

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE

Cette thèse intitulée:

**APPLICATIONS DE LA MÉTHODE À COURANTS D'INTERFACE
POUR LA MODÉLISATION DE SUPERCELLULES
TRIDIMENSIONNELLES**

présentée par Robert ROY

en vue de l'obtention du grade de Ph.D.

a été dûment acceptée par le jury d'examen constitué de:

M. Daniel ROZON, président.....

M. Alain HÉBERT,

M. Guy MARLEAU,.....

M. Guy HOTTE,.....

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

**APPLICATIONS DE LA MÉTHODE À COURANTS D'INTERFACE
POUR LA MODÉLISATION DE SUPERCELLULES
TRIDIMENSIONNELLES**

par

Robert ROY

**INSTITUT DE GÉNIE ÉNERGÉTIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE**

**THÈSE PRÉSENTÉE EN VUE DE L'OBTENTION
DU GRADE DE PHILOSOPHIÆ DOCTOR (Ph.D.)
(GÉNIE NUCLÉAIRE)**

Juillet 1987

© Robert Roy 1987

SOMMAIRE

Dans un réacteur de type CANDU (CANada Deutérium Uranium), les mécanismes de réactivité sont disposés à angle droit par rapport aux canaux de combustible. Une résolution de l'équation de transport neutronique en géométrie tridimensionnelle s'avère indispensable afin d'apprécier les variations du flux engendrées par le déplacement des mécanismes de régulation de la puissance du réacteur (compartiments de réglage de la puissance zonale, barres absorbantes en acier ou au cobalt, ...).

Nous allons donc développer et qualifier une technique déterministe de calcul des "supercellules" (définies comme des régions du réacteur contenant, à la fois, du combustible, des matériaux de structure, du modérateur, du caloporteur et des mécanismes de réactivité), laquelle technique est basée sur la méthode à courants d'interface (CI).

Cette méthode permet la résolution de l'équation de transport des neutrons dans un domaine rectangulaire tridimensionnel composé de sous-domaines, que nous appellons "cellules". Le formalisme de la méthode à courants d'interface est employé pour coupler les différentes cellules d'un

domaine. Au niveau de chaque cellule, le comportement des neutrons est déterminé par des matrices de réponses qui sont évaluées en utilisant la méthode des probabilités de collision (PC).

Pour des cellules homogènes de géométrie simple (rectangulaire ou cylindrique), des réductions analytiques nous ont permis de simplifier les équations intégrales décrivant ces PC; une méthode permettant la subdivision de cellules rectangulaires homogènes a également été élaborée. Pour des cellules hétérogènes de géométrie mixte, contenant à la fois des zones de formes rectangulaire et cylindrique, nous avons développé une méthode de quadrature permettant de préserver les propriétés fondamentales de symétrie des probabilités à calculer. Cette quadrature fait intervenir des familles de directions dont les symétries fondamentales respectent celles de la géométrie de la supercellule.

Afin de faciliter le respect des lois de réciprocité, les matrices de réponse résultant de la discrétisation spatiale de chaque cellule par un calcul de PC, ainsi que la matrice globale obtenue par assemblage de toutes les cellules, ont aussi été exprimées sous forme symétrique.

Le cas le plus souvent rencontré de supercellule fait intervenir un réseau de cellules rectangulaires, qui constitue un quadrillage appliqué sur le domaine initial. Pour résoudre de tels réseaux, nous avons mis au point une procédure des directions alternées (ADI), où le couplage des courants selon chaque axe est utilisé à tour de rôle. La vitesse de convergence sur les courants et les flux obtenus par ce processus itératif a été notablement accélérée par le calcul de paramètres de relaxation résultant de la minimisation d'une fonctionnelle qui évalue l'erreur globale sur le système.

Ces développements ont été intégrés dans un logiciel appelé EXCELL, entièrement écrit en Fortran 77. La version actuelle de ce code est constituée de six modules interdépendants qui permettent un traitement des cellules à plusieurs groupes d'énergie. Couplé à d'autres logiciels de transport, EXCELL s'inscrit dans une chaîne de calcul permettant de déterminer la distribution de la puissance de fission sur l'ensemble du réacteur.

Pour qualifier ces méthodes, nous présentons des résultats numériques de deux types: des comparaisons avec un calcul de référence et des calculs d'application. Les calculs d'un assemblage de cellules, typique

aux réacteurs à eau sous pression (REP), sont comparés à ceux obtenus en utilisant le logiciel bidimensionnel EURYDICE. Des réductions analytiques de cellules homogènes rectangulaires ont été comparées aux calculs obtenus par les logiciels SHETAN et EXCELL. À l'aide de ces deux derniers logiciels, nous avons aussi effectué des calculs d'application pour une cellule contenant une croix de poison. Nous avons finalement analysé les résultats d'un calcul d'assemblage tridimensionnel modélisant les compartiments de réglage à eau légère du réacteur CANDU.

ABSTRACT

The design of reactivity devices in a CANada Deuterium Uranium (CANDU) reactor requires computer codes capable of dealing with neutron-transport problems in a general three-dimensional (3D) geometry. This thesis presents an efficient deterministic approach, based on the interface current (IC) formalism, in order to reduce the integral transport equation in the modelling of an "extended cell" that contains fuel, moderator, reactor hardware and controllers inserted perpendicularly to fuel channels.

Basically, 3D calculations are done in the following way. The extended cell (the domain) to be analyzed is divided into subregions, which we refer to later as "cells". The neutron current distribution leaving each cell is determined, via a response matrix, as a function of the current entering the cell. We used the collision probability (CP) method to obtain response matrices for each cell.

Because the determination of CP matrices is the time consuming part of the transport calculation, we have tailored an efficient ray tracing

method to describe neutron paths within the cells, allowing the calculation of the CP within arbitrary three-dimensional geometries. This method, which respects the implicit geometric symmetry of the cell, is used to compute all probabilities inside heterogeneous rectangular cells containing zones of mixed cylindrical and rectangular geometry. In order to accelerate the treatment of homogeneous cells, further reductions are also applied to the integrals involved in CP calculations.

A symmetrized form for the global linear system of equations is obtained after discretization of the integral transport equation over the extended cell.

The solution of this system over a domain consisting of a rectangular 3D lattice of cells is achieved using an ADI iteration scheme, making use of the interchangeability of the roles of cells along each cartesian direction. To speed up the convergence of this iterative procedure, we chose to compute a relaxation factor using the residual minimization technique. A new code, called EXCELL, has been written in Fortran 77 to perform such 3D calculations. This modular code can treat 3D lattices of cells in a multi-energy group discretization.

To qualify these methods, numerical results are reported for a PWR rod assembly, where we compare the 2D code EURYDICE results with ours. To validate analytical reductions in an homogeneous rectangular cell, we compare them to either SHETAN or EXCELL calculations. Using these two last codes, calculations for a cell with a cruciform absorber are also reported. The case of light-water zone control assemblies is finally studied as an application of a typical 3D situation inside a CANDU core.

REMERCIEMENTS

L'auteur tient à souligner qu'il a bénéficié du support financier du CRSNG et d'Hydro-Québec pour développer ces méthodes, et à remercier Alain Hébert et Guy Marleau pour leur encouragement par des discussions (souvent utiles), sans lesquelles il lui eut été impossible de réaliser ce projet. Qu'il lui soit aussi permis de remercier son épouse, Clémence Préfontaine, pour son appui et sa patience.

TABLE DES MATIÈRES

	Page
SOMMAIRE.....	iv
ABSTRACT.....	viii
REMERCIEMENTS.....	xi
TABLE DES MATIÈRES.....	xii
LISTE DES FIGURES.....	xv
LISTE DES TABLES.....	xviii
INTRODUCTION.....	1
CHAPITRE 1 - LE TRANSPORT NEUTRONIQUE EN GÉOMÉTRIE TRIDIMENSIONNELLE.....	14
1.1 Méthode des probabilités de collision.....	18
1.2 Méthode à courants d'interface.....	27
1.3 Symétries d'assemblage.....	33
1.4 Calcul des probabilités de collision.....	38
1.4.1 Réductions analytiques et fractionnement d'une cellule homogène.....	38
1.4.2 Quadratures en cellule hétérogène.....	45

CHAPITRE 2 - RÉSOLUTION DES ASSEMBLAGES TRIDIMENSIONNELS.....	57
2.1 Cas monocellulaire.....	57
2.1.1 Résolution itérative complète.....	62
2.1.2 Élimination algébrique des courants.....	62
2.1.3 Élimination algébrique des flux.....	65
2.1.4 Résolution directe.....	67
2.2 Cas polycellulaire.....	69
2.2.1 Procédure des directions alternées.....	75
2.2.2 Accélération variationnelle.....	81
CHAPITRE 3 - DESCRIPTION DU PROGRAMME EXCELL.....	85
3.1 Logique de développement.....	89
3.1.1 Paramètres de quadrature des cellules.....	90
3.1.2 Paramètres du traitement itératif.....	98
3.2 Structure du programme.....	100
3.2.1 Module géométrique.....	102
3.2.2 Module de libération de mémoire.....	108
3.2.3 Module d'assemblage des cellules.....	108
3.2.4 Module de calcul complet des PC.....	111
3.2.5 Module de résolution.....	112
3.2.6 Module d'évaluation de la source.....	113

3.3 Instructions d'utilisation.....	114
3.3.1 Schéma de calcul polycinétique.....	114
3.3.2 Difficultés d'opération.....	116
CHAPITRE 4 - TESTS NUMÉRIQUES.....	122
4.1 Assemblage 15x15 de crayons de combustible (test REP).....	124
4.2 Cube fractionné 2x2x2.....	129
4.3 Problème IAEA-3D résolu en transport (test IAEA-3D).....	133
4.4 Croix de poison dans une cellule modérée à l'eau lourde (test CRdP).....	139
4.5 Étude du compartiment à eau légère (test CEL).....	146
CONCLUSION.....	153
BIBLIOGRAPHIE.....	156
ANNEXE A - CALCUL DES PROBABILITÉS DE COLLISION D'UNE CELLULE HOMOGÈNE.....	161
A.1 Réductions analytiques pour un hexaèdre droit.....	161
A.2 Réductions analytiques pour un cylindre troué.....	185
ANNEXE B - DESCRIPTION STANDARDISÉE DE EXCELL.....	212

LISTE DES FIGURES

	Page
Figure 1.1 Réflexion par rapport à un plan extérieur de l'assemblage..	34
Figure 1.2 Symétrie planaire à l'intérieur de l'assemblage.....	36
Figure 1.3 Fractionnement d'une cellule homogène.....	41
Figure 1.4 Changement de variables.....	47
Figure 1.5 Parcours optique entre deux zones.....	49
Figure 1.6 Ensemble de lignes d'intégration parallèles.....	54
Figure 1.7 Connection des lignes d'intégration de deux cellules.....	56
Figure 2.1 Renumerotations ADI des cellules.....	78
Figure 2.2 Calcul d'un paramètre de correction.....	83
Figure 3.1 Coeur d'un réacteur CANDU.....	86
Figure 3.2 Écorché d'une partie du coeur.....	87
Figure 3.3 Assemblage de cellules.....	88
Figure 3.4 Octant principal des quadratures angulaires.....	93
Figure 3.5 Angles de la quadrature EQ ₄	96
Figure 3.6 Bases orthonormées pour la quadrature planaire.....	97
Figure 3.7 Segments d'une ligne d'intégration.....	106

Figure 3.8 Stockage vectoriel utilisé pour les matrices symétriques.....	110
Figure 3.9 Schéma global du calcul neutronique.....	115
Figure 3.10 Schéma simplifié du traitement polycinétique.....	117
Figure 4.1 Données pour le test REP.....	125
Figure 4.2 Assemblage de cellules (test REP).....	126
Figure 4.3 Numérotation des zones d'un cube fractionné en 8 parties égales.....	130
Figure 4.4 Description du problème IAEA-3D.....	134
Figure 4.5 Données pour le problème IAEA-3D.....	135
Figure 4.6 Bilan des 1000 neutrons (test IAEA-3D).....	138
Figure 4.7 Cellule avec une croix de poison (vue de quatre cellules)....	140
Figure 4.8 Cellule avec une croix de poison (vue en hauteur).....	141
Figure 4.9 Système de coordonnées utilisé dans SHETAN.....	142
Figure 4.10 Graphe de k-infini (test CRdP).....	144
Figure 4.11 Compartiment à eau légère.....	147
Figure 4.12 Supercellule contenant un compartiment à eau légère.....	148
Figure 4.13 Bilan des 1000 neutrons (test CEL).....	151
Figure A.1 Hexaèdre droit homogène.....	163
Figure A.2 Angles en coordonnées polaires.....	171
Figure A.3 Cylindre troué homogène.....	186

Figure A.4	Projection sur la surface de bout.....	190
Figure A.5	Coordonnées cartésiennes sur l'anneau.....	192
Figure A.6	Variation de la distance à l'axe.....	194
Figure A.7	Transmission à la surface interne.....	199
Figure A.8	Projection sur la surface de bout (transmission par la surface interne).....	201
Figure A.9	Projection sur la surface de bout (transmission par la surface externe).....	208
Figure A.10	Cylindre homogène sans trou.....	210

LISTE DES TABLES

	Page
Table 4.1 Comparaison des taux de collision (test REP).....	128
Table 4.2 Probabilités calculées par quadratures multidimensionnelles	131
Table 4.3 Méthode directe vs procédure ADI (test IAEA-3D).....	137
Table 4.4 Comparaison des taux de collision (test CRdP).....	145
Table 4.5 Effets des interfaces sur les taux de collision (test CEL).....	150

INTRODUCTION

Les réacteurs CANDU se distinguent des réacteurs à eau sous pression des filières américaine (réacteurs PWR) et française (réacteur PWR), entre autre, par la disposition horizontale du coeur, à l'intérieur duquel les principaux mécanismes de réactivité sont placés perpendiculairement aux canaux de combustible. Cette particularité des CANDU exige un traitement tridimensionnel des supercellules, une supercellule se définissant comme une région du coeur contenant du combustible (mélange d'isotopes lourds comme l'oxyde d'uranium), du modérateur, du caloporteur, des matériaux de structure et possiblement certains mécanismes de régulation ou d'arrêt d'urgence du réacteur. Tout modèle du coeur doit tenir compte des effets de réactivité causés par ces mécanismes [1]. Cependant, le flux neutronique à l'intérieur des différentes zones est d'autant plus difficile à évaluer lorsque ces supercellules sont fortement hétérogènes. Ainsi, un modèle de diffusion simplifié, valable pour les études de conception du coeur, peut s'avérer inadéquat pour traiter des gradients de flux importants ou pour décrire le déplacement d'un mécanisme de régulation ou les effets d'un absorbant solide ou liquide (gadolinium injecté dans le modérateur, par exemple).

Le calcul global des interactions causées par les neutrons dans un réacteur débute par une représentation très fine en énergie et se termine généralement par une représentation simplifiée en énergie et très fine en espace. Cette approche est rendue nécessaire par la géométrie complexe des réacteurs et par les fortes variations en énergie des propriétés nucléaires des matériaux qui les composent. Dans le schéma global de calcul neutronique [2, 3], nous retrouvons donc trois grandes phases de calcul :

1. le calcul de sections efficaces,
2. le calcul de cellule élémentaire,
3. le calcul de réacteur.

