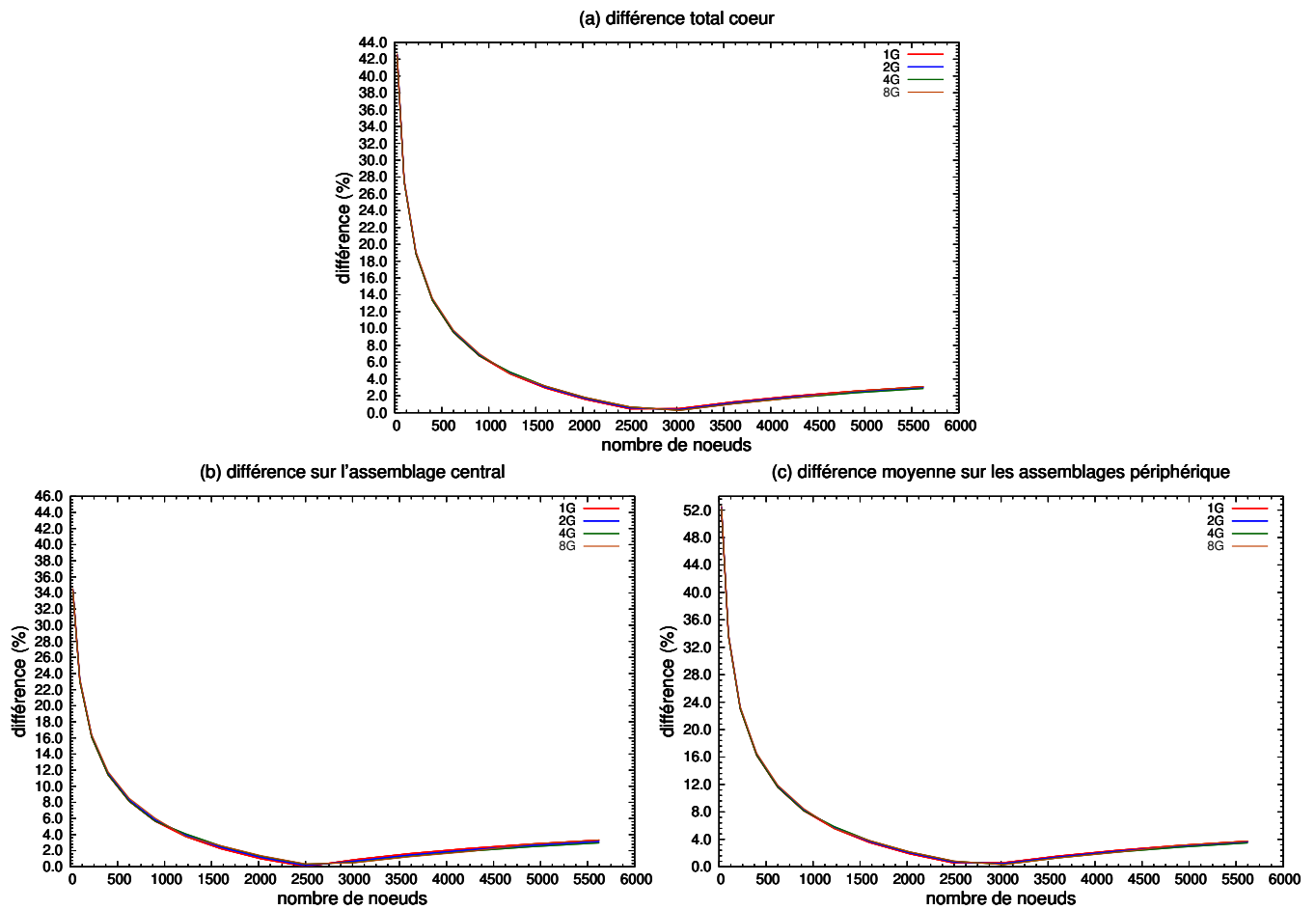


FIGURE A.16: Différence relative commise entre une résolution par transport (via *Serpent2*) et par diffusion neutronique (via la NDM) sur le minicore 100% UOX. Plusieurs degré de discrétisation du maillage sont considérés pour le calcul par la NDM, ainsi que plusieurs groupes en énergie. Les assemblages périphériques correspondent à la ceinture d'assemblages la plus externe du coeur.

A.3 Calcul du laplacien en différences finies

Les équations de la diffusion neutronique font intervenir un terme de diffusion pour modéliser les échanges spatiaux de flux entre les régions du réacteur. Mathématiquement, ce terme de diffusion s'exprime comme $div(\vec{g}rad(D \cdot \phi))$, où D est le coefficient de diffusion et ϕ le flux neutronique. Dans le cas d'un milieu où le coefficient de diffusion est constant, le terme de fuite volumique peut également s'écrire comme : $D\Delta\phi$, où $\Delta()$ désigne l'opérateur laplacien.

La NDM utilise une formule de différences finies (noté DF dans la suite) la plus simple possible pour modéliser numériquement ce terme. Dans la suite, la démonstration de cette expression numérique est rappelée. Cependant, d'autres formulations du laplacien sont possibles en DF. L'intérêt de ces formules alternatives est discuté dans la suite.

Enfin, cette annexe développe une formulation en DF du terme de fuite qui prend en compte de façon rigoureuse la variabilité spatiale du coefficient de diffusion dans le terme de fuites volumiques.

A.3.1 Discrétisation du laplacien en différences finies

Le laplacien (Δ) est un opérateur mathématiques définit comme :

$$\Delta(\phi) = \sum_{\forall i} \frac{\partial^2 \phi}{\partial r_i^2}$$

Avec $\phi(\vec{r})$, le flux neutronique dépend de l'espace, ici considéré infiniment dérivable et continu en tout point. Dans la suite on note $\partial_{xx}\phi$ la dérivée seconde de ϕ par rapport à x .

L'expression en DF de cet opérateur se déduit d'un développement de Taylor du flux en chaque point selon chaque dimension de l'espace. Dans le cas d'une géométrie 2D, on aboutit aux expressions suivantes :

$$\phi_{i+1,j} = \phi_{i,j} + h \cdot \partial_x \phi_{i,j} + \frac{1}{2} \cdot h^2 \cdot \partial_{xx} \phi_{i,j} + \frac{1}{6} \cdot h^3 \cdot \partial_{xxx} \phi_{i,j} + \frac{1}{24} \cdot h^4 \cdot \partial_{xxxx} \phi_{i,j} + \mathcal{O}(h^5)$$

$$\phi_{i-1,j} = \phi_{i,j} - h \cdot \partial_x \phi_{i,j} + \frac{1}{2} \cdot h^2 \cdot \partial_{xx} \phi_{i,j} - \frac{1}{6} \cdot h^3 \cdot \partial_{xxx} \phi_{i,j} + \frac{1}{24} \cdot h^4 \cdot \partial_{xxxx} \phi_{i,j} + \mathcal{O}(h^5)$$

Avec h le pas d'espace dans la dimension x . En combinant ces différents développements limités, il est possible d'isoler les termes correspondant aux dérivées d'ordre 2 en espace :

$$\phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} = 2(\phi_{i,j} + \frac{1}{2} \cdot h^2 \cdot \partial_{xx} \phi_{i,j} + \frac{1}{24} \cdot h^4 \cdot \partial_{xxxx} \phi_{i,j} + \mathcal{O}(h^6))$$

$$\phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} - 2 \cdot \phi_{i,j} = h^2 \cdot \partial_{xx} \phi_{i,j} + \frac{1}{12} \cdot h^4 \cdot \partial_{xxxx} \phi_{i,j} + \mathcal{O}(h^6)$$

d'où :

$$\partial_{xx} \phi_{i,j} = \frac{\phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} - 2 \cdot \phi_{i,j}}{h^2} - \frac{1}{12} \cdot h^2 \cdot \partial_{xxxx} \phi_{i,j} + \mathcal{O}(h^4)$$

$$\partial_{xx} \phi_{i,j} = \frac{(\phi(i+1, j) + \phi(i-1, j) - 2 \cdot \phi(i, j))}{h^2} + \mathcal{O}(h^2)$$

Il en va de même pour chaque dimension d'espace. En sommant l'expression de chacune des dérivées secondes en espace on obtient la formulation en différence finie du laplacien :

$$\Delta\phi_{i,j} = \partial_{xx}\phi_{i,j} + \partial_{yy}\phi_{i,j} + (\phi(i+1, j) + \phi(i-1, j) - 2 \cdot \phi(i, j))h_x^2 + (\phi(i, j+1) + \phi(i, j-1) - 2 \cdot \phi(i, j))h_y^2 + \mathcal{O}(h_x^2) + \mathcal{O}(h_y^2)$$

Cette approximation numérique est alors en $\mathcal{O}(h^2)$ ce qui signifie qu'elle est d'ordre 2. L'ordre de la méthode est un indicateur de la précision du développement limité. Plus particulièrement il exprime le fait que si l'on divise le pas de discrétisation par 2 alors la précision devrait augmenter d'un facteur 4.

Pour construire cette formule en DF, seuls les 4^{er} premiers voisins du point (i, j) ont été utilisés. Ce schéma est donc appelé schéma 5-points.

$$\begin{array}{ccccc} & & (i,j+1) & & \\ (i-1,j) & & (i,j) & & (i+1,j) \\ & & (i,j-1) & & \end{array}$$

Tableau A.4: Schéma 5-points généralement utilisé en 2D

La prise en compte du nouvelle dimension d'espace (i.e. 3D) se traduit par l'ajout de deux nouveaux points dans le schéma de calcul du laplacien, on parle alors de schéma 7-points.

A.3.2 Formulations alternatives de l'opérateur laplacien en différence finies

Les formules de DF précédemment développées pour le calcul numérique du laplacien permettent la propagation de l'information uniquement de nœud proche voisin en nœud proche voisin. Cette approximation privilégie certaine direction de propagation de l'information, ce qui peut sur des temps courts ou des maillages trop grossiers, mène à un comportement cinétique différent de celui représenté par les équations.

Pour résoudre ce problème d'anisotropie de propagation de l'information, d'autres formules DF peuvent-être développées. Ces schémas sont d'ordre plus élevé ce qui se traduit par la prise en compte d'un nombre de nœuds voisins plus important. Les formules aux différences finies ainsi construites sont appelées HOC, pour *High Order Compact Stencil Scheme*.

Schéma à 9-points en 2D (9-points $\mathcal{O}(2)$)

Un premier schéma à 9-points consiste à tenir compte des 8 voisins d'un nœud du maillage (cf. A.5)

$$\begin{array}{ccccc} (i-1,j+1) & (i,j+1) & (i+1,j+1) & & \\ (i-1,j) & (i,j) & (i+1,j) & & \\ (i-1,j-1) & (i,j-1) & (i+1,j-1) & & \end{array}$$

Tableau A.5: Schéma 9-points

Comme toujours, la formulation numérique de l'opérateur laplacien se déduit de la combinaison des développements limités (DL) en chaque nœud voisin du point d'intérêt (ici noté (i, j) et nommé point central). Par exemple au nœud de coordonnée $(i+1, j+1)$ le DL s'écrit :

$$\begin{aligned} u_{i+1,j+1} &= u_{i,j} + h \cdot \partial_x u + h \cdot \partial_y u \\ &+ \frac{1}{2} \cdot h^2 \cdot (\partial_{xx} u + 2 \cdot \partial_x \partial_y u + \partial_{yy} u) \\ &+ \frac{1}{6} \cdot h^3 \cdot (\partial_{xxx} u + 3 \cdot \partial_{xx} \partial_y u + 3 \cdot \partial_x \partial_{yy} u + \partial_{yyy} u) \\ &+ \dots \end{aligned}$$

Ces calculs peuvent être automatisés en remarquant que pour un ordre de dérivation donnée, les pondérations de chaque dérivée partielle sont données par la $n^{\text{ième}}$ ligne du triangle de Pascal² multiplié par un coefficient $\frac{1}{n!}$. Les développements limités sont ensuite sommés sur l'ensemble des points jouant le même rôle autour du point central (position équivalente par rotation). Cela donne pour les points plus proches voisins (ou points normaux vis-à-vis du point central) :

$$\begin{aligned} \sum DL_{norm} &= u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1} = \\ &4 \cdot u_{i,j} + 2 \cdot \frac{h^2}{2} \cdot (\partial_{xx}u + \partial_{yy}u) + 2 \cdot \frac{h^4}{24} \cdot (\partial_{xxxx}u + \partial_{yyyy}u) + \mathcal{O}(h^6) \end{aligned}$$

Et pour les points diagonaux :

$$\begin{aligned} \sum DL_{diag} &= u_{i+1,j+1} + u_{i+1,j-1} + u_{i-1,j+1} + u_{i-1,j-1} = \\ &4 \cdot u_{i,j} + 4 \cdot \frac{h^2}{2} \cdot (\partial_{xx}u + \partial_{yy}u) + 4 \cdot \frac{h^4}{24} \cdot (\partial_{xxxx}u + 6 \cdot \partial_{xxyy}u + u\partial_{yyyy}u) + \mathcal{O}(h^6) \end{aligned}$$

La sommation des DL par couple de points symétriques par rapport au point central fait disparaître les termes d'ordre impaire. L'utilisation des points diagonaux fait apparaître un nouveau terme : $\partial_x\partial_y$ qui n'existait pas dans les DL aux points normaux. Cette nouvelle source d'erreur ne pourra donc pas être annulée par simple combinaison entre les DL normaux et diagonaux.

Cependant la combinaison $4 \cdot \sum DL_{norm} + \sum DL_{diag}$ permet une factoriser des termes d'erreur d'ordre 4 d'une façon intéressante :

$$\sum_{i'=-1}^1 \sum_{j'=-1}^1 u_{i+i',j+j'} - 20 \cdot u_{i,j} = 12 \cdot \frac{h^2}{2} (\partial_{xx}u + \partial_{yy}u) + 12 \cdot \frac{h^4}{4} (\partial_{xxxx}u + 2 \cdot \partial_{xxyy}u + \partial_{yyyy}u)$$

Où les termes d'ordre 4 peuvent alors s'écrire :

$$d^2(\partial_{xx}u + \partial_{yy}u) = \partial_{xxxx}u + 2 \cdot \partial_{xxyy}u + \partial_{yyyy}u$$

soit :

$$\partial_{xxxx}u + 2 \cdot \partial_{xxyy}u + \partial_{yyyy}u = \Delta(\Delta u)$$

L'erreur de troncature sur le laplacien correspond alors au laplacien du laplacien. Cette relation présente un avantage important dans le cadre de la résolution de l'équation de Laplace : $\Delta u = 0$. Les termes d'ordre 4 disparaissent alors et le schéma devient d'ordre 4 ($\mathcal{O}(\frac{h^6}{h^2})$). D'après **REF**, cette conclusion reste valable lorsque l'on résout l'équation de poisson ($\Delta u = f$) car l'erreur diminuera proportionnellement à $\mathcal{O}(h^4)$.

Le schéma à 9-points finalement retenu est explicité tableau A.6. Pour un terme source fixé, l'équation de la diffusion peut être considérée comme analogue à l'équation de poisson, on peut donc espérer avoir un schéma numérique de meilleure qualité bien que formellement l'ordre de la formule en DF soit toujours d'ordre 2. Dans la suite on référera à ce schéma comme celui de l'opérateur 9-points $\mathcal{O}(2)$.

Schéma à 9-points en 2D sans points diagonaux (9-points $\mathcal{O}(4)$)

Une façon beaucoup plus directe de construire un laplacien qui soit véritablement d'ordre 4 consiste à étendre le schéma 5-points dans les principales directions du repère du maillage (cf. Schema9PointStencils-o4).

1/6	4/6	1/6
4/6	-20/6	4/6
1/6	4/6	1/6

Tableau A.6: Pondération de chacun des nœuds voisins dans un schéma 9-points. Ne pas oublier de diviser par h^2 pour calculer le laplacien

		(i, j+2)		
		(i, j+1)		
(i-2,j)	(i-1,j)	(i,j)	(i+1,j)	(i,j+2)
		(i, j-1)		
		(i, j-2)		

Tableau A.7: Schéma 9-points

		1/12		
		16/12		
1/12	16/12	-60/12	16/12	1/12
		16/12		
		1/12		

Tableau A.8: Pondération de chacun des nœuds voisins dans un schéma 9-points. Ne pas oublier de diviser par h^2 pour calculer le laplacien

La prise en compte des DL aux points $(i, j + 2)$, $(i, j - 2)$, $(i + 2, j)$ et $(i - 2, j)$ présente l'avantage de ne pas introduire de termes aux dérivées partielles. La pondération qu'il faut associer à chaque nœud du maillage est alors la suivante :

Ce nouveau schéma 2D, théoriquement plus précis que les deux précédents, est introduit à dessein de la comparaison des différentes formulations du laplacien menée dans le paragraphe suivant. Il présente l'avantage d'être véritablement d'ordre 4, tout en accentuant l'anisotropie de propagation de l'information. Dans la suite on référera à ce schéma comme celui de l'opérateur 9-points $\mathcal{O}(4)$.

Schéma comparaison de différentes formulation en différence finie de laplacien 2D

La formulation du laplacien à 5-points, la plus simple et la plus couramment utilisée, est celle retenue dans la NDM. La formulation du laplacien à 9-points (avec points diagonaux) n'est formellement pas plus précise mais à l'avantage de propager l'information (i.e. le flux) dans toutes les directions directement accessible de chaque nœud. Enfin, un troisième opérateur, d'ordre 4 a été présenté comme l'amélioration naturelle du schéma 5-points classique.

Ce paragraphe propose une comparaison des trois opérateurs décrits précédemment sur le cas d'un minceur 100% UOX, en 2D, à l'état stationnaire et à 2 groupes en énergie. La composition unique de l'assemblage UOX est celle donnée dans l'article [54]. Chaque assemblage est divisé en 10×10 nœuds ce qui permet d'écarter les compensations d'erreurs liées à la non convergence du maillage. Le pas de temps utilisé est alors de 5×10^{-9} s.

2. dans le cas d'une dérivée mixte d'ordre total (n) et d'ordre (m) selon une variable d'espace, le coefficient appliqué correspond au $m^{\text{ème}}$ chiffre de la $n^{\text{ème}}$ ligne du triangle de Pascal

	5-points	9-points $\mathcal{O}(2)$	9-points $\mathcal{O}(4)$
Correction de criticité (pcm)	6801	6804	6651
Nombre d'itérations	255441	254571	253704
Écart moyen sur le flux total à l'échelle d'un assemblage (en %)	0.54	0.54	1.23

Tableau A.9: Résumé des principales différences observables sur la nappe de flux à l'état stationnaire d'un minceur UOX en 2D. Le nombre d'itérations correspond aux nombres de pas d'intégration nécessaire dans la méthode IRIS pour parvenir à la criticité à 10^{-10} pcm près. L'écart moyen sur le flux correspond à la moyenne des différences relatives, par rapport à un calcul Serpent2, sur le flux à l'échelle de l'assemblage .

La tableau A.9 montre que l'utilisation du laplacien 9-points par rapport au laplacien 5-points $\mathcal{O}(2)$ entraîne un faible écart sur la nappe de flux. L'état stationnaire ne semble pas être atteint beaucoup plus rapidement malgré la propagation plus isotrope de l'information.

La comparaison à la solution de référence, calculée par Serpent 2, de l'opérateur laplacien 9-points $\mathcal{O}(4)$ laisse penser que ce dernier est moins pertinent. Cependant, il apparaît que la carte de flux obtenue pour sur cette configuration est exactement la même (à 10^{-6} près) que celle issue d'un maillage de 12×12 nœuds par assemblage avec l'opérateur 5-points. La dégradation de la nappe de flux par rapport au calcul Serpent 2 provient du fait qu'asymptotiquement la diffusion s'écarte de la solution Monte Carlo. Soulignons également que la convergence de la méthode IRIS est obtenue 37 fois plus rapidement avec le maillage 10×10 et l'opérateur 9-points $\mathcal{O}(4)$ que dans le cas du maillage de 12×12 nœuds par assemblage avec l'opérateur 5-points.

En conclusion, pour l'état stationnaire l'utilisation de l'opérateur 9-points $\mathcal{O}(2)$ n'apporte aucune différence vis-à-vis de l'opérateur classique à 5-points. Cependant il serait judicieux de poursuivre cette comparaison dans le cas d'un transitoire rapide. L'utilisation d'un schéma d'ordre plus élevé (i.e. laplacien 9-points $\mathcal{O}(4)$) permet bien à précision fixée de diminuer le nombre de nœuds du maillage et donc potentiellement le temps de calcul. Cette option apparaît prometteuse vis-à-vis des choix de conception de la NDM.

Schéma 3D à 27-points

Le développement de HOC à 3 dimensions suit le même principe que celui exposé en 2D. Les DL selon les 3 directions (\vec{x} , \vec{y} , \vec{z}) sont calculés pour chaque point voisin du point central :

$$\begin{array}{ccc}
 (i-1,j-1,k-1) & (i-1,j,k-1) & (i-1, j+1, k-1) \\
 (i,j-1,k-1) & (i,j,k-1) & (i, j+1, k-1) \\
 (i+1,j-1,k-1) & (i+1,j,k-1) & (i+1, j+1, k-1) \\
 \\
 (i-1,j-1,k) & (i-1,j,k) & (i-1, j+1, k) \\
 (i,j-1,k) & (i,j,k) & (i, j+1, k) \\
 (i+1,j-1,k) & (i+1,j,k) & (i+1, j+1, k) \\
 \\
 (i-1,j-1,k+1) & (i-1,j,k+1) & (i-1, j+1, k+1) \\
 (i,j-1,k+1) & (i,j,k+1) & (i, j+1, k+1) \\
 (i+1,j-1,k+1) & (i+1,j,k+1) & (i+1, j+1, k+1)
 \end{array}$$

Tableau A.10: Coordonnée des points utilisés pour un laplacien 3D à 27-points

Par exemple, pour le sommet du cube de coordonnée $(x + h_x, y + h_y, z + h_z)$, le DL s'écrit :

$$\begin{aligned}
 u(x + h_x, y + h_y, z + h_z) = & \\
 u(x, y, z) + h_x \cdot \partial_x u + h_y \cdot \partial_y u + h_z \cdot \partial_z u & \\
 + \frac{1}{2} (h_x^2 \cdot \partial_{xx} u + h_y^2 \cdot \partial_{yy} u + h_z^2 \cdot \partial_{zz} u + 2 \cdot h_x h_y \cdot \partial_x \partial_y u + 2 \cdot h_x h_z \cdot \partial_x \partial_z u + 2 \cdot h_y h_z \cdot \partial_y \partial_z u) & \\
 + \frac{1}{6} \cdot (h_x^3 \cdot \partial_{xxx} u + h_y^3 \cdot \partial_{yyy} u + h_z^3 \cdot \partial_{zzz} u & \\
 + 3 \cdot h_x^2 h_y \cdot \partial_{xx} \partial_y u + 3 \cdot h_x^2 h_y \cdot \partial_{xx} \partial_z u + 3 \cdot h_y^2 h_z \cdot \partial_{yy} \partial_z u + 3 \cdot h_y^2 h_x \cdot \partial_{yy} \partial_x u & \\
 + 3 \cdot h_z^2 h_x \cdot \partial_{zz} \partial_x u + 3 \cdot h_z^2 h_y \cdot \partial_{zz} \partial_y u + 6 \cdot h_x h_y h_z \cdot \partial_z \partial_y \partial_x u) & \\
 + \mathcal{O}(3) &
 \end{aligned}$$

Cette fois le coefficient devant chaque dérivée partielle est donné par la pyramide de Pascal (l'équivalent 3D du triangle de Pascal, voir Tableau A.11), multiplié par $\frac{1}{n!}$, c'est à dire le coefficient du développement de Taylor.

1
1
1 1
1
2 2
1 2 1
1
3 3
3 6 3
1 3 3 1

Tableau A.11: Pyramide de Pascal jusqu'à l'ordre 3. Soit une dérivée partielle d'ordre n où $n = i + j + k$, avec (i, j, k) respectivement le degré de chaque dérivée selon une direction (x, y, z) . Le coefficient associé à cette dérivée correspond au nombre de coordonnée (j, k) (ou de façon équivalente tout double extrait du triplet (i, j, k)) dans le $n^{\text{ème}}$ étage de la pyramide de Pascal.

Les points ayant des positions équivalentes par rapport au point central se verront attribuer les mêmes coefficients dans la formule aux différences finies (invariance par rotation). Les DL sont donc sommés par famille de points, et les sommes ainsi calculées sont combinées entre elles pour donner la formule aux différences finies du laplacien. Les pondérations de ces sommes sont les coefficients de chaque point dans la formule aux différences finies.

L'objectif de ces combinaisons linéaires est de parvenir à une formule dont l'erreur a l'ordre le plus élevé possible ou bien d'obtenir une forme particulière de l'erreur. Dans un schéma à 27-points l'utilisation des points situés hors des directions normales entraîne l'apparition de différent type de dérivées croisées qui ne peuvent s'annuler par des combinaisons linéaires avec les DL d'autres directions. C'est pourquoi, exactement comme dans le cas 2D, la solution retenues est une combinaison linéaire permettant de mettre les termes d'ordre 4 sous la forme d'un laplacien

tridimensionnelle (**RefA** et **RefB**) :

$$\begin{aligned}
 14 \cdot \sum DL_{normaux} + 3 \cdot \sum DL_{edge} + 1 \cdot \sum DL_{corner} &= \\
 60 \cdot \partial_{xxxx}u + 120 \cdot \partial_{xxyy}u + 60 \cdot \partial_{yyyy}u + 120 \cdot \partial_{yyzz}u + 60 \cdot \partial_{zzzz}u + 120 \cdot \partial_{zzxx}u &= \\
 = 60 \cdot \Delta(\partial_{xx}u + \partial_{yy}u + \partial_{zz}u) &= \\
 = 60 \cdot \Delta(\Delta u) &
 \end{aligned}$$

Ce qui aboutit aux pondérations suivantes :

1/30	3/30	1/30
3/30	14/30	3/30
1/30	3/30	1/30
3/30	14/30	3/30
14/30	-60/30	14/30
3/30	14/30	3/30
1/30	3/30	1/30
3/30	14/30	3/30
1/30	3/30	1/30

Tableau A.12: Schéma 3D à 27-points

De façon analogue au cas 2D, l'erreur est aussi solution de l'équation de Laplace. Ainsi, bien que le schéma soit formellement d'ordre 2, on peut s'attendre à une meilleure précision selon la nature du problème résolu.

Cette formulation permet donc d'avoir une propagation du flux selon toutes les directions directement accessibles à un point du maillage. Cependant, on notera que pour aboutir à la formulation numérique du laplacien 3D il est nécessaire de factoriser par h_x ou h_y ou h_z , ce qui n'est possible que lorsque le pas d'espace est uniforme dans chaque direction :

$$\begin{aligned}
 14 \cdot \sum_{norm} u_{i',j',k'} + 3 \cdot \sum_{edge} u_{i',j',k'} + \sum_{corner} u_{i',j',k'} - 60 \cdot u_{i,j,k} &= \\
 \frac{60}{2} \cdot (h_x^2 \cdot \partial_{xx}u + h_y^2 \cdot \partial_{yy}u + h_z^2 \cdot \partial_{zz}u) + \mathcal{O}(4) &
 \end{aligned}$$

Ce dernier point pose une contrainte importante sur le maillage à utiliser pour le réacteur. Ce dernier doit uniquement être constitué de cube, or en pratique ce n'est jamais la solution privilégiée. En effet l'hétérogénéité matérielle étant plus forte radialement qu'axialement, les mailles sont généralement plus longues que larges. D'autres options "mixtes" sont envisageables comme les schémas à 11-points qui correspondent aux schémas à 9-points en 2D (le schéma compacte) auquel on rajoute 2 points axialement.

A.3.3 Prise en compte de la variation du coefficient de diffusion

Les développements précédemment mentionnés sont basés sur l'hypothèse d'un coefficient de diffusion spatialement constant. Si tel n'est pas le cas, la NDM utilise des coefficients de diffusion moyennés aux interfaces entre les nœuds. Cependant cette méthode n'est pas généralisable aux HOC qui utilisent des points distants du point central, sans interfaces communes. Il est donc

nécessaire de trouver comment traiter la variation spatiale du coefficient de diffusion pour utiliser des estimations plus élaborées du laplacien.

Pour établir une formulation générale de l'opérateur de diffusion, il est nécessaire de revenir à son écriture la plus fondamentale :

$$div(D \cdot \overrightarrow{grad}(\phi))$$

En appliquant l'opérateur divergence avec D fonction de l'espace, il vient que :

$$grad(D) \cdot grad(\phi) + D \cdot \Delta \phi$$

D'un point de vue numérique, le terme $grad(D) \cdot grad(\phi)$ s'avère peu satisfaisant car sa traduction n'est pas univoque. Le théorème de Green-Ostrogradsky permet de mieux comprendre ce terme :

$$\begin{aligned} \tau_{fuite} &= \iiint div(D \cdot \overrightarrow{grad}(\phi)) d\vec{r}^3 \\ &= \iint D \cdot \overrightarrow{grad}(\phi) d\vec{S} \\ &= D \cdot \iiint \phi \cdot d\vec{r}^3 + \iint grad(D) \cdot grad(\phi) d\vec{S} \end{aligned} \quad (A.22)$$

Le laplacien s'interprète alors comme le bilan des courants sur toutes les interfaces du volume considéré. Dans le cas du calcul de l'intégrale volumique du produit des gradients l'interprétation est plus complexe. Il faut intégrer ce produit de gradients sur le volume que représente le nœud (bulk). Or à l'intérieur de ce volume le flux est supposé constant, de même que le coefficient de diffusion. En réalité le gradient ne peut qu'être mesuré qu'à la frontière du volume. Le terme $grad(D) \cdot grad(\phi)$ semble donc ambiguë (dans le formalisme des différences finies), c'est pourquoi on cherche à l'exprimer d'une façon détournée :

$$\partial^2(D \cdot \phi) = \partial^2 D + \partial^2 \phi + 2 \cdot \partial D \cdot \partial \phi$$

Soit :

$$\Delta(D \cdot \phi) = \phi \cdot \Delta D + D \cdot \Delta \phi + 2 \cdot grad(D) \cdot grad(\phi)$$

Donc :

$$grad(D) \cdot grad(\phi) = \frac{1}{2} \cdot (\Delta(D \cdot \phi) - D \cdot \Delta(\phi) - \phi \cdot \Delta D)$$

D'où l'écriture de l'opérateur de diffusion avec terme de diffusion fonction de l'espace :

$$\begin{aligned} div(D \cdot \overrightarrow{grad}(\phi)) &= D \cdot \Delta \phi + \frac{1}{2} \cdot (\Delta(D \cdot \phi) - D \cdot \Delta \phi - \phi \cdot \Delta D) \\ div(D \cdot \overrightarrow{grad}(\phi)) &= \frac{(\Delta D \cdot \phi + D \cdot \Delta \phi - \phi \cdot \Delta D)}{2} \end{aligned}$$

Tous les termes de cette équation s'expriment comme des laplaciens dont les traductions en différences finies sont bien connues. Cette généralisation permet notamment l'utilisation de formules d'ordres élevés prenant en compte la variation spatiale du coefficient de diffusion, ce qui permet de l'utilisation des précédents développements de cette section.

A.4 Algorithmes d'intégration temporel

Les transitoires neutroniques d'insertion de réactivité sont rapides et peuvent conduire à des variations sur plusieurs ordre de grandeurs des paramètres physiques. Il est nécessaire de s'assurer que l'algorithme d'intégration temporel choisi permet de rendre compte de la physique de l'accident en dépit de la violence du phénomène. Pour cela plusieurs schémas d'intégration explicites sont comparés lors d'une variation brusque de la population neutronique modélisée dans un réacteur simplifié. Dans la logique de conception de la NDM, on veillera à maintenir un rendement maximal entre temps de calcul et précision des résultats.

A.4.1 Algorithmes d'intégration temporel testés :

Quatre schémas d'intégration sont testés : Euler explicite, Euler-SOR, RK2, RK45 et RK8. Ces schémas sont succinctement rappelés ci dessous.

Euler explicite

$$\begin{cases} \phi_x^{t+1} &= \phi_x^t + \Delta t \cdot \left. \frac{d\phi}{dt} \right|_x^t \\ \left. \frac{d\phi}{dt} \right|_x^t &= D \frac{(\phi_{x+1}^t + \phi_{x-1}^t - 2 \cdot \phi_x^t)}{\Delta x^2} + (\nu \Sigma_f - \Sigma_a) \phi_x^t \end{cases}$$

Euler-SOR

$$\begin{cases} \phi_x^+ &= \omega \cdot \phi_x^+ + (1 - \omega) \cdot \phi_x^* \\ \phi_x^* &= \phi_x^t + \Delta t \cdot \left. \frac{d\phi}{dt} \right|_x^+ \\ \left. \frac{d\phi}{dt} \right|_x^+ &= D \frac{(\phi_{x+1}^+ + \phi_{x-1}^+ - 2 \cdot \phi_x^+)}{\Delta x^2} + (\nu \Sigma_f - \Sigma_a) \phi_x^+ \end{cases}$$

Ce schéma doit être itéré jusqu'à ce que ϕ^* tende vers ϕ^+ . Lorsque cette égalité devient vraie, le schéma est alors équivalent à un Euler implicite. En pratique, l'égalité est jugée satisfaite quand l'écart relatif entre les vecteurs ϕ^* et ϕ^+ est inférieur à un certain critère ici fixé à 10^{-5} . Notons que l'intégration temporelle de chaque nœud n'est pas indépendante de celle des autres nœuds.

RK2

$$\begin{cases} \phi_x^{t+1} &= \phi_x^t + \Delta t \cdot \left. \frac{d\phi}{dt} \right|_x^* \\ \left. \frac{d\phi}{dt} \right|_x^* &= D \frac{(\phi_{x+1}^* + \phi_{x-1}^* - 2 \cdot \phi_x^*)}{\Delta x^2} + (\nu \Sigma_f - \Sigma_a) \phi_x^* \\ \phi_x^* &= \phi_x^t + \frac{\Delta t}{2} \cdot \left. \frac{d\phi}{dt} \right|_x^t \\ \left. \frac{d\phi}{dt} \right|_x^t &= D \frac{(\phi_{x+1}^t + \phi_{x-1}^t - 2 \cdot \phi_x^t)}{\Delta x^2} + (\nu \Sigma_f - \Sigma_a) \phi_x^t \end{cases}$$

Dans ce schéma à deux étapes il est nécessaire de faire un premier calcul intermédiaire de ϕ^* sur l'ensemble des nœuds du cœur. Un second calcul basé sur l'état intermédiaire du cœur (indexé *) précédemment calculé permet alors de déduire ϕ^{t+1} .

