

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL

affiliée à l'Université de Montréal

**Mise en œuvre d'un calcul du cœur BEAVRS en transport 3D cellule par
cellule avec le code déterministe APOLLO3**

KÉVIN FRÖHLICHER

Département de génie physique

Mémoire présenté en vue de l'obtention du diplôme de *Maîtrise ès sciences appliquées*
Génie énergétique

Juin 2019

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL

affiliée à l'Université de Montréal

Ce mémoire intitulé :

**Mise en œuvre d'un calcul du cœur BEAVRS en transport 3D cellule par
cellule avec le code déterministe APOLLO3**

présenté par **Kévin FRÖHLICHER**

en vue de l'obtention du diplôme de *Maîtrise ès sciences appliquées*
a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de :

Guy MARLEAU, président

Alain HÉBERT, membre et directeur de recherche

Jean-François VIDAL, membre et codirecteur de recherche

Richard CHAMBON, membre externe

DÉDICACE

À mes parents.

REMERCIEMENTS

Je souhaite tout d'abord remercier mon directeur de recherche, Alain Hébert, pour avoir accepté d'encadrer ma maîtrise, ainsi que mon codirecteur, Jean-François Vidal, avec qui j'ai eu l'occasion de travailler pendant six mois au sein du LEPH. Ce fût un plaisir de travailler avec eux. Leur encadrement m'a permis de progresser énormément dans le domaine du calcul neutronique.

Je remercie Guy Marleau et Richard Chambon, pour avoir accepté de faire partie de mon jury.

Merci également aux étudiants avec qui j'ai passé de bons moments, que ce soit au CEA ou à l'EPM. La liste est longue, mais je voudrais remercier particulièrement Martin, pour nos vacances et nos fréquents échanges sur nos sujets respectifs. Vivian, qui m'a beaucoup aidé dans la compréhension de nombreux aspects de la modélisation d'un réacteur, et a su me prodiguer de précieux conseils. Bastien, pour sa bonne humeur et ses explications lors de mon passage au CEA. Merci aussi à Guillaume pour les fous rires, Atyab pour son aide en anglais, Giorgio pour ses conseils culinaires, Martin F. pour ses blagues, Jordan et Axel avec qui j'ai partagé un bureau, et tous les autres qui ne sont pas explicitement cités ici.

Je tiens ensuite à remercier les personnes du LEPH avec qui j'ai travaillé pendant mon stage, tout particulièrement Pascal Archier et Laurent Buiron, pour leur patience et leur aide inestimable pour la prise en main d'APOLLO3. Merci aussi à Cyrille De Saint Jean, pour m'avoir accueilli au sein du LEPH, et m'avoir encouragé à poursuivre vers une thèse de doctorat.

Mes remerciements vont aussi à Lydie Giot, enseignante-chercheuse dans le laboratoire Subatech de l'IMT-Atlantique, qui a su m'aiguiller dans mon choix de parcours, et sans qui je n'aurais jamais fait cette maîtrise.

Enfin, je remercie très sincèrement mes parents, qui m'ont soutenu tout au long de mes études. Tout cela n'aurait jamais été possible sans leur aide.

RÉSUMÉ

En physique des réacteurs nucléaires, on effectue généralement les calculs neutroniques en deux étapes. Premièrement, un calcul à l'échelle dite *réseau* est effectué sur un motif d'assemblage de combustible (souvent tronqué suivant ses symétries) en réseau infini. Les sections efficaces macroscopiques issues de ce calcul sont alors utilisées pour caractériser les propriétés des matériaux définis lors de la deuxième étape de calcul : le calcul *cœur*. Ce dernier étant effectué sur une géométrie 3D finie.

Historiquement, le calcul réseau est effectué en théorie du transport et le calcul cœur en théorie de la diffusion. Les avancées technologiques concernant la puissance de calcul des ordinateurs permettent désormais de considérer le calcul cœur en théorie du transport. Dans le cadre du développement de sa nouvelle plateforme de calcul déterministe APOLLO3, le Commissariat à l'Énergie Atomique et aux énergies alternatives (CEA) effectue la validation des performances du code à travers l'élaboration de nouveaux schémas de calcul appliqués aux RNR-Na et REL. Le calcul 3D par la méthode des ordonnées discrètes mis en place lors de ce projet est appliqué au benchmark BEAVRS publié par le MIT en 2013.

Ce mémoire a pour but de présenter les travaux de validation effectués en configuration «Hot Zero Power» (HZP). Concernant les options retenues pour le calcul réseau, le maillage énergétique REL383 (383 groupes en énergie) est choisi, pour une utilisation de la méthode des sous-groupes d'ECCO pour l'autoprotection des résonances. Un calcul en transport à 20 groupes en énergie a été effectué pour le calcul du cœur complet.

Concernant la validation des calculs réseau, l'utilisation de la méthode de Tone pour l'autoprotection des résonances dans le domaine énergétique rapide permet une diminution du coût de calcul sans changement notable des taux de capture et de fission. L'autoprotection en mélange de certains isotopes (^{235}U et ^{238}U , ^{107}Ag et ^{109}Ag) permet une meilleure modélisation des taux de capture de ces isotopes.

Ce mémoire présente la validation à temps initial en configuration Hot Zero Power (HZP) du schéma de calcul (ensemble des solveurs, options de calcul et modélisations du système étudié). La validation a été établie à l'échelle réseau à l'aide de comparaisons avec les résultats issus de calculs de type Monte-Carlo produits avec le code de calcul stochastique TRIPOLI4 aussi développé au CEA. Les résultats du calcul cœur quant à eux sont directement comparés aux données expérimentales fournies dans BEAVRS. Un maximum de 5% d'écart sur les cartes radiales de réponses des détecteurs entre les calculs et les spécifications de BEAVRS est observé.

ABSTRACT

The nuclear reactor physics package code APOLLO3 is presently being developed by the *Commissariat à l'Énergie Atomique et aux énergies alternatives* (CEA) in France. Its aim is to replace current tools used in the neutronic studies of thermal and fast neutrons reactors. With the increase in computational power in recent years, deterministic methods that used to be too costly for traditional reactor simulations can now be investigated. The Physical Studies Laboratory (*Laboratoire d'Études de Physique – LEPh*) participates in the validation and certification project of APOLLO3 by testing the code capabilities and developing new calculation sequence.

This thesis focuses on a new reference calculation sequence for Pressurized Water Reactors (PWR). Said sequence is based on the long-established two-level type of calculation. First, at the lattice scale, we use the REL383 energy mesh and the Method Of Characteristics (MOC) to compute the flux. Then, the core modeling is carried out using a discrete-ordinate solver with twenty energy groups. The purpose of using a transport equation solver for the core step (instead of the traditional diffusion equation solver) is to validate the whole sequence of APOLLO3's capacity to operate a fine flux calculation on the whole reactor. In order to verify the accuracy of the results, a Monte Carlo code, TRIPOLI4, is used as the reference. We also wanted to compare the performance of APOLLO3 to an experimental case, which is why the whole sequence is applied to the BEAVRS benchmark published by MIT in 2013. This benchmark offers sets of detector data and physical test results for two complete cycles, including the first cycle of operation, for an industrial PWR. We limit our investigation to Hot Zero Power (HZP) fresh fuel configurations.

Different self-shielding configurations are first compared. The main self-shielding step is eventually implemented with the subgroup method from the ECCO code and shows good accuracy with respect to Monte Carlo results. Then it is shown that using the Tone method in the high energy domain allows for a speed gain of up to 40% of the global calculation time on the lattice level – while retaining similar results. Finally, a simulation of a quarter core leads to a maximum discrepancy of 5% on the radial map of detector responses provided in the BEAVRS specifications.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE	iii
REMERCIEMENTS	iv
RÉSUMÉ	v
ABSTRACT	vi
TABLE DES MATIÈRES	vii
LISTE DES TABLEAUX	x
LISTE DES FIGURES	xi
LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS	xiv
CHAPITRE 1 INTRODUCTION	1
1.1 Contexte	1
1.2 Schéma de calcul	2
1.3 Objectifs	2
1.4 Plan du mémoire	3
CHAPITRE 2 ASPECTS THÉORIQUES	4
2.1 Données nucléaires	4
2.2 Équation de Boltzmann	4
2.2.1 Espace des phases	4
2.2.2 Flux neutronique	5
2.2.3 Section efficace et taux de réaction	5
2.2.4 Forme différentielle de l'équation de transport	6
2.2.5 Forme caractéristique de l'équation de transport	6
2.2.6 Forme intégrale de l'équation de transport	7
2.2.7 Terme de source de neutrons	7
2.2.8 Approche multigroupe	9
2.3 Méthodes de résolution de l'équation de transport	10
2.3.1 Méthode des probabilités de première collision	11
2.3.2 Méthode des ordonnées discrètes	14

2.3.3	Méthode des caractéristiques	17
2.4	Calcul réseau	20
2.4.1	Maillage spatial	20
2.4.2	Utilisation des tables de probabilité	21
2.4.3	Autoprotection des résonances	23
2.4.4	Modèles de fuites	27
2.4.5	Homogénéisation et condensation	29
2.5	Calcul de cœur	30
2.6	Approche stochastique	31
CHAPITRE 3 CONFIGURATION DU CALCUL		33
3.1	BEAVRS	33
3.2	Schéma de calcul	34
CHAPITRE 4 VALIDATION DU CALCUL RÉSEAU À TEMPS 0		39
4.1	Utilisation de la méthode des sous-groupes en mélange	40
4.1.1	Assemblages UOx sans absorbant	40
4.1.2	Assemblages AIC et B4C	47
4.1.3	Assemblages avec poisons absorbants (BA)	56
4.2	Accélération par la méthode de Tone	61
4.2.1	Impact sur le k_{∞}	62
4.2.2	Impact sur le calcul du flux et des taux de réaction	64
4.3	Effet des grilles de support	68
4.4	Conclusions du calcul réseau	75
CHAPITRE 5 MISE EN PLACE DU CALCUL DE CŒUR		77
5.1	Options du calcul de cœur	77
5.1.1	Modèle de fuite, homogénéisation et condensation lors de l'étape réseau	77
5.1.2	Modélisation du réflecteur	77
5.1.3	Options du solveur cœur	78
5.2	Comparaison au benchmark : méthode et résultats	79
CHAPITRE 6 CONCLUSION		84
6.1	Synthèse des travaux	84
6.1.1	Schéma réseau	84
6.1.2	Schéma cœur	84
6.1.3	Jeux de données	85

6.2	Limitations de la solution proposée	85
6.3	Perspectives	86
	RÉFÉRENCES	88

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 4.1	Écart absolu (en pcm) APOLLO3-TRIPOLI4 du k_∞ pour des assemblages sans barreau absorbant	41
Tableau 4.2	Maillage à 13 groupes pour la validation de l'autoprotection	42
Tableau 4.3	Écart sur le taux de capture pour des assemblages 0BA	42
Tableau 4.4	Écart sur le taux de capture de l'uranium pour des assemblages 0BA en pcm	43
Tableau 4.5	Écart absolu (en pcm) APOLLO3-TRIPOLI4 du k_∞ pour des assemblages barrés	48
Tableau 4.6	Écart sur le taux de capture pour des assemblages AIC et B4C	49
Tableau 4.7	Écart sur le taux de capture de l'uranium pour des assemblages AIC et B4C en pcm	49
Tableau 4.8	Écart sur le taux de capture de l'argent, de l'indium et du cadmium pour des assemblages AIC en pcm	50
Tableau 4.9	Efficacité des barres de contrôle pour différents assemblages absorbants	58
Tableau 4.10	Écart absolu (en pcm) APOLLO3-TRIPOLI4 du k_∞ pour des assemblages présentant des poisons de type pyrex	58
Tableau 4.11	Écart sur le taux de capture pour des assemblages avec poisons absorbants de type pyrex (BA)	59
Tableau 4.12	Écart sur le taux de capture de l'uranium pour des assemblages BA	59
Tableau 4.13	Temps de calcul global pour différents assemblages	61
Tableau 4.14	Écart absolu (en pcm) APOLLO3-TRIPOLI4 du k_∞ avec utilisation de la méthode des sous-groupes et de la méthode de Tone	63
Tableau 4.15	Écart absolu (en pcm) APOLLO3-TRIPOLI4 du k_∞ pour les différentes configurations des grilles de support (cas SG + Tone)	68
Tableau 4.16	Écart absolu (en pcm) APOLLO3-TRIPOLI4 du taux de capture total pour les différentes configurations des grilles de support (cas SG + Tone)	69

LISTE DES FIGURES

Figure 2.1	Algorithme de résolution de l'équation de transport multigroupe . . .	12
Figure 2.2	Représentation de quadratures S_6 <i>level-symmetric</i> et produit	16
Figure 2.3	Découpage en triangles du solveur MINARET	17
Figure 2.4	Cellule de combustible raffinée	21
Figure 2.5	Huitième d'assemblage raffiné	21
Figure 2.6	Représentation d'une section efficace et de sa densité de probabilité associée	23
Figure 2.7	Algorithme d'itération entre le calcul de flux principal et l'autoprotection des résonances avec la méthode des sous-groupes d'ECCO	25
Figure 2.8	Découpe d'une traverse de réflecteur avec six cellules de combustible .	31
Figure 3.1	Position des absorbants (BA) dans le cœur (cycle 1)	34
Figure 3.2	Géométrie d'autoprotection d'un huitième d'assemblage configuration 0BA	35
Figure 3.3	Géométrie d'autoprotection d'un demi-assemblage configuration 6BA	35
Figure 3.4	Géométrie d'autoprotection d'un demi-assemblage configuration 15BA	36
Figure 3.5	Géométrie d'assemblage 12BA pour le calcul avec TRIPOLI4	36
Figure 3.6	Représentation des grilles de maintien des assemblages dans BEAVRS	37
Figure 3.7	Géométrie d'autoprotection d'un huitième d'assemblage configuration 0BA avec grilles en zircaloy4	37
Figure 3.8	Homogénéisation d'un huitième d'assemblage	38
Figure 4.1	Deux premières résonances de l' ^{238}U (groupes 8 à 10)	43
Figure 4.2	Troisième résonance de l' ^{238}U (groupes 7)	44
Figure 4.3	Écarts pour le taux de capture de l'uranium par groupe en énergie pour un assemblage 0BA et un enrichissement de 3,1 %	45
Figure 4.4	Écarts relatifs (%) sur le taux de capture à deux groupes par cellule pour un assemblage 0BA et un enrichissement de 3,1 % (cas SG + mélange)	46
Figure 4.5	Écarts relatifs (%) sur le taux de fission total par cellule pour un assemblage 0BA et un enrichissement de 3,1 % (cas SG + mélange) . .	46
Figure 4.6	Écarts relatifs (%) sur le flux à deux groupes par cellule pour un assemblage 0BA et un enrichissement de 3,1 % (cas SG + mélange) . .	47
Figure 4.7	Flux thermique issu de calculs avec TRIPOLI4 pour différents assemblages (enrichissement de 3,1%)	48

Figure 4.8	Écart pour le taux de capture de l'uranium par groupe en énergie pour un assemblage AIC et un enrichissement de 3,1 %	51
Figure 4.9	Écart pour le taux de capture de l'argent par groupe en énergie pour un assemblage AIC et un enrichissement de 3,1 %	52
Figure 4.10	Recouvrement des résonances de l' ^{107}Ag et de l' ^{109}Ag dans le groupe 5 (76,2 eV - 752 eV)	53
Figure 4.11	Écart pour le taux de capture de l' ^{115}In par groupe en énergie pour un assemblage AIC et un enrichissement de 3,1 %	53
Figure 4.12	Résonances de l' ^{115}In dans le groupe 9 (7,6 eV - 19,08 eV)	54
Figure 4.13	Écart relatif (%) sur le taux de capture à deux groupes par cellule pour des assemblages AIC et B4C, pour un enrichissement de 3,1 % (cas SG + mélange)	55
Figure 4.14	Écart relatif (%) sur le taux de fission total par cellule pour des assemblages AIC et B4C, pour un enrichissement de 3,1 % (cas SG + mélange)	56
Figure 4.15	Écart relatif (%) sur le flux à deux groupes par cellule pour des assemblages AIC et B4C, pour un enrichissement de 3,1 % (cas SG + mélange)	57
Figure 4.16	Flux thermique issu de calculs avec TRIPOLI4 pour différents assemblages avec pyrex (enrichissement de 3,1%)	58
Figure 4.17	Écart pour le taux de capture de l' ^{238}U par groupe en énergie pour des assemblages 15BA et 16BA, et un enrichissement de 3,1 %	60
Figure 4.18	Écart relatif (%) sur le taux de capture et le flux à deux groupes par cellule pour un assemblage 16BA et un enrichissement de 3,1 % (cas SG + mélange)	62
Figure 4.19	Écart relatif (%) sur le taux de fission total par cellule pour un assemblage 16BA et un enrichissement de 3,1 % (cas SG + mélange)	63
Figure 4.20	Écart pour le taux de capture de l' ^{238}U par groupe en énergie pour des assemblages 0BA et AIC, pour un enrichissement de 3,1 %	65
Figure 4.21	Écart relatif (%) sur le taux de capture et le flux rapide par cellule pour des assemblages 0BA et AIC, pour un enrichissement de 3,1 % (cas SG + Tone)	66
Figure 4.22	Écart relatif (%) sur le taux de capture et le flux thermique par cellule pour des assemblages 0BA et AIC, pour un enrichissement de 3,1 % (cas SG + Tone)	67

Figure 4.23	Écarts pour le taux de capture de l' ^{238}U par groupe en énergie pour un assemblage 0BA avec un enrichissement de 3,1 %, pour différentes configurations de grilles	69
Figure 4.24	Écarts relatifs (%) sur le flux rapide par cellule pour des assemblages 0BA avec un enrichissement de 3,1 %, pour différentes configurations de grilles (cas SG + Tone)	70
Figure 4.25	Écarts relatifs (%) sur le flux thermique par cellule pour des assemblages 0BA avec un enrichissement de 3,1 %, pour différentes configurations de grilles (cas SG + Tone)	71
Figure 4.26	Écarts relatifs (%) sur le taux de capture rapide par cellule pour des assemblages 0BA avec un enrichissement de 3,1 %, pour différentes configurations de grilles (cas SG + Tone)	72
Figure 4.27	Écarts relatifs (%) sur le taux de capture thermique par cellule pour des assemblages 0BA avec un enrichissement de 3,1 %, pour différentes configurations de grilles (cas SG + Tone)	73
Figure 4.28	Écarts relatifs (%) sur le taux de fission par cellule pour des assemblages 0BA avec un enrichissement de 3,1 %, pour différentes configurations de grilles (cas SG + Tone)	74
Figure 5.1	Schéma des traverses une dimension pour le calcul des réflecteurs axiaux	78
Figure 5.2	Traverses des réflecteurs radiaux pour le calcul de flux avec APOLLO3	79
Figure 5.3	Taille maximale d'une maille radiale en fonction de la position le long de l'axe x (en $y = 0$)	80
Figure 5.4	Maillage MINARET	80
Figure 5.5	Écarts relatifs entre le taux de fission calculé avec APOLLO3 dans les tubes d'instrumentations (normalisé) et les réponses des détecteurs fournies dans BEAVRS (normalisées)	82
Figure 5.6	Écarts relatifs entre le taux de fission calculé avec APOLLO3 dans les tubes d'instrumentations (normalisé et ramené dans un quart du cœur grâce aux symétries) et les réponses des détecteurs fournies dans BEAVRS (normalisées) avec prise en compte de la correction de la bascule initiale	83

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

BEAVRS	Benchmark for Evaluation And Validation of Reactor Simulations
REP	Réacteur à Eau sous Pression
PWR	Pressurized Water Reactor (<i>REP</i> en français)
RNR	Réacteur à Neutrons Rapides
REL	Réacteur à Eau Légère
PIJ	Méthode des Probabilités de Collision
MOC	Method Of Characteristics
CEA	Commissariat à l'Énergie Atomique et aux énergies alternatives
P1	Développement en polynômes de Legendre à l'ordre 1
P3	Développement en polynômes de Legendre à l'ordre 3
UOx	Oxyde d'Uranium
ASTRID	Advanced Sodium Technological Reactor for Industrial Demonstration
JEFF	Joint Evaluated Fission and Fusion file
HZP	Hot Zero Power
pcm	Pour Cent Mille (10^{-5})
SPRC	Service de Physique des Réacteurs et du Cycle
LEPh	Laboratoire d'Études de Physique
SERMA	Service d'Études de Réacteurs et de Mathématiques Appliquées
MIT	Massachusetts Institute of Technology
SHEM	Santamarina-Hfaiedh Energy Mesh

CHAPITRE 1 INTRODUCTION

Depuis la deuxième moitié du XX^e siècle, l'industrie électronucléaire s'est développée dans différents pays. Divers concepts de réacteurs électrogènes ont ainsi vu le jour, parmi lesquels les Réacteurs à Eau sous Pression (REP) et les Réacteurs à Neutrons Rapides refroidis au Sodium (RNR-Na). L'étude du fonctionnement des réacteurs rassemble de multiples compétences issues de différents domaines de la physique (thermohydraulique, thermomécanique, physique nucléaire, neutronique ...). Dans le cadre de ce mémoire, on s'intéressera uniquement à l'aspect neutronique de l'étude des réacteurs. Lors des études de neutronique, on s'intéresse au comportement de la population de neutrons évoluant au sein du réacteur, représentée par le flux neutronique. En effet, l'énergie récupérée au sein du cœur du réacteur est sous la forme thermique et provient de la fission de noyaux lourds provoquée par les neutrons. Pour un REP, on parle de filière thermique, car les neutrons rapides issus de la fission sont ralentis à des vitesses proches de celles dues à l'agitation thermique des noyaux du milieu avant de produire des fissions sur les noyaux fissiles constituant le combustible. Dans le cas des RNR, on parle de filière rapide, car les neutrons sont peu ralentis.

1.1 Contexte

L'évolution des exigences en matière de sûreté nucléaire et l'étude des réacteurs de génération III et IV nécessitent le développement de nouveaux outils de modélisation, rendu possible par l'augmentation de la puissance des calculateurs. Dans l'objectif d'unifier les codes déterministes utilisés pour l'étude neutronique des réacteurs le SERMA et le SPRC participent au développement et à la validation de la nouvelle plateforme de calcul multifilière APOLLO3 [1] depuis le début des années 2010. APOLLO3 est voué à remplacer les outils préexistants pour l'étude des réacteurs thermiques (APOLLO2/CRONOS2) et des réacteurs rapides (ECCO/ERANOS).

Les étapes de validation et qualification consistent à comparer les calculs réalisés avec le code déterministe respectivement à des calculs stochastiques (Monte Carlo), dits de référence, et à des données expérimentales. Ce projet s'inscrit dans ce processus et se propose de valider les capacités du code APOLLO3 à établir une reconstruction fine de puissance avec un calcul de cœur réalisé en théorie du transport. Le cas d'étude retenu est un réacteur de type REP présenté dans le benchmark BEAVRS [2].

1.2 Schéma de calcul

Afin d'effectuer une résolution numérique d'un problème de neutronique, une modélisation s'impose afin de réduire le nombre d'inconnues du problème (un calcul sur géométrie réelle du cœur, avec une discrétisation énergétique très fine, en une seule étape, en évolution, n'étant pas envisageable, car trop coûteux). Un schéma de calcul est défini par :

- la géométrie modélisée
- le code de calcul et les solveurs utilisés
- les simplifications opérées et les hypothèses émises

Les simplifications et hypothèses dépendent du système étudié. Ainsi, suivant le type de réacteur étudié (REP, CANDU, RNR, REB, etc...), le schéma sera optimisé différemment. Les modélisations et simplifications majeures concernant le schéma présenté dans le cadre de ce mémoire sont les suivantes, elles seront détaillées plus loin :

- données nucléaires utilisées
- enchainements des différents calculs
- approximation quasi statique afin de considérer la forme stationnaire de l'équation de transport
- calcul en deux étapes : l'étape réseau suivie de l'étape cœur
- autoprotection des résonances lors de l'étape réseau
- utilisation de modèles de fuite lors de l'étape réseau
- homogénéisation spatiale et la condensation en énergie entre le calcul réseau et le calcul cœur
- utilisation de modèles d'équivalence
- expansion en polynômes de certaines grandeurs (flux, section efficace, source de neutrons)

Les simplifications retenues pour le schéma dépendent de l'objectif du calcul, un schéma de type industriel se doit d'être rapide et de rendre compte du fonctionnement normal d'un réacteur alors qu'un schéma de référence, plutôt utilisé pour des études de sûreté en amont du fonctionnement, ou de la mise au point du réacteur, doit être avant tout précis.

1.3 Objectifs

L'objectif principal est de mettre en place un calcul de cœur en théorie du transport avec une description géométrique semi-hétérogène (les cellules de combustible sont décrites de façon homogène en leur sein, mais différenciées les unes des autres), dans le but d'établir un schéma déterministe de référence pouvant être mis en œuvre sur une bonne machine de bureau.

Pour cela, on procède à la validation d'un schéma de calcul à deux niveaux : tout d'abord, le schéma à l'échelle réseau est développé et validé à l'aide de calculs de référence. Différentes options sont comparées afin de choisir la plus adaptée aux critères de précisions recherchés pour la constitution d'une bibliothèque de sections efficaces en vue du calcul de cœur.

La deuxième étape correspond au calcul de cœur. Le calcul est effectué à temps initial en se basant sur un réacteur industriel et les données expérimentales associées.

1.4 Plan du mémoire

L'étude effectuée s'articule autour de trois grandes étapes. Tout d'abord figure une revue de littérature présentant les éléments théoriques et méthodes utilisées nécessaires à la compréhension des travaux réalisés.

La validation du calcul d'assemblage est ensuite présentée. Les résultats obtenus avec APOLLO3 sont comparés aux résultats obtenus par un calcul de référence puis discutés.

Enfin, la mise en place du calcul de cœur est expliquée et les résultats comparés aux données expérimentales disponibles dans BEAVRS.

CHAPITRE 2 ASPECTS THÉORIQUES

2.1 Données nucléaires

L'étude neutronique des réacteurs repose sur l'utilisation de données nucléaires comme les sections efficaces microscopiques associées aux différentes réactions ou encore les rendements de fission en fonction des isotopes considérés. Ces données nucléaires sont issues d'évaluation et relèvent du domaine de la physique nucléaire. Elles sont recensées au sein de différentes bases de données : en Europe, la base de données principalement utilisée est JEFF (Joint Evaluated Fission and Fusion file) [3].

2.2 Équation de Boltzmann

L'équation de Boltzmann a été établie en 1872 par Ludwig Boltzmann. Elle permet de décrire l'évolution d'un gaz hors équilibre. Les neutrons étant des particules neutres, leur parcours au sein de la matière se fait en ligne droite entre deux chocs (à condition de négliger la gravité). De plus, ils n'interagissent pas chimiquement avec les noyaux. Enfin, la densité de la population neutronique au sein d'un réacteur étant très faible devant la densité de noyaux présents, on peut négliger les interactions neutron-neutron. Le «gaz» de neutrons peut donc être assimilé à un gaz parfait dont l'évolution au sein du réacteur est modélisée par l'équation de Boltzmann linéarisée ou équation de transport. Des éléments de la présentation qui suit ont été empruntés à l'ouvrage [4]. Pour plus de détails, le lecteur pourra s'y référer.

2.2.1 Espace des phases

L'étude de la population neutronique en un point du réacteur se fait dans l'espace au cours du temps. Les neutrons sont décrits à un temps t par les grandeurs suivantes :

\mathbf{r} : la position du neutron (3 variables : x , y et z)

Ω : la direction du neutron (2 variables : θ l'angle polaire et φ l'angle azimutal)

V_n : la vitesse (en valeur absolue) du neutron peut être remplacée par $E = \frac{1}{2}m_n V_n^2$ son énergie cinétique ou $u = \ln(\frac{E_0}{E})$ sa léthargie moyennant un changement de variable adapté

L'espace des phases associé au problème est donc à 6 dimensions (3 dimensions pour la position et 3 dimensions pour la vitesse)

2.2.2 Flux neutronique

La population de neutrons dans un réacteur est représentée par la densité neutronique notée $n(\mathbf{r}, V_n, \boldsymbol{\Omega}, t)$. C'est une fonction du temps et une distribution du point de vue des autres variables de sorte que : $n(\mathbf{r}, V_n, \boldsymbol{\Omega}, t)d^3rdV_nd^2\Omega$ représente le nombre de neutrons présents au temps t dans un volume élémentaire d^3r centré en \mathbf{r} , avec une vitesse V_n à dV_n près et une direction $\boldsymbol{\Omega}$ à $d^2\Omega$ près. Le flux neutronique angulaire est une notion mathématique définie par :

$$\phi(\mathbf{r}, V_n, \boldsymbol{\Omega}, t) = V_n n(\mathbf{r}, V_n, \boldsymbol{\Omega}, t) \quad (2.1)$$

On peut aussi définir le flux intégré :

$$\phi(\mathbf{r}, V_n, t) = \int_{4\pi} d^2\Omega \phi(\mathbf{r}, V_n, \boldsymbol{\Omega}, t) \quad (2.2)$$

2.2.3 Section efficace et taux de réaction

La notion de section efficace permet de quantifier la probabilité d'interaction entre un neutron et un noyau pour différentes réactions. Elle dépend de l'isotope considéré, de l'énergie du neutron et de la réaction nucléaire étudiée. La section efficace microscopique pour une réaction ρ est notée σ_ρ^* et est liée à la probabilité pour un neutron d'interagir avec un noyau $*$. Elle est homogène à une surface et s'exprime en barn ($1 \text{ barn} = 10^{-24} \text{ cm}^2$). La section efficace macroscopique, quant à elle, est liée à la probabilité pour un neutron d'interagir avec un milieu. Pour un milieu constitué exclusivement de noyaux $*$, la section efficace macroscopique est définie par :

$$\Sigma_\rho^* = N^* \times \sigma_\rho^* \quad (2.3)$$

Où N^* est la densité de noyaux $*$ constituant le milieu. Cette grandeur s'exprime en cm^{-1} , et est égale à l'inverse du libre parcours moyen d'un neutron dans ce milieu lorsque σ_ρ correspond à la section efficace totale. Enfin, le taux de réaction volumique pour une réaction ρ et un noyau $*$ est défini par :

$$\tau_\rho^* = \phi \Sigma_\rho^* \quad (2.4)$$

Le taux de réaction volumique est la principale grandeur physique observable, car il représente le nombre de réactions par seconde et par unité de volume pour la réaction ρ . C'est par exemple la grandeur mesurée par les détecteurs au sein du réacteur (on va par exemple mesurer le courant émis par une chambre fission, celui-ci sera directement proportionnel au taux de fission dans le dépôt fissile de la chambre). C'est cette grandeur que l'on cherche généralement à conserver lors des diverses simplifications du problème et étapes de calcul.

2.2.4 Forme différentielle de l'équation de transport

On considère un volume d'étude V . Un bilan de la population de neutrons sur ce volume permet d'établir la forme différentielle de l'équation de transport :

$$\frac{1}{V_n} \frac{\partial}{\partial t} \phi(\mathbf{r}, V_n, \boldsymbol{\Omega}, t) + \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \phi(\mathbf{r}, V_n, \boldsymbol{\Omega}, t) + \Sigma(\mathbf{r}, V_n, t) \phi(\mathbf{r}, V_n, \boldsymbol{\Omega}, t) = Q(\mathbf{r}, V_n, \boldsymbol{\Omega}, t) \quad (2.5)$$

où :

- $\frac{1}{V_n} \frac{\partial}{\partial t} \phi(\mathbf{r}, V_n, \boldsymbol{\Omega}, t)$ représente la variation du nombre de neutrons dans le volume étudié
- $\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \phi(\mathbf{r}, V_n, \boldsymbol{\Omega}, t)$ est le nombre de neutrons sortant du volume d'étude
- $\Sigma(\mathbf{r}, V_n, t) \phi(\mathbf{r}, V_n, \boldsymbol{\Omega}, t)$ est le nombre de collisions dans un volume d^3r
- $Q(\mathbf{r}, V_n, \boldsymbol{\Omega}, t)$ est le terme de source de neutrons au sein de d^3r

Les codes de calcul neutronique traitent généralement l'équation en régime stationnaire. On obtient donc :

$$\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \phi(\mathbf{r}, V_n, \boldsymbol{\Omega}) + \Sigma(\mathbf{r}, V_n, t) \phi(\mathbf{r}, V_n, \boldsymbol{\Omega}) = Q(\mathbf{r}, V_n, \boldsymbol{\Omega}) \quad (2.6)$$

Avec :

- ϕ le flux neutronique
- Σ la section efficace macroscopique totale du milieu
- Q la densité de la source neutronique

L'équation de transport peut être utilisée sous d'autres formes, présentées ci-dessous.

2.2.5 Forme caractéristique de l'équation de transport

On considère une droite de direction $\boldsymbol{\Omega}$, appelée *caractéristique*, le long de laquelle se déplace un neutron. À tout moment $t + \frac{s}{V_n}$, la position de la particule est notée $\mathbf{r} + s\boldsymbol{\Omega}$. Après réécriture de l'opérateur $\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \phi$ tel quel :

$$\frac{d}{ds} = (\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{i}) \frac{\partial}{\partial x} + (\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{j}) \frac{\partial}{\partial y} + (\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{k}) \frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{V_n} \frac{\partial}{\partial t} \quad (2.7)$$

$\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ sont les vecteurs unitaires du repère cartésien. On obtient le long de la caractéristique :

$$\begin{aligned} -\frac{d}{ds} \phi(\mathbf{r} - s\boldsymbol{\Omega}, V_n, \boldsymbol{\Omega}, t - \frac{s}{V_n}) + \Sigma(\mathbf{r} - s\boldsymbol{\Omega}, V_n) \phi(\mathbf{r} - s\boldsymbol{\Omega}, V_n, \boldsymbol{\Omega}, t - \frac{s}{V_n}) \\ = Q(\mathbf{r} - s\boldsymbol{\Omega}, V_n, \boldsymbol{\Omega}, t - \frac{s}{V_n}) \end{aligned} \quad (2.8)$$

2.2.6 Forme intégrale de l'équation de transport

Pour obtenir la forme intégrale de l'équation de transport, on intègre le flux angulaire le long d'une caractéristique dans l'équation 2.8. La solution homogène du problème est $e^{-\tau(s, V_n)}$, où :

$$\tau(s, V_n) = \int_0^s ds' \Sigma(\mathbf{r} - s'\mathbf{\Omega}, V_n) \quad (2.9)$$

est le chemin optique, traduisant l'atténuation de la densité de neutrons le long de la caractéristique. La méthode de variation de la constante permet d'obtenir la forme suivante dans le cas d'un domaine fini :

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{r}, V_n, \mathbf{\Omega}, t) &= e^{-\tau(b, V_n)} \phi(\mathbf{r} - b\mathbf{\Omega}, V_n, \mathbf{\Omega}, t - \frac{b}{V_n}) \\ &+ \int_0^b ds e^{-\tau(s, V_n)} Q(\mathbf{r} - s\mathbf{\Omega}, V_n, \mathbf{\Omega}, t - \frac{s}{V_n}) \end{aligned} \quad (2.10)$$

où b représente la longueur de la caractéristique.

2.2.7 Terme de source de neutrons

Le terme de source $Q(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}, t)$ représente à la fois les neutrons provenant de la diffusion sur un noyau $Q^{scat}(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}, t)$ (changement d'énergie et de direction), les neutrons provenant de la fission $Q^{fiss}(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}, t)$ et les neutrons provenant de sources secondaires (réactions (n,xn) par exemple). En régime stationnaire, en considérant l'isotropie des réactions de fission dans le référentiel du laboratoire, on obtient le terme de source suivant :

$$Q(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) = \int_{4\pi} d^2\Omega' \int_0^\infty dE' \Sigma_s(\mathbf{r}, E \leftarrow E', \mathbf{\Omega} \leftarrow \mathbf{\Omega}') \phi(\mathbf{r}, E', \mathbf{\Omega}') + \frac{1}{4\pi k_{eff}} Q^{fiss}(\mathbf{r}, E) \quad (2.11)$$

où :

- $\Sigma_s(\mathbf{r}, E \leftarrow E', \mathbf{\Omega} \leftarrow \mathbf{\Omega}')$: section efficace macroscopique de diffusion (incluant les réactions (n,xn))
- k_{eff} : facteur de multiplication effectif. On divise le terme de source de fission par ce facteur pour satisfaire la condition de régime stationnaire.

Dans un milieu isotrope, la section efficace de diffusion ne dépend que de l'angle de diffusion.