Les développements que nous allons présenter font partie de la deuxième phase. En amont, nous retrouvons les sections efficaces microscopiques calculées à partir de données nucléaires expérimentales. En aval, la théorie de diffusion nous permet un calcul de réacteur, celui-ci étant généralement décomposé en zones macroscopiques de grandes dimensions. Décrivons maintenant plus précisément les interrelations entre ces phases.

L'interaction neutron-matière est caractérisée par les sections efficaces. Les sections efficaces microscopiques, mesurées expérimentalement pour différents noyaux et différents types de réaction nucléaire (fission, capture radiative, diffusion, etc.), dépendent, entre

autres choses, de l'énergie du neutron incident. Pour des énergies bien déterminées du neutron incident, les sections efficaces des isotopes lourds présentent de brusques remontées, appelées **résonances**, qui viennent du fait que l'énergie du neutron est suffisante pour exciter un niveau quantique du noyau composé. La probabilité d'une interaction est alors fortement accrue. Pour caractériser des domaines en énergie regroupant plusieurs résonances, il est nécessaire de calculer des sections efficaces dites **autoprotégées**.

En plus de ces effets d'autoprotection, il faut tenir compte des effets de thermalisation. Pour des énergies inférieures à l'électron-volt, les sections efficaces deviennent dépendantes de la température des noyaux et de leurs liaisons moléculaires. Les effets d'autoprotection et de thermalisation sont pris en compte par la première phase, celle du calcul de sections efficaces permettant, à partir de données nucléaires expérimentales, de constituer des banques de sections efficaces selon un découpage du spectre énergétique plus ou moins fin (comportant de 50 à 100 groupes d'énergie). Ces calculs de sections efficaces sont généralement réalisés en milieu infini et homogène, à l'exception du calcul d'autoprotection qui demande une représentation explicite de la géométrie.

En utilisant les sections efficaces calculées à la phase précédente, les phénomènes physiques (absorption, ralentissement...) sont maintenant traités avec soin dans une **cellule élémentaire**, maille typique du réacteur (généralement en géométrie bidimensionnelle) qui se répète à l'infini (calcul en mode fondamental). Ce calcul permet l'obtention du flux neutronique à l'intérieur des différentes zones de la cellule sur tout le découpage en énergie (de 50 à 100 groupes). Les différents taux de réaction qui décrivent les phénomènes de fission, d'absorption de ralentissement et de fuite sont calculés en se servant de ce flux neutronique. Au terme de ce calcul, les taux de réaction sont homogénéisés sur l'ensemble de la cellule et condensés sur un nombre réduit de groupes d'énergie (de 2 à 4 groupes) pour produire des coefficients de diffusion et des sections efficaces macroscopiques décrivant les différentes interactions.

La cellule élémentaire comporte généralement un élément ou une grappe de combustible entouré de son caloporteur et de son modérateur. Cependant, un formalisme multicellule peut également être utilisé pour traiter un assemblage complet de réacteur REP ou pour étudier l'interaction de plusieurs cellules non identiques [4]. À mesure que l'énergie est produite

dans le coeur du réacteur, les propriétés du combustible se transforment par activation neutronique et par transmutation isotopique. Les interactions neutron-noyau conduisent à une destruction progressive des noyaux fissiles initiaux et à l'apparition de produits de fission et de nouveaux noyaux lourds, ce qui a pour effet de modifier les sections efficaces macroscopiques des milieux de combustion. L'étude des phénomènes d'usure du combustible au niveau du réacteur s'effectue par un calcul d'évolution, partiellement découplé du calcul de cellule (voir approche SLB et SCS dans [5]). Le calcul de cellule élémentaire produit donc une tabulation des coefficients de diffusion et des sections efficaces macroscopiques homogènes en fonction de l'irradiation du combustible.

Le calcul de supercellule est ensuite utilisé pour tenir compte des effets des mécanismes de régulation ou d'arrêt d'urgence sur la distribution du flux. Dans le cas des réacteurs CANDU, des effets tridimensionnels non négligeables sont introduits par ces mécanismes. Le but d'un calcul de supercellule est alors de corriger les paramètres du réseau de cellules élémentaires pour tenir compte de ces effets. Ce calcul est également réalisé en milieu infini et fait partie intégrante de la phase du calcul de cellule. Dans la chaîne globale du calcul neutronique, le logiciel EXCELL que nous allons présenter s'inscrit dans cette étape du calcul et peut donc être utilisé pour

corriger les sections efficaces macroscopiques et les coefficients de diffusion des cellules élémentaires perturbées par la présence d'un mécanisme de régulation ou d'arrêt d'urgence.

Les paramètres calculés lors de la phase précédente sont ensuite utilisés pour le calcul de réacteur. Le comportement énergétique des neutrons y est simplifié, et chaque cellule y est représentée par ses propriétés homogénéisées spécifiques; de plus, les frontières du réacteur sont traitées de façon exacte. Les hypothèses de la théorie de diffusion (loi de Fick) sont généralement utilisées pour calculer la distribution du flux et de la puissance neutronique dans le coeur du réacteur. Le calcul statique de réacteur sert de base aux calculs de design et de gestion de combustible qui font appel à des techniques de simulation et d'optimisation et tiennent compte de l'évolution du combustible. Il est également possible d'étudier le comportement dynamique du réacteur suite à une modification de ses variables d'état. Ceci permet l'analyse des rétroactions qui apparaissent après l'intervention des mécanismes de réglage ou de sûreté, ainsi que les incidences sur la puissance locale ou globale des effets de réactivité et de température.

Les calculs qui nous intéressent utilisent l'équation de transport

(ou équation de Boltzmann) des neutrons pour obtenir la distribution du flux à l'intérieur d'une supercellule. Pour résoudre l'équation de transport, il est possible d'utiliser soit des méthodes stochastiques [6] (code de simulation de Monte Carlo), soit des méthodes déterministes. Plusieurs logiciels de référence (tel le code WIMS [7]) offrent déjà la possibilité d'utiliser diverses méthodes déterministes pour le calcul de cellule élémentaire. Nos développements s'inscrivent dans ce cadre qui présente l'avantage d'être moins coûteux en temps de calcul que les méthodes stochastiques, tout en demeurant précis.

Sous sa forme intégrale, l'équation de transport appliquée à un domaine donné peut être discrétisée de façon à définir des probabilités de collision (PC). Cette méthode est utilisée depuis les débuts de la neutronique moderne, et des simplifications analytiques pour les probabilités des cylindres infinis, des sphères et des hémisphères ont été effectuées au début des années cinquante. Une quinzaine d'années plus tard, des réductions portant sur des géométries un peu plus élaborées (cylindre fini et cuboïde) ont été développées [8]. Malheureusement, un traitement complet des PC dans une géométrie élaborée demande un temps de calcul considérable, même pour un cas bidimensionnel. Dans les années soixante-dix, certaines techniques permettant de coupler différents domaines, via les courants

neutroniques aux surfaces extérieures, apparaissent. Ces méthodes à courants d'interface, appliquées conjointement avec la méthode des probabilités de collision, permettent de résoudre l'équation de transport neutronique dans le contexte d'un assemblage de cellules [4]. En utilisant un développement limité du flux angulaire de surface, il devient alors possible de générer une solution approximative représentant adéquatement les effets spatiaux à un coût largement inférieur à la solution utilisant uniquement les probabilités de collision au niveau du domaine complet (que nous appellerons un "calcul PC complet"). Ce gain relatif dans la vitesse d'exécution d'un calcul permet une discrétisation plus détaillée des domaines énergétiques et spatiaux, et donc une meilleure représentation des effets énergétiques et spatiaux sur le flux neutronique.

Au Canada, deux logiciels permettaient jusqu'à présent d'effectuer les calculs de supercellules. Le programme MULTICELL [9] utilise l'approche de la théorie de diffusion à deux groupes d'énergie pour calculer les flux dans les différentes zones de la supercellule; cette approche est couplée à une méthode rudimentaire de transport pour les seules zones où le taux d'absorption est élevé. Le couplage entre les deux méthodes s'effectue via des conditions aux frontières qui permettent un rééquilibrage des

neutrons entrant et sortant par des surfaces communes. Cette méthode est simple et rapide, mais devient controversée dans les cas où la théorie de diffusion est inadéquate (modérateur empoisonné au gadolinium par exemple).

Le second logiciel de calcul de supercellule a pour nom SHETAN [10]. Ce programme repose entièrement sur une discrétisation de l'équation intégrale de transport utilisant le formalisme des courants d'interface (CI), et ne fait donc appel à aucune hypothèse de diffusion. Ce logiciel utilise un système de coordonnées mixtes (rectangulaires et cylindriques) et permet de modéliser clairement les dispositifs de réactivité dans une supercellule carrée. Toutefois, une étude élaborée nous a permis de découvrir quelques lacunes qui limitent son utilisation lors de calculs de référence. L'asymétrie résultant du calcul des probabilités de collision, produites par une quadrature utilisant un axe de référence [11], constitue la première lacune et peut conduire, pour un empilement de cellules, à des distorsions axiales du flux. Une seconde lacune provient de la lenteur de la convergence d'un assemblage polycellulaire. SHETAN résout l'équation de transport par sur-relaxation successive (méthode SOR). Pour accélérer la convergence d'un calcul polycellulaire, deux méthodes sont prévues. La première consiste à

itérer plus souvent sur les cellules à convergence lente; la seconde introduit un maillage grossier superposé au maillage de cellules original et qui sert à rééquilibrer les flux. Différents tests [12] ont démontré que, lorsque l'assemblage contient plusieurs cellules, la vitesse de convergence est considérablement réduite. Une dernière remarque porte sur la numérotation: si plusieurs cylindres sont disposés dans un même axe, SHETAN confond les numéros des surfaces externes.

Pour pallier à ces lacunes, nous avons donc développé et qualifié un nouveau logiciel: EXCELL, qui présente une technique de calcul des supercellules basée uniquement sur l'équation de Boltzmann et utilisant une approche de type CI semblable à celle de SHETAN. Ces développements prennent donc pour acquises les hypothèses de base du logiciel SHETAN. Cependant, ce nouveau logiciel modulaire apporte des modifications majeures au niveau du calcul des probabilités de collision et de la méthode de résolution monocinétique. L'ensemble, dont cette thèse résume les différentes facettes, a été intégré à un logiciel de transport polycinétique.

Dans un premier chapitre, nous décrivons la méthode de résolution de l'équation de transport des neutrons appliquée à un domaine

rectangulaire tridimensionnel décomposé en cellules. Nous décrivons d'abord la méthode classique des probabilités de collision. Le transport des neutrons y est déterminé au niveau de chaque cellule, à l'aide de matrices de réponse produites par le calcul des probabilités de transmission surfacique, de fuite et de première collision volumique. Par la suite, le formalisme de la méthode à courants d'interface est utilisé pour coupler des cellules individuelles et représenter ainsi la supercellule dans son ensemble. Pour des cellules homogènes de géométrie simple (rectangulaire ou cylindrique), des réductions analytiques nous ont permis de simplifier les équations intégrales décrivant ces probabilités [11, 13]. Une cellule homogène est fractionnée en zones, et nous montrons comment il est possible de recomposer les probabilités complètes de la cellule à partir des formules de réduction associées aux différentes zones. Pour des cellules hétérogènes de géométrie mixte, contenant à la fois des zones de forme rectangulaire et cylindrique, nous avons développé une méthode de quadrature permettant de préserver les propriétés fondamentales de symétrie propres aux géométries, au niveau des probabilités à calculer. Cette quadrature fait intervenir des familles de directions [14, 15] dont les symétries fondamentales respectent expressément celles de la géométrie analysée.

Le deuxième chapitre présente la méthode d'assemblage des cellules et de résolution pour ces assemblages. Le respect des lois de réciprocité des probabilités de collision nous a conduit à une formulation des équations monocinétiques faisant apparaître des matrices symétriques de réponse associées à chaque cellule. Le couplage des cellules par les courants de neutrons aux interfaces permet d'obtenir la matrice globale associée à la supercellule. Pour traiter les supercellules faisant intervenir un réseau de cellules rectangulaires, nous avons mis au point une procédure des directions alternées, déjà utilisée avec succès dans le contexte des calculs de diffusion [16]. La vitesse de convergence sur les courants et les flux obtenus par ce processus itératif est accélérée par le calcul de paramètres de relaxation obtenus en minimisant une fonctionnelle qui évalue l'erreur globale sur le système [17].

Le troisième chapitre explique la manière dont les développements précédents ont été intégrés au logiciel EXCELL, entièrement écrit en Fortran 77. Nous y décrivons la structure de la version courante constituée de six modules interdépendants qui permettent un traitement monocinétique des assemblages de cellules et l'intégration de ces modules dans un contexte polycinétique. Nous mentionnons ensuite les difficultés de développement

que nous avons rencontrées et les études qui pourraient compléter ces développements. Pour des applications en simple précision sur ordinateur à 32 bits, des calculs de normalisations des lignes d'intégration et des probabilités de collision, qui s'avèrent nécessaires afin de conserver les volumes et d'assurer un bilan neutronique exact, sont aussi décrits.

Différents résultats numériques sont présentés au quatrième chapitre. Les cas regroupés comprennent d'abord un test comparatif avec le logiciel bidimensionnel EURYDICE [18], puis une comparaison des réductions analytiques aux calculs obtenus par différents logiciels (SHETAN et EXCELL); ces tests nous ont permis de valider les méthodes décrites plus haut. Nous avons aussi étudié le comportement de la procédure des directions alternées pour un problème comprenant un grand nombre de cellules (cas test IAEA-3D) et comparé les résultats de SHETAN aux nôtres, pour une cellule contenant une croix de poison. Nous avons finalement effectué des calculs en assemblage tridimensionnel afin de modéliser les compartiments d'eau légère présents dans les réacteurs CANDU.

Finalement, la conclusion décrit la pertinence de notre approche ainsi que sa validité eu égard aux tests numériques précités; nous ajoutons aussi quelques remarques au sujet des possibilités futures de développement.

CHAPITRE 1
LE TRANSPORT NEUTRONIQUE
EN GÉOMÉTRIE TRIDIMENSIONNELLE

La résolution de l'équation de transport des neutrons en régime stationnaire a pour but de calculer le flux de neutrons qui dépend de l'énergie, de la position dans le domaine analysé mais aussi de la direction angulaire considérée. Dans le cadre de la théorie des probabilités de collision, les hypothèses de réduction suivantes [3] sont généralement appliquées lors de cette résolution:

Hypothèse I:

En effectuant une discrétisation du spectre neutronique, l'équation de transport spatio-énergétique est réduite en une série d'équations spatiales couplées, chacune d'entre elles ayant une forme monocinétique.

Cette première hypothèse est fondamentale pour la description des équations de cette thèse. Nous n'avons en effet développé que des algorithmes monocinétiques. Les différentes techniques appliquées lors de la résolu-

tion polycinétique ne sont pas présentées ici. Le lecteur intéressé trouvera cependant une bonne introduction à ces techniques à la référence 19.