RK4

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\phi}{dt} \Big|_x^t = D \frac{(\phi_{x+1}^t + \phi_{x-1}^t - 2 \cdot \phi_x^t)}{\Delta x^2} + (\nu \Sigma_f - \Sigma_a) \phi_x^t \\ \phi_x^{t+\frac{1}{4}} = \phi_x^t + \frac{\Delta t}{2} \cdot \frac{d\phi}{dt} \Big|_x^t \\ \frac{d\phi}{dt} \Big|_x^{t+\frac{1}{4}} = D \frac{(\phi_{x+1}^{t+\frac{1}{4}} + \phi_{x-1}^{t+\frac{1}{4}} - 2 \cdot \phi_x^{t+\frac{1}{4}})}{\Delta x^2} + (\nu \Sigma_f - \Sigma_a) \phi_x^{t+\frac{1}{4}} \\ \phi_x^{t+\frac{2}{4}} = \phi_x^t + \frac{\Delta t}{2} \cdot \frac{d\phi}{dt} \Big|_x^{t+\frac{1}{4}} \\ \frac{d\phi}{dt} \Big|_x^{t+\frac{2}{4}} = D \frac{(\phi_{x+1}^{t+\frac{2}{4}} + \phi_{x-1}^{t+\frac{2}{4}} - 2 \cdot \phi_x^{t+\frac{2}{4}})}{\Delta x^2} + (\nu \Sigma_f - \Sigma_a) \phi_x^{t+\frac{2}{4}} \\ \phi_x^{t+\frac{3}{4}} = \phi_x^t + \Delta t \cdot \frac{d\phi}{dt} \Big|_x^{t+\frac{3}{4}} \\ \frac{d\phi}{dt} \Big|_x^{t+\frac{3}{4}} = D \frac{(\phi_{x+1}^{t+\frac{3}{4}} + \phi_{x-1}^{t+\frac{3}{4}} - 2 \cdot \phi_x^{t+\frac{3}{4}})}{\Delta x^2} + (\nu \Sigma_f - \Sigma_a) \phi_x^{t+\frac{3}{4}} \\ \phi_x^{t+1} = \phi_x^t + \frac{\Delta t}{6} \cdot \left(\frac{d\phi}{dt} \Big|_x^{t+\frac{1}{4}} + 2 \cdot \frac{d\phi}{dt} \Big|_x^{t+\frac{2}{4}} + 2 \cdot \frac{d\phi}{dt} \Big|_x^{t+\frac{3}{4}} + \frac{d\phi}{dt} \Big|_x^{t+\frac{4}{4}} \right) \end{array} \right.$$

Que l'on résume en :

	$\frac{d\phi}{dt} \Big _x^t$	$\frac{d\phi}{dt} \Big _x^{t+\frac{1}{4}}$	$\frac{d\phi}{dt} \Big _x^{t+\frac{2}{4}}$	$\frac{d\phi}{dt} \Big _x^{t+\frac{3}{4}}$
$\phi \Big _x^{t+\frac{1}{4}}$	$\frac{1}{2}$	0	0	0
$\phi \Big _x^{t+\frac{2}{4}}$	0	$\frac{1}{2}$	0	0
$\phi \Big _x^{t+\frac{3}{4}}$	0	0	1	0
$\phi \Big _x^{t+\frac{4}{4}}$	$\frac{1}{6}$	$\frac{2}{6}$	$\frac{2}{6}$	$\frac{1}{6}$

Tableau A.13: Coefficient pour le calcul des estimations successives du schéma RK4

RK45

Le schéma RK45 avec les coefficients de Fehlberg est une variante couramment utilisé du schéma RK4. L'intérêt de ce dernier est de proposer une première estimation d'ordre 5 du flux au pas de temps $t + 1$ (ici notée $\phi \Big|_x^{t+\frac{6}{6}}$). A partir des estimations de dérivées précédentes il est également possible de calculer une autre estimation à l'ordre 4 (ici notée $\phi \Big|_x^{t+\frac{6'}{6}}$). La différence entre ces deux estimations permet de quantifier l'amplitude des termes tronqués (en $\mathcal{O}(\Delta t^5)$). Cette information peut être utilisée pour calculer un pas de temps, alors qualifié d'adaptatif, de façon à borner l'erreur sur chaque pas d'intégration.

	$\left. \frac{d\phi}{dt} \right _x^t$	$\left. \frac{d\phi}{dt} \right _x^{t+\frac{1}{6}}$	$\left. \frac{d\phi}{dt} \right _x^{t+\frac{2}{6}}$	$\left. \frac{d\phi}{dt} \right _x^{t+\frac{3}{6}}$	$\left. \frac{d\phi}{dt} \right _x^{t+\frac{4}{6}}$	$\left. \frac{d\phi}{dt} \right _x^{t+\frac{5}{6}}$
$\phi \Big _x^{t+\frac{1}{6}}$	$\frac{1}{4}$	0	0	0	0	0
$\phi \Big _x^{t+\frac{2}{6}}$	$\frac{3}{32}$	$\frac{9}{32}$	0	0	0	0
$\phi \Big _x^{t+\frac{3}{6}}$	$\frac{1932}{2197}$	$-\frac{7200}{2197}$	$\frac{7296}{2197}$	0	0	0
$\phi \Big _x^{t+\frac{4}{6}}$	$\frac{439}{216}$	-8	$\frac{3680}{513}$	$-\frac{845}{410}$	0	0
$\phi \Big _x^{t+\frac{5}{6}}$	$-\frac{8}{27}$	2	$-\frac{3544}{2565}$	$\frac{1859}{4104}$	$-\frac{11}{40}$	0
$\phi \Big _x^{t+\frac{6}{6}}$	$\frac{25}{216}$	0	$\frac{1408}{2565}$	$\frac{2197}{4101}$	$-\frac{1}{5}$	0
$\phi \Big _x^{t+\frac{6'}{6}}$	$\frac{16}{135}$	0	$\frac{6656}{12825}$	$\frac{28561}{56430}$	$-\frac{9}{50}$	$\frac{2}{55}$

Tableau A.14: Coefficient (de Fehlberg) pour le calcul des estimations successives du schéma RK45

RK8

Le schéma Runge Kutta d'ordre 8 utilise 14 estimations de dérivées, successivement construites à partir des estimations précédentes ainsi que résumé dans le tableau A.15.

Annexe A. Outils dédiés à l'analyse de sûreté

	$\frac{d\phi}{dt} \Big _x^t$	$\frac{d\phi}{dt} \Big _x^{t+\frac{1}{13}}$	$\frac{d\phi}{dt} \Big _x^{t+\frac{2}{13}}$	$\frac{d\phi}{dt} \Big _x^{t+\frac{3}{13}}$	$\frac{d\phi}{dt} \Big _x^{t+\frac{4}{13}}$	$\frac{d\phi}{dt} \Big _x^{t+\frac{5}{13}}$	$\frac{d\phi}{dt} \Big _x^{t+\frac{6}{13}}$	$\frac{d\phi}{dt} \Big _x^{t+\frac{7}{13}}$	$\frac{d\phi}{dt} \Big _x^{t+\frac{8}{13}}$	$\frac{d\phi}{dt} \Big _x^{t+\frac{9}{13}}$	$\frac{d\phi}{dt} \Big _x^{t+\frac{10}{13}}$	$\frac{d\phi}{dt} \Big _x^{t+\frac{11}{13}}$	$\frac{d\phi}{dt} \Big _x^{t+\frac{12}{13}}$	$\frac{d\phi}{dt} \Big _x^{t+\frac{13}{13}}$
$\phi_x^{t+\frac{1}{13}}$	$\frac{1}{18}$	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
$\phi_x^{t+\frac{2}{13}}$	$\frac{1}{48}$	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
$\phi_x^{t+\frac{3}{13}}$	$\frac{1}{32}$	0	$\frac{3}{32}$	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
$\phi_x^{t+\frac{4}{13}}$	$\frac{5}{16}$	0	$-\frac{75}{64}$	$\frac{75}{64}$	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
$\phi_x^{t+\frac{5}{13}}$	$\frac{3}{80}$	0	0	$\frac{3}{16}$	$\frac{3}{20}$	0	0	0	0	0	0	0	0	0
$\phi_x^{t+\frac{6}{13}}$	$\frac{29443841}{614563906}$	0	$\frac{77736538}{69253847}$	$-\frac{28963883}{112500000}$	$\frac{23124283}{1800000000}$	0	0	0	0	0	0	0	0	0
$\phi_x^{t+\frac{7}{13}}$	$\frac{16016141}{946692911}$	0	0	$\frac{61564180}{138732637}$	$\frac{22789713}{633445777}$	$\frac{545815736}{2771057229}$	$-\frac{180193667}{1043307555}$	0	0	0	0	0	0	0
$\phi_x^{t+\frac{8}{13}}$	$\frac{39632708}{573591083}$	0	0	$-\frac{433636366}{683701615}$	$-\frac{421739975}{2616292301}$	$\frac{100302831}{723423059}$	$\frac{790204164}{839813087}$	$\frac{800635310}{3783071287}$	0	0	0	0	0	0
$\phi_x^{t+\frac{9}{13}}$	$\frac{246121993}{1340847787}$	0	0	$-\frac{37695042795}{15268766246}$	$-\frac{309121744}{1061227803}$	$-\frac{12992083}{490766935}$	$\frac{6005943493}{2108947869}$	$\frac{393006217}{13966673457}$	0	0	0	0	0	0
$\phi_x^{t+\frac{10}{13}}$	$-\frac{1028468189}{846180014}$	0	0	$\frac{8478235783}{508512852}$	$\frac{1311729495}{1432422823}$	$-\frac{1701304382}{1701304382}$	$-\frac{48777925059}{3047939560}$	$\frac{15336726248}{1032824649}$	$-\frac{45442868181}{3398467696}$	0	0	0	0	0
$\phi_x^{t+\frac{11}{13}}$	$\frac{185892177}{718116043}$	0	0	$-\frac{3185094517}{667107341}$	$-\frac{477755414}{1098053517}$	$-\frac{703635378}{230739211}$	$\frac{5731566787}{1027545527}$	$\frac{5232866602}{850066563}$	$-\frac{4093664535}{808688257}$	0	0	0	0	0
$\phi_x^{t+\frac{12}{13}}$	$\frac{403863854}{491063109}$	0	0	$-\frac{5068492393}{434740067}$	$-\frac{411421997}{543043805}$	$\frac{652783627}{914296604}$	$\frac{11173962825}{925320536}$	$-\frac{13158990841}{6184727034}$	$\frac{3936647629}{1978049680}$	0	0	0	0	0
$\phi_x^{t+\frac{13}{13}}$	$\frac{14005451}{335480064}$	0	0	0	0	$-\frac{59238493}{1068277825}$	$\frac{181606767}{758867731}$	$\frac{561292985}{797845732}$	$-\frac{1041891430}{1371343529}$	$\frac{760417239}{1151165299}$	$-\frac{528747749}{2220607170}$	$\frac{118820643}{751138087}$	$-\frac{528747749}{2220607170}$	$\frac{1}{4}$

Tableau A.15: Table de construction des différentes estimations de dérivées du schéma RK8.

L'algorithme RK8 correspond à un développement limité dont l'erreur est en $\mathcal{O}(\Delta t^8)$ soit pour un pas de typique de Δt^8 une erreur pondérée par un facteur 10^{-64} . Ce schéma est le plus précis de ceux considérés dans pour notre comparaison, il est donc considéré comme la référence dans la suite.

A.4.2 Configuration utilisée pour l'inter-comparaison

Les comparaisons des différents schémas de calcul sont menés sur un cœur carré de $300\text{cm} \times 300\text{cm}$, modélisé en 2D et à 2 groupes en énergie (et sans précurseurs). Ce cœur est composé uniformément d'un seul type d'assemblage de type UOX. Les sections efficaces calculées par Serpent2 et utilisé dans le cadre de cette étude sont données dans A.16. Le cœur est modélisé par un maillage de 30×30 nœuds avec un pas de temps de 10^{-8} s. Les conditions de bords utilisées sont les conditions de Robin, ce qui correspond en neutronique à l'utilisation d'une distance extrapolée.

réaction	Σ_a (cm^{-1})	$\nu\Sigma_f$ (cm^{-1})	$\Sigma_{g \rightarrow g'}$ (cm^{-1})	D (cm)	v ($\text{cm} \cdot \text{s}^{-1}$)
groupe 1	1.032×10^{-2}	7.959×10^{-3}	-	1.369	1.834×10^7
groupe 2	1.211×10^{-1}	1.731×10^{-1}	1.703×10^{-2}	3.770×10^{-1}	4.134×10^5

Tableau A.16: Section efficace 2 groupes utilisées pour la modélisation d'un minicœur 100% UOX

Dans un premier temps la configuration est ramenée à l'état d'équilibre grâce à la méthode IRIS. La transitoire consiste à partir de cet état stationnaire et à imposer une densité neutronique spatialement plate. Énergétiquement, on impose également des densités neutroniques égales entre le groupe rapide et thermique.

Suite à la méthode IRIS, le jeu de section efficace a été modifié de façon à rendre le cœur critique lorsque le flux est dans son mode fondamental. L'imposition d'une nappe de flux hors équilibre (ici plate) et son évolution jusqu'à retrouver un état d'équilibre constitue le transitoire test. Ce transitoire est à la fois brusque tout en étant un des plus simple qu'il soit possible de définir.

A.4.3 Résultats

Le tableau A.17 confirme que la durée du temps de calcul est globalement proportionnelle au nombre d'estimations de dérivée par pas de temps. On note cependant qu'un laps de temps fixe reste nécessaire pour l'initialisation des données. Cela explique que le temps de mise à l'équilibre du cœur avec un schéma RK2 ne soit pas strictement égale au double de celui du schéma d'Euler. Les corrections de criticité ainsi que les nappes de flux obtenues à l'issue de la mise à l'équilibre sont égales (aux erreurs numériques près soit 10^{-10}) quelques soit le schéma d'intégration temporel choisi. Ce résultat est conforme au fait qu'à l'état stationnaire la dérivée temporelle est nulle et n'influence donc pas la répartition du flux.

	Euler	Euler-SOR	RK2	RK4	RK45	RK8
nombre d'itérations IRIS	762094	772525	774211	774279	777922	777213
temps de calcul IRIS (s)	40.4	46.9	52.9	80.4	115	322
temps de calcul transitoire (s)	19.5	31.8	49.0	118	205	735

Tableau A.17: Comparaison des temps de calculs des différents schémas d'intégration temporel. Les calculs sont menés sur un seul processeur i5-2450M cadencé à 2.50GHz.

La figure A.17 permet de comparer la différence entre l'évolution du nombre total de neutrons calculé selon un schéma d'intégration temporel donné et le schéma RK8, pour le transitoire précédemment décrit. Les écarts au schéma RK8 sont les plus importants en début de transitoire, probablement en raison de faibles disparités dans la qualité de l'équilibre initial. Après 0.01 seconde, on constate une stabilisation de l'écart sur le nombre de neutrons à 10^{-7} % du résultat donné par RK8. Cette erreur subit une lente croissance au fil des itérations.

L'erreur la plus importante est donnée pour le schéma Euler, ce qui semble cohérent avec l'ordre minimal (en $\mathcal{O}(\Delta t)$). Le schéma RK2 et RK4 exhibe des précisions très similaires. L'utilisation d'Euler-SOR s'impose comme étant ici le meilleur compromis entre temps de calcul et précision, avec un écart quasi nul par rapport à RK8. Cette conclusion nécessiterait toutefois d'être étayée sur d'autres configurations.

Enfin, notons que les précisions très satisfaisantes obtenues pour tous les schémas de calcul testés proviennent en partie du faible pas de temps utilisé. Des écarts plus significatifs sont à prévoir lors de l'augmentation du pas d'intégration. Les méthodes d'ordre plus élevé pourraient alors montrer de meilleures performances en temps de calcul grâce à l'utilisation d'un pas de temps adaptatif. Cependant, ce gain restera certainement modeste puisque le pas de temps connaît une borne maximale liée à la stabilité numérique des schémas numériques en différences finies.

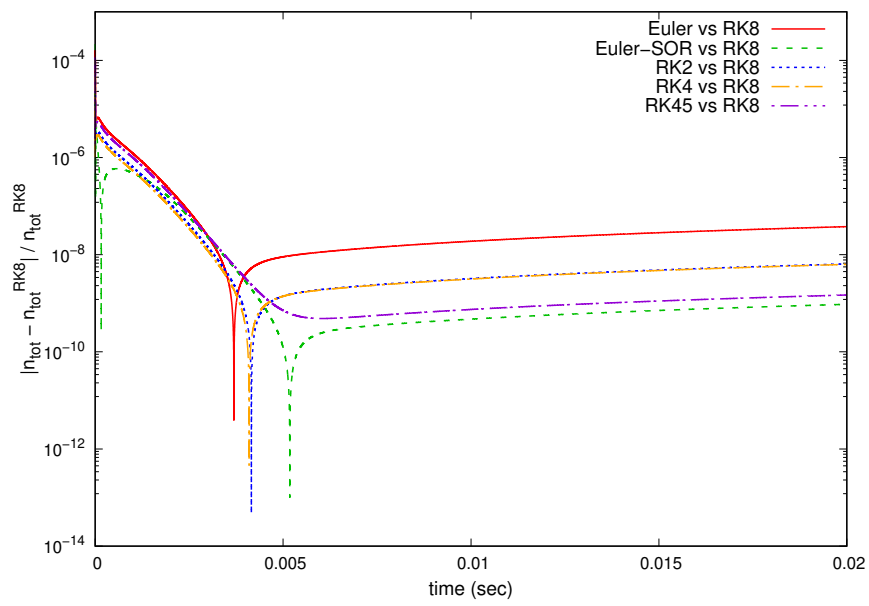


FIGURE A.17: Évolution au cours du temps de la différence relative sur le nombre total de neutrons en cœur calculé par divers schéma d'intégration temporel, comparé au résultat donné par le schéma RK8. Les chutes importantes indiquent un croisement des courbes d'évolution du nombre total de neutron avec celui calculé par RK8.

A.5 Étude de stabilité du code BATH

Cette section propose une analyse de stabilité des schémas numériques mis en œuvre dans BATH ainsi que des vérifications au travers de leurs comparaisons à des situations analytiques simples. Cette étude est qualifiée de préliminaire car elle est réalisée avec des hypothèses simplificatrices : paramètres constants, conditions limites constantes et sans couplages entre les différentes régions.

A.5.1 Dans le combustible / dans la gaine

L'équation résolue dans la gaine et le combustible est similaire, hormis le terme de puissance volumique qu'on suppose uniquement présent dans le combustible. Cette équation est rappelée ci-dessous :

$$\rho C_p \frac{dT}{dt} = \lambda \Delta T + \ddot{q}$$

Avec :

- ρ la masse volumique, ($kg \cdot m^{-3}$)
- C_p la capacité calorifique, ($J \cdot kg^{-1} \cdot m^{-3}$)
- λ la conductivité thermique, ($W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}$)
- \ddot{q} la source de puissance volumique, ($W \cdot m^{-3}$)

En cohérence avec les choix de la NDM, cette équation est résolue numériquement par différences finies. Le crayon est découpé axialement en tronçons supposés indépendants thermiquement (i.e. pas de conduction thermique axiale). Chaque tronçon est modélisé en 1D, selon la direction radiale. Le problème est supposé axi-symétrique. Du fait de la géométrie cylindrique du combustible et de la gaine, on choisit d'exprimer le laplacien également en coordonnée cylindrique :

$$\rho_i C_{p_i} \frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} = \lambda_i^n \left(\frac{T_{i+1}^n + T_{i-1}^n - 2 \cdot T_i^n}{\Delta r^2} + \frac{1}{r_i} \cdot \frac{T_{i+1}^n - T_{i-1}^n}{2 \cdot \Delta r} \right) + \ddot{q}$$

Analyse de Von Neumann

Le calcul du laplacien discrétisé fait intervenir une dérivée d'ordre 1. L'estimation de cette dérivée par une formule centrée (i.e. $\frac{dT}{dr} = \frac{T_{i+1}^n - T_{i-1}^n}{2 \cdot \Delta r}$) est généralement instable [38]. Une étude de la stabilité numérique est donc nécessaire pour vérifier la formulation retenue pour l'opérateur laplacien. Pour se faire, on utilise la méthode de Von Neumann qui consiste à décomposer la valeur calculé en chaque nœud à l'équilibre en une de somme composée de la solution numérique et de l'erreur de troncature :

$$T_i^n = T_{i, \text{discr}}^n + \epsilon_i^n$$

avec :

- ϵ_i^n l'erreur de troncature
- $T_{i, \text{discr}}^n$ la solution algébrique de l'équation différentielle discrétisée.
- i l'indice spatial
- n l'indice temporel

Cette décomposition est reportée dans l'équation discrétisée :

$$\rho C_p \frac{T_{i, \text{discr}}^{n+1} + \delta T_i^{n+1} - T_{i, \text{discr}}^n - \delta T_i^n}{\Delta t} = \lambda \left(\frac{T_{i+1}^n + \delta T_{i+1}^n + T_{i-1}^n + \delta T_{i-1}^n - 2 \cdot (T_i^n + \delta T_i^n)}{\Delta r^2} + \frac{1}{r_i} \cdot \frac{T_{i+1}^n + \delta T_{i+1}^n - T_{i-1}^n - \delta T_{i-1}^n}{2 \cdot \Delta r} \right) + \ddot{q}$$

On considère ici que les paramètres de l'équation sont constants. Par définition $T_{i, discr}^n$ est solution de l'équation discrétisé, ce qui permet d'obtenir l'équation d'évolution de l'erreur numérique :

$$\rho C_p \frac{\epsilon_i^{n+1} - \epsilon_i^n}{\Delta t} = \lambda \left(\frac{\epsilon_{i+1}^n + \epsilon_{i-1}^n - 2 \cdot \epsilon_i^n}{\Delta r^2} + \frac{1}{r_i} \cdot \frac{\epsilon_{i+1}^n - \epsilon_{i-1}^n}{2 \cdot \Delta r} \right)$$

La seconde étape de la méthode de Von Neumann consiste à développer sous la forme d'une série de fourrier l'erreur numérique :

$$\epsilon(x, t) = \sum a_n \cdot e^{c_m \cdot t + j \cdot k_m \cdot x}$$

Cette opération a pour but de supprimer la dépendance spatiale aux nœuds adjacents. En écrivant l'équation d'évolution de l'erreur pour chaque mode il est possible de calcul le facteur d'amplification de l'erreur, ici noté G et défini comme :

$$G(k_m) = 1 - \frac{4\lambda\Delta t}{\rho C_p \Delta r^2} \sin^2\left(\frac{k_m \Delta r}{2}\right) + j \cdot \frac{\lambda\Delta t}{\rho C_p \Delta r^2} \cdot \frac{\Delta r}{r_i} \cdot \sin(k_m \Delta r)$$

Dans la suite on pose $\alpha = \frac{\lambda\Delta t}{\rho C_p \Delta r^2}$.

Le schéma est considéré comme stable si $|G| < 1$. Quelque soit le mode de l'erreur, celui-ci ne doit pas être amplifié au fil des itérations. Afin ne pas dépendre de la discrétisation du maillage la variable discrète $k_m \Delta r$ avec $k_m \in [\frac{2\pi}{R}; \frac{2\pi N}{R}]$ (N étant le nombre de zones de la géométrie discrétisée) est remplacée par la variable continue $\beta \in [0; \pi]$:

$$|G(\beta)| = \sqrt{\left(1 - 4 \cdot \alpha \cdot \sin^2\left(\frac{\beta}{2}\right)\right)^2 + \left(\alpha \cdot \frac{\Delta r}{r_i} \cdot \sin(\beta)\right)^2} \quad (\text{A.23})$$

La figure (A.18) représente une étude paramétrique du gain exprimé par l'équation A.23.

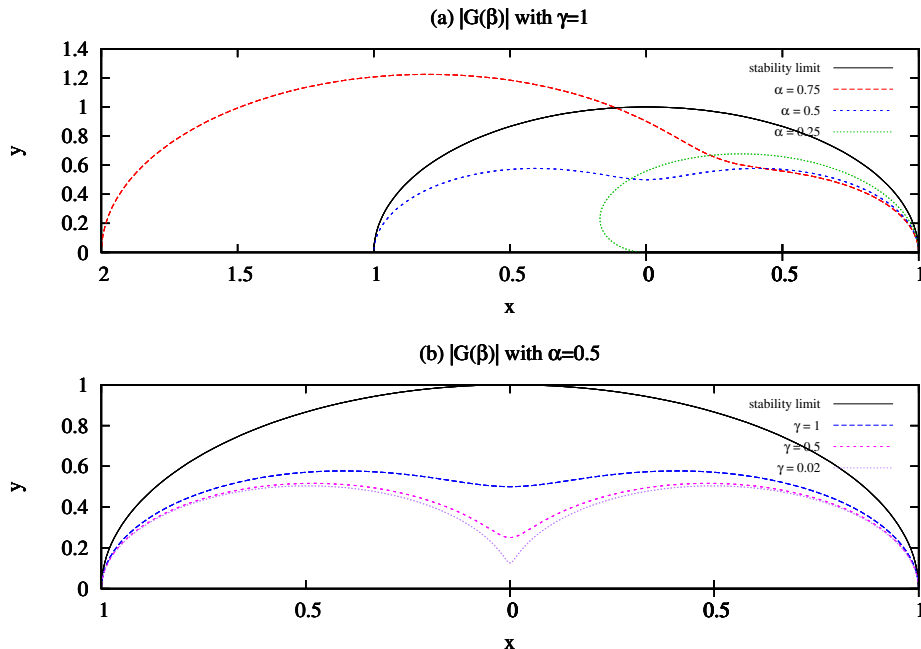


FIGURE A.18: Module du facteur d'amplification. La figure (a) est tracé pour plusieurs valeur de $\alpha = \frac{\lambda\Delta t}{\rho C_p \Delta r^2}$ et pour $\gamma = \frac{\Delta r}{r_i}$ fixé à sa valeur maximale ($\gamma = 1$). La figure (b) synthétise une étude de sensibilité par rapport au facteur γ avec $\alpha = \frac{1}{2}$, limite de stabilité établie par le graphique (a). L'étude pour γ maximal est la plus pénalisante du point de vue de la stabilité.

La stabilité est dominée que par le terme : $(1 - 4 \cdot \alpha \cdot \sin^2(\frac{\beta}{2}))^2$ d'où la condition de stabilité suivante :

$$\alpha = \frac{\lambda \Delta t}{\rho C_p \Delta r^2} < \frac{1}{2}$$

On obtient alors la même condition de stabilité que dans le cas où l'équation est résolue sur une géométrie cartésienne.

Test numérique

Pour vérifier la bonne implémentation du schéma numérique développé ainsi que la pertinence de notre analyse de stabilité, une première comparaison sur un cas analytique est réalisée. La configuration utilisée est celle d'un crayon combustible de rayon $R_{fuel} = 4.095 \cdot 10^{-3} m$, modélisé en 1D selon la direction radiale. On s'intéressera ici au profil de température à l'état stationnaire.

Analytiquement l'équation à résoudre est la suivante :

$$\rho C_p \cdot \frac{dT}{dt} = \lambda \cdot \frac{1}{r} \cdot \frac{d}{dr} \left(r \cdot \frac{dT}{dr} \right) + \ddot{q}$$

Dans cette configuration on utilisera des valeurs des paramètres thermiques typiques de celles d'un REP UOX :

- $\lambda = 3.94 (J \cdot K^{-1} \cdot m^{-1})$
- $C_p = 316 (J \cdot K^{-1} \cdot Kg^{-1})$
- $\rho = 10.7 \cdot 10^3 (Kg \cdot m^{-3})$
- $\ddot{q} = 300 \cdot 10^6 (W \cdot m^{-3})$
- $T_{fuel}(R_{fuel}) = 700 K$

En géométrie cylindrique la solution du problème est [39] :

$$T(r) = \frac{\ddot{q}}{4\lambda} (R^2 - r^2) + T(r = R)$$

Numériquement, la pastille est modélisée avec 50 nœuds (radiaux) et l'utilisation d'un pas de temps de $\Delta t = 10^{-3} s$. Le maillage utilisé remplit bien le critère de stabilité qui limite le nombre de nœuds à 85. La pastille est amenée à l'état stationnaire par intégrations temporelles successives à partir d'une distribution uniforme de température.

La comparaison des profils de température combustible est donnée par la figure A.19.

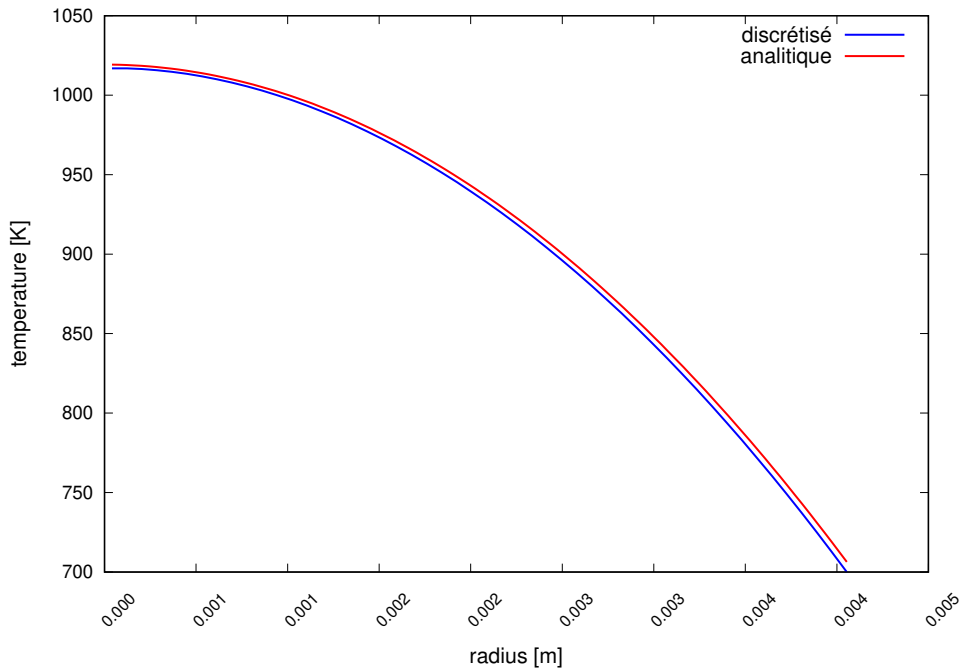


FIGURE A.19: Profil radial de température à l'état stationnaire dans une pastille de combustible. Comparaison de la solution analytique et de la résolution numérique.

L'écart entre la résolution numérique et la solution analytique est de l'ordre de 3 K. On notera que le schéma numérique ne semble pas conserver l'énergie puisque le profil de température numérique est systématiquement inférieur au profil analytique. Cette différence s'explique en partie par le fait que la condition limite est numériquement appliquée au dernier nœud (dont la température est imposée) alors que formellement cette dernière doit être appliquée à la surface de ce nœud.

A.5.2 Dans le caloporteur

Pour rappel, l'équation résolue dans le caloporteur est la suivante :

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{4 \cdot h_{cc}}{D_{chauffant}} \cdot (T_{cladding}(z) - T_{coolant}(z)) - \frac{\dot{D}_{massique} C_{p,i}^n}{S_{passage\ fluide}} \cdot \frac{dT}{dz}$$

Avec :

- ρ la masse volumique ($kg \cdot m^{-3}$)
- C_p la capacité calorifique ($J \cdot Kg^{-1} \cdot K^{-1}$)
- h_{cc} le coefficient de conducto-convection ($W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}$)
- $\dot{D}_{massique}$ la débit massique ($kg \cdot s^{-1}$)
- $D_{chauffant}$ le périmètre chauffant, (m)
- $S_{passage\ fluide}$ la section de passage du fluide, (m^2)

qu'on discrétise directement en :

$$\rho_i^n C_i^n \frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} = \frac{4 \cdot h_{cc}^n}{D_{chauffant}} (T_{cladding}^n - T_i^n) - \frac{\dot{D}_{massique} C_{p,i}^n}{S_{passage\ fluide}} \cdot \frac{(T_i^n - T_{i-1}^n)}{\Delta z}$$

Le terme d'advection est discrétisé par un schéma vers l'arrière d'ordre 1 un espace ($\mathcal{O}(\Delta z)$). La formule centrée, bien que d'ordre supérieur ($\mathcal{O}(\Delta z^2)$) est instable, de même que le schéma vers l'avant (ordre $\mathcal{O}(\Delta z)$) [38]. Une interprétation simple est que dans le cadre d'un schéma explicite l'information propagée ne peut venir du nœud qui se trouve plus en aval de l'écoulement.