On peut alors décomposer cette section en polynômes de Legendre :

$$\Sigma_s(\mathbf{r}, E \leftarrow E', \mathbf{\Omega} \leftarrow \mathbf{\Omega}') = \frac{1}{2\pi} \Sigma_s(\mathbf{r}, E \leftarrow E', \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{\Omega}') = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \Sigma_{s,l}(\mathbf{r}, E \leftarrow E') P_l(\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{\Omega}') \quad (2.12)$$

Avec :

$$\Sigma_{s,l}(E \leftarrow E') = \int_{-1}^1 d\mu \Sigma_s(E \leftarrow E', \mu) P_l(\mu) \quad (2.13)$$

En pratique, on tronque la section efficace de diffusion à l'ordre L . Un développement en P_0 décrit l'isotropie du choc, P_1 un choc linéairement anisotrope. Dans la plupart des cas, on se limite aux développements P_0 , P_1 ou P_3 .

Sachant que (voir [4], section 2.1) :

$$P_l(\boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{\Omega}') = \sum_{m=-l}^l R_l^m(\boldsymbol{\Omega}) R_l^m(\boldsymbol{\Omega}') \quad (2.14)$$

où les R_l^m sont les harmoniques sphériques et on définit :

$$\phi_l^m(\mathbf{r}, E) = \int_{4\pi} d^2\Omega R_l^m(\boldsymbol{\Omega}) \phi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) \quad (2.15)$$

On obtient :

$$Q(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) = \int_0^\infty dE' \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \Sigma_{s,l}(\mathbf{r}, E \leftarrow E') \sum_{m=-l}^l R_l^m(\boldsymbol{\Omega}) \phi_l^m(\mathbf{r}, E') + \frac{1}{4\pi k_{eff}} Q^{fiss}(\mathbf{r}, E) \quad (2.16)$$

La source de fission quant à elle s'écrit :

$$Q^{fiss}(\mathbf{r}, E) = \sum_{j=1}^{J^{fiss}} \chi_j(E) \int_0^\infty dE' \nu \Sigma_{f,j}(\mathbf{r}, E') \phi(\mathbf{r}, E') \quad (2.17)$$

avec :

- J^{fiss} : nombre total d'isotopes fissiles
- χ_j : spectre de fission du j -ième isotope fissile
- $\nu \Sigma_{f,j}$: terme de production (nombre moyen de neutrons émis après fission multiplié par la section efficace de fission macroscopique) pour le j -ième isotope fissile

La forme développée du terme source est donc en régime stationnaire :

$$Q(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) = \int_0^\infty dE' \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \Sigma_{s,l}(\mathbf{r}, E \leftarrow E') \sum_{m=-l}^l R_l^m(\boldsymbol{\Omega}) \phi_l^m(\mathbf{r}, E') + \frac{1}{4\pi k_{eff}} \sum_{j=1}^{J^{fiss}} \chi_j(E) \int_0^\infty dE' \nu \Sigma_{f,j}(\mathbf{r}, E') \phi(\mathbf{r}, E') \quad (2.18)$$

2.2.8 Approche multigroupe

Afin de simplifier la résolution numérique de l'équation de transport, on passe généralement par une approche dite *multigroupe*. Il s'agit de discrétiser le domaine énergétique en G groupes tels que :

$$E_0 > \dots > E_g > \dots > E_{G-1} > E_G > 0 \quad (2.19)$$

On considère dans chaque groupe la moyenne sur le groupe de chaque grandeur neutronique comme si les neutrons de ce groupe étaient mono énergétiques. Les flux neutroniques angulaires et intégrés dans le groupe g s'expriment donc ainsi :

$$\phi_g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \langle \phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) \rangle_g = \int_{u_g}^{u_{g-1}} du \phi(\mathbf{r}, u, \boldsymbol{\Omega}) \quad (2.20)$$

Où u est la léthargie définie précédemment (voir section 2.2.1).

$$\phi_g(\mathbf{r}) = \langle \phi(\mathbf{r}) \rangle_g = \int_{u_g}^{u_{g-1}} du \phi(\mathbf{r}, u) \quad (2.21)$$

On utilise, dans le cas hétérogène, une formule conservatrice des taux de réaction (produit du flux par la section efficace associée à la réaction considérée) dans le cas d'un milieu homogène (attention cette relation n'est plus strictement conservatrice pour un milieu hétérogène). Sur chaque groupe g , on définit les sections efficaces macroscopiques totale, différentielle et de fission par :

$$\Sigma_g = \frac{1}{\phi_g(\mathbf{r})} \langle \Sigma(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}) \rangle_g = \frac{1}{\phi_g} \int_{u_g}^{u_{g-1}} du \Sigma(\mathbf{r}, u) \phi(\mathbf{r}, u) \quad (2.22)$$

$$\Sigma_{s,l,g \leftarrow h}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\phi_g(\mathbf{r})} \langle \Sigma_{s,l}(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}) \rangle_{g \leftarrow h} = \frac{1}{\phi_g} \int_{u_g}^{u_{g-1}} du \int_{u_h}^{u_{h-1}} du' \Sigma_{s,l}(\mathbf{r}, u \leftarrow u') \phi(\mathbf{r}, u') \quad (2.23)$$

$$\nu \Sigma_{f,j,g}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\phi_g(\mathbf{r})} \langle \nu \Sigma_{f,j}(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}) \rangle_g \quad (2.24)$$

Le terme de source multigroupe en régime stationnaire est :

$$Q_g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \sum_{h=1}^G \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \Sigma_{s,l,g \leftarrow h}(\mathbf{r}) \sum_{m=-l}^l R_l^m(\boldsymbol{\Omega}) \phi_{l,h}^m(\mathbf{r}) + \frac{1}{4\pi k_{eff}} \sum_{j=1}^{J^{fiss}} \chi_{j,g} \sum_{h=1}^G \nu \Sigma_{f,j,h}(\mathbf{r}) \phi_h(\mathbf{r}) \quad (2.25)$$

avec $\chi_{j,g}$ le spectre de fission dans le groupe g tel que :

$$\chi_{j,g} = \int_{u_{g-1}}^{u_g} du \chi_j(u) \quad (2.26)$$

On obtient donc un jeu de G équations de transport à résoudre :

$$\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \phi_g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) + \Sigma_g(\mathbf{r}) \phi_g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = Q_g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) \quad (2.27)$$

Pour les ordres $l > 0$ de la section efficace de diffusion (équation 2.23), on choisit de condenser les moments par le flux d'ordre 0. Les moments d'ordres supérieurs pourraient être utilisés, ce n'est pas le cas ici. Lors de l'étape réseau, le nombre de groupe est généralement de l'ordre de quelques centaines [5]. Pour le calcul de cœur, le nombre de groupes peut varier de deux à quelques dizaines.

2.3 Méthodes de résolution de l'équation de transport

Afin de calculer le k_{eff} et le flux ϕ , on résout l'équation de transport multigroupe dans chaque groupe g de façon itérative. On procède tout d'abord à un balayage du domaine de calcul (*tracking* en anglais). Lors de cette étape, les informations sur la géométrie de calcul sont récupérées par le code et stockées. Ces informations diffèrent suivant la méthode utilisée pour la résolution de l'équation de transport. Généralement, la résolution s'effectue en trois étapes :

- une boucle externe dans laquelle on s'intéresse au k_{eff} , au flux total ϕ , la source de fission Q_{fiss} ainsi qu'à la source d'*up-scattering* (diffusion des neutrons vers une énergie supérieure)
- une boucle *multigroupe* dans laquelle on effectue une descente du spectre en énergie (l'équation multigroupe est résolue sur chaque groupe du plus énergétique au moins énergétique). La source de diffusion des groupes $g' > g$ est mise à jour à chaque pas
- une boucle interne dans laquelle est mise à jour la source de diffusion interne au groupe g à chaque itération jusqu'à convergence spatiale et angulaire du flux

L'équation de transport multigroupe résolue dans le groupe g , lors des itérations externes (e), et internes (i) (voir figure 2.1), est :

$$[L^g + H^{gg}]\phi_g^{(e)} = \sum_{g' < g} H_{down}^{gg'} \phi_{g'}^{(e)} + \sum_{g' > g} H_{up}^{gg'} \phi_{g'}^{(e-1)} + \frac{1}{k_{eff}^{(e-1)}} [F\phi]_g^{(e-1)} \quad (2.28)$$

Avec :

$$[L^g]\phi_g^{(e)} = \mathbf{\Omega} \cdot \nabla \phi_g^{(e)} \quad (i) + \Sigma_g \phi_g^{(e)} \quad (i) \quad (2.29)$$

$$[H^{gg}]\phi_g^{(e)} = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \Sigma_{s,l,g \leftarrow g} \sum_{m=-l}^l R_l^m \phi_{l,g}^m \quad (e) \quad (i-1) \quad (2.30)$$

$$\sum_{g' < g} H_{down}^{gg'} \phi_{g'}^{(e)} = \sum_{g'=1}^{g-1} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \Sigma_{s,l,g \leftarrow g'} \sum_{m=-l}^l R_l^m \phi_{l,g'}^m \quad (e) \quad (2.31)$$

$$\sum_{g' > g} H_{up}^{gg'} \phi_{g'}^{(e)} = \sum_{g'=g+1}^G \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \Sigma_{s,l,g \leftarrow g'} \sum_{m=-l}^l R_l^m \phi_{l,g'}^m \quad (e-1) \quad (2.32)$$

$$[F\phi]_g^{(e-1)} = \sum_{j=1}^{J_{fiss}} \chi_{j,g} \sum_{h=1}^G \nu \Sigma_{f,j,h} \phi_h^{(e-1)} \quad (2.33)$$

2.3.1 Méthode des probabilités de première collision

La méthode des probabilités de première collision (ou méthode PIJ) s'applique sur un système spatialement discrétisé en régions aux propriétés nucléaires uniformes, généralement considéré en milieu infini (les conditions aux frontières sont le plus souvent de type translation ou symétrie de réflexion). La source est la plupart du temps isotrope (car très coûteux autrement, il faudrait calculer une matrice des probabilités de collision par moment de la section efficace de diffusion. Pour $l = 1$ on a $m \in \llbracket -1, 1 \rrbracket$ donc 3 matrices). Il s'agit de résoudre un système matriciel par groupe d'énergie en passant par l'inversion de la matrice des probabilités, de taille $I \times I$ où I est le nombre de régions dans la géométrie discrétisée. C'est pourquoi cette méthode n'est pas adaptée aux géométries présentant un grand nombre de zones.

Si l'on considère la forme intégrale de l'équation de transport (équation (2.10)), pour un réseau infini, intégrée sur l'angle solide, on a :

$$\phi_g(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} d^2\Omega \int_0^\infty ds e^{-\tau_g(s)} Q_g(\mathbf{r} - s\mathbf{\Omega}) \quad (2.34)$$

Le chemin optique $\tau_g(s)$ étant défini par l'équation (2.9). En effectuant le changement de

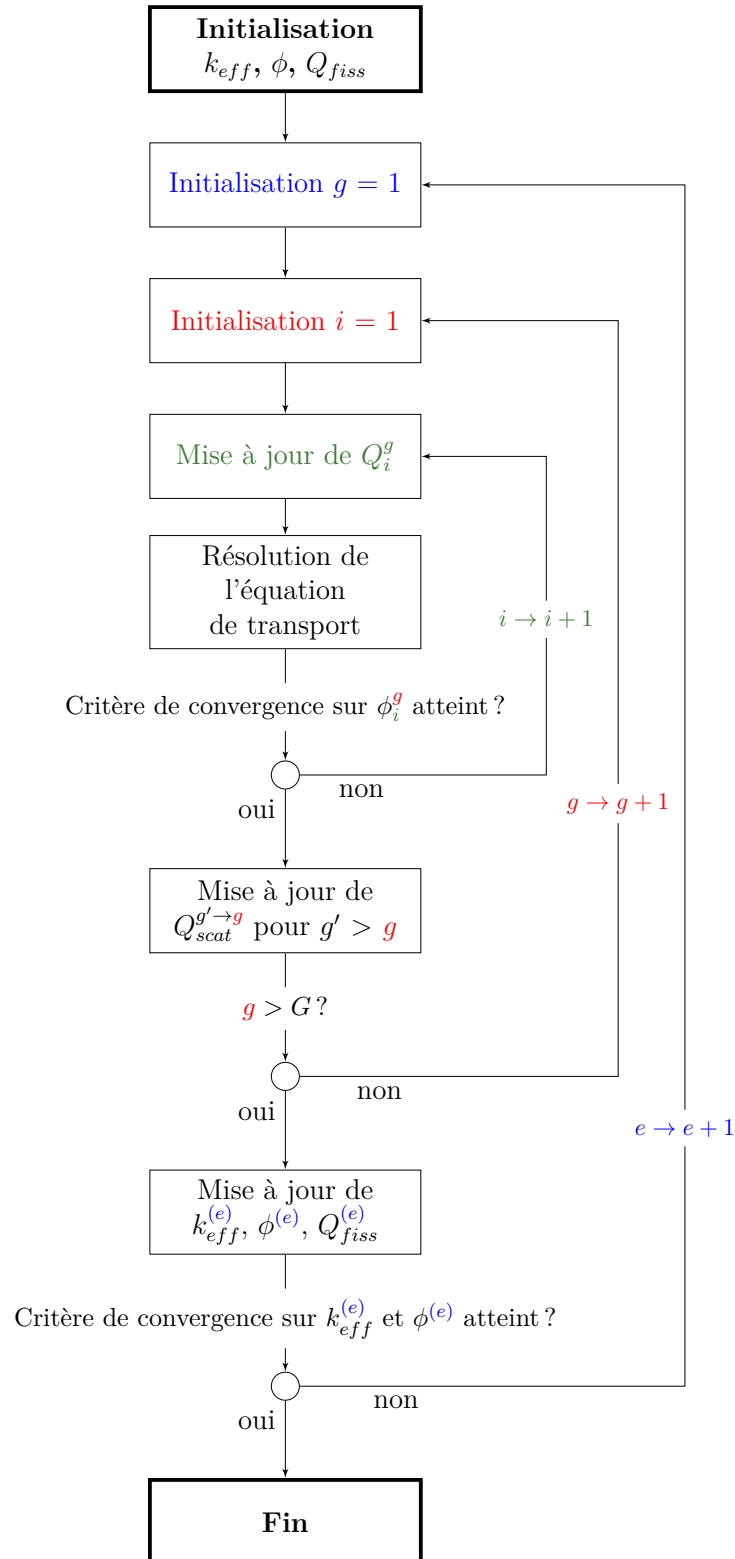


Figure 2.1 Algorithme de résolution de l'équation de transport multigroupe

variable $\mathbf{r}' = \mathbf{r} - s\boldsymbol{\Omega}$ avec $d^3r' = s^2 d^2\Omega ds$, et $s = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$, on obtient :

$$\phi_g(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \int_{\infty} d^3r' \frac{e^{-\tau_g(s)}}{s^2} Q_g(\mathbf{r}') \quad (2.35)$$

Soit V_i , $i \in \llbracket 1; I \rrbracket$, les régions définies dans la géométrie et V_I^∞ l'ensemble des régions similaires à V_i , définies par la translation ou la symétrie de la géométrie initiale du réseau infini. On considère que le terme source de neutrons dans chaque région est uniforme. Après multiplication de l'équation (2.35) par la section efficace totale dans le groupe g , $\Sigma_g(\mathbf{r})$ et intégration spatiale sur chaque région V_i on obtient :

$$\int_{V_j} d^3r \Sigma_g(\mathbf{r}) \phi_g(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \int_{V_j} d^3r \Sigma_g(\mathbf{r}) \sum_i Q_{i,g} \int_{V_i^\infty} d^3r' \frac{e^{-\tau_g(s)}}{s^2} \quad (2.36)$$

En prenant :

$$\phi_{j,g} = \frac{1}{V_j} \int_{V_j} d^3r \phi(\mathbf{r}) \quad (2.37)$$

$$\Sigma_{j,g} = \frac{1}{V_j \phi_{j,g}} \int_{V_j} d^3r \Sigma_g(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}) \quad (2.38)$$

$$P_{ij,g} = \frac{1}{4\pi V_i} \int_{V_i^\infty} d^3r' \int_{V_j} d^3r \frac{e^{-\tau_g(s)}}{s^2} \quad (2.39)$$

où $P_{ij,g}$ est la probabilité qu'un neutron du groupe g né dans la région V_i subisse sa première collision dans la région V_j .

On a :

$$V_j \Sigma_{j,g} \phi_{j,g} = \sum_i Q_{i,g} V_i P_{ij,g} \quad (2.40)$$

Dans le cas où $\Sigma_g(\mathbf{r})$ est constante dans une région j et égale à $\Sigma_{g,j}$, on considère la probabilité de première collision réduite :

$$p_{ij,g} = \frac{P_{ij,g}}{\Sigma_{g,j}} \quad (2.41)$$

Les facteurs $p_{ij,g}$ possèdent des propriétés de réciprocity et de conservation qui s'écrivent :

$$p_{ij,g} V_i = p_{ji,g} V_j \quad (2.42)$$

$$\sum_i p_{ij,g} \Sigma_{j,g} = 1 \quad \forall i \quad (2.43)$$

Ces propriétés permettent donc de poser d'après les équations 2.40 et 2.41 :

$$\phi_{i,g} = \sum_j Q_{j,g} p_{ij,g} \quad (2.44)$$

Afin d'utiliser l'algorithme présenté figure 2.1, on réécrit l'équation 2.44 :

$$\phi_{i,g} - \sum_j p_{ij,g} \Sigma_{s0,j,g \leftarrow g} \phi_{j,g} = Q_{j,g}^\diamond p_{ij,g} \quad (2.45)$$

Où $Q_{j,g}^\diamond$ représente la source de neutrons à laquelle on a retiré la source de diffusion interne au groupe g . Écrite sous forme matricielle cette équation donne :

$$\Phi_g = \mathbb{W}_g \mathbf{Q}_g^\diamond \quad (2.46)$$

Où $\Phi_g = \{\phi_{i,g}; \forall i\}$, $\mathbf{Q}_g^\diamond = \{Q_{i,g}^\diamond; \forall i\}$,

$$\mathbb{W}_g = [\mathbb{I} - \mathbb{P}_g \mathbb{S}_{s0,g \leftarrow g}]^{-1} \mathbb{P}_g \quad (2.47)$$

Avec \mathbb{I} la matrice identité, $\mathbb{P}_g = \{p_{ij,g}; \forall i, j\}$ la matrice des probabilités de première collision dans le groupe d'énergie g et $\mathbb{S}_{s0,g \leftarrow g}$ la matrice des sections de transfert internes au groupe g :

$$\mathbb{S}_{s0,g \leftarrow g} = \begin{bmatrix} \Sigma_{s0,1,g \leftarrow g} & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & & & \vdots \\ \vdots & & \Sigma_{s0,i,g \leftarrow g} & & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 & \Sigma_{s0,I,g \leftarrow g} \end{bmatrix}$$

À l'itération externe, $e + 1$ on effectue alors :

$$\Phi_g^{(e+1)} = \mathbb{W}_g \mathbf{Q}_g^{\diamond(e)} \quad (2.48)$$

2.3.2 Méthode des ordonnées discrètes

Adaptée à la physique des réacteurs dans les années 50 par Carlson [6], la méthode des ordonnées discrètes se base sur une discrétisation angulaire de la forme différentielle de l'équation de transport. La discrétisation de la variable Ω en une série de directions Ω_n , et de poids associés \mathcal{W}_n , est appelée quadrature. Différentes discrétisations sont alors possibles.

Quadrature

En une dimension, l'équation de transport s'exprime selon une seule inconnue spatiale $\mu = \cos(\psi)$ (ψ et ϕ sont respectivement l'angle polaire et l'angle azimutal décrivant la sphère unité). On a alors :

$$\int_{-1}^1 d\mu f(\mu) \simeq \sum_{n=1}^N \mathcal{W}_n f(\mu_n) \quad (2.49)$$

En deux dimensions, on généralise l'équation précédente à :

$$\frac{2}{\pi} \int_0^1 d\mu \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\phi f(\mu, \eta, \xi) \simeq \sum_{n=1}^M \mathcal{W}_n f(\mu_n, \eta_n, \xi_n) \quad (2.50)$$

où $\eta = \sqrt{1 - \mu^2} \cos(\phi)$ et $\xi = \sqrt{1 - \mu^2} \sin(\phi)$ ($M = \frac{N(N+2)}{8}$ dans le cas d'une quadrature de type *level-symmetric*).

On associe un angle solide à chaque direction Ω_n de sorte que :

$$\mathcal{W}_n = \int_{\Omega_n} d^2\Omega \quad (2.51)$$

$$\sum_{n=1}^M \mathcal{W}_n = 1 \quad (2.52)$$

Plusieurs quadratures sont alors possibles pour calculer les points de bases et les poids associés. Dans le cas d'une géométrie cartésienne, une quadrature de type *level-symmetric* (figure 2.2a) permet de conserver la quadrature après rotation d'angle $\frac{\pi}{2}$. On peut aussi utiliser une quadrature produit de Gauss-Chebychev (figure 2.2b), plus adaptée aux géométries cylindriques (d'après Hébert [4], section 3.9.1).

Méthode S_N

À une dimension, on considère un domaine subdivisé en sous-domaines dont les bornes sont $[x_{i-\frac{1}{2}}; x_{i+\frac{1}{2}}]$, centrées en x_i , et de longueur $\Delta x_i = x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}$. L'équation de transport traitée par la méthode S_N , avec une approche de type différences finies, prend alors la forme :

$$\mu_n(\phi_{n,i+\frac{1}{2}} - \phi_{n,i-\frac{1}{2}}) + \Delta x_i \Sigma_i \phi_{n,i} = \Delta x_i Q_{n,i} \quad (2.53)$$

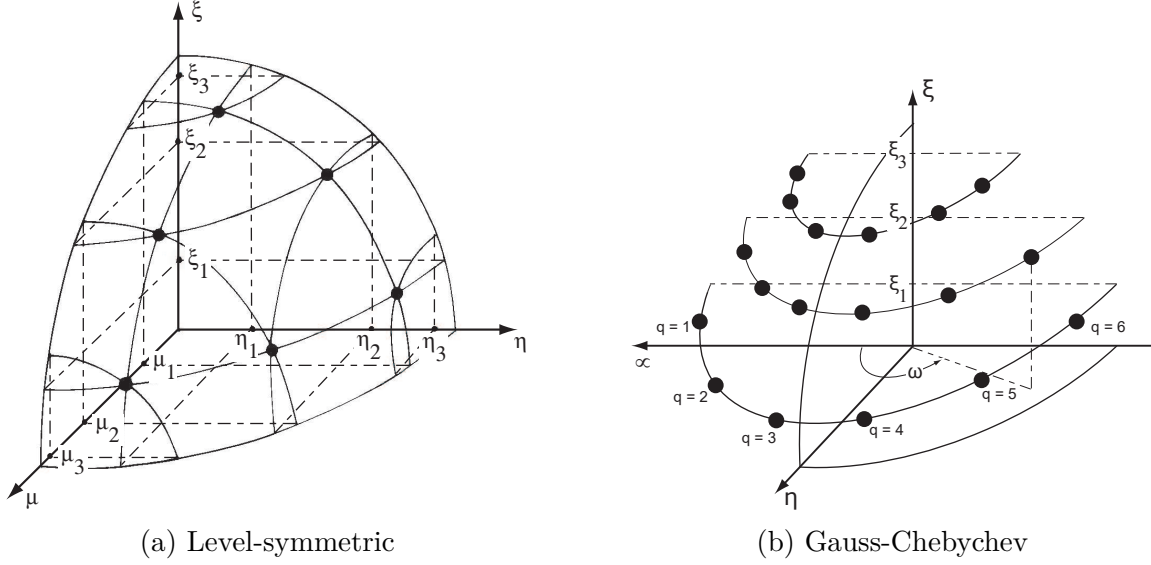


Figure 2.2 Représentation de quadratures S_6 *level-symmetric* et produit

où :

$$Q_{n,i} = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} Q_{l,i}^{pn} P_l(\mu_n) \quad (2.54)$$

$$\phi_{n,i} = \frac{1}{\Delta x_i} \int_{x_{n,i-\frac{1}{2}}}^{x_{n,i+\frac{1}{2}}} dx \phi_n(x) \quad (2.55)$$

$$Q_{l,i}^{pn} = \frac{1}{\Delta x_i} \int_{x_{n,i-\frac{1}{2}}}^{x_{n,i+\frac{1}{2}}} dx Q_l(x) \quad (2.56)$$

En deux dimensions on pose $\Delta y_j = y_{n,j+\frac{1}{2}} - y_{n,j-\frac{1}{2}}$ et $V_{i,j} = \Delta x_i \Delta y_j$, de sorte que :

$$\frac{\mu_n}{\Delta x_i} (\phi_{n,i+\frac{1}{2},j} - \phi_{n,i-\frac{1}{2},j}) + \frac{\eta_n}{\Delta y_j} (\phi_{n,i,j+\frac{1}{2}} - \phi_{n,i,j-\frac{1}{2}}) + \Sigma_{i,j} \phi_{n,i,j} = Q_{n,i,j} \quad (2.57)$$

avec :

$$Q_{n,i,j} = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \sum_{\substack{m=-l \\ m+l \text{ pair}}}^l Q_{l,i,j}^m R_l^m(\mu_n, \eta_n, \xi_n) \quad (2.58)$$

$$\phi_{n,i,j} = \frac{1}{V_{i,j}} \int_{x_{n,i-\frac{1}{2}}}^{x_{n,i+\frac{1}{2}}} dx \int_{y_{n,j-\frac{1}{2}}}^{y_{n,j+\frac{1}{2}}} dy \phi_n(x, y) \quad (2.59)$$

$$Q_{l,i,j}^m = \frac{1}{V_{i,j}} \int_{x_{n,i-\frac{1}{2}}}^{x_{n,i+\frac{1}{2}}} dx \int_{y_{n,j-\frac{1}{2}}}^{y_{n,j+\frac{1}{2}}} dy Q_l^m(x, y) \quad (2.60)$$

$\phi_n(x) = \phi(x, \mu_n)$ en une dimension et $\phi_n(x, y) = \phi(x, y, \mu_n, \eta_n)$ en deux dimensions. Les moments de Legendre et des harmoniques sphériques du flux sont alors respectivement calculés en une et deux dimensions par :

$$\Phi_l(x) = \sum_n \mathcal{W}_n \phi_n(x) P_l(\mu_n) \quad (2.61)$$

$$\Phi_l^m(x, y) = \sum_n \mathcal{W}_n \phi_n(x, y) R_l^m(\mu_n, \eta_n, \xi_n) \quad (2.62)$$

Méthode des éléments finis de Galerkin discontinue

Le solveur MINARET [7] utilise des éléments finis discontinus avec une méthode de projection de Galerkin pour la discrétisation spatiale du domaine. Le domaine géométrique est découpé en triangles (figure 2.3), extrudés pour un calcul en trois dimensions, sur lesquels l'équation de transport est résolue avec la méthode S_N . Le principe est d'interpoler le flux $\phi_n(x, y)$ sur

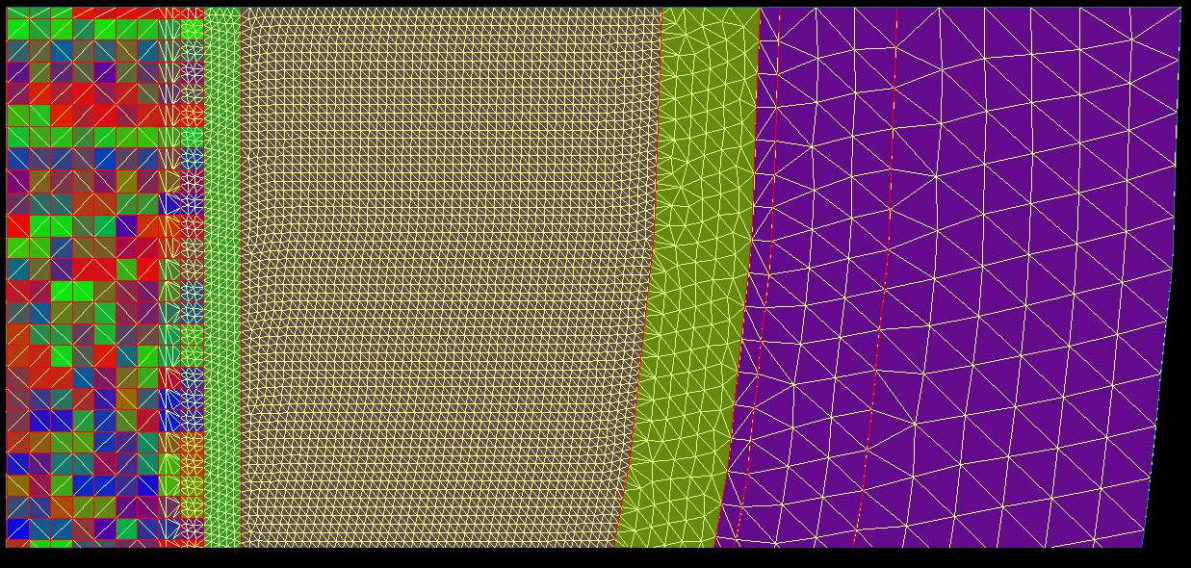


Figure 2.3 Découpage en triangles du solveur MINARET

chaque sous-domaine triangulaire ($\phi_n(z)$ pour la partie axiale). La méthode dite discontinue permet la discontinuité du flux aux frontières de deux triangles adjacents.

2.3.3 Méthode des caractéristiques

La méthode des caractéristiques (*Method Of Characteristics* - MOC en anglais) s'intéresse à la forme caractéristique de l'équation de transport (équation 2.8) dans sa forme statique. Le principe est de résoudre l'équation le long d'une caractéristique \mathbf{T} définie par sa direction $\mathbf{\Omega}$

et son point d'origine \mathbf{p} lui-même défini en deux dimensions dans le plan $\mathbf{\Pi}_\Omega$ orthogonal à Ω .

Tout comme pour la méthode des probabilités de première collision l'espace est partitionné en I volumes V_i de propriétés nucléaires uniformes au sein de chaque volume. La contribution des flux calculés sur chaque caractéristique du *tracking* est intégrée tel que :

$$\begin{aligned} V_i \phi_i &= \int_{V_i} d^3r \int_{4\pi} d^2\Omega \phi(\mathbf{r}, \Omega) \\ &= \int_{\Upsilon} d^4T \int_{-\infty}^{+\infty} ds \chi_{V_i}(\mathbf{T}, s) \phi(\mathbf{p} + s\Omega, \Omega) \end{aligned} \quad (2.63)$$

Avec $\Upsilon = \{\mathbf{T}\} = 4\pi \times \mathbf{\Pi}_\Omega$ l'ensemble des caractéristiques du domaine de *tracking*, et $d^4T = d^2\Omega d^2p$. $\chi_{V_i}(\mathbf{T}, s)$ est la fonction caractéristique égale à 1 si le point $\mathbf{p} + s\Omega$ de \mathbf{T} se situe dans le volume V_i , 0 sinon. Rappelons que s est la distance parcourue par le neutron sur la caractéristique depuis le point d'origine \mathbf{p} .

On note :

$$\mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{r}_k + l_k \Omega ; k \in \llbracket 1, K \rrbracket \quad (2.64)$$

les points aux frontières des régions traversées par la caractéristique. Les longueurs l_k et les indices N_k des régions sont récupérés lors de la phase de *tracking*, K étant le nombre total de régions traversées par \mathbf{T} .

$$\phi_k(\mathbf{T}) = \phi(\mathbf{r}_k, \Omega) ; k \in \llbracket 1, K + 1 \rrbracket \quad (2.65)$$

est le flux à la frontière de la région k , associé à la caractéristique \mathbf{T} . Le flux moyen associé à cette caractéristique dans une région k est alors défini par :

$$\bar{\phi}_k(\mathbf{T}) = \frac{1}{l_k(\mathbf{T})} \int_0^{l_k(\mathbf{T})} ds \phi(\mathbf{r}_k + s\Omega, \Omega) ; k \in \llbracket 1, K \rrbracket \quad (2.66)$$

L'équation 2.63 devient donc :

$$V_i \phi_i = \int_{\Upsilon} d^4T \sum_k \delta_{iN_k} l_k(\mathbf{T}) \bar{\phi}_k(\mathbf{T}) \quad (2.67)$$

Le volume V_i est alors donné par :

$$4\pi V_i = \int_{\Upsilon} d^4T \sum_k \delta_{iN_k} l_k(\mathbf{T}) \quad (2.68)$$

Le terme de source est lui aussi moyenné sur chaque segment :

$$\bar{Q}_k(\mathbf{T}) = \frac{1}{l_k(\mathbf{T})} \int_0^{l_k(\mathbf{T})} ds Q(\mathbf{r}_k + s\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}) ; k \in \llbracket 1, K \rrbracket \quad (2.69)$$

Pour la méthode des caractéristiques, l'intégrale $\int_{\Upsilon} d^4T$ est traitée par une somme discrète de contributions pondérées (les poids ω_m sont issus d'une quadrature, voir section 2.3.2), tel que :

$$\int_{\Upsilon} d^4T f(\mathbf{T}) \simeq 4\pi \sum_{m=1}^M \omega_m f(\mathbf{T}_m) \quad (2.70)$$

Ainsi les équations 2.67 et 2.68 donnent :

$$\frac{\phi_i}{4\pi} = \frac{\sum_{m=1}^M \omega_m \sum_k \delta_{iN_k} l_k(\mathbf{T}_m) \bar{\phi}_k(\mathbf{T}_m)}{\sum_{m=1}^M \omega_m \sum_k \delta_{iN_k} l_k(\mathbf{T}_m)} \quad (2.71)$$

Plusieurs hypothèses sont possibles pour la représentation de la source, parmi lesquelles celle d'une source constante par région telle que :

$$Q(\mathbf{r}_k + s\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}) = Q_{N_k}(\boldsymbol{\Omega}) ; \forall s \in [0, l_k] \quad (2.72)$$

Cette approximation mène à :

$$\begin{aligned} \phi_{k+1}(\mathbf{T}) &= \mathcal{A}_k(\mathbf{T})\phi_k(\mathbf{T}) + \mathcal{B}_k(\mathbf{T})Q_{N_k}(\boldsymbol{\Omega}) \\ \bar{\phi}_k(\mathbf{T}) &= \frac{1}{l_k} [\mathcal{B}_k(\mathbf{T})\phi_k(\mathbf{T}) + \mathcal{C}_k(\mathbf{T})Q_{N_k}(\boldsymbol{\Omega})] \end{aligned} \quad (2.73)$$

où :

- Si $\Sigma_{N_k} \neq 0$:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_k(\mathbf{T}) &= e^{-\tau_k(\mathbf{T})} \\ \mathcal{B}_k(\mathbf{T}) &= \frac{1}{\Sigma_{N_k}} (1 - e^{-\tau_k(\mathbf{T})}) \\ \mathcal{C}_k(\mathbf{T}) &= \frac{l_k(\mathbf{T})}{\Sigma_{N_k}} \end{aligned} \quad (2.74)$$

- Si $\Sigma_{N_k} = 0$:

$$\begin{aligned}\mathcal{A}_k(\mathbf{T}) &= 1 \\ \mathcal{B}_k(\mathbf{T}) &= l_k(\mathbf{T}) \\ \mathcal{C}_k(\mathbf{T}) &= \frac{l_k^2(\mathbf{T})}{2}\end{aligned}\tag{2.75}$$

Avec :

$$\tau_k(\mathbf{T}) = \Sigma_{N_k} l_k(\mathbf{T})\tag{2.76}$$

D'autres représentations du terme de source peuvent être utilisées, linéaire [8] par exemple.

2.4 Calcul réseau

Dans cette section sont présentées les principales étapes du calcul réseau, depuis l'étape de maillage géométrique jusqu'à l'homogénéisation et la condensation des sections efficaces en préparation du calcul de cœur complet.

2.4.1 Maillage spatial

En partant des résultats présentés par Raynaud [9] les options de calcul testées sur une cellule de combustible et sur différents motifs de 3×3 cellules ont été testées sur plusieurs géométries d'assemblages issues du benchmark BEAVRS [2]. La géométrie généralement modélisée dans le cas d'un assemblage correspond à un huitième de la géométrie réelle. En effet, en raison des symétries de l'assemblage, on peut réduire la taille du problème en imposant les bonnes conditions aux frontières du domaine étudié. Dans le cas des assemblages 6BA et 15BA présentés dans BEAVRS, on modélise la moitié de l'assemblage, car ils ne présentent pas la même symétrie.