Nous décrivons maintenant la forme fondamentale de l'équation de transport monocinétique employée tout au long de ce chapitre. Considérons un domaine D isolé du milieu extérieur et borné par une frontière ∂D . Notons les quantités vectorielles par des lettres grasses minuscules, et les matrices par des lettres grasses majuscules. En tout point \mathbf{r} du domaine, l'équation monocinétique de transport des neutrons relie le flux spatio-angulaire $\phi(\mathbf{r}, \Omega)$ à la source de neutrons présente à l'intérieur de ce domaine et au flux surfacique $\phi^-(\mathbf{r}'_b, \Omega)$ entrant par la frontière ∂D . Sous sa forme intégrale, cette équation peut s'écrire [3, 20]:

$$\phi(\mathbf{r}, \Omega) = \int_0^b \psi(\mathbf{r}', \Omega) \exp(-\tau_s) ds + \phi^-(\mathbf{r}'_b, \Omega) \exp(-\tau_b) \quad (1.1)$$

où $\mathbf{r}'_b = \mathbf{r} - b\Omega$ est un point de la frontière ∂D et où $\mathbf{r}' = \mathbf{r} - s\Omega$ est un point intérieur au domaine D . De plus, le parcours optique traversé est défini comme:

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

où Σ désigne la section efficace macroscopique totale, qui mesure la probabilité d'interaction neutron-noyau en un point du domaine pour un angle donné. Remarquons que $\exp(-\tau_s)$ représente alors la probabilité qu'un neu-

tron franchisse une distance s sans subir de collision. Ainsi, la forme intégrale (1.1) traduit le bilan des neutrons de direction Ω qui parviennent à atteindre le point \mathbf{r} .

Dans cette formulation monocinétique, les sources de neutrons peuvent provenir soit de la diffusion des neutrons du groupe d'énergie considéré, soit des sources fixes de neutrons provenant des réactions nucléaires telles que la fission ou d'un transfert de neutrons issus d'autres groupes d'énergie par diffusion (lors du processus de thermalisation ou de ralentissement). Elles peuvent s'exprimer par [2]:

$$\psi(\mathbf{r}, \Omega) = \int_{4\pi} d^2\Omega' \Sigma^s(\mathbf{r}, \Omega, \Omega') \phi(\mathbf{r}, \Omega') + \psi^*(\mathbf{r}, \Omega) \quad (1.2)$$

où Σ^s désigne la section efficace macroscopique de diffusion, qui mesure la probabilité d'une interaction neutron-noyau conduisant à une diffusion du neutron dans le groupe considéré. Remarquons que l'invariance rotationnelle de l'équation (1.2) résulte du fait que les milieux considérés ont localement des propriétés spatiales indépendantes des directions. Le terme de source fixe est représenté par $\psi^*(\mathbf{r}, \Omega)$.

De la même façon, il est possible d'obtenir le flux angulaire sortant du domaine au point $\mathbf{r} = \mathbf{r}_b$, situé à la frontière par:

$$\phi^+(\mathbf{r}_b, \Omega) = \int_0^b \psi(\mathbf{r}', \Omega) \exp(-\tau_s) ds + \phi^-(\mathbf{r}'_b, \Omega) \exp(-\tau_b) \quad (1.3)$$

Intégrons l'équation (1.1) sur tous les angles solides Ω . Le flux spatial obtenu est maintenant défini par l'équation suivante [3]:

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{r}) = & \int_D d^3r' \psi(\mathbf{r}', \Omega) \frac{\exp(-\tau_s)}{s^2} \\ & + \int_{\partial D} d^2r'_b (\Omega \cdot \mathbf{N}_-) \phi^-(\mathbf{r}'_b, \Omega) \frac{\exp(-\tau_b)}{b^2} \end{aligned} \quad (1.4)$$

où \mathbf{N}_- est la normale unitaire entrante à la surface ∂D . De la même manière, en multipliant par le cosinus directeur $\Omega \cdot \mathbf{N}_+$ à la surface et en intégrant l'équation (1.3) sur les directions sortantes, nous définissons le flux sortant :

$$\begin{aligned} \pi \phi^+(\mathbf{r}_b) = & \int_{\Omega \cdot \mathbf{N}_+ > 0} d^2r'_b (\Omega \cdot \mathbf{N}_+) \phi^+(\mathbf{r}'_b, \Omega) \\ = & \int_D d^3r' (\Omega \cdot \mathbf{N}_+) \psi(\mathbf{r}', \Omega) \frac{\exp(-\tau_s)}{s^2} \\ & + \int_{\Omega \cdot \mathbf{N}_+ > 0} d^2r'_b (\Omega \cdot \mathbf{N}_+) (\Omega \cdot \mathbf{N}_-) \phi^-(\mathbf{r}'_b, \Omega) \frac{\exp(-\tau_b)}{b^2} \end{aligned} \quad (1.5)$$

où \mathbf{N}_+ désigne la normale unitaire sortante à la surface ∂D .

1.1 Méthode des probabilités de collision

Les équations décrites ci-haut servent de base à la méthode classique des probabilités de collision que nous définirons ici en détail. Avant d'aller plus avant, il nous faut émettre certaines hypothèses qui permettent une discrétisation spatiale de ces équations.

Hypothèse II:

Les sources de neutrons proviennent de chocs isotropes entre particules dans le référentiel du laboratoire.

Cette seconde hypothèse restreint encore la généralité du problème étudié; mais il est possible de tenir compte de façon approximative de l'effet d'une anisotropie linéaire du choc en modifiant les sections efficaces impliquées dans les équations par une correction dite de transport [3].

Partitionnons maintenant le domaine D en L sous-domaines (appelés zones) de volumes V_i et la frontière ∂D en Λ sous-frontières (appelées surfaces) S_α de la manière suivante:

$$D = \sum_{i=1}^L V_i \qquad \partial D = \sum_{\alpha=1}^{\Lambda} S_\alpha$$

Remarquons que les surfaces sont toujours désignées par les lettres grecques, pour les distinguer des volumes.

Comme hypothèse finale, nous assumons une certaine homogénéité de cette partition:

Hypothèse III:

Les sources sont uniformes dans chacune de ces zones, et les propriétés matérielles sont homogènes. Les courants en cosinus entrants et sortants par chacune des sous-frontières sont aussi supposés constants.

Cette dernière hypothèse permet un développement double P_0 du flux angulaire de surface, et elle s'avère suffisante dans la majorité des applications de calcul de cellule [4, 18]. Remarquons que la supposition de courants en cosinus constants est équivalente à l'isotropie du flux entrant [21]. L'équation (1.4) peut alors être réécrite sous forme discrète:

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{r}) = & \sum_{i=1}^L \psi_i \int_{V_i} d^3r' \frac{\exp(-\tau_s)}{s^2} \\ & + \sum_{\alpha=1}^{\Lambda} \bar{\varphi}_{\alpha} \int_{S_{\alpha}} d^2r'_b \frac{(\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{N}_{-}) \exp(-\tau_b)}{b^2} \end{aligned} \quad (1.6)$$

alors que l'équation (1.5) devient:

$$\pi \phi^+(\mathbf{r}_b) = \sum_{i=1}^L \psi_i \int_{V_i} d^3r' \frac{(\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{N}_+) \exp(-\tau_s)}{s^2} \quad (1.7)$$

$$+ \sum_{\alpha=1}^{\Lambda} \phi_{\alpha}^{-} \int_{S_{\alpha}} d^2r'_b \frac{(\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{N}_+) (\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{N}_-) \exp(-\tau_b)}{b^2}$$

L'hypothèse concernant l'isotropie des chocs nous permet d'éliminer la dépendance angulaire des sections efficaces. Multiplions maintenant l'équation (1.6) par la section efficace totale $\Sigma_j = \Sigma(\mathbf{r})$ de la zone d'indice j et intégrons sur toute cette zone; nous retrouvons alors le système d'équations linéaires suivant:

$$\Sigma_j \phi_j V_j = \sum_{i=1}^L V_i P_{ij} \psi_i + \sum_{\alpha=1}^{\Lambda} P_{\alpha j} J_{\alpha} \quad (1.8)$$

$$1 \leq j \leq L$$

où ϕ_j désigne le flux neutronique moyen dans la zone j et où $J_{\alpha} = \pi S_{\alpha} \phi_{\alpha}^{-}$ définit le courant en cosinus entrant par la surface S_{α} .

Nous obtenons un autre système d'équations en intégrant l'équation (1.7) sur chacune des surface β :

$$J^+_{\beta} = \sum_{i=1}^L V_i P_{i\beta} \psi_i + \sum_{\alpha=1}^{\Lambda} P_{\alpha\beta} J^-_{\alpha} \quad (1.9)$$

$$1 \leq \beta \leq \Lambda$$

où $J^+_{\beta} = \pi S_{\beta} \phi^+_{\beta}$ définit le courant en cosinus sortant par la surface S_{β} . Ces équations font intervenir des expressions de probabilités définies comme suit [3]:

$$P_{ij} = \sum_j P_{ij} = \frac{\sum_j \int_{V_i} d^3r' \int_{V_j} d^3r \frac{\exp(-\tau_s)}{s^2}}{4\pi V_i} \quad (1.10a)$$

$$P_{\alpha j} = \sum_j P_{\alpha j} = \frac{\sum_j \int_{S_{\alpha}} d^2r'_s \int_{V_j} d^3r (\Omega \cdot N_-) \frac{\exp(-\tau_s)}{s^2}}{\pi S_{\alpha}} \quad (1.10b)$$

$$P_{i\beta} = \frac{1}{4\pi V_i} \int_{V_i} d^3r' \int_{S_{\beta}} d^2r_s (\Omega \cdot N_+) \frac{\exp(-\tau_s)}{s^2} \quad (1.10c)$$

$$P_{\alpha\beta} = \frac{1}{\pi S_{\alpha}} \int_{S_{\alpha}} d^2r'_s \int_{S_{\beta}} d^2r_s (\Omega \cdot N_+) (\Omega \cdot N_-) \frac{\exp(-\tau_s)}{s^2} \quad (1.10d)$$

$$\begin{aligned} 1 \leq i, j \leq L \\ 1 \leq \alpha, \beta \leq \Lambda \end{aligned}$$

Ces probabilités peuvent être interprétées physiquement de la manière suivante [22]:

P_{ij} : probabilité pour un neutron né de manière isotropique et uniforme dans la zone i de subir sa première collision à l'intérieur de la zone j , aussi appelée **probabilité de collision**;

$P_{\alpha j}$: probabilité pour un neutron né de manière isotropique et uniforme sur la surface α de subir sa première collision à l'intérieur de la zone j ;

$P_{i\beta}$: probabilité pour un neutron né de manière isotropique et uniforme dans la zone i d'atteindre la surface β sans avoir subi de collision, aussi appelée **probabilité de fuite**;

$P_{\alpha\beta}$: probabilité pour un neutron né de manière isotropique et uniforme sur la surface α d'atteindre la surface β sans avoir subi de collision, aussi appelée **probabilité de transmission**.

Lors de calculs numériques, il est d'usage de définir aussi les probabilités **réduites** p_{ij} et $p_{\alpha j}$ (voir les équations (1.10a) et (1.10b)) qui ont l'avantage de donner un sens aux équations (1.8) dans des zones de section efficace très faible ou nulle (milieu gazeux ou de vide absolu).

Les différentes probabilités définies ci-haut sont interdépendantes; à partir des équations (1.10), il est possible d'écrire des **lois de réciprocité** qui résultent directement de la forme discrétisée du théorème de réciprocité de l'équation de transport [2]. Ces lois peuvent s'exprimer par:

$$V_i P_{ij} = V_j P_{ji} \quad (1.11a)$$

$$S_\alpha P_{\alpha j} = 4 V_j P_{j\alpha} \quad (1.11b)$$

$$S_\alpha P_{\alpha\beta} = S_\beta P_{\beta\alpha} \quad (1.11c)$$

$$1 \leq i, j \leq L$$

$$1 \leq \alpha, \beta \leq \Lambda$$

De plus, certaines relations sont imposées aux probabilités de collision par les **lois de conservation des neutrons**. Ces lois expriment l'idée qu'un neutron créé dans une zone donnée doit soit subir une collision dans une quelconque autre zone du domaine, soit s'échapper par une surface; il en est de même pour un neutron incident à une sous-frontière. Ces deux bilans prennent la forme [3]:

$$\sum_{j=1}^L P_{ij} + \sum_{\beta=1}^{\Lambda} P_{i\beta} = 1 \quad (1.12a)$$

$$\sum_{j=1}^L P_{\alpha j} + \sum_{\beta=1}^{\Lambda} P_{\alpha\beta} = 1 \quad (1.12b)$$

$1 \leq i \leq L$
 $1 \leq \alpha \leq \Lambda$

La méthode des probabilités de collision consiste alors à résoudre l'équation monocinétique de transport appliquée au domaine D en deux temps:

1. D'abord, un calcul des probabilités de collision, de fuite et de transmission telles que définies en (1.10) qui dépend de la géométrie du domaine et des différents matériaux inclus dans ses zones, ainsi que de la

discrétisation spatiale choisie.

2. Ensuite, un calcul des flux dans toutes les zones et des courants sortants à toutes les surfaces extérieures. Ce calcul s'effectue en résolvant le système (1.8)-(1.9) et dépend à la fois des sources fixes et des conditions à la frontière du domaine.

Discutons maintenant des conditions externes aux systèmes (1.8)-(1.9). Le terme de source (1.2) s'exprime facilement compte tenu de l'hypothèse II sous la forme discrétisée:

$$\psi_i = \sum_i^S \phi_i + \psi_i^* \quad (1.13)$$

$$1 \leq i \leq L$$

où \sum_i^S désigne la section efficace de diffusion de la zone i . Le terme ψ_i est appelé l'**émission** des neutrons dans la zone i . Comme notre domaine D est isolé du milieu extérieur, il nous faut décrire comment les neutrons pénètrent par les surfaces extérieures et ce qui arrive aux neutrons qui en sortent. Ces conditions aux frontières sont généralement données selon une parmi deux formes possibles: ou bien des courants entrant fixes traversent ces surfaces, ou bien un coefficient de réflexion assure un effet de retour des neutrons sortants.

Ces coefficients portent le nom d'**albédo** et apparaissent sur la diagonale de la matrice géométrique **A** qui relie les courants entrants aux courants sortants:

$$J^-_{\alpha} = \sum_{\beta=1}^{\Lambda} A_{\alpha\beta} J^+_{\beta} + J^*_{\alpha} \quad (1.14)$$

$1 \leq \alpha \leq \Lambda$

où J^*_{α} désigne un courant fixe de neutrons entrant par la surface α . En général, la matrice **A** prend des formes simples; par exemple, lorsqu'il n'y a aucun effet de retour des neutrons sortants, il faut poser **A** = **0** (matrice nulle) alors que la réflexion parfaite est représentée par **A** = **I** (matrice identité).

1.2 Méthode à courants d'interface

La méthode à courants d'interface (CI) introduit un niveau d'approximation supplémentaire lors de la résolution de l'équation de transport. Sur le maillage fin du domaine initial D , est superposé un maillage plus grossier de macrozones disjointes que nous appelons **cellules**. Partitionnons d'abord le domaine en cellules C^k ; chaque cellule étant bornée par sa frontière ∂C^k qui sera partitionnée en surfaces:

$$D = \sum C^k \qquad \partial C^k = \sum_{\alpha=1}^{\Lambda^k} S_{\alpha}^k$$

Pour des besoins de conformité géométrique, il est souhaitable que cette partition en cellules respecte la partition zonale originale. Nous imposons donc les critères suivants:

1. chaque zone est entièrement contenue dans une cellule unique;
2. toute sous-frontière extérieure de la partition zonale doit correspondre exactement à une sous-frontière extérieure d'une cellule donnée.