Étude de stabilité

L'analyse de la stabilité de ce schéma s'appuie à nouveau sur la méthode de Von Neumann. Elle est réalisée à paramètres constants, avec une température fixe pour le gaine et constante sur toute la hauteur du crayon. La température en chaque nœud est décomposée en deux composantes représentant la solution analytique et l'erreur numérique :

$$T_i^n = T_{i,discr}^n + \epsilon_i^n$$

En appliquant cette décomposition dans l'équation d'évolution de la température caloporteur on obtient l'équation d'évolution de l'erreur :

$$\begin{aligned} \rho C_p \frac{T_{i,discr}^{N+1} + \epsilon_i^{N+1} - T_{i,discr}^N - \epsilon_i^N}{\Delta t} &= \frac{4h_{cc}}{D_c} \cdot (T_c - T_{i,discr}^N - \epsilon_i^N) - v \rho C_p \cdot \frac{T_{i,discr}^N + \epsilon_i^N - T_{i-1,discr}^N - \epsilon_i^N}{\Delta z} \\ \rho C_p \frac{\epsilon_i^{N+1} - \epsilon_i^N}{\Delta t} &= \frac{-4h_{cc}}{D_c} \cdot \epsilon_i^N - v \rho C_p \cdot \frac{\epsilon_i^N - \epsilon_{i-1}^N}{\Delta z} \\ \frac{\epsilon_i^{N+1} - \epsilon_i^N}{\Delta t} &= \frac{-4h_{cc}}{\rho C_p D_c} \cdot \epsilon_i^N - \frac{v}{\Delta z} \cdot (\epsilon_i^N - \epsilon_{i-1}^N) \\ \epsilon_i^{N+1} &= \epsilon_i^N - \frac{4h_{cc} \cdot \Delta t}{\rho C_p D_c} \cdot \epsilon_i^N - \frac{v \cdot \Delta t}{\Delta z} \cdot (1 - e^{-j k_m \Delta z}) \cdot \epsilon_i^N \end{aligned}$$

En décomposant l'erreur en série de fourrier on parvient à exprimer le module d'amplification de l'erreur pour chaque mode spatial :

$$\frac{\epsilon_i^{N+1}}{\epsilon_i^N} = 1 - \frac{4h_{cc} \cdot \Delta t}{\rho C_p D_c} - \frac{v \cdot \Delta t}{\Delta z} \cdot (1 - e^{-j k_m \Delta z})$$

on pose alors :

$$\begin{cases} \gamma = \frac{4h_{cc} \cdot \Delta t}{\rho C_p D_c} > 0 \\ \alpha = \frac{v \cdot \Delta t}{\Delta z} > 0 \\ \beta = k_m \Delta z \quad \text{où } \beta \in [0; \pi] \end{cases}$$

Ce qui permet de ré-écrire le module d'amplification de l'erreur comme :

$$G = 1 - \gamma - \alpha \cdot (1 - e^{-j\beta})$$

qu'on ré-arrange en partie réelle et partie imaginaire :

$$G = 1 - \gamma - \alpha + \alpha \cdot (\cos(\beta) - j \cdot \sin(\beta))$$

Pour qu'il n'y est pas d'amplification de l'erreur, le module du gain doit resté inférieur à l'unité quelque soit le mode d'où :

$$|G|^2 = (1 - \gamma - \alpha)^2 + \alpha^2 + 2 \cdot \alpha \cdot (1 - \gamma - \alpha) \cdot \cos(\beta)$$

Avec :

$$\begin{cases} (1 - \gamma - \alpha)^2 + \alpha^2 \geq 0 \\ 2 \cdot \alpha \cdot (1 - \gamma - \alpha) \cdot \cos(\beta) \quad \text{de signe inconnu} \end{cases}$$

On dérive $|G|^2$ selon β afin de connaître les angles où le gain est maximal :

$$\frac{d|G|^2}{d\beta} = -2 \cdot \alpha \cdot (1 - \gamma - \alpha) \cdot \sin(\beta) = 0$$

Les solutions dépendant de β sont alors :

$$\implies \beta \in \{0; \pi\}$$

Si le maximum est en $\beta = 0$ alors imposer la stabilité revient à :

$$|G|_{max}^2 < 1$$

soit :

$$0 < (1 - \gamma - \alpha)^2 + \alpha^2 + 2 \cdot \alpha \cdot (1 - \gamma - \alpha) < 1$$

ce qui aboutit à :

$$\implies \gamma < 2, \quad \forall \alpha$$

Si le maximum est en $\beta = \pi$ alors le système à résoudre est :

$$0 < (1 - \gamma - \alpha)^2 + \alpha^2 - 2 \cdot \alpha \cdot (1 - \gamma - \alpha) < 1$$

ce qui aboutit à :

$$\implies \gamma \leq 1 - 2\alpha$$

Si on ré-injecte $\gamma = 1 - 2\alpha$ dans l'expression de G_{max} on obtient alors :

$$|G|_{max} = \sqrt{(1 - 1 + 2\alpha - \alpha)^2 + \alpha^2 - 2 \cdot \alpha \cdot (1 - 1 + 2\alpha - \alpha)}$$

$$|G|_{max} = \sqrt{4\alpha^2} < 1$$

$$\implies \alpha < \frac{1}{2}$$

En conclusion le schéma est stable si le système suivant est satisfait :

$$\implies \begin{cases} \frac{v \cdot \Delta t}{\Delta z} < \frac{1}{2} \\ \frac{4h_{cc} \cdot \Delta t}{\rho C_p D_c} < 1 - 2 \cdot \frac{v \cdot \Delta t}{\Delta z} \end{cases}$$

Test numérique

Le schéma numérique développé pour la résolution de la température du caloporteur est confrontée à une résolution analytique sur un stationnaire. La configuration retenue pour ce test est un sous-canal 1D modélisé uniquement axialement. La température de la gaine est fixée à 700 K sur toute la hauteur de l'assemblage. Seul les profils de températures stationnaires sont comparés. Les paramètres de l'équation sont considérés comme constants.

La résolution analytique repart de l'équation introduite précédemment :

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{h_{cc}}{L} \cdot (T_{cladding} - T) - \rho C_p \cdot v_z \cdot \frac{\partial T}{\partial z}$$

Avec L une distance caractéristique telle que :

$$L = \frac{S_{mouillé}}{P_{chauffé}} = \frac{(a_{pas\ réseau}^2 - \pi r_{cladding}^2)}{2\pi r_{cladding}}$$

En imposant l'état stationnaire le système devient :

$$\frac{dT}{dz} - \frac{h_{cc}}{\rho C_p \cdot v_z \cdot L} \cdot (T_{cladding} - T) = 0$$

On pose alors $\frac{h_{cc}}{\rho C_p v_z L} = \frac{1}{h_z} = \frac{h_{cc} \cdot P_{chauffé}}{C_p \cdot \dot{D}_{massique}}$.

La solution analytique s'exprime alors comme :

$$T(z) = T_{inlet} \cdot e^{\frac{-z}{h_z}} + T_{cladding} \cdot (1 - e^{\frac{-z}{h_z}})$$

Avec dans ce cas test les paramètres thermiques fixées aux valeurs suivantes :

- $T_{inlet} = 560 \text{ (K)}$
- $T_{cladding} = 700 \text{ (K)}$
- $S_{mouillé} = (1.26 \cdot 10^{-2})^2 - \pi(4.583 \cdot 10^{-3})^2 = 9.28 \cdot 10^{-5} \text{ (m}^2\text{)}$
- $\rho = 712 \text{ (Kg} \cdot \text{m}^{-3}\text{)}$
- $C_p = 5642 \text{ (J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}\text{)}$
- $\dot{D}_{massique} = 2.84 \cdot 10^{-1} \text{ (Kg} \cdot \text{s}^{-1}\text{) par sous canal}$
- $P_{mouillé} = 2\pi \cdot (4.583 \cdot 10^{-3}) + 4 \cdot (1.26 \cdot 10^{-2}) = 7.92 \cdot 10^{-2} \text{ (m)}$
- $P_{chauffant} = 2\pi \cdot (4.583 \cdot 10^{-3}) = 2.87 \cdot 10^{-2} \text{ (m)}$
- $D_{mouillé} = \frac{4 \cdot S_{mouillé}}{P_{mouillé}} = 4.69 \cdot 10^{-3} \text{ (m)}$
- $L = \frac{S_{mouillé}}{P_{chauffé}} = 3.23 \cdot 10^{-3} \text{ (m)}$
- $v_z = \frac{\dot{D}_{massique}}{\rho \cdot S_{mouillé}} = 4.2982 \text{ (m} \cdot \text{s}^{-1}\text{)}$
- $\mu = 8.5823 \cdot 10^{-5} \text{ (Pa} \cdot \text{s)}$
- $\lambda = 5.4917 \cdot 10^{-1} \text{ (} \frac{\text{W}}{\text{K} \cdot \text{m}}\text{)}$
- $Re = 1.6931 \cdot 10^5$ légèrement au dessus de la limite $1.2 \cdot 10^5$
- $Pr = \frac{\mu \cdot C_p}{\lambda} = 8.817 \cdot 10^{-1}$ dans la plage de variation permise
- $Nu = 0.023 \cdot Re^{0.8} \cdot Pr^{0.4} = 333.27$
- $h_{cc} = \frac{Nu \cdot \lambda}{D_{chauffant}} = 6.377 \cdot 10^3 \text{ (W} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{m}^{-2}\text{)}$
- $\frac{1}{h_z} = 1.142 \cdot 10^{-1} \text{ (m}^{-1}\text{)}$
- $h_z \approx 8.8 \text{ m} \gg H_{coeur} = 3.66 - 4.20 \text{ (m)}$

Numériquement la discrétisation axiale est celle imposée par la neutronique, soit une vingtaine de nœuds. Le pas de temps choisit est de $\Delta t = 10^{-3}$ s, ce qui satisfait les critères de stabilité précédemment établis :

$$\begin{cases} \alpha = \frac{v \cdot \Delta t}{\Delta z} \approx 1.992 \cdot 10^{-4} \\ \gamma = \frac{h_{cc} \cdot \Delta t}{\rho C_p L} \approx 4.914 \cdot 10^{-4} < 9.996 \cdot 10^{-1} \end{cases}$$

La figure (A.20) représente le profil axiale obtenue à l'état stationnaire pour la résolution analytique et discrétisée du problème.

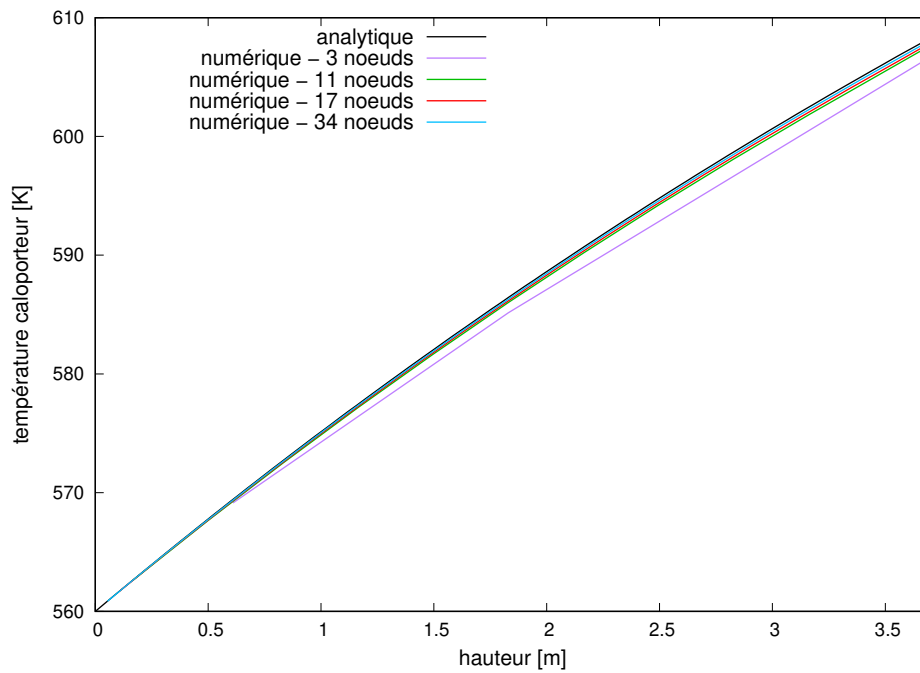


FIGURE A.20: Comparaison analytique / numérique de la résolution de l'état stationnaire pour l'équation du caloporteur. Différente discrétisation spatiale sont testées afin de rendre compte de la convergence du maillage.

L'écart de température constaté pour la discrétisation $Z = 17$ nœuds axiaux est inférieur au Kelvin prouvant ainsi la bonne implémentation du schéma numérique. Il est également possible de conclure que le maillage, imposé par les considérations neutroniques, est suffisant pour la résolution de la thermohydraulique simplifiée (dans un cas stationnaire).

A.6 Comparaison BATH - COBRA-EN

L'objectif de cette comparaison est dans un premier temps de vérifier l'implémentation de BATH et dans un second temps de quantifier les poids des hypothèses simplificatrices qui y sont utilisées. Cette comparaison permet, en outre, d'identifier la plage de validité de BATH, notamment à l'approche du régime diphasique.

La comparaison BATH/COBRA-EN [40] est réalisée sur un assemblage typique de REP (réseau carré 17x17 avec 25 tubes guides). La distribution de puissance est calculée par MCNP dans deux « zones » : celle des crayons combustibles et celle des tubes guides³. Ainsi pour COBRA chaque crayon a la même distribution de puissance, ce qui facilite la comparaison avec BATH. Le maillage axial a une forte influence sur l'estimation du *MDNBR*. En effet, un maillage grossier aura tendance à moyenniser la distribution axiale de puissance faussant ainsi l'estimation du *MDNBR*. Pour cette comparaison, le maillage axiale est fixé à 20 nœuds sur toute la hauteur active de l'assemblage.

Dans le cadre de cette comparaison inter-codes, il n'y a pas d'intérêt à itérer les calculs de neutronique et de thermohydraulique. La même distribution axiale de puissance est fournie à BATH et à COBRA-EN. Les spécifications de la configuration simulée sont les suivantes :

propriétés	valeurs
hauteur de l'assemblage	366 cm
pas du réseau	1.267 cm
rayon de la pastille combustible	4.0945×10^{-3} m
épaisseur de la gaine	5.7×10^{-4} m
densité du combustibles (<i>UOX</i>)	$10.970 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$
densité de la gaine (<i>ZrO₂</i>)	$6.552 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$
h_{GAP}	$7000 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1}$
débit massique	$3900 \text{ W} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{m}^{-2}$
T_{inlet}	560 K

Dans la suite, les résultats des deux codes sont comparés pour plusieurs niveaux de puissance imposés à l'assemblage.

A.6.1 Puissance d'assemblage imposée à 16.3 MW_{th} ($320 \frac{\text{W}}{\text{cm}^3}$ dans le combustible) :

La discrétisation spatiale adoptée par COBRA-EN pour la pastille combustible est plus faible que pour BATH : 7 nœuds sont utilisés radialement pour représenter la pastille contre 54 dans BATH. De plus COBRA-EN n'utilise pas une discrétisation cylindrique de la géométrie ce qui tend à aplatir la distribution de température combustible. Ces différences dans la modélisation du crayon expliquent l'écart constaté dans le profil axial de la température moyenne du combustible (c.f. figure A.21 (a)).

3. Dans cette zone la puissance est donc nulle (i.e. pas de prise en compte du chauffage par γ).

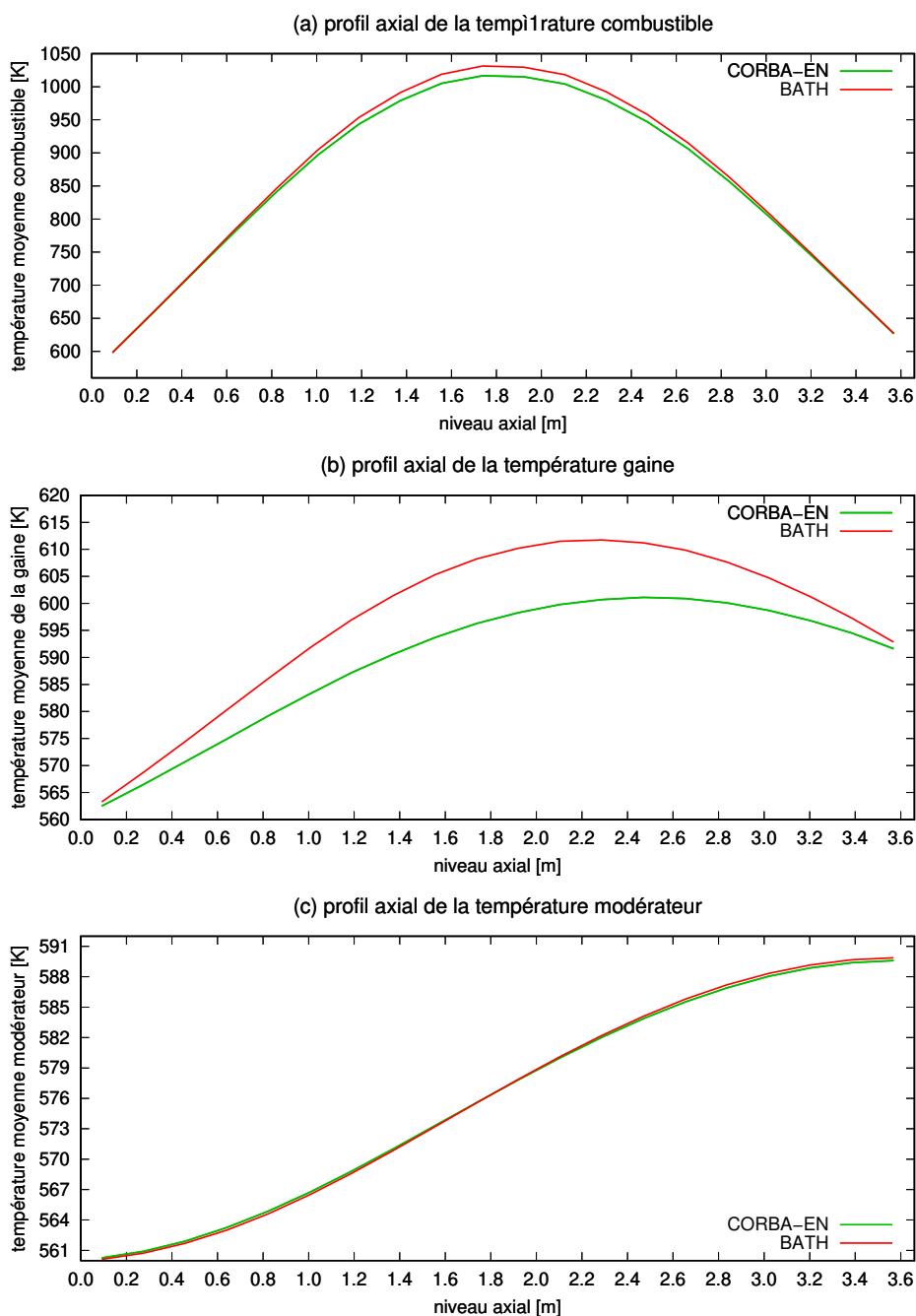


FIGURE A.21: Profil axial de température moyenne combustible, gaine et caloporteur

COBRA-EN ne donne accès qu'à la température du dernier nœud de la gaine, là où BATH fournit la température moyenne de la gaine pour chaque niveau axial. Les variables comparées ne sont donc pas les mêmes, ce qui explique les différences constatées entre les profils axiaux de température dans la gaine. (c.f. figure A.21).

Les températures du caloporteur montrent un excellent accord, avec un écart sur la température de sortie d'environ $0.3 K$. Cela confirme la validité des hypothèses simplificatrices de BATH et la pertinence des résultats donnés par le code pour des états stationnaires loin de la limite de sûreté.

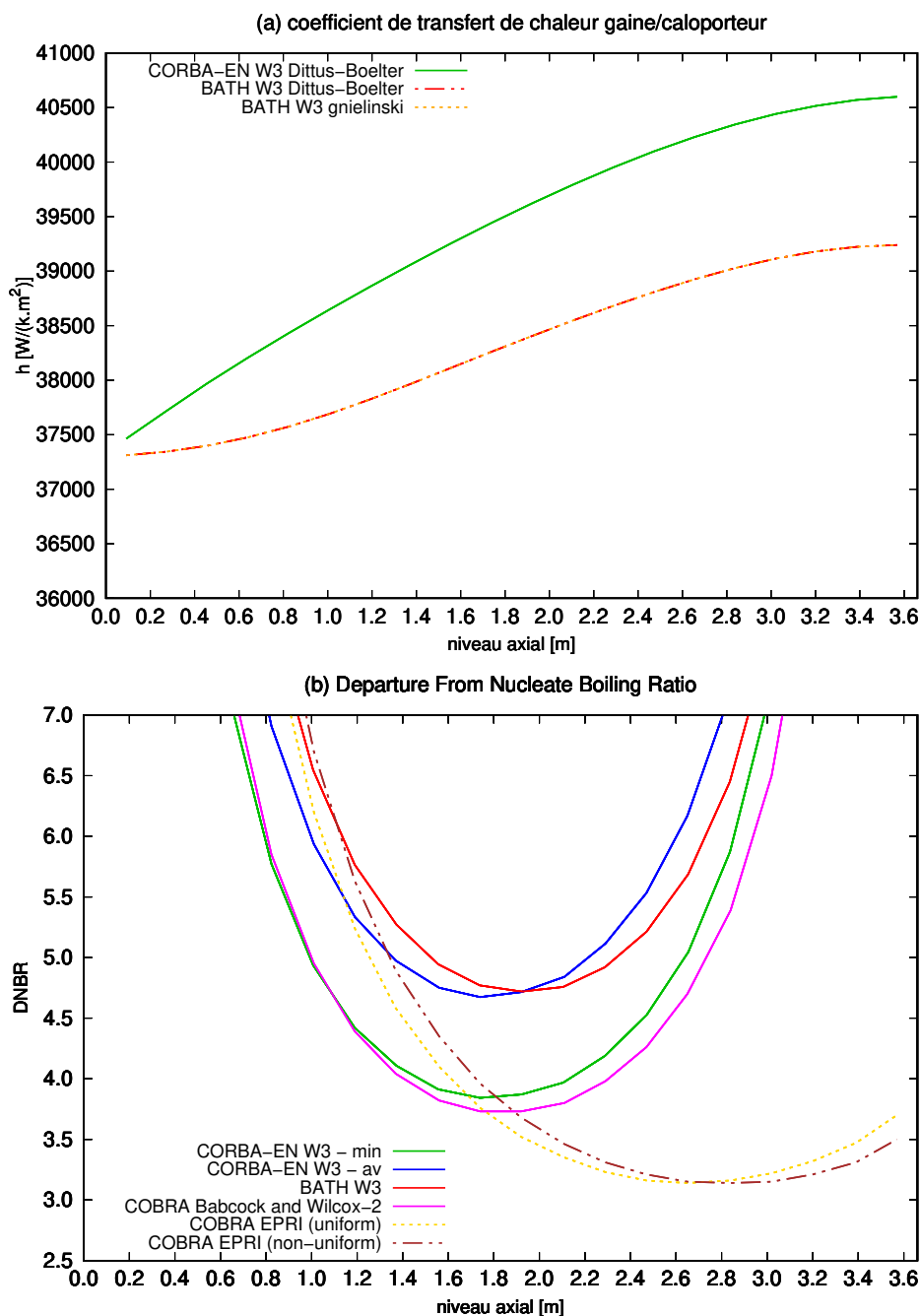


FIGURE A.22: Comparaison du $DNBR$ et du coefficient d'échange thermique calculés par BATH et COBRA-EN

Pour cette comparaison, COBRA-EN et BATH utilisent tous deux la corrélation de Dittus-Boelter pour le calcul du coefficient de transfert thermique. La figure A.22, (a) montrent néanmoins certaines différences dans le profil axial du coefficient de transfert thermique. Ces écarts peuvent-être liés à l'hypothèse d'incompressibilité / débit constant utilisée dans BATH. A titre d'illustration, un d'utilisation de la corrélation « Gnielinski » est également représenté. Le h_{gap} ainsi calculé est inférieur d'environ 10% par rapport à celui obtenu avec Dittus-Boelter. Notons cependant que cette différence se traduit par un écart négligeable sur la température caloporteur comme relevé précédemment.

La figure A.22, (b) permet de comparer les estimations du $DNBR$ calculées dans BATH et COBRA-EN. Dans BATH, le $DNBR$ est calculé par la corrélation $W - 3$ en s'appuyant sur la corrélation de Dittus-Boelter pour l'estimation du flux thermique en paroi. Différentes corrélations sont testées dans COBRA-EN. Chacune d'elles donne lieu à différentes valeurs en fonction du type de sous-canal pour lesquelles elles sont calculées. En effet, bien que la puissance soit uniformément répartie entre les crayons combustibles certains restent mieux refroidis que d'autres grâce à la présence de trous d'eau. Sans être incompatible, le $MDNBR$ calculé par BATH se monte optimiste en comparaison des différentes estimations fournies par COBRA. Rappelons que loin du flux critique ($DNBR \gg 1$) les corrélations sont peu précises, ce qui semble cohérent avec la dispersion constatée dans les diverses estimations de $MDNBR$.

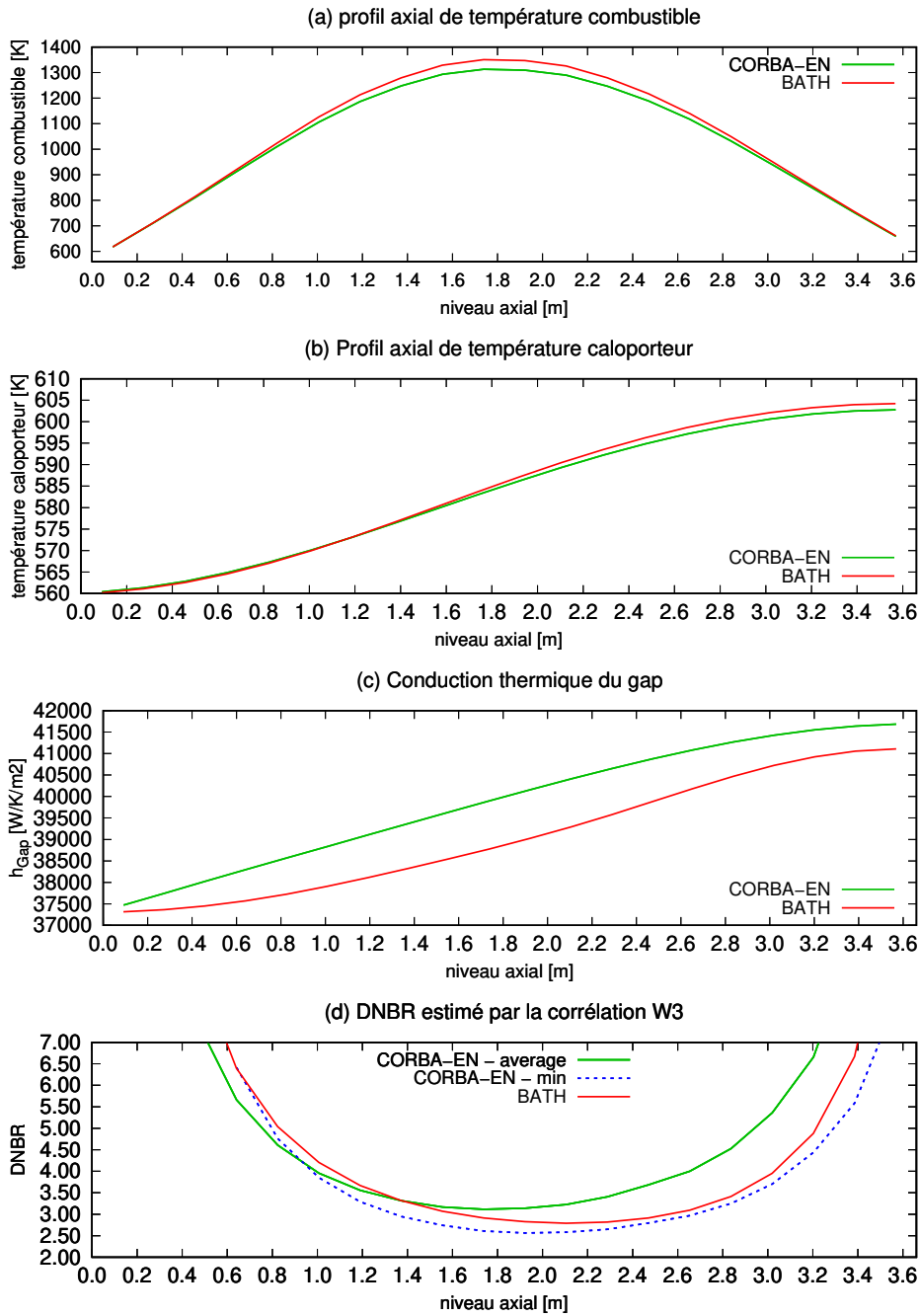
A.6.2 Puissance assemblage imposée à 24.5 MW_{th} :

FIGURE A.23: Profil axial de température moyenne combustible et caloporteur, du coefficient de transfert de chaleur et du MDNBR obtenu respectivement avec COBRA-EN et BATH

L'augmentation du niveau de puissance dans l'assemblage exacerbe les différences précédemment constatées sur les profils de températures. Comme le montre la figure A.23, l'écart sur la température (moyenne) maximale du combustible est d'environ 50 K . Celui sur la température de sortie du caloporteur est d'environ 2 K .

Bien-que ce soit la même corrélation qui soit utilisée par les deux codes, l'estimation du $DNBR$ reste différente mais compatible. Cette différence peut-être imputable à plusieurs fac-

teurs : le calcul d'un titre plus précis avec COBRA-EN, la prise en compte de la variation de la masse volumique ou encore la variation de la pression le long du sous-canal. La pression ayant une influence sur les propriétés thermiques du caloporteur. Il est à noter que la pression en sortie d'assemblage fournie à COBRA-EN est de 15.8 MPa ⁴, alors que pour BATH cette pression est supposée fixée à 15.5 MPa le long du sous-canal (c'est à dire la pression du pressuriseur).

A.6.3 Puissance assemblage imposée à 41 MW_{th} :

Pour ce niveau de puissance et le niveau de débit massique imposé, le caloporteur se trouve partiellement sous forme vapeur en sortie de l'assemblage. Deux simulations COBRA-EN sont utilisées lors de cette comparaison. La première simulation, la plus proche de BATH, suppose la présence d'une seule phase et cherche un état stationnaire de l'écoulement en résolvant les 3 équations de conservation (masse, énergie et quantité de mouvement). Une seconde simulation va prendre en compte la présence d'une phase vapeur. Pour cela 4 équations sont résolues : deux équations de conservation de la masse pour la phase liquide et la phase vapeur ainsi qu'une équation de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement pour le système formé par les deux phases. Des corrélations sont utilisées pour estimer le taux de génération de vapeur, la vitesse de la vapeur et la fraction de vide à un endroit donné.

4. COBRA-EN estime la perte de pression le long d'un assemblage à environ 72 kPa. Cette perte de charge est uniquement liée au frottement sur la gaine des crayons (i.e. pas de présence de grilles de mélange ni de modélisation de plenum).

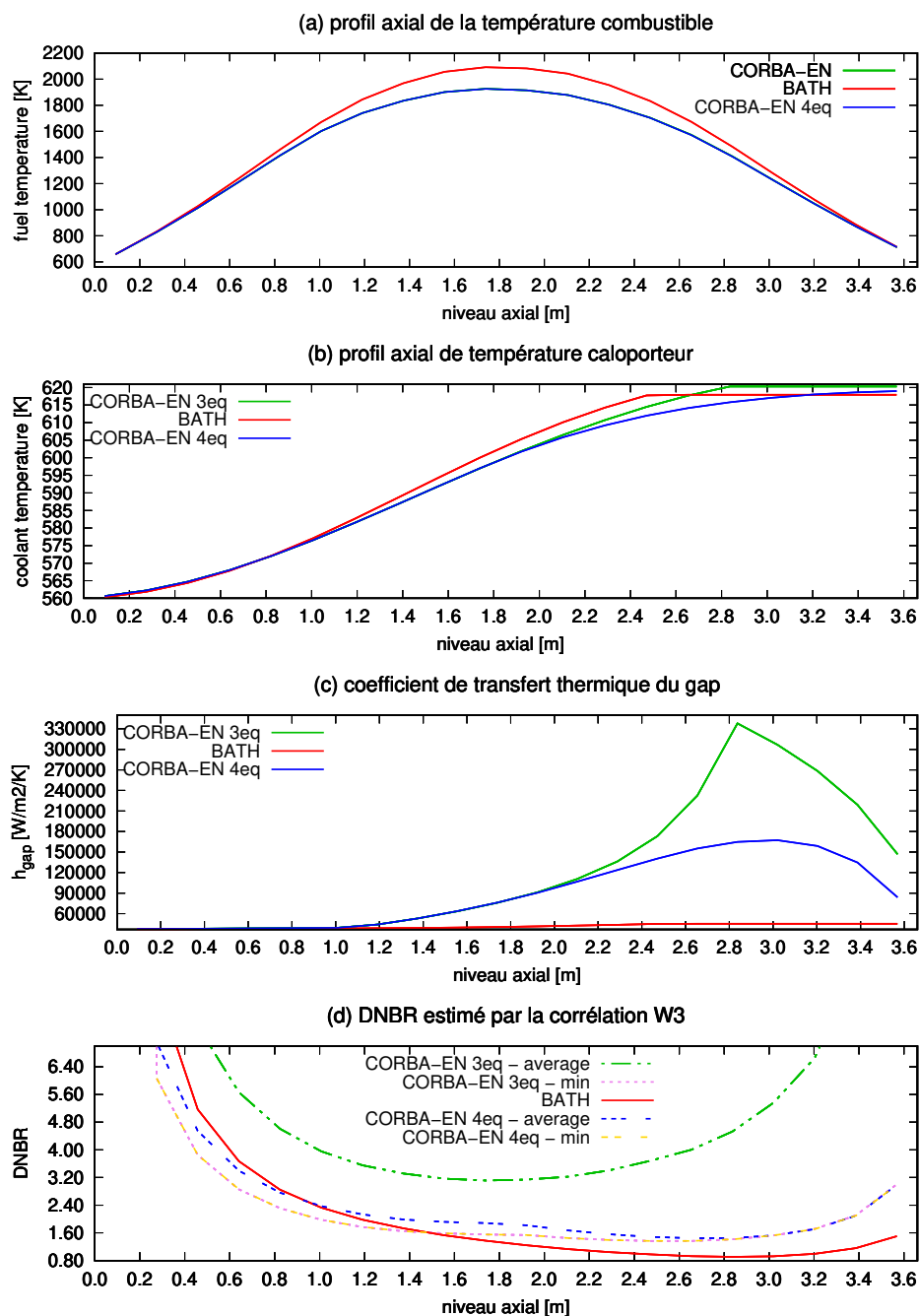


FIGURE A.24: Comparaison BATH / COBRA_EN sur un assemblage type de REP à une puissance assemblage impliquant l'ébullition du caloporteur.

Comme le montre la figure figure A.24 (b), la température de saturation est atteinte environ au $\frac{2}{3}$ de la hauteur de l'assemblage pour la simulation BATH. Cette dernière intervient plus loin dans les simulations COBRA-EN. Cette configuration donne lieu à des écarts importants, jusqu'à 300 K , sur la température combustible. Malgré un coefficient de transfert de chaleur plus faible d'un facteur 5 dans BATH par rapport au modèle à 4 équations de COBRA-EN, la prédiction du $DNBR$ reste compatible avec celles données par COBRA-EN, en particulier celle du modèle le plus raffiné. Notons que cette fois BATH fournit la prédiction la plus pessimiste du MDNBR ce qui semble positif dans l'optique d'utilisation prévue pour cet outil.

Les écarts importants constatés entre BATH et COBRA-EN sur cette configuration ainsi que la dispersion importante des résultats selon la modélisation diphasique utilisée dans COBRA-EN incite à prendre une marge suffisante vis-à-vis de la température de saturation pour pouvoir ce fier aux résultats de la simulation.

A.6.4 Conclusion :

Pour des écoulements respectant les critères de sûreté, les hypothèses simplificatrices de BATH se montrent justifiées et permettent un bon accord avec un code sous-canal industriel. La prédiction du *DNBR* par BATH se trouve dans la dispersion des résultats fournie par COBRA-EN. Pour des écoulements dégradés, les prédictions de BATH se révèlent moins précises mais acceptables. En particulier la défaillance par excès du flux thermique critique est correctement prédite par BATH.

Annexe B

Annexe du Chapitre sur la conception de SMR Th/U

B.1 REA sur les SMR-ThU : éjection d'une seule grappe de contrôle

La seule grappe éjectée dans le coeur 17x17 et le 19x19 correspond à l'une des deux grappes des cas de double éjection. Les configurations initiales de ce nouvel accident sont représentés par la figure B.1.