Le cylindre de combustible est discrétisé en quatre régions (respectivement 50%, 30%, 15% et 5% du volume de la pastille de combustible) dans le cadre d'un combustible type UOx suivant les recommandations de Santamarina [10]. Cela permet une meilleure représentation de l'absorption résonante de ^{238}U au sein de la pastille, et donc de l'évolution de la production de ^{239}Pu dans le combustible. En effet, on constate un fort gradient d'absorption dans les couronnes extérieures de la pastille [11].

Concernant la discrétisation spatiale au niveau de la cellule pour le calcul de flux, les travaux de Canbakan [12] suggèrent l'utilisation d'un sous-maillage de type raffiné [13] (voir figures 2.4 et 2.5) pour des résultats plus précis. L'objectif étant de mettre en œuvre un schéma de référence, on se permet une dégradation du temps de calcul pour des résultats plus précis.

Ce découpage permet notamment une meilleure discrétisation de l'espace dans le modérateur pour une meilleure représentation du ralentissement des neutrons.

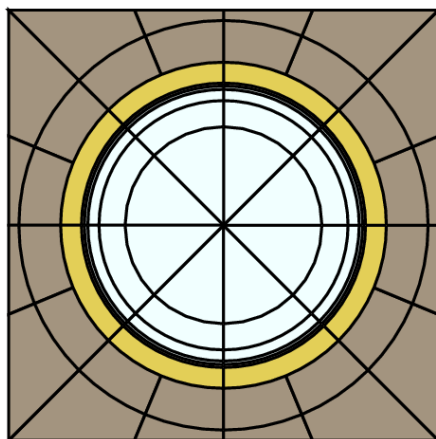


Figure 2.4 Cellule de combustible raffinée

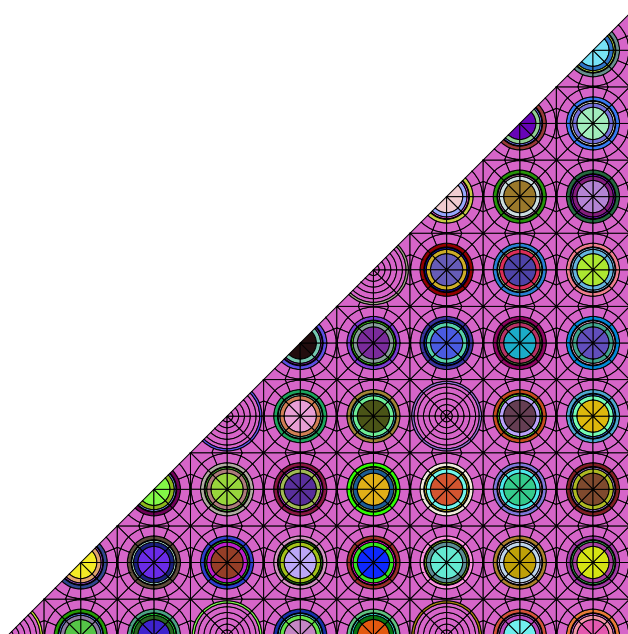


Figure 2.5 Huitième d'assemblage raffiné

2.4.2 Utilisation des tables de probabilité

Les méthodes d'autoprotection des résonances utilisées dans le cadre de ce projet s'appuient sur l'utilisation des tables de probabilités. Elles ont été initialement introduites par Levitt [14] pour les méthodes Monte-Carlo puis Cullen [15] aux États-Unis, et Nikolaev [16, 17] en

Russie pour la méthode des sous-groupes. Ribon les a ensuite adaptées [18, 19, 20] dans son formalisme CALENDF [21].

Le principe est de représenter les sections efficaces au sein d'un groupe en énergie par leur densité de probabilité (figure 2.6). Soit $\Pi(\sigma)d\sigma$ la probabilité pour la section efficace considérée d'être comprise dans un intervalle $[\sigma; \sigma + d\sigma]$. La densité de probabilité associée $\Pi(\sigma)$ est normalisée sur le groupe en énergie considéré :

$$\int_0^{\max(\sigma)} d\sigma \Pi(\sigma) = 1 \quad (2.77)$$

On discrétise alors cette densité de probabilité par une série de pics de Dirac centrés en des valeurs σ_k de la section efficace totale :

$$\Pi(\sigma) = \sum_{k=1}^K \delta(\sigma - \sigma_k) \omega_k \quad (2.78)$$

avec :

$$\sum_{k=1}^K \omega_k = 1 \quad (2.79)$$

On considère alors K sous-groupes de sections efficaces, centrés en σ_k , au sein d'un groupe en énergie. L'intégrale de Riemann d'une fonction dépendant de la section efficace sur le groupe en énergie $[E_{inf}; E_{sup}]$ est exprimée sous la forme d'une intégrale de Lebesgue faisant intervenir la densité de probabilité $\Pi(\sigma)$:

$$\frac{1}{E_{sup} - E_{inf}} \int_{E_{inf}}^{E_{sup}} dE f(\sigma(E)) = \int_0^{\max(\sigma)} d\sigma \Pi(\sigma) f(\sigma) \quad (2.80)$$

L'équation 2.78 permet alors de poser :

$$\frac{1}{E_{sup} - E_{inf}} \int_{E_{inf}}^{E_{sup}} dE f(\sigma(E)) = \sum_{k=1}^K f(\sigma_k) \omega_k \quad (2.81)$$

L'approche du code CALENDF se base sur la conservation des moments d'ordre l , où $l \in \llbracket 1 - K; K \rrbracket$, de la section efficace pour déterminer les couples $(\sigma_k; \omega_k)$ à l'aide d'une quadrature de Gauss :

$$\frac{1}{E_{sup} - E_{inf}} \int_{E_{inf}}^{E_{sup}} dE \sigma^l(E) = \sum_{k=1}^K (\sigma_k)^l \omega_k \quad (2.82)$$

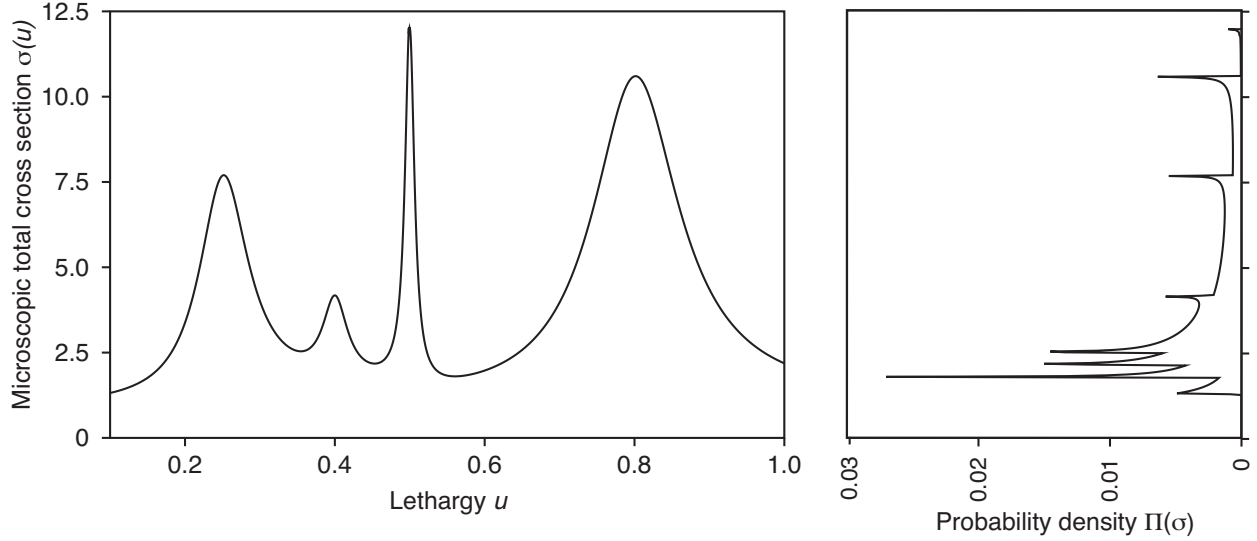


Figure 2.6 Représentation d'une section efficace et de sa densité de probabilité associée

2.4.3 Autoprotection des résonances

Les résonances des sections efficaces provoquent le phénomène physique d'autoprotection des résonances en présence d'un flux neutronique. Cela correspond à l'effondrement du flux au niveau de la résonance. La modélisation de ce phénomène est cruciale pour le calcul multigroupe. En effet, les sections efficaces présentes dans les bibliothèques multigroupes sont moyennées sur chaque groupe en énergie, ce qui réduit la dépression du flux lors du calcul multigroupe et provoque alors une surévaluation du taux de réaction associé.

Différentes méthodes ont été développées dans les codes déterministes pour traiter cet effet. Dans le code APOLLO3, différentes approches ont été implémentées, en particulier la méthode de Sanchez-Coste [22] pour les REL, la méthode des sous-groupes d'ECCO [23] et la méthode de Tone [24], initialement développées pour l'étude de la filière rapide. Ces méthodes se basent sur l'utilisation des tables de probabilités décrites précédemment. Les développements suivants présument l'utilisation de la forme intégrale de l'équation de transport et de la méthode des probabilités de première collision pour le calcul du flux interne à l'autoprotection (équation 2.83). On pourrait toutefois envisager une approche basée sur la forme différentielle de l'équation. Dans le cadre de la méthode des probabilités de collision, on rappelle l'équation 2.40 :

$$V_j \Sigma_{t,j}(u) \phi_j(u) = \sum_i V_i P_{ij}(u) Q_i(u) \quad (2.83)$$

Par la suite, l'indice + désignera l'ensemble des isotopes non résonant dans la région traitée

tandis que l'indice * désignera l'isotope résonant. Les développements suivants s'appuient sur la présentation qu'en fait Vidal [25].

Méthode des sous-groupes d'ECCO

L'hypothèse principale de cette méthode est l'absence de corrélation entre les sources de neutrons et les réactions pour une léthargie u de sorte que pour une région j , une réaction ρ et un isotope résonant * :

$$\langle \phi_j \rangle_g = \sum_i \frac{V_i}{V_j} \left\langle \frac{P_{ij}}{\Sigma_{t,j}} Q_i \right\rangle_g \approx \sum_i \frac{V_i}{V_j} \left\langle \frac{P_{ij}}{\Sigma_{t,j}} \right\rangle_g \langle Q_i \rangle_g \quad (2.84)$$

$$\langle \sigma_\rho^* \phi_j \rangle_g = \sum_i \frac{V_i}{V_j} \left\langle \sigma_\rho^* \frac{P_{ij}}{\Sigma_{t,j}} Q_i \right\rangle_g \approx \sum_i \frac{V_i}{V_j} \left\langle \sigma_\rho^* \frac{P_{ij}}{\Sigma_{t,j}} \right\rangle_g \langle Q_i \rangle_g \quad (2.85)$$

Les grandeurs $\left\langle \frac{P_{ij}}{\Sigma_{t,j}} Q_i \right\rangle_g$ et $\left\langle \sigma_\rho^* \frac{P_{ij}}{\Sigma_{t,j}} Q_i \right\rangle_g$ sont calculées à partir des tables de probabilités mathématiques issues du formalisme CALENDF (voir section 2.4.2). Les sections autoprotégées sont données par :

$$\tilde{\sigma}_{\rho,j}^{*g} = \frac{\langle \sigma_\rho^* \phi_j \rangle_g}{\langle \phi_j \rangle_g} = \frac{\sum_{k=1}^K \frac{\sum_i V_i \omega^k P_{ij}^k Q_i^g \sigma_\rho^k}{N_j^* \sigma_t^k + \Sigma_{t,j}^{+,g}}}{\sum_{k=1}^K \frac{\sum_i V_i \omega^k P_{ij}^k Q_i^g}{N_j^* \sigma_t^k + \Sigma_{t,j}^{+,g}}} \quad (2.86)$$

On remarque que le terme de probabilité de collision P_{ij}^k doit être calculé pour chaque sous-groupe k dans chaque groupe g dans lequel les sections sont autoprotégées. De plus, le terme de source Q_i^g est nécessaire et calculé lors des itérations de puissance dans le calcul de flux principal. Avec le formalisme ECCO, la factorisation de Livolant-Jeanpierre n'est pas utilisée, de sorte que les calculs d'autoprotection et de flux ne sont pas découplés. Une itération entre le calcul de flux et l'autoprotection est donc nécessaire jusqu'à la convergence des sections efficaces (voir figure 2.7). La méthode des sous-groupes développée dans le code ECCO est donc une méthode coûteuse, mais qui a l'avantage d'avoir peu d'hypothèses simplificatrices, ce qui permet son utilisation dans de nombreux cas.

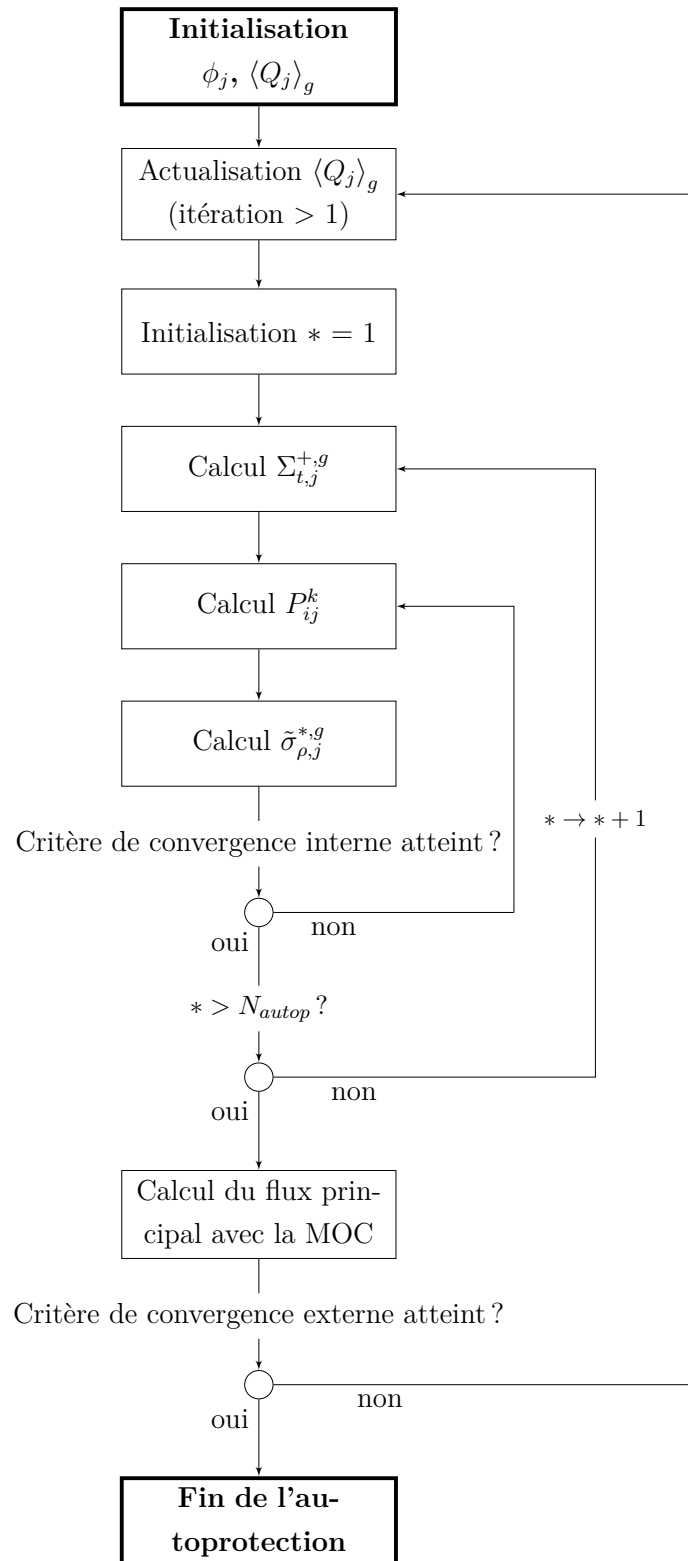


Figure 2.7 Algorithme d'itération entre le calcul de flux principal et l'autoprotection des résonances avec la méthode des sous-groupes d'ECCO

Méthode de Tone

La méthode de Tone a été développée par Tatsuzo Tone [26] dans le cadre de l'analyse des réacteurs rapides et implémentée dans APOLLO3 par Li Mao [24]. Elle repose sur l'hypothèse de l'homogénéité de la source dans chaque groupe g et région i ($Q_i(u) \approx Q_i^g$). De plus, on considère que le flux $\phi_{ij}(u)$, dans une région j dû aux neutrons en provenance d'une région i , est proportionnel au flux multigroupe ϕ_{ij}^g associé. On définit alors le coefficient de proportionnalité $\alpha_j(u)$ qui ne dépend que de la léthargie u et de la zone j tel que :

$$\phi_{ij}(u) \approx \alpha_j(u) \frac{V_i}{V_j} \frac{P_{ij}^g}{\Sigma_{t,j}^g} Q_i^g = \alpha_j(u) \phi_{ij}^g \quad (2.87)$$

En utilisant les relations de réciprocité et de conservation des P_{ij} (équations 2.42 et 2.43) et en sommant les contributions de chaque région i on obtient alors :

$$\phi_j(u) = \frac{\sum_i V_i Q_i^g P_{ij}^g}{\sum_i V_i (N_i^* \sigma_t^*(u) + \Sigma_{t,j}^{+,g}) P_{ij}^g} \quad (2.88)$$

et d'après l'équation 2.87 :

$$\alpha_j(u) = \frac{V_j \Sigma_{t,j}^g}{\sum_i V_i (N_i^* \sigma_t^*(u) + \Sigma_{t,j}^{+,g}) P_{ij}^g} \quad (2.89)$$

Tout comme pour la méthode des sous-groupes, les sections efficaces à autoprotéger sont calculées à l'aide des tables de probabilités, de sorte que :

$$\tilde{\sigma}_{\rho,j}^{*g} = \frac{\langle \sigma_\rho^* \phi_j \rangle_g}{\langle \phi_j \rangle_g} = \frac{\sum_{k=1}^K \frac{\omega^k \sigma_\rho^k}{\sum_i V_i (N_i^* \sigma_t^k + \Sigma_{t,i}^{+,g}) P_{ij}^g}}{\sum_{k=1}^K \frac{\omega^k}{\sum_i V_i (N_i^* \sigma_t^k + \Sigma_{t,i}^{+,g}) P_{ij}^g}} \quad (2.90)$$

On remarque cette fois-ci que le terme P_{ij}^g n'est à calculer qu'une seule fois par groupe g . De plus, l'itération sur les sources Q_i^g n'est pas nécessaire, ce qui en fait une méthode plus rapide que la méthode des sous-groupes présentée précédemment. Nous verrons par la suite comment la méthode de Tone, tel qu'elle est implémentée dans le code APOLLO3, nous a permis d'accélérer le calcul à l'étape réseau.

2.4.4 Modèles de fuites

Le calcul d'assemblage étant réalisé en réseau infini il ne reproduit pas le cas réel pour lequel les neutrons peuvent sortir du domaine de calcul. On applique donc un modèle de fuite pour le calcul des bibliothèques de sortie en vue du calcul cœur. Si l'environnement dans lequel l'assemblage considéré est placé est inconnu lors de l'étape réseau, on fait l'hypothèse d'un régime critique. Le principe est donc d'imposer un facteur de multiplication effectif k_{eff} unitaire et de calculer un coefficient de fuite d_g et un laplacien critique B^2 à l'aide d'un modèle B_1 homogène sur le maillage à 383 groupes.

On considère l'assemblage comme un domaine fermé par des conditions de réflexion ou de symétrie aux frontières. Le flux est représenté par le produit d'une contribution macroscopique $\psi(\mathbf{r})$ et d'une contribution microscopique $\varphi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega})$:

$$\phi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) = \psi(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) \quad (2.91)$$

$\psi(\mathbf{r})$ est associé à la forme du flux global au sein du réacteur tandis que $\varphi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega})$ représente les variations microscopiques intervenant au sein de chaque assemblage. Le modèle du mode fondamental consiste à supposer que le flux macroscopique est solution d'une équation de Laplace :

$$\nabla^2\phi(\mathbf{r}) + B^2\phi(\mathbf{r}) = 0 \quad (2.92)$$

Le coefficient B^2 est réel et calculé de sorte à obtenir une forme du flux macroscopique $\phi(\mathbf{r})$ similaire à la forme du flux au sein du réacteur complet, tel que $k_{eff} = 1$. La géométrie et la composition du cœur étant inconnues lors de l'étape réseau une solution générale $\psi(\mathbf{r})$ est utilisée pour le calcul de fuite :

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_0 e^{i\mathbf{B}\cdot\mathbf{r}} \quad (2.93)$$

où \mathbf{B} est défini afin que $B^2 = \mathbf{B} \cdot \mathbf{B}$. On obtient donc avec $\varphi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega})$ complexe :

$$\phi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) = \varphi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) e^{i\mathbf{B}\cdot\mathbf{r}} \quad (2.94)$$

Plusieurs modèles sont possibles pour déterminer le vecteur \mathbf{B} , chacun reposant sur différentes hypothèses.

Modèle B_1 homogène

Les modèles B_N reposent sur le développement en polynômes de Legendre à l'ordre N de la section efficace différentielle de diffusion $\Sigma_s(E \leftarrow E', \boldsymbol{\Omega} \leftarrow \boldsymbol{\Omega}')$. Le modèle B_1 homogène

repose sur un développement au premier ordre et sur une modélisation homogène de la cellule ou de l'assemblage sur lequel le calcul est effectué de sorte que $\varphi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) = \varphi(E, \boldsymbol{\Omega})$:

$$\phi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) = \varphi(E, \boldsymbol{\Omega})e^{i\mathbf{B}\cdot\mathbf{r}} \quad (2.95)$$

En utilisant la factorisation de l'équation 2.95 dans l'équation de transport propre à une géométrie infinie homogène, on obtient :

$$\begin{aligned} [\Sigma(E) + i\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\Omega}] \varphi(E, \boldsymbol{\Omega}) &= \int_{4\pi} d^2\Omega' \int_0^\infty dE' \Sigma_s(E \leftarrow E', \boldsymbol{\Omega} \leftarrow \boldsymbol{\Omega}') \varphi(E', \boldsymbol{\Omega}') \\ &+ \frac{\chi(E)}{4\pi k_{eff}} \int_0^\infty dE' \nu(E') \Sigma_f(E') \varphi(E') \end{aligned} \quad (2.96)$$

Les équations du modèle B_1 sont alors :

$$\begin{aligned} [\Sigma(E) + d(B, E) B^2] \varphi(E) &= \int_0^\infty dE' \Sigma_{s0}(E \leftarrow E') \varphi(E') \\ &+ \frac{\chi(E)}{K_{eff}} \int_0^\infty dE' \nu(E') \Sigma_f(E') \varphi(E') \end{aligned} \quad (2.97)$$

$$d(B, E) = \frac{1}{3\gamma [B, \Sigma(E)] \Sigma(E)} \left\{ 1 + 3 \int_0^\infty dE' \Sigma_{s1}(E \leftarrow E') d(B, E') \frac{\varphi(E')}{\varphi(E)} \right\} \quad (2.98)$$

Avec :

$$\gamma(B, E) = \frac{1}{3\Sigma} \frac{\alpha(B, \Sigma)}{\beta(B, \Sigma)} \quad (2.99)$$

$$\alpha(B, \Sigma) = \begin{cases} \frac{1}{B} \tan^{-1} \frac{B}{\Sigma} & \text{si } B^2 > 0; \\ \frac{1}{\Sigma} - \frac{B^2}{3\Sigma^3} + \frac{B^4}{5\Sigma^5} - \frac{B^6}{7\Sigma^7} + \dots & \text{si } B^2 \simeq 0; \\ \frac{1}{2\Im(B)} \ln\left(\frac{\Sigma + \Im(B)}{\Sigma - \Im(B)}\right) & \text{si } B^2 < 0. \end{cases} \quad (2.100)$$

$$\beta(B, \Sigma) = \frac{1}{B^2} [1 - \alpha(B, \Sigma)\Sigma] \quad (2.101)$$

Pour plus de détails, le lecteur peut se référer à l'ouvrage de Hébert [4], section 4.3.2.

Modèle B hétérogène

Le modèle hétérogène suppose une géométrie hétérogène et donc la dépendance spatiale du flux microscopique $\varphi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega})$. Ce modèle de fuite a pour intérêt de prendre en compte les hétérogénéités au sein de la géométrie du calcul pour une meilleure représentation des fuites, notamment dans le cas d'assemblages présentant des poisons absorbants (voir les travaux de Vidal sur les réacteurs rapides [27]).

Pour plus de détails sur le modèle B_1 hétérogène tel qu'implémenté dans le code APOLLO3, voir les travaux de Rimpault [28] et Vidal [25].

2.4.5 Homogénéisation et condensation

Lors de cette étape, les sections efficaces autoprotégées sont condensées en énergie et homogénéisées spatialement en préparation de leur utilisation pour le calcul de cœur. Le principe est de regrouper les micro régions d'indice i en macro-régions d'indice I et de condenser le maillage énergétique des groupes d'indice g en un maillage plus grossier de groupes G (attention, ne pas confondre I et G définis ici avec le nombre de régions totales dans la géométrie et le nombre total de groupes du maillage en énergie définis plus tôt). On pose alors les relations suivantes pour le taux de collision, le taux de diffusion, le taux de production et le flux condensés et homogénéisés :

$$\tau_{I,G}^* = \sum_{g \in G} \sum_{i \in I} V_i \Sigma_{i,g} \phi_{i,g} \quad (2.102)$$

$$\tau_{sl,I,G \leftarrow G'}^* = \sum_{g' \in G'} \sum_{g \in G} \sum_{i \in I} V_i \Sigma_{sl,i,g \leftarrow g'} \phi_{i,g'} \quad (2.103)$$

$$\tau_{f,I,G}^* = \sum_{g \in G} \sum_{i \in I} V_i \nu \Sigma_{f,i,g} \phi_{i,g} \quad (2.104)$$

$$F_{I,G}^* = \sum_{g \in G} \sum_{i \in I} V_i \phi_{i,g} \quad (2.105)$$

Les sections efficaces macroscopiques associées aux macro-régions et macro-groupes sont alors calculées par :

$$\Sigma_G(\mathbf{r}) = \frac{\tau_{I,G}^*}{F_{I,G}^*} \quad (2.106)$$

$$\Sigma_{sl,G \leftarrow G'}(\mathbf{r}) = \frac{\tau_{sl,I,G \leftarrow G'}^*}{F_{I,G}^*} \quad (2.107)$$

$$\nu \Sigma_{f,G}(\mathbf{r}) = \frac{\tau_{f,I,G}^*}{F_{I,G}^*} \quad (2.108)$$

Ces relations permettent d'obtenir des sections efficaces macroscopiques homogénéisées spatialement sur les macro-régions du calcul de cœur, et condensées en macro-groupes en énergie, utilisées dans le calcul de cœur. Toutefois, elles ne permettent pas strictement de conserver les taux de réactions. En effet, rien n'assure que le flux calculé sur les macro-régions après l'application des formules précédentes soit égal à la somme des flux calculés sur les micro régions initiales. Des méthodes d'équivalence ([5] section 17.6) peuvent alors être mises en place pour corriger les sections homogénéisées et condensées (pour plus d'information, se

référer à l'ouvrage de Hébert [4], section 4.4.2, pour la méthode SPH).

Une autre approche consiste à développer le flux angulaire selon les harmoniques sphériques à l'ordre N et d'homogénéiser les moments des sections efficaces de diffusion par les moments du flux associés. Ainsi on obtient [27] :

$$\tilde{\Sigma}_{sl,I}^{m,G \leftarrow G'} = \frac{\sum_{i \in I} \sum_{g' \in G'} \sum_{g \in G} \sum_{sl,i}^{g \leftarrow g'} \phi_{l,i}^{m,g'}}{\sum_{i \in I} \sum_{g' \in G'} \phi_{l,i}^{m,g'}} - \delta_{G,G'} (\Sigma_{tl,I}^{m,G} - \Sigma_{t,I}^G) \quad (2.109)$$

avec :

$$\phi_i^g(\Omega) \approx \sum_{l=0}^N \frac{2l+1}{4\pi} \sum_{m=-l}^l \phi_{l,i}^{m,g} R_l^m(\Omega) \quad (2.110)$$

Le terme en rouge dans l'équation 2.109 correspond à une correction sur les moments d'ordres supérieurs à 0 de la section de diffusion. Cette correction découle de l'homogénéisation de la section totale par les moments du flux et permet une meilleure prise en compte de l'anisotropie du flux lors de l'étape de condensation homogénéisation. La section de transfert est toujours dépendante du rang azimutal m . On procède donc à une minimisation par la méthode des moindres carrés afin de s'affranchir de cette dépendance [25] tel que :

$$\tilde{\Sigma}_{sl,I}^{G \leftarrow G'} = \frac{\sum_{m=-l}^{+l} \phi_{l,I}^{m,G'} \sum_{i \in I} \sum_{g' \in G'} \sum_{g \in G} \sum_{sl,i}^{g \leftarrow g'} \phi_{l,i}^{m,g'}}{\sum_{m=-l}^{+l} (\phi_{l,I}^{m,G'})^2} - \delta_{G,G'} (\tilde{\Sigma}_{tl,I}^G - \Sigma_{t,I}^G) \quad (2.111)$$

avec :

$$\tilde{\Sigma}_{tl,I}^G = \frac{\sum_{m=-l}^{+l} \phi_{l,I}^{m,G} \sum_{i \in I} \sum_{g \in G} \sum_{t,i}^g \phi_{l,i}^{m,g}}{\sum_{m=-l}^{+l} (\phi_{l,I}^{m,G})^2} \quad (2.112)$$

Les autres sections efficaces restent homogénéisées comme présenté précédemment.

2.5 Calcul de cœur

Le calcul sur un cœur complet de réacteur en une seule étape à l'aide de méthodes déterministes est encore très coûteux. Avec la performance actuelle des ordinateurs, l'étape du calcul réseau est essentielle dans le schéma de calcul présenté dans les chapitres suivants. Dans le calcul de cœur qui suit le calcul réseau, on considère un domaine géométrique constitué des macro-régions définies lors de l'homogénéisation. Le maillage en énergie hérite lui aussi de la condensation effectuée lors de l'étape précédente. Le calcul peut être réalisé en théorie du

transport ou bien en faisant l'approximation de la diffusion. Lors de ses travaux, Vidal [25] s'est intéressé à la modélisation d'un cœur en théorie du transport à l'aide des méthodes des caractéristiques et S_N .

Concernant le choix des macro-régions pour l'homogénéisation dans le cas d'un REP, plusieurs descriptions d'un assemblage sont possibles. Généralement, deux approches sont utilisées, la description de l'assemblage comme une pâte homogène ou alors l'homogénéisation cellule par cellule, pour laquelle le crayon de combustible est homogénéisé avec le modérateur qui l'entoure, mais où chaque cellule est différenciée des autres.

Les sections efficaces des matériaux constituant le réflecteur doivent aussi être calculées en préparation du calcul de cœur. La méthode généralement mise en place consiste à effectuer un calcul type réseau d'une traverse dans laquelle on place des assemblages, ou cellules de combustible, sur une largeur équivalente à un ou plusieurs assemblages pour modéliser la partie nourricière qui produit un flux neutronique bombardant les matériaux du réflecteur (voir figure 2.8). Une condition de vide est définie à la frontière extérieure du réflecteur. Les sections efficaces sont alors autoprotégées, homogénéisées et condensées, comme pour un calcul d'assemblage, et utilisées pour définir les matériaux réflecteurs dans le calcul de cœur.



Figure 2.8 Découpe d'une traverse de réflecteur avec six cellules de combustible

2.6 Approche stochastique

Une autre approche consiste à résoudre l'équation de transport par des méthodes stochastiques. C'est l'approche de Monte-Carlo [29]. Ces méthodes permettent une modélisation quasi exacte du problème et sont donc souvent utilisées comme calcul de référence pour comparaison et validation des méthodes déterministes.

Le principe de cette approche repose sur l'utilisation de tirages aléatoires pour simuler l'évolution d'un neutron dans les domaines géométrique et énergétique de calcul. On tire aléatoirement les variables de position et de direction initiales du neutron au début de son *histoire*. Connaissant la section efficace totale d'interaction du neutron avec le milieu qu'il traverse, on peut déterminer la probabilité que le neutron a d'interagir avec le milieu. Ainsi, un nouveau

tirage permet de déterminer la distance d parcourue par le neutron avant interaction (les neutrons parcourant l'espace en ligne droite entre deux collisions, il nous suffit de connaître leur position initiale, leur direction et la distance parcourue pour suivre sa trajectoire entre deux collisions). Lorsque le neutron effectue une collision avec le milieu, on détermine quelle réaction nucléaire intervient grâce à un nouveau tirage aléatoire et la connaissance des sections efficaces microscopiques partielles σ_ρ . La probabilité pour qu'une réaction ρ se produise lors d'une collision est alors :

$$P(\rho) = \frac{\sigma_\rho}{\sigma} \quad (2.113)$$

où σ est la section efficace microscopique totale. L'histoire du neutron se termine lorsqu'il est absorbé ou quitte le domaine géométrique de calcul.

L'incertitude associée à ce genre de calculs est statistique, ainsi pour réduire les incertitudes sur les grandeurs calculées (le flux essentiellement) on procède à un grand nombre de simulations d'histoires de neutrons. L'approche Monte-Carlo étant très coûteuse, elle est généralement utilisée pour les calculs de référence à des fins de validation des calculs déterministes. Différents codes Monte-Carlo sont utilisés à travers le monde, le plus célèbre étant MCNP [30]. D'autres codes parmi lesquels SERPENT-2 [31] ou encore TRIPOLI-4 [32], utilisé dans le cadre de ce projet, permettent l'étude du transport des neutrons ou des photons gamma.

CHAPITRE 3 CONFIGURATION DU CALCUL

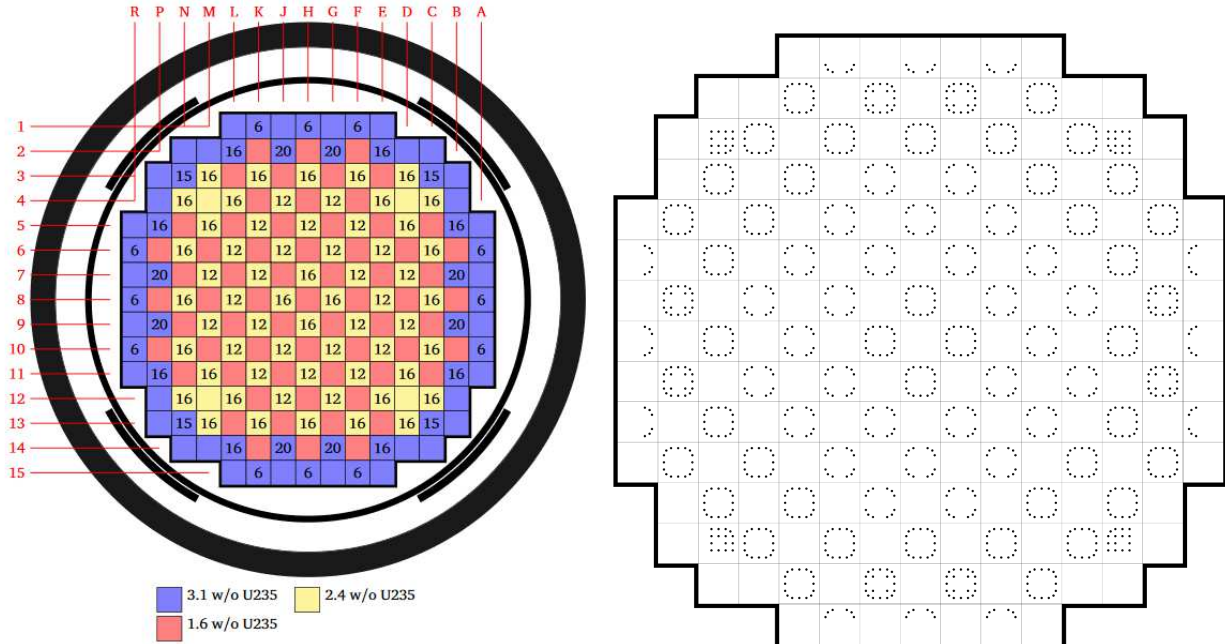
3.1 BEAVRS

Le réacteur décrit dans le benchmark [2] est un REP Westinghouse d'une puissance thermique de $3411MW_{th}$. Ce mémoire présente les résultats obtenus en configuration *Hot Zero Power* (HZP) pour le premier cycle de fonctionnement.