De nouvelles surfaces, appelées **interfaces**, sont ajoutées à la partition originale; ces surfaces servent à joindre les cellules dans l'assemblage

polycellulaire. Si nous formons l'union de toutes les cellules, chaque interface y est numérotée exactement deux fois, comme appartenant aux frontières de deux cellules:

$$S_{\alpha}^k \subset \partial C^k \cap \partial C^l \Rightarrow \exists \beta \text{ tel que: } S_{\alpha}^k = S_{\beta}^l \\ 1 \leq \alpha \leq \Lambda^k \quad 1 \leq \beta \leq \Lambda^l$$

Chaque cellule est considérée comme un domaine en soi indépendamment des cellules voisines, l'équation (1.4) est donc maintenant décrite par:

$$\phi(\mathbf{r}) = \int_{C^k} d^3r' \psi(\mathbf{r}', \Omega) \frac{\exp(-\tau_s)}{s^2} \quad (1.15) \\ + \int_{\partial C^k} d^2r'_b (\Omega \cdot \mathbf{N}_-) \phi(\mathbf{r}'_b, \Omega) \frac{\exp(-\tau_b)}{b^2}$$

et les réductions appliquées à la section §1.1 pour décrire les probabilités de collision s'appliquent a fortiori localement; l'équivalent des équations (1.8)-(1.9) devient alors:

$$\sum_j^k \phi_j^k v_j^k = \sum_{i=1}^{L^k} v_i^k P_{ij} \psi_i^k + \sum_{\alpha=1}^{\Lambda^k} P_{\alpha j} \psi_{\alpha}^k \quad (1.16)$$

$$1 \leq j \leq L^k$$

$$j_{\beta}^{k+} = \sum_{i=1}^{L^k} V_i^k P_{i\beta} \psi_i^k + \sum_{\alpha=1}^{\Lambda^k} P_{\alpha\beta} j_{\alpha}^{k-} \quad (1.17)$$

$$1 \leq \beta \leq \Lambda^k$$

où L^k désigne le nombre de zones (de volume V_i^k) de la cellule C^k et Λ^k le nombre de surfaces de cette même cellule. Quelques remarques s'imposent ici. Les probabilités de collision à l'intérieur d'une macrozone ne sont pas modifiées par rapport aux probabilités initiales; cependant, il y a maintenant plus de probabilités de transmission à calculer vu l'introduction des interfaces au domaine. Toutefois, le nombre total de probabilités à calculer s'avère normalement grandement diminué du fait que les probabilités de collision entre les zones de cellules différentes n'ont plus à être évaluées.

L'introduction d'interfaces peut engendrer des effets indésirables de réfraction des neutrons [21]. Pour réduire ces effets, il est possible de développer des méthodes plus coûteuses qui permettent de tenir compte de l'anisotropie angulaire des neutrons entrant par les surfaces de chaque cellule [4, 18]. Il nous est apparu souhaitable de restreindre notre étude à

l'approximation DP_0 , donc de supposer l'isotropie angulaire des courants entrants.

L'hypothèse d'isotropie et d'uniformité des courants d'interface, c'est-à-dire des courants de neutrons situés sur ces nouvelles surfaces internes, dégrade donc partiellement la qualité de la solution originale utilisant la méthode classique des probabilités de collision. Cependant les calculs de perturbations, où les propriétés physiques sont modifiées pour quelques cellules seulement, sont beaucoup plus simples à réaliser, puisque seules les probabilités des cellules contenant des zones perturbées devront être réévaluées.

Pour obtenir une résolution globale à l'intérieur du domaine D , nous procédons à un assemblage des cellules entre elles, en couplant les courants entrants et sortants des interfaces de deux cellules:

$$S_{\alpha}^k = S_{\beta}^l \subset \partial C^k \cap \partial C^l \Rightarrow$$

$$j_{\alpha}^{k-} = j_{\beta}^{l+} \quad \text{et} \quad j_{\alpha}^{k+} = j_{\beta}^{l-} \quad (1.18)$$

$$1 \leq \alpha \leq \Lambda^k \quad 1 \leq \beta \leq \Lambda^l$$

Les émissions de neutrons et les conditions à la frontière extérieure du domaine restent encore décrites par les équations (1.13) et (1.14). Le système d'équations à résoudre est maintenant plus creux, et donc plus simple à résoudre.

Les deux cas-limite de cette méthode correspondent:

1. au cas où le domaine est constitué d'une cellule unique; dans ce cas nous retrouvons la méthode classique exposée précédemment;
2. au cas où chaque cellule correspond exactement à une zone du domaine; nous retrouvons alors la méthode J_{\pm} [3].

Remarquons que les lois de réciprocité et de conservation énoncées à la section §1.1 restent valables localement. Ces lois peuvent être utilisées pour réduire le nombre de probabilités à calculer dans une cellule donnée et pour assurer la conservation des neutrons.

Les règles générales à suivre pour déterminer une bonne partition du domaine nous incitent à nous éloigner des deux cas-limite:

- 1. choisir une partition en macrozones trop grossière fait disparaître les avantages à utiliser les courants d'interfaces;**
- 2. choisir une partition en macrozones trop fine peut introduire des effets de réfraction des neutrons entre les cellules.**

1.3 Symétries d'assemblage

Il est possible de simplifier le traitement d'un assemblage de cellules lorsque des symétries interviennent à l'intérieur de cet assemblage. Ces symétries permettent de réduire la dimension du système global à résoudre et donc de diminuer le nombre d'inconnues recherchées. Voici différents types de symétrie qui peuvent caractériser un assemblage [18]:

1. Réflexion des neutrons par rapport à un plan extérieur de l'assemblage.

Cette condition s'applique à toutes les cellules localisées sur le côté réfléchi (voir figure 1.1) de l'assemblage et peut donc s'intégrer aux conditions frontière du système d'équations (1.16)-(1.18). Les courants placés à l'extérieur des cellules C^k situées le long de ce plan (en l'occurrence le plan de réflexion de la figure 1.1) satisfont alors:

$$j_{k-2}^{-} = \beta j_{k+2}^{+} \quad (1.19)$$

où β est l'albédo de la réflexion. Une parfaite réflexion correspond à une

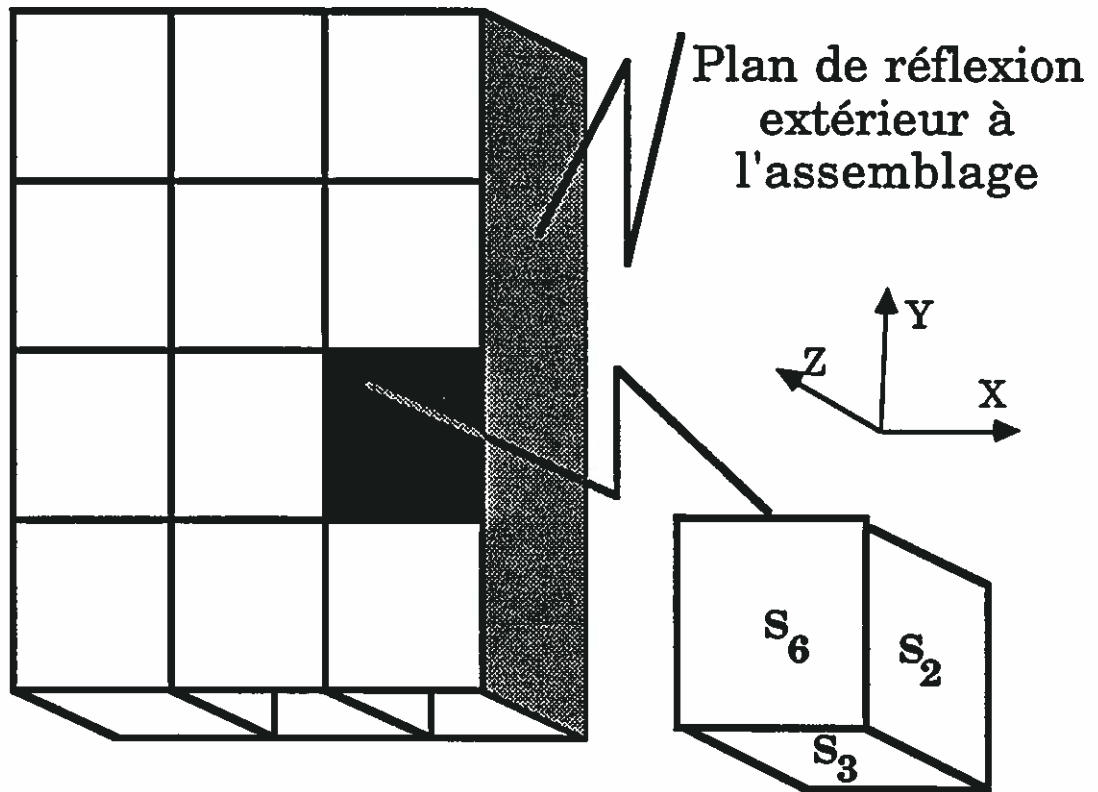


Figure 1.1 Réflexion par rapport à un plan extérieur de l'assemblage.

valeur $\beta = 1.0$, alors qu'une condition de courant ré-entrant nul correspond à la valeur $\beta = 0.0$.

2. Symétrie planaire de l'assemblage.

Cette condition s'applique à toutes les cellules situées sur un plan de symétrie axiale médian d'un alignement de cellules (voir figure 1.2). Ce plan médian présente un effet de miroir pour l'assemblage. Les courants placés le long de ce plan médian satisfont les relations (voir figure 1.2):

$$j^{k-}_1 = j^{k+}_2 \quad \text{et} \quad j^{k+}_1 = j^{k-}_2 \quad (1.20)$$

Les cellules du plan médian ont un poids de 0.5; c'est-à-dire que leur contribution lors de l'assemblage des probabilités de collision est diminuée de moitié. Seules les cellules situées d'un côté de l'assemblage sont représentées; toutefois, les cellules de l'autre côté (cellules en hachuré sur la figure 1.2) sont virtuellement présentes en forçant les courants entrants de ce côté à leur valeur symétrique par (1.20).

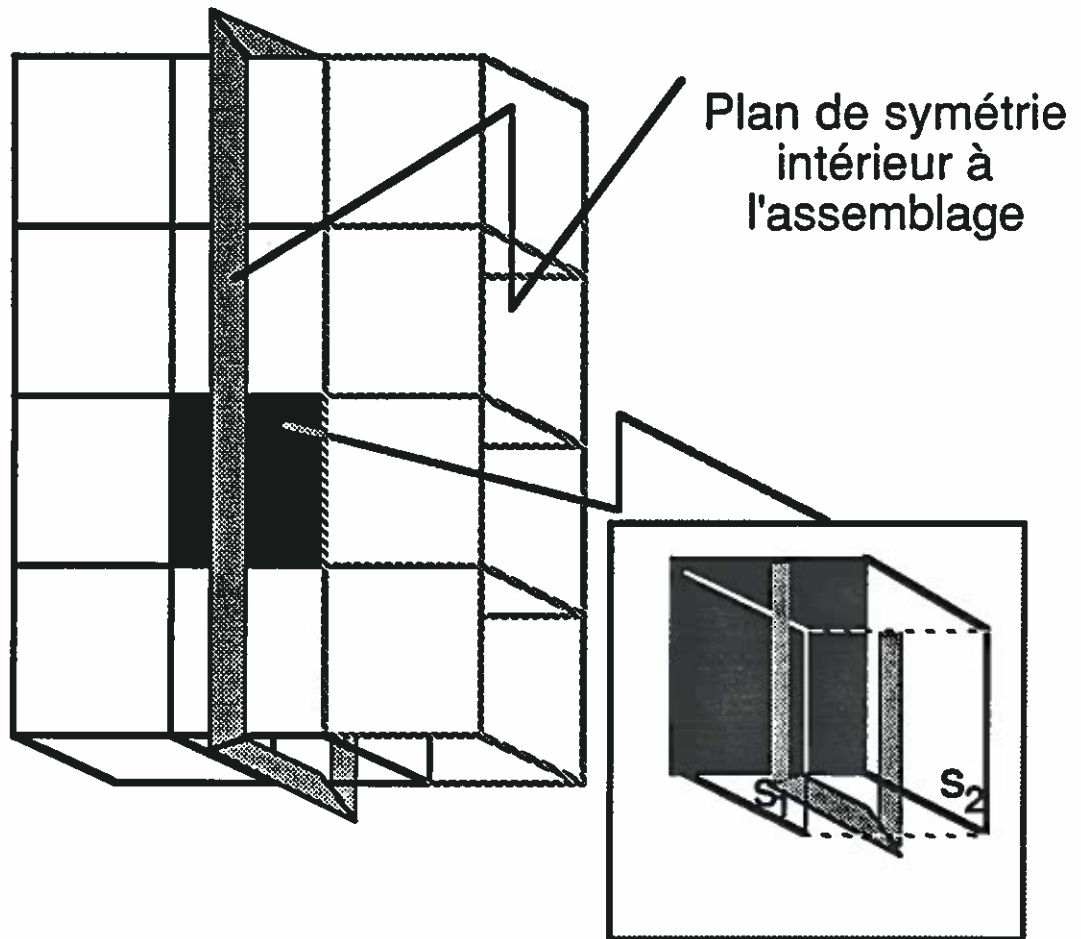


Figure 1.2 Symétrie planaire
à l'intérieur de l'assemblage.

Il est aussi possible que le plan de symétrie de l'assemblage soit diagonal, deux plans échangent alors leurs courants. Ceci n'est permis que dans un assemblage dont les cellules situées le long de la diagonale sont carrées, et, dans ce cas, les cellules situées sur le plan diagonal auront un poids de 0.5 fois les autres cellules.

Plusieurs symétries planaires peuvent également être présentes dans un même assemblage. Lorsqu'il n'y a pas de symétrie diagonale, le poids des cellules situées le long des plans de symétrie axiale peut être obtenu en multipliant les poids relatifs à chaque symétrie imposée à la cellule considérée; toutefois, les cellules ayant à la fois une symétrie diagonale et une symétrie planaire (diagonale et plan se coupant à 45°) ont un poids de 0.125. Il est également possible qu'un assemblage possède à la fois des réflexions sur certains plans externes et des symétries planaires sur d'autres.

1.4 Calcul des probabilités de collision

Les probabilités de transmission, de fuite et de collision définies par les équations intégrales (1.10) se prêtent mal à une évaluation numérique. Ces intégrales font intervenir respectivement quatre, cinq et six dimensions. À moins de recourir à des évaluations de type Monte-Carlo [6], les quadratures multidimensionnelles peuvent s'avérer imprécises. De toute façon, l'évaluation des probabilités sous cette forme est coûteuse et inefficace.

Dans cette section, nous décrivons les développements que nous avons utilisés pour simplifier quelque peu le calcul de ces probabilités. Nous présentons premièrement les simplifications analytiques possibles en géométrie cartésienne ou cylindrique homogène, ces deux géométries étant couramment utilisées dans les réacteurs. Ensuite, la technique de calcul d'une cellule homogène partitionnée en zones est décrite. Finalement, les simplifications pour une cellule 3D hétérogène arbitraire sont présentées.

1.4.1 Réductions analytiques et fractionnement d'une cellule homogène

La résolution formelle, qui consiste à trouver les solutions exactes

par un calcul analytique des différentes probabilités, n'est qu'exceptionnellement réalisable. Des simplifications ou réductions analytiques ont commencé très tôt à être appliquées au calcul des probabilités de collision unidimensionnelles. Pour des zones bidimensionnelles, les réductions applicables à la méthode des courants d'interfaces sont connues depuis quelques années [18].