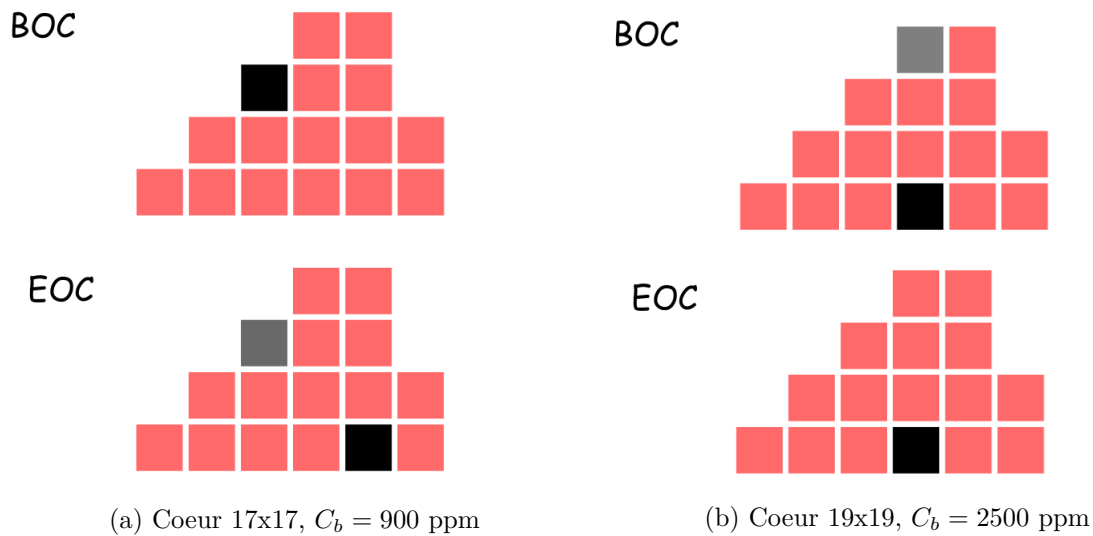


FIGURE B.1: Configuration coeur pour le transitoire d'éjection d'une seule grappe. Les positions de l'assemblages subissant l'éjection sont représentés en noir.

B.1.1 Coeur 17x17

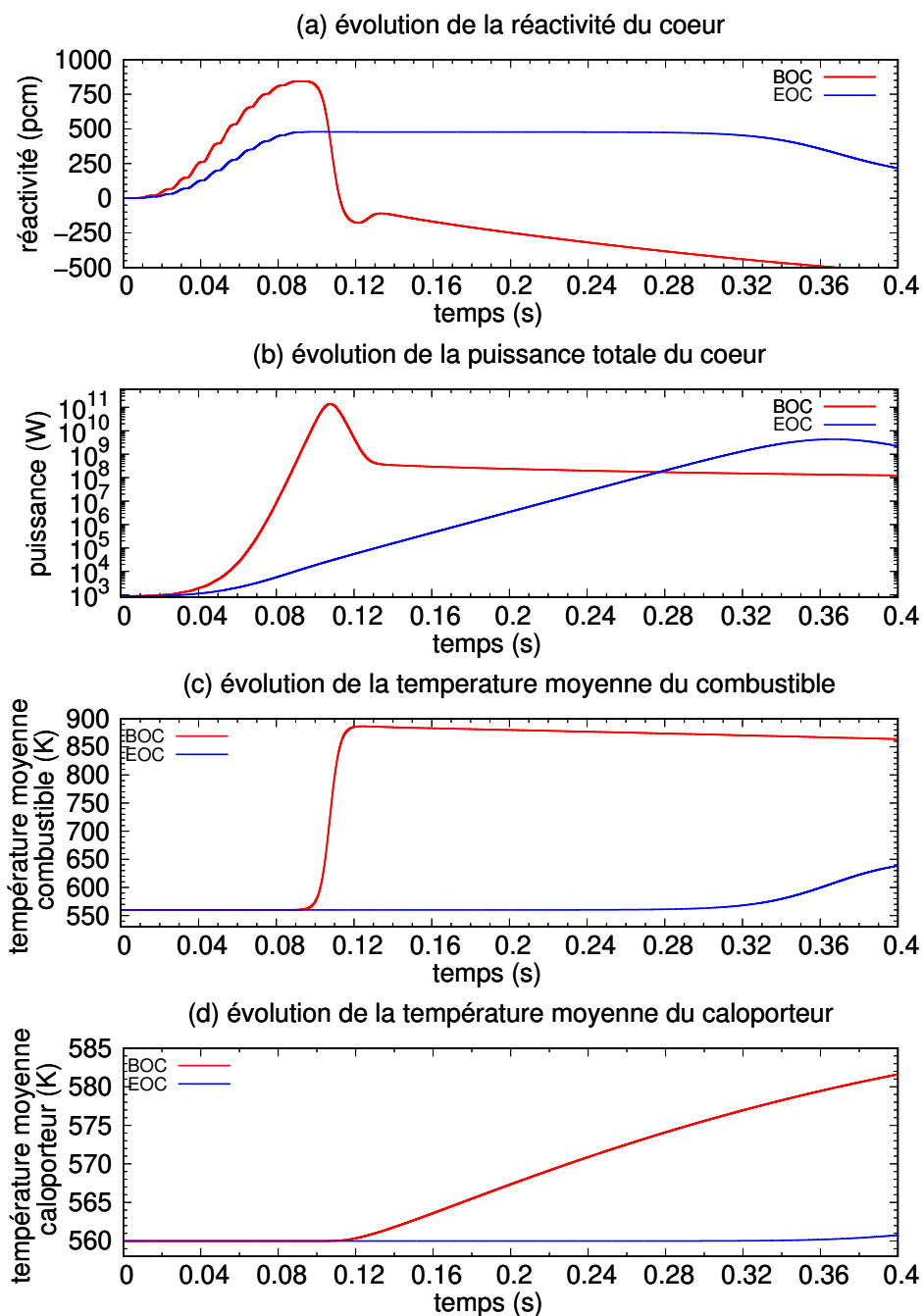


FIGURE B.2: Résumé des principales observables physiques lors de l'éjection d'une seule grappe de contrôle dans le SMR Th/U 17x17.

B.1.2 Coeur 19x19

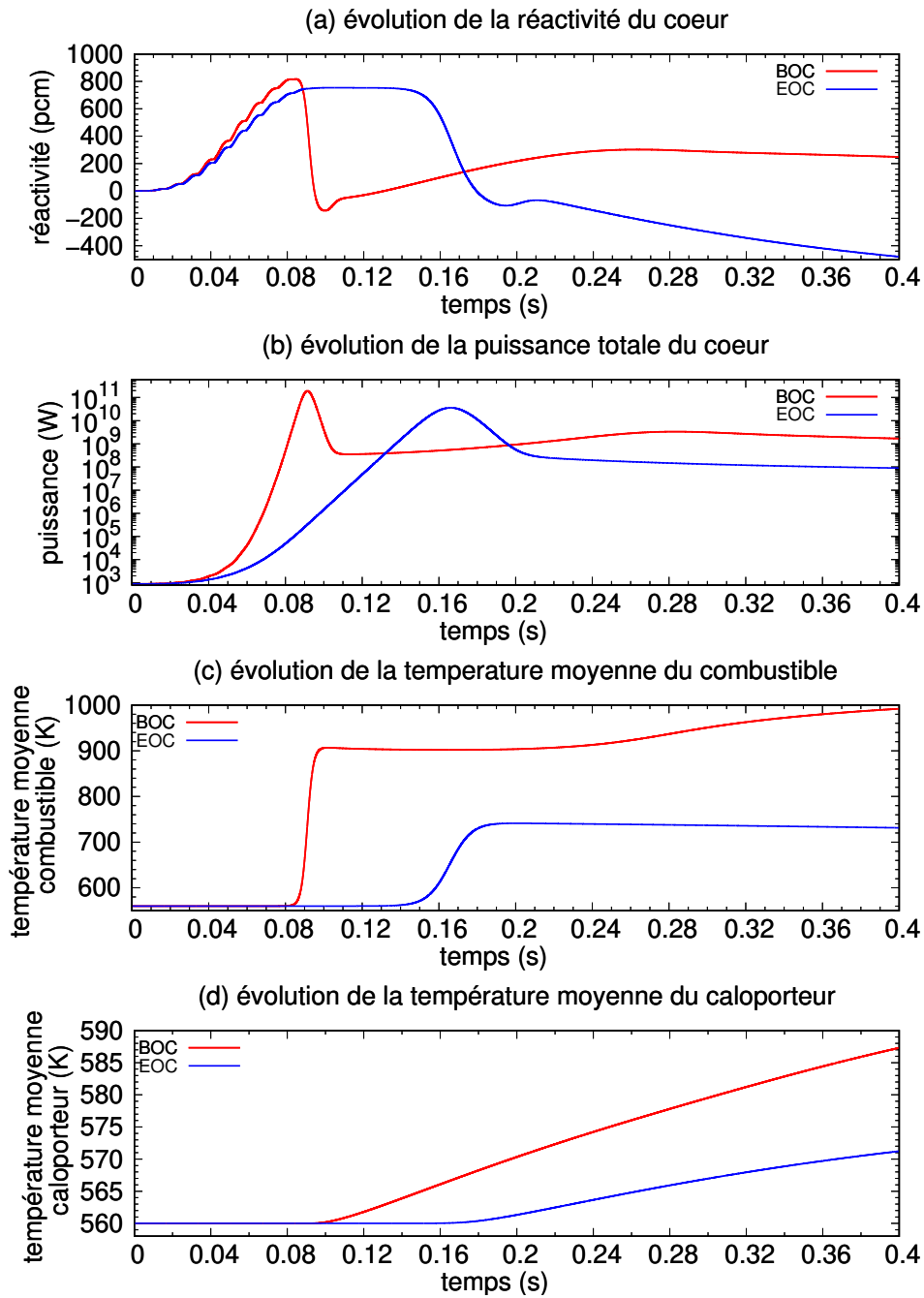


FIGURE B.3: Résumé des principales observables physiques lors de l'éjection d'une seule grappe de contrôle dans le SMR Th/U 17x17.

B.2 Modèle de cinétique point adiabatique

Le modèle de cinétique point simplifié utilisé pour l'analyse des résultats de la NDM est le suivant :

$$\frac{dP}{dt} = \frac{\rho - \beta_{eff}}{\Lambda} + \sum \lambda_i \cdot c_i \quad (\text{B.1})$$

$$\frac{dc_i}{dt} = \frac{\beta_i \cdot P}{\Lambda} - \lambda_i \cdot c_i \quad (\text{B.2})$$

$$\frac{dT_{fuel}}{dt} = \frac{P}{d_{fuel} \cdot C_p \cdot V_{fuel}} \quad (\text{B.3})$$

$$\rho(t) = \frac{\rho_\infty}{1 + e^{-100 \cdot (t-0.06)}} + \alpha_{fuel} \cdot (T_{fuel} - T_{fuel}^0) \quad (\text{B.4})$$

Avec :

P la puissance de l'assemblage subissant l'éjection, en Watt.

ρ la réactivité exprimée en pcm.

Λ le temps de génération en seconde.

β_{eff} la fraction totale de neutrons retardés, exprimée en pcm.

c_i la $i^{\text{ème}}$ famille de précurseurs.

λ_i la constante de décroissance de la $i^{\text{ème}}$ famille de précurseurs en s^{-1} .

β_i la fraction de neutrons retardés de la $i^{\text{ème}}$ famille de précurseur en pcm.

T_{fuel} la température du combustible de l'assemblage subissant l'éjection, en K.

d_{fuel} la densité du combustible, exprimée en $\frac{Kg}{m^3}$.

C_p la capacité calorifique du combustible en $\frac{J}{kg \cdot K}$.

V_{fuel} le volume de combustible d'un assemblage, en m^3 .

ρ_∞ le poids de la barre éjectée.

T_{fuel}^0 la température initiale du combustible, en K.

α_{fuel} le coefficient de contre-réaction neutronique du combustible, exprimé en $\frac{pcm}{K}$.

L'insertion de réactivité est modélisée par une fonction sigmoïde (e.g $\frac{1}{1+e^{-x}}$) qui va mimer la cinétique d'insertion de la réactivité. Ce raffinement permet d'être plus précis sur l'instant du pic de puissance.

Le combustible est simulé de façon adiabatique (i.e sans terme de refroidissement), ce qui limite la pertinence de ce modèle à la fin de la contre-réaction combustible. L'inertie combustible considérée ici est celle d'un assemblage entier, sans considération spatiale sur le terme de chauffage. Implicitement on suppose que la nappe de flux est homogène à l'échelle d'un assemblage.

Neutroniquement seul l'assemblage éjecté est représenté. Le modélisation 0D de la cinétique point ne prend pas en compte les éventuelle redistribution de puissance en cœur qui ont lieu au cour du transitoire (sauf si introduction d'une composante ad-hoc dans la réactivité). Les fuites neutroniques (provoquée par un facteur de forme élevée) vers d'autres assemblages sont donc négligées. Le poids de la barre éjecté est estimé à 1244 pcm au BOC contre 1330 pcm au EOC. Ce résultat est donné par deux simulations *Serpent2*, la première avec grappes pleinement insérée et l'autre sans grappe de contrôle.

B.3 Éjection d'une grappe de contrôle dans le cas d'un coeur 21x21 dont la hauteur et le débit massique sont augmentés.

La hauteur du coeur est passée de 2.3m à 3.66m. Le débit massique est portée à $6419.58 \frac{kg}{s \cdot m^2}$ ce qui représente le double de la valeur proposée dans le SMR 21x21 standard. La modification de la hauteur n'a pas d'incidence sur le niveau de puissance car pour un flux massique conservé l'échauffement axiale est moindre mais il se fait sur une plus grande hauteur. En revanche, la modification du flux massique laisse le choix entre double le niveau de puissance et donc la densité de puissance du combustible ou conserver le niveau de puissance coeur et diminuer l'échauffement du caloporteur en coeur. Les deux perspectives sont ici acceptables. En effet le doublement du niveau de puissance combinée à l'augmentation de la hauteur de l'assemblage donne une puissance volumique moyenne de $270 \frac{W}{cm^3}$, valeur en dessous du critère de conception.

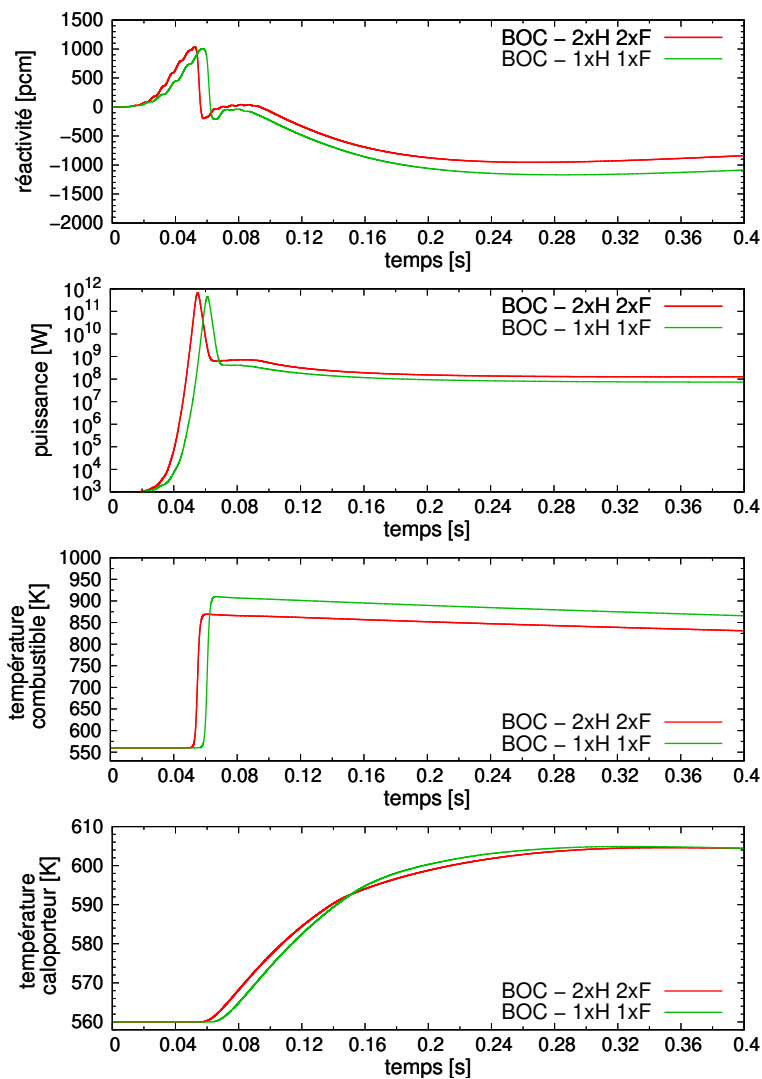


FIGURE B.4: Éjection d'une grappe de contrôle au BOC dans le coeur 21x21. Les courbes désignées par « BOC - 1xH 1xF » correspondent aux résultats précédemment présentés. Les courbes désignées par « BOC - 2xH 2xF » correspondent au cas la hauteur du coeur est de 3.66m et où le flux massique est doublé.



Enhancements to the Nodal Drift Method for a Rod Ejection Accident in a PWR-like mini-core with lumped thermal model



P. Prévot, A. Nuttin*, N. Capellan, O. Méplan

LPS, Université Grenoble-Alpes, CNRS/IN2P3, Grenoble, France

ARTICLE INFO

Article history:

Received 28 July 2016

Received in revised form 21 October 2016

Accepted 22 October 2016

Available online 14 November 2016

Keywords:

Nodal Drift Method

Spatial kinetics

Diffusion theory

Rod Ejection Accident

PWR

Lumped thermal model

ABSTRACT

Previous burnup calculations of High Conversion Water Reactor (HCWR) options have given promising fuel cycle results. Now safety must be assessed. This requires the development of academic computing tools, coupling as simply as possible neutronics and thermal-hydraulics. The diffusion-based Nodal Drift Method (NDM) for spatial core analysis has been developed towards a broad and coarse safety review of the most promising candidates. NDM has been already validated on a simplified CANDU LOCA benchmark, without thermal coupling. Dedicated to the calculation of a Rod Ejection Accident (REA) as defined by a recent PWR-like mini-core benchmark, the present work describes and validates all the necessary enhancements to NDM. A first 2D geometry with coupling to a lumped thermal model has been validated. Then, 3D features including a refined model for the ejected control rod have been added. Particular attention has been paid on the analysis of discrepancies with reference results. Limitations due to the oversimplified lumped thermal model are finally discussed.

© 2016 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

Our Simulation Initiative for Reactors Improving Uranium savings and Safety margins (SIRIUS) has focused since 2005 on water cooled reactors, possibly more competitive than fast reactors in the next decades. The conversion performance of thorium-fueled CANDU and PWR reactors has been studied (Nuttin et al., 2012). While thorium-fueled standard CANDU is barely breeding, PWR finds it hard to reach such a high conversion level. From a comparative analysis of CANDU vs. PWR core neutronics, we have preliminarily evaluated possible ways to achieve significantly higher conversion based on faster spectra. Burnup calculations of a few High Conversion Water Reactor (HCWR) options have given promising fuel cycle results. Their safety level must now be assessed on typical design transients, which requires new academic tools including a simplified method for spatial kinetics called Nodal Drift Method (NDM). In a first subsection, the work previously done on NDM is summarized. Then a recent optimization of the integration scheme is described.

1.1. Previous results and new objectives

NDM is part of the C++ framework MURE (Méplan et al., 2009), which has recently been widened to SMURE (Méplan et al., 2015).

* Corresponding author.

E-mail address: nuttin@lpsc.in2p3.fr (A. Nuttin).

This powerful collection of simulating tools allows to use Monte Carlo codes MCNP 6 (MCNP Team, 2014) and Serpent 2 (Leppänen et al., 2015) for the proper generation of diffusion data, the calculation of fuel evolution and the coupling of neutronics with thermal-hydraulics (Capellan et al., 2009). In this context, NDM has been developed as a missing link between too approximate point kinetics and too sophisticated industrial codes. NDM is based on 2-group diffusion theory and a lumped parameter model with maximized mesh size. It has already been described and validated on a simple CANDU LOCA (Loss Of Coolant Accident) benchmark, without any needs for thermal calculations thanks to cross sections tabulated against time (Nuttin et al., 2016).

Most of the interesting HCWR cores whose safety remains to be assessed are PWR-like. Rod Ejection Accident (REA) is thus their common design transient. This work aims at enhancing NDM towards this particular type of 3D calculations. Coupling to a lumped thermal model has been used to update diffusion data and take care of thermal feedbacks. The benchmark of a REA in a 3D PWR-like mini-core, initially proposed by Kliem et al. (2011) and with results from Sjenitzer et al. (2015), has been chosen for validation purposes.

1.2. Prior optimization of the integration scheme

NDM solves the 2-group diffusion equations in each of the homogeneous zones (named “lumps”) of a core. For each lump, the unknowns are the total numbers of fast neutrons n_1 (above

0.625 eV), slow neutrons n_2 and delayed neutron precursors (with six groups in all the following). Neutron exchange between lumps is quantified by “drift rates”. Drift rate of energy group g is noted Drt_g and is equal to $D_g \Delta(n_g v_g)$ where D_g is the diffusion coefficient, v_g the neutron velocity and Δ stands for the “Drift Operator”. The latter is based on a simple discretization of the Laplacian, like in the “effective D/L method” by Yasinsky and Henry (1965). The number n of pieces into which the core is cut per dimension is called “ppd” and noted “n-p”. Optimal ppd is checked to be in agreement with Ackroyd (1986), who gives a condition to be equivalent to a more precise finite difference scheme. Let us add that “internodal” diffusion coefficients D_{ij} have been recently developed, so that drift rates between neighbour lumps i and j remain equal in absolute value. For each energy group, D_{ij} is computed from intrinsic D_i and D_j , giving the related P_1 transport cross sections. These are weighted by the products of neutron number and velocity to give the proper average $\Sigma_{tr,ij}$ and finally D_{ij} (equal to $1/3\Sigma_{tr,ij}$).

In the first version described by Nuttin et al. (2016), the ODE systems of all lumps were solved within a simple fully explicit scheme by a classical variable-step fourth-order Runge-Kutta method. Now the integration scheme remains to be optimized for complex safety transients, with a trade-off between accuracy and computing time. For that purpose, a simple PWR-like transient test case has been used. The core is a 2D square of 350 cm side, filled with the homogenized composition of a typical UOX assembly (with 4.5 at.% of ^{235}U in U) as given by Kozłowski and Downar (2007). First the initial steady state is obtained by NDM’s IRIS (Iterative Recovery of Initial Stability) method, described by Nuttin et al. (2016). Then a flat neutron distribution is suddenly imposed all over the core, with the same value $n_1 = n_2$ in all its lumps. As this distribution is different from steady state, a transient starts. Four explicit integration methods are used to compute this transient and are compared at its end, which is a new equilibrium: the forward Euler method (called “Euler”), the Successive Over-Relaxed Euler method (“SOR-Euler”), the fourth-order Runge-Kutta method (“RK4”) and the Runge-Kutta-Fehlberg method (“RKF45”). Too complex of use within a multi-physics framework, implicit methods have been excluded.

The scheme chosen as reference for this comparison is Euler with very fine spatial and time discretizations (ppd of 50-p and time step of 10^{-9} s), which is called “Ref. Euler” in the following. To be compared to this reference, all other schemes have looser steps of 30-p and 10^{-8} s respectively. For each scheme, accuracy is given by its relative error with reference on the core total neutron number (n_{tot}). Computing times are measured on the same processor and for the same transient physical time of 7 ms. Stability is quantified by the maximal time step Δt_{stab} (increased from its nominal value of 10^{-8} s) before divergence. All values obtained for these three indicators are given at the end of transient by Table 1. Although tempting, Euler is rejected because of its lack of stability which will worsen as the systems will become more complex. High order RK4 and RKF45 methods are a little more stable, but at the price of higher computing times (and with results becoming inaccurate when Δt is close to Δt_{stab}). For a reasonable computing cost, SOR-Euler (as described by Nicholls et al., 1990) is more stable than Euler. More precisely, SOR-Euler is a semi-implicit scheme which approximates after n iterations the new converged value $Z_{n+1} =$

$Y_0 + \Delta t \times dY_{n+1}/dt$ at time $t + \Delta t$ of any variable equal to Y_0 at time t . The dY_{n+1}/dt derivative is the LHS term of the diffusion equation for the considered energy group (computed for Y_{n+1}). The link between Y_{n+1} and the previous iteration is given by $Y_{n+1} = (1 - \omega) Y_n + \omega Z_n$, with ω the so-called relaxation parameter. For enhanced stability, ω must be chosen between 0 and 1. As a good trade-off, it has been set to 0.5 here. Such a choice makes this generally called “Over-Relaxed” scheme actually under-relaxed in our case. As shown by Table 1 once Euler is rejected, SOR-Euler provides a pretty good trade-off between accuracy and computing time. In consistency with our search for a high accuracy vs. complexity ratio, it is chosen as the new scheme for NDM and will be used with the same nominal time step of 10^{-8} s in all the following.

2. Validation on a 2D version of the mini-core REA

After its first benchmark on a 2D CANDU LOCA without thermal coupling, NDM had to be tested against real 3D PWR kinetics. That is why the REA in a PWR-like mini-core, proposed by Kliem et al. (2011) and detailed by Sjenitzer et al. (2015), has been chosen and is precisely described here. Then, for first tests of NDM on such a typical PWR design transient, a simple 2D model is proposed with lumped thermal coupling. Special care has been taken of the ways cross sections are interpolated when temperatures change and when rod is ejected. Last subsection gives the main results of this model and deduces the main enhancements to be made.

2.1. Description of the original mini-core benchmark

For more than ten years, coupling Monte Carlo neutron transport with subchannel thermohydraulics have met great successes. First limited to steady states at full power (like for instance in Capellan et al., 2009), this technique is now actively developed towards transient simulations. With a fully explicit scheme, Sjenitzer et al. (2015) have proposed the dynamic coupling of the Monte Carlo code TRIPOLI-4 (TRIPOLI-4 Project Team, 2013) using the JEFF-3.1.1 library with the subchannel code SUBCHANFLOW (Imke and Sanchez, 2012) as a new tool for safety studies. For validation purposes, this recent work makes use of a few test cases among which we have chosen the so-called “mini-core benchmark”. This transient is a REA, giving access to the interesting issues of both strong spatial heterogeneity and thermal coupling. It was originally proposed in a report of the european NURISP project (Chanaron et al., 2015). It is a subtask of a boron dilution scenario which has been developed for testing the multi-physics coupling of the 3D reactor dynamics codes COBAYA3 (Lozano et al., 2008) and DYN3D (Rohde et al., 2016) with the 3D thermal-hydraulics code FLICA4 (Toumi et al., 2000) within the NURESIM platform (Jiménez et al., 2015). The complete benchmark definition is given in Kliem et al. (2011). The mini-core is composed of eight MOX fuel assemblies surrounding a central UOX fuel assembly and horizontally reflected by water assemblies (cf. Fig. 1).

All assemblies have 17×17 rod positions and typical PWR dimensions, with a side of 21.42 cm and a height of 366 cm. Details of UOX and MOX fuel assemblies have been borrowed from the so-called “Purdue benchmark” of a REA in a full PWR core

Table 1

Integration schemes compared to Ref. Euler at the end of our simple PWR-like transient test case in terms of accuracy, computing time and stability.

	Euler	SOR-Euler	RK4	RKF45
Rel. error on n_{tot} (%)	2.21	2.46	2.33	2.33
Computing time (s)	309	793	1089	1854
Max. time step Δt_{stab} (s)	10^{-6}	$2 \cdot 10^{-6}$	$2 \cdot 10^{-6}$	$2 \cdot 10^{-6}$

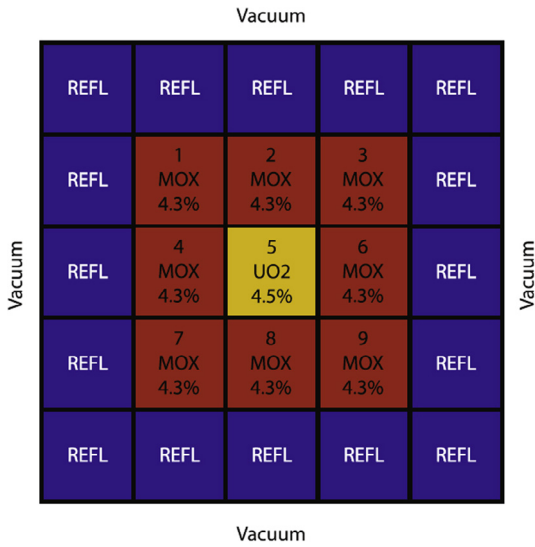


Fig. 1. Layout of the fuel assemblies in the mini-core, as described and numbered by Sjenitzer et al. (2015).

(Kozłowski and Downar, 2007). Enrichment values given (in at.%) by Fig. 1 are average, for these assemblies have complex structures with different types of fuel pins (all having usual PWR features, including those with burnable poisons). Fig. 2 details the central UOX fuel assembly of the mini-core, containing 104 Integral Fuel Burnable Absorber (IFBA) pins for short-term reactivity control. The 24 control pins, part of the so-called “control rod” which is ejected in the mini-core benchmark, are indicated on Fig. 2 by the locations with a cross. On same locations, MOX assemblies have instead 24 WABA (Wet Annular Burnable Absorber) pins providing longer-term reactivity control than IFBA ones.

Let us now describe more precisely the transient and its calculation by Sjenitzer et al. (2015). This unprotected transient consists in the ejection of the control rod from the central UOX fuel assembly of the mini-core, being initially in the so-called Hot Zero Power (HZP) steady state. As detailed by Table 2, the partially inserted control rod is fully ejected in 0.1 s exactly. The transient has been computed until $t = 0.2$ s, as a new equilibrium is roughly reached. Let us specify that, due to slight inconsistencies in data given by Sjenitzer et al. (2015), Table 2’s initial and transient conditions have been carefully cross-checked against Kliem et al. (2011). The critical boron concentration is approximated from the result obtained by Sjenitzer et al. (2015), considering a significant accuracy of 10 ppm in our following interpolations. The TRIPOLI-4/SUBCHANFLOW coupling developed and used on this REA bench-

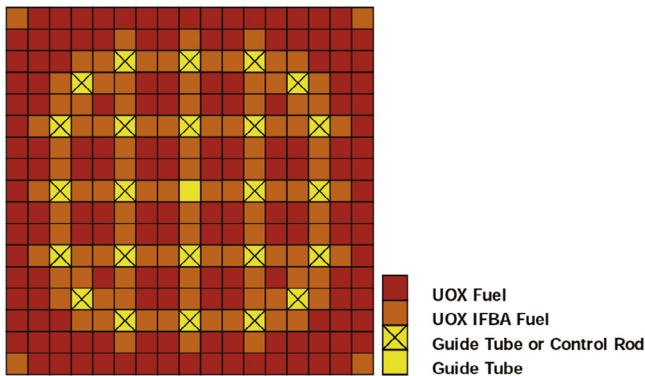


Fig. 2. Rod configuration of the central UOX fuel assembly in mini-core, as given by Kozłowski and Downar (2007).

Table 2

Main conditions for Hot Zero Power (HZP) steady state ($t = 0$) and REA transient from HZP, from Kliem et al. (2011) and Sjenitzer et al. (2015).

	HZP	REA from HZP
Core power	1 W	Increases (about 0.1 GW at $t = 0.2$ s)
Coolant flow rate \dot{m}	82.12 kg·s ⁻¹ (per assembly)	Constant (82.12 kg·s ⁻¹)
Coolant inlet temperature T_{in}	560 K	Constant (560 K)
Boron concentration (critical)	500 at. ppm	Constant (500 at. ppm)
UOX control rod insertion depth	232.433 cm (height of 366 cm)	Decreases at constant speed (zero at $t = 0.1$ s)

mark by Sjenitzer et al. (2015) is used as our reference in all the following. In this scheme, the ejected rod position is updated at each time step in the TRIPOLI-4 description of the mini-core. Excepting reflectors where no thermal calculation is performed, each assembly is subdivided in 17 axial zones and associated to a thermal-hydraulic subchannel computed by SUBCHANFLOW. Another coupled scheme between diffusion code DYN3D and sub-channel code FLICA-4 (Jiménez Escalante et al., 2012) has been used for validation by Sjenitzer et al. (2015) and will allow us to estimate if a discrepancy with the reference is significant or not.

2.2. Thermal and nuclear elements of a first 2D model

In this preliminary model, the spatial discretization is not optimized. It associates one single NDM lump to each assembly, with zero axial buckling. After a brief description of its simple thermal part, we explain here how it manages the dependencies of interpolated cross sections on both temperatures and rod ejection.

2.2.1. Lumped thermal coupling

Fuel and coolant temperatures T_{fuel} and T_{cool} of any lump (and its associated assembly in this case) are computed as the time-dependent solutions of the simple coupled system of Eqs. (1) and (2) below:

$$\rho_{fuel} V_{fuel} C_{fuel} \frac{dT_{fuel}}{dt} = P_{tot} - G_{fit}(T_{fuel} - T_{cool}) \quad (1)$$

$$\rho_{cool} V_{cool} C_{cool} \frac{dT_{cool}}{dt} = G_{fit}(T_{fuel} - T_{cool}) - 2 \dot{m} C_{cool}(T_{cool} - T_{in}) \quad (2)$$

where:

- ρ_{fuel} (ρ_{cool}) is the density of the fuel (respectively the coolant),
- V_{fuel} and V_{cool} are respectively the fuel and coolant volumes within the lump,
- C_{fuel} (C_{cool}) is the heat capacity of the fuel (respectively the coolant) in J·kg⁻¹·K⁻¹,
- P_{tot} is the total power released in the lump (and supposed to be only in the fuel) in W,
- G_{fit} is the adjusted global conductance of the fuel-to-coolant heat transfer for the lump, in W·K⁻¹.

As already given by Table 2 for an assembly, \dot{m} is the mass flow of the coolant (in kg·s⁻¹) and T_{in} the constant coolant inlet temperature. These two equations, with all terms in W, are simple power balances of the lump fuel and coolant volumes (about $4.7 \cdot 10^{-2}$ and $9.8 \cdot 10^{-2} \text{ m}^3$ respectively, for densities of about 10.24 and 0.73 g·cm^{-3}). Products $\rho_{fuel} V_{fuel}$ and $\rho_{cool} V_{cool}$ are kept constant, assuming that the total interacting masses remain unchanged during the whole transient. All necessary values at given temperatures have been taken from IAEA (2008) for the fuel and from NIST

(2011) for the coolant. Heat capacities C_{fuel} and C_{cool} are kept constant, evaluated to about 320 and 5500 J·kg⁻¹·K⁻¹ respectively at iteratively determined average temperatures. In addition to the hypothesis of constant ρV products, it has been assumed that:

- coolant inlet conditions are constant,
- axial heat fluxes are negligible compared to horizontal ones,
- power sources which are either delayed or released in coolant can be mixed in P_{tot} (released in fuel).