Le réacteur présenté dans BEAVRS possède des assemblages avec des barreaux de poison absorbant (BA : *Burnable Absorber en anglais*) fait de verre borosilicaté. Ces absorbants restent placés dans le cœur et ne sont pas déplacés pendant un cycle de fonctionnement contrairement aux barres de contrôles en $Ag - In - Cd$ (*AIC*) ou B_4C , leur position est indiquée figure 3.1. Dans la suite de ce mémoire, les dénominations des différentes configurations d'assemblages seront celles utilisées dans les spécifications du benchmark. Ainsi *0BA* correspond à un assemblage sans barreau absorbant, *nBA* correspond à un assemblage avec n barreaux absorbants en verre borosilicaté. Enfin les configurations *AIC* et *B4C* correspondent respectivement à des assemblages avec barres de contrôle en *AIC* et B_4C insérées dans les tubes guides.

Les assemblages modélisés sont majoritairement symétriques, de sorte que l'on peut se contenter de représenter un huitième d'assemblage pour le calcul déterministe (voir figure 3.2), sous condition de choisir les conditions aux frontières appropriées. Les assemblages comportant 6 et 15 poisons absorbants (configurations 6BA et 15BA) seront eux représentés sous la forme de moitié d'assemblage, car ils ne présentent pas cette première symétrie (voir figures 3.3 et 3.4).

Le maintien des éléments d'un assemblage se fait à l'aide de grilles disposées autour de chaque assemblage à 8 endroits différents. Ces grilles sont composées d'un cerclage externe à l'assemblage, et de structures internes disposées autour de chaque cellule. Les deux grilles aux extrémités sont en SS304 (acier inoxydable) et les structures d'espacement internes à l'assemblage sont en inconel alors que les 6 grilles intermédiaires et leurs structures d'espacement internes sont en zircaloy4. Pour le calcul stochastique, les grilles sont représentées telles que décrites dans la documentation de BEAVRS (section 2.2.2.2 de [2], voir les figures 3.5 et 3.6). Pour le calcul déterministe, les grilles d'espacement internes sont modélisées par des cylindres dont le rayon extérieur est proche du demi-pas d'une cellule sans être tangent aux bords de la cellule (afin d'éviter les problèmes numériques) et dont le rayon intérieur est choisi afin de conserver la quantité de matière (figure 3.7), d'après les recommandations de Dudognon [33].



(a) Position des assemblages dans le cœur.
La couleur indique l'enrichissement en ^{235}U ,
le nombre inscrit indique le nombre d'absorbants
(BA) dans l'assemblage

(b) Position exacte des absorbtants (BA) dans le
cœur

Figure 3.1 Position des absorbtants (BA) dans le cœur (cycle 1) [2]

Les dimensions présentées dans BEAVRS sont prises à froid et ne prennent pas en compte la dilatation thermique des matériaux dans des conditions de fonctionnement du réacteur. Les dimensions données ont donc été soumises à des dilations suivant les recommandations du projet CASL [34] avant d'effectuer les calculs avec APOLLO3 et TRIPOLI4.

3.2 Schéma de calcul

Suite aux travaux de Canbakan [12], la méthode des sous-groupes a été retenue pour l'autoprotection lors de l'étape du calcul réseau. Différentes options d'autoprotection ont été étudiées et sont présentées dans ce mémoire : utilisation de la méthode des sous-groupes d'ECCO [23] seule, autoprotection des mélanges pour certains isotopes (uranium et argent), utilisation de la méthode de Tone [24] dans certains groupes énergétiques pour accélérer le calcul.

Le calcul des p_{ij} pour l'autoprotection est effectué avec la méthode des probabilités de collision implémentée dans le solveur TDT [35]. Le solveur TDT est un algorithme de calcul des

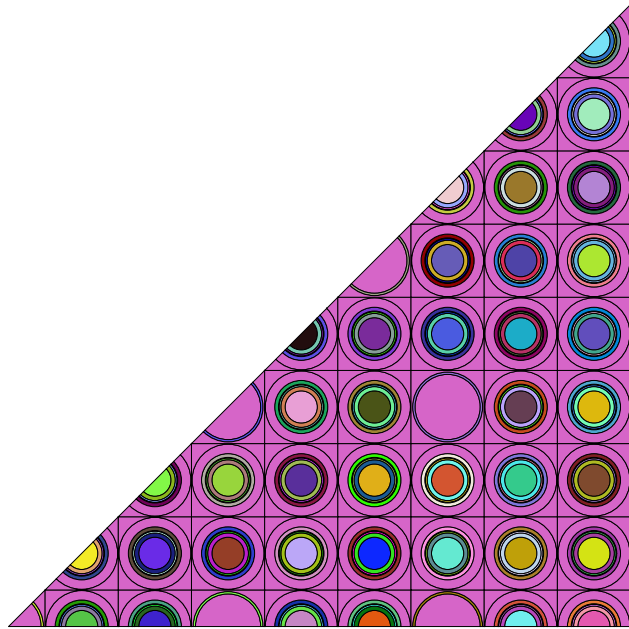


Figure 3.2 Géométrie d'autoprotection d'un huitième d'assemblage configuration 0BA

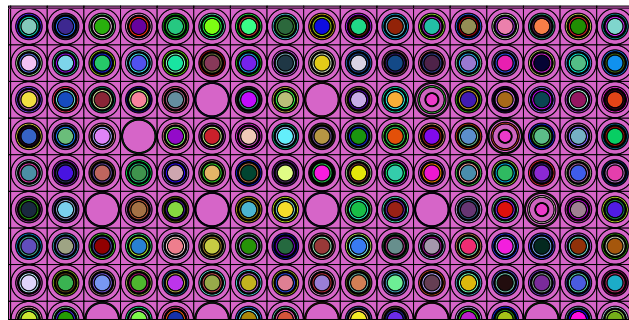


Figure 3.3 Géométrie d'autoprotection d'un demi-assemblage configuration 6BA

trajectoires rectilignes de neutrons à travers le domaine géométrique (algorithme de tracking) suivi d'un algorithme de calcul du flux neutronique par la méthode PIJ ou par la méthode MOC. Pour le calcul principal de flux lors de l'étape réseau, il est effectué avec la Méthode des Caractéristiques (MOC) développée dans le solveur TDT [36]. Le maillage énergétique est le maillage REL383 [25] échantillonné en énergie à 383 groupes.

La méthode Sn implémentée dans le solveur MINARET [7] est employée pour le calcul de flux lors du calcul cœur.

Une condensation à 20 groupes [37, 10] en énergie est effectuée à l'issue de l'étape réseau, en préparation du calcul de cœur. Lors de cette étape d'homogénéisation-condensation, deux homogénéisations géométriques ont été envisagées, une homogénéisation au niveau de la cel-

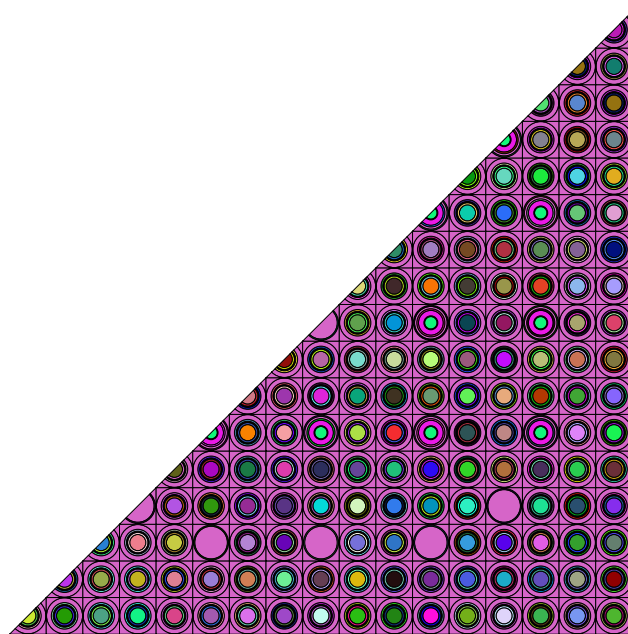


Figure 3.4 Géométrie d'autoprotection d'un demi-assemblage configuration 15BA

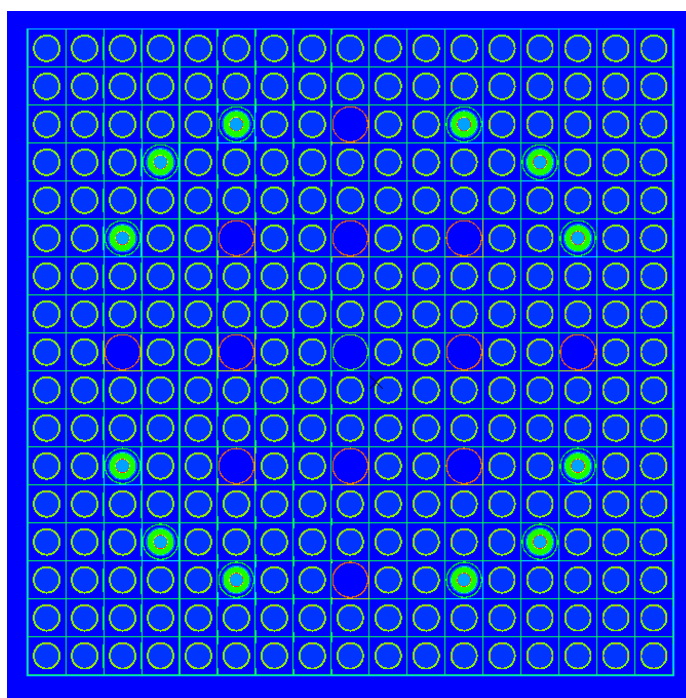


Figure 3.5 Géométrie d'assemblage 12BA pour le calcul avec TRIPOLI4

lule (semi-hétérogène, figure 3.8a) et une homogénéisation gardant les crayons de combustible différenciés des autres matériaux dans chaque cellule (hétérogène, figure 3.8b).

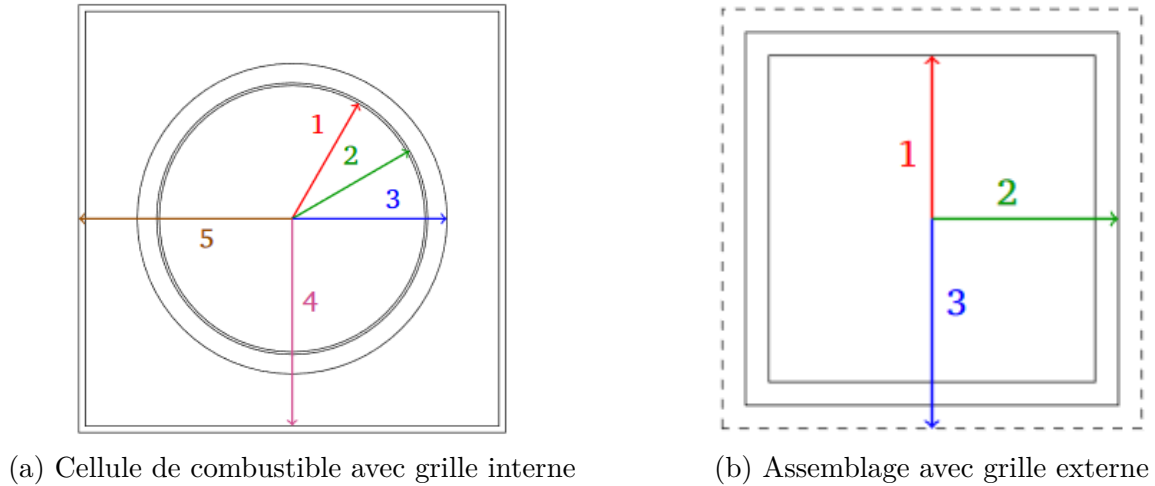


Figure 3.6 Représentation des grilles de maintien des assemblages dans BEAVRS [2]

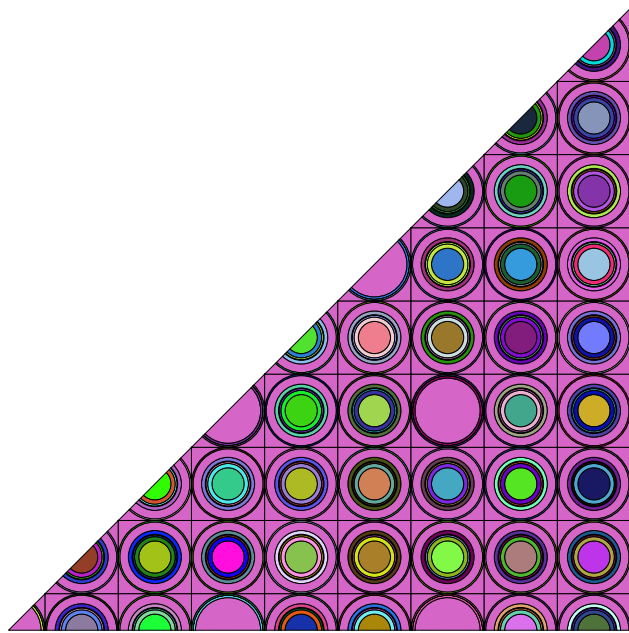
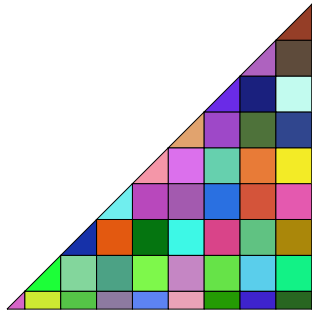
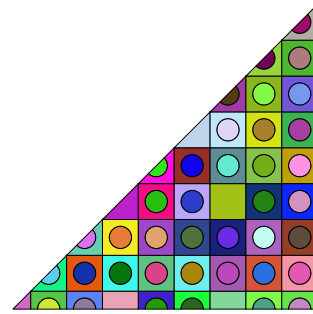


Figure 3.7 Géométrie d'autoprotection d'un huitième d'assemblage configuration 0BA avec grilles en zircaloy4

Deux méthodes sont utilisables, une homogénéisation par le flux et une homogénéisation par les moments du flux. Suite aux travaux de Vidal sur les réacteurs à neutrons rapides [27], l'utilisation d'une méthode d'homogénéisation par les moments du flux est utilisée dans le cadre de ce projet. Concernant le modèle de fuite employé, il s'agit d'un modèle B_1 homogène. Toutefois, des études sur l'utilisation du modèle hétérogène sont envisagées pour le cas des réacteurs à eau légère.



(a) Cellule par cellule (semi-hétérogène)



(b) Crayon par crayon (hétérogène)

Figure 3.8 Homogénéisation d'un huitième d'assemblage

L'intérêt du calcul de cœur en trois dimensions en théorie du transport, en configuration hétérogène ou semi-hétérogène, est de pouvoir valider la capacité du code APOLLO3 à réaliser un calcul fin du flux, pouvant mettre en évidence les effets des hétérogénéités de la géométrie (modélisation des grilles de maintien, des trous d'eau et des absorbants par exemple) sur l'allure du flux.

CHAPITRE 4 VALIDATION DU CALCUL RÉSEAU À TEMPS 0

Les options du calcul réseau ont été validées pour la configuration HZP du premier cycle présenté dans le benchmark BEAVRS. Trois jeux d'options ont été testés pour l'autoprotection des résonances. Concernant la méthode utilisée pour le calcul de flux, la méthode des caractéristiques constante du solveur TDT-MOC [36] est utilisée avec un développement anisotrope à l'ordre 3 de la loi de choc [38, 12]. Le calcul de flux interne à l'autoprotection est lui réalisé avec la méthode des probabilités de première collision (solveur TDT [35]), avec un développement à l'ordre 0 (isotrope) de la loi de choc sans correction de transport.

Les isotopes autoprotégés sont : ^{235}U et ^{238}U pour le combustible, ^{107}Ag , ^{109}Ag , ^{110}Cd , ^{113}Cd et ^{115}In pour les barres de contrôle, ^{90}Zr , ^{91}Zr , ^{92}Zr , ^{94}Zr , ^{96}Zr , ^{56}Fe et ^{52}Cr pour les matériaux de structure. Dans la suite du mémoire, les différents cas étudiés seront intitulés :

- **SG :**
 - méthode des sous-groupes pour l'autoprotection
 - tous les isotopes listés précédemment sont autoprotégés entre les groupes 1 et 194
- **SG + mélange :**
 - méthode des sous-groupes pour l'autoprotection
 - ^{235}U et ^{238}U autoprotégés au sein d'un mélange entre les groupes 1 et 285
 - ^{107}Ag et ^{109}Ag autoprotégés au sein d'un mélange entre les groupes 1 et 194
 - ^{115}In autoprotégé entre les groupes 1 et 250
 - les autres isotopes listés précédemment sont autoprotégés entre les groupes 1 et 194
- **SG + Tone :**
 - tous les isotopes sont autoprotégés isolement des autres à l'aide de la méthode de Tone entre les groupes 1 et 74
 - utilisation de la méthode des sous-groupes à partir du groupe 75 suivant les spécificités du cas **SG + mélange**

Le reste des options utilisées lors de l'étape réseau (modèle de fuite et homogénéisation pour le calcul de cœur) seront présentées au chapitre suivant. Les résultats obtenus avec APOLLO3 pour les différentes configurations sont comparés aux résultats obtenus avec TRIPOLI4.

Dans la suite de ce mémoire, les taux de réaction et les flux calculés sont normalisés au taux

de production dans l'assemblage suivant les relations suivantes :

$$\tilde{\tau}_{AP3} = \frac{\tau_{AP3}}{\tau_{prod}} \quad (4.1)$$

$$\tilde{\tau}_{T4} = \frac{\tau_{T4}}{k_{\infty}} \quad (4.2)$$

$$\text{avec} \quad \tau_{prod} = \nu \Sigma_f \phi \quad (4.3)$$

Le taux de réaction calculé par TRIPOLI4 est divisé par le facteur de multiplication infini, car les résultats obtenus avec ce code de calcul sont normalisés à une absorption pour un neutron initialement émis.

4.1 Utilisation de la méthode des sous-groupes en mélange

D'après les travaux de Raynaud [9], la méthode des sous-groupes d'ECCO semble donner de bons résultats pour l'autoprotection en mélange de l' ^{235}U et de l' ^{238}U jusqu'à 5,53 eV, pour un motif de quelques cellules de combustible. Cette section s'intéresse donc aux résultats de l'utilisation de cette méthode sur différents assemblages neufs.

4.1.1 Assemblages UOx sans absorbant

Le facteur de multiplication infini k_{∞} rend compte des conditions de criticité d'un cœur (régime sous-critique, critique ou sur-critique). Il est donc primordial de prédire correctement ce facteur lors d'un calcul de neutronique. Toutefois, des effets de compensation peuvent apparaître et bien que le calcul d'un k_{∞} soit précis les différents taux de réaction peuvent ne pas être prédits correctement. C'est pourquoi on s'intéresse aussi aux taux de capture pour différents isotopes d'importance et pour différentes cellules d'un assemblage pour vérifier un comportement spatial correct. Le taux de fission et le flux sont aussi regardés.

Étude du k_{∞}

Dans un premier temps, on s'intéresse au $k_{\infty} = \frac{\text{neutrons à la génération } n}{\text{neutrons à la génération } n-1} = \frac{\tau_{production}}{\tau_{absorption}}$ en milieu infini. Le tableau 4.1 montre les écarts obtenus en pcm pour la valeur du k_{∞} pour les premiers cas de l'étude. On remarque une amélioration moyenne de 38 pcm grâce aux modifications apportées aux options d'autoprotection. k_{∞} est sous-estimé par rapport au calcul de référence d'environ 100 pcm. Cet ordre de grandeur correspond aux résultats obtenus par Canbakan [12] avec le code APOLLO2 pour un assemblage UOx.

Tableau 4.1 Écarts absolus (en pcm) APOLLO3-TRIPOLI4 du k_∞ pour des assemblages sans barre absorbant

Assemblage (enrichissement ^{235}U)	Écarts absolus k_∞ (pcm)	
	SG	SG + mélange
0BA (1,6%)	-147	-110
0BA (2,4%)	-142	-102
0BA (3,1%)	-164	-118

Taux d'absorption (hors fission)

Les résultats sur le taux de capture (défini ici comme le taux d'absorption hors fission) sont présentés dans cette section. Les écarts relatifs sont donnés en pourcentage par $\Delta r = \frac{\tau_{AP3} - \tau_{T4}}{\tau_{T4}} \times 100$ et les écarts absolus en pcm par $\Delta a = (\tau_{AP3} - \tau_{T4}) \times 10^5$. La comparaison entre les résultats obtenus avec APOLLO3 et ceux obtenus avec TRIPOLI4 est effectuée à différentes échelles. Tout d'abord, le taux de capture total est intégré puis analysé plus en détail par isotope et par groupe d'énergie. Pour observer l'importance d'un groupe d'énergie par rapport à un autre, le maillage à 13 groupes présenté au tableau 4.2 est utilisé pour la comparaison.

Les écarts sur le taux de capture total, présentés dans le tableau 4.3, montrent des résultats satisfaisants. Toutefois, le taux de capture total, au même titre que k_∞ , ne sont pas vraiment représentatifs des effets plus fins intervenant en réacteur. C'est pourquoi on s'intéresse aux taux de capture des isotopes de l'uranium, et en particulier de ^{238}U , qui par capture produit du ^{239}Pu , actinide majeur dans la composition du combustible irradié. Le tableau 4.4 montre un gain allant de 19 à 31 pcm sur la prédiction du taux de capture de ^{238}U pour un assemblage sans absorbant. Le taux de conversion (rapport du taux de capture de ^{238}U sur le taux d'absorption total) augmentant lorsque l'enrichissement diminue et en présence d'absorbant, il est donc primordial de bien évaluer le taux de capture de cet isotope pour un réacteur comme celui présenté dans BEAVRS, présentant de nombreux assemblages avec de faibles enrichissements et des absorbants comme le verre borosilicaté, afin de prédire avec précision l'inventaire en plutonium au long du cycle. Concernant le taux de capture de ^{235}U il y a peu de différences entre les configurations testées, le taux calculé avec APOLLO3 est presque égal au taux calculé avec la référence TRIPOLI4.

L'enrichissement en ^{235}U dans les réacteurs français étant de l'ordre de 3,5% à 4,5%, les résultats des nappes de taux de réaction et par groupe d'énergie seront présentés pour l'enrichissement 3,1% (enrichissement le plus élevé pour le premier cycle proposé dans BEAVRS).

Si l'on s'intéresse aux écarts sur le taux de capture par groupe, on remarque que les gains

Tableau 4.2 Maillage à 13 groupes pour la validation de l'autoprotection [39]

Groupe	Borne supérieure	Borne inférieure	Note
1	19,74 MeV	2,24 MeV	seuil (n, xn) pour ^{238}U (6,2 MeV), seuil de diffusion inélastique de ^{16}O (6,4 MeV), 2 ^{ème} et 3 ^{ème} chances de fission
2	2,24 MeV	498 keV	seuil de fission de ^{238}U (≈ 1 MeV), 2 ^{ème} et 3 ^{ème} résonances de ^{16}O (1 MeV et 1,3 MeV)
3	498 keV	11,14 keV	1 ^{ère} résonance de ^{16}O (434 keV), domaine non résolu pour les isotopes lourds, seuil de diffusion inélastique pour ^{238}U (45 keV)
4	11,14 keV	752 eV	limite des domaines résolus/non résolus pour ^{238}U
5	752 eV	76,2 eV	résonance du ^{91}Zr (291 eV), début du domaine résolu, résonances de ^{238}U (102 eV, 117 eV, 189 eV et 292 eV)
6	76,2 eV	40,21 eV	4 ^{ème} résonance de ^{238}U (66 eV)
7	40,21 eV	22,6 eV	3 ^{ème} résonance de ^{238}U (36,7 eV)
8	22,6 eV	19,08 eV	2 ^{ème} résonance de ^{238}U (20,9 eV)
9	19,08 eV	7,6 eV	résonances des isotopes pairs
10	7,6 eV	4,0 eV	1 ^{ère} résonance de ^{238}U
11	4,0 eV	0,625 eV	1 ^{ère} résonance du ^{240}Pu et du ^{242}Pu
12	0,625 eV	0,9 meV	1 ^{ère} résonance de ^{235}U , du ^{239}Pu et du ^{241}Pu
13	0,9 meV	0,1 meV	domaine thermique

Tableau 4.3 Écarts sur le taux de capture pour des assemblages 0BA

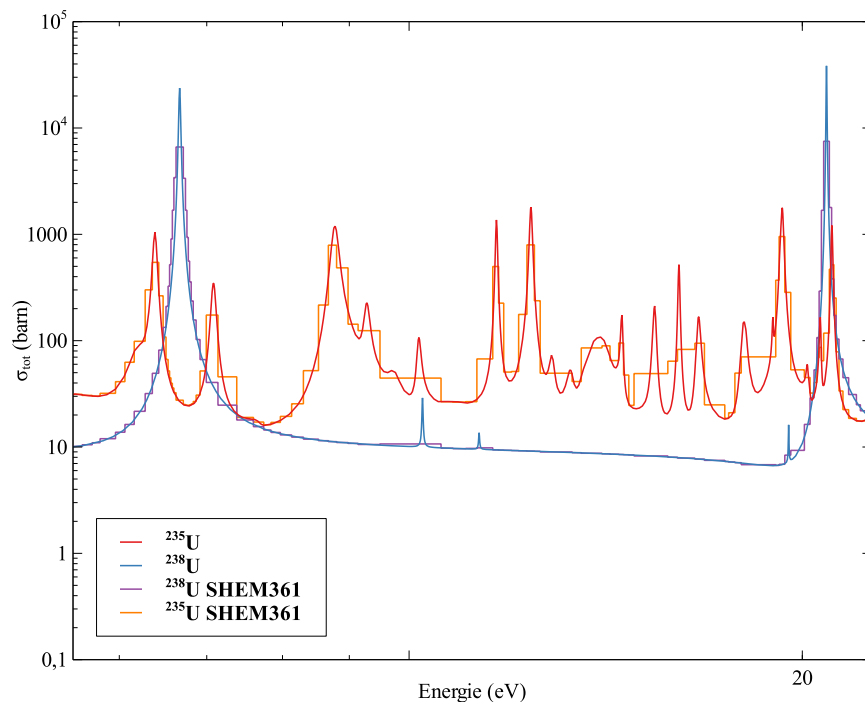
Assemblage (enrichissement ^{235}U)	Δr (%)		Δa (pcm)	
	SG	SG + mélange	SG	SG + mélange
0BA (1.6%)	0.25	0.19	22	17
0BA (2.4%)	0.24	0.17	17	12
0BA (3.1%)	0.26	0.19	16	12

constatés précédemment interviennent essentiellement dans les groupes 8 à 10 du maillage à 13 groupes (voir figure 4.3b). Une légère détérioration du taux de capture dans le groupe 5 est aussi observée et participe à l'amélioration du score total par compensation. On retrouve dans les groupes 8 et 10 les deux premières résonances de ^{238}U (voir tableau 4.2, figure

Tableau 4.4 Écarts sur le taux de capture de l'uranium pour des assemblages OBA en pcm

Assemblage (enrichissement ^{235}U)	^{235}U		^{238}U	
	SG	SG + mélange	SG	SG + mélange
OBA (1.6%)	+12	+9	+67	+31
OBA (2.4%)	+14	+8	+49	+19
OBA (3.1%)	+17	+9	+48	+21

4.1), qui n'étaient pas autoprotégées dans la configuration SG, car décrites par un maillage très fin. La figure 4.1 représente le maillage SHEM361 qui présente une structure multigroupe voisine de celle de REL383. Les écarts observés pour l' ^{238}U dans le groupe 7 (figure 4.3b) proviennent vraisemblablement d'un maillage insuffisant dans les groupes du maillage REL383 correspondants (voir figure 4.2). En effet, la troisième résonance de l' ^{238}U est une résonance diffusante. On pourrait donc s'interroger sur la validité de l'hypothèse de décorrélation de la source de ralentissement et des réactions à l'énergie E , pour la méthode des sous-groupes, dans ces groupes d'énergie.

Figure 4.1 Deux premières résonances de l' ^{238}U (groupes 8 à 10)

Les taux de capture thermique ($E \leq 0,625 \text{ eV}$) et rapide ($E > 0,625 \text{ eV}$) par cellule présentent des écarts inférieurs au pour cent sur chaque cellule du huitième d'assemblage.

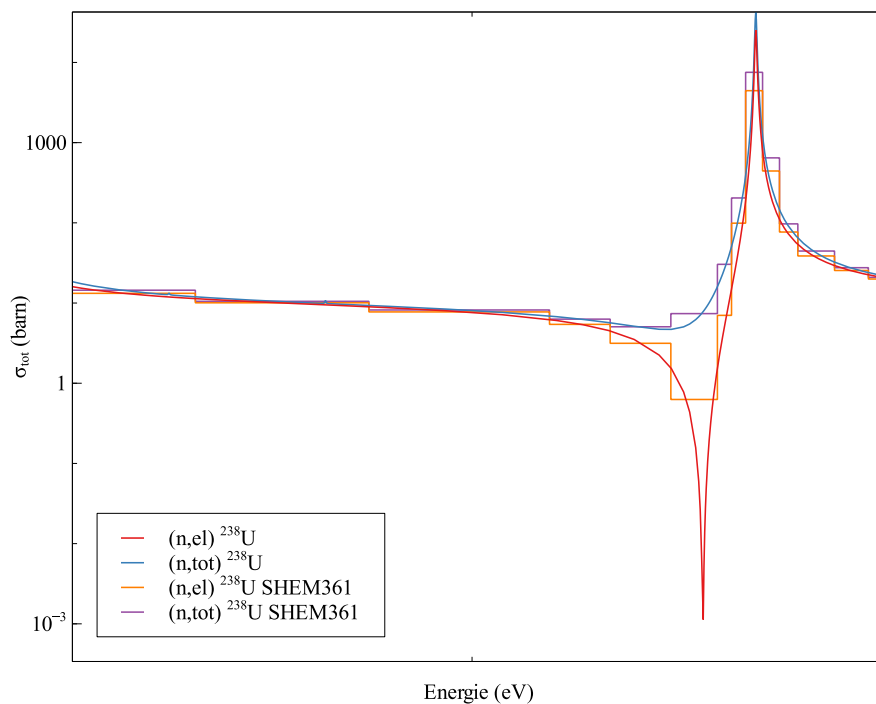


Figure 4.2 Troisième résonance de l' ^{238}U (groupes 7)

Le taux de capture rapide (figure 4.4a) est surestimé par APOLLO3, sauf dans la cellule du tube d'instrumentation central. Concernant le taux de capture thermique, les écarts sont plus faibles avec une moyenne de 0,02 % (voir figure 4.4b). Toutefois, on note une sous-estimation plus importante dans les trous d'eau que dans les cellules de combustible. Les écarts sur le taux de capture total présentés précédemment (tableau 4.3) et l'homogénéité de ces écarts sur l'assemblage (figure 4.4) montrent une bonne prédiction du taux de capture par APOLLO3 sans de forts effets de compensation spatiaux.

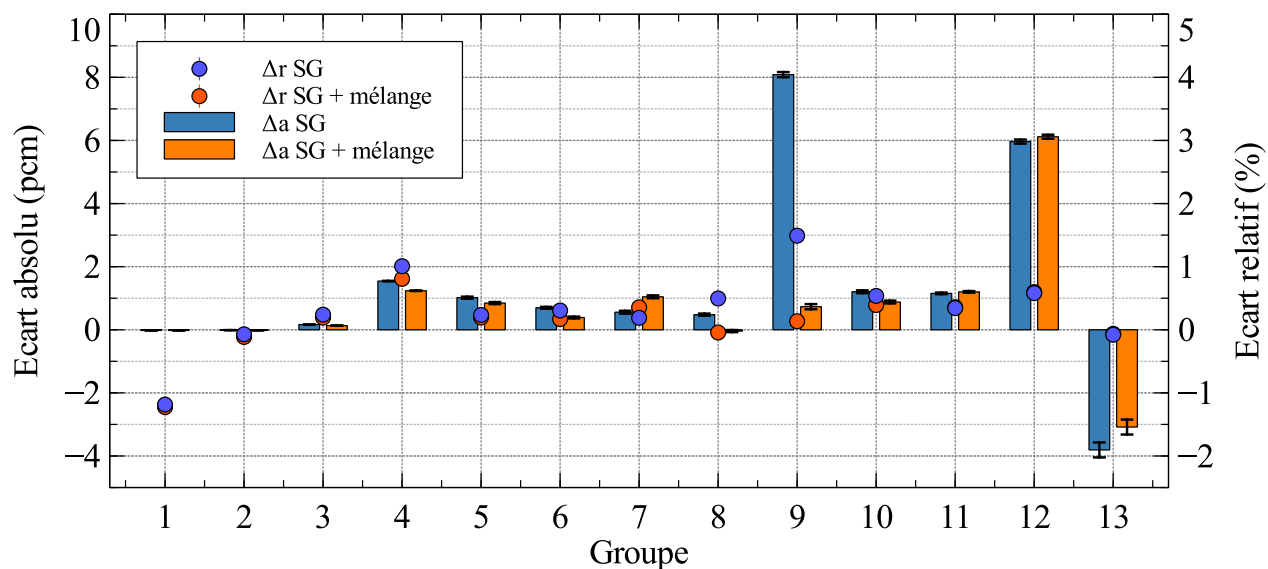
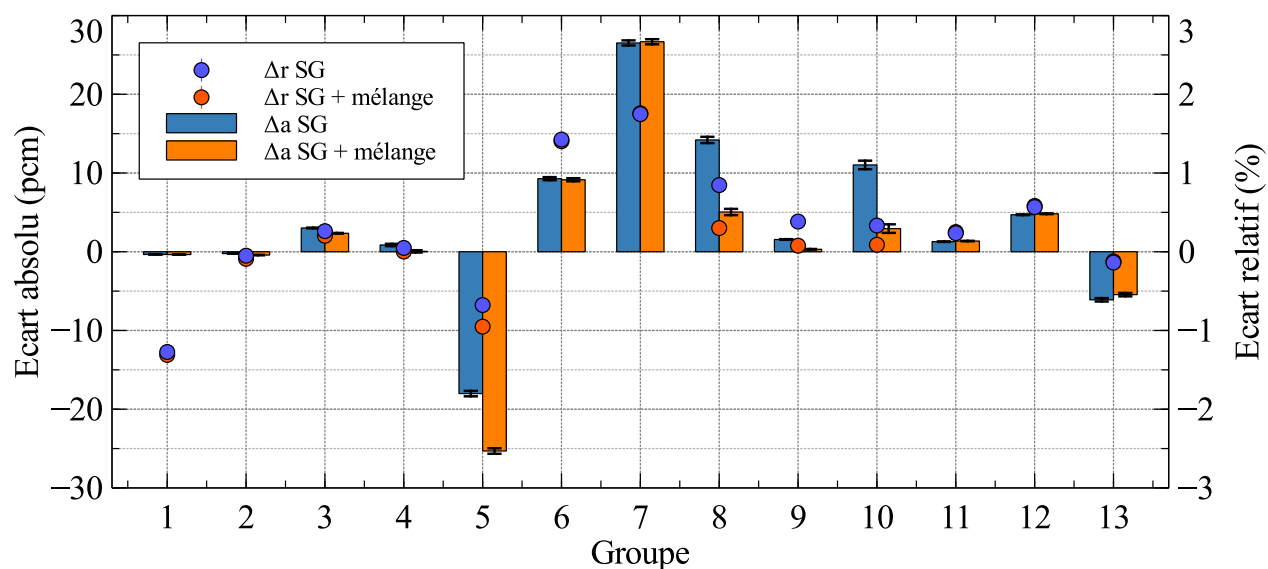
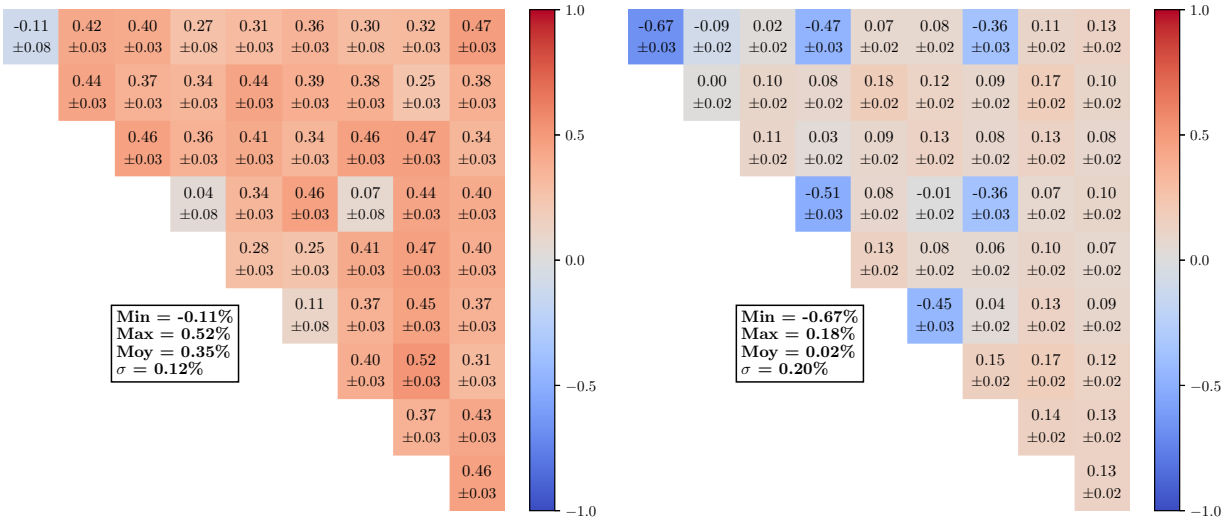
(a) ^{235}U (b) ^{238}U

Figure 4.3 Écarts pour le taux de capture de l'uranium par groupe en énergie pour un assemblage 0BA et un enrichissement de 3,1 %

Taux de fission à un groupe

Les écarts sur le taux de fission à un groupe permettent de se rendre compte de l'erreur commise sur la prédiction de la puissance issue des fissions (soit environ 95% de la puissance totale) au sein de l'assemblage.