En géométrie tridimensionnelle, Carlvik [8] développa des simplifications faisant intervenir les fonctions de type exponentiel-intégral pour le calcul des probabilités de collision et de fuite dans des hexaèdres droits et dans des cylindres non troués; par ailleurs, ses calculs ne tiennent pas compte des probabilités de transmission qui servent à assembler des cellules.

Notre contribution à ce niveau a été de calculer les probabilités de transmission dans le cas d'un hexaèdre et de traiter les cylindres troués, afin de permettre un empilement de cellules d'un type donné jointes les unes aux autres par leurs interfaces.

Nous référons le lecteur à l'annexe A pour une analyse des simplifications des différentes probabilités dans le cas d'un hexaèdre homogène droit et d'un cylindre homogène troué. Des développements en séries de

Taylor des probabilités de collision nous permettent de retrouver des expressions pour ces probabilités qui trouvent leur utilité quand l'épaisseur optique des zones s'avère faible. Le cas-limite d'un cylindre non troué qui a déjà été étudié par Carlvik [8] est aussi résumé dans cette annexe.

Souvent, un assemblage de cellules contient des cellules homogènes partitionnées de façon à ce que leurs faces externes correspondent aux faces d'autres cellules. Voyons comment les probabilités de collision pour la cellule dépendent du partitionnement.

Nous considérons d'abord une cellule homogène C de section efficace Σ décomposée en deux zones, et dont la frontière ∂C est divisée en deux surfaces, qui correspondent aux surfaces externes associées à chacune des zones (voir figure 1.3):

$$C = V_1 + V_2 \quad \partial C = S_1 + S_2$$

Il est possible de fractionner la probabilité de collision P_{CC} de la manière suivante:

$$(V_1 + V_2) P_{CC} = \int_C d^3r' \int_C d^3r (2\sqrt{\pi}s)^{-2} \exp(-\Sigma s)$$

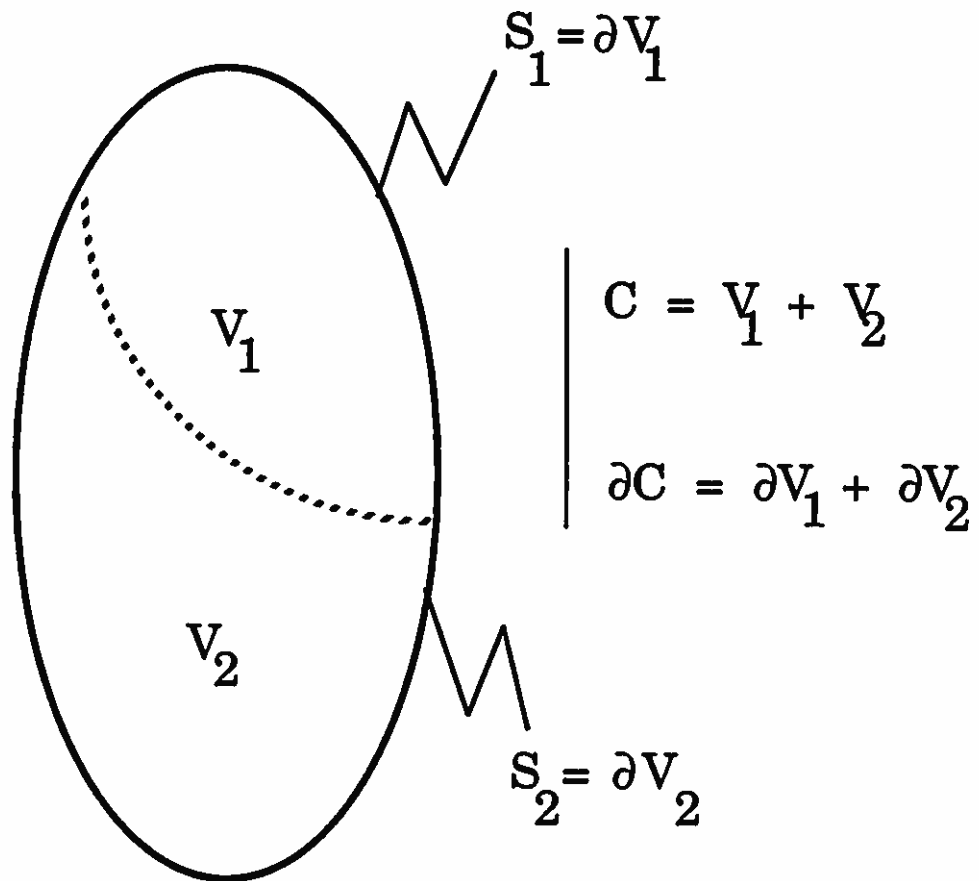


Figure 1.3 Fractionnement d'une cellule homogène.

$$\begin{aligned}
&= \left\{ \int_{V_1} d^3r' + \int_{V_2} d^3r' \right\} \left\{ \int_{V_1} d^3r + \int_{V_2} d^3r \right\} (2\sqrt{\pi}s)^{-2} \exp(-\Sigma s) \\
&= \int_{V_1} d^3r' \int_{V_1} d^3r (2\sqrt{\pi}s)^{-2} \exp(-\Sigma s) \\
&\quad + \int_{V_1} d^3r' \int_{V_2} d^3r (2\sqrt{\pi}s)^{-2} \exp(-\Sigma s) \\
&\quad + \int_{V_2} d^3r' \int_{V_1} d^3r (2\sqrt{\pi}s)^{-2} \exp(-\Sigma s) \\
&\quad + \int_{V_2} d^3r' \int_{V_2} d^3r (2\sqrt{\pi}s)^{-2} \exp(-\Sigma s) \\
&= V_1 P_{11} + V_1 P_{12} + V_2 P_{21} + V_2 P_{22}
\end{aligned}$$

où P_{CC} désigne la probabilité de collision dans la cellule et où P_{ij} désigne la probabilité de collision d'un neutron de la zone V_i dans la zone V_j . La loi de réciprocité nous dit aussi que:

$$V_1 P_{12} = V_2 P_{21}$$

Pour calculer les probabilités de collision P_{21} et P_{12} impliquées dans ces équations, il est donc suffisant d'évaluer P_{CC} , P_{11} et P_{22} .

Il est possible d'évaluer les probabilités de transmission de la cellule en nous servant du même argument de fractionnement des intégrales. Pour ces probabilités, nous aurons:

$$(S_1 + S_2) P_{\partial C, \partial C} = S_1 P_{\partial 1, \partial 1} + S_1 P_{\partial 1, \partial 2} + S_2 P_{\partial 1, \partial 2} + S_2 P_{\partial 2, \partial 2}$$

où $P_{\partial i, \partial j}$ représente la probabilité de transmission de la zone i par la zone j .

La loi de réciprocité (1.14) se résume alors par:

$$S_1 P_{\partial 1, \partial 2} = S_2 P_{\partial 2, \partial 1}$$

La connaissance des valeurs de $P_{\partial C, \partial C}$, $P_{\partial 1, \partial 1}$ et $P_{\partial 2, \partial 2}$ s'avère suffisante pour résoudre complètement toutes les probabilités de transmission. L'analyse globale d'une cellule homogène à deux zones peut généralement être réalisée par un calcul dans chacune des deux zones, suivi d'un calcul au niveau de l'union de ces deux zones.

Pour une cellule décomposée en plusieurs zones, il faut prévoir un algorithme récursif de reconstruction par partitionnement des probabilités faisant intervenir tous les sous-ensembles connexes de zones et de surfaces. Supposons donc une cellule C partitionnée en L zones, et dont la frontière ∂C est elle-même décomposée en Λ surfaces:

$$C = \sum_{i=1}^L V_i \quad \partial C = \sum_{\alpha=1}^{\Lambda} S_{\alpha}$$

Nous devons considérer l'ensemble des partitions plus grossières de la cellule, partitions compatibles avec la partition zonale au même sens que décrit

à la section §1.2. En commençant par la partition la plus fine, on déterminera les probabilités de collision en appliquant la méthode J_{\pm} à chaque zone:

calcul PC pour tous les $\{ V_i ; \partial V_i \}_{i=1,L}$

Ensuite, les partitions contenant des macrozones constituées de deux zones seront utilisées pour calculer les probabilités de collision entre chaque zone et ses voisines immédiates:

calcul PC pour tous les $\{ V_i \cup V_j ; \partial(V_i \cup V_j) \}_{i=1,L; j=1,L}$
tels que: $\partial V_i \cap \partial V_j = S_{i,j}$ (zones qui ont toutes une interface).

Supposons que toutes les probabilités de collision ont été évaluées pour tous les sous-ensembles connexes de N zones. Par induction, nous poursuivons ensuite en considérant tous les sous-ensembles connexes de $N+1$ zones. Les probabilités de chaque sous-ensemble de zones connexes procurent des informations qui permettent de compléter le schéma récursif.

Cet algorithme, appelé **algorithme de fractionnement**, procure toutes les probabilités de collision d'une manière efficace lorsque les zones sont convexes. Pour une cellule dont les zones ne sont pas convexes (empilement de cylindres troués, par exemple), il faudra aussi tenir compte

des trajets de neutrons qui sortent des zones pour y revenir ensuite, ce qui complique notablement les calculs.

En utilisant les simplifications des probabilités développées à l'annexe A conjointement à l'algorithme de fractionnement, il est possible de reconstituer l'ensemble des probabilités de collision, de transmission et de fuite des cellules rectangulaires. Cette application s'avère très utile notamment pour des fins de comparaison avec des probabilités de collision déterminées par une quadrature multidimensionnelle [11].

1.4.2 Quadratures en cellule hétérogène

Nous allons maintenant étudier le cas d'une cellule hétérogène. Les expressions des probabilités en (1.10) se prêtent mal à un traitement numérique; nous allons donc transformer ces expressions pour obtenir des formes plus simples à intégrer.

Divisons une cellule C en L zones homogènes de volume V_i et de section efficace totale Σ_i , et divisons sa surface extérieure en Λ surfaces S_α . Les probabilités de collision de zone à zone s'expriment par:

$$p_{ij} = \frac{1}{4\pi V_i V_j} \int d^3r \int d^3r' \frac{\exp(-\tau(\mathbf{r}, \mathbf{r}'))}{s^2} \quad 1 \leq i, j \leq L$$

où $\mathbf{r}' = \mathbf{r} - s \boldsymbol{\Omega}$ et $\boldsymbol{\Omega}$ est le vecteur de direction unitaire qui indique l'orientation du parcours optique entre les deux éléments de volume. Le terme $\tau(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ représente le parcours optique entre ces mêmes éléments. Même si cette intégrale est a priori singulière (lorsque $s^2 \rightarrow 0$), cette singularité disparaît en utilisant le changement de variables:

$$d^3r = d^2\Omega \, dt \, s^2$$

où $d^2\Omega$ est l'élément d'angle solide que supporte $\boldsymbol{\Omega}$. Définissons maintenant un plan $\pi_{\boldsymbol{\Omega}}$ perpendiculaire à la direction $\boldsymbol{\Omega}$. La deuxième intégrale peut être transformée par le changement de variables :

$$d^3r' = d^2s \, dt'$$

où d^2s représente un élément de surface du plan $\pi_{\boldsymbol{\Omega}}$. Après ces changements (illustrés par la figure 1.4), nous obtenons l'expression suivante:

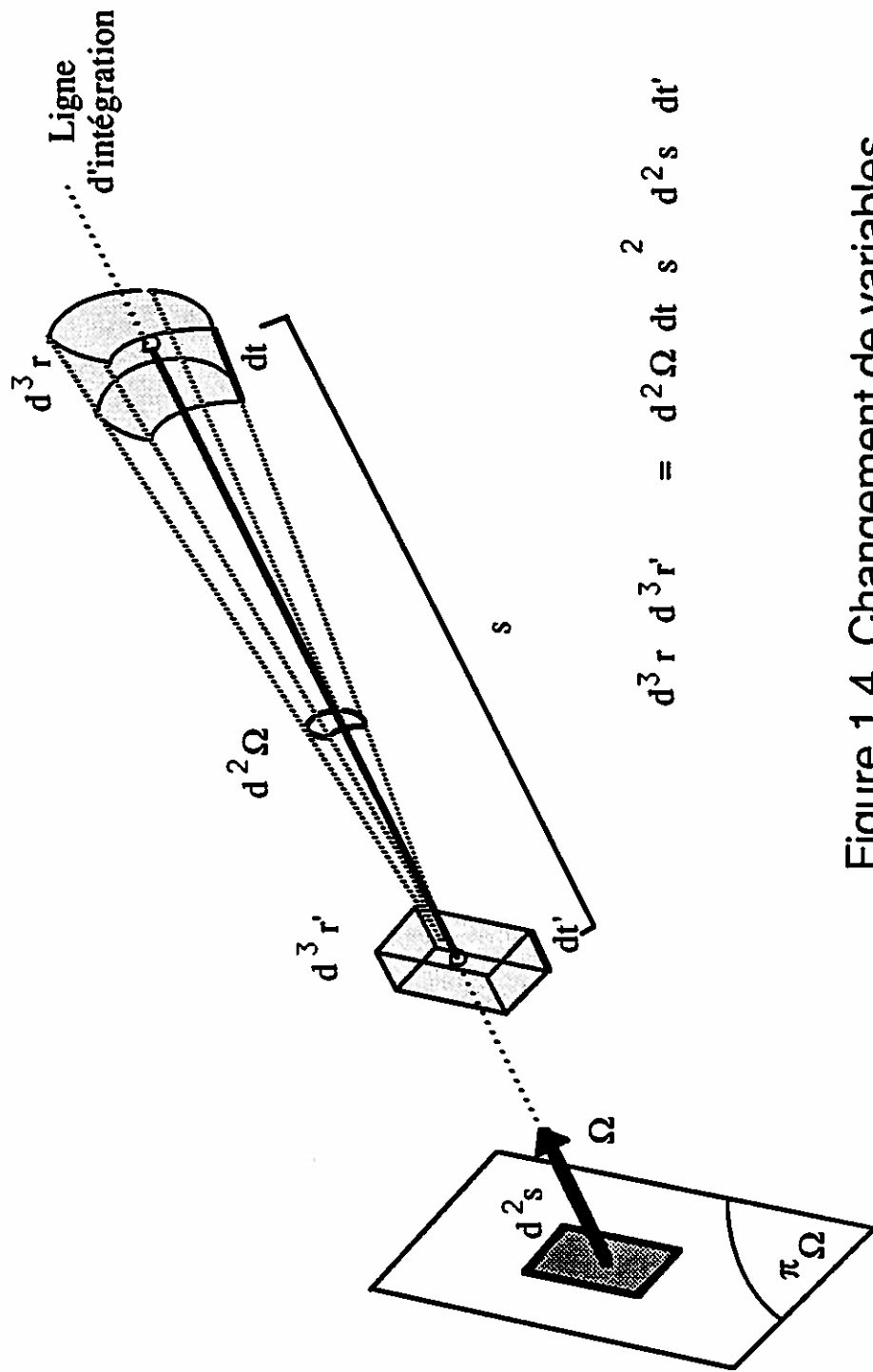


Figure 1.4. Changement de variables.

$$p_{ij} = \frac{1}{4\pi V_i} \int d^2\Omega \int d^2s \chi(V_i) \chi(V_j) \int dt \int dt' e^{-\tau_{ij}} \quad (1.21)$$

$1 \leq i, j \leq L$

Les deux premières intégrales bidimensionnelles définissent des droites: la première intégrale en donnant la direction de la droite, la seconde en identifiant une position de départ à partir d'un plan. La fonction $\chi(X)$ est une fonction caractéristique pour l'ensemble X qui est définie par:

$$\chi(X) = 1 \text{ si la droite intersecte } X$$

0 autrement.