All these assumptions are usual for REA, especially in this case of a rapid ejection with thermal feedbacks which make transient end after 0.2 s only. Let us carefully note here that they will not apply anymore in a slower transient such as a Main Steam Line Break (MSLB), which will require specific developments.

In more details, Eq. (1) links the temperature change of fuel to its heating by fission and to its cooling by heat transfer towards coolant. This latter term is simply given by the effective thermal conductance G_{fit} , whose constant and unique value is adjusted to 2 10⁵ W·K⁻¹ for an optimal agreement of main results with reference. Only at higher power, with average fuel and coolant temperatures both different to 560 K, could G_{fit} be directly evaluated via Eq. (2) at steady state. Anyway, no extra effort to enhance the G_{fit} value of this oversimplified fuel-to-coolant heat transfer model is really worth, for G_{fit} is nothing but a convenient fitting parameter which cannot reproduce the complexity of local effects. Physical conductance values are indeed eminently local and strongly related to temperatures. Moreover, particularly during transients, so-called Pellet-Clad Interactions lead to changes in gap conductances which increase as power peaks and gap shrinks. This process is similar to the one induced by burnup, as precisely described by Todreas and Kazimi (2012). In order to illustrate the expected difference between NDM's effective conductance G_{fit} and local physical values, an analytical calculation based on PWR UOX thermal resistances has been done with both fuel and coolant temperature set at 560 K. A typical value of 1.7 10⁴ W·K⁻¹ has been obtained, confirming that G_{fit} 's optimal value has no local validity. With the net coolant power as its LHS term, Eq. (2) subtracts the power lost via the coolant flow to the fuel-to-coolant heat transfer. The approximation of a linear axial profile for coolant temperature along each lump's height has been made, with a view to 3D which will make it more valid. Hence, with T_{out} being the coolant outlet temperature, the difference ($T_{out} - T_{in}$) in the power lost term has been duly replaced by $2(T_{cool} - T_{in})$.

2.2.2. Cross section dependencies

For each assembly type, 2-group cross-sections are taken from Kliem et al. (2011). These data are tabulated in burnup, fuel temperature (between 473 K and 1773 K), coolant density (between 0.05 and 0.87 g·cm⁻³) and boron concentration. Burnup is set to zero and boron concentration to 500 ppm (cf. Table 2). All coolant densities, in particular those given as results by Sjenitzer et al. (2015), have been converted to temperatures by using tables from NIST (2011). During the transient, each macroscopic cross section Σ (for instance the thermal absorption one Σ_{a2}) is computed by NDM as the sum of separate fuel and coolant contributions:

$$\Sigma = \Sigma(T_{f0}, T_{c0}) + P_{c0}(T_{fuel} - T_{f0}) + Q_{f0}(T_{cool} - T_{c0}) \quad (3)$$

where:

- $\Sigma(T_{f0}, T_{c0})$ is the value at the initial fuel and coolant temperatures $T_{f0} = T_{c0} = 560$ K,
- $P_{c0}(T_{fuel} - T_{f0})$ is a second-order polynomial in $(T_{fuel} - T_{f0})$ without constant term,
- $Q_{f0}(T_{cool} - T_{c0})$ is a second-order polynomial in $(T_{cool} - T_{c0})$ without constant term.

This separation of dependencies on T_{fuel} and T_{cool} has been motivated by some reference results (cf. Section 3), showing that coolant temperatures in the mini-core start to increase quite a long time (of about 30 ms) after fuel ones. Let us specify that the two coefficients of the P_{c0} polynomial are obtained by imposing $T_{cool} = T_{c0}$ (hence P 's "c0" index). Similarly, Q_{f0} 's coefficients only depend on T_{f0} . Diffusion coefficients at fuel and coolant temperatures are obtained via transport cross sections. For any energy group, each transport cross section Σ_{tr} is interpolated like all macroscopic cross sections and equal to 1/3D within the simple P_1 approximation. Other kinetic data needed such as delayed neutron proportions and time constants or group velocities v are directly obtained from the same tabulated source (Kliem et al., 2011). All these data give access to characteristic times extracted from NDM's 2-group diffusion equations as the inverses of Σv products. These times have been checked to be fully consistent with the previously optimized time step of 10⁻⁸ s (cf. Section 1).

Let us finally describe the special case of mini-core's central UOX assembly. As the control rod is ejected, its tip divides one lump at a given time into two sub-volumes, one rodDED (above) and the other unrodDED (below). The lump is thus "partially rodDED", which imposes to approximate its cross sections. In this first 2D version, average fluxes are computed along the complete assembly height. As a consequence, the only possible way to homogenize partially rodDED cross sections in this case is to simply weight them by volumes:

$$\Sigma_V = \frac{\Sigma_{rod} V_{rod} + \Sigma_{unr} V_{unr}}{V_{lump}} \quad (4)$$

with V_{lump} the volume of the lump and V_{rod} (resp. V_{unr}) its rodDED (resp. unrodDED) part. The cross section values Σ_{rod} and Σ_{unr} are obtained from tabulated diffusion data (distinguishing rodDED from unrodDED assemblies) via the fuel and coolant temperatures of the lump at any time. This "V-weighting" is coarse and will be improved with 3D, giving access to some more axial detail for neutron fluxes.

2.3. Main results and needs for improvement

The 2D NDM model described in previous subsection can be roughly evaluated by looking at Fig. 3 showing its main results on the mini-core REA. Total power reaches a so-called "power peak" around $t = 0.07$ s according to reference, while 2D NDM makes it happen about 0.01 s before as shown by Fig. 3(a). This is probably due to our 2D modelization, especially as regards the control rod ejection effect. The two power curves tend to agree thereafter, despite a slightly increasing gap following a small local maximum of 2D NDM close to $t = 0.1$ s (end of rod ejection). During the process of choosing the optimal conductance G_{fit} , this maximum has been identified as an unphysical artefact induced at end of rod ejection. Two simple qualitative remarks can be made on total power, that lead to interesting conclusions. First, total power increases by almost twelve orders of magnitude. This illustrates how challenging is such a REA as a test, and makes our results look not so bad given the simplicity of our very first 2D model based on the diffusion approximation. The second obvious remark is that total power reaches its maximum well before the end of rod ejection, which shows the high importance of thermal feedbacks and consequently of the way thermal exchanges are modeled in this transient.

At first sight, Fig. 3(b) shows a discrepancy with reference that seems more embarrassing than the time gap between power peaks previously noticed. According to reference, UOX fuel temperature rises much later than in our results. A more detailed analysis of this deviation clearly shows that most of it may be due to an error in the exploitation of reference data by Sjenitzer et al. (2015). As a

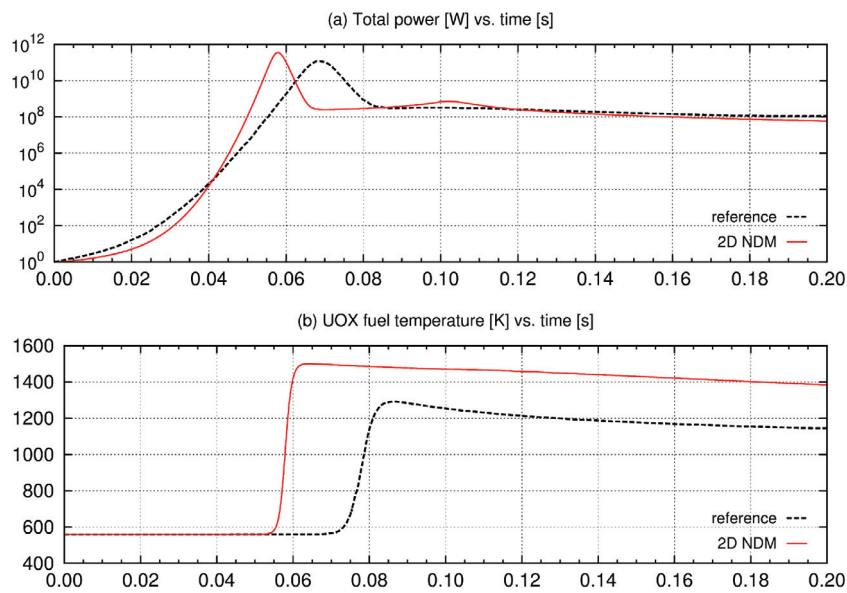


Fig. 3. Main results obtained on REA from HZP by 2D NDM, compared with reference (TRIPOLI-4/SUBCHANFLOW).

matter of fact, reference total power and UOX fuel temperature exhibit inconsistent rises (difficult to detect since shown on separate figures in Sjenitzer's article). When the reference power peak ends due to thermal feedback, the reference fuel temperature of the hottest assembly (UOX) barely begins to increase. More precisely, reference power is maximal at $t = 0.068$ s while UOX fuel temperature meets its fastest increase rate at $t = 0.078$ s. On the contrary, both maxima are logically reached at the same time according to NDM. It really seems that TRIPOLI-4 and SUBCHANFLOW data have been desynchronized, probably after a pre-transient coupled calculation as described by Section 2.2 of Sjenitzer's article. Thus we make the hypothesis that all reference temperature results have been inadvertently delayed by 0.010 s, which is only benign and does not jeopardize at all our reference's validity.

Besides the time gap between fuel temperature rises (significantly reduced within previous hypothesis), the main time discrepancy lies in the difference between power peaks as shown by Table 3's first line. NDM's advance of 0.011 s should be reduced by a more accurate 3D model. Next line shows that total power is overestimated by 2D NDM at its maximum (by a factor of 3.0), while it is underestimated at the end of transient (by a factor of 0.7). Table 3's last line indicates a fuel temperature discrepancy of about 200 K at the end of transient. Taking a typical Fuel Temperature Coefficient of -2.5 pcm/K, this corresponds to a reactivity gap of 500 pcm which is largely acceptable (given typical NDM discrepancies as previously observed by Nuttin et al., 2016). All these rather satisfying results obtained by our first 2D model leave room for great expectancies towards 3D.

3. Enhancements and validation on the 3D mini-core REA

REA in a PWR causes an eminently local perturbation. Within an epithermal spectrum, the mean scattering free path is small com-

pared to core dimensions. Hence, power and temperature changes are quite slow to propagate. For all these reasons, added to the conclusions of our preliminary 2D NDM analysis, geometric detail is essential for accurate transient results. This section first describes all the necessary upgrades of NDM for handling 3D calculations. Then new results are compared with reference. Finally, a few sensitivity studies allow to check that optimized and validated 3D NDM is as accurate as possible with the lumped thermal model.

3.1. Necessary enhancements to 3D NDM

First a converged discretization is looked for, on a simplified configuration of the mini-core and by comparison to a Monte Carlo calculation. Then accuracy is optimized by the add of 2-group extrapolation lengths for edge lumps. Last important enhancement deals with rod ejection and the proper homogenization of cross sections over all concerned lumps of UOX assembly during the transient.

3.1.1. Spatial discretization trade-off

Our goal here is to set up spatial discretization through the convergence of steady state k_{eff} values. For that purpose, the mini-core is used at HZP without control rods. NDM results obtained for this configuration with a few different discretizations have been compared to a Monte Carlo calculation by Serpent 2 (Leppänen et al., 2015). The obtained k_{eff} is 1.01329 ± 27 pcm with JEFF-3.1.1, all Doppler broadenings set at 560 K and the appropriate thermal treatment for light water. As already defined for 2D discretization, ppd is the number of pieces into which the core is cut per dimension. Here for 3D we define H_{xy} as the horizontal ppd at the assembly level. For instance all assemblies remain complete in the horizontal plane with $H_{xy} = 1 \times 1$, while $H_{xy} = 2 \times 2$ implies that they are splitted into four quarters. Similarly, Z is the axial ppd. H_{xy} is set equal to 1×1 , 2×2 , 3×3 or 4×4 and Z to 9, 17 or

Table 3

Comparison with reference calculations (TRIPOLI-4/SUBCHANFLOW) of a few results obtained on the REA from HZP by 2D NDM.

	At power peak		At end of transient	
	Reference	2D NDM	Reference	2D NDM
Time (s)	0.068	0.057	0.2	0.2
Total power (W)	$1.2 \cdot 10^{11}$	$3.6 \cdot 10^{11}$	$7.9 \cdot 10^7$	$5.9 \cdot 10^7$
UOX fuel temperature (K)	563	1014	1145	1383

50. For all these discretizations, k_{eff} values have been computed as Criticality Corrections (CC) by NDM's IRIS method which basically consists in an iterative adjustment of $\nu\Sigma_f$ cross sections.

All Z 's give about the same k_{eff} value (± 2 pcm) at a given H_{xy} , which shows that axial discretization has almost no effect. This is not surprising, since heterogeneity is essentially horizontal. At the medium Z of 17, NDM's k_{eff} is equal to 0.95133 for $H_{xy} = 1 \times 1$, to 0.97890 for 2×2 , to 0.97904 for 3×3 and to 0.97970 for 4×4 . For further comparisons, Z is definitely set to 17 as in reference calculations. With $H_{xy} = 3 \times 3$, discretization is converged on k_{eff} but the nine resulting pieces of each assembly are no longer filled with the same detail of fuel pins and tubes (cf. Fig. 2 for UOX). In this case, it does not make sense anymore to use the same set of diffusion data for these different pieces. That is why $H_{xy} = 2 \times 2$ has been chosen, as the finest possible discretization according to this consistency criterion. Convergence on k_{eff} is obtained at ± 100 pcm in this case, which is still largely acceptable for NDM and much lower than the observed discrepancy with Serpent 2 of about 3000 pcm. Between transport with implicit space-energy effects and diffusion based on infinite spectrum data like in our NDM calculations of the mini-core, such a discrepancy is usual as recalled for instance by Freeman (1981).

Two adaptations to the chosen mesh have been made on the lumped thermal model (as described in Section 2.2). First, Eqs. (1) and (2) are discretized accordingly. The hypothesis of coolant temperature linearity over each lump's height is reinforced, and the $2(T_{cool} - T_{in})$ term is simply replaced by $(T_{cool,k} - T_{cool,k-1})$ where k is the axial index of the lump (equal to 1 at the bottom and to 17 at the top of the assembly). The second change affects NDM's effective conductance whose value is now associated to each assembly lump, being proportional to its power and thus to its volume. For the sake of comparison, we have established an assembly value $G_{fit,3D}$ of $5 \cdot 10^4 \text{ W}\cdot\text{K}^{-1}$ which is comparable to G_{fit} . With $H_{xy} = 2 \times 2$ and $Z = 17$, $G_{fit,3D}$ is 68 ($2^2 \times 17$) times higher than the value used in each lump's equations and adjusted for best agreement with reference. Due to higher spatial detail, $G_{fit,3D}$ is logically closer to the analytically computed local value of $1.7 \cdot 10^4 \text{ W}\cdot\text{K}^{-1}$ than G_{fit} was.

3.1.2. Add of 2-group extrapolation lengths

Now k_{eff} has been used as an indicator for mesh convergence, let us have a look on assembly flux values to check accuracy. Table 4's top lines give the deviations of the 1-group assembly fluxes computed by 3D NDM and compared to Serpent 2's ones, showing a maximal relative error of about 30% for the reflector assembly in the corner. With a deviation smaller than 2%, the flux in the UOX assembly is pretty good. In order to optimize NDM's accuracy,

especially in edge lumps where the method is less efficient, 2-group extrapolation lengths have been implemented in boundary conditions. For any edge lump and each energy group g , an extrapolation length is computed as $e_g = 0.71/\Sigma_{tr,g}$ where $\Sigma_{tr,g}$ is the corresponding transport cross section (Lamarsh, 1966). This distance is then added to the so-called (by Nuttin et al., 2016) d_{ext} distance between each edge lump center and the point at surface with zero flux condition. As shown by Table 4's bottom lines, this slightly improves all the results. Let us specify that the main part of these slight improvements comes understandably from the extrapolation lengths added horizontally to edge reflector lumps. Like reflector temperatures, these particular distances are constant (equal to 2.35 cm for group 1 and to 0.57 cm for group 2). In UOX and MOX assemblies, extrapolation lengths depending on fuel and coolant temperatures change a bit during transient (between 2.9 and 3.1 cm for group 1, between 0.8 and 0.9 cm for group 2). In the following, all NDM calculations will be performed with such 2-group extrapolation lengths.

3.1.3. Improvement of the rod ejection model

In our 2D model, a simple V -weighting as detailed by Eq. (4) has been used to homogenize cross sections of the partially rodded UOX assembly along its full height. Although this way goes against the proper conservation of reaction rates, it was the only possible in that case. But here in 3D, with 17 axial levels, the rod ejection model can be significantly improved through a simple upgrade. Partially inserted control rods cause strong and variable axial heterogeneities. As explained for nodal methods by Joo (1984), redefining lumps accordingly at each new time step would be too complex and weighting cross sections by volumes would not conserve reaction rates. The simplest method for proper homogenization is the so-called "approximate ΦV -weighting", well described by Dall'Osso (2002) from an original proposal by Gehin (1992). Because each lump is the smallest spatial element in NDM like in many other methods, there is no available value for average fluxes $\Phi_{rod,k}$ and $\Phi_{unr,k}$ respectively in the rodded and unrodded parts of the partially rodded lump at axial level k (so-called "lump k "). Gehin's method consists in approximating these fluxes for both energy groups and at any time of the transient by using those of the two lumps above (rodded, at axial level $k + 1$) and below (unrodded, at axial level $k - 1$) as detailed below:

$$\phi_{rod,k} = \frac{\phi_k V_{rod,k} + \phi_{k+1} V_{lump}}{V_{rod,k} + V_{lump}} \quad (5)$$

$$\phi_{unr,k} = \frac{\phi_k V_{unr,k} + \phi_{k-1} V_{lump}}{V_{unr,k} + V_{lump}} \quad (6)$$

where:

- ϕ_k is the flux within lump k ,
- $V_{rod,k}$ is the rodded volume of lump k ,
- $V_{unr,k}$ is the unrodded volume of lump k ,
- V_{lump} is the total volume of any full lump.

Hence the re-homogenized cross section (noted $\Sigma_{\phi V}$) of any reaction in the partially rodded lump k writes:

$$\Sigma_{\phi V} = \frac{\Sigma_{rod,k} \phi_{rod,k} V_{rod,k} + \Sigma_{unr,k} \phi_{unr,k} V_{unr,k}}{\phi_{rod,k} V_{rod,k} + \phi_{unr,k} V_{unr,k}} \quad (7)$$

with $\Sigma_{rod,k}$ (resp. $\Sigma_{unr,k}$) the rodded (resp. unrodded) cross section at lump k 's fuel and coolant temperatures. Easy to implement since all necessary data are naturally provided by NDM, this method should be a good trade-off between accuracy and simplicity.

Table 4

Relative errors (%) compared to Serpent 2 of 1-group assembly neutron fluxes given by 3D NDM with $H_{xy} = 2 \times 2$ and $Z = 17$, without any correction (top lines) or with 2-g extrapolation lengths (bold bottom lines). Mini-core is at HZP, all rods withdrawn. East-NorthEast octant is shown.

		31.6
		28.3
↑	6.72	13.3
	6.34	11.9
	1.69	15.1
	1.24	13.9
	→	X

3.2. Comparison of 3D results to reference

With all improvements (including SOR-Euler scheme, “ $H_{xy} = 2 \times 2, Z = 17$ ” discretization, 2-group extrapolation lengths and approximate ϕV -weighting), NDM version is called “3D NDM” until the end. Results obtained on REA from HZP with this version are detailed by Fig. 4, showing an overall improved agreement with reference. Fig. 4(a) shows only 3D NDM’s reactivity, because reference’s one has not been published somewhere else than in a confidential NURISP report. Followed in parallel with Fig. 4(b)’s total power, NDM’s reactivity exhibits perfect consistency. First it increases due to rod ejection, as power rises. Then, as reactivity starts to decrease because of fuel thermal feedback, power peaks. During power decrease, fuel temperature stabilizes and reactivity meets a minimum. These three remarkable times are detailed from a thermal point of view by Table 5. Thereafter, reactivity increases during about one hundredth of a second until rod ejection sees its

effect compensated before its end (at $t = 0.1$ s) by coolant thermal feedback. As noticed in Section 2, reference temperatures shown by Fig. 4(c) and (d) seem artificially delayed (by 0.010 s) while 3D NDM’s curves are consistent, although clearly underestimated by our simple lumped thermal model.

Maximal UOX fuel temperature of reference is about 250 K above NDM’s value. In the case of MOX fuel, the same gap is found for the assembly numbered 2 (cf. Fig. 1) while it is only about 10 K for number 3 (close to more reflector assemblies and thus less sensible to thermal variations). After the end of rod ejection, the discrepancy between reference and 3D NDM on UOX coolant temperature increases linearly. It reaches 13 K at $t = 0.2$ s, while the same gap is only 2 and 4 K for MOX assemblies numbered 2 and 3 respectively. Discrepancies given by Sjenitzer et al. (2015) between the DYN3D/FLICA-4 coupling and reference are useful to better analyze those between NDM and reference. For instance, DYN3D/FLICA-4 has its power peak 3.5 ms after reference while

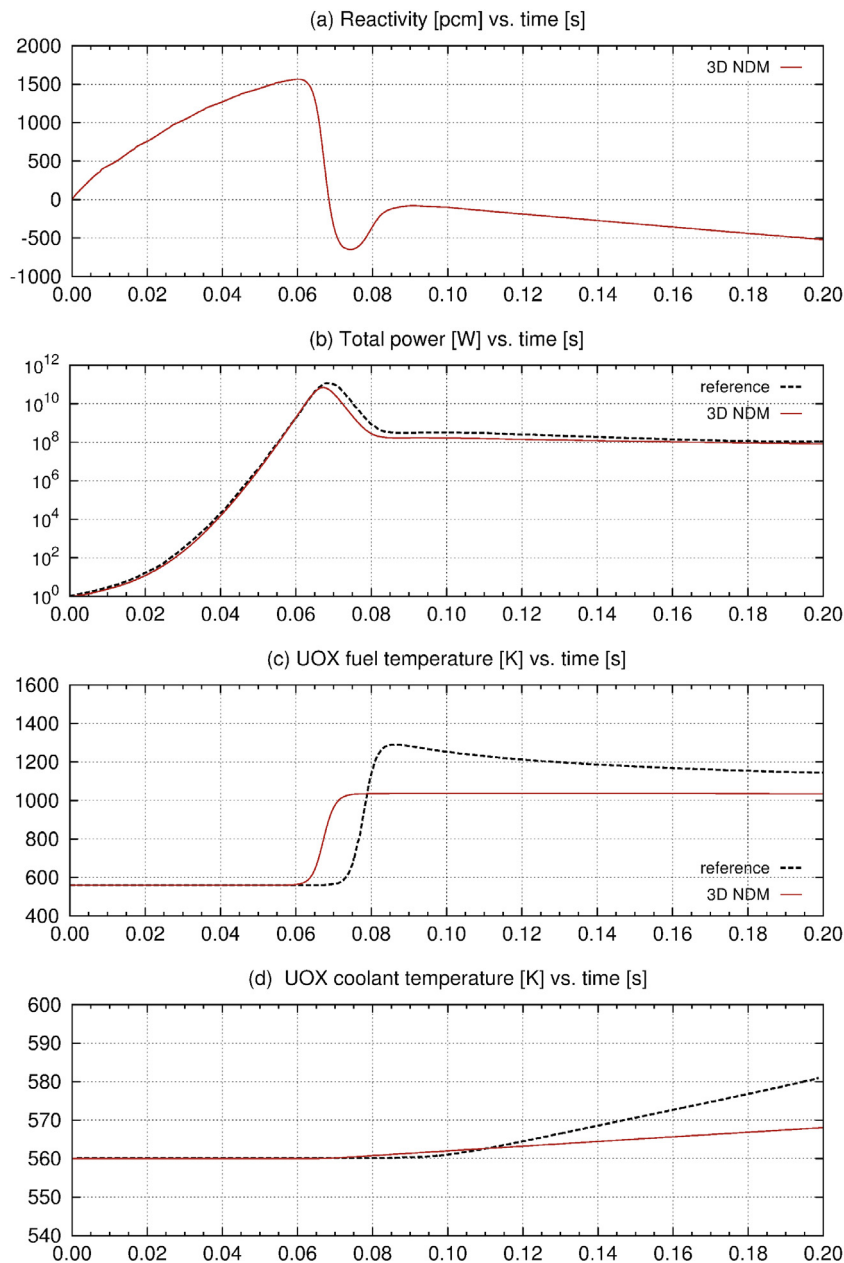


Fig. 4. Detailed results obtained on REA from HZP by 3D NDM, compared with reference (TRIPOLI-4/SUBCHANFLOW).

Table 5

Description [and coupling analysis] of the few extrema appearing on Fig. 4 around $t = 0.07$ s during REA from HZP as computed by 3D NDM.

	$t = 0.060$ s	$t = 0.067$ s	$t = 0.074$ s
Reactivity (pcm)	1566 [is maximal]	445	−650 [is minimal]
Total power (W)	$2.9 \cdot 10^9$	$7.1 \cdot 10^{10}$ [is maximal]	$4.0 \cdot 10^9$
UOX fuel temperature (K)	563 [starts to increase]	787 [thermal feedback appears]	1029 [is stabilized]

NDM's one happens only 1.0 ms before (at $t = 0.067$ s, cf. Table 5). As for power peak, NDM's value is lower than reference by 41% while DYN3D/FLICA-4's one is lower by 7% only. On the contrary, at the end of transient, discrepancies of the total power with reference are of the same kind, with NDM's and DYN3D/FLICA-4's values underestimated by 25% and 43% respectively.

Put together, these observations clearly indicate power and especially temperature issues in NDM calculations. This is all the more obvious as temperatures are underestimated by 3D NDM, while they were overestimated by the 2D version (cf. Fig. 3). Therefore it can be concluded that the main obstacle to the accuracy of 3D NDM is our oversimplified lumped thermal model, degrading power balance. Showing very good agreement between reference and NDM's normalized power profiles in the UOX assembly, Fig. 5 confirms that the thermal model is the only part which remains to be optimized. Indeed all other modelizations implicated in these profiles are working fine. For instance, the progressive effect of rod ejection on the UOX power profile is almost perfectly reproduced as shown by Fig. 5(a)–(c). Once the rod is fully ejected, the power profile is only imposed by the fuel temperature's one. Hence Fig. 5(d) demonstrates that both are very close to reference's ones at the end of rod ejection. Damaging power and temperature absolute values, the lumped thermal model should be replaced by a more accurate description based on real thermal-hydraulics.

3.3. Additional sensitivity studies

Besides a clear lack of thermal accuracy, 3D NDM reproduces reference results sufficiently well to be considered as suitable for our further exploratory design studies. In order to give some more

physical insight and to definitely validate 3D NDM (fully described by Section 3.1) as the optimal model with imposed lumped thermal model, two sensitivity studies have been performed.

3.3.1. To the rod ejection model

As previously explained, neither rodded nor unrodded cross-sections (both provided by the benchmark) are representative when the tip of the ejected rod divides a lump. Diffusion data taking the flux distribution inside the partially rodded lump into account must be computed by homogenization, without any sub-lump details available. Two such methods have been tested so far: V - and ΦV -weighting, the latter being adopted in the 3D version. These two simple methods have been compared on REA from HZP to a third possible one which has been called $\Phi_{k\pm 1} V$ -weighting. It simply approximates the fluxes in the rodded and unrodded parts of lump k by those in the rodded lump above (Φ_{k+1}) and the unrodded lump below (Φ_{k-1}) respectively. For any energy group and reaction, the resulting average cross-section $\Sigma_{k\pm 1}$ writes:

$$\Sigma_{k\pm 1} = \frac{\Sigma_{rod,k} \Phi_{k+1} V_{rod,k} + \Sigma_{unr,k} \Phi_{k-1} V_{unr,k}}{\Phi_{k+1} V_{rod,k} + \Phi_{k-1} V_{unr,k}} \quad (8)$$

where, as a reminder from Section 3.1, $\Sigma_{rod,k}$ (resp. $\Sigma_{unr,k}$) is the rodded (resp. unrodded) cross section at lump k 's fuel and coolant temperatures and $V_{rod,k}$ (resp. $V_{unr,k}$) is the rodded (resp. unrodded) volume of lump k .

Fig. 6 allows to compare these three simple NDM-compatible homogenization methods on reactivity and total power. As for reactivity, V -weighting is clearly responsible for so-called “rod cusping”. As described by Joo (1984), reactivity curve on Fig. 6(a) exhi-

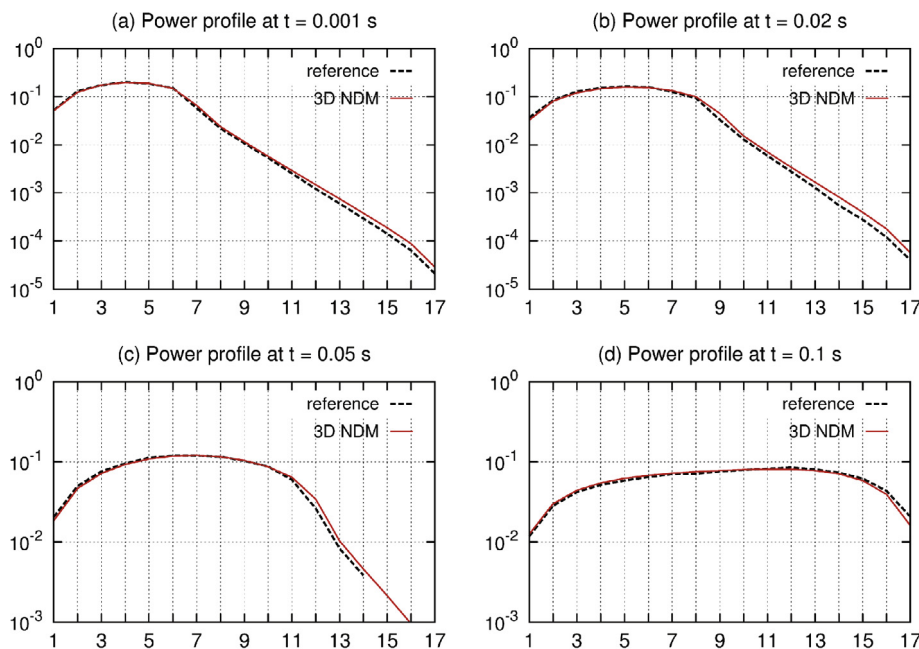


Fig. 5. Power (normalized to a total of 1) axial profiles given vs. axial zone numbers at various times of the REA from HZP as computed in UOX assembly by 3D NDM, compared with reference (TRIPOLI-4/SUBCHANFLOW).

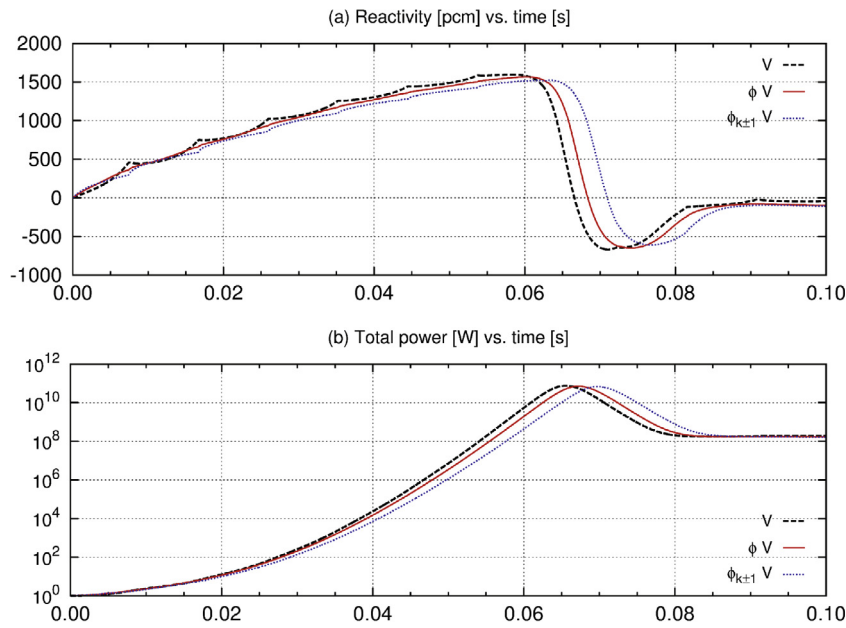


Fig. 6. Comparison of reactivity (a) and total power (b) obtained during the first half of REA from HZP by 3D NDM, with different homogenization methods used for the ejected rod cross sections.

bits unphysical cusps every 6 ms (corresponding to 0.1 s, the total time of rod ejection at constant speed, divided by $Z = 17$). Indeed each time the tip of the rod corresponds to an interface between two lumps, discontinuous cross section changes occur and produce a reactivity cusp. More representative of flux profiles within rodged lumps than V -weighting, the two other methods almost show none of these. With close integrals, the three reactivity curves show different insertion rates. Fig. 6(b) shows power peak times spread in the same order, with about 2 ms between ΦV -weighting's intermediate one and each of the two others. These time gaps are twice as large as the 1.0 ms observed between reference and 3D NDM's power peaks. Hence it can be said of other methods than ΦV -weighting that they degrade the real kinetics of reactivity insertion due to rod ejection. Comparatively to time dispersion, maximal deviations of total power are very low (+7%

for V -weighting and -4% for $\Phi_{k\pm 1} V$ -weighting, compared to ΦV -weighting). As a concluding remark, let us add that Dall'Osso (2002) has proposed an "equivalent-node method" based on the conservation of neutron balance between the homogenized rodged lump and a refined treatment of it. Although much more complex than ΦV -weighting, it roughly gives the same results, which strongly reinforces our choice.

3.3.2. To the tabulated diffusion data

Since the beginning, we have used the tabulated cross sections taken from Kliem et al. (2011), for the sake of comparison with Sjenitzer et al. (2015) using the same. These data (from now on called "BD") have been completely recalculated from different values with narrower temperature ranges as given by the original fuel assembly information of a Rod Ejection Accident (Kozłowski and

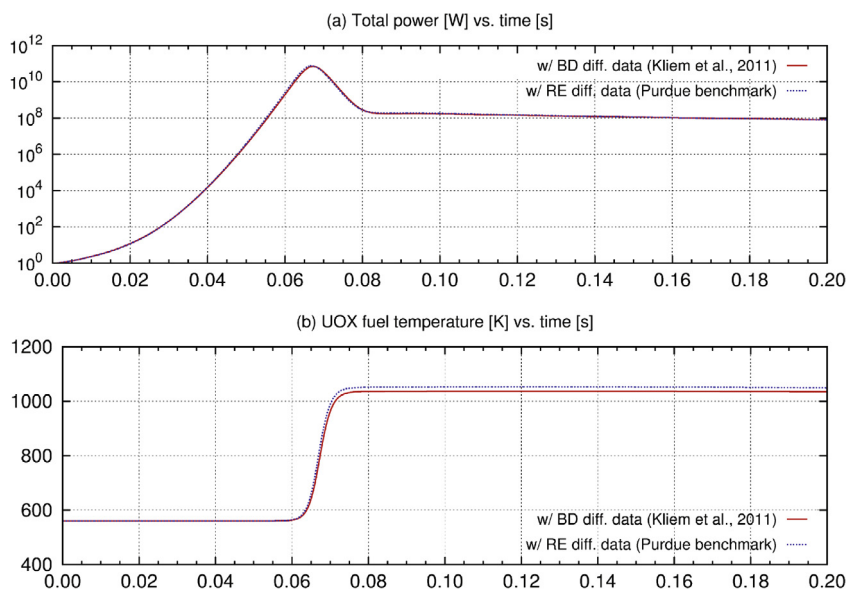


Fig. 7. Main results obtained on REA from HZP by 3D NDM, either with the BD (Boron Dilution) or the RE (Rod Ejection) diffusion data.