Les écarts présentés sur la figure 4.5 illustrent une bonne prédiction du taux de fission sur



(a) Groupe rapide

(b) Groupe thermique

Figure 4.4 Écart relatif (%) sur le taux de capture à deux groupes par cellule pour un assemblage OBA et un enrichissement de 3,1 % (cas SG + mélange)

l'assemblage avec un maximum de -0.13% près du tube d'instrumentation central.

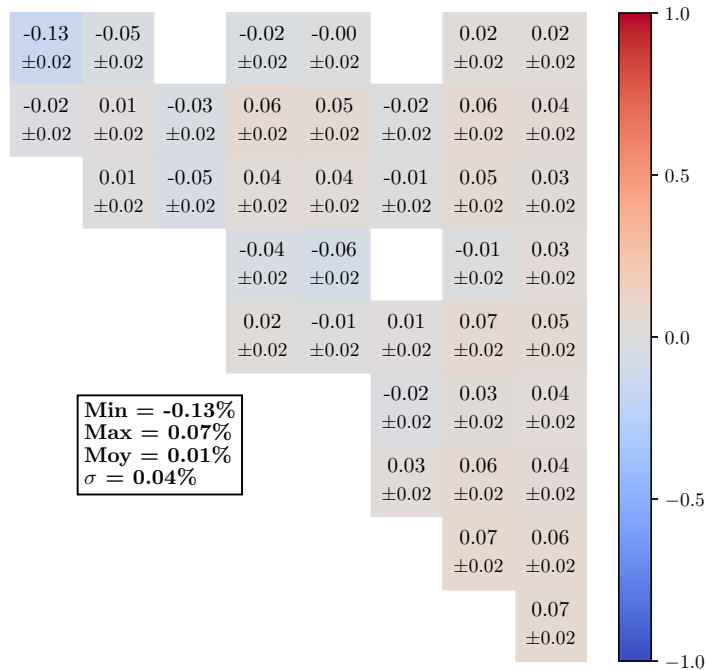


Figure 4.5 Écart relatif (%) sur le taux de fission total par cellule pour un assemblage OBA et un enrichissement de 3,1 % (cas SG + mélange)

Nappe de flux

Si l'on regarde le flux au sein de l'assemblage, on remarque que le flux rapide est très bien calculé par APOLLO3 avec un écart moyen de -0.05% et un écart-type de 0.02% (figure 4.6a). Le flux thermique quant à lui présente une sous-estimation plus importante dans les trous d'eau avec un minimum de -0.5% dans la cellule du tube d'instrumentation, ce qui reste acceptable. Cette sous-estimation correspond à la sous-estimation observée figure 4.4b pour la capture thermique.

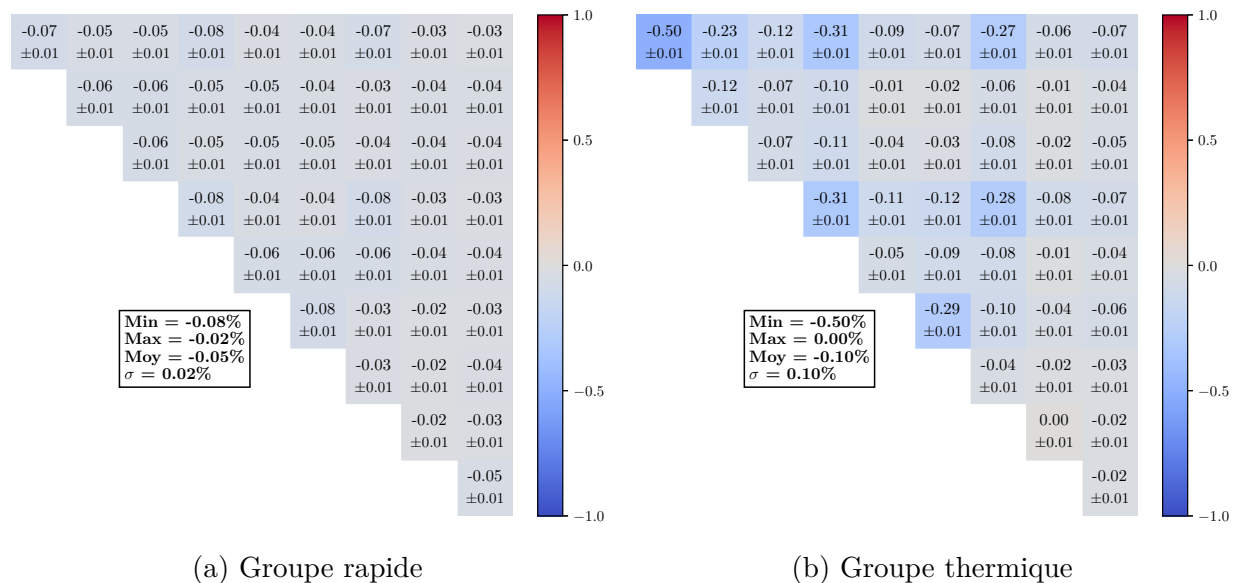


Figure 4.6 Écart relatif (%) sur le flux à deux groupes par cellule pour un assemblage 0BA et un enrichissement de 3,1 % (cas SG + mélange)

4.1.2 Assemblages AIC et B4C

Les assemblages barrés (pour lesquels on considère l'insertion totale des barres de contrôle dans les tubes guide, excepté le tube d'instrumentation central) présentent de fortes hétérogénéités (notamment sur la forme du flux, voir figure 4.7) généralement source d'erreurs plus importantes lors de calculs déterministes, il est donc utile de s'intéresser aux résultats obtenus pour de telles configurations d'assemblage.

Étude du k_∞

Les assemblages AIC sont moins bien calculés que les assemblages sans absorbant, avec une sous-estimation du k_∞ de l'ordre de 200 pcm. De même que pour les cas sans absorbant, les

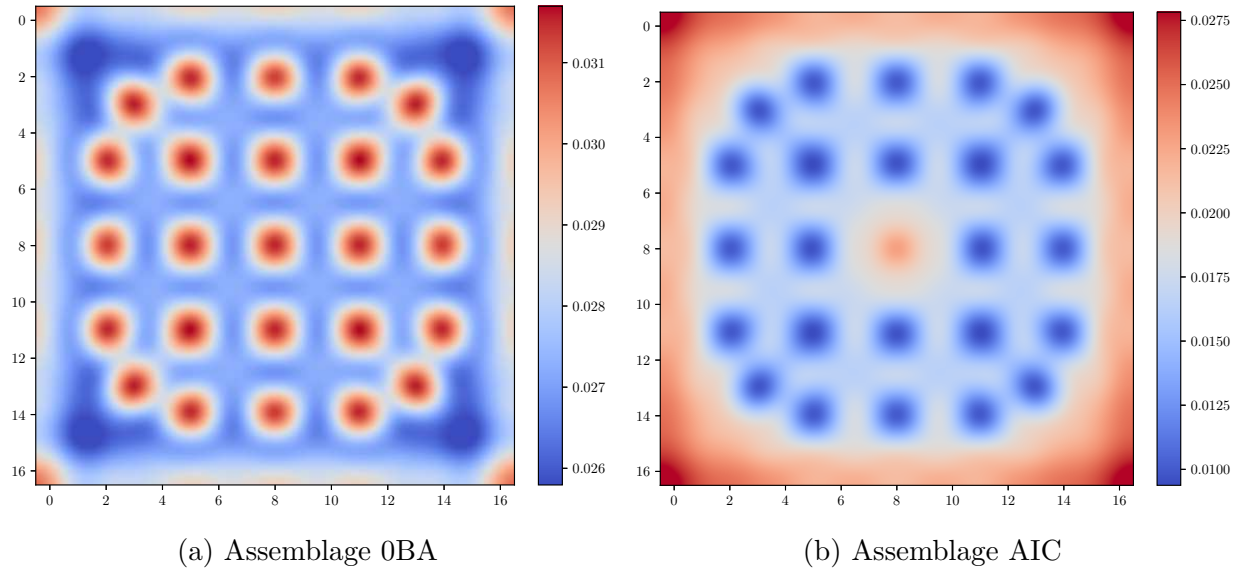


Figure 4.7 Flux thermique issu de calculs avec TRIPOLI4 pour différents assemblages (enrichissement de 3,1%)

options d'autoprotection choisies dans le cas SG + mélange ont permis d'améliorer la prédiction du k_∞ pour ces assemblages, jusqu'à un maximum de 86 pcm pour un enrichissement de 3,1%, faisant ainsi passer l'écart absolu sous le seuil de 250 pcm. Les assemblages barrés au B_4C , quant à eux, sont modélisés avec de très faibles écarts sur le facteur de multiplication infini (voir tableau 4.5).

Tableau 4.5 Écarts absolus (en pcm) APOLLO3-TRIPOLI4 du k_∞ pour des assemblages barrés

Assemblage (enrichissement ^{235}U)	Écarts absolus k_∞ (pcm)	
	SG	SG + mélange
AIC (1,6%)	-273	-206
AIC (2,4%)	-293	-214
AIC (3,1%)	-311	-225
B4C (1,6%)	-45	-24
B4C (2,4%)	-33	-9
B4C (3,1%)	-24	+3

Taux d'absorption (hors fission)

Le taux de capture total est ici aussi mieux prédit avec le jeu d'options SG + mélange. Un gain de 22 à 28 pcm est observé pour les assemblages AIC (tableau 4.6). Les résultats sur les

assemblages B4C quant à eux sont sensiblement les mêmes entre les deux cas.

Tableau 4.6 Écarts sur le taux de capture pour des assemblages AIC et B4C

Assemblage (enrichissement ^{235}U)	Δr (%)		Δa (pcm)	
	SG	SG + mélange	SG	SG + mélange
AIC (1.6%)	0.59	0.44	114	86
AIC (2.4%)	0.57	0.41	85	62
AIC (3.1%)	0.57	0.41	74	52
B4C (1.6%)	0.04	-0.00	8	-0
B4C (2.4%)	0.00	-0.04	1	-6
B4C (3.1%)	-0.02	-0.06	-3	-9

Comme illustré dans le tableau 4.7, le taux de capture de l' ^{238}U est fortement surestimé par APOLLO3. Toutefois, on constate une amélioration allant de 41 *pcm* pour les assemblages les plus enrichis, à 60 *pcm* pour les assemblages les moins enrichis (soit une amélioration relative de 40% à 44%). La capture des absorbants des barres de contrôle (tableau 4.8) est aussi globalement mieux modélisée, avec un gain moyen pour l' ^{107}Ag de 43 *pcm*, pour l' ^{109}Ag de 11 *pcm* et pour l' ^{115}In de 33 *pcm*. Le ^{110}Cd présente peu d'écart (-1 *pcm*) quel que soit l'enrichissement et le jeu d'options choisis tandis que la capture du ^{113}Cd est dégradée de quelques pcm sans que cela ne soit sensiblement moins bon.

Tableau 4.7 Écarts sur le taux de capture de l'uranium pour des assemblages AIC et B4C en pcm

Assemblage (enrichissement ^{235}U)	^{235}U		^{238}U	
	SG	SG + mélange	SG	SG + mélange
AIC (1.6%)	+17	+12	+147	+87
AIC (2.4%)	+20	+13	+107	+60
AIC (3.1%)	+24	+14	+94	+53
B4C (1.6%)	+20	+15	+100	+46
B4C (2.4%)	+22	+14	+69	+26
B4C (3.1%)	+25	+14	+55	+17

La diminution des écarts APOLLO3 - TRIPOLI4 observée précédemment intervient essentiellement dans les groupes 8 et 10 (figure 4.8b) comme pour les assemblages sans absorbant (voir figure 4.3b), soit au niveau des deux premières résonances de l' ^{238}U . Les améliorations constatées pour l'argent sont quant à elles visibles dans le groupe 5 (figure 4.9). La figure 4.10 illustre le recouvrement des résonances des deux isotopes de l'argent dans ce groupe. La

Tableau 4.8 Écarts sur le taux de capture de l'argent, de l'indium et du cadmium pour des assemblages AIC en pcm

Assemblage (enrichissement ^{235}U)	^{107}Ag		^{109}Ag	
	SG	SG + mélange	SG	SG + mélange
AIC (1.6%)	+99	+49	+57	+44
AIC (2.4%)	+79	+37	+40	+30
AIC (3.1%)	+70	+32	+35	+26

Assemblage (enrichissement ^{235}U)	^{115}In		^{110}Cd		^{113}Cd	
	SG	SG + mélange	SG	SG + mélange	SG	SG + mélange
AIC (1.6%)	+104	+65	-1	-1	+24	+29
AIC (2.4%)	+80	+48	-1	-1	+8	+13
AIC (3.1%)	+68	+40	-1	-1	+3	+7

prise en compte du mélange $^{107}Ag - ^{109}Ag$ permet donc d'obtenir de meilleurs résultats sur le taux de capture de ces deux isotopes. L' ^{115}In voit la prédiction de sa capture dans le groupe 9 s'améliorer, cette plage en énergie correspond aux 3^{ème} et 4^{ème} résonances de l'isotope (voir figure 4.12), qui n'étaient pas autoprotégées dans la configuration SG.

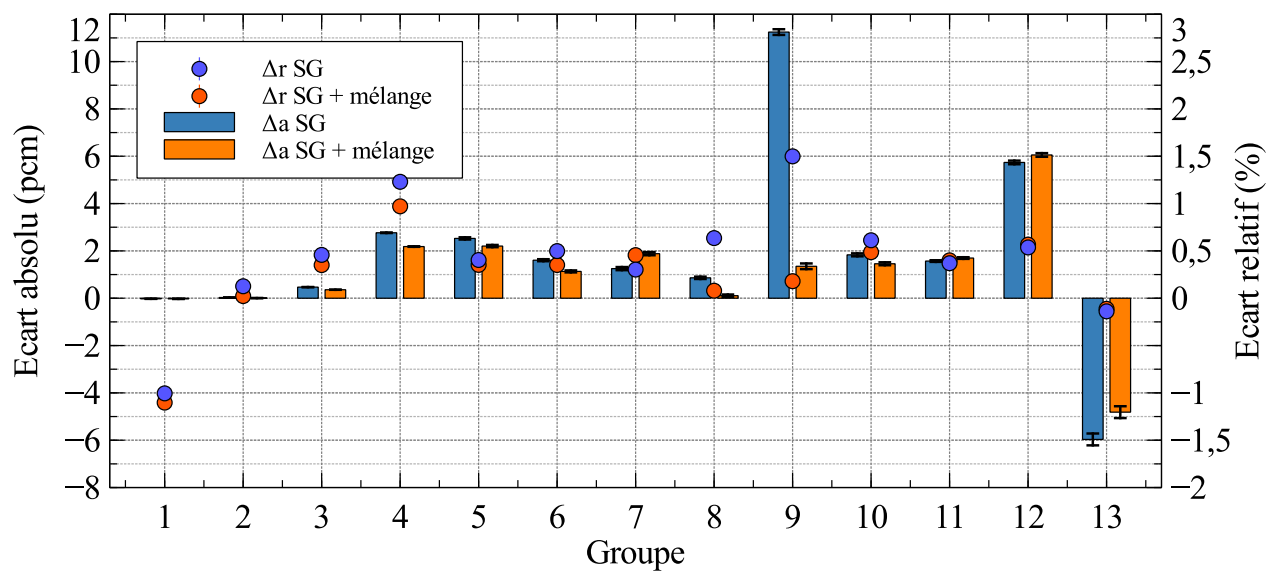
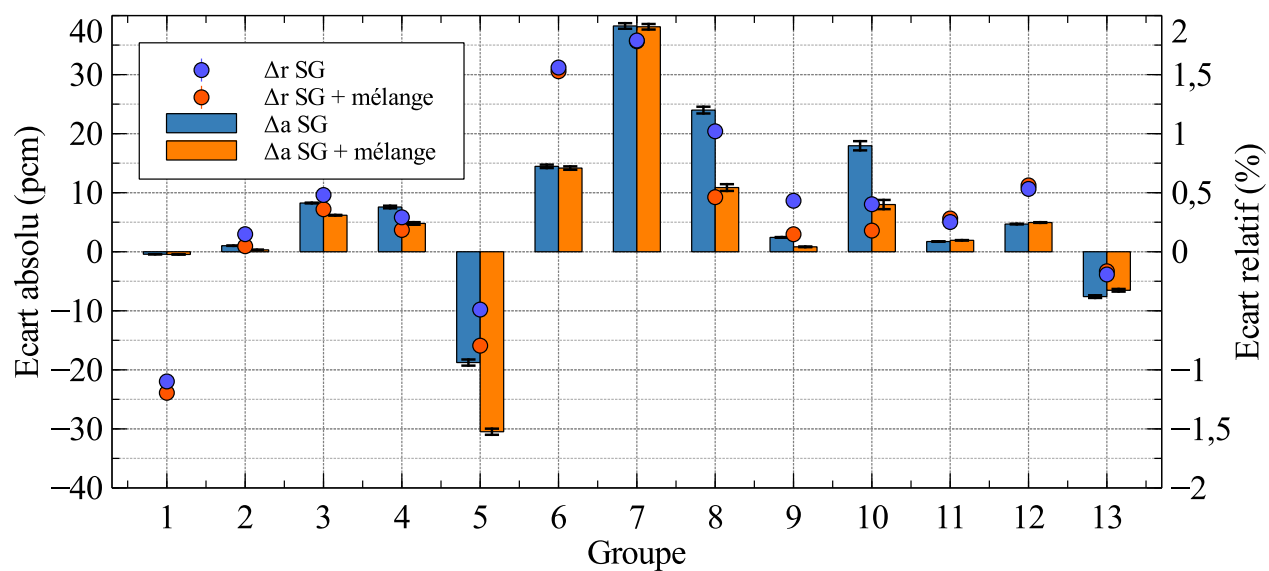
(a) ^{235}U (b) ^{238}U

Figure 4.8 Écarts pour le taux de capture de l'uranium par groupe en énergie pour un assemblage AIC et un enrichissement de 3,1 %

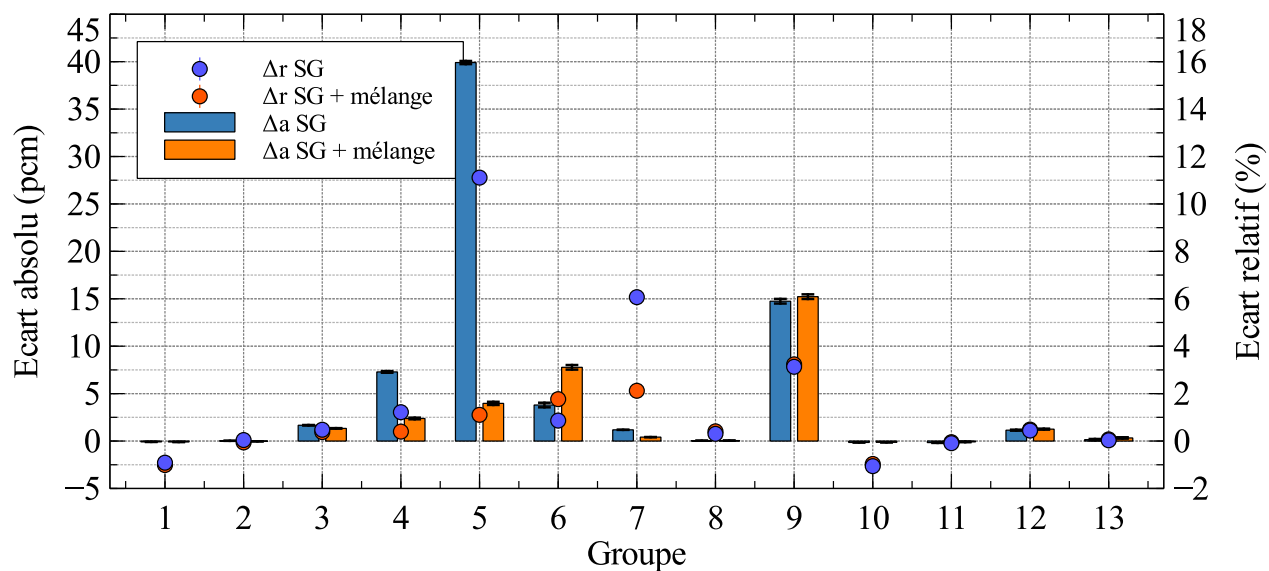
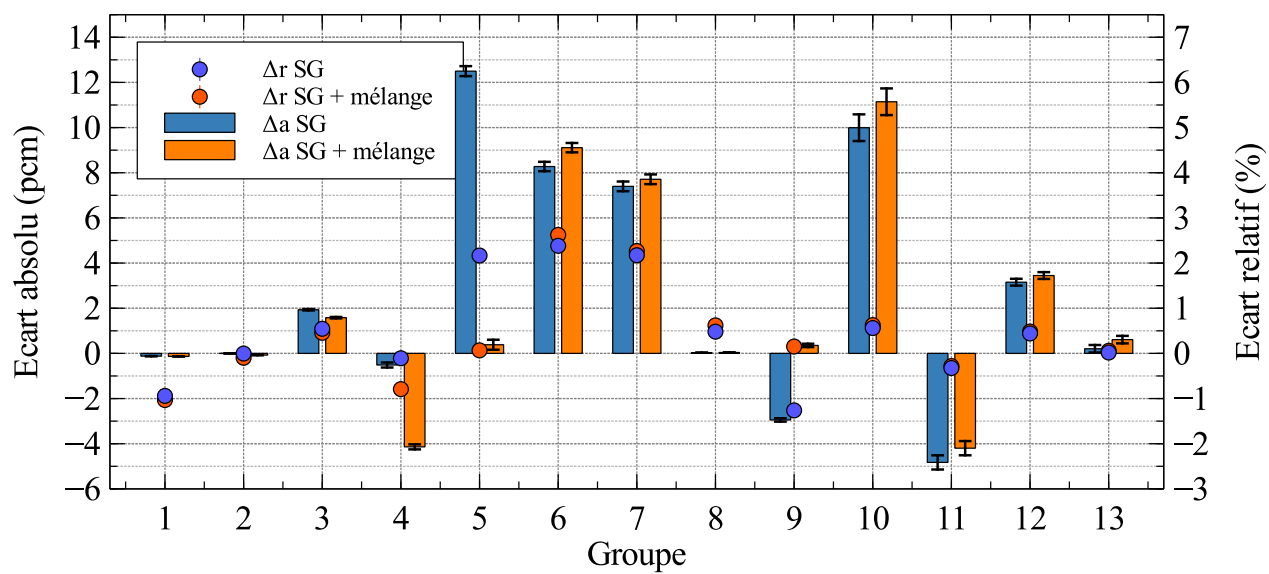
(a) ^{107}Ag (b) ^{109}Ag

Figure 4.9 Écarts pour le taux de capture de l'argent par groupe en énergie pour un assemblage AIC et un enrichissement de 3,1 %

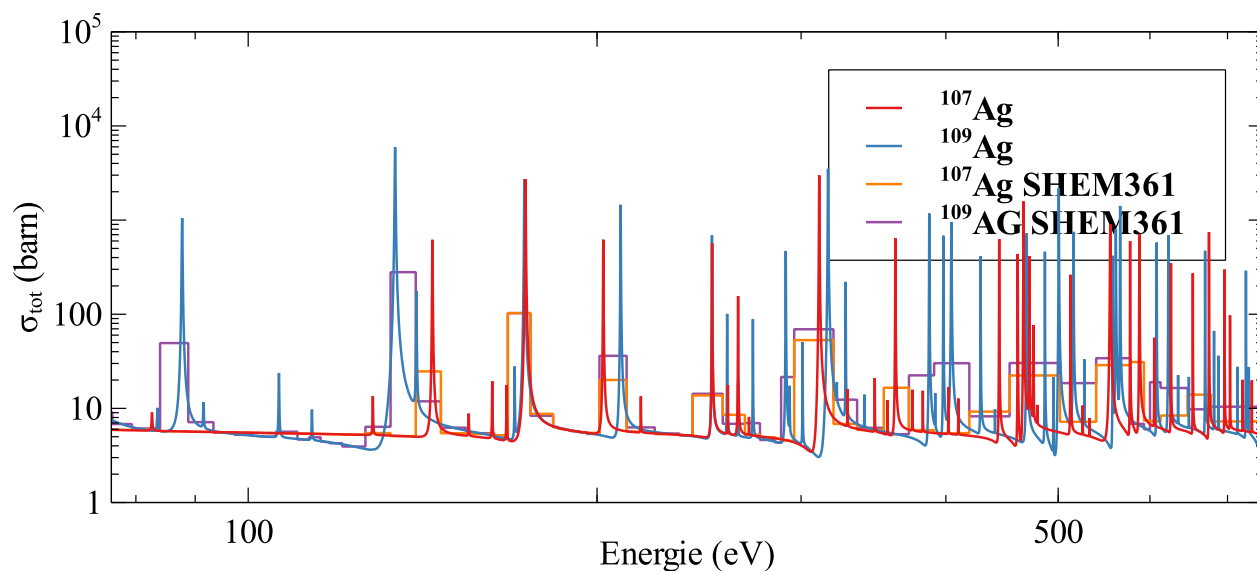


Figure 4.10 Recouvrement des résonances de l' ^{107}Ag et de l' ^{109}Ag dans le groupe 5 (76,2 eV - 752 eV)

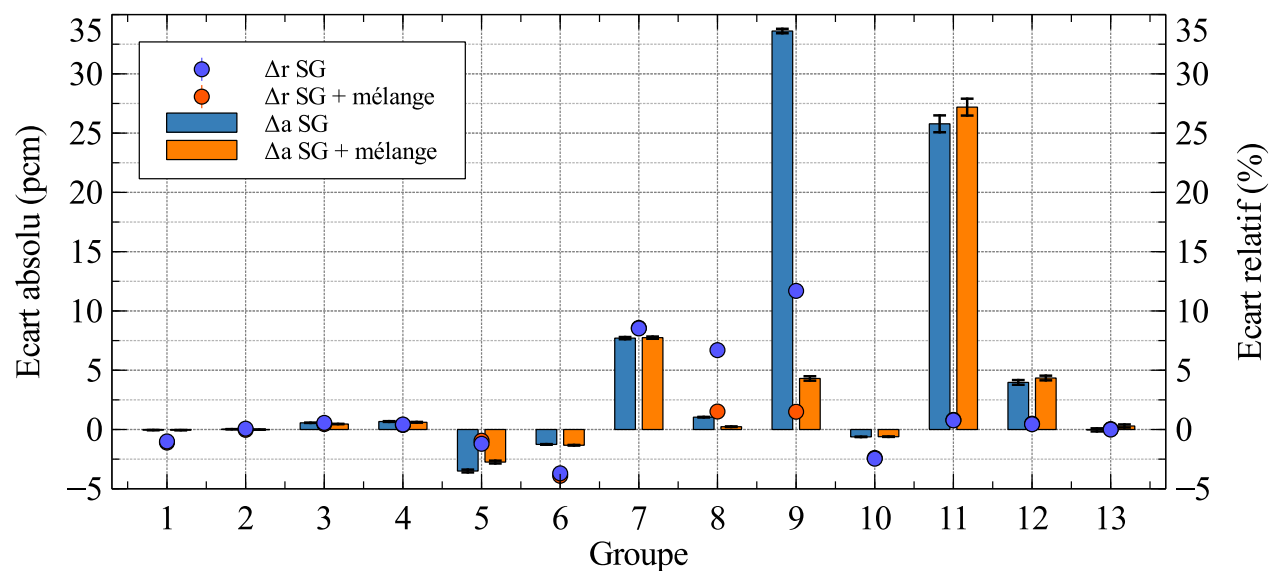


Figure 4.11 Écarts pour le taux de capture de l' ^{115}In par groupe en énergie pour un assemblage AIC et un enrichissement de 3,1 %

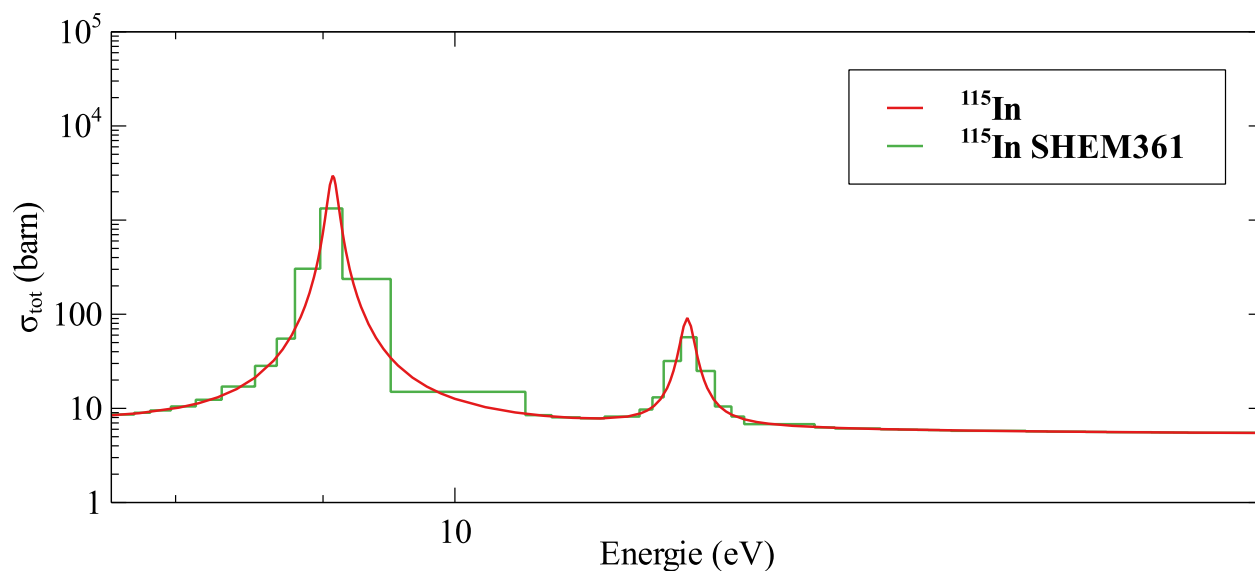


Figure 4.12 Résonances de l' ^{115}In dans le groupe 9 (7,6 eV - 19,08 eV)

Les cartes des écarts sur la capture rapide (figures 4.13a et 4.13c) montrent une surestimation du taux de capture dans le domaine rapide relativement uniforme, si ce n'est un écart plus important dans les cellules comportant les barres d'AIC, et une sous-estimation dans les cellules comportant du B_4C . La capture dans le trou d'eau central est toujours sous-estimée par APOLLO3 dans le domaine thermique (figures 4.13b et 4.13d). Les écarts restent cependant inférieurs au pour cent. On note une légère surestimation de la capture thermique dans les cellules de combustible faisant face aux absorbants (que ce soit pour les assemblages AIC ou B4C).

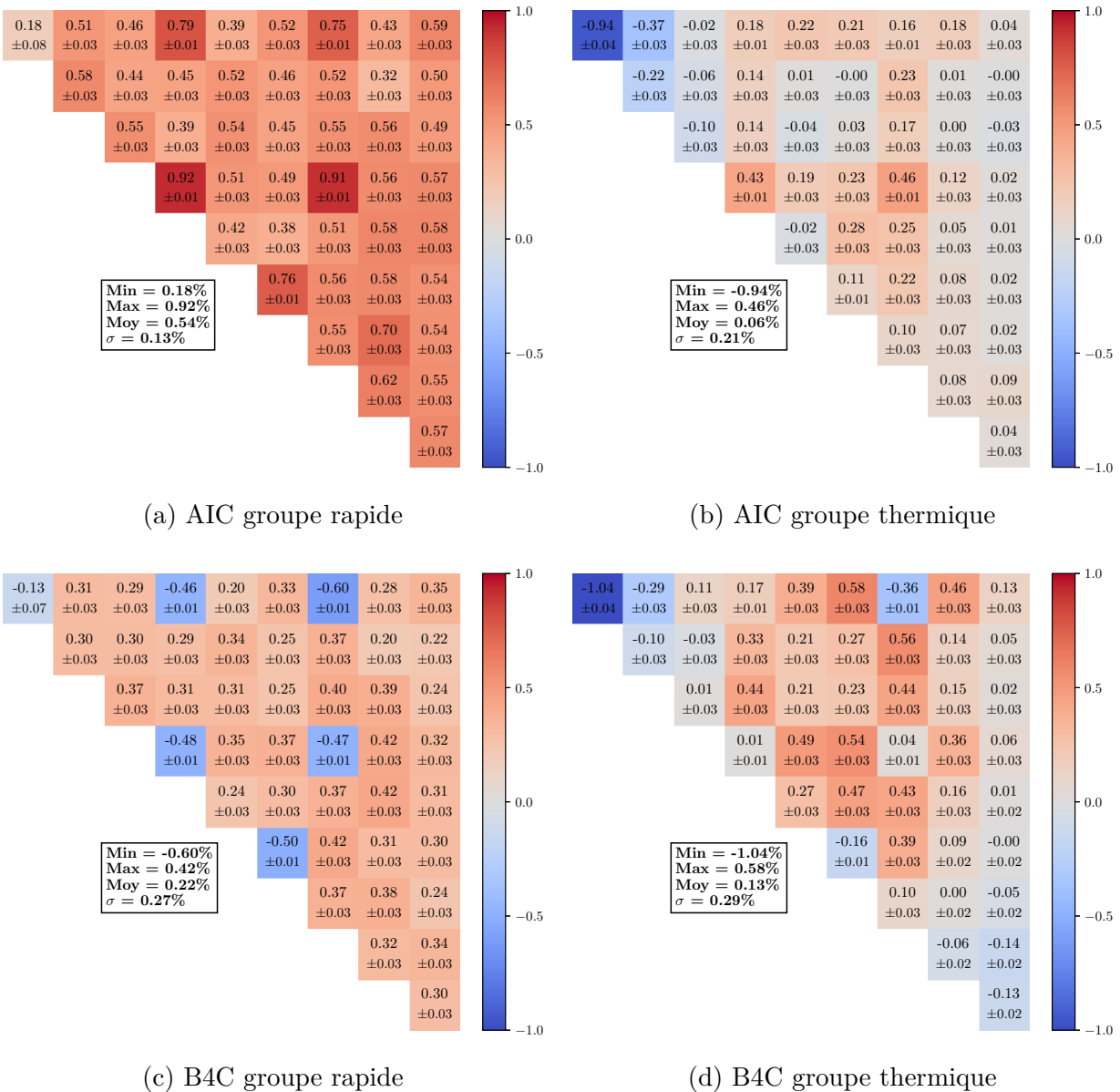


Figure 4.13 Écart relatif (%) sur le taux de capture à deux groupes par cellule pour des assemblages AIC et B4C, pour un enrichissement de 3,1 % (cas SG + mélange)

Taux de fission à un groupe

Malgré les hétérogénéités introduites avec les absorbants AIC ou B_4C , le taux de fission reste globalement bien calculé (figure 4.14a) avec une légère surestimation autour des crayons d'absorbant, et une légère sous-estimation en face du trou d'eau central, par rapport au cas sans absorbant (figure 4.5).