Le parcours optique τ_{ij} demeure fonction de t et t' , variables qui désignent les coordonnées le long de cette droite. Toutefois, il est possible d'effectuer analytiquement ces deux dernières intégrales, additionnant ainsi les parcours optiques de tous les segments de cette droite joignant la zone i à la zone j . En supposant que Σ_i et Σ_j dénotent les sections efficaces totales pour les zones i et j respectivement, le parcours optique peut être défini par:

$$\tau_{ij} = | \Sigma_i(t_{i+1}-t) + \tau_0 + \Sigma_j(t'-t_j) |$$

$$t_i \leq t \leq t_{i+1}$$

$$t_j \leq t' \leq t_{j+1}$$

où τ_0 désigne le parcours optique à l'extérieur des deux zones (voir figure 1.5). L'intégration le long de l'axe t et t' s'effectue en considérant la relation:

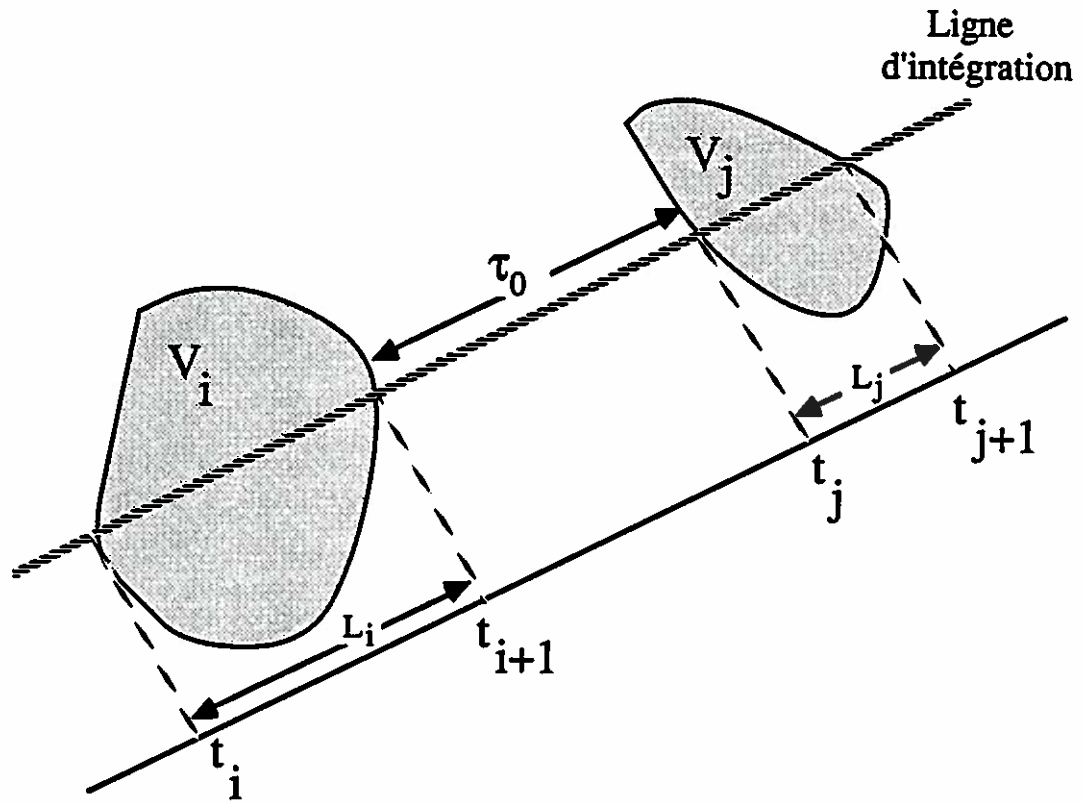


Figure 1.5. Parcours optique entre deux zones.

$$\int_0^L dt e^{-\Sigma t} = \begin{cases} (1 - e^{-\Sigma L}) / \Sigma & \text{si } \Sigma \neq 0 \\ L & \text{si } \Sigma = 0 \end{cases}$$

Après intégration selon t et t' sur les intervalles de longueur $L_i = t_{i+1} - t_i$ et $L_j = t_{j+1} - t_j$ respectivement, nous obtenons:

$$\int dt \int dt' e^{-\tau_{ij}} = \begin{cases} \frac{(1 - e^{-\Sigma_i L_i}) e^{-\tau_0} (1 - e^{-\Sigma_j L_j})}{\Sigma_i \Sigma_j} & \text{si } i \neq j, \Sigma_i \neq 0 \text{ et } \Sigma_j \neq 0 \\ L_i e^{-\tau_0} \frac{(1 - e^{-\Sigma_j L_j})}{\Sigma_j} & \text{si } i \neq j, \Sigma_i = 0 \text{ et } \Sigma_j \neq 0 \\ \frac{(1 - e^{-\Sigma_i L_i}) e^{-\tau_0} L_j}{\Sigma_i} & \text{si } i \neq j, \Sigma_i \neq 0 \text{ et } \Sigma_j = 0 \\ L_i e^{-\tau_0} L_j & \text{si } i \neq j, \Sigma_i = 0 \text{ et } \Sigma_j = 0 \\ \frac{2(L_i - (1 - e^{-\Sigma_i L_i}) / \Sigma_i)}{\Sigma_i} & \text{si } i = j, \Sigma_i \neq 0 \\ L_i^2 & \text{si } i = j, \Sigma_i = 0 \end{cases}$$

Il est possible de réduire les probabilités de fuite de façon similaire à partir de l'équation:

$$P_{i\beta} = \frac{1}{4\pi V_i} \int_{V_i} d^3r \int_{S_\beta} d^2r'_s (\Omega \cdot \mathbf{N}_+) \frac{\exp(-\tau(\mathbf{r}, \mathbf{r}'))}{s^2} \quad \begin{array}{l} 1 \leq i \leq L \\ 1 \leq \beta \leq \Lambda \end{array}$$

en utilisant les changements de variables:

$$d^3r = d^2\Omega \, dt \, s^2$$

$$d^2r'_s (\Omega \cdot \mathbf{N}_+) = d^2s$$

nous obtenons l'expression:

$$P_{i\beta} = \frac{1}{4\pi V_i} \int d^2\Omega \int d^2s \chi(V_i) \chi(S_\beta) \int dt e^{-\tau_{i\beta}} \quad \begin{array}{l} 1 \leq i \leq L \\ 1 \leq \beta \leq \Lambda \end{array} \quad (1.22)$$

où $\tau_{i\beta}$ représente le parcours optique de la zone i vers la surface β .

L'intégration le long de l'axe des t nous conduit à:

$$\int dt e^{-\tau_i \beta} = \begin{cases} \frac{(1 - e^{-\Sigma_i L_i}) e^{-\tau_0}}{\Sigma_i} & \text{si } \Sigma_i \neq 0 \\ L_i e^{-\tau_0} & \text{si } \Sigma_i = 0 \end{cases}$$

où τ_0 représente le parcours optique minimal entre la zone i et la surface β .

Finalement, nous réduisons les probabilités de transmission:

$$P_{\alpha\beta} = \frac{1}{\pi S_\alpha} \int_{S_\alpha} d^2 r_s \int_{S_\beta} d^2 r'_s (\Omega \cdot \mathbf{N}_-) (\Omega \cdot \mathbf{N}_+) \frac{\exp(-\tau(r, r'))}{s^2}$$

$1 \leq \alpha, \beta \leq \Lambda$

en utilisant les changements de variables:

$$d^2 r_s (\Omega \cdot \mathbf{N}_+) s^{-2} = d^2 \Omega$$

$$d^2 r'_s (\Omega \cdot \mathbf{N}_+) = d^2 s$$

et nous obtenons l'expression:

$$P_{\alpha\beta} = \frac{1}{\pi S_\alpha} \int d^2 \Omega \int_{4\pi} d^2 s \chi(S_\alpha) \chi(S_\beta) e^{-\tau_{\alpha\beta}} \quad (1.23)$$

$$1 \leq \alpha, \beta \leq \Lambda$$

où $\tau_{\alpha\beta}$ représente le parcours optique de la surface α vers la surface β .

Les quadratures utilisées pour évaluer les intégrations (1.21) à (1.23) sont établies en substituant au continuum des droites un échantillon de **lignes d'intégration** discrètes réparties régulièrement. Cette discrétisation est effectuée en choisissant une quadrature pour déterminer les directions angulaires, et une autre pour décrire le plan perpendiculaire à chaque direction choisie. Une fois l'ensemble des directions discrètes Ω déterminé par la quadrature angulaire, l'intégration numérique de toutes les probabilités d'une cellule s'effectue simultanément pour les probabilités de collision, de fuite et de transmission, en suivant les trajets de neutrons le long de lignes d'intégration toutes parallèles à une direction donnée (voir figure 1.6).

Cette méthode de discrétisation des lignes d'intégration par une quadrature angulaire suivie d'une quadrature planaire convient bien aux problèmes faisant intervenir des cellules tridimensionnelles; en voici les principaux avantages:

1. l'ensemble des quadratures angulaires peut être adapté aux symétries de la cellule considérée. Pour une application faisant intervenir trois axes cartésiens, il est possible de choisir des direc-

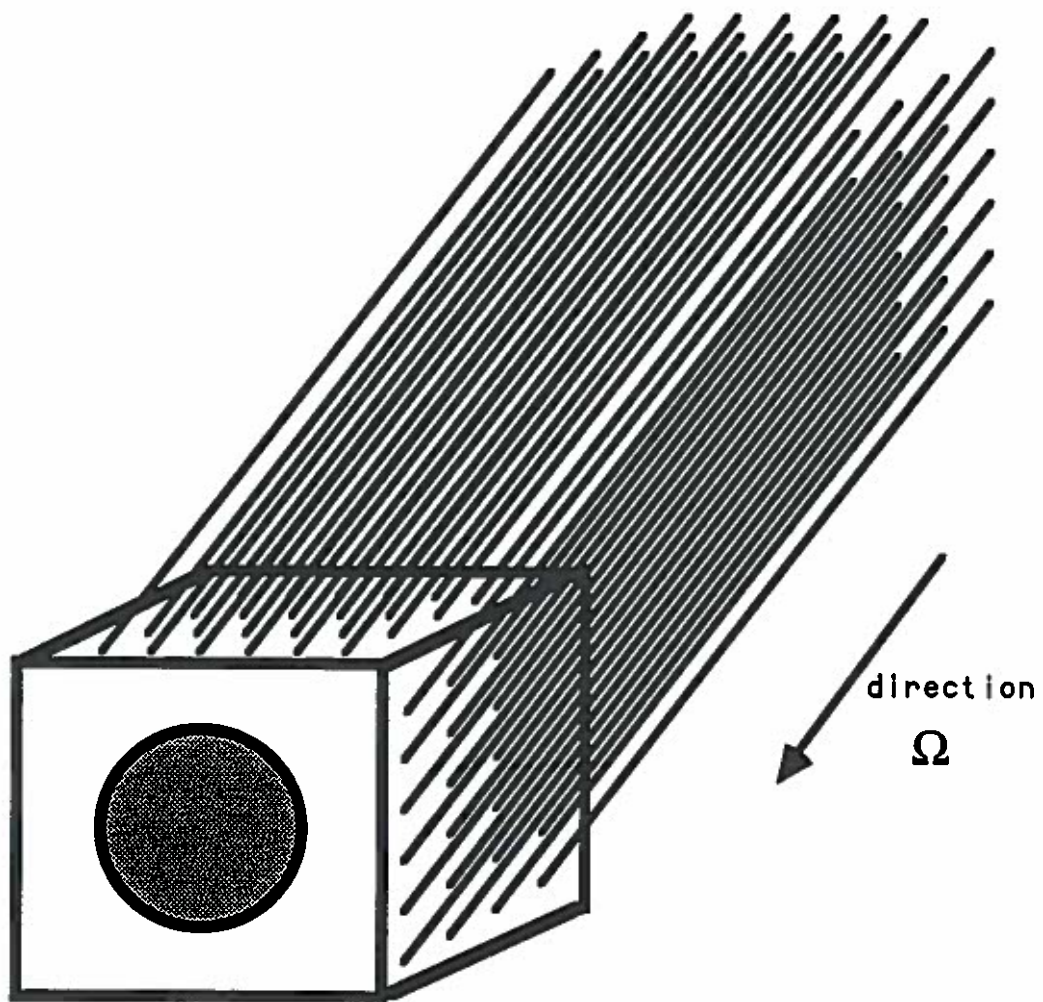


Figure 1.6. Ensemble de lignes d'intégration parallèles.

tions invariantes selon les rotations axiales. Pour un problème avec des cellules hexagonales, nous choisissons plutôt des angles respectant une symétrie hexagonale. Ces familles d'angles peuvent être calquées sur celles employées dans la méthode des ordonnées discrètes [14,15].

2. Toutes les lignes d'intégration correspondant à une direction donnée peuvent avoir le même poids, lors d'une intégration trapézoïdale. Ceci permet de réduire substantiellement le temps de calcul nécessaire lors de l'évaluation des probabilités.

3. Les lignes d'intégration correspondant à différentes cellules de quadratures compatibles peuvent s'interconnecter (voir figure 1.7) pour former des lignes plus longues et être ensuite réutilisées pour un calcul complet des probabilités de collision au niveau d'une nouvelle cellule formée de l'union des précédentes.

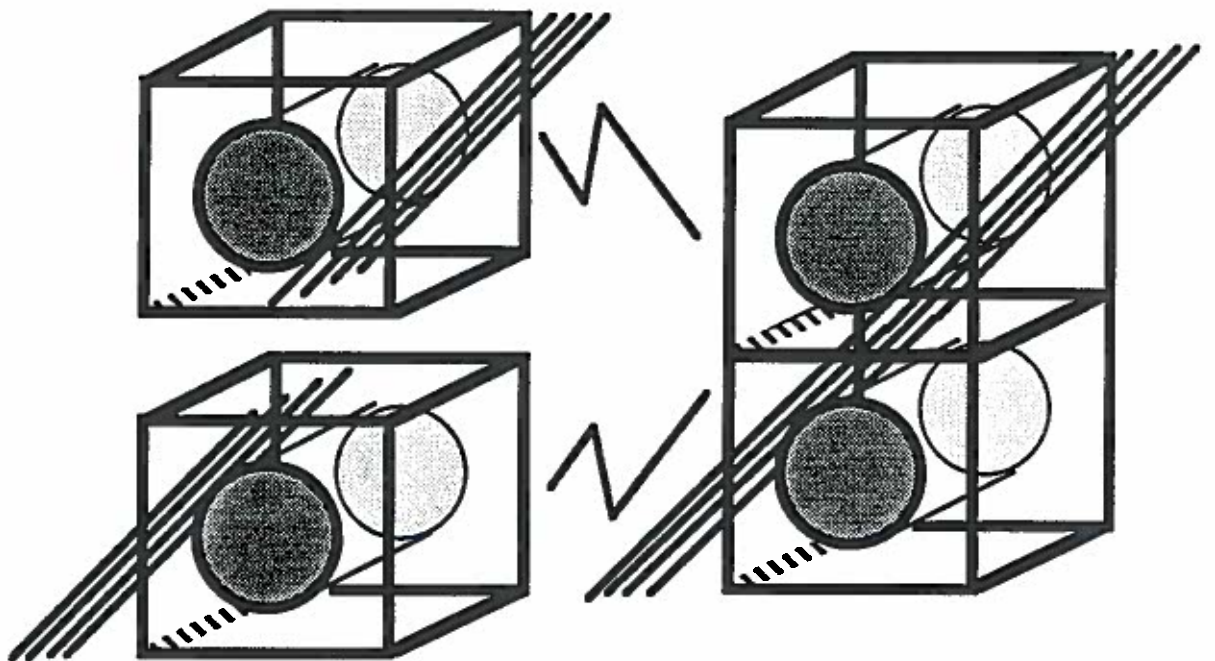


Figure 1.7. Connection des lignes d'intégration de deux cellules.