Downar, 2007). Through interpolation, the latter “RE” data used instead of our BD cross sections could lead to deviations. Here we want to make sure that these deviations, if they exist, are not relevant.

Fig. 7 shows that no significant difference is observed between our BD-based calculation of the mini-core REA from HZP and another one using RE diffusion data in the broad meaning of the term (i.e. including tabulations and their associated interpolations). As barely visible on Fig. 7(a), RE’s power peak is slightly higher (+7%) relatively to BD’s one. The discrepancy of total power is very low at the end of transient, with RE’s value lower by about 1% only. The time difference between power peaks is about 0.3 ms (BD delayed), which is smaller almost by one order of magnitude than the one observed between reference and DYN3D/FLICA-4. As shown by Fig. 7(b), the maximal deviation on UOX fuel temperature is slightly above 1% (RE higher). Reached during the thermal feedback part, it remains until the end. Thus the possible bias caused by diffusion data handling has been checked to be negligible. This last verification confirms that the 3D version of NDM is optimal.

4. Conclusions and perspectives

The main conclusion of our previous milestone article (Nuttin et al., 2016) dealt with the successful validation of the Nodal Drift Method, dedicated to further studies of thorium-fueled HCWR options. This validation had been performed on a very simple 2D CANDU LOCA benchmark without thermal coupling. Objectives towards real 3D PWR-like transients were announced in an exhaustive to-do list, whose items have all been precisely checked in this work. Here, all these necessary achievements are first reviewed. Then our to-do list is updated, including coupling with thermal-hydraulics and a few typical core calculation issues.

4.1. Conclusions on 3D NDM’s accuracy and methodology

Starting with 2D, Sections 1 and 2 have built a solid basis for further developments. Through the home-made test case of a square homogeneous core, the integration scheme has been optimized from a fully explicit to a semi-implicit one. According to Section 1, this latter scheme based on the SOR-Euler method is expected to be more efficient when used on more complex systems and transients. In such studies coming next, additional features like variable-step or predictor-corrector algorithms will be tested for further verification. After the full description of a mini-core REA from HZP as used by Sjenitzer et al. (2015), Section 2 details all the elements of a first 2D NDM model. With lumped thermal coupling and simple interpolation of diffusion data, 2D NDM has been compared to Sjenitzer’s TRIPOLI-4/SUBCHANFLOW coupling. Although the general tendencies of the transient are quite well reproduced by NDM, embarrassing discrepancies have been observed. Relatively to reference, power peak is thus overestimated by a factor of 3 and advanced by about 10 ms. Large deviations have been noticed on temperatures too, most probably because of the lumped thermal model. Before concluding on this main limitation, it has been decided to review all possible enhancements which 3D can bring.

With an increasingly refined model for the mini-core benchmark, Section 3 has thus described the necessary upgrades of NDM for handling 3D calculations. Fuel assemblies have been cut into 2×2 parts horizontally and 17 levels vertically. Besides this optimal spatial discretization, 2-group extrapolation lengths have been added and ΦV -weighting has been used to homogenize the cross sections of the partially rodded lumps. These upgrades have substantially improved NDM results on the REA, proving that 3D

NDM can reproduce sufficiently well the behavior of PWR-like cores under such transients for our HCWR studies coming next. Main improvement deals with the advance of power peak, reduced to 1.0 ms only. Although 3D NDM is far from perfect agreement with reference, its remaining discrepancies are now confirmed to come essentially from the too simple thermal model. This conclusion has been reinforced by two additional sensitivity studies. 3D NDM is thus an interesting alternative to the more sophisticated way of dynamic coupling as proposed by Sjenitzer et al. (2015). This latter way is very efficient and all the more attractive as computing limitations fade away. But we do prefer to start exploratory studies with a simplified approach like NDM, despite its lack of accuracy. For “we believe strongly that only when there is a true understanding of the physical and analytical basis of a reactor calculation can the machine be used to full effect”, as early pointed out by Weinberg and Wigner (1958). Of course Monte Carlo or deterministic transport is still needed in our case, for the preparative calculation of representative diffusion data.

4.2. Perspectives on thermal coupling and burnup calculations

Throughout the analysis of progressive enhancements, we have been able to thoroughly understand and evaluate the limitations of NDM in its latest 3D version. The first item in our to-do list is the coupling with some real thermal-hydraulics, as described for instance by Duderstadt and Hamilton (1976) or, with refined details, by Todreas and Kazimi (2012). For that purpose, we are currently developing within SMURE a simple analytical method called BATH (Basic Approach to Thermal-Hydraulics), to be coupled with 3D NDM. Based on one average subchannel per assembly, BATH will perform 2D (RZ) calculations with a monophasic liquid flow. Radial conduction will be solved analytically, and some exchange correlations used for the convective heat flux.

Even if this major upgrade is expected to be sufficient, the use of a subchannel code should not be discarded. For validation purposes, especially on some local issues inside a typical PWR primary circuit, CFD could be considered as well. Let us note that having recourse to such sophisticated codes could be all the more necessary as we plan to study highly sub-moderated cores within a typical PWR envelope. Although two energy groups are known to be often sufficient, the latter objective implies to check carefully that this remains true for strongly hardened neutron spectra. Detailed comparisons with six energy groups are scheduled.

In these HCWR studies, a strong interplay is expected between the various steps of the usual design procedure, as described by Duderstadt and Hamilton (1976) for instance. After the full characterization of each steady state by NDM/BATH coupling, the fuel cycle will be analyzed. Depending on its results, new optimizations in terms of final burnup and conversion performance will be proposed. Each significant change in core design will be tested back on steady state, and against safety during typical transients. The core calculation method, responsible for burnup predictions, will thus clearly be a central piece in our design suite. In a previous study of thorium-fueled CANDU and PWR reactors (Nuttin et al., 2012), we performed our core calculations with the diffusion code DONJON (Marleau et al., 2006). But now cores that should be studied first are small to medium thorium-fueled PWR-like cores, with a strong seed-blanket heterogeneity. An industrial code like DONJON, dedicated to CANDU and barely adaptable to standard PWR, would reveal itself too specialized for these exploratory studies. In order to manage a wide range of refueling schemes together with innovative ways of reactivity management, NDM will thus be used as a solid basis for such core calculations.

Concurrently with this simple adaptation of NDM from transient to burnup calculations, the best ways for representative diffusion data will be investigated. Nicely interfaced in SMURE, Serpent

2 has been already chosen for the proper and convenient production of the homogenized group constants (Leppänen et al., 2016). So far, our diffusion data have been computed by simple ΦV -weighting of tallies issued from single-assembly calculations, with reflective boundary conditions. A good way to enhance the representativity of our computed diffusion data would be to make critical spectrum corrections. A recent review by Smith (2016) has summed up most techniques used for that, including those confidentially kept embedded in commercial codes. Among these, the one that seems the most attractive to us consists in mimicking the neutronic environment around a given assembly. With this trick exploiting SMURE's great ability to generate geometries, Monte Carlo transport could help us to compute more representative diffusion data. Another simple way would be to use 1D space-energy correction factors, like Freeman (1981) did for HCWR calculations. These last developments would perfectly complete our NDM-based core design tools. While avoiding overly complex calculation techniques, NDM would make an optimal use of diffusion simplicity for our comparative studies of HCWR options.

Acknowledgements

As a first-year PhD student, the main author (P.P.) would like to express his gratitude to the Grenoble PhD School for Physics, to the LPSC Reactor Physics Group and to its MAP (Modelization, Analysis, Prospective) team. The authors acknowledge technical feedback on nodal methods from N. Kerkar (EDF/SEPTEN, Lyon) and on PWR technology from P. Rubiolo (MAP team responsible).

References

- Ackroyd, R.T., 1986. A finite element method for diffusion theory embracing nodal and difference methods. *Prog. Nucl. Energy* 18, 7–20.
- Capellan, N. et al., 2009. 3D coupling of Monte Carlo neutronics and thermal-hydraulics calculations as a simulation tool for innovative reactor concepts. In: *Proc. Int. Conf. GLOBAL 2009*, Paris, France.
- Chanaron, B. et al., 2015. Advanced multiphysics simulation for reactor safety in the framework of the NURES SAFE project. *Ann. Nucl. Energy* 84, 166–177.
- Dall'Osso, A., 2002. Reducing rod cusping effect in nodal expansion method calculations. In: *Proc. Int. Conf. PHYSOR 2002*, Seoul, Korea.
- Duderstadt, J.J., Hamilton, L.J., 1976. *Nuclear Reactor Analysis*. John Wiley & Sons.
- Freeman, L.B., 1981. Space-energy few-group neutron cross sections for large, complex core calculations. *Nucl. Sci. Eng.* 78, 342–358.
- Gehin, J.C., 1992. A Quasi-Static Polynomial Nodal Method for Nuclear Reactor Analysis. MIT. PhD thesis.
- IAEA, 2008. Thermophysical Properties of Materials For Nuclear Engineering: A Tutorial and Collection of Data. <http://www-pub.iaea.org/MTCD/publications/PDF/IAEA-THPH_web.pdf>.
- Imke, U., Sanchez, V.H., 2012. Validation of the subchannel code SUBCHANFLOW using the NUPEC PWR tests. *Sci. Technol. Nucl. Installations*. Article ID 465059.
- Jiménez Escalante, J., Gomez Torres, A., Sanchez Espinoza, V., 2012. D3.1.2.3c: Solutions to exercises of Boron Dilution Benchmark by DYN3D/FLICA-4 coupled codes at pin level. Nuclear Reactor Integrated Simulation Project of the 7th FP EURATOM.
- Jiménez, G. et al., 2015. Boron dilution transient simulation analyses in a PWR with neutronics/thermal-hydraulics coupled codes in the NURISP project. *Ann. Nucl. Energy* 84, 86–97.
- Joo, H.S., 1984. Resolution of the Control Rod Cusping Problem for Nodal Methods. MIT. PhD thesis.
- Kliem, S., Mittag, S., Gommlich, A., Apanasevich, P., 2011. D3.1.2.2: Definition of a PWR boron dilution benchmark. Nuclear Reactor Integrated Simulation Project of the 7th FP EURATOM.
- Kozłowski, T., Downar, T., 2007. PWR MOX/UO₂ Core Transient Benchmark, Final Report NEA-6048. OECD Nuclear Energy Agency.
- Lamarsh, J.R., 1966. *Introduction to Nuclear Reactor Theory*. Addison-Wesley.
- Leppänen, J. et al., 2015. User Manual of the Monte Carlo code Serpent 2. <<http://serpent.vtt.fi/mediawiki/>>.
- Leppänen, J., Pusa, M., Fridman, E., 2016. Overview of methodology for spatial homogenization in the Serpent 2 Monte Carlo code. *Ann. Nucl. Energy* 96, 126–136.
- Lozano, J.-A., Garcia-Herranz, N., Ahnert, C., Aragonés, J.M., 2008. The analytic nodal diffusion solver ANDES in multigroups for 3D rectangular geometry: development and performance analysis. *Ann. Nucl. Energy* 35, 2365–2374.
- Marleau, G., Hébert, A., Roy, R., 2006. A User Guide for DRAGON 3.05B. Report IGE-174 Rev. 6B, Institut de Génie Nucléaire, École Polytechnique de Montréal.
- MCNP Team, 2014. MCNP Version 6 - A General Monte Carlo N-Particle Transport Code. Report LA-CP-14-00745, Los Alamos National Laboratory.
- Méplán, O. et al., 2009. MURE, MCNP Utility for Reactor Evolution: couples Monte Carlo transport with fuel burn-up calculations. Computer Program Services of OECD Nuclear Energy Agency. <<http://www.oecd-nea.org/tools/abstract/detail/nea-1845>>.
- Méplán, O. et al., 2015. SMURE, Serpent-MURE. <<http://lpsc.in2p3.fr/MURE/html/SMURE/UserGuide>>.
- Nicholls, A., Honig, B., 1990. A rapid finite difference algorithm utilizing successive over-relaxation to solve the Poisson–Boltzmann equation. *J. Comput. Chem.* 12, 435–445.
- NIST, 2011. Thermophysical Properties of Fluid Systems. <<http://webbook.nist.gov/chemistry/fluid>>.
- Nuttin, A. et al., 2012. Comparative analysis of high conversion achievable in thorium-fueled slightly modified CANDU and PWR reactors. *Ann. Nucl. Energy* 40, 171–189.
- Nuttin, A. et al., 2016. Validation of the minimalistic Nodal Drift Method for spatial kinetics on a simple CANDU LOCA benchmark. *Ann. Nucl. Energy* 88, 135–150.
- Rohde, U. et al., 2016. The reactor dynamics code DYN3D – models, validation and applications. *Prog. Nucl. Energy* 89, 170–190.
- Sjenitzer, B.L., Hoogenboom, J.E., Jiménez Escalante, J., Sanchez Espinoza, V., 2015. Coupling of dynamic Monte Carlo with thermal-hydraulic feedback. *Ann. Nucl. Energy* 76, 27–39.
- Smith, K.S., 2016. Nodal diffusion methods: understanding numerous unpublished details. In: *Proc. Int. Conf. PHYSOR 2016*, Sun Valley, ID.
- Todreas, N.E., Kazimi, M.S., 2012. *Nuclear Systems Volume 1: Thermal Hydraulic Fundamentals*. CRC Press.
- Toumi, I., Bergeron, A., Gallo, D., Roy, E., Caruge, D., 2000. FLICA-4: a three dimensional two-phase flow computer code with advanced numerical methods for nuclear applications. *Nucl. Eng. Des.* 200, 139–155.
- TRIPOLI-4 Project Team, 2013. TRIPOLI-4 version 8.1, 3D general purpose continuous energy Monte Carlo transport code. Computer Program Services of OECD Nuclear Energy Agency. <<http://www.oecd-nea.org/tools/abstract/detail/nea-1716>>.
- Weinberg, A.M., Wigner, E.P., 1958. *The Physical Theory of Neutron Chain Reactors*. The University of Chicago Press.
- Yasinsky, J.B., Henry, A.F., 1965. Some numerical experiments concerning space-time reactor kinetics behavior. *Nucl. Sci. Eng.* 22, 171–181.

PRELIMINARY DESIGN STUDIES BY A COMPLETE ACADEMIC SIMULATION TOOLBOX OF A WATER-COOLED THORIUM-FUELED SMALL MODULAR REACTOR CORE

P. Prévot*, A. Nuttin, N. Capellan, O. Méplan
LPSC, Université Grenoble-Alpes, CNRS/IN2P3, Grenoble, France
53 Avenue des Martyrs, 38026 Grenoble Cedex, France
*Tel: 0476284338, Email:prevot@lpsc.in2p3.fr

Abstract – A simple methodology has been developed for the design of competitive PWR-like reactors. It is illustrated by a Small Modular Reactor (SMR) loaded with thorium fuel and targeting an ambitious final burnup. The complexity of the tested nuclear cores is managed by progressively increasing the level of simulation detail and taking into account the related operating constraints. For sufficient design margin, various moderation ratio values have been considered. By means of our C++ framework SMURE (Serpent/MCNP Utility for Reactor Evolution), fuel evolution is first computed at the mirrored assembly scale, then at the full core scale with power flattening. Particular care is taken to make reactivity management, by standard soluble boron completed by an optimized suite of burnable poisons, realistic at both scales. Safety requirements are finally tested on a typical Rod Ejection Accident (REA). This core transient calculation relies on our diffusion-based Nodal Drift Method (NDM) coupled to our 1D-RZ time-dependent code BATH (Basic Approach to Thermal-Hydraulics).

I. INTRODUCTION

To address current nuclear issues, competitiveness should be a priority concern for newly conceived reactors taking advantage of both existing concepts and innovative options¹. This paper develops a design methodology in the view of a fast and broad exploration of nuclear reactor concepts. As a consequence, a quick and trustworthy assessment of the fuel and safety performance is expected. This analysis should also take into account the operating constraints to ensure the feasibility of the concept.

Our design process is composed of three parts that progressively refine the reactor picture. A coarse core pre-sizing is done based on the wanted core characteristics. The first step consists in a fully mirrored assembly evolution. This calculation allows setting the fuel enrichment to reach the target burnup and to consider the reactivity management problematics. Enhanced core description is considered in the second step through the full core evolution. This evolution is based on an innovative Monte Carlo method called FCU. Core scale allows to address power flattening problematics, thermal-hydraulics concerns and also to prove the efficiency of global reactivity management strategy. The last step assesses the safety performance of the core under design. Safety criteria are evaluated on a REA transient by means of a previously

developed toolbox including a neutronic/thermohydraulics coupling. Core weakness highlighted during the transient are used to review the core performance and to select the most relevant innovative solutions to examine.

Facing the current difficulty to build a large nuclear reactor, the Small Modular Reactor (SMR) concept generates a wide interest. Although the idea of a small reactor is not new², it has been calling for renewal under mainly economical concerns³. Their reduced sizes, the possibility of a large and serialized production, a simplified fuel management as well as a passive safety conception promise some economical viability to this concept⁴. The method previously described is applied on the academic design of a thorium fuelled SMR to assess what reasonable performance could be expected. A large panel of moderation ratios (as given by 15, 17, 19 or 21 rods per assembly side) has been considered to keep a sufficient design margin for easy adaptation to all cumulated operating constraints.

II. REACTIVITY AND BURNUP PRE-SIZING AT ASSEMBLY LEVEL

The proposed design relies greatly on the actual PWR operating design as it demonstrates its efficiency and

benefits from a long-standing experience. To mitigate the downgrading performance of a smaller reactor, the maximal power level for the SMR category⁵, of about 900 MW_{th}, is used in the following. Standard value of power density in standard PWR design is of about 300 W/cm³ of fuel which implies a power density of about 100 W/cm³. That value could be adapted to thorium-fuel that has different thermal and mechanical properties than UOX. The two following choices have fixed the volume. The ratio $\frac{Diameter}{Height}$ is computed to minimize the core leakage. The value applied, close to typical PWR value, is to the unit. This handmade designing process leads to a core made of 89 fuel assemblies of about 230 cm-height.

II.A. Moderation Panel and Enrichment Tuning

In the following evolution calculation on fully mirrored assembly level are computed by the means of SMURE (Serpent/MCNP Utility for Reactor Evolution). SMURE is a powerful C++ framework which allows to select either MCNP 6 (Ref. 6) or Serpent 2 (Ref. 7) for the calculation of fuel evolution as well as for the coupling of neutronic with thermal-hydraulics⁸. For all evolutions in this paper, SMURE (Ref. 9) calls Serpent 2, using ENDF/B-VII.1, to perform the neutronic calculation on the basis of which fuel depletion is computed.

The unusual fuel choice encourages us to consider various moderating ratio both to allow degrees of freedom in the design process and to optimize the fissile consumption. The moderating ratios reviewed are named according to the number of rod per assembly side: 15, 17, 19 and 21.

TABLE I

Fuel performance of fully mirrored assembly for various moderating ratio enriched at 4% at. in ²³³U. Conversion Ratio (CR) is integrated over the all cycle. Fissile Inventory Ratio (FIR), is given at the end of cycle. Burnup-eff is defined as the produced energy in the cycle over the difference between the initial and final fissile masses.

	15x15	17x17	19x19	21x21
Burnup (GW.day/ton _{HM})	37.0	41.0	42.0	39.6
Burnup-eff. (GW.day/kg)	1.73	1.93	2.15	2.68
FIR	0.47	0.48	0.52	0.63
CR	0.51	0.56	0.61	0.68

At first, impact of the moderating ratio is examined for a typical fissile enrichment of about 4%. Table I shows that the decrease of the moderating ratio has a positive impact on ²³²Th/²³³U the conversion ratio (CR). The spectral hardening improve the ²³²Th capture against the ²³³U fission by increasing the following cross-section

ratio: $\frac{\sigma_{cap, 232Th}}{\sigma_{fiss, 233U}}$. On the other hand, the effect on the burnup

is balanced between a less effective fissile and a reduced fissile consumption. Let us introduce the effective burnup as the ratio of energy produced (in GW.day) over the difference between the initial and the final fissile mass (in kg). This variable is a trade-off between the burnup and the FIR performance; it clearly shows that the better use of the fissile resource is made in the 21x21 lattice.

TABLE II.

Fuel performance in a fully mirrored assembly for various moderating ratios. Enrichment is adjusted to reach a burnup of about 40 GW.day/ton_{HM}, with a criticality penalty of about 3000 pcm to take into account the neutron leak outside the core.

	15x15	17x17	19x19	21x21
Enrichment (% at. ²³³ U)	4.5	4.3	4.3	4.5
Burnup-eff. (GW.day/kg)	1.60	1.79	2.02	2.33
$\frac{d\rho}{dT_{fuel}}$ (pcm/K)	-2.30	-2.10	-3.39	-2.92
$\frac{d\rho}{dT_{cool}}$ (pcm/K)	-1.82	-13.4	-26.8	-44.3

With the aim to design a competitive SMR, the enrichment is adjusted to fulfill a burnup of about 40 GW.day/ton_{HM}. This typical value for PWR remains challenging¹⁰ for a small reactor running in once-through refueling. The neutronic leakage is simply modeled by a reactivity threshold, of about 3000 pcm, under which fuel evolution is stopped as the core cannot maintain its criticality.

According to Table II, the 21x21 lattice significantly improves its fissile use compared to the standard 17x17. As expected fuel temperature feedback is weakly impacted by the moderating ratio contrary to the coolant temperature coefficient (CTC). Here, CTC is defined as the reactivity variation caused by a change of coolant temperature and density. Counter-intuitively the CTC is improved in low moderating ratio probably due to the shift of the neutronic spectrum toward resonance area where the ratio $\frac{\sigma_{capture}}{\sigma_{fission}}$ increases. On the contrary, for the 15x15 assembly, a coolant temperature rise brings the configuration closer to the optimal moderating ratio that explains the weak CTC value.

Unlike UOX fuel, it has been noticed than neutronic spectrum becomes softer with the fuel depletion. Moreover, the moderator feedback becomes stronger during the cycle. For instance, in the 17x17 lattice, the α_{cool} evolves from about -13 pcm/K to -22 pcm/K. No clear explanation has been found yet.

II.B. Reactivity Management by Soluble Boron and Burnable Poisons

Core performance cannot be reasonably estimated without taking into account the various constraints of the operating conditions. The first constraint that has been treated is the reactivity management. For the sake of simplicity the soluble boron is preferred due to its flexibility and its homogeneous effect, although many studies¹¹ aim at designing soluble boron free reactors to reduce the reactor cost and effluent production.

The CTC has to remain negative; this imposed a limit on the boron concentration. A rough estimation of the maximal boron concentration is given by the following formula:

$$\frac{\alpha_{cool}}{\alpha_b} \cdot d_0 = C_{B,max}$$

With:

- α_{cool} is the CTC in (pcm.m³/kg)
- α_b is the boron effectiveness in (pcm/ppm)
- d_0 is the average coolant density (kg/m³)
- $C_{B,max}$ the maximal boron concentration in (ppm)

More precise results are obtained with Serpent2 calculation as shown in Table III.

TABLE III.

Maximal boron concentration and the associated boron effectiveness for the different moderating ratios considered.

Lattice	15x15	17x17	19x19	21x21
$C_{B,max}$ (ppm)	50	800	2600	8500
α_B (pcm/ppm)	-6.9	-4.5	-2.7	-1.5

Because of the single batch mode, a large amount of reactivity has to be compensated. In all lattices under design, soluble boron is not enough and burnable poisons are necessary. The 15x15 lattice is not considered further because the amount of reactivity manageable by soluble boron is so low (one hundredth of the initial reactivity excess) that it makes any BPs loading too difficult.

In standard PWR, three BPs are traditionally considered: Gadolinium and Erbium which are homogeneously mixed with fuel and IFBA (Integrated Fuel Burnable Absorber) which are used as coating. For mixed BPs, thorium fuel is assumed to be as compatible as UOX (Ref. 12).

Gadolinium is the more frequently used, under its Gd₂O₃ form, usually at 8% wt (maximal proportion is about 20% wt) with about 10 rods. The important cross-sections of the ¹⁵⁷Gd and ¹⁵⁵Gd (51000 and 254000 barn in typical thermal spectrum) imply a consumption adapted for a 12-month cycle. Erbium is used under the Er₂O₃ form in smaller concentration of about 1.5% wt but with a larger

number of rods (around a hundred). Its lower cross-section (670 barns for the ¹⁶⁷Er thermal averaged cross-section) makes it more suitable for long cycle (24 months). At first order, the number of poisoned rods determines the amount of reactivity covered by the BPs while the poison concentration controls the disappearance kinetics. In this study, IFBA is made of ZrB₂ whose enrichment is set at 95 % at in ¹⁰B. Since the absorption mean free-path of a neutron in such IFBA is about 34 μm, thickness used are between 70 and 130 μm (2 or 3 mean free paths) which ensures long term depletion¹³.

During the whole cycle, reactivity must be handled by a good combination of BPs between a lower limit that correspond to the criticality threshold (3000 pcm) and a higher limit which is the maximal amount of reactivity compensable by soluble boron. Although location of burnable absorbers does not change their reactivity weight, it impacts the intra-assembly peaking factor¹⁴. Since this study is about rough effective design, such considerations have been discarded.

Finding a working BP combination is an empirical task. An initial guess could be intuited by means of approximate values for rod weight and depletion kinetic. For instance, in the 17x17 lattice at BOC, one Gd-rod (respectively the Er-rod and IFBA-rod) weight is about 700 pcm (respectively 110 pcm and 940 pcm). At first, an initial k_{inf} is targeted to match the boron maximal concentration. Then, the depletion kinetics is adjusted by a BP type selection in order to remain between the previously defined reactivity limits. Always in the case of a 17x17 lattice, for the usual proportion (as described before), absorption rate is divided by a factor of 3 at approximately 10 GW.d/ton_{HM} for the Gadolinium, while Erbium reaches about 20 GW.d/ton_{HM} and IFBA about 35 GW.d/ton_{HM}. Because of the small reactivity swing allowed by the soluble boron in the 17x17 lattice, the three BPs have been used. In other lattices, the Gadolinium has been preferred. The depletion kinetics has then been modulated by using 2 different enrichments (cf. Fig. 1).

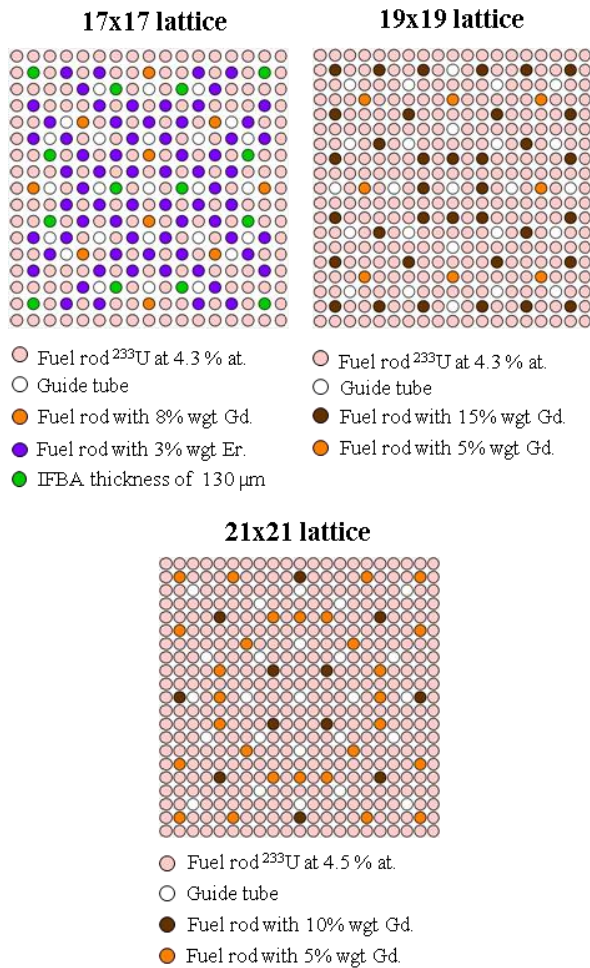


Fig. 1. Lattice poisoning for reactivity management based on maximal use of the soluble boron. The 17x17 lattice uses 10 Gd-rods, 68 Er-rod and 14 IFBA-rods. The 19x19 lattice uses 36 Gd-rods and 8 other Gd-rods with a lower Gd enrichment. The 21x21 lattice uses 12 Gd-rods and 28 other Gd-rods with a lower Gd enrichment

Final results for each lattice in full mirrored assembly calculation are given by Fig.2. The rough reactivity management proposed gives an estimation of the burnup penalty induced by the fissile mass replaced by the BPs and then by their residual penalty. The 17x17 lattice has the larger burnup loss passing from 40 GWd/ton_{HM} to about 34 GWd/ton_{HM}, while for the others lattices the burnup loss is closer to about 2.0 GWd/ton_{HM}. It is caused by the large amount of BPs needed to operate with a very low reactivity swing. Using rod control to manage the reactivity would relax this operating constraint but it could be done only at core scale. It has been assumed in this section that the maximal boron concentration is independent on fuel enrichment and the on of BP.

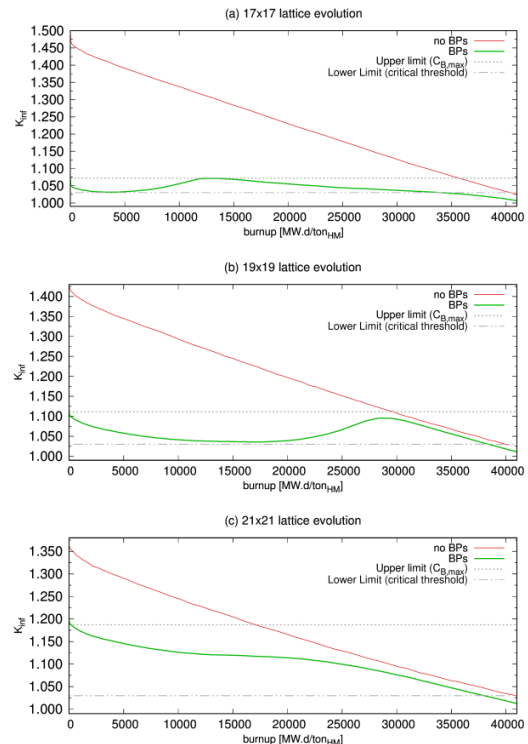


Fig. 2. Fully mirrored lattice evolution for different moderating ratios with or without burnable poisons. The lower limit represents is leak threshold below which the core is not more considered as critical. Enrichment has been set to reach the 40 GW.d/ton_{HM} without poisoning. The upper limit represents the maximal reactivity amount covered by the soluble boron.

III. FULL CORE EVOLUTION AND ZONING FOR FORM FACTOR

III.A. Full Core Evolution (FCU method)

An innovative method called FCU for “Full Core evolution with few Universes” has been implemented in SMURE to perform full core evolution calculations with Serpent 2. The starting point of this method is the division of the core in a few clusters of assemblies. Inside such a cluster, assemblies share the same geometry and initial composition. They must have approximately the same flux level and a quite similar neutronic neighbourhood. Based on these prerequisites, the difference in the fuel depletion between each assemblies of a cluster is expected to be negligible. Figure 3 (a) gives an example of such clustering.

Monte Carlo concept of universe is used to transcribe this cluster-based core construction. Universe number plays the role of pointer (in the programming language sense) to refer to any lattice. The core is usually a lattice, filled of universe numbers that refer them self to assembly lattice. The key point is to represent a whole assembly cluster by a single universe number. The assembly lattice can be composed of different evolving rods. For instance,

in Fig. 3 (b), each assembly has 3 types of rods which are depleted according to their own fluxes.

Despite its simplicity, the FCU method allows core evolution to be performed with representative neighborhood for each assembly and for or a reasonable computing cost. In the following studies no axial zoning has been considered for the rod evolution.

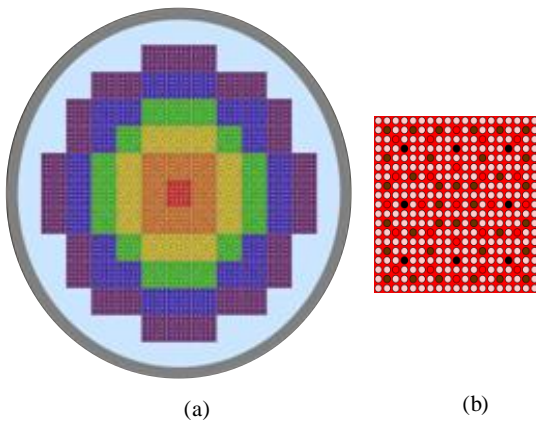


Fig. 3. Illustration on the radially-clustered core geometry used in FCU. Fig. (a): SMR divided in 6 universes distinguishable by their color. Fig (b): Zoom on the central universe of the core. This is a 19x19 lattice filled with three different rod types, see Fig. 1 for a detailed composition.

III.B. Power Flattening by Enrichment Zoning

As a very first step in the appliance of the FCU method, a universe pattern must be chosen to perform a core evolution. Preliminary versions of the cores are loaded with lattice assemblies designed in section II. These cores are named according to the lattice type they are filled with (e.g. 17x17 core). They are surrounded by a water reflector layer of about an assembly-width, and a simplified reactor vessel made of steel as shown in Fig 3. Power map at assembly scale is computed for each considered core. Assemblies that share similar power level (maximal differences of about 10%) are gathered in one

representative universe. Such universe patterns match approximately a core division in cylindrical layers. Following this rule, the 17x17 core (respectively the 19x19 and the 21x21 cores) has 9 (13 and 13) evolving universes with 4 (3 and 3) different evolving rods per universe. No significant change on the final burnup value is observed with the use of a coarser universe pattern.