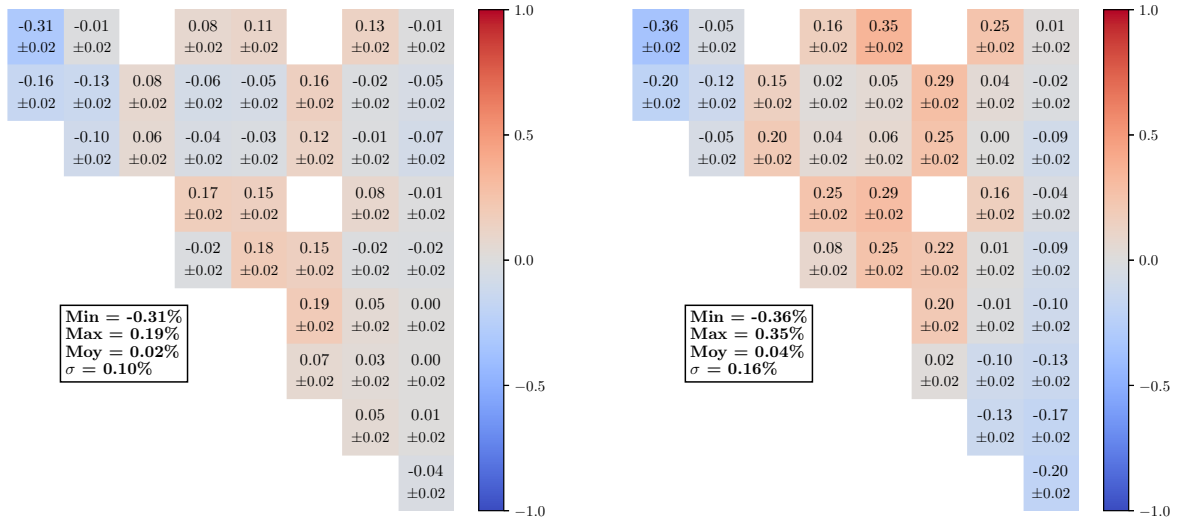


Figure 4.14 Écart relatif (%) sur le taux de fission total par cellule pour des assemblages AIC et B4C, pour un enrichissement de 3,1 % (cas SG + mélange)

Nappe de flux

Le flux thermique est sous-estimé dans le trou d'eau central et surestimé dans les cellules d'AIC et de B_4C (figure 4.15b). Malgré un écart sur le flux plus important dans ces cellules les écarts sur les taux de capture observés aux figures 4.13b et 4.13d sont moins marqués voir de signe opposé pour les assemblages B4C.

Efficacité des barres de contrôle

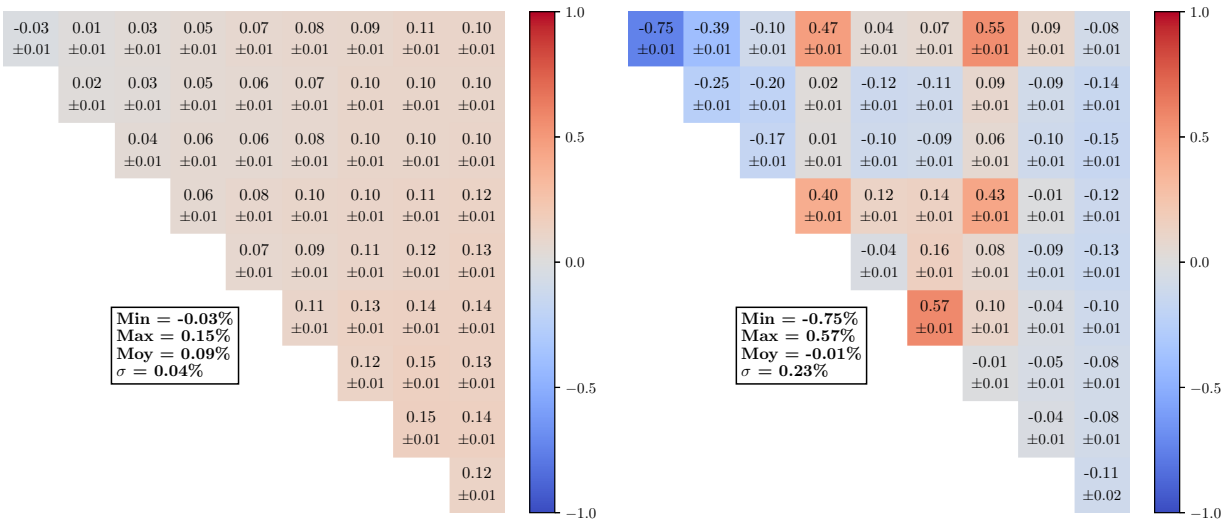
On définit l'efficacité des barres de contrôle par :

$$eff = \frac{1}{k_{\infty, \text{ sans barres}}} - \frac{1}{k_{\infty, \text{ avec barres}}} \quad (4.4)$$

Le tableau 4.9 montre une sous-estimation de l'efficacité des barres de contrôle en B_4C , et une sur-estimation dans le cas des barres en AIC. Toutefois, ces écarts sont inférieurs au pour-cent.

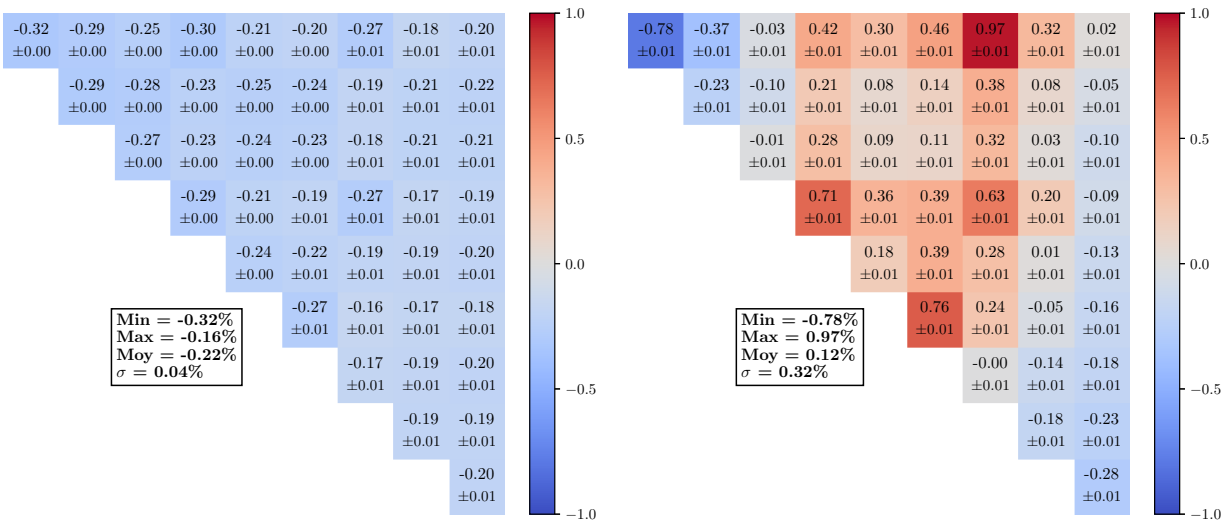
4.1.3 Assemblages avec poisons absorbants (BA)

Le réacteur présenté dans BEAVRS possède des assemblages avec des barreaux de poison absorbant, comme décrit au chapitre 3. Si ces absorbants ont un effet bien moins important



(a) AIC groupe rapide

(b) AIC groupe thermique



(c) B4C groupe rapide

(d) B4C groupe thermique

Figure 4.15 Écart relatifs (%) sur le flux à deux groupes par cellule pour des assemblages AIC et B4C, pour un enrichissement de 3,1 % (cas SG + mélange)

que les barres de contrôle, ils introduisent tout de même des hétérogénéités (voir figure 4.16) dans les assemblages et le cœur. Quantifier les erreurs du calcul déterministe est donc nécessaire pour la validation de la modélisation.

Comme pour les assemblages présentés précédemment les écarts sont moins importants dans le cas SG + mélange (voir tableau 4.10). Les hétérogénéités introduites entraînent des écarts plus grands que pour les assemblages sans absorbant, mais qui restent inférieurs aux écarts

Tableau 4.9 Efficacité des barres de contrôle pour différents assemblages absorbants

Assemblage (enrichissement ^{235}U)	TRIPOLI4 (pcm)	SG		SG + mélange	
	<i>eff</i> (pcm)	<i>eff</i> (pcm)	Δr SG (%)	<i>eff</i> (pcm)	Δr SG + mélange (%)
AIC (1, 6%)	-52074	-52558	0.93	-52440	0.70
AIC (2, 4%)	-39739	-40104	0.92	-40008	0.68
AIC (3, 1%)	-33573	-33877	0.90	-33793	0.65
B4C (1, 6%)	-63444	-63417	-0.04	-63397	-0.07
B4C (2, 4%)	-49369	-49324	-0.09	-49309	-0.12
B4C (3, 1%)	-42302	-42231	-0.17	-42220	-0.19

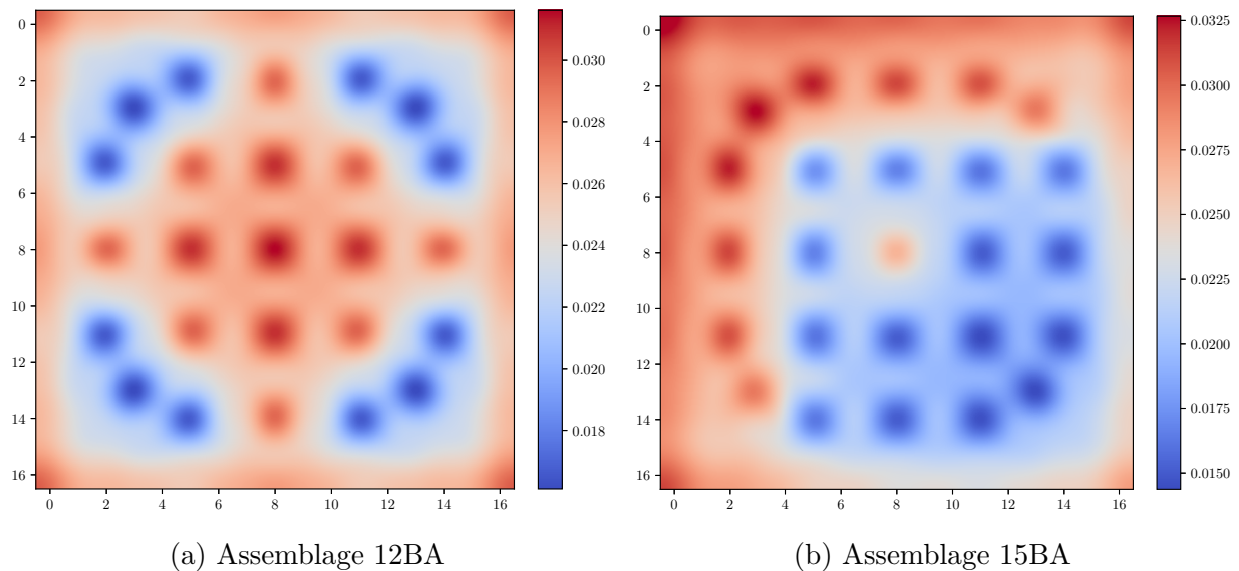


Figure 4.16 Flux thermique issu de calculs avec TRIPOLI4 pour différents assemblages avec pyrex (enrichissement de 3,1%)

observés pour les assemblages AIC.

Tableau 4.10 Écarts absolus (en pcm) APOLLO3-TRIPOLI4 du k_∞ pour des assemblages présentant des poisons de type pyrex

Assemblage (enrichissement ^{235}U)	Écarts absolus k_∞ (pcm)	
	SG	SG + mélange
6BA (3,1%)	-165	-122
12BA (3,1%)	-188	-149
15BA (3,1%)	-187	-147
16BA (3,1%)	-178	-132
20BA (3,1%)	-181	-145

Taux d'absorption (hors fission)

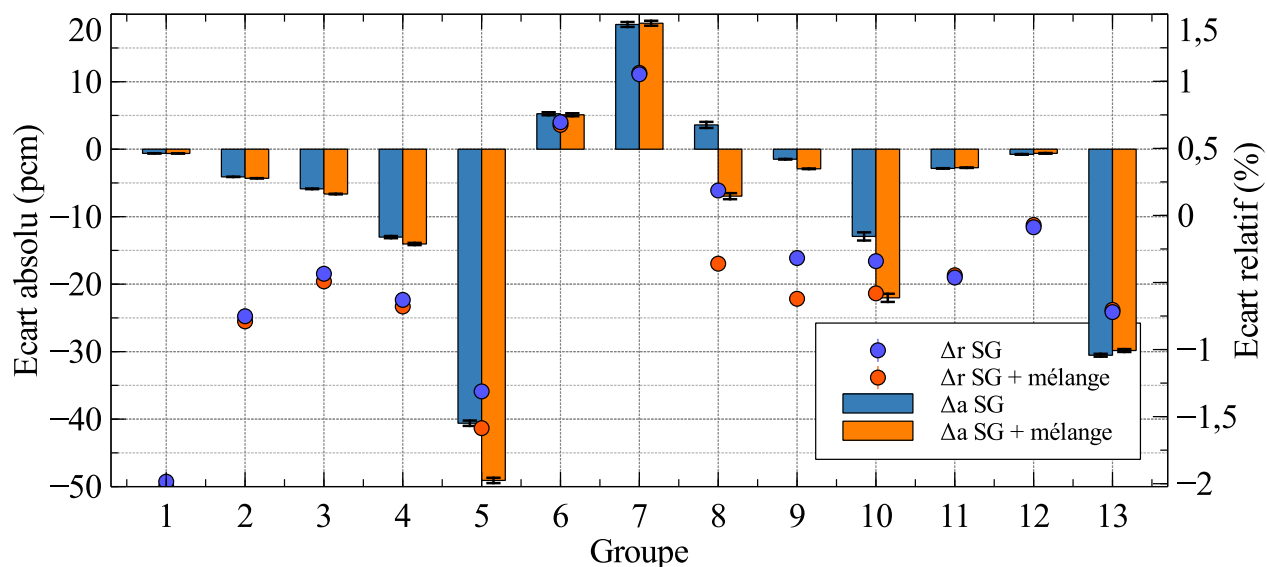
Le taux de capture total est lui aussi mieux estimé pour ces assemblages que pour les assemblages barrés (voir tableau 4.11). Les gains les plus importants entre les deux jeux d'options SG et SG + mélange sont obtenus pour les assemblages les plus hétérogènes (6BA et 15BA). Les mêmes tendances sont observées avec une surestimation des taux de capture des isotopes de l'uranium et une amélioration des résultats, sauf pour l'assemblage 15BA qui présente une sous-estimation du taux de capture de ces isotopes dans les groupes 8, 10 et 13, et qui se dégrade avec l'autoprotection de l'uranium en mélange dans les groupes 8 et 10 (figure 4.17a). Pour les autres assemblages comme les 16BA, les tendances restent similaires aux assemblages sans absorbant et aux assemblages barrés (figure 4.17b). Les écarts des taux de capture par groupe en énergie de l' ^{235}U ne sont pas présentés ici, car ils sont relativement faibles (tableau 4.12) et similaires aux autres cas.

Tableau 4.11 Écarts sur le taux de capture pour des assemblages avec poisons absorbants de type pyrex (BA)

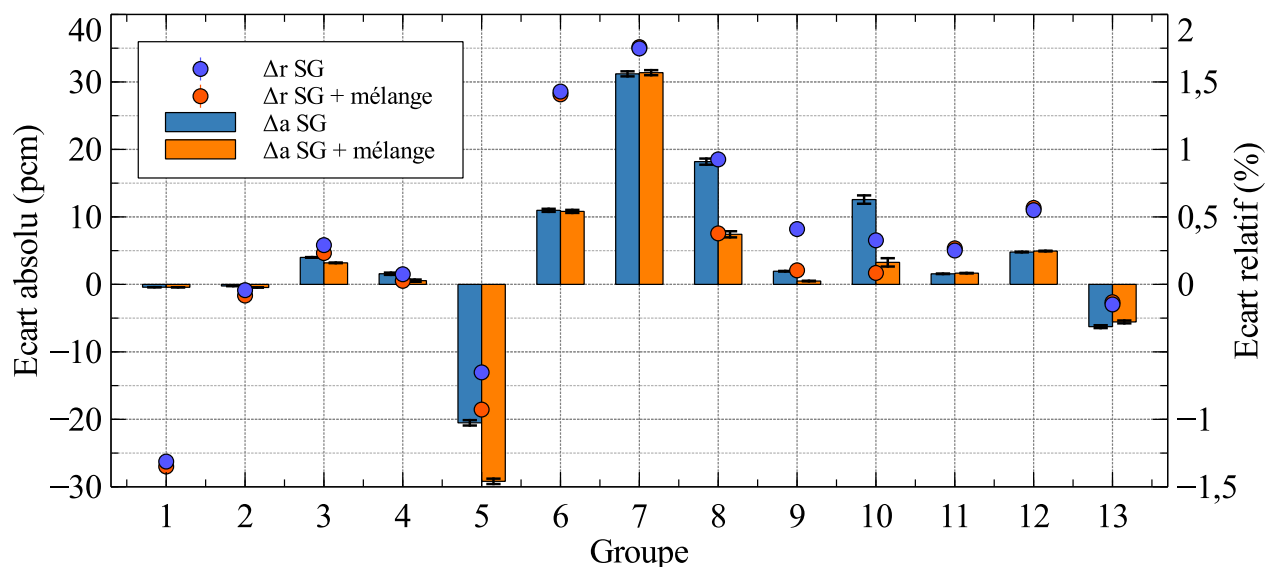
Assemblage (enrichissement ^{235}U)	Δr (%)		Δa (pcm)	
	SG	SG + mélange	SG	SG + mélange
6BA (3.1%)	0.28	0.21	65	48
12BA (3.1%)	0.28	0.22	21	17
15BA (3.1%)	0.31	0.25	85	68
16BA (3.1%)	0.28	0.22	24	19
20BA (3.1%)	0.29	0.24	26	21

Tableau 4.12 Écarts sur le taux de capture de l'uranium pour des assemblages BA

Assemblage (enrichissement ^{235}U)	^{235}U		^{238}U	
	SG	SG + mélange	SG	SG + mélange
6BA (3.1%)	18	10	51	23
12BA (3.1%)	19	11	56	27
15BA (3.1%)	-33	-42	-85	-116
16BA (3.1%)	20	11	59	28
20BA (3.1%)	21	12		



(a) 15BA



(b) 16BA

Figure 4.17 Écarts pour le taux de capture de l' ^{238}U par groupe en énergie pour des assemblages 15BA et 16BA, et un enrichissement de 3,1 %

Écarts par cellule

Les résultats par cellule montrent les mêmes tendances que pour les assemblages précédents. La capture dans le domaine rapide est surestimée avec des écarts inférieurs au pour cent (figure 4.18a) tandis que la capture dans le domaine thermique est mieux évaluée, à l'exception du trou d'eau central présentant une sous-estimation de l'ordre de 0,70%. L'écart dans les

cellules d'absorbant quant à lui est proche de 0. Le taux de capture n'est pas autant sur-estimé que dans les cas AIC et B4C, ou autant sous-estimé que dans le cas 0BA (figure 4.18b).

Le flux rapide est là aussi bien prédit par APOLLO3 (figure 4.18c). La présence d'absorbant dans une cellule entraîne une légère sur-estimation du flux thermique, tandis que ce flux est légèrement plus sous-estimé dans les trous d'eau (figure 4.18d) comme observé précédemment. La précision de l'évaluation du taux de fission par APOLLO3 n'est pas très affectée par la présence d'absorbant de type pyrex, et ne montre qu'une légère surestimation dans les cellules faisant face aux absorbants comme on peut le constater figure 4.19.

La méthode des sous-groupes telle qu'implémentée dans le code APOLLO3 nécessite un couplage entre le calcul d'autoprotection et le calcul de flux principal comme expliqué section 2.4.3, ce qui en fait une méthode coûteuse. On se propose par la suite d'accélérer le calcul en utilisant la méthode de Tone pour certains domaines en énergie.

4.2 Accélération par la méthode de Tone

Les travaux de Vidal [39] montrent que les résultats obtenus en utilisant la méthode de Tone dans le domaine rapide sont similaires à ceux obtenus avec la méthode des sous-groupes d'ECCO telle qu'implémentée dans APOLLO3, pour un réacteur de type REP. Son utilisation moins coûteuse (voir section 2.4.3) doit donc permettre d'accélérer le calcul d'autoprotection au moins pour les groupes rapides. Les temps de calcul moyens présentés dans le tableau 4.13 montrent une diminution moyenne non négligeable du temps de calcul total pour tous les types d'assemblages. L'autoprotection avec cette méthode est réalisée sur les groupes 1 à 74 comme spécifié au début de ce chapitre, et correspond au cas $SG + Tone$. La diminution du temps de calcul peut atteindre -40% pour les assemblages moitié (6BA et 15BA) or la proportion des groupes autoprotégés par cette méthode représente 38% des groupes autoprotégés (74/194) et 19% du total des groupes (74/383). On constate une diminution globale du temps de calcul.

Tableau 4.13 Temps de calcul global pour différents assemblages

Assemblage	Temps de calcul moyen (s)		Gain moyen
	SG + mélange	SG + Tone	
0BA, xBA (huitième)	693	477	-31%
AIC	804	600	-25%
6BA, 15BA (moitié)	3451	2113	-39%

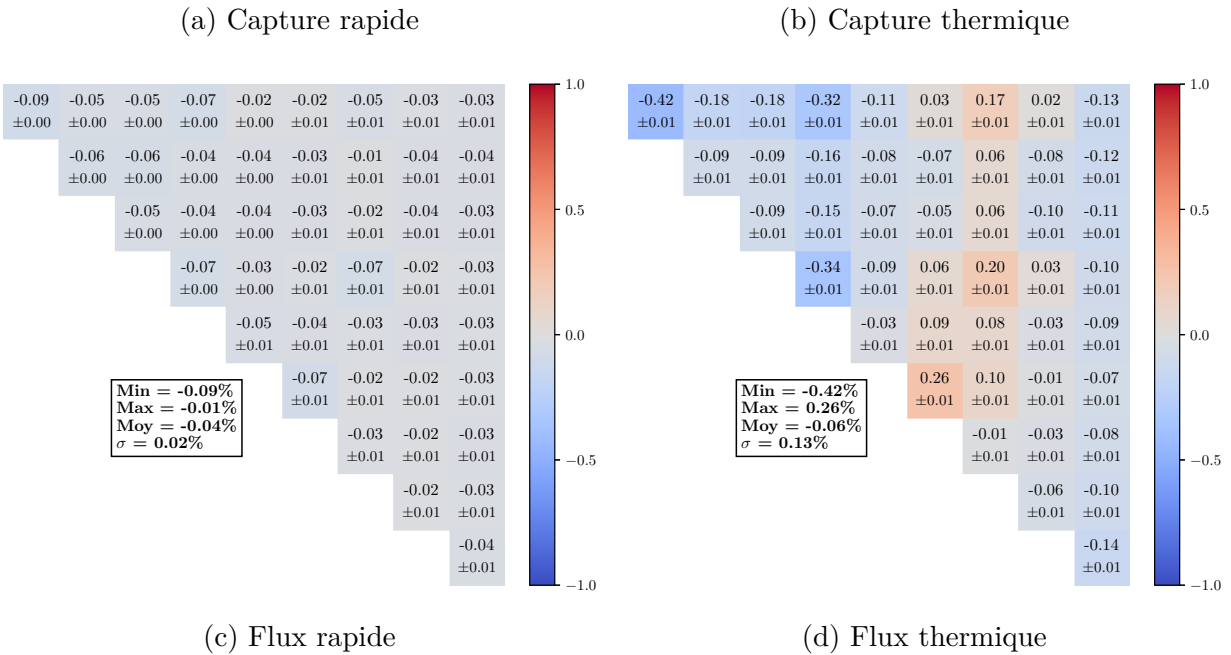
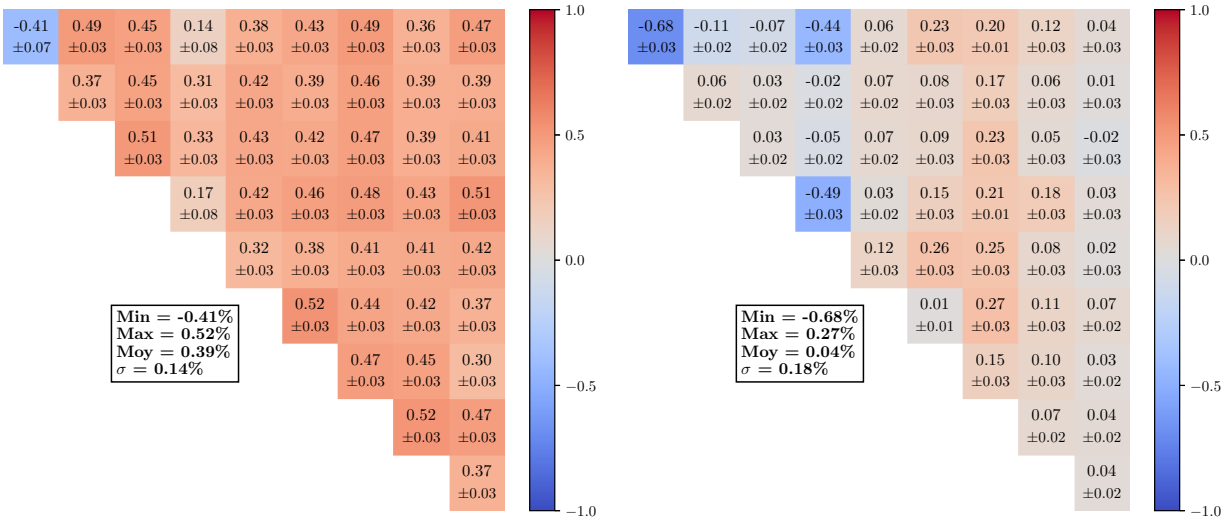


Figure 4.18 Écart relatif (%) sur le taux de capture et le flux à deux groupes par cellule pour un assemblage 16BA et un enrichissement de 3,1 % (cas SG + mélange)

4.2.1 Impact sur le k_{∞}

Les différents écarts obtenus pour les deux cas *SG + mélange* et *SG + Tone* sont répertoriés dans le tableau 4.14 et sont sensiblement les mêmes entre les deux jeux d'options, avec un écart de l'ordre de 3 pcm (14 pcm dans le pire des cas). Les différences introduites par l'emploi de la méthode de Tone dans les 74 premiers groupes semblent négligeables jusqu'ici.

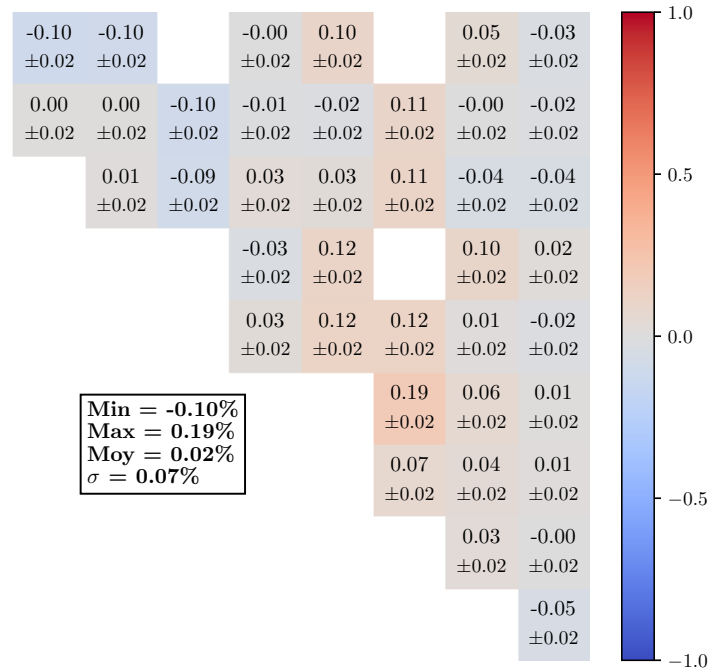


Figure 4.19 Écart relatifs (%) sur le taux de fission total par cellule pour un assemblage 16BA et un enrichissement de 3,1 % (cas SG + mélange)

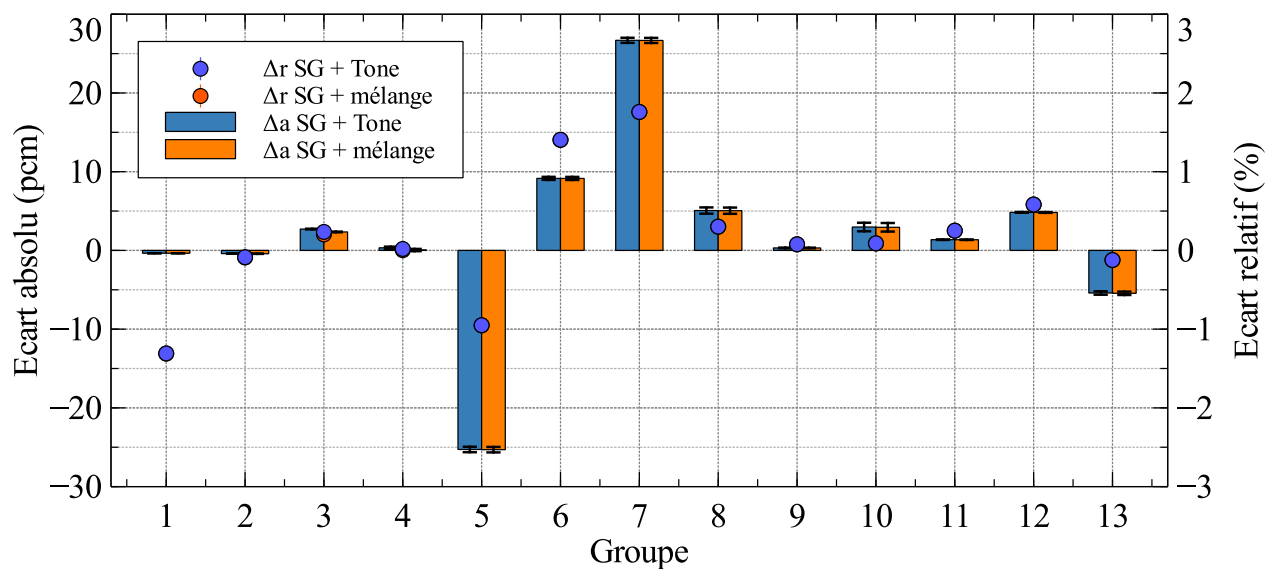
Tableau 4.14 Écart absolu (en pcm) APOLLO3-TRIPOLI4 du k_∞ avec utilisation de la méthode des sous-groupes et de la méthode de Tone

Assemblage (enrichissement ^{235}U)	Écart absolu k_∞ (pcm)	
	SG + mélange	SG + Tone
0BA (1,6%)	-110	-113
0BA (2,4%)	-102	-105
0BA (3,1%)	-118	-120
AIC (1,6%)	-206	-209
AIC (2,4%)	-214	-217
AIC (3,1%)	-225	-228
B4C (1,6%)	-24	-24
B4C (2,4%)	-9	-9
B4C (3,1%)	+3	+2
6BA (3,1%)	-122	-126
12BA (3,1%)	-149	-151
15BA (3,1%)	-147	-150
16BA (2,4%)	-140	-153
16BA (3,1%)	-132	-146
20BA (3,1%)	-145	-148

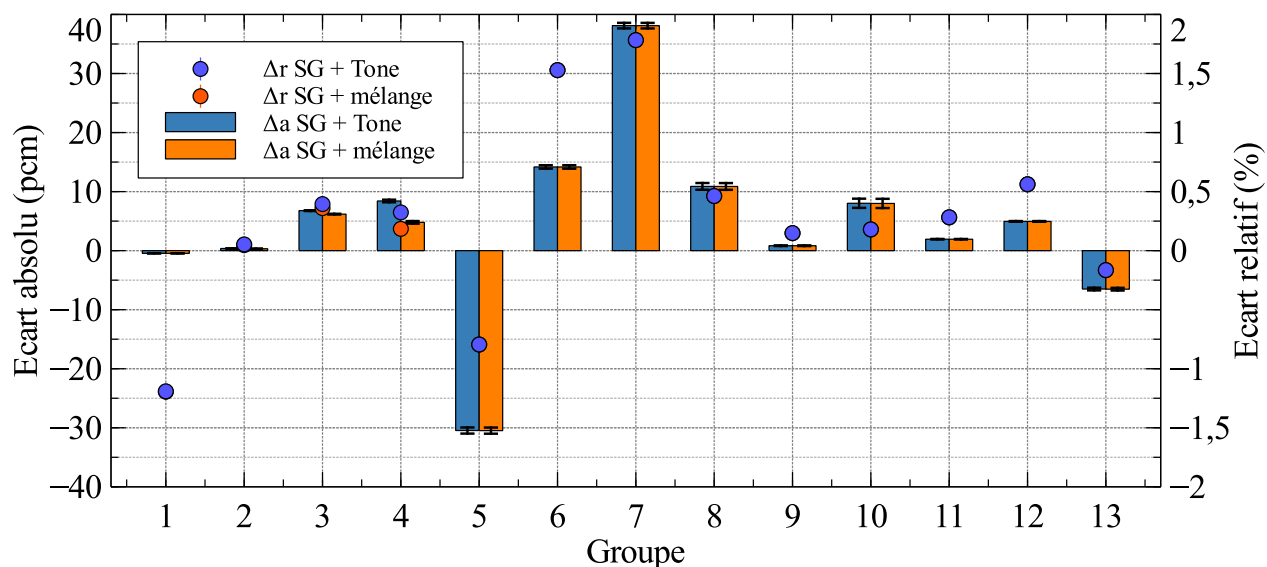
4.2.2 Impact sur le calcul du flux et des taux de réaction

Suite aux résultats obtenus avec les options du cas SG + mélange, seuls les résultats pour la capture de ^{238}U par groupe d'énergie pour les assemblages de type 0BA et AIC, ainsi que les cartes des écarts par cellule pour le flux rapide et la capture rapide seront présentés dans cette partie. En effet, les assemblages AIC présentent les plus grands écarts avec le calcul de référence et le cas 0BA représente un cas d'assemblage plus classique, les autres configurations présentent des écarts situés entre ces deux cas. De plus, les changements opérés sur l'autoprotection interviennent dans le domaine rapide (utilisation de la méthode de Tone pour $E > 3 \text{ keV}$).

Les écarts sur le taux de capture à 13 groupes pour ^{238}U (figure 4.20) ne montrent aucune différence sensible sur la modélisation de la capture de cet isotope, entre la méthode des sous-groupes et la méthode de Tone, pour le domaine $E > 3 \text{ keV}$ et confirment les résultats obtenus par Vidal [39] pour un assemblage complet avec ou sans absorbant. Spatialement, on observe la même situation que dans le cas où la méthode de Tone n'est pas utilisée (voir figure 4.21) que ce soit pour le flux ou le taux de capture dans le domaine rapide. Le domaine thermique ne subit pas de contre-coup notable (voir figure 4.22).