CHAPITRE 2

RÉSOLUTION DES ASSEMBLAGES TRIDIMENSIONNELS

Dans ce chapitre, nous allons discuter des techniques de résolution de l'équation de transport pour des assemblages de cellules formant un réseau cartésien de cellules rectangulaires. Nous divisons notre présentation en deux parties. D'abord, nous étudions des méthodes de résolution qui s'appliquent à des domaines composés d'une seule cellule. Ensuite, nous examinons les méthodes qui s'appliquent aux domaines polycellulaires.

2.1 Cas monocellulaire

Avant de présenter ces deux sujets, expliquons comment il est possible de réécrire les équations (1.8) et (1.9) en ne faisant intervenir que des matrices symétriques. Cette symétrisation fait usage des relations de réciprocité (1.11), qui nous servent à définir une matrice symétrique d'ordre $L+\Lambda$, appelée **matrice de cellule** notée par Q et dont les éléments sont:

$$Q_{i,j} = V_i p_{ij} = V_j p_{ji} = Q_{j,i}$$
$$Q_{L+\alpha,j} = S_\alpha P_{\alpha j} = 4 V_j P_{j\alpha} = Q_{j,L+\alpha} \quad (2.1)$$

$$Q_{L+\alpha,L+\beta} = S_\alpha P_{\alpha\beta} = S_\beta P_{\beta\alpha} = Q_{L+\beta,L+\alpha}$$
$$\begin{array}{l} 1 \leq i,j \leq L \\ 1 \leq \alpha,\beta \leq \Lambda \end{array}$$

En utilisant cette définition, il est possible de réécrire les équations monocinétiques (1.8) et (1.9) sous la forme:

$$V_j \phi_j = \sum_{i=1}^L Q_{j,i} \psi_i + \sum_{\alpha=1}^{\Lambda} Q_{j, L+\alpha} \{ 4J^-_{\alpha} / S_{\alpha} \} \quad (2.2a)$$

$$4J^+_{\beta} = \sum_{i=1}^L Q_{L+\beta, i} \psi_i + \sum_{\alpha=1}^{\Lambda} Q_{L+\beta, L+\alpha} \{ 4J^-_{\alpha} / S_{\alpha} \} \quad (2.2b)$$

$$\begin{aligned} 1 \leq j \leq L \\ 1 \leq \beta \leq \Lambda \end{aligned}$$

Nous pouvons maintenant introduire une matrice diagonale de géométrie G définie par:

$$\begin{aligned} G_{i,j} &= 4V_i \delta_{ij} = 4V_j \delta_{ji} = G_{j,i} \\ G_{L+\alpha, j} &= 0 = G_{j, L+\alpha} \end{aligned} \quad (2.3)$$

$$G_{L+\alpha, L+\beta} = S_{\alpha} \delta_{\alpha\beta} = S_{\beta} \delta_{\beta\alpha} = G_{L+\beta, L+\alpha}$$

$$\begin{aligned} 1 \leq i, j \leq L \\ 1 \leq \alpha, \beta \leq \Lambda \end{aligned}$$

ainsi que trois vecteurs f , e et e^* :

$$\begin{aligned} f_j &= \phi_j \\ f_{L+\beta} &= \{ 4J^+_{\beta} / S_{\beta} \} \end{aligned} \quad (2.4a)$$

$$\begin{aligned} e^*_j &= \psi^*_j \\ e^*_{L+\beta} &= \{ 4 J^*_\beta / S_\beta \} \end{aligned} \quad (2.4b)$$

$$\begin{aligned} e_j &= \psi_j - \psi^*_j \\ e_{L+\beta} &= \{ 4 (J_\beta - J^*_\beta) / S_\beta \} \end{aligned} \quad (2.4c)$$

$$\begin{aligned} 1 \leq j \leq L \\ 1 \leq \beta \leq \Lambda \end{aligned}$$

En utilisant cette notation vectorielle, l'équation de transport appliquée à une cellule prend la forme symétrique:

$$G f = Q e + Q e^* \quad (2.5)$$

De la même façon, il est possible de symétriser les conditions externes au système données par les équations (1.13) et (1.14) en définissant la matrice d'effet de retour B comme suit:

$$\begin{aligned} B_{i,j} &= \sum_i^s \delta_{ij} = \sum_j^s \delta_{ji} = B_{j,i} \\ B_{L+\alpha,j} &= 0 = B_{j,L+\alpha} \end{aligned} \quad (2.6)$$

$$B_{L+\alpha,L+\beta} = A_{\alpha\beta} = A_{\beta\alpha} = B_{L+\beta,L+\alpha}$$

$$\begin{aligned} 1 \leq i,j \leq L \\ 1 \leq \alpha,\beta \leq \Lambda \end{aligned}$$

où la matrice des albédos A qui intervient dans (1.14) est symétrique. Les

équations (1.13) et (1.14) peuvent alors être condensées sous la forme:

$$\mathbf{B} \mathbf{f} = \mathbf{e} \quad (2.7)$$

Considérons le cas particulier où la section de diffusion associée à certaines zones de la cellule est nulle. Dans ce cas, les flux dans ces zones peuvent se calculer directement en utilisant (1.8) seulement. Ce sont des inconnues inutiles dans la démarche de résolution des équations couplées (2.5) et (2.7), puisqu'elles n'apparaissent pas dans (2.7). De la même façon, les courants sortants de toutes les surfaces d'albédo nul n'apparaissent pas dans (2.7). Nous considérons donc le système (2.5) et (2.7) en ne retenant pas ces inconnues; il sera toujours possible d'établir leur valeur en retournant aux équations (1.8), après que les autres inconnues aient été calculées. Nous pouvons donc dorénavant considérer la matrice \mathbf{B} comme inversible.

Les équations **CI** symétriques (2.5) et (2.7) ne font intervenir que des matrices symétriques, leur traitement en est d'autant plus facilité. Si nous décomposons maintenant les matrices \mathbf{Q} , \mathbf{G} et \mathbf{B} , et les vecteurs \mathbf{f} , \mathbf{e} et \mathbf{e}^* de la façon suivante:

$$\mathbf{Q} = \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_{VV} & \mathbf{Q}_{VS} \\ \mathbf{Q}_{SV} & \mathbf{Q}_{SS} \end{bmatrix} \quad \mathbf{f} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_V \\ \mathbf{f}_S \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} \mathbf{G}_{VV} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{G}_{SS} \end{bmatrix} \quad \mathbf{e} = \begin{bmatrix} \mathbf{e}_V \\ \mathbf{e}_S \end{bmatrix} \quad (2.8)$$

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{VV} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{B}_{SS} \end{bmatrix} \quad \mathbf{e}^* = \begin{bmatrix} \mathbf{e}^*_V \\ \mathbf{e}^*_S \end{bmatrix}$$

où les indices v et s dénotent respectivement les composantes des différentes matrices reliées aux zones et aux surfaces (remarquons qu'ici $\mathbf{Q}_{VS}^T = \mathbf{Q}_{SV}$).

On obtient alors la forme décomposée des équations CI symétriques:

$$\mathbf{G}_{VV} \mathbf{f}_V = \mathbf{Q}_{VV} (\mathbf{e}_V + \mathbf{e}^*_V) + \mathbf{Q}_{VS} (\mathbf{e}_S + \mathbf{e}^*_S) \quad (2.9a)$$

$$\mathbf{G}_{SS} \mathbf{f}_S = \mathbf{Q}_{SV} (\mathbf{e}_V + \mathbf{e}^*_V) + \mathbf{Q}_{SS} (\mathbf{e}_S + \mathbf{e}^*_S) \quad (2.9b)$$

$$\mathbf{B}_{VV} \mathbf{f}_V = \mathbf{e}_V \quad (2.9c)$$

$$\mathbf{B}_{SS} \mathbf{f}_S = \mathbf{e}_S \quad (2.9d)$$

Voyons maintenant comment il est possible de résoudre ces équations. Une première méthode consiste à résoudre de façon itérative le système complet des équations (2.5) et (2.7). Il faut toutefois envisager la possibilité que cette solution ne représente qu'un calcul intermédiaire qui doit être effectué à plusieurs reprises pour différentes valeurs du vecteur source \mathbf{e}^* . Cet argument milite en faveur d'une résolution directe des équations CI symétriques. Les méthodes de résolution directes sont cependant in-

adéquates lorsque les dimensions du système sont grandes. Nous présentons maintenant différentes options de résolution, certaines d'entre elles permettant des réductions partielles du système des équations dans les applications monocellulaires.

2.1.1. Résolution itérative complète

La méthode de surrelaxation successive permet de résoudre le système des équations (2.5) et (2.7) en se servant d'un paramètre de relaxation. Cette méthode consiste à itérer jusqu'à convergence les équations:

$$\mathbf{G} \mathbf{f}_{k+1} = (1 - \omega) \mathbf{G} \mathbf{f}_k + \omega [\mathbf{Q} \mathbf{e}_k + \mathbf{Q} \mathbf{e}^*]$$

$$\mathbf{e}_{k+1} = (1 - \omega) \mathbf{e}_k + \omega \mathbf{B} \mathbf{f}_k$$

où k représente le numéro de l'itération et ω est le paramètre de relaxation choisi. Ce paramètre peut soit être donné par l'utilisateur ou recalculé à chaque itération. Une procédure similaire est employée dans le logiciel SHE-TAN [10].

2.1.2. Élimination algébrique des courants

Une technique de réduction couramment employée permet d'éliminer les termes de courants \mathbf{f}_s et \mathbf{e}_s des équations (2.9). En utilisant les conditions de réflexion aux surfaces externes données par la matrice \mathbf{B}_{ss} et

en transformant le système pour y éliminer d'abord la composante e_s , nous obtenons:

$$G_{VV} f_V = Q_{VV} (e_V + e^*_V) + Q_{VS} B_{SS} f_S + Q_{VS} e^*_S$$

$$G_{SS} f_S = Q_{SV} (e_V + e^*_V) + Q_{SS} B_{SS} f_S + Q_{SS} e^*_S$$

$$B_{VV} f_V = e_V$$

et finalement, après substitution de la valeur de f_S :

$$\begin{aligned} G_{VV} f_V &= \{ Q_{VV} + Q_{VS} B_{SS} [G_{SS} - Q_{SS} B_{SS}]^{-1} Q_{SV} \} (e_V + e^*_V) \\ &\quad + \{ Q_{VS} + Q_{VS} B_{SS} [G_{SS} - Q_{SS} B_{SS}]^{-1} Q_{SS} \} e^*_S \\ &= R_{VV} (e_V + e^*_V) + r^*_V \end{aligned}$$

(2.10)

$$B_{VV} f_V = e_V$$

où les vecteurs e^*_V , e^*_S et r^*_V sont connus.

Cette technique de réduction est très utile lorsque les sections efficaces de diffusion associées aux différentes zones doivent être modifiées lors de calculs de transport successifs; nous retrouvons cette situation notamment lors d'un calcul de laplacien-matière [2, 3]. L'inversion de $G_{SS} - Q_{SS} B_{SS}$ est assurée par les relations de conservation (1.12) lorsque les albédos sont choisis entre 0 et 1. Cette méthode a cependant un désavantage du

point de vue numérique. La matrice $\mathbf{G}_{SS} - \mathbf{Q}_{SS} \mathbf{B}_{SS}$ n'est pas symétrique, alors que la matrice finale \mathbf{R}_{VV} doit être symétrique; ainsi, des effets de troncature qui peuvent se produire lors de l'inversion (ou de la factorisation) de cette matrice peuvent générer des distorsions au niveau de la réciprocité.

Il est facile de remédier à ce problème. En éliminant d'abord la composante \mathbf{f}_S plutôt que \mathbf{e}_S des équations (2.9), nous obtenons:

$$\mathbf{G}_{VV} \mathbf{f}_V = \mathbf{Q}_{VV} (\mathbf{e}_V + \mathbf{e}_V^*) + \mathbf{Q}_{VS} (\mathbf{e}_S + \mathbf{e}_S^*)$$

$$\mathbf{G}_{SS} \mathbf{B}_{SS}^{-1} \mathbf{e}_S = \mathbf{Q}_{SV} (\mathbf{e}_V + \mathbf{e}_V^*) + \mathbf{Q}_{SS} (\mathbf{e}_S + \mathbf{e}_S^*)$$

$$\mathbf{B}_{VV} \mathbf{f}_V = \mathbf{e}_V$$

après substitution de la valeur de \mathbf{e}_S , nous obtenons ensuite:

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_{VV} \mathbf{f}_V &= \{ \mathbf{Q}_{VV} + \mathbf{Q}_{VS} [\mathbf{G}_{SS} \mathbf{B}_{SS}^{-1} - \mathbf{Q}_{SS}]^{-1} \mathbf{Q}_{SV} \} (\mathbf{e}_V + \mathbf{e}_V^*) \\ &\quad + \{ \mathbf{Q}_{VS} + \mathbf{Q}_{VS} [\mathbf{G}_{SS} \mathbf{B}_{SS}^{-1} - \mathbf{Q}_{SS}]^{-1} \mathbf{Q}_{SS} \} \mathbf{e}_S^* \\ &= \mathbf{R}_{VV} (\mathbf{e}_V + \mathbf{e}_V^*) + \mathbf{r}_V^* \end{aligned} \tag{2.11}$$

$$\mathbf{B}_{VV} \mathbf{f}_V = \mathbf{e}_V$$

Les deux formulations (2.10) et (2.11) conduisent à la même expression finale puisque l'inverse de \mathbf{B}_{SS} existe (par notre convention d'éliminer les sur-

faces d'albédo nul). Les matrices \mathbf{G}_{SS} et \mathbf{B}_{SS} définies en (2.8) sont de forme simple (la plupart du temps diagonales), et en supposant que ces matrices commutent:

$$\mathbf{G}_{SS} \mathbf{B}_{SS} = \mathbf{B}_{SS} \mathbf{G}_{SS}$$

nous remarquons que la matrice $\mathbf{G}_{SS} \mathbf{B}_{SS}^{-1} - \mathbf{Q}_{SS}$ est symétrique, et se prête donc à une factorisation de type $\mathbf{L} \mathbf{D} \mathbf{L}^T$. Il est alors aisé de préserver la symétrie de l'expression finale de \mathbf{R}_{VV} . La résolution des équations (2.11) peut être effectuée en se servant d'une stratégie itérative tel que décrite au paragraphe §2.1.1, les valeurs des vecteurs \mathbf{f}_S et \mathbf{e}_S peuvent ensuite être évaluées par substitution arrière:

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_S &= [\mathbf{G}_{SS} \mathbf{B}_{SS}^{-1} - \mathbf{Q}_{SS}]^{-1} \{ \mathbf{Q}_{SV} (\mathbf{e}_V + \mathbf{e}_V^*) + \mathbf{Q}_{SS} \mathbf{e}_S^* \} \\ \mathbf{e}_S &= \mathbf{B}_{SS} \mathbf{f}_S \end{aligned}$$