Studied cores are designed to operate in standard PWR thermohydraulics conditions (pressure at 155 bars, coolant inlet temperature in the core set to 560 K). It is assumed that the thermal shock resistance of an SMR core vessel is the same than a standard PWR, thus the maximal temperature rise in the core (noted as ΔT) is limited to 40 K. Mass flux per assembly is adjusted to reach such ΔT in an assembly that produces the average power density according to the following formula:

$$\dot{m} = \frac{\ddot{q} \cdot S_{fuel} \cdot H}{S_{cool} \cdot C_p \cdot \Delta T} = \frac{\ddot{q} \cdot S_{fuel} \cdot H}{S_{cool} \cdot \Delta h}$$

With:

- \dot{m} the mass flux in (kg/m².s)
- \ddot{q} the fuel power density (W/m³)
- H the height of the assembly in (m)
- S_{fuel} the pellet cross-section in (m²)
- S_{cool} the coolant cross-section in a lattice cell (m²)
- C_p the heat capacity in (J/kg.K)
- ΔT the coolant temperature rise in (K)
- Δh the enthalpy rise corresponding to the temperature rise in (J/kg)

The simplest hypothesis is to consider a uniform mass flux for all assemblies. To avoid boiling right out of an assembly, the peaking factor (i.e. the ratio of the power produced in an assembly over the average power per assembly) must be kept below 1.55. This value¹⁵, can be deduced from the previous formula and works for each lattice studied.

To respect this criterion, enrichment is zoned per universes. Enrichment proportion increases linearly with

Form Factor 17x17 core					
			1,13	0,7	
		1,21	1,24	1,01	
	0,97	1,11	1,19	1,04	0,62
0,84	0,93	1,08	1,18	1,09	0,66

Enrichment 17x17 core					
			4,96E-02	4,30E-02	
		4,31E-02	4,63E-02	4,96E-02	
	3,89E-02	4,12E-02	4,35E-02	4,58E-02	4,30E-02
3,66E-02	3,89E-02	4,12E-02	4,35E-02	4,58E-02	4,30E-02

Form Factor 19x19 core					
			0,99	0,60	
		1,24	1,20	0,93	
	1,02	1,17	1,25	1,07	0,60
0,83	0,94	1,13	1,26	1,14	0,65

Enrichment 19x19 core					
			4,61E-02	4,20E-02	
		4,22E-02	4,44E-02	4,69E-02	
	3,81E-02	4,05E-02	4,32E-02	4,61E-02	4,20E-02
3,40E-02	3,69E-02	3,98E-02	4,27E-02	4,56E-02	4,20E-02

Form Factor 21x21 core					
			1,00	0,87	
		1,06	1,09	0,99	
	0,83	0,98	1,11	1,08	0,96
0,68	0,77	0,94	1,11	1,17	1,04

Enrichment 21x21 core					
			4,62E-02	4,50E-02	
		4,22E-02	4,45E-02	4,71E-02	
	3,79E-02	4,04E-02	4,32E-02	4,62E-02	4,50E-02
3,37E-02	3,67E-02	3,97E-02	4,27E-02	4,57E-02	4,50E-02

TABLE IV. Only a eighth of the core is represented. The left cores are filled by assembly's form factor at BOC, defined as the assembly's power over the average core power. The right cores are filled with the assembly's enrichment at BOC expressed in % of ²³³U in heavy metal.

the universe's distance from the core center. In the same time, the total amount of ^{233}U in the core is conserved. Enrichment in the outer universe is kept unchanged (see Table IV) to minimize the neutronic core leak and vessel irradiation damages. A parametric study is carried out with Serpent 2 to minimize the form factor. The results, shown in Table IV, demonstrate the efficiency of this method at the cost of a wide fissile enrichment from about 3.5% to 5%. The lower form factor in the 21x21 is explained by a harder spectrum which makes the power flattening easier.

TABLE V. Summary of core performance as computed by various models. "FA" simulation refers to fully mirrored infinite lattice calculation, "BASIC" simulations refers to FCU simulation of a core filled with the "FA" assemblies and enrichment zoning. "OPTIMIZED" simulation refers to "BASIC" simulation with zoned BPs. "B-Th" simulations refers to "OPTIMIZED" core simulation with soluble boron following and thermal coupling.

Lattice	Simulation	Burnup [GW.d/ton _{HM}]	FIR	^{232}U [g] production per FA
17x17	FA	34.0	0.55	12.0
	BASIC	30.9	0.59	10.4
	OPTIMIZED	34.0	0.56	12.1
	B-Th	32.3	0.59	10.9
19x19	FA	38.4	0.56	22.5
	BASIC	30.7	0.64	16.6
	OPTIMIZED	35.0	0.59	19.5
	B-Th	35.5	0.60	20.9
21x21	FA	37.9	0.64	29.2
	BASIC	30.3	0.70	21.6
	OPTIMIZED	32.6	0.67	23.4
	B-Th	31.9	0.71	25.3

Improvement on the core evolution has been added gradually in order to quantify their importance on the global performances. The Table V summarizes these results for the different calculation among them:

- The "FA" configuration which correspond to the fully mirrored assembly calculation, loaded with BPs as already presented in section II.
- The "BASIC" configurations refer to core evolutions with enrichment zoning.
- The "OPTIMIZED" calculations refer to core evolution where the BPs are also zoned.
- The "B-Th" calculations refer to an "OPTIMIZED" core configuration with a boron-following to keep the reactivity close to the criticality at ± 200 pcm and a thermal coupling applied on each universe according to their power level at each evolution time step.

The comparison between the "FA" and the "BASIC" calculation highlights an important difference on the bumup, up to 20% in the 21x21 case. One part of that discrepancy is explained by the heterogeneous fuel depletion at core level despite power flattening. The power level also impacts the kinetic consumption of the BPs which are quickly bumed in the high flux regions. The differentiation of the BP buming has a disruptive effect on the power distribution. To preserve the power flattening and improve the bumup performance, the BPs must also be zoned. As a first approach, the BP distribution is modified proportionally to their universe power level at beginning of cycle (BOC). The total BP amount is kept unchanged at core scale. This enhancement, added in the "OPTIMIZED" core simulation, increases the final bumup of about 10% but it does not fully explain the differences with the "FA" calculation.

The other part of the "FA vs. BASIC" core bumup difference lies in the leak threshold assumed for the "FA" calculation. As shown in Fig 4, core leakage is close to 5000 pcm (and even more for harder spectrum). Let us specify that the leaks computed are those from the fissile part of the core (not from the reflector neither the vessel) which is the most consistent in view of a fully mirrored assembly comparison. The more the power density is high in the outer core layer, the more the leaks are important. Wide leak swing also implies important change in the power distribution. Fig. 4 also shows that optimization process leads to a higher core leakage which is consistent with a flatten power distribution. By using the "OPTIMIZED" core configuration and taking into account larger leaks in the "FA" bumup predictions, the discrepancy is reduced to about 1 GW.d/ton_{HM}.

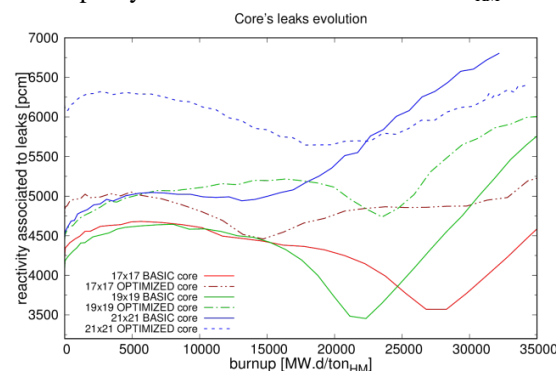


Fig. 4. Core leaks during the whole cycle, in various SMR configurations in "BASIC" configuration and "OPTIMIZED" configuration.

Boron-following and thermal coupling have also been tested in the "B-Th" core evolution. The soluble boron concentration is adjusted before every time step in order to reach criticality. This critical concentration is determined iteratively at ± 200 pcm. Thermal coupling is also taken into account. The power density is estimated by Serpent in

each universe during the core evolution. A cosine shape is assumed for the axial power profile. From this, analytical temperature profiles are computed in an average rod (cf. IV.A.). Average temperatures for the fuel, the cladding and the coolant are then imposed to the different evolving rods of each universe. Coolant density is also modified according to the new coolant temperature value. This thermal coupling could be improved by introducing axial discretization but it will also induce a higher computational cost.

In the purpose of developing a simple and quick core evolution method, this last study aim to prove the reduced impact of the boron-following and the temperature coupling on the final burnup value¹⁶ as see in Table V.

For all cases, maximal output coolant temperature, over the whole evolution, reach about 610 K which is closed to the boiling temperature (617 K at 155 bars). A variation of about $\pm 10K$ on this maximal temperature has been recorded during the evolution. Improving safety margin on the maximal coolant temperature output imply to control and to flatten more the power distribution (by means of control rod for instance) or by a ΔT_{core} derating. The MDNBR remains to be examined.

The presence of soluble boron in the moderator modifies the final isotope inventory. The boron hardens the neutronic spectrum, which favors the conversion process but also increases the ²³²U production and thus high energy gamma emissions.

All the cores loaded with the maximal boron concentration (determined in section II) exhibit, on the first time step, a reactivity excess between 2000 and 1000 pcm. Thus, before Xe appearance, our cores need other means of reactivity control to ensure criticality. Maximal boron concentrations computed in section II have been proven to be too optimistic. The maximal boron concentration change is due to the enrichment zoning and the addition of burnable poisons. Variation of ²³³U enrichment induces a change of about 525 ppm/%at on the maximal boron concentration. Burnable poisons also impact the C_b^{max} by their influence on the neutronic spectrum¹⁷.

These observations allow reconsidering the general design methodology. Maximal boron concentration determination in fully mirrored assembly calculation is not reliable enough. A first solution would be to take a sufficient margin on the value predicted by this method. A more efficient strategy would be to compute the maximal boron concentration at core level in parallel to the insertion of BPs just after enrichment zoning.

IV. REA AS DESIGN TRANSIENT

A complete assessment of the core under design must include a safety evaluation on a challenging transient accident. Here, a Rod Ejection Accident (REA) is chosen. In UOX fuel, REA are usually performed at end of cycle (EOC) because the β_{eff} is minimal due to ²³⁸U conversion

into ²³⁹Pu. On the contrary, the use of thorium fuel slightly improves the β_{eff} during the cycle of about 10% because of the marginal apparition of ²³⁵U, (cf. Table VI).

TABLE VI. β_{eff} estimation at core scale, at BOC (Beginning of cycle), MOC (Middle of Cycle) and EOC (End of cycle) for various assembly's moderation ratio.

Core \ β_{eff} (pcm)	BOC: $0.0 \frac{GW \cdot j}{ton_{HM}}$	MOC: $20 \frac{GW \cdot j}{ton_{HM}}$	EOC: $35 \frac{GW \cdot j}{ton_{HM}}$
17x17	308	316	334
19x19	305	326	340
21x21	291	319	353

Yet other effects (such as spectrum softening as boron concentration decreases) have opposite influences, hence the two configurations (BOC and EOC) are considered in the following to provide a view of the transient response over the whole cycle. REA commonly starts from Hot Zero Power condition (HZP) to maximize the inserted amount of reactivity. This state is characterized by an isothermal core temperature set at 560 K and an initial power set to 10^{-6} of the nominal power¹⁸.

At EOC, HZP inserts some reactivity which is handled by B₄C control rods since no boron is left. The control rods are enriched in ¹⁰B to get as close as possible to criticality. The hottest fuel assemblies are firstly rodded.

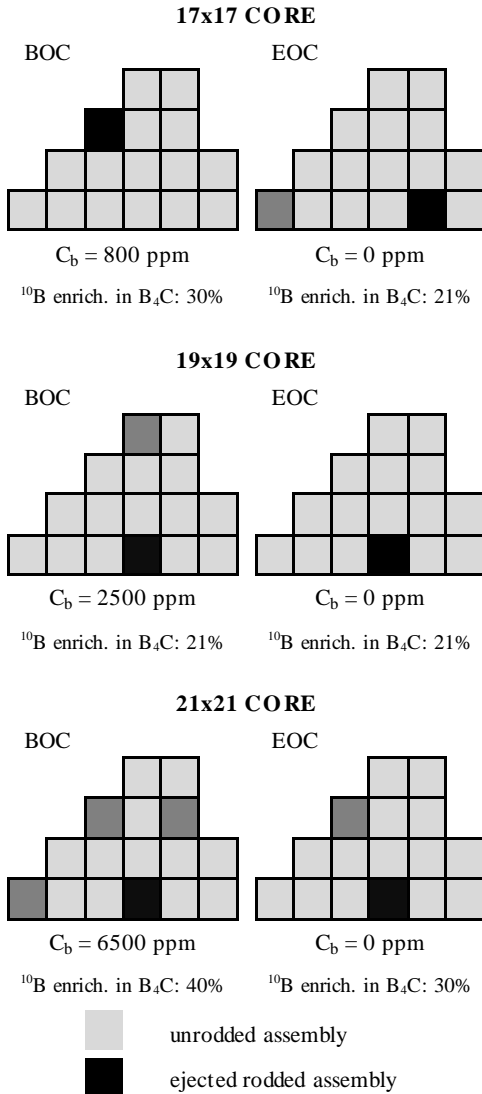
In BOC case, the concentration of soluble boron is adjusted to reach criticality at HFP or if the reactivity excess is too high, the soluble boron concentration is set to the maximal value previously defined. The rest of the reactivity excess is compensated with control rods in the same way than in EOC cases.

For an ejection time, standard value considered in PWR design is about 0.1 s. Despite a shorter assembly length, this value is used in the following. Serious transients are chosen in order to identify the most resilient concept among those considered. In that view, two types of rod ejection are computed for each core at BOC and EOC: one type with one rod ejected (1-rod ejection) and one with two rods ejected simultaneously (2-rod ejection). The hottest fuel assemblies in the unrodded HFP configuration are those chosen to undergo the rod ejection. At the beginning of the transient, in a 2-rod ejection case the second ejected rod position is the closest rodded position given the core symmetry (cf. Fig. 5).

During an REA, traditional indicators are considered to assess the accident's consequences:

- Maximal fuel temperature has to remain below 2900 K for UO₂ fuel which corresponds to the fusion temperature decreased by a safety margin of about 10% (comprising uncertainties). The same margin is applied on the ThO₂ fuel which should not overcome 3100 K.

- The amount of energy provided to the pellet during the accident should remain below 225 cal/g at BOC to avoid a rod failure¹⁹. This value is only relevant for UO₂ fuel but also used for the ThO₂ fuel in this study.
- The hottest zircaloy cladding temperature must remain below 1755 K to prevent exothermal oxidation and below 900 K on a longer time (few minutes) to avoid fast oxidation²⁰.
- The proportion of rods undergoing a boiling crisis has to be less than 10%. Critical heat fluxes are usually given by the usual W-3 DNBR (Departure from Nucleate Boiling Ratio) correlation²¹. In the following only the bulk coolant temperature is computed.



■ not ejected rodded assembly

Fig. 5. Core configurations for the REA accident, for each moderating ratio considered in 1-rod ejection. For the 2-rod ejections, the second ejected rod is the nearest rod given by x/y symmetry.

IV.A. Simple Tools Used for REA: NDM and BATH

Time-dependent neutronic calculations are handled by a SMURE integrated tool called NDM²². The core geometry is represented by a 3D mesh whose size is adjusted in a best effort approach (high ratio of accuracy versus complexity). It is expressed in this study by assemblies divided into 12 levels in the axial dimension and 4 square pieces per assembly in the horizontal dimensions. To ensure stability and accuracy, a small time step of 10⁻⁸ s is used. However, the calculation time is achieved with reasonable computing cost (about 3 hours) by means of parallelization (on 15 CPU of about 2.60 GHz).

NDM has been validated on a typical REA transient²³. Coupled to a simple lumped thermal model, this benchmark highlighted the need to compute temperature profiles which has lead to the development of BATH (Basic Approach to Thermal Hydraulics). Basically, BATH solves the energy conservation equation in an average cell (i.e. with fuel, gap, cladding and coolant), using the finite difference formalism. This average cell is split into axial levels where the following equations are solved:

$$\rho \cdot C_p \cdot \frac{dT_{fuel}(r)}{dt} = \lambda \cdot \left(\frac{d^2 T_{fuel}}{dr^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{dT_{fuel}}{dr} \right) + \ddot{q}$$

$$\rho \cdot C_p \cdot \frac{dT_{clad}(r)}{dt} = \lambda \cdot \left(\frac{d^2 T_{clad}}{dr^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{dT_{clad}}{dr} \right)$$

$$\rho \cdot C_p \cdot \frac{\partial T_{cool}}{\partial t} + \dot{m} \cdot C_p \cdot \frac{\partial T_{cool}}{\partial z} = h_{cc} \cdot (T_{clad}^{ext} - T_{cool}) \cdot \frac{S_{clad}^{ext}}{V_{cool}}$$

With:

- \ddot{q} the fuel average power density (W.m⁻³).
- ρ the density (kg.m⁻³), in fuel, cladding or coolant.
- C_p the heat capacity (J.kg⁻¹.K⁻¹), in fuel, cladding or coolant.
- λ the conductivity (W.m⁻¹.K⁻¹), in fuel, cladding or coolant.
- \dot{m} the mass flux (kg.m⁻².s⁻¹).
- S_{clad}^{ext} the wet cladding surface in the current axial level (m²).
- V_{cool} the volume of coolant in the axial level (m³).
- h_{cc} the conducto-convective coefficient in ($\frac{W}{m^2.K}$).

For better readability, the subscripts that indicate the belonging of λ, ρ, C_p to a cell zone have been omitted. The conducto-convective coefficient is computed from the dimensionless Nusselt number as: $Nu = \frac{h_{cc} L_c}{\lambda_{clad}}$ where L_c is the characteristic length that is here the heating diameter. The system is closed by estimating the Nu number with the Dittus-Bolter correlation²⁴. The conditions of application for that correlation are quite close to those in a PWR operating condition. That correlation works only for a single phase flow. As a consequence, the calculation is not relevant anymore as soon as the boiling temperature is reached (617 K at 155 bars). For simple mass conservation, density and mass flux are kept constant.

Cell mesh is illustrated in Fig. 6. Axial dependency is supposed negligible in the fuel and the cladding since the axial thermal gradient is much lower than the radial one. On the contrary, only the bulk value at each is computed for the coolant.

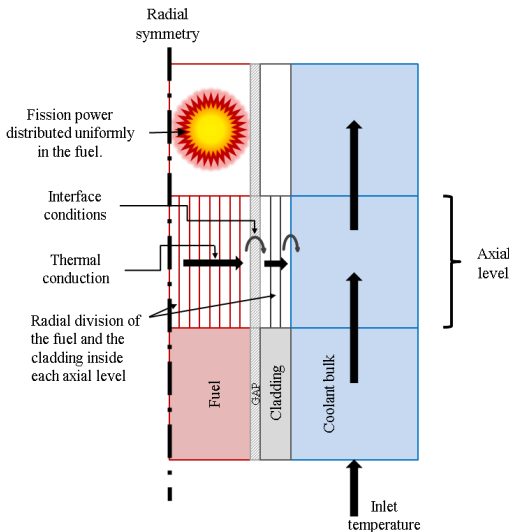


Fig. 6. Principle scheme of a typical BATH cell. In each axial level, fuel and cladding temperature profiles is computed.

Boundary conditions between the radial layers are described below:

- At Fuel/Cladding interface

$$\begin{cases} \lambda \cdot \frac{dT_{fuel}}{dr} \Big|_{R_{fuel}^{ext}} = h_{Gap} \cdot (T_{clad}(R_{fuel}^{int}) - T_{fuel}(R_{fuel}^{ext})) \\ \lambda \cdot \frac{dT_{clad}}{dr} \Big|_{R_{fuel}^{int}} = h_{Gap} \cdot (T_{clad}(R_{fuel}^{int}) - T_{fuel}(R_{fuel}^{ext})) \end{cases}$$

- At Cladding/Coolant interface

$$\lambda \frac{dT_{clad}}{dr} \Big|_{R_{clad}^{ext}} = h_{cc} \cdot (T_{cool} - T_{clad}(R_{fuel}^{int}))$$

Considering the short transient duration, the coolant inlet temperature is kept constant at 560 K. The gap between the fuel and the cladding is modeled by a thermal

conductance h_{Gap} set to $1.0 \cdot 10^5 W/K$ (Ref. 23). No extra effort to enhance this value of this oversimplified fuel-to-cladding heat transfer model is really worth, since it cannot reproduce the complexity of the so-called Pellet-Clad Interactions and the gap shrink that happens in such transient.

An easy coupling is ensured by overlapping NDM and BATH meshes. Each column of 3D NDM lump cell is connected to a BATH cell. The neutronic calculation provides density power profile to BATH. In response, average fuel and coolant temperatures are given to each neutronic lump. An effective fuel temperature²⁵ is provided to the neutronic lump $T_{eff} = \frac{5}{9} \cdot T_s + \frac{4}{9} \cdot T_c$ (T_s the surface temperature of the fuel zone and T_c the central temperature).

Tabulated cross-sections depending on fuel and coolant temperatures have been previously computed by the Serpent 2 code for each universe of the different core models of section III. In these calculation, fuel and coolant temperature are changed independently while all other are kept at 560 K. The fuel temperature values used are 560, 600, 900, 1200, 1500, and 1800 K and the coolant temperature ones are 560, 600 and 650 K. Tabulated cross-sections are processed by NDM as follows:

$$\Sigma_R = \Sigma_{T_c=560K}^{T_f=560K} + \Delta \Sigma_f(T_f) + \Delta \Sigma_c(T_c)$$

Where $\Delta \Sigma_f(T_f)$ is a polynomial function given by a least square minimization. Low orders (below 3) are preferred to filter statistical noise.

Characteristic times of the neutronics and the thermal-hydraulics differ by several orders of magnitude. Neutronics time could be estimated as the $\min(\Sigma \cdot v)$ or $\frac{D \cdot v}{\Delta x^2}$ in the case of a very fine mesh, which leads to values of about 10^{-7} s. Characteristic times of thermal-hydraulics is estimated by $\frac{\lambda}{\rho \cdot C_p \cdot \Delta x^2}$ which is equals, in the fuel, about 10^{-2} s. As a consequence, desynchronizing NDM and BATH calculations can nicely improve the computing performance (of about 20%) without losing any accuracy. It is easily done by using: $dt_N = 10^{-8}$ s for neutronics and $dt_{TH} = 10^{-5}$ s for thermal-hydraulics. At first, NDM performs $(\frac{dt_{TH}}{dt_N}) = 10^3$ neutronic iterations without updating temperatures. Then, BATH computes temperatures using the power averaged density over all previous neutronic time steps in each lump.

IV.B. Impact of Test Transient on Core Designs

Only the one rod ejection transient is presented for the 21x21 core as the safety criteria are compromised in this transient. The 17x17 has expressed correct response to this 1-rod ejection while the 19x19 core barely avoids the

boiling. For the 17x17 and 19x19 cores, the 2-rod ejections are presented.

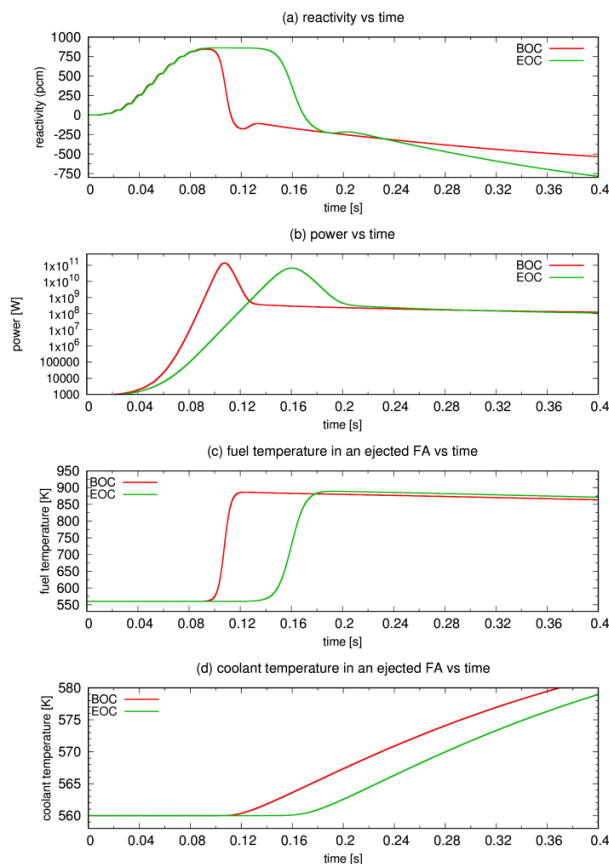


Fig. 8. Summary of the 2-rod ejection in the 17x17 core.

General review

The rod ejection accident can be divided in 4 steps according to the dominant effect.

At first, the ejected rod has almost no impact on the reactivity because it leaves low neutronic importance areas (bottom of the core), as see in Fig. 8,9,10-a. The power starts to rise at around $t=0.02$ s. Despite a special homogenization treatment in the rodded lump²³, the so-called rod cusping effect²⁶ is still visible due to the coarse axial mesh used. In all cases, the reactivity inserted at EOC is about 200 pcm higher than at BOC. Nevertheless, the power peak is at least 40% higher at BOC than in EOC, which is mostly due to the lower precursor proportion. There is no trivial correlation between the rod weight and its enrichment, since the 19x19 and 21x21 cores have approximately the same inserted reactivity with ¹⁰B enrichment varying from 21% to 40%.

In a second step, the reactivity evolution is constrained by the fuel temperature. Feedback is effective above the Doppler threshold, at about 800 K. In the case of the 17x17 core (Fig. 8-a,c), reaching this temperature takes more time than the rod ejection itself. This results in a

reactivity plateau during which the power can increase until the fuel temperature reaches the Doppler threshold. On the contrary, in the 21x21 case (Fig. 10-a,c), fuel feedback becomes efficient before the end of the ejection. In all cases, this fuel temperature rise is enough to make the core subcritical.

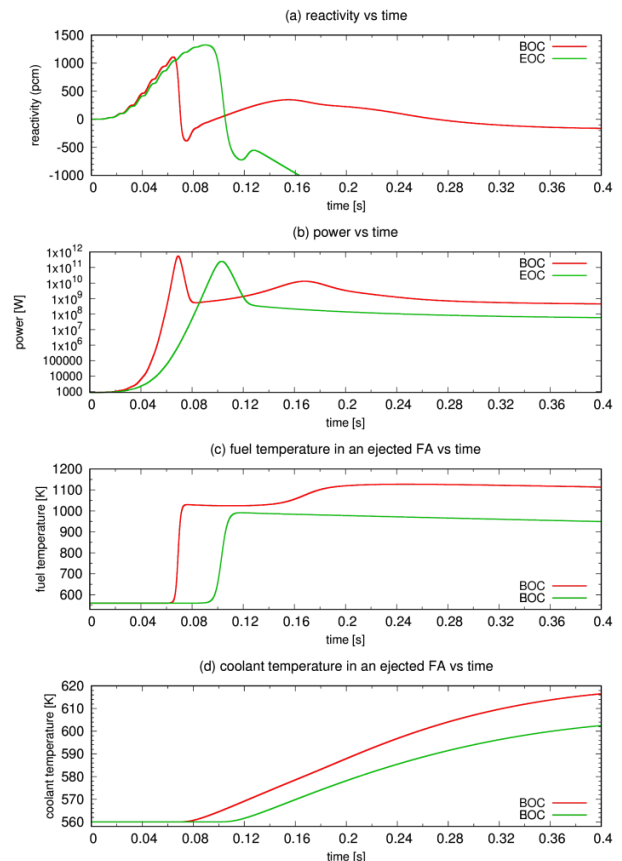


Fig. 9. Summary of the 2-rod ejection in the 19x19 core.

As power is directly released in the fuel pellet, the reactivity strongly decreases in about $2 \cdot 10^{-2}$ s, followed by a reactivity revival of about $5 \cdot 10^{-2}$ s which constitutes the third step of the reactivity evolution (Fig. 8-a, 9-a, 10-a). It corresponds to the thermal diffusion from the fuel to the cladding. The fuel temperature stops increasing for the benefit of the cladding temperature which has no impact on the reactivity. It also implies a slight flattening of the radial fuel temperature profile. The effective fuel temperature used to compute thermal dependent cross-sections is very sensitive to this fuel temperature gap. Those effects lead to a small reactivity increase.

In the fourth step, the reactivity is dominated by coolant feedback. For the cores, BOC has a higher CTC because of soluble boron. In the 17x17 core, at BOC, the coolant temperature rise has almost no effect on reactivity, which indicates boron concentration is closed to its maximum.

As seen in Fig. 9-a,d, the maximal boron concentration has been overestimated for the 19x19 core since the boron concentration used is lower (2500 ppm used against 2600 ppm). During cross-section generation, Serpent 2 calculation gives a negative of about $-4 pcm/K$ for the whole core. A careful examination indicates that unrodded universe CTC are positives. The global negative value comes is due to a leakage increase. This global negative CTC is computed for the fundamental mode of the rodded core, which is not relevant at the end of the transient. Moreover, a NDM / Serpent 2 comparison highlights that leakage variation is underestimated by NDM. Extra effort should be dedicated in further studies to more representative feedback calculation.

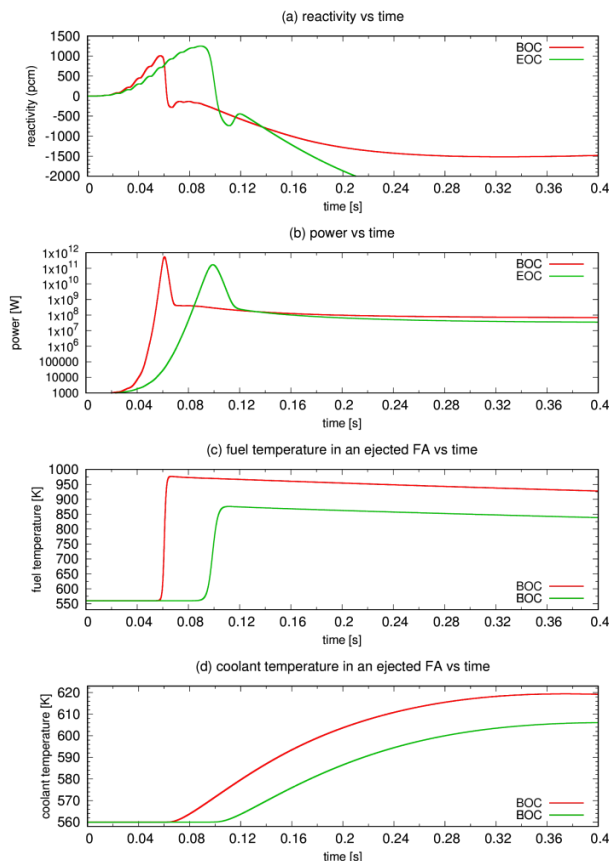


Fig. 10. Summary of the 1-rod ejection in the 21x21 core.

It can be reasonably assumed that a core always operates below the maximal soluble concentration. That is why, a more realistic configuration is considered for the REA in the 21x21 core at BOC (see Fig. 5). The coolant feedback is ensured to be negative by limiting the boron concentration to 6500 ppm. More control rods are added, with a higher ^{10}B enrichment, to balance the reactivity excess. The reactivity evolution is stopped once the coolant temperature is stabilized (Fig. 10-a,d). Finally, the core

finds a new stable power level according to the mass flow value.

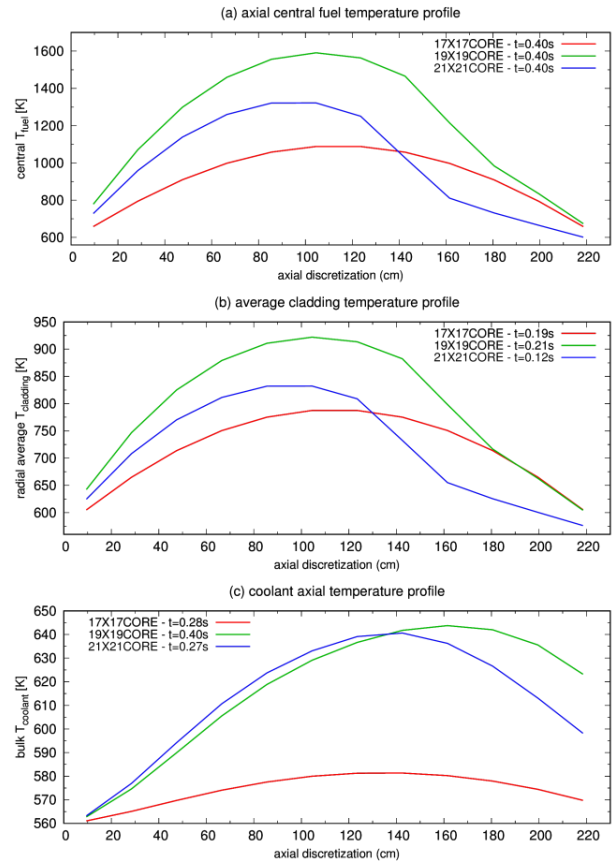


Fig. 11. Fuel, cladding and coolant temperature axial profiles in the hottest assembly at the time of maximal local temperature.

Criteria review

For the sake of clarity, only the BOC analysis is detailed. Previously presented criteria are evaluated at each time step in all fuel assemblies. Fig. 11 shows the axial profile of the central fuel temperature, the average cladding temperature and the coolant temperature in the hottest assembly at the time where the maximal local value has been reached.

As suggested in Fig. 8, the 17x17 core exhibits the best behavior despite the simultaneous ejection of 2 rods. The higher temperatures are encountered in the 19x19 core because of the positive CTC effect and the second Doppler response. Due to the reactivity plateau in the 17x17 core transient, neutronic flux has the time to relax into its new fundamental mode, which is why fuel and cladding profiles are axially symmetrical. On the contrary, for the 19x19 and 21x21 core transients, fuel feedback occurs before the end of the ejection. As a consequence, the lower part of the rod is more heated than the upper part.

According to Fig.11, fuel temperature never exceeds the melting point in any simulation. Central fuel

temperature maximum always occurs at the end of transient as heat removal is slow. Nevertheless, central fuel temperature evolution should remain acceptable as the power level of the hottest assembly is about 10 times lower than the average power level at HFP. Thus the first criterion is respected. The fuel gap temperature into the pellet is always lower than 500 K, which prevents any rod failure.

Cladding temperature reaches the limit of fast oxidation for long time transients in the 19x19 core. However, the average cladding temperature tends to decrease at the end of the transient. This second criterion is then also respected.

Coolant temperature is far from its boiling point in the 17x17 core. However, as the average coolant temperature is not stabilized at the end of transient (see Fig. 8.), boiling at the outlet of an assembly is still possible, afterwards. For the 19x19 and 21x21 cores, boiling crisis occurs in almost the full length of the hottest assembly. About 35% of the assemblies undergo boiling in the 19x19 core against 16% for in 21x21 core, which unfulfills the last criterion. It has to be noticed that only single phase flow equation is used to compute the energy conservation in the coolant. Results that occur after the boiling are then irrelevant and may change the previous conclusion on the central fuel and cladding temperatures.

Those simulations are fully consistent with the well-known fact that coolant heat removal is the main issue for tight lattices. Transient consequences could be mitigated in the case of the 19x19 core by a negative CTC. A review of the maximal boron concentration would lead to the determination of a new burnable poison mix. Higher mass flux seems also necessary in the 19x19 and 21x21 core cases, which implies some power derating.