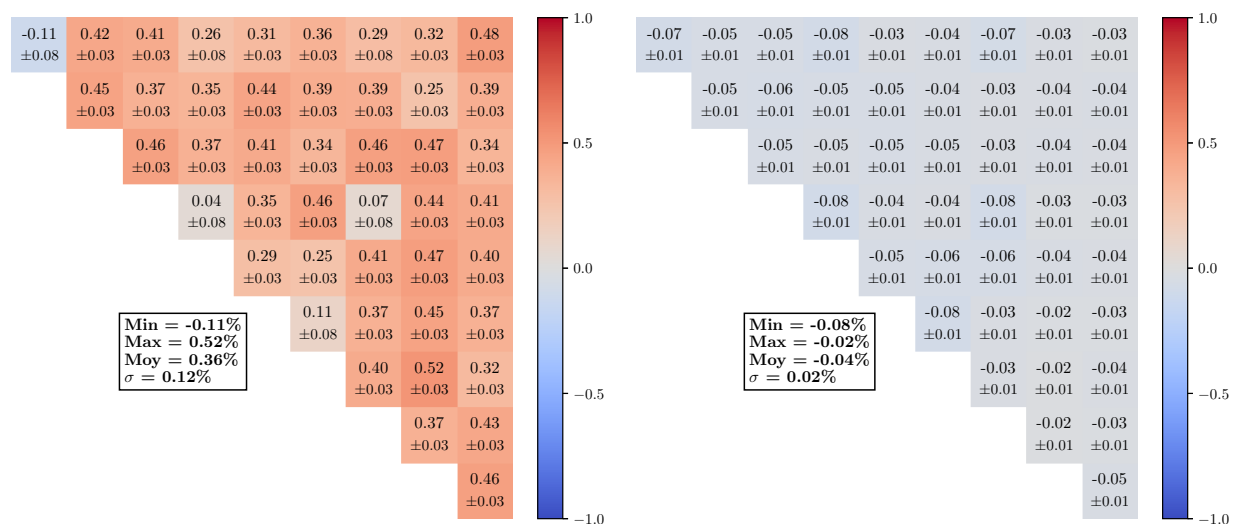


(a) Assemblage 0BA



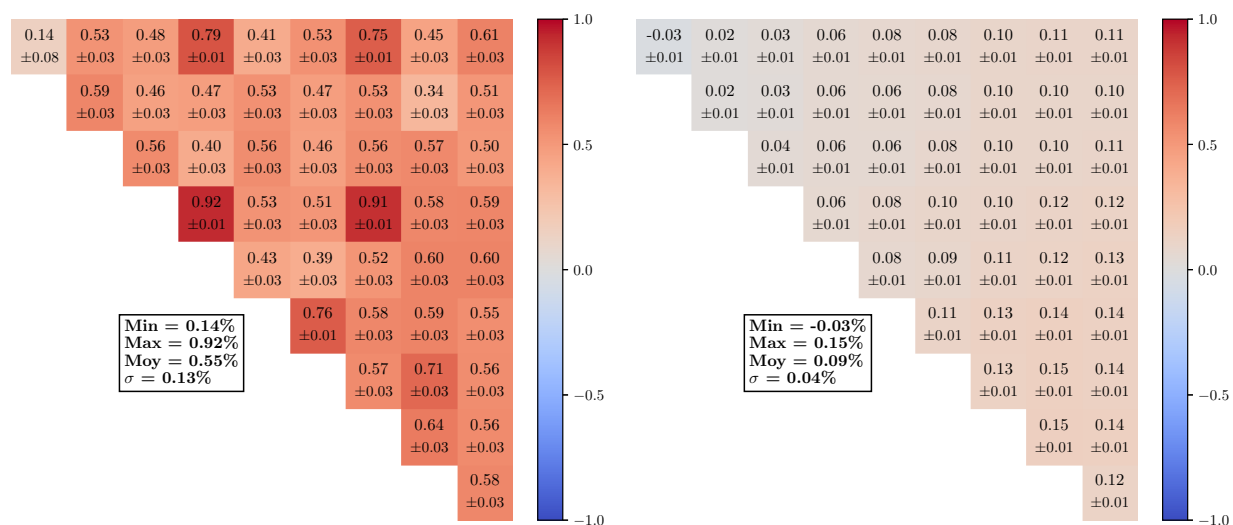
(b) Assemblage AIC

Figure 4.20 Écarts pour le taux de capture de l' ^{238}U par groupe en énergie pour des assemblages 0BA et AIC, pour un enrichissement de 3,1 %



(a) 0BA capture rapide

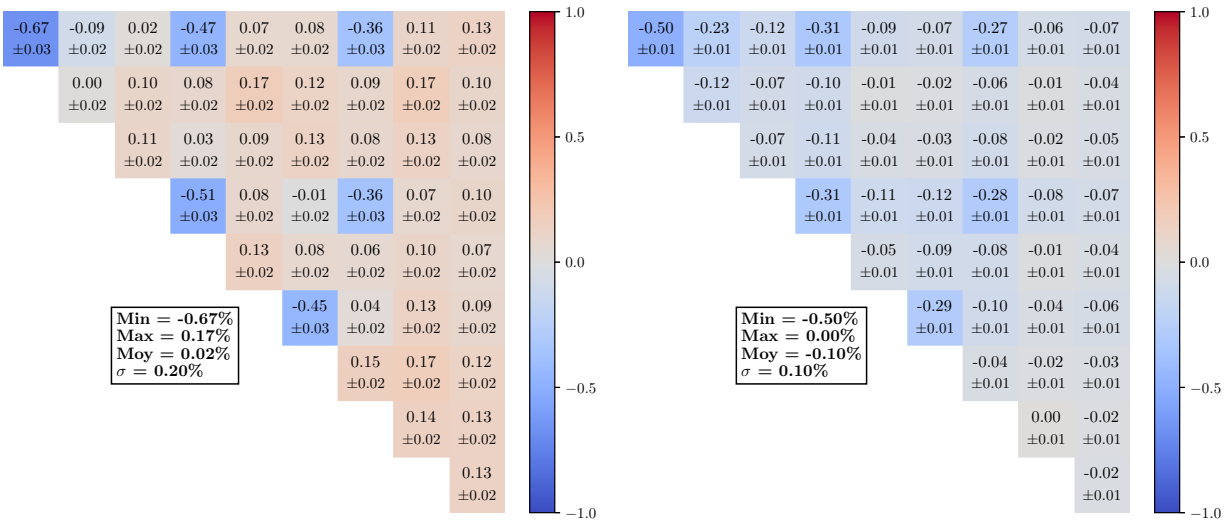
(b) 0BA flux rapide



(c) AIC capture rapide

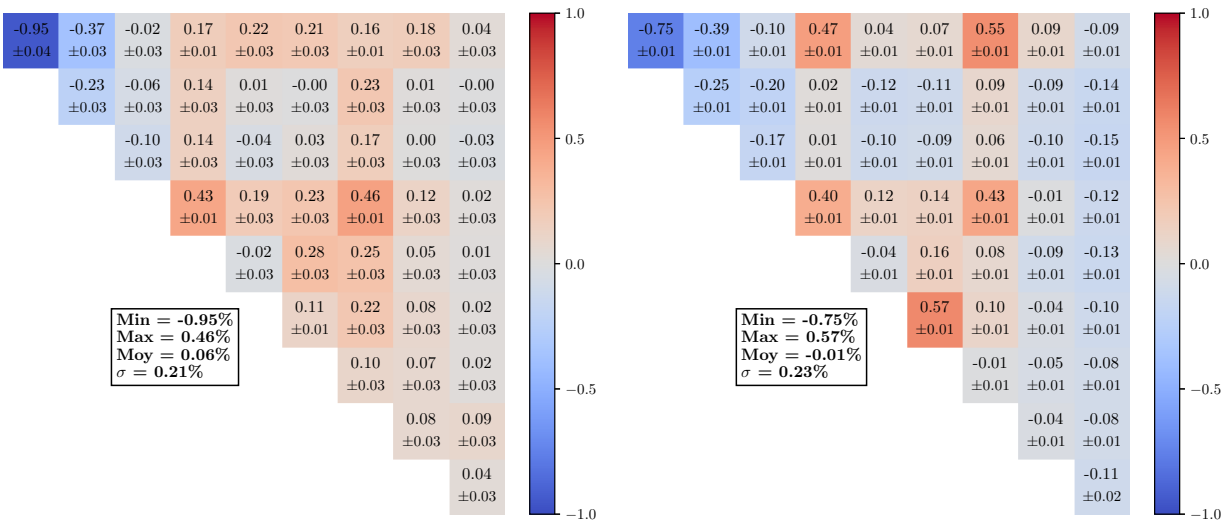
(d) AIC flux rapide

Figure 4.21 Écart relatif (%) sur le taux de capture et le flux rapide par cellule pour des assemblages 0BA et AIC, pour un enrichissement de 3,1 % (cas SG + Tone)



(a) OBA capture thermique

(b) OBA flux thermique



(c) AIC capture thermique

(d) AIC flux thermique

Figure 4.22 Écart relatifs (%) sur le taux de capture et le flux thermique par cellule pour des assemblages OBA et AIC, pour un enrichissement de 3,1 % (cas SG + Tone)

L'utilisation de la méthode de Tone dans le domaine rapide permet donc une accélération non négligeable du calcul réseau sans affecter de façon importante les résultats obtenus en situation de fonctionnement normal du réacteur. Les configurations vidangées, traitées dans les travaux de Vidal [39], sont elles aussi correctement calculées.

4.3 Effet des grilles de support

Pour le calcul de cœur en trois dimensions, il a été décidé de modéliser les grilles de support de façon explicite afin d'étudier les effets de celles-ci sur le calcul de transport. Les résultats obtenus pour les assemblages correspondants ont donc été comparés à des calculs de référence avec TRIPOLI4.

Les hétérogénéités introduites par les grilles de support entraînent une sous-estimation plus importante du k_∞ et une sur-estimation plus importante du taux de capture total, visibles dans les tableaux 4.15 et 4.16. Les écarts du taux de capture de l' ^{238}U par groupe présentés figure 4.23 montrent une surestimation plus importante pour les cas avec grilles, particulièrement lorsque celles-ci sont en zircaloy4, avec un écart total de +40 pcm pour les grilles en inconel/SS304 et +80 pcm pour les grilles en zircaloy4 (contre +22 pcm pour le cas sans grille) dans le cas d'un assemblage 0BA dont le combustible est enrichi à hauteur de 3,1%. Les plus grands écarts sont observés pour les assemblages AIC avec des écarts sur le calcul du k_∞ dépassant 250 pcm en valeur absolue dans certains cas (en rouge dans le tableau 4.15).

Tableau 4.15 Écarts absolus (en pcm) APOLLO3-TRIPOLI4 du k_∞ pour les différentes configurations des grilles de support (cas SG + Tone)

Assemblage (enrichissement ^{235}U)	Écarts absolus k_∞ (pcm)		
	Sans grilles	Inconel	Zircaloy4
B4C (1.6%)	-24		
B4C (2.4%)	-9		
B4C (3.1%)	+2		
AIC (1.6%)	-209	-245	-329
AIC (2.4%)	-217	-255	-381
AIC (3.1%)	-228	-244	-400
0BA (1.6%)	-113	-202	-142
0BA (2.4%)	-105	-196	-167
0BA (3.1%)	-120	-173	-186
6BA (3.1%)	-126	-175	-217
12BA (3.1%)	-151	-193	-228
15BA (3.1%)	-150	-189	-259
16BA (2.4%)	-153	-209	-243
16BA (3.1%)	-146	-199	-263
20BA (3.1%)	-148	-205	-267

Le flux rapide est surestimé dans chaque cellule de façon à peu près uniforme en présence de grilles (figure 4.24), particulièrement pour des grilles en zircaloy4 (figure 4.24c). Dans le domaine thermique, on constate une bascule de l'écart entre le centre de l'assemblage et la

Tableau 4.16 Écarts absolus (en pcm) APOLLO3-TRIPOLI4 du taux de capture total pour les différentes configurations des grilles de support (cas SG + Tone)

Assemblage (enrichissement ^{235}U)	Écarts absolus $\tau_{capture}$ (pcm)		
	Sans grilles	Inconel	Zircaloy4
B4C (1.6%)	0		
B4C (2.4%)	-6		
B4C (3.1%)	-9		
AIC (1.6%)	+87	+132	+149
AIC (2.4%)	+62	+94	+120
AIC (3.1%)	+53	+73	+103
0BA (1.6%)	+18	+47	+23
0BA (2.4%)	+12	+32	+21
0BA (3.1%)	+12	+24	+20
6BA (3.1%)	+50	+97	+92
12BA (3.1%)	+17	+32	+31
15BA (3.1%)	+69	+12	+13
16BA (2.4%)	+24	+45	+43
16BA (3.1%)	+20	+36	+39
20BA (3.1%)	+22	+39	+45

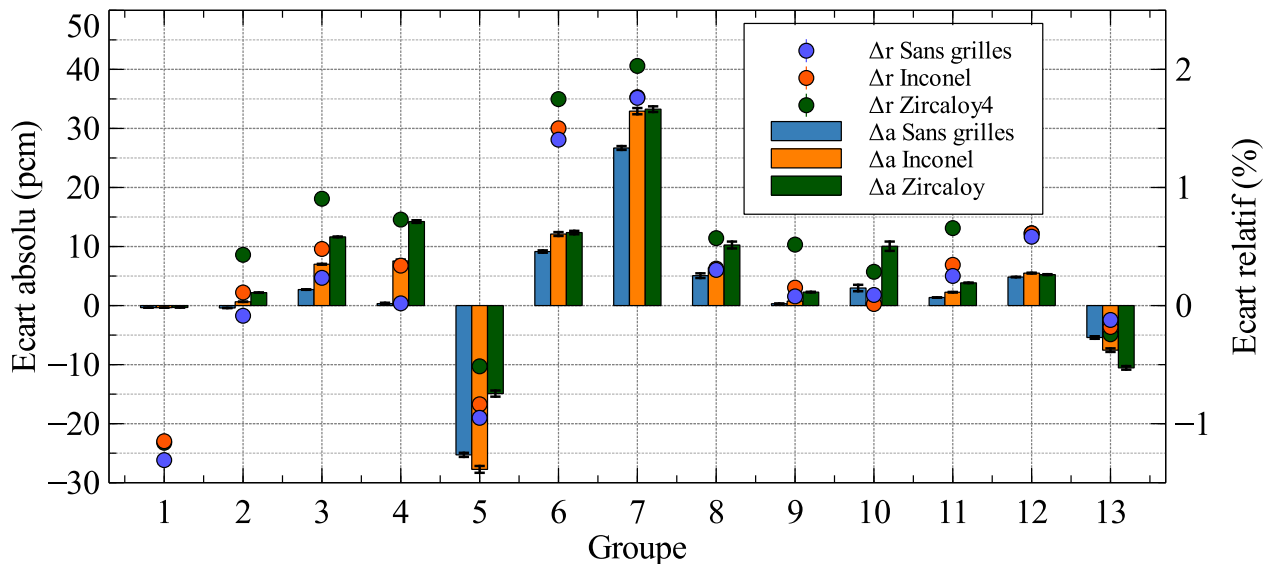
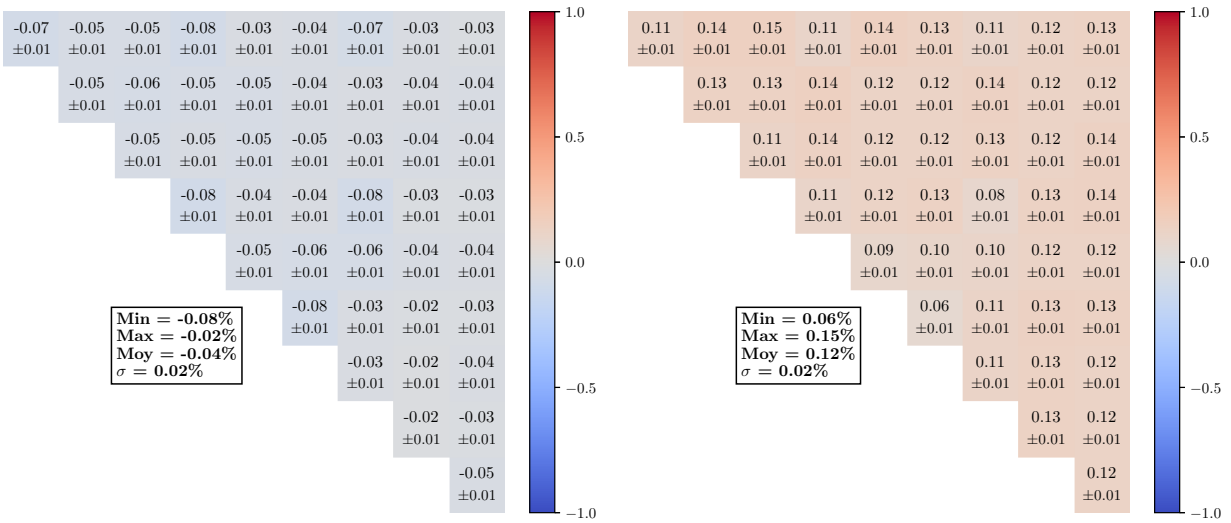


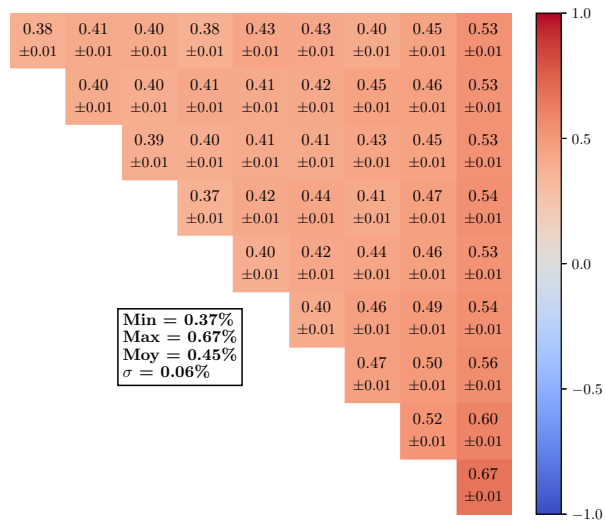
Figure 4.23 Écarts pour le taux de capture de ^{238}U par groupe en énergie pour un assemblage 0BA avec un enrichissement de 3,1 %, pour différentes configurations de grilles

périphérie (figure 4.25). L'effet est plus important avec des grilles en zircaloy4.



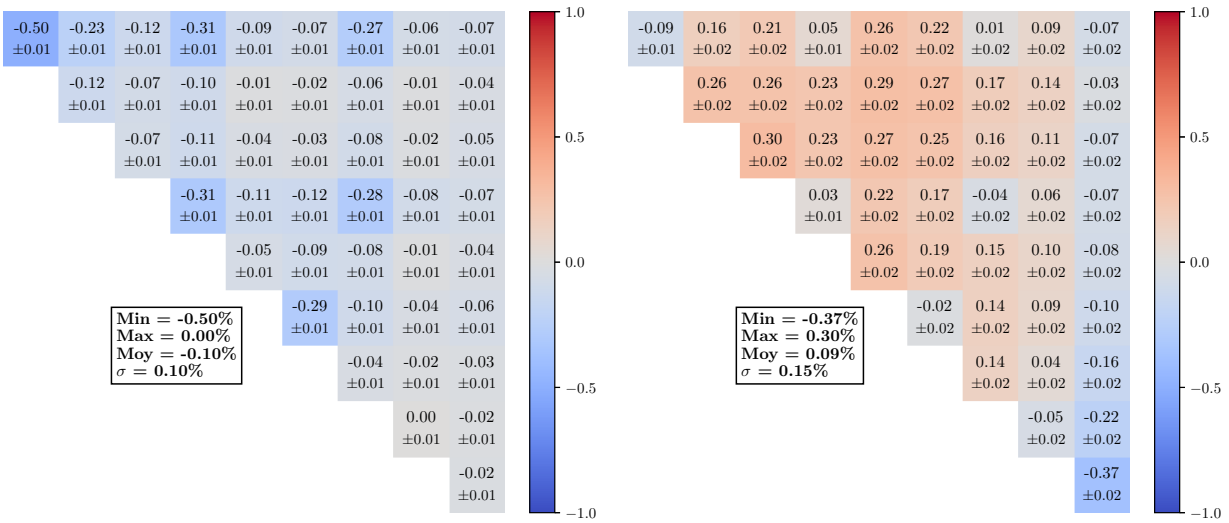
(a) Sans grille

(b) Grilles en inconel/SS304



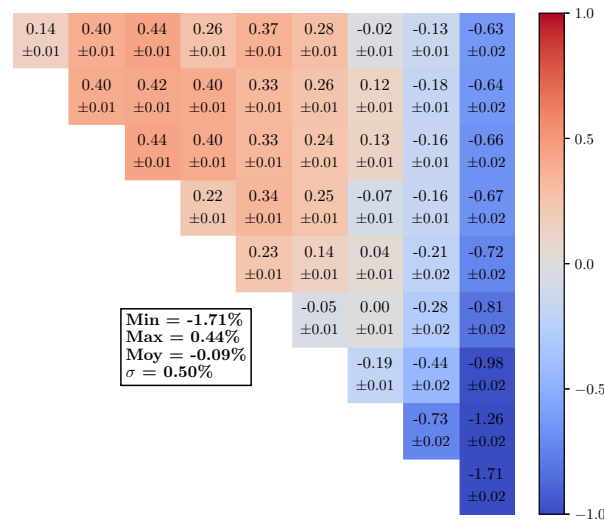
(c) Grilles en zircaloy4

Figure 4.24 Écart relatif (%) sur le flux rapide par cellule pour des assemblages OBA avec un enrichissement de 3,1 %, pour différentes configurations de grilles (cas SG + Tone)



(a) Sans grille

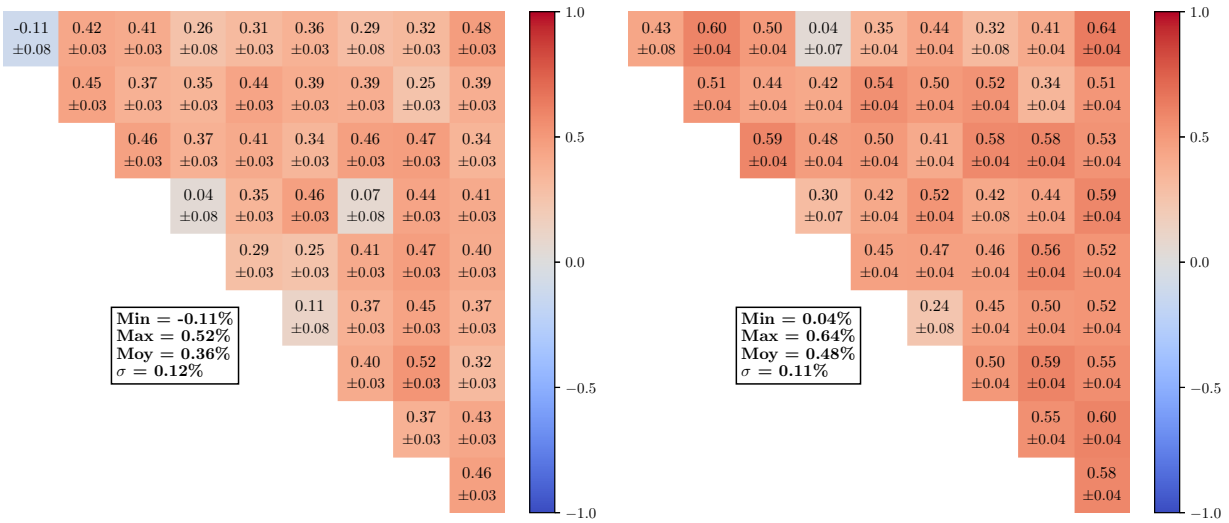
(b) Grilles en inconel/SS304



(c) Grilles en zircaloy4

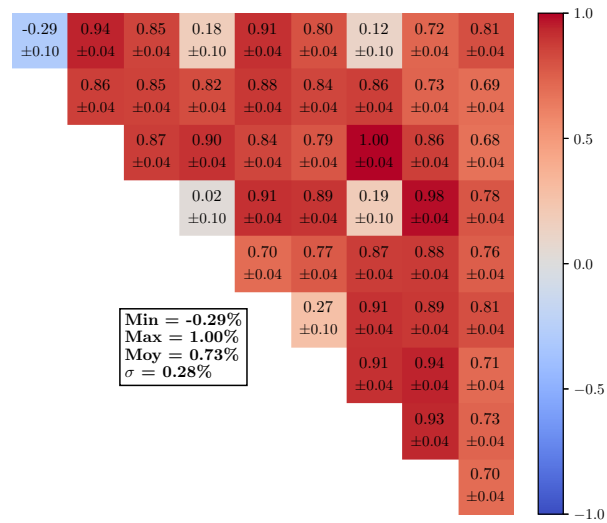
Figure 4.25 Écart relatif (%) sur le flux thermique par cellule pour des assemblages OBA avec un enrichissement de 3,1 %, pour différentes configurations de grilles (cas SG + Tone)

On observe les mêmes phénomènes pour le taux de capture (figures 4.26 et 4.27). On remarque que la capture dans le domaine thermique est surestimée dans les trous d'eau lorsque des grilles en inconel/SS304 sont présentes (figure 4.27b), contrairement aux autres cas.



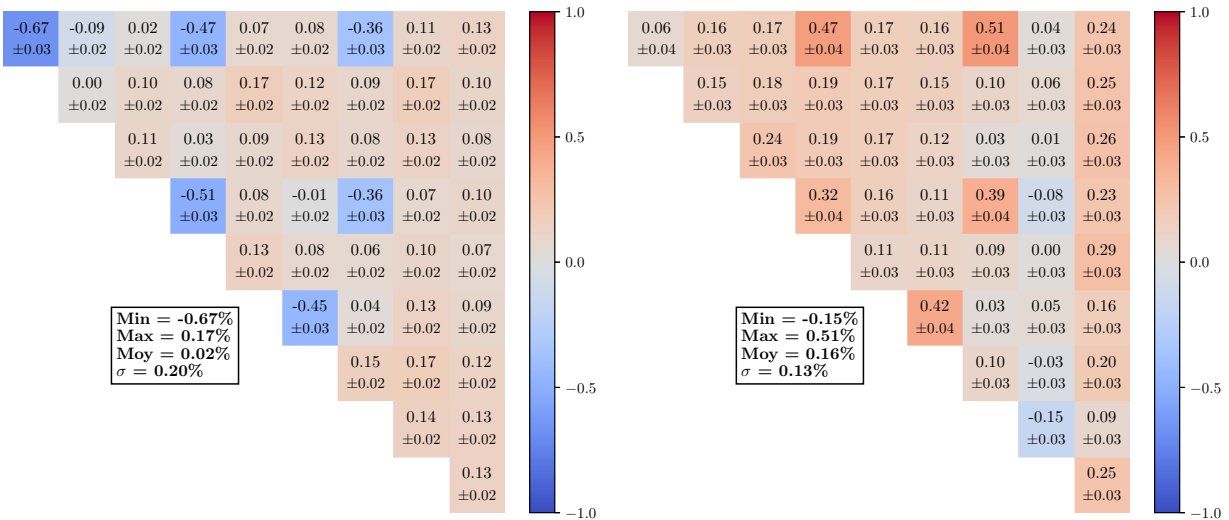
(a) Sans grille

(b) Grilles en inconel/SS304



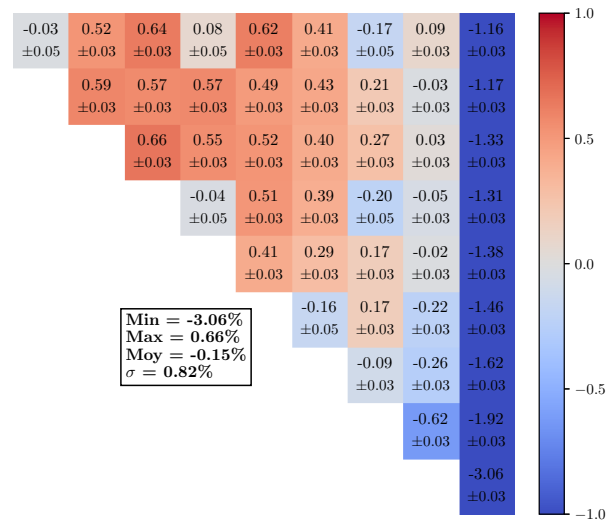
(c) Grilles en zircaloy4

Figure 4.26 Écart relatif (%) sur le taux de capture rapide par cellule pour des assemblages OBA avec un enrichissement de 3,1 %, pour différentes configurations de grilles (cas SG + Tone)



(a) Sans grille

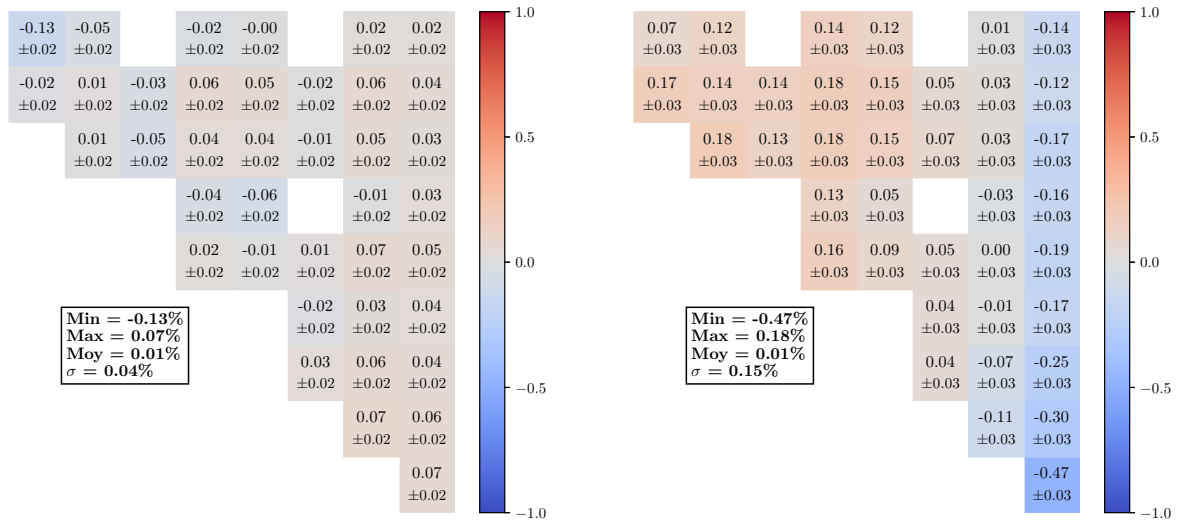
(b) Grilles en inconel/SS304



(c) Grilles en zircaloy4

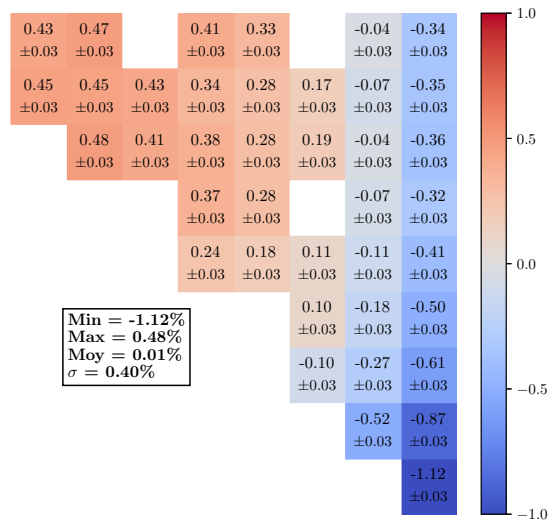
Figure 4.27 Écart relatif (%) sur le taux de capture thermique par cellule pour des assemblages 0BA avec un enrichissement de 3,1 %, pour différentes configurations de grilles (cas SG + Tone)

Concernant la prédiction du taux de fission par APOLLO3, on note des écarts bien plus importants dans les cas avec grilles (figure 4.28) (jusqu'à $-1,12\%$ dans le coin pour des grilles en zircaloy4, figure 4.28c). Le taux de fission est lui aussi surestimé au centre de l'assemblage et sous-estimé près des bords, APOLLO3 surestime donc la puissance au centre des assemblages avec grilles (principalement pour les grilles de zircaloy4).



(a) Sans grille

(b) Grilles en inconel/SS304



(c) Grilles en zircaloy4

Figure 4.28 Écart relatif (%) sur le taux de fission par cellule pour des assemblages 0BA avec un enrichissement de 3,1 %, pour différentes configurations de grilles (cas SG + Tone)

4.4 Conclusions du calcul réseau

À l'heure actuelle, l'option retenue pour le calcul réseau dans ce schéma est le cas *SG + Tone*. Ce jeu d'options a permis d'obtenir des valeurs du k_∞ sous-estimées par APOLLO3 avec un maximum de 225 pcm d'écart absolu dans les configurations pour lesquelles les assemblages ne possèdent pas de grilles de support, y compris pour les cas très hétérogènes comme les assemblages AIC. Les gains obtenus en utilisant la méthode des sous-groupes en mélange, et en étendant le domaine d'autoprotection à 5,53 eV pour les isotopes de l'uranium, portent majoritairement sur le taux de capture de l' ^{238}U , et permettent donc une meilleure prédiction du taux de production de ^{239}Pu au sein de l'assemblage. Les écarts par cellule sont, de plus, inférieurs au pour cent même pour des assemblages avec de forts absorbants (*AIC*, *B₄C*). Le taux de fission, quant à lui, est relativement bien prédit par APOLLO3, y compris pour des assemblages AIC, B4C et avec absorbants de type pyrex (BA).

Les hétérogénéités introduites par les grilles de support et les différents barreaux absorbants ont un effet sur la forme spatiale du flux calculé. Dans le domaine rapide le taux de capture est plus surestimé dans les cellules avec les barreaux en *AIC* que sur le reste de l'assemblage, et sous-estimé dans le *B₄C*, alors qu'une surestimation relativement homogène a lieu dans le cas sans absorbant. Ces hétérogénéités provoquent une sous-estimation plus importante du taux de capture dans le trou d'eau central (de l'ordre de 1%). Un écart positif plus important dans les cellules d'absorbant que dans les cellules voisines est observé. Concernant l'efficacité des barres de contrôle, les écarts obtenus sont inférieurs au pour-cent, avec respectivement une sur-estimation et une sous-estimation, dans les cas AIC et B4C.

Les grilles, qu'elles soient en inconel/SS304 ou en zircaloy4, provoquent un basculement des taux de réaction et du flux dans le domaine thermique vers le centre de la géométrie. Cet effet est plus marqué lorsque les grilles sont en zircaloy4 avec notamment un saut dans les écarts observés pour les cellules du bord (voir figure 4.27c). Pour la modélisation avec APOLLO3, les grilles dans chaque cellule ont été définies sous forme cylindrique (voir au chapitre 3, figure 3.7) contrairement à la géométrie TRIPOLI4 pour laquelle les représentations données dans BEAVRS (voir chapitre 3, figure 3.6) ont été conservées. De même, la grille externe placée autour de l'assemblage a été diluée dans la lame d'eau pour le calcul avec APOLLO3. Ces différences pourraient avoir un rôle dans les écarts obtenus, bien que dans le cas des grilles en inconel/SS304 les écarts soient moins marqués (quel que soit les matériaux composants les grilles la même modélisation géométrique a été mise en place). Le taux d'absorption rapide est plus sur-estimé avec les grilles en zircaloy4, cela pourrait provenir d'un défaut d'autoprotection des isotopes du *Zr* dans le domaine rapide. En effet, le zirconium présente des résonances au-dessus du keV (environ 100 eV pour le ^{92}Zr). Les écarts étant présents

dans les trois cas étudiés, l'utilisation de la méthode de Tone dans le domaine rapide ne semble pas en être la cause. La densité de Zr est plus importante dans chaque cellule avec les grilles, et des recouvrements de résonances ont lieu pour les isotopes concernés. Un traitement de l'autoprotection du Zr en mélange pourrait peut-être atténuer les écarts observés. Dans le domaine thermique ($E \leq 0,625 \text{ eV}$), l'autoprotection ne devrait pas avoir d'effet direct sur ces écarts. Il serait intéressant d'étudier le taux de capture des différents isotopes présents dans ces cellules, afin de cibler plus précisément la source des écarts.

Lors du calcul réseau, on procède aussi à la mise en place d'un modèle de fuite, à l'homogénéisation spatiale et la condensation en énergie des sections efficaces en prévision du calcul de cœur. Les choix faits pour ces opérations sont présentés dans la partie suivante.

CHAPITRE 5 MISE EN PLACE DU CALCUL DE CŒUR

Dans cette partie, les options du schéma de calcul associé au calcul de cœur complet et les résultats obtenus avec APOLLO3 sont traités, puis comparés aux données des détecteurs fournies dans BEAVRS. Aucune modélisation Monte-Carlo n'a été mise en place pour le cœur du réacteur à cause des difficultés numériques importantes et des ressources informatiques prohibitives associées à un tel calcul.

5.1 Options du calcul de cœur

5.1.1 Modèle de fuite, homogénéisation et condensation lors de l'étape réseau

Le modèle de fuite utilisé pour cette modélisation est un modèle B_1 homogène (voir section 2.4.4). L'homogénéisation et la condensation des sections efficaces autoprotégées sont réalisées par la méthode du flux scalaire telle que décrite section 2.4.5, aucune équivalence n'est mise en place lors de l'homogénéisation condensation ou lors de l'étape cœur.

5.1.2 Modélisation du réflecteur

Les sections efficaces autoprotégées, homogénéisées et condensées pour les matériaux constituant le réflecteur sont calculées en une dimension pour les réflecteurs axiaux avec le solveur IDT (méthode S_N), et en deux dimensions avec TDT-MOC pour le réflecteur radial.

Réflecteurs axiaux

Le réflecteur supérieur est découpé en quatre régions homogènes, depuis l'extrémité supérieure de la partie fissile active jusqu'au bord intérieur de la cuve du réacteur (*vessel* en anglais)(figure 5.1a). Le réflecteur inférieur est représenté en deux parties, depuis l'extrémité inférieure de la partie fissile active jusqu'au bord de la cuve (figure 5.1b). Dans un premier temps, on effectue un calcul d'assemblage en deux dimensions, que l'on homogénéise complètement de sorte à définir une pâte homogène utilisée comme matériau multiplicateur pour le calcul de traverse en une dimension (partie fissile produisant un flux vu par les régions définies plus tôt).

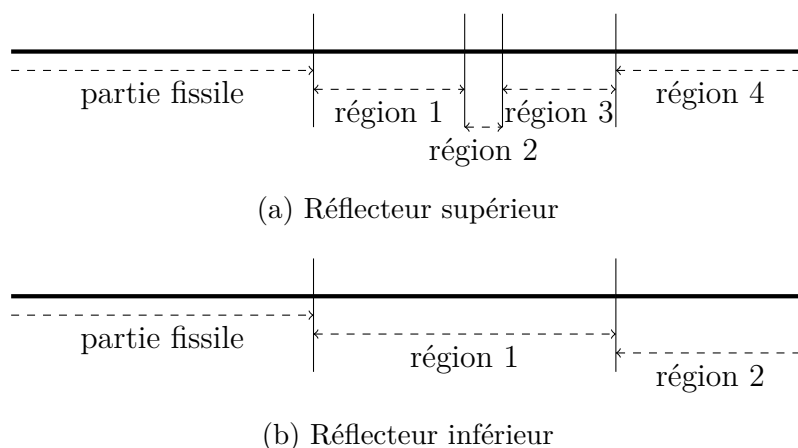


Figure 5.1 Schéma des traverses une dimension pour le calcul des réflecteurs axiaux

Réflecteur radial

On distingue deux réflecteurs radiaux, un réflecteur vu par les assemblages sur les côtés du cœur (figure 5.2a), et un réflecteur vu par les assemblages situés dans les coins du cœur (figure 5.2b). Ces deux macro-régions sont découpées en six et huit zones respectivement :

- Pour les côtés : lame d'eau, peau (*baffle* en anglais) 1, peau 2, eau, jupe (*barrel* en anglais), eau.
- Pour les coins : lame d'eau, peau (*baffle* en anglais) 1, peau 2, eau, jupe (*barrel* en anglais), lame d'eau (entre la peau et la protection neutronique), protection neutronique (*neutron pad* en anglais), eau.

Pour le réflecteur positionné dans les coins, des protections neutroniques pour limiter la fluence cuve dans les directions écrantées est ajoutée (composée d'acier, elle s'étend sur 32° centrée à 45° [2]).

Pour réaliser le calcul des sections efficaces autoprotégées, homogénéisées et condensées, une traverse de cellules de combustible sur une longueur de trois assemblages suivie des matériaux réflecteurs définis plus tôt est modélisée. L'équation du transport est résolue à l'aide de la méthode des caractéristiques (MOC) à 383 groupes en énergie, sur le même modèle que les calculs réseau étudiés précédemment.

5.1.3 Options du solveur cœur

Les options définies lors du calcul de cœur sont les suivantes :

- Solveur MINARET (méthode S_N)
- Quadrature de type produit cartésien (Gauss-Chebyshev)

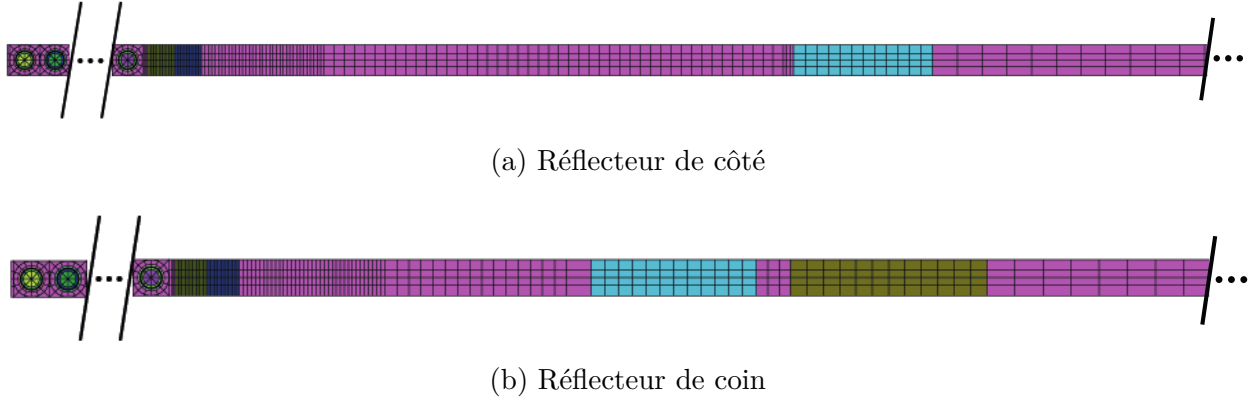


Figure 5.2 Traverses des réflecteurs radiaux pour le calcul de flux avec APOLLO3

- 4 directions polaires définies dans $[0; \frac{\pi}{2}]$ et 3 directions azimutales définies dans $[0; \frac{\pi}{2}]$, soit $(4 \times 2) \times (3 \times 4) = 96$ directions en trois dimensions
- Discrétisation spatiale : éléments finis discontinus de Galerkin (quadratiques axialement et radialement)
- Taille de maille d (en cm) : voir équation suivante

$$d = 1,3 \text{ cm dans les assemblages}$$

$$d = 0,7 \text{ dans la juppe et l'eau (pour } R < R_{\text{peau}})$$

$$d(r) = \log_{3,5}(r - R_{\text{peau}} + 1) + 0,7 \text{ pour } r \geq R_{\text{peau}}$$

La taille de maille est définie de façon à ce que son évolution soit continue entre le rayon de la peau et le rayon externe de la géométrie (correspondant au rayon interne de la cuve), avec une taille maximale d'environ 3,5 cm en périphérie (voir figures 5.3 et 5.4).

5.2 Comparaison au benchmark : méthode et résultats

Les données fournies dans le benchmark sont proportionnelles aux réponses données par des détecteurs internes au cœur. Les détecteurs utilisés pour ces mesures expérimentales sont de petites chambres à fission constituées d' ^{235}U traversant les tubes d'instrumentation (trou d'eau central d'un assemblage) des différents assemblages instrumentés [2]. Afin de modéliser ces détecteurs dans le calcul avec APOLLO3, et d'obtenir des résultats proportionnels aux données de BEAVRS, de faibles quantités d' ^{235}U (de l'ordre de $10^{-12} \text{ atomes.barn}^{-1}.\text{cm}^{-1}$) sont placées dans l'eau des tubes d'instrumentation (au centre de l'assemblage) lors du calcul réseau effectué pour le calcul des bibliothèques de sections efficaces autoprotégées, homogé-

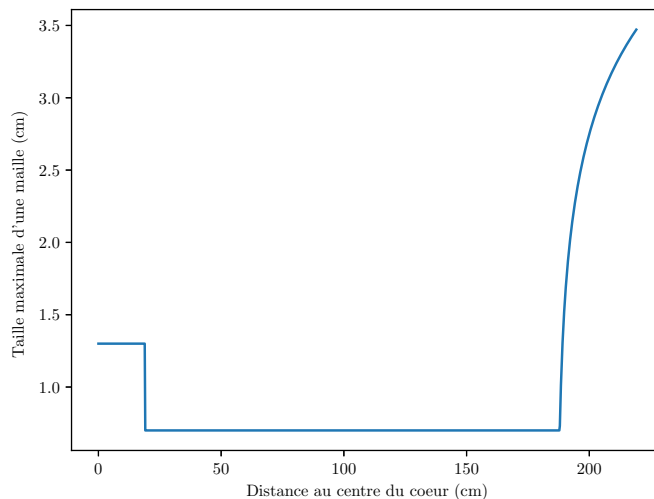
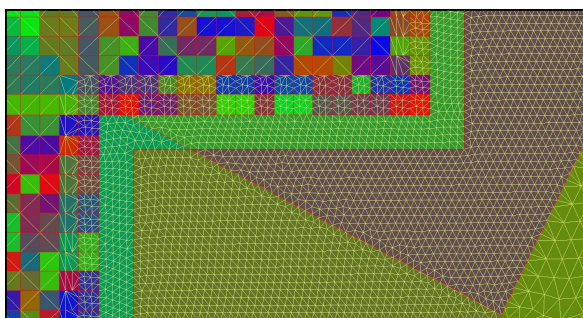
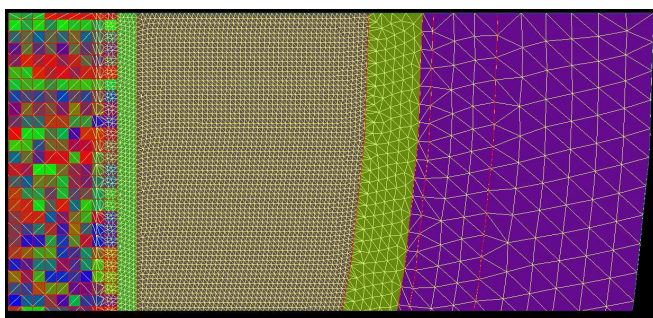


Figure 5.3 Taille maximale d'une maille radiale en fonction de la position le long de l'axe x (en $y = 0$)



(a) Près de la peau



(b) En périphérie du cœur

Figure 5.4 Maillage MINARET

néisées et condensées, de sorte que le comportement physique du cœur ne soit pas influencé, mais qu'un taux de fissions pour ce matériau puisse être comptabilisé. On compare alors le taux de fission intégré axialement obtenu par APOLLO3 pour les cellules instrumentées à la réponse des détecteurs donnée dans le benchmark pour l'assemblage correspondant. Les résultats sont normalisés de telle sorte que :

$$\tilde{x}_i = x_i \times \frac{\text{nombre d'assemblages instrumentés (58)}}{\sum_i x_i} \quad (5.1)$$

Où x_i est le score brut intégré axialement en sortie du calcul APOLLO3 ou fourni par le benchmark et \tilde{x}_i est le score après normalisation. Les résultats obtenus sont présentés figures

5.5 et 5.6.

Deux calculs ont été effectués, l'un avec un développement de la loi de choc en P_1 , l'autre en P_3 . Les résultats obtenus pour la configuration HZP du réacteur, à concentration de bore critique dans le cas réel, sont respectivement de 0,99711 et 0,99750 pour le facteur de multiplication effectif, soit une sous-estimation de 289 pcm dans le cas d'une diffusion linéairement anisotrope, et 250 pcm dans le cas anisotrope d'ordre trois.

La spécification BEAVRS dans sa version 2.0.2 propose un jeu de données corrigées pour la réponse des détecteurs. En effet, une oscillation de la puissance est observée au démarrage lors des mesures expérimentales, mais n'est pas reproduite par le calcul déterministe produisant des résultats symétriques. La figure 5.5 illustre cette différence, avec des écarts forts entre les régions nord-ouest et sud-est du cœur (jusqu'à +15,2% d'écart contre -9,2%). La figure 5.6 présente la comparaison entre les données corrigées (*tilt correct* en anglais) et les résultats APOLLO3. On constate une bascule du taux de fission vers l'extérieur du cœur dans le calcul APOLLO3, avec un écart relatif d'environ -5% au centre du cœur et +5% en périphérie. Différentes sources d'erreur sont possibles, les biais liés aux données nucléaires, la modélisation du réflecteur ou encore une erreur dans les jeux de données utilisés. La modélisation mise en place montre la possibilité d'une modélisation de la nappe macroscopique de puissance par APOLLO3 avec une erreur maximale de l'ordre de 5%. Il est à noter que l'utilisation de l'homogénéisation par la méthode des moments du flux donne des résultats similaires à ceux obtenus avec la méthode d'homogénéisation par le flux scalaire.

Concernant la volumétrie du calcul, une bonne station de travail peut le réaliser en environ 45 heures de calcul avec une occupation de la mémoire vive de l'ordre de 120 Go.

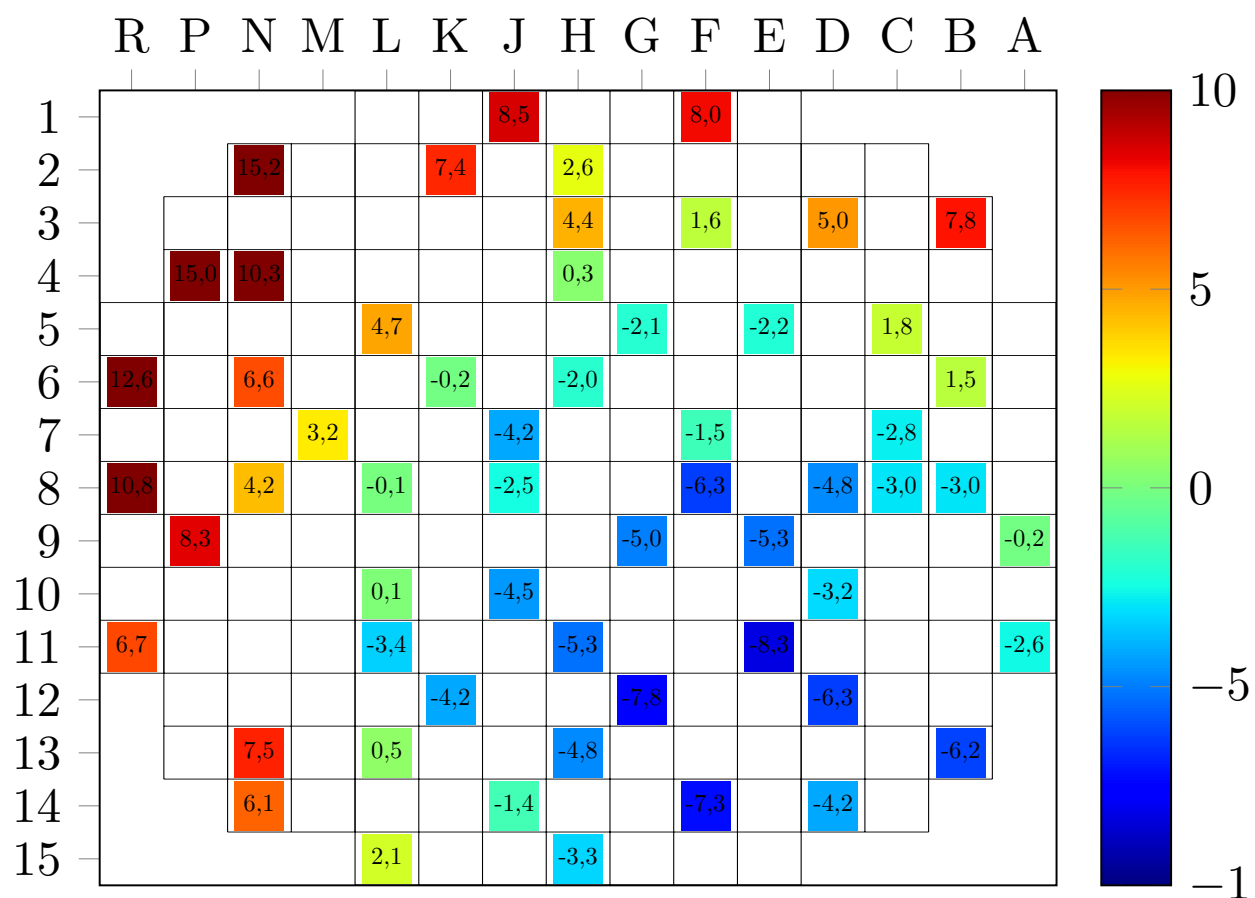


Figure 5.5 Écarts relatifs entre le taux de fission calculé avec APOLLO3 dans les tubes d'instrumentations (normalisé) et les réponses des détecteurs fournies dans BEAVRS (normalisées)

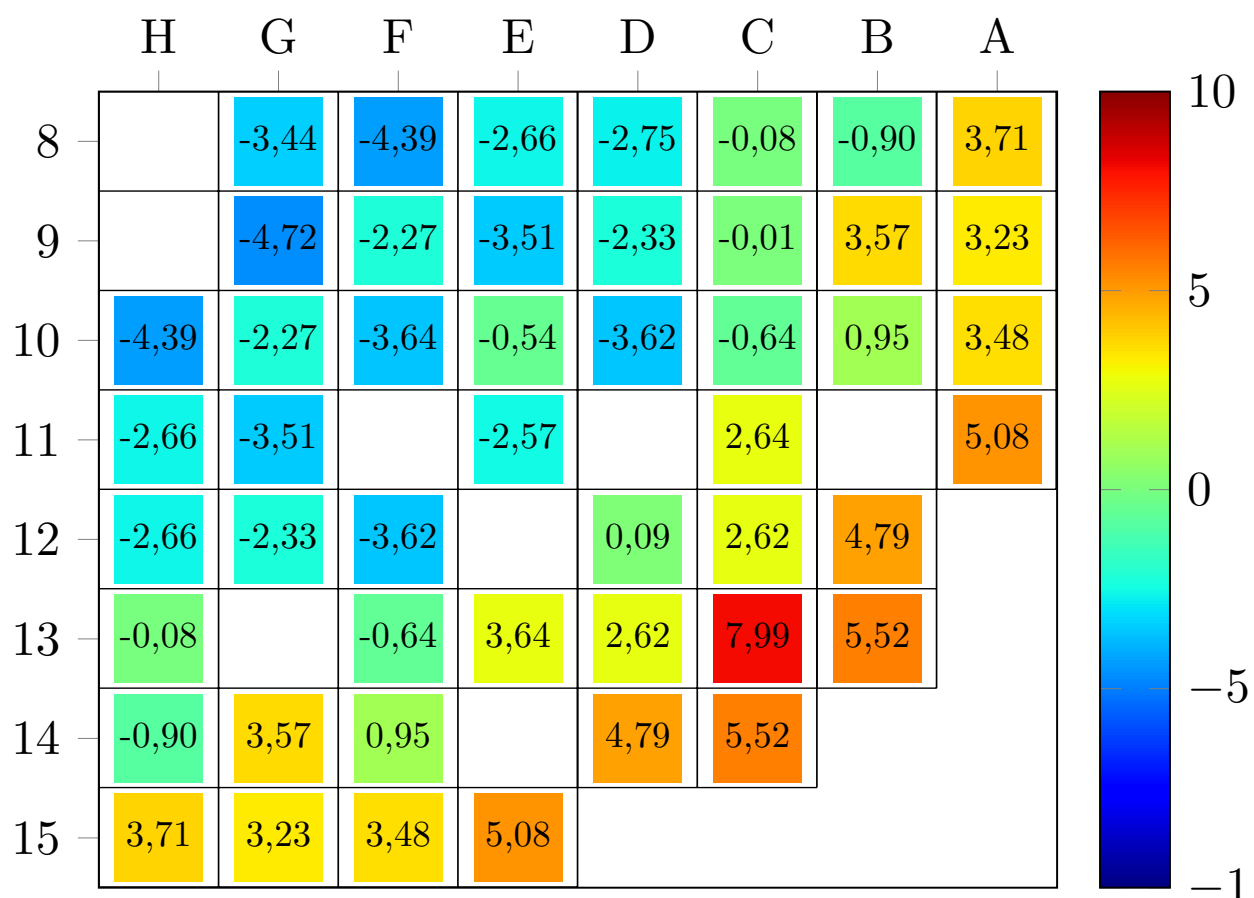


Figure 5.6 Écarts relatifs entre le taux de fission calculé avec APOLLO3 dans les tubes d'instrumentations (normalisé et ramené dans un quart du cœur grâce aux symétries) et les réponses des détecteurs fournies dans BEAVRS (normalisées) avec prise en compte de la correction de la bascule initiale

CHAPITRE 6 CONCLUSION

6.1 Synthèse des travaux

6.1.1 Schéma réseau

Ce projet a pour objectif la validation des capacités du code APOLLO3 à reproduire finement la réactivité et une nappe de puissance lors du fonctionnement hors situation accidentelle d'un réacteur de type REP. Le schéma de calcul mis en place a été validé pour les calculs de réseau, avec des résultats proches de calculs de références effectués en théorie statistique avec le code Monte-Carlo TRIPOLI4. L'utilisation de la méthode des sous-groupes pour l'autoprotection, et notamment la prise en compte de mélanges d'isotopes résonants dans le combustible et les barreaux absorbants, permet un gain de précision sur le calcul des taux de réactions associés, participant à l'amélioration générale des résultats observés. Il a été montré que l'utilisation de la méthode de Tone dans le domaine rapide permet un gain non négligeable du temps de calcul, pour des résultats similaires à la méthode des sous-groupes seule. Le schéma utilisé pour le calcul d'assemblage est donc le suivant :

- données nucléaires : JEFF 3.1.1
- utilisation du maillage REL383
- autoprotection à l'aide de la méthode des sous-groupes avec prise en compte des mélanges (^{235}U , ^{238}U) et (^{107}Ag , ^{109}Ag)
- utilisation de la méthode de Tone dans le domaine rapide (groupes 1 à 74)
- utilisation de la méthode des probabilités de collision pour le calcul du flux interne à l'autoprotection avec un développement P0 de la loi de choc
- utilisation de la méthode des caractéristiques pour le calcul de flux principal avec un développement P3 de la loi de choc

La modélisation des grilles de support au niveau de l'assemblage provoque des écarts plus importants, particulièrement en périphérie de l'assemblage pour les grilles en zircaloy4.

6.1.2 Schéma cœur

La modélisation du cœur a été comparée au cas réel décrit dans le benchmark BEAVRS. Le calcul effectué sur le cœur complet avec APOLLO3 mène à des écarts de 250 *pcm* pour la valeur du coefficient de multiplication effectif, et de l'ordre de 5% pour le taux de fission. Une bascule de ce taux de fission a été observée entre le centre du cœur, présentant des écarts relatifs proches de 5%, et la périphérie avec des écarts pouvant atteindre ponctuellement 8%.

Les options utilisées pour le calcul de cœur final sont les suivantes :

- condensation par les moments du flux à 20 groupes en énergie lors du calcul d’assemblage
- utilisation d’un modèle de fuite B_1 homogène lors du calcul d’assemblage
- modélisation cellule par cellule de la géométrie des assemblages
- méthode S_N (MINARET)
- quadrature produit de type Gauss-Chebyshev (option *cartesian_product*) avec 96 directions définies en trois dimensions
- éléments finis quadratiques axialement et radialement
- développement P3 de la loi de choc

6.1.3 Jeux de données

Des jeux de données en langage Python ont été produits dans le cadre du projet. Des bibliothèques de sections efficaces autoprotégées, homogénéisées et condensées sont disponibles pour chaque assemblage du benchmark, à différentes concentrations de bore pour la suite de la validation. Les scripts Python associés à la production de ces bibliothèques et à la validation du calcul réseau sont disponibles pour les codes APOLLO3 et TRIPOLI4. Enfin, la géométrie du cœur (configuration du premier cycle de fonctionnement) a aussi été produite à l’aide de l’interface INCA, développée en langage Python au CEA.

6.2 Limitations de la solution proposée

Concernant les résultats obtenus lors du calcul réseau, l’évolution de l’écart entre APOLLO3 et TRIPOLI4 au sein des assemblages avec des grilles de support en zircaloy4 reste inexplicquée; ce point sera analysé prochainement au LEPh. Les grilles sont traitées de la même manière lors de la construction de la géométrie, l’assignation des matériaux et la dilatation des structures (utilisation des mêmes méthodes implémentées dans l’interface INCA).

La solution obtenue pour le calcul de cœur a été directement comparée aux mesures effectuées sur le réacteur réel lors du fonctionnement. Les écarts obtenus proviennent donc de différentes origines, parmi lesquelles d’éventuels biais sur les données nucléaires et les hypothèses faites lors de la modélisation géométrique. Durant ce projet, aucun calcul stochastique du cœur complet en configuration HZP n’a été effectué à mêmes données nucléaires pour occulter le biais dû à celles-ci. Les seuls résultats présentés dans ce mémoire portent sur la valeur du k_{eff} et la réponse radiale des détecteurs. Toutefois, d’autres mesures ont été effectuées sur le réacteur, telles que le poids des barres de contrôle, le coefficient de température ou encore la

concentration de bore critique au cours des deux premiers cycles de fonctionnement (nécessite un calcul en évolution). Ces mesures n'ont pas été comparées à des résultats numériques par manque de temps. De plus, l'effet des grilles de support sur la forme du flux axial au sein du cœur complet n'a pas été mis en exergue en comparant les réponses des détecteurs axiaux aux résultats obtenus avec APOLLO3.

6.3 Perspectives

Par expérience, il est conseillé d'éviter au maximum d'utiliser les interfaces utilisateur en développement pour ce genre de projet. Si elles permettent d'utiliser certaines méthodes très utiles, elles peuvent manquer de souplesse dans certains cas particuliers. La validation devrait être faite au plus proche du code possible avant implémentation dans ce genre d'interface.

Les scripts proposés constituent une piste de travail pour les futurs développements du schéma de calcul. Il serait intéressant de produire un calcul stochastique du cœur complet pour éliminer les biais dus aux données nucléaires, et donc vérifier la validité des choix faits quant aux options utilisés lors du calcul avec APOLLO3 (notamment la modélisation du réflecteur). Cela pourrait permettre de mieux cibler les sources d'erreur entre le calcul déterministe et la situation réelle.

Il a été choisi de ne pas mettre en place d'équivalence transport-transport pour le calcul de réflecteur, et l'homogénéisation-condensation lors de l'étape réseau. L'objectif était de valider les capacités de la méthode d'homogénéisation-condensation par les moments du flux, pour une géométrie cellule par cellule, sans équivalence. Il serait intéressant de comparer les résultats obtenus avec ceux que l'on obtiendrait en utilisant une homogénéisation-condensation par le flux avec la mise en place d'une équivalence, sachant que des scripts sont disponibles pour effectuer ces calculs réseau. Le modèle de fuite B_1 homogène, utilisé dans les schémas mis en place pour les REP jusqu'ici, permet d'obtenir des résultats corrects. Mettre en place un calcul réseau avec application d'un modèle B_1 hétérogène permettrait de quantifier les effets de l'hypothèse du mode fondamental homogène pour le calcul des fuites neutroniques.

Différentes méthodes de résolution de l'équation du transport sont disponibles dans APOLLO3. Afin d'optimiser le schéma réseau, la méthode des courants d'interface avec un regroupement des cellules en différentes régions d'autoprotection peut être utilisée lors de l'autoprotection. Cela permettrait de gagner en temps de calcul lors de cette étape, car la géométrie n'est alors pas traitée dans son ensemble comme c'est le cas pour la méthode des probabilités de collision exacte du module TDT-CPM. Néanmoins, la construction de la géométrie dans ce cas diffère de celle mise en place lors du projet. En effet, le solveur MULTICELL (méthode

des courants d'interface) n'accepte que des géométries de type *cell*, or les demi-lames d'eau modélisées lors du calcul réseau sont des objets de type *grid*, que l'ont raffine pour le calcul de flux. La méthode *EquiGeom* utilisée pour le couplage des calculs de flux et d'autoprotection (voir méthode des sous-groupes d'ECCO, section 2.4.3, figure 2.7) nécessite deux géométries de même type pour le calcul de flux et l'autoprotection. La méthode de raffinement des cellules de type *cell* doit donc permettre de construire la géométrie raffinée voulue pour le calcul de flux à l'aide de la méthode des caractéristiques. Des développements récents doivent permettre d'effectuer ce couplage.

Le schéma de calcul proposé n'a été utilisé que pour le calcul statique en configuration HZP. Il reste donc à mettre en place le calcul d'évolution pour le premier cycle de fonctionnement du réacteur. À moyen terme, le but est de mettre en place la prise en compte des contre-réactions thermohydrauliques dans le schéma en évolution. Par la suite, nous proposons d'étudier le second cycle de fonctionnement du réacteur, pour lequel des données expérimentales sont également disponibles.

RÉFÉRENCES

- [1] D. Schneider, F. Dolci, F. Gabriel, J. Palau, M. Guillo, B. Pothet, P. Archier, K. Ammar, F. Auffret, R. Baron *et al.*, “APOLLO3® : CEA/DEN deterministic multi-purpose code for reactor physics analysis,” dans *Proceedings of PHYSOR*, 2016.
- [2] N. Horelik, B. Herman, B. Forget et K. Smith, “Benchmark for evaluation and validation of reactor simulations (BEAVRS), v1.0.1,” dans *Proc. Int. Conf. Mathematics and Computational Methods Applied to Nuc. Sci. & Eng*, 2013.
- [3] A. Santamarina, D. Bernard, P. Blaise, M. Coste, A. Courcelle, T. Huynh, C. Jouanne, P. Leconte, O. Litaize, S. Mengelle *et al.*, “The JEFF-3.1.1 nuclear data library,” *JEFF report*, vol. 22, n°. 10.2, p. 2, 2009.
- [4] A. Hébert, *Applied reactor physics*, 2^e éd. Presses internationales Polytechnique, 2016.
- [5] P. Reuss, *Précis de neutronique*. EDP sciences, 2012.
- [6] B. G. Carlson, “Solution of the transport equation by Sn approximations,” Los Alamos Scientific Lab., N. Mex., Rapport technique, 1955.
- [7] J. Moller et J. Lautard, “MINARET, a deterministic neutron transport solver for nuclear core calculations,” 2011.
- [8] S. Santandrea et P. Mosca, “Linear surface characteristic scheme for the neutron transport equation in unstructured geometries,” *Proceeding of Physor 2006*, p. 10–14, 2006.
- [9] D. Raynaud, “Rapport de projet de fin d’étude,” Mémoire de maîtrise, INP Grenoble - Phelma, 2018.
- [10] A. Santamarina, C. Collignon et C. Garat, “French calculation schemes for light water reactor analysis,” *The Physics of Fuel Cycles and Advanced Nuclear Systems : Global Developments (PHYSOR 2004)*, 2004.
- [11] K. Lassmann, C. O’carroll, J. Van de Laar et C. Walker, “The radial distribution of plutonium in high burnup UO₂ fuels,” *Journal of Nuclear Materials*, vol. 208, n°. 3, p. 223–231, 1994.
- [12] A. Canbakan, “Validation d’un nouveau calcul de référence en évolution pour les réacteurs thermiques,” Mémoire de maîtrise, École Polytechnique de Montréal, 2014.
- [13] J. Vidal, O. Litaize, D. Bernard, A. Santamarina, C. Vaglio-Gaudard et R. Tran, “New modelling of LWR assemblies using the APOLLO2 code package,” *Proc. Joint Int. Top. Mtg. on Mathematics & Computation and Supercomputing in Nuclear Applications (M&C+ SNA 2007)*, p. 15–19, 2007.

- [14] L. B. Levitt, “The probability table method for treating unresolved neutron resonances in Monte Carlo calculations,” *Nuclear Science and Engineering*, vol. 49, n^o. 4, p. 450–457, 1972.
- [15] D. E. Cullen, “Application of the probability table method to multigroup calculations of neutron transport,” *Nuclear Science and Engineering*, vol. 55, n^o. 4, p. 387–400, 1974.
- [16] M. Nikolaev, A. Ignatov, N. Isaev et V. Kokhlov, “The method of subgroups for considering the resonance structure of the cross sections in neutron calculations (part 1),” *Atomic Energy*, vol. 29, n^o. 1, p. 689–695, 1970.
- [17] M. N. Nikolaev, “Comments on the probability table method,” *Nuclear Science and Engineering*, vol. 61, n^o. 2, p. 286–287, 1976.
- [18] P. Ribon et J.-M. Maillard, “Les tables de probabilité : Application au traitement des sections efficaces pour la neutronique,” *Report CEA-N, NEACRP-L-294*, 1986.
- [19] O. Keltoum Bouhelal et P. Ribon, “Calculation of slowing down with probability tables,” vol. 62, USA, 1990//, p. 575 – 6.
- [20] O. Bouhelal et P. Ribon, “Probabilities tables. A method of treatment of neutronic problems,” Marrakesh, Morocco, 1991, p. 225 – 232.
- [21] J.-C. Sublet et P. Ribon, “A probability table based cross section processing system : CALENDF - 2001,” *Journal of Nuclear Science and Technology*, vol. 39, n^o. sup2, p. 856–859, 2002.
- [22] M. Coste-Delclaux, “Modélisation du phénomène d’autoprotection dans le code de transport multigroupe APOLLO2,” *Conservatoire national des arts et métiers (France)*, 2006.
- [23] L. Mao, “Subgroup method in the APOLLO3 self-shielding calculations,” 2011.
- [24] L. Mao et I. Zmijarevic, “A new Tone’s method in APOLLO3® and its application to fast and thermal reactor calculations,” *Nuclear Engineering and Technology*, vol. 49, n^o. 6, p. 1269–1286, 2017.
- [25] J.-F. Vidal, “Contribution à l’amélioration des méthodes déterministes et des schémas de calcul neutronique des réacteurs nucléaires,” Habilitation à diriger des recherches, CEA/DEN/DER/SPRC/LEPh, 2018.
- [26] T. Tone, “A numerical study of heterogeneity effects in fast reactor critical assemblies,” *Journal of Nuclear Science and Technology*, vol. 12, n^o. 8, p. 467 – 81, 1975/08/.
- [27] J.-F. Vidal, P. Archier, B. Faure, V. Jouault, J.-M. Palau, V. Pascal, G. Rimpault, F. Auffret, L. Graziano, E. Masiello *et al.*, “APOLLO3 homogenization techniques for transport core calculations—application to the ASTRID CFV core,” *Nuclear Engineering and Technology*, vol. 49, n^o. 7, p. 1379–1387, 2017.

- [28] G. Rimpault, J.-F. Vidal et W. Van Rooijen, “Neutron leakage treatment in reactor physics. consequences for predicting core characteristics,” Rapport technique, 2015.
- [29] A. Haghghat, *Monte Carlo Methods for Particle Transport*. Crc Press, 2016.
- [30] J. F. Briesmeister, “MCNP : a general Monte Carlo code for neutron and photon transport. version 3A. Revision 2,” Los Alamos National Lab., Rapport technique, 1986.
- [31] J. Leppänen, M. Pusa, T. Viitanen, V. Valtavirta et T. Kaltiaisenaho, “The Serpent Monte Carlo code : Status, development and applications in 2013,” dans *SNA+MC 2013-Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications+ Monte Carlo*. EDP Sciences, 2014, p. 06021.
- [32] E. Brun, F. Damian, C. Diop, E. Dumonteil, F. Hugot, C. Jouanne, Y. Lee, F. Malvagi, A. Mazzolo, O. Petit *et al.*, “TRIPOLI4®), CEA, EDF and AREVA reference Monte Carlo code,” dans *SNA+ MC 2013-Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications+ Monte Carlo*. EDP Sciences, 2014, p. 06023.
- [33] A. Dudognon, “Modélisation neutronique d’un coeur de démarrage : Benchmark international BEAVRS,” Mémoire de maîtrise, Grenoble-INP PHELMA, 2017.
- [34] S. Palmtag, “Investigation of thermal expansion effects in MPACT,” CASL-U-2016-1015-000, Consortium for Advanced Simulation of Light Water . . . , Rapport technique, 2016.
- [35] N. Lyoussi-Charrat, “Calcul de transport neutronique dans le code APOLLO2 par la méthode des probabilités de collision dans une géométrie cartésienne générale,” Rapport, CEA/DEN/DM2S/SERMA/LENR, 1994.
- [36] R. Sanchez et A. Chetaine, “A synthetic acceleration for a two-dimensional characteristic method in unstructured meshes,” *Nuclear science and engineering*, vol. 136, n^o. 1, p. 122–139, 2000.
- [37] B. Roque, A. Santamarina, C. Mattera et E. Lejeune, “Validation of the new french criticality-safety package CRISTAL,” dans *Top. Meeting on Criticality-safety Challenges in the Next Decade, Chelan, USA*, 1997, p. 7–11.
- [38] A. Calloo, “Développement d’une nouvelle modélisation de la loi de choc dans les codes de transport neutronique multigroupes,” Thèse de doctorat, Université de Grenoble, 2012.
- [39] J.-F. Vidal et D. Raynaud, “Combining the Tone’s and subgroup models for reference LWR self-shielding and calculations in APOLLO3®),” dans *PHYTRA 2018, The Fourth International Conference on Physics and Technology of Reactors and Applications, Marrakech, Morocco*, 2018.