V. CONCLUSIONS AND PERSPECTIVES

In this paper, a simple methodology to assess innovative reactor designs has been presented. Reactor complexity is handled progressively. Core performance is reviewed while safety and operating constraints are taken into account. Because of the growing interest of the SMRs in the nuclear renewal, this methodology has been applied on a thorium fueled SMR reactor. Four moderating ratios (notated 15x15, 17x17, 19x19 and 21x21) have been considered to make optimizations possible.

Summary of the SMR study

Our methodology is composed of three main steps: the fully mirrored assembly evolution, the core evolution and the transient calculation. During the fully mirrored assembly calculation, enrichment has been set to reach 40 GWd/ton_{HM}. In the first instance, the reactivity management has been addressed by determining a maximal soluble boron concentration. This step leads to the elimination of the 15x15 lattice. Single batch mode implies

a large amount of reactivity that necessitates a varied and important amount of burnable poison. A decrease of the burnup performance of about 2 GWd/ton_{HM} has been observed, mainly due to some fissile substitution by burnable poisons.

Core scale evolution has been computed with a Monte Carlo treatment by means of an original method called FCU which has helped us to flatten the power distribution during the whole evolution. This process retro-act upon the previously determined BP mix and the maximal soluble boron concentration.

The last safety step involves, at first, a 1-rod ejection transient. Despite a satisfying fuel response, the 21x21 core exceeds the authorized proportion of boiling assemblies. As power flattening has already been optimized, solution like the total power derating by increasing the mass flow has to be considered despite their extra cost. Simultaneous 2-rod ejection has also been considered. The 17x17 core is the most resilient. Hence the 19x19 core option should be seen as a possibly satisfactory (i.e. competitive) trade-off between high conversion and enhanced safety.

Further Methodological Development

Optimization of BP distribution is essential to conserve high burnup performance at core scale. As a consequence, it appears more efficient to set the BP mix after enrichment zoning. A general computing approach must be developed to produce BP mix that suits a given power level and helps to control the core power flattening. Then, in function of the remaining reactivity at each evolving time step, soluble boron can be added and checked to be below the maximal limit. To ensure an optimal transient behaviour, each core universe must exhibit a negative CTC. Better fuel performance can be expected from a simpler reactivity control management together with multi-batch refueling. This option will be adapted and tested in our new FCU method.

On the transient aspect, it appears that MDNBR estimation is essential to safety analysis. Moreover, 2-phase flow computation could be planned if sensibility would need to be enhanced. Usage of a 2-rod ejection transient indicates that REA is not necessarily the most relevant design transient. Other design transients should be envisaged.

Future work

Our toolbox has demonstrated to be both mature and flexible to provide valuable insight in the scope of design exploration. Our future study will test the SMR ability to address the problem of the Pu consumption / conversion by the design of a Th/Pu-fueled SMR. This study has also outlined a few problems in relation with soluble boron, whose impact could be minimized by various alternative options.

ACKNOWLEDGEMENTS

As a third-year PhD student, the main author (P.P.) would like to express his gratitude to the Grenoble PhD School for Physics, to the LPSC Reactor Physics Group and to its MAP (Modelization, Analysis, and Prospective) team. The authors acknowledge technical feedback on PWR technology from P. Rubiolo (MAP team responsible).

REFERENCES

1. A. NUTTIN, P. GUILLEMIN et al., "Comparative Analysis of High Conversion Achievable in Thorium-Fueled Slightly Modified CANDU and PWR Reactors", *Ann. Nucl. Energy*, 40, 1, 171 (2012).
2. K.S. KOZIER, "The nuclear battery: A very small reactor power supply for remote locations", *Energy*, 16, 1-2, 583-591 (1991)
3. N.R. BROWN, A. WORNALL, "Fuel Cycle Performance of Thermal Spectrum Small Modular Reactors", *Proc. Int. Congress on Advances in Nuclear Power Plant (ICAPP' 2016)*, San Francisco, CA, USA, 17-20 (2015)
4. V. NIAN, "The prospects of small modular reactors in Southeast Asia", *Progress in Nuclear Energy*, 98, 131-142 (2017)
5. S. BANOORI, M.H. SUBKI et al., *Advances in Small Modular Reactor Technology Developments*, Introduction, IAEA (2016)
6. O. MEPLAN et al., "SMURE, Serpent/MCNP Utility for Reactor Evolution: Couples Monte Carlo Transport with Burnup and Thermal-Hydraulics Calculations", <http://www.oecd-nea.org/tools/abstract/detail/nea-1845>, OECD Nuclear Energy Agency (2015).
7. J. LEPPANEN et al., "User Manual of the Monte Carlo code Serpent 2", <http://serpent.vtt.fi/mediawiki>, VTT Technical Research Centre of Finland (2015).
8. N. Capellan et al., "3D coupling of Monte Carlo neutronics and thermal-hydraulics calculations as a simulation tool for innovative reactor concepts", *Proc. Int. Conf. GLOBAL*, Paris, France (2009)
9. O. MEPLAN et al., SMURE, Serpent-MURE, <http://lpsc.in2p3.fr/MURE/html/SMURE/UserGuide>, (2015)
10. E.D. KITCHER, S.S. CHIRAYATH et al., "Neutronics and Thermal Hydraulics analysis of a Small Modular Reactor", *Ann. Nucl. Energy*, 97, 1, 232 (2016).
11. S.Y. KIM, J. K. KIM, "A reactivity hold-down strategy for soluble boron free operation by introducing Pu-238 added fuel", *Ann. Nuc. Energy*, 27, 855-871 (2000)
12. A. BAENA, T. CARDINAELS et al., "Synthesis of UO₂ and ThO₂ doped with Gd₂O₃", *J. Nuc. Materials*, 461, 271-281 (2015)
13. S.B. ALAM et al., "Feasibility Study of the Design of Homogeneously Mixed Thorium-Uranium Oxide and All-Uranium Fueled Reactor Cores for Civil Nuclear Marine Propulsion", *Proc. Int. Congress on Advances in Nuclear Power Plants ICAPP*, Nice, France, May 3-6, 2015, p. 1918, American Nuclear Society (2015) (CD-ROM).
14. J.C. KIM, M.H. KIM et al. "Nuclear Design Feasibility of the Soluble Boron Free PWR Core", *J. Korean Nuc. Soc.*, 330, 4, 342-352 (1998)
15. S. PRAMUDITYA and M. TAKAHASHI, "Code Design Study for Power Upgrading of Integral Primary System PWR", *Ann. Nucl. Energy*, 59, 1, 16 (2013).
16. G. KEPISTY, J. CETNAR et al., "Parametric studies of the PWR fuel assembly modelling with Monte-Carlo method", *Ann. Nuc. Energy*, 94, 189-207 (2016)
17. N. Z. ZAINUDDIN, G.T. PARKS et al., "The factors affecting MTC of thorium-plutonium-fuelled PWRs", *Ann. Nuc. Energy*, 98, 132-143 (2016)
18. T. KOZLOWSKI, T. DOWNAR, "PWR MOX/UO₂ Core Transient Benchmark, Final Report NEA-62048", OECD Nuclear Energy Agency, (2007)
19. F. DAMIAN, S. DOUCE et al., "Improvement of the Conversion Ratio in PWR", *Proc. Int. Conf. PHYSOR*, Pittsburgh, Pennsylvania, USA (2010)
20. N. KERKAR, P. PAULIN, *Exploitation des cœurs REP*, Chapitre 3, EDP Sciences, Les Ulis (2009)
21. L.S. TONG, "Heat transfer in water cooled nuclear reactors", *Nuc. Eng. and Design*, 6, 301-324 (1967)
22. A. NUTTIN, P. PREVOT et al., "Validation of the Minimalistic Nodal Drift Method for Spatial Kinetics on a Simple CANDU LOCA Benchmark", *Ann. Nucl. Energy*, 88, 1, 135 (2016).

23. P. PREVOT, A. NUTTIN et al., “Enhancements to the Nodal Drift Method for a Rod Ejection Accident in a PWR-like Mini-core with Lumped Thermal Model”, *Ann. Nucl. Energy*, 101, 1, 128 (2017).
24. R. WINTERTON, “Where did the Dittus and Boelter equation come from?”, *Int J. Heat Mass Trans.*, 41, 4-5, 809-810 (1998)
25. G. ROWLANDS, “Resonance absorption and non-uniform temperature distribution”, *J. Nuc. Energy, Parts A & B. Reactor Sci. Technol.*, 16 (1962)
26. A. DALL’OSSO, “Reducing rod cusping effect in nodal expansion method calculations”, *Proc. Int. Conf. PHYSOR*, Seoul, Korea (2002)

Bibliographie

- [1] Alain Grandjean and Jean-Marc Jancovici. *Le Plein s' il vous plaît. La solution au problème de l'énergie*. Le Seuil, 2014.
- [2] C. De Castro et al. The role of non conventional oil in the attenuation of peak oil. *Energy Policy*, 37(5) :1825–1833, 2009.
- [3] Nick A Owen, Oliver R Inderwildi, et al. The status of conventional world oil reserves—hype or cause for concern? *Energy policy*, 38(8) :4743–4749, 2010.
- [4] Energy Information Administration (US) and Government Publications Office. *International Energy Outlook 2016 : With Projections to 2040*. Government Printing Office, 2016.
- [5] Core Writing Team, Rajendra K Pachauri, et al. IPCC, 2014 : climate change 2014 : synthesis report. Contribution of Working Groups I. *II and III to the Fifth Assessment Report of the intergovernmental panel on Climate Change. IPCC, Geneva, Switzerland*, 151, 2014.
- [6] Pablo Servigne and Raphaël Stevens. *Comment tout peut s' effondrer. Petit manuel de collapsologie à l'usage des générations présentes : Petit manuel de collapsologie à l'usage des générations présentes*. Le Seuil, 2015.
- [7] Philippe Bihouix. *L'Âge des low tech. Vers une civilisation techniquement soutenable*. Le Seuil, 2014.
- [8] Giorgio Locatelli, Chris Bingham, et al. Small Modular Reactors : A comprehensive overview of their economics and strategic aspects. *Progress in Nuclear Energy*, 73 :75–85, 2014.
- [9] Jasmina Vujić, Ryan M Bergmann, et al. Small Modular Reactors : Simpler, safer, cheaper? *Energy*, 45(1) :288–295, 2012.
- [10] Paul Reuss. *L'épopée de l'énergie nucléaire, Une histoire scientifique et industrielle*. EDP Sciences, Les Ulis Cedex A, France, 2007.
- [11] Antoine Monnet. *Disponibilité à long terme des ressources mondiales d'uranium*. PhD thesis, Université Montpellier, 2016.
- [12] A Nuttin, P Guillemin, et al. Comparative analysis of high conversion achievable in thorium-fueled slightly modified CANDU and PWR reactors. *Annals of Nuclear Energy*, 40(1) :171–189, 2012.
- [13] Perrine Guillemin. *Recherche de la haute conversion en cycle thorium dans les réacteurs CANDU et REP. Développement des méthodes de simulation associées et étude de scénarios symbiotiques*. PhD thesis, Institut Polytechnique de Grenoble, 2009.
- [14] Alexis Nuttin. *Physique des réacteurs à eau lourde ou légère en cycle thorium : étude par simulation des performances de conversion et de sûreté*. Habilitation à diriger des recherches en physique, Juin 2012. LPSC-12-143.

- [15] Franco Michel-Sendis. *Contribution à l'étude de la production d'²³³U en combustible MOX-ThPu en réacteur à eau sous pression. Scénarios de transition vers des concepts isogénérateurs Th/²³³U en spectre thermiques. Développement du code MURE d'évolution du combustible*. PhD thesis, Université Paris Sud, 2006.
- [16] A Nuttin, P Guillemin, et al. Study of CANDU thorium-based fuel cycles by deterministic and Monte Carlo methods. In *PHYSOR-2006 Topical Meeting on Advances in Nuclear Analysis and Simulation*, pages C111–10. American Nuclear Society, 2006.
- [17] Paul Reuss. *Précis de Neutronique*. EDP Sciences, 2003.
- [18] Vanessa Vallet. *Recherche de l'économie des ressources naturelles par des études de conception de cœurs de réacteurs à eau légère et à haut facteur de conversion à combustibles mixtes thorium / uranium / plutonium*. PhD thesis, I-MEP2 : Ingénierie - Matériaux, Mécanique, Environnement, Énergétique, Procédés, Production, 2006.
- [19] Robert Barjon. *Physique des réacteurs Nucléaires*. ISN, Grenoble, 1993.
- [20] Michel Soutif. *Physique neutronique*. Presses universitaires de France, 1962.
- [21] John R Lamarsh. *Introduction to nuclear reactor theory*, volume 3. Addison-Wesley Reading, Massachusetts, 1966.
- [22] Jaakko Leppänen et al. *Development of a new Monte Carlo reactor physics code*. PhD thesis, VTT Technical Research Centre of Finland, 2007.
- [23] Zhaoyuan Liu, Kord Smith, et al. Cumulative migration method for computing rigorous diffusion coefficients and transport cross sections from monte carlo. *Annals of Nuclear Energy*, 112 :507–516, 2018.
- [24] R Chambon and A Hébert. A new open-source pin power reconstruction capability in DRAGON5 and DONJON5 neutronic codes. *Nuclear Engineering and Design*, 289 :208–217, 2015.
- [25] James J Duderstadt, Louis J Hamilton, et al. *Nuclear reactor analysis*, volume 84. Wiley New York, 1976.
- [26] Neil E. Todreas and Mujid S. Kazimi. *Nuclear Systems, Thermal Hydraulic Fundamentals*. CRC Press, Taylor & Francis Group, 600 Broken Sound Parkway NW Suite 300, Boca Raton, FL 33487-2742, 2012.
- [27] Pierre Coppolani. *La chaudière des réacteurs à eau sous pression*. EDP Sciences, 2012.
- [28] Nicolas Capellan. *Couplage 3D neutronique thermohydraulique. Développement d'outils pour les études de sûreté des réacteurs innovants*. PhD thesis, Université Paris Sud-Paris XI, 2009.
- [29] Henri Fenech. *Heat transfer and fluid flow in nuclear systems*. Elsevier, 2013.
- [30] Jean-Marc Delhaye. *Thermohydraulique des réacteurs*. EDP sciences, 2012.
- [31] Nordine Kerkar and Philippe Paulin. *Exploitation des cœurs REP*. EDP Sciences, 2008.
- [32] Marcin Karol Rowinski, Timothy John White, et al. Small and medium sized reactors (SMR) : A review of technology. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 44 :643–656, 2015.
- [33] A Nuttin, P Prévot, et al. Validation of the minimalistic Nodal Drift Method for spatial kinetics on a simple CANDU LOCA benchmark. *Annals of Nuclear Energy*, 88 :135–150, 2016.
- [34] Yongbin Ge. Multigrid method and fourth-order compact difference discretization scheme with unequal meshsizes for 3D Poisson equation. *Journal of Computational Physics*, 229(18) :6381–6391, 2010.

- [35] Murli M Gupta and Jules Kouatchou. Symbolic derivation of finite difference approximations for the three-dimensional poisson equation. *Numerical Methods for Partial Differential Equations : An International Journal*, 14(5) :593–606, 1998.
- [36] Mohamed S El-Genk and Jean-Michel P Tournier. A point kinetics model for dynamic simulations of next generation nuclear reactor. *Progress in Nuclear Energy*, 92 :91–103, 2016.
- [37] Richard H Pletcher, John C Tannehill, et al. *Computational fluid mechanics and heat transfer*. CRC Press, 2012.
- [38] Oleg Zikanov. *Essential computational fluid dynamics*. John Wiley & Sons, 2010.
- [39] Theodore L Bergman, Frank P Incropera, et al. *Fundamentals of heat and mass transfer*. John Wiley & Sons, 2011.
- [40] D Basile, M Beghi, et al. COBRA-EN : an upgraded version of the COBRA-3C/MIT code for thermal hydraulic transient analysis of light water reactor fuel assemblies and cores. *Radiation Safety Information Computational Center, Oak Ridge National Lab*, 1999.
- [41] Peter J Linstrom and WG Mallard. Nist chemistry webbook. NIST standard reference database no. 69. <https://webbook.nist.gov/chemistry/fluid/>, 2001.
- [42] LS Tong. Prediction of departure from nucleate boiling for an axially non-uniform heat flux distribution. *Journal of Nuclear Energy*, 21(3) :241–248, 1967.
- [43] Hubert Gard. *Physique, fonctionnement et sûreté des REP : Le réacteur en production*. Edp sciences, 2015.
- [44] G Rowlands. Resonance absorption and non-uniform temperature distributions. *J. Nuclear Energy, Pts. A & B. Reactor Sci. and Technol.*, 6(AERE-M-717), 1962.
- [45] P Bellier, M Coste, et al. Apollo2. 5 : notice théorique. *Rapport CEA*, 2002.
- [46] W.L. Woodruff J.R. Deen et al. WIMS-D4 Winfrith Improved Multigroup Scheme Code System, WIMS-ANL User Manual Rev4. 1991.
- [47] X MCNP. Monte carlo team, MCNP. a general purpose monte carlo n-particle transport code, version 5. 5.
- [48] TRIPOLI-4 Project Team. TRIPOLI-4 User Guide, 2008.
- [49] Jaakko Leppänen, Maria Pusa, et al. The Serpent Monte Carlo code : Status, development and applications in 2013. In *SNA+ MC 2013-Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications+ Monte Carlo*, page 06021. EDP Sciences, 2014.
- [50] William H Press, Saul A Teukolsky, et al. *Numerical recipes in C++*. The art of scientific computing, 1992.
- [51] P Prévot, A Nuttin, et al. Enhancements to the Nodal Drift Method for a Rod Ejection Accident in a PWR-like mini-core with lumped thermal model. *Annals of Nuclear Energy*, 101 :128–138, 2017.
- [52] Bruno Chanaron, Carol Ahnert, et al. Advanced multi-physics simulation for reactor safety in the framework of the NURESAFE project. *Annals of Nuclear Energy*, 84 :166–177, 2015.
- [53] Tomasz Kozłowski and Thomas J Downar. PWR MOX/UO₂ Core Transient Benchmark Final Report. *Nuclear Energy Agency, Organization for Economic Co-operation and Development, US Nuclear Regulatory Commission*, 2007.
- [54] B.L Sjenitzer, Hoogenboom, et al. Coupling of dynamix Monte Carlo with thermal-hydraulic feedback. *Annals of Nuclear Energy*, 79 :27–39, 2014.
- [55] Bart L Sjenitzer, J Eduard Hoogenboom, et al. Coupling of dynamic Monte Carlo with thermal-hydraulic feedback. *Annals of Nuclear Energy*, 76 :27–39, 2015.

- [56] U Imke, V Sanchez, et al. SUBCHANFLOW. a new empirical knowledge based subchannel code. In *Annual meeting on nuclear technology 2010. Documentation*, 2010.
- [57] Ulrich Rohde, Kliem, et al. The reactor dynamics code DYN3D—models, validation and applications. *Progress in Nuclear Energy*, 89 :170–190, 2016.
- [58] Philippe Fillion, Augustin Chanoine, et al. FLICA-OVAP : a new platform for core thermal–hydraulic studies. *Nuclear Engineering and Design*, 241(11) :4348–4358, 2011.
- [59] S Douce, F Damian, JC Le Pallec, and C Poinot-Salanon. Improvement of the conversion ratio in PWR-core performances and preliminary study of a reactivity initiated accident. *Proceedings Int. Conf. PHYSOR*, 2010.
- [60] Kostadin Ivanov and Maria Avramova. Challenges in coupled thermal–hydraulics and neutronics simulations for lwr safety analysis. *Annals of Nuclear Energy*, 34(6) :501–513, 2007.
- [61] S. Kleim, S. Mittag, et al. D3.1.2.2 definition of a PWR boron dilution benchmark, Nuclear Reactor Integrated Simulation Project. 2011.
- [62] Han-Sem Joo. *Resolution of the control rod cusping problem for nodal methods*. PhD thesis, Massachusetts Institute of Technology, 1984.
- [63] Aldo Dall’Osso. Reducing rod cusping effect in nodal expansion method calculations. In *Proceedings of the International Conference on the New Frontiers of Nuclear Technology : Reactor Physics, Safety and High-Performance Computing, PHYSOR*, 2002.
- [64] O Méplan, J Hajnrych, et al. MURE 2 : SMURE, Serpent-MCNP Utility for Reactor Evolution. URL : <http://lpsc.in2p3.fr/MURE/html/SMURE/UserGuide/UserGuide.html>, page 26, 2017.
- [65] Alice Somaini. *Analyse des erreurs induites par une modélisation simplifiée sur l’évolution des combustibles REP. Impact des fuites neutroniques dans les calculs cellules*. PhD thesis, Université Paris-Saclay, 2017.
- [66] Grzegorz Kepisty, Jerzy Cetnar, et al. Parametric studies of the PWR fuel assembly modeling with monte-carlo method. *Annals of Nuclear Energy*, 94 :189–207, 2016.
- [67] P Prévot, A Nuttin, et al. Preliminary design studies by a complete academic simulation toolbox of a water-cooled thorium-fueled small modular reactor core. In *International Conference proceedings of GLOBAL*, pages EA–185, Seoul, Korea, 2017.
- [68] A Nuttin, N Capellan, et al. Facing challenges for monte carlo analysis of full PWR cores : Towards optimal detail level for coupled neutronics and proper diffusion data for nodal kinetics. In *SNA+ MC 2013-Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications+ Monte Carlo*, page 02202. EDP Sciences, 2014.
- [69] Eric Dumonteil, Fausto Malvagi, et al. Particle clustering in Monte Carlo criticality simulations. *Annals of Nuclear Energy*, 63 :612–618, 2014.
- [70] Andrea Zoia, Eric Dumonteil, et al. Clustering of branching Brownian motions in confined geometries. *Physical Review E*, 90(4) :042118, 2014.
- [71] Julie Brizi. *Cycles uranium et thorium en réacteurs à neutrons rapides refroidis au sodium. Aspects neutroniques et déchets associés*. PhD thesis, Université Orsay-Paris, 2010.
- [72] Baptiste Leniau. *Caractérisation des sources radioactives du cycle du combustible. Applications au cycle du thorium. Synthèse de l’²³²U en combustibles solides*. PhD thesis, Université Paris Sud, 2013.
- [73] Vitaly Sobolev and Sergei Lemehov. Modelling heat capacity, thermal expansion, and thermal conductivity of dioxide components of inert matrix fuel. *Journal of nuclear materials*, 352(1-3) :300–308, 2006.

- [74] Marc Ernoult. *Gestion avancée du plutonium en REP. Complémentarité des cycles thorium et uranium*. PhD thesis, Université Paris Sud, 2014.
- [75] Framatom. Réacteur convertibile à variation de spectre, rapport de faisabilité du concept. *Tech. Rep.*, NMD-DM0123 :AREVA NP, 1998.
- [76] V. Uotinen, J. Sapyta, et al. Reevaluation of the spectral shift control reactor. *Transactions of the American Nuclear Society*, 27 :429–430, 1977.
- [77] J. Clayton. The shippingport pressurized water reactor and light water breeder reactor. *25th central regional meeting American chemical society*, WAPD-T-3007, 1999.
- [78] P.R. Kasten. Review of the Radkowsky Thorium Reactor Concept. *Nuclear Science and Engineering*, 102 :341–394, 1998.
- [79] Yigal Ronen. *High Converting Water Reactors*. CRC Press, Inc., 2000 Corporate Blvd., N.w., Boca Raton, Florida, 33431, 1990.
- [80] M. Delpech. Enhancing the uranium utilization rate in LWRs : a step toward a sustainable nuclear energy. *Int. Conf. ICAPP'09*, pages 341–394, 2009.
- [81] H. Golfier. Advanced High Conversion PWR : preliminary analysis. *Proceedings of ICAPP*, 7389, 2007.
- [82] T Viitanen. *Implementing a Doppler-preprocessor of cross section libraries in reactor physics code Serpent*. PhD thesis, M. Sc. Thesis, Helsinki University of Technology, 2009.
- [83] Nurjuanis Zara Zainuddin, Geoffrey T Parks, et al. The factors affecting MTC of thorium–plutonium-fuelled PWRs. *Annals of Nuclear Energy*, 98 :132–143, 2016.
- [84] Soon Young Kim and Jong Kyung Kim. A reactivity hold-down strategy for soluble boron free operation by introducing pu-238 added fuel. *Annals of Nuclear Energy*, 27(10) :855–871, 2000.
- [85] Nicholas R Brown, Andrew Worrall, et al. Impact of thermal spectrum Small Modular Reactors on performance of once-through nuclear fuel cycles with low-enriched uranium. *Annals of Nuclear Energy*, 101 :166–173, 2017.
- [86] Jong-Chae Kim, Myung-Hyun Kim, et al. Nuclear design feasibility of the soluble boron free PWR core. *Nuclear Engineering and Technology*, 30(4) :342–352, 1998.
- [87] Bruna Martin Cabanas. *Comportement des produits de corrosion dans le circuit primaire des centrales REP-absorption du cobalt et du nickel sur des ferrites représentatifs*. PhD thesis, Université Paris Sud-Paris XI, 2010.
- [88] DSU RAPPORT. Restitution des travaux du groupe de réflexion «défense en profondeur tritium». sources de production et gestion du tritium produit par les installations.
- [89] Marielle Asou. *Etude des terres rares en tant que poison consommable pour le contrôle des cycles allongés pour les réacteurs électrogènes*. PhD thesis, Paris 11, 1995.
- [90] Pieck Dario. *Optimisation de l'utilisation du gadolinium comme poison consommable dans le combustible nucléaire : Vers un REP sans bore*. PhD thesis, Aix-Marseille Université, 2013.
- [91] Angela Baena, Thomas Cardinaels, et al. Synthesis of UO₂ and ThO₂ doped with Gd₂O₃. *Journal of Nuclear Materials*, 461 :271–281, 2015.
- [92] Syed Bahauddin Alam, Benjamin A Lindley, et al. Feasibility study of the design of homogeneously mixed thorium-uranium oxide and all-uranium fueled reactor cores for civil nuclear marine propulsion. 2015.
- [93] Benjamin A Lindley, Ali Ahmad, et al. Steady-state and transient core feasibility analysis for a thorium-fuelled reduced-moderation PWR performing full transuranic recycle. *Annals of Nuclear Energy*, 72 :320–337, 2014.

- [94] Evans D Kitcher and Sunil S Chirayath. Neutronics and thermal hydraulics analysis of a Small Modular Reactor. *Annals of Nuclear Energy*, 97 :232–245, 2016.
- [95] MB Chadwick, P Obložinský, et al. ENDF/B-VII.0 : next generation evaluated nuclear data library for nuclear science and technology. *Nuclear data sheets*, 107(12) :2931–3060, 2006.
- [96] P. Monoravi et al. Quasi-non-destructive isotopic ratio measurement of boron in irradiated coontrol rod B4C pellets using a home-built reflectron time-of-flight mass spectrometer. *International Journal of Mass Spectrometry*, 309 :148–153, 2012.
- [97] Bruno Tarride. *Physique, fonctionnement et sûreté des REP. Maîtrise des situations accidentelles du systèmes réacteur*. EDP Sciences, 2013.
- [98] Benoit Forget, Kord Smith, et al. Integral Full Core Multi-Physics PWR Benchmark with Measured Data.
- [99] Collectif. *Les Déchets Nucléaires, un dossier scientifique*. Les Éditions de Physique, 1997.
- [100] SL Morrison, BA Lindley, et al. The effect of plutonium quality on thorium-plutonium mixed oxide fuel in light water reactors. In *International Congress on Advances in Nuclear Power Plants, ICAPP 2016*, volume 3, pages 1697–1706, 2016.
- [101] J. H. Holland. *Adaptation in natural and artificial systems*. University of Michigan Press, 1975.
- [102] Mathieu Muniglia. *Optimisation du pilotage d'un Réacteur à Eau Pressurisée dans le cadre de la transition énergétique à l'aide d'algorithmes évolutionnaires*. PhD thesis, Université Paris-Saclay, 2017.
- [103] Emil Fridman and Sören Kliem. Pu recycling in a full Th-MOX PWR core. Part I : Steady state analysis. *Nuclear engineering and design*, 241(1) :193–202, 2011.
- [104] Syeileendra Pramuditya, Minoru Takahashi, et al. Core design study for power uprating of integral primary system PWR. *Annals of Nuclear Energy*, 59 :16–24, 2013.
- [105] N. Terranova et al. Adjoint neutron flux calculations with TRIPOLI-4 : Verification and comparison to deterministic codes. *Annals of Nuclear Energy*, 114 :136–148, 2017.
- [106] I Lux and L Koblinger. Monte carlo particle transport methods : Neutron and photon calculations. 1991.
- [107] A. Gensler, K. Kühnel, et al. PWR core safety analysis with 3-dimensional methods. *Annals of Nuclear Energy*, 84 :131–139, 2015.
- [108] Dan Kotlyar, Geoffrey T. Parks, et al. Thorium-based plutonium incineration in the I^2S -LWR. *Annals of Nuclear Energy*, 100 :68–75, 2017.
- [109] Lucas .P Tucker, A. Alajo, et al. Thorium-based mixed oxide fuel in a pressurized water reactor : A burnup analysis with MCNP. *Annals of Nuclear Energy*, 111 :163–175, 2018.
- [110] Chantal Guertin. *Analyse de stabilite numerique des schemas couples de neutronique et de thermohydraulique et nouveau modele de contre-reactions neutroniques*. PhD thesis, Paris 11, 1995.
- [111] Lucas .P Tucker, A. Alajo, et al. Thorium-based mixed oxide fuel in a pressurized water reactor : A beginning of life feasibility analysis with MCNP. *Annals of Nuclear Energy*, 76 :323–334, 2015.
- [112] E. Fridman and S. Kliem. Pu recycling in a full Th-MOX PWR core. Part I : Steady state analysis. *Nuclear Engineering and Design*, 241 :193–202, 2011.
- [113] A. Abarea, P. Hidalgo, et al. Verification of CTF/PARCSv3.2 coupled in a turbine trip scenario. *Proceedings of ICAPP*, april 2017.

- [114] Clive AJ Fletcher. *Computational techniques for fluid dynamics 2 : Specific techniques for different flow categories*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [115] Matteo Gamarino, Aldo Dall’Osso, et al. A neutron-leakage spectrum model for on-the-fly rehomogenization of nodal cross sections. *Annals of Nuclear Energy*, 116 :257–279, 2018.
- [116] N Martin and A Hébert. Adaptation of the B1 leakage model to Monte Carlo criticality calculations. In *International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering*, Rio de Janeiro, Brazil, 2011.
- [117] Miriam Daeubler, Aleksandar Ivanov, et al. High-fidelity coupled monte carlo neutron transport and thermal-hydraulic simulations using serpent 2/SUBCHANFLOW. *Annals of Nuclear Energy*, 83 :352–375, 2015.
- [118] Nicolas Sator and Nicolas Pavloff. *Physique statistique : cours et exercices corrigés : licence 3 & master, sciences de la matière, écoles d’ingénieurs*. Vuibert, 2016.
- [119] Juan J Carbajo, Gradyon L Yoder, et al. A review of the thermophysical properties of MOX and UO₂ fuels. *Journal of Nuclear Materials*, 299(3) :181–198, 2001.
- [120] D Baldova, E Fridman, et al. High conversion Th-U233 fuel for current generation of PWRs : Part I–Assembly level analysis. *Annals of Nuclear Energy*, 73 :552–559, 2014.

Résumé

Les réacteurs de 4ème génération ont pour objectif l'avènement d'un nucléaire durable susceptible de soutenir la transition énergétique. Anticipant un possible retard, dû à des difficultés techniques et économiques, des solutions innovantes inspirées des technologies actuelles (REP) sont à l'étude. Ces réacteurs à haute conversion nécessitent le développement d'outils académiques simples et robustes adaptés aux phases de la conception et capables :

- D'évaluer les performances du combustible (burnup). Cet aspect est géré par l'environnement C++ SMURE (Serpent/MCNP Utility for Reactor Evolution), ici adapté et complété pour modéliser l'évolution du combustible à l'échelle de l'assemblage comme à l'échelle du cœur.
- D'évaluer les performances de sûreté, ce qui nécessite le couplage entre la neutronique, ici approchée par la théorie de la diffusion et résolue par la NDM (Nodal Drift Method), et la thermohydraulique dont le traitement est simplifié dans le code BATH (Basic Approach to ThermalHydraulics). Le couplage NDM/BATH a fait l'objet d'une validation sur un benchmark d'éjection de grappe.

Nos outils et méthodes de conception sont appliqués au dimensionnement de SMR sous-modérés à eau légère fonctionnant soit au Th/U soit au Th/Pu. Outre les critères usuels de conception (i.e. facteur de forme), il s'est avéré nécessaire, pour la crédibilité du concept, de spécifier la gestion de la réactivité, ce qui a mené au développement d'une méthodologie d'optimisation des poisons consommables. L'analyse de sûreté a permis de poser de nouveaux critères de conception, notamment sur le niveau maximal de sous-modération permettant d'éviter la crise d'ébullition nucléée. Cela a également mis en lumière les implications sur la sûreté de certains choix de conception comme le fonctionnement avec un inventaire réduit en bore soluble.

Mots clés : Couplage neutronique/thermohydraulique, RELHFC, SMR, Th/U, ThPu, Poisons consommables, REA, NDM/BATH

Abstract

The Generation IV of nuclear reactors aims at making the nuclear energy a sustainable power source, able to contribute efficiently to the energetic transition. To anticipate the delay of this Gen. IV, innovative retro-fitted nuclear reactors with high level of conversion are studied. The conception of such reactors needs the development of a flexible and robust academical tool box in order to :

- Evaluate fuel performance. This is done by means of SMURE (Serpent/MCNP Utility for Reactor Evolution), the dedicated CNRS C++ framework, which is adapted to perform burnup calculation both at assembly scale and at core scale.
- Evaluate safety performance. This implies coupled transient simulation between neutronics and thermohydraulics. Neutronics is handled by the Nodal Drift Method (NDM) which solves the diffusion equations while thermohydraulics is simplified and computed by the code Basic Approach to ThermalHydraulics (BATH). This coupling between NDM/BATH has been validated on a Rod Ejection Accident (REA) benchmark.

Ours tools and methods are applied on the design of sub-moderated water-cooled SMR cores using either Th/U or Th/Pu fuel. In addition to basic conception criteria such as the form factor, the reactivity management has been investigated in details, which has led to the development of a new methodology for optimal used of burnable poisons. The safety analysis against REA highlights new conceptions limits, in particular on the maximal sub-moderating ratio in order to avoid nucleate boiling. It also reveals the consequences on the reactor safety of some design choices such as low soluble boron inventory.

Keywords : neutronic/thermohydraulic coupling, HCWR, SMR, Th/U, ThPu, burnable poisons, REA, NDM/BATH