2.1.3. Élimination algébrique des flux

Une autre méthode de réduction des formules (2.9) consiste à faire disparaître les termes de flux \mathbf{f}_V et \mathbf{e}_V . Dans ce cas, en utilisant des substitutions successives de \mathbf{f}_V et \mathbf{e}_V , nous obtenons le système:

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_{SS} \mathbf{f}_S &= \{ \mathbf{Q}_{SS} + \mathbf{Q}_{SV} [\mathbf{G}_{VV} \mathbf{B}_{VV}^{-1} - \mathbf{Q}_{VV}]^{-1} \mathbf{Q}_{VS} \} (\mathbf{e}_S + \mathbf{e}_S^*) \\ &+ \{ \mathbf{Q}_{SV} + \mathbf{Q}_{SV} [\mathbf{G}_{VV} \mathbf{B}_{VV}^{-1} - \mathbf{Q}_{VV}]^{-1} \mathbf{Q}_{VV} \} \mathbf{e}_V^* \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \mathbf{R}_{SS} (\mathbf{e}_S + \mathbf{e}^*_S) + \mathbf{r}^*_S \\
 \mathbf{B}_{SS} \mathbf{f}_S &= \mathbf{e}_S
 \end{aligned}
 \tag{2.12}$$

la matrice géométrique \mathbf{G}_{VV} et la matrice \mathbf{B}_{VV} sont toutes deux diagonales et elles commutent toujours:

$$\mathbf{G}_{VV} \mathbf{B}_{VV} = \mathbf{B}_{VV} \mathbf{G}_{VV}$$

nous remarquons que la matrice $\mathbf{G}_{VV} \mathbf{B}_{VV}^{-1} - \mathbf{Q}_{VV}$ est aussi symétrique, et se prête aussi à une factorisation de type $\mathbf{L} \mathbf{D} \mathbf{L}^T$. La résolution des équations (2.12) peut, une fois de plus, être effectuée en se servant d'une stratégie itérative tel que décrite au paragraphe §2.1.1, les valeurs des vecteurs \mathbf{f}_V et \mathbf{e}_V sont ensuite évaluées par substitution arrière:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{f}_V &= [\mathbf{G}_{VV} \mathbf{B}_{VV}^{-1} - \mathbf{Q}_{VV}]^{-1} \{ \mathbf{Q}_{VS} (\mathbf{e}_S + \mathbf{e}^*_S) + \mathbf{Q}_{VV} \mathbf{e}^*_V \} \\
 \mathbf{e}_V &= \mathbf{B}_{VV} \mathbf{f}_V
 \end{aligned}$$

Pour une application où les sections de diffusion demeurent fixes, et où les albédos sont susceptibles d'être modifiés par une itération externe, cette méthode s'avère avantageuse. Remarquons finalement que cette approche nous conduit, après avoir substitué \mathbf{f}_S par sa valeur dans la première équation de (2.12), à définir une **matrice de réponse** symétrique associée à la cellule:

$$\mathbf{e}_S = [\mathbf{G}_{SS} \mathbf{B}_{SS}^{-1} - \mathbf{R}_{SS}]^{-1} \{ \mathbf{R}_{SS} \mathbf{e}^*_S + \mathbf{r}^*_S \}$$

$$\mathbf{f}_s = \mathbf{B}_{ss}^{-1} \mathbf{e}_s$$

En supposant des sources fixes de neutrons dans les différentes zones de la cellule, cette matrice de réponse nous permet de déduire les courants entrants et sortants par toutes les surfaces de la cellule si on connaît les termes de courants fixes entrants par certaines surfaces; ces matrices de réponse peuvent être utilisées pour des applications polycellulaires [20, 21].

2.1.4. Résolution directe

Une dernière forme de réduction consiste à inverser directement le système (2.9) dans son ensemble. Dans ce paragraphe, nous utilisons plutôt le format (2.5) et (2.7) des équations CI symétriques, dans lequel nous substituons la valeur de \mathbf{f} pour obtenir simplement:

$$\mathbf{e} = [\mathbf{G}\mathbf{B}^{-1} - \mathbf{Q}]^{-1} \mathbf{Q} \mathbf{e}^* \quad (2.13)$$

La matrice symétrique $\mathbf{G}\mathbf{B}^{-1} - \mathbf{Q}$ se prête alors à une factorisation de type $\mathbf{L}\mathbf{D}\mathbf{L}^T$ lorsque les matrices \mathbf{G} et \mathbf{B} commutent. La résolution d'un problème monocinétique comporte alors deux étapes:

1. l'évaluation du terme de source $\mathbf{Q} \mathbf{e}^*$
2. la résolution flux/courants sortants de (2.13).

Cette technique est bien adaptée aux problèmes à plusieurs groupes d'énergie car la factorisation dans chaque groupe n'est effectuée qu'une seule fois, alors que les itérations externes que nous décrivons plus loin ne changent que les sources.

Dans le logiciel EXCELL, les cas monocellulaires peuvent être traités soit après une élimination algébrique des courants qui se fait via le module de calcul complet des PC (voir §2.1.2 et §3.2.4), soit par résolution directe via le module d'assemblage des cellules (voir §2.1.4 et §3.2.3).

2.2 Cas polycellulaire

Dans cette section, nous décrivons les méthodes de résolution pour des assemblages de plusieurs cellules. Nous considérons, comme à la section §1.2, un domaine D partitionné en cellules C^k , chaque cellule étant bornée par sa frontière ∂C^k :

$$D = \sum C^k \qquad C^k = \sum_{i=1}^{L^k} v_i^k \qquad \partial C^k = \sum_{\alpha=1}^{\Lambda^k} s_{\alpha}^k$$

Les équations de transport (1.16) et (1.17) peuvent être symétrisées en utilisant la technique décrite à la section §2.1. Ainsi, pour la cellule C^k de l'assemblage, les équations de transport reliant les flux et les courants sortants aux sources de neutrons peuvent s'exprimer sous la forme:

$$G^k f^k = Q^k e^k + Q^k e^{*k} \qquad (2.14)$$

où les matrices Q^k et G^k et les vecteurs f^k , e^k et e^{*k} sont définis aux équations (2.1), (2.3) et (2.4).

La différence majeure entre le traitement monocellulaire et le cas polycellulaire apparaît lorsque nous examinons les conditions externes (1.13) et (1.14). Nous pouvons encore définir une matrice d'effet de retour B^k associée à la cellule C^k selon (2.6), mais ces matrices sont insuffisantes pour fermer le système d'équations (2.14); il nous faut ici tenir compte du couplage entre les interfaces des cellules. Le couplage entre la cellule C^k et

C^1 est représenté par une **matrice de transmission** des courants, notée T^{kl} de dimension $(L^k + \Lambda^k) \times (L^1 + \Lambda^1)$ et dont les éléments sont définis par:

$$T_{\alpha\beta}^{kl} = \begin{cases} 1 & \text{si } k=1 \text{ et si } \partial V^k_i \cap \partial V^1_j = S^k_\alpha = S^1_\beta, \\ 0 & \text{autrement.} \end{cases} \quad (2.15)$$

Ces matrices de transmission assurent le couplage entre les courants sortants d'une cellule C^k et les courants entrants dans la cellule C^1 . Elles possèdent la propriété de symétrie suivante: $T^{kl} = (T^{lk})^T$. Définissons maintenant une matrice globale de couplage K^{kl} qui combine les effets du couplage polycellulaire et les conditions externes:

$$K^{kl} = T^{kl} + B^k \delta^{kl} \quad (2.16)$$

où δ^{kl} est une matrice d'ordre $L^k + \Lambda^k$, telle que:

$$\delta^{kl} = \begin{cases} I & \text{(matrice identité) si } k=1, \\ 0 & \text{(matrice nulle) autrement.} \end{cases}$$

Dans l'équation (2.16), remarquons qu'il y a séparation entre les surfaces externes et les interfaces ce qui assure $B^k T^{kl} = 0$. Notons aussi que les surfaces externes à albédo nul et les zones de section efficace de diffusion nulle sont éliminées du système comme à l'équation (2.7), ce qui permet l'inversion des matrices B^k .

Les notations précédentes nous permettent de combiner les équations

tions (1.13) et (1.14) comme suit:

$$\mathbf{e}^k = \sum_l \mathbf{K}^{kl} \mathbf{f}^l \quad (2.17)$$

Les équations (2.14) et (2.17) sont appelées les **équations CI symétriques** pour un assemblage de plusieurs cellules; elles décrivent entièrement le système linéaire que nous cherchons à résoudre.

Encore une fois, plusieurs méthodes de résolution s'offrent à nous; ces méthodes regroupent:

1. les méthodes itératives (surrelaxation comme en §2.1.1),
2. la méthode directe,
3. les méthodes hybrides, impliquant des réductions partielles du système.

Parmi ces méthodes hybrides, notons la possibilité d'éliminer algébriquement les courants externes ou les flux, puis de recourir à une méthode itérative de résolution globale. Ces deux techniques appliquées conjointement à une méthode de surrelaxation ont déjà été analysées ailleurs [23] et ne seront pas présentées dans le cadre de cette thèse.

Nous introduisons ici une méthode hybride où nous éliminerons les vecteurs \mathbf{f}^l de l'équation (2.14) et où nous suggérons une méthode itéra-

tive de résolution des vecteurs e^l . Cette technique nécessite d'abord l'inversion de l'ensemble formé par toutes les matrices K^{kl} . Nous noterons par $(K^{-1})^{kl}$ les matrices de dimension $(L^k + \Lambda^k) \times (L^l + \Lambda^l)$ définies par les expressions:

$$f^k = \sum_l (K^{-1})^{kl} e^l \quad (2.18)$$

Ces matrices sont facilement calculables puisque les matrices B^k sont toutes inversibles. Pour ce faire, développons l'expression suivante:

$$\begin{aligned} & \sum_m \{ T^{km} + B^k \delta^{km} \} \{ T^{ml} + \delta^{ml} (B^l)^{-1} \} = \\ & \sum_m \{ T^{km} T^{ml} + B^k \delta^{km} T^{ml} \\ & \quad + T^{kl} \delta^{ml} (B^l)^{-1} + B^k \delta^{kl} \delta^{ml} (B^l)^{-1} \} = \\ & \sum_m \{ T^{km} T^{ml} + 0 + 0 + B^k \delta^{kl} \delta^{ml} (B^l)^{-1} \} = \\ & \sum_m \{ T^{km} T^{ml} \} + B^k \delta^{kl} (B^l)^{-1} = \delta^{kl} \end{aligned}$$

Cette dernière égalité s'explique de la manière suivante. Puisque les interfaces entre deux cellules n'ont pas de contact avec une troisième cellule et comme $T^{km} = 0$ si $k = m$, nous remarquons que:

$$\sum_m \{ T^{km} T^{ml} \} = 0 \quad \text{si } k \neq l$$

Il reste dans la sommation les matrices de transmission vers les cellules voisines de la cellule k qui multiplient les matrices de transmission dans le sens inverse. Le résultat de cette sommation conduit à une matrice identité pour toutes les interfaces de la cellule k ; les éléments manquants (non-interfaces) de cette matrice identité proviennent de $B^k (B^k)^{-1}$.

Nous déduisons de ce développement l'expression des matrices (2.18) qui prennent la forme:

$$(K^{-1})^{kl} = T^{kl} + \delta^{kl} (B^k)^{-1}$$

La substitution des valeurs de f^k dans les équations (2.14) nous amène à:

$$G^k \left\{ \sum_l (K^{-1})^{kl} e^l \right\} = Q^k e^k + Q^k e^{*k}$$

qui, après quelques développements algébriques, devient:

$$[G^k (B^k)^{-1} - Q^k] e^k + G^k \sum_l T^{kl} e^l = Q^k e^{*k} \quad (2.19)$$

Parce que les interfaces partagent des surfaces identiques, nous définissons des matrices L^{kl} qui ont la propriété suivante:

$$\mathbf{L}^{kl} = \mathbf{G}^k \mathbf{T}^{kl} = \mathbf{T}^{kl} \mathbf{G}^l = (\mathbf{L}^{kl})^T \quad k < l$$

et, il est possible de réécrire l'équation (2.19) sous la forme:

$$\sum_l \mathbf{M}^{kl} \mathbf{e}^l = \sum_{l < k} \mathbf{L}^{kl} \mathbf{e}^l + \mathbf{D}^k \mathbf{e}^k + \sum_{l > k} (\mathbf{L}^{kl})^T \mathbf{e}^l = \mathbf{b}^k \quad (2.20)$$

ou sous la forme plus condensée:

$$\mathbf{M} \mathbf{e} = [\mathbf{L} + \mathbf{D} + \mathbf{L}^T] \mathbf{e} = \mathbf{b} \quad (2.21)$$

où la matrice \mathbf{D} est diagonale par blocs et la matrice \mathbf{L} est triangulaire inférieure et où nous aurons défini les matrices et les vecteurs suivants:

$$\begin{aligned} \mathbf{D}^k &= [\mathbf{G}^k (\mathbf{B}^k)^{-1} - \mathbf{Q}^k] \\ \mathbf{M}^{kl} &= \mathbf{D}^k \delta^{kl} + \mathbf{T}^{kl} \mathbf{G}^l \\ \mathbf{b}^k &= \mathbf{Q}^k \mathbf{e}^{*k} \end{aligned} \quad (2.22)$$

Les matrices \mathbf{B}^k sont d'une forme simple (la plupart du temps diagonales) et donc aisément inversibles. Le système (2.20) ou (2.21) constitue la base de notre approche pour la résolution des assemblages multicellulaires.

Une première solution consiste à inverser (ou factoriser) directement le système (2.21). Toutefois, dans le cas d'un réseau de cellules, la matrice \mathbf{M} est pleine et, même en utilisant une numérotation des inconnues susceptible d'en minimiser le profil, son traitement numérique reste coûteux. Il nous faut donc envisager une méthode itérative rapide pour résoudre ces systèmes linéaires. Nous allons maintenant présenter une méthode de résolution basée sur la procédure des directions alternées, méthode qui a déjà été employée avec succès dans des calculs de diffusion [16].

2.2.1 Procédure des directions alternées

Nous étudions ici un domaine constitué d'un assemblage tridimensionnel de cellules rectangulaires. Le profil de la matrice \mathbf{M} dépend fortement de la numérotation employée pour décrire les inconnues du système (2.21). Nous choisissons dans un premier temps une numérotation arbitraire des inconnues du système à résoudre que nous appelons la **numérotation de l'utilisateur**.

La procédure des directions alternées (**procédure ADI**) utilise la possibilité d'interchanger le rôle des cellules le long de chacun des trois axes

cartésiens. Supposons que nous renumérotions les inconnues en suivant les critères suivants:

1. les cellules sont renumérotées en suivant le maillage d'abord selon l'axe des X, puis selon l'axe des Y et finalement selon l'axe des Z,
2. les inconnues dans les cellules (émissions ou courants) sont numérotées comme suit: on commence par les inconnues ayant des contact, via les interfaces, avec la cellule précédente, puis on numérote les inconnues reliées aux zones et aux autres surfaces, exceptions faites des inconnues ayant des contacts avec la cellule suivante qui sont numérotées en dernier lieu.

La structure de la matrice \mathbf{M} est tridiagonale par blocs, sauf pour les termes de transmission aux interfaces selon les axes Y et Z. Les sous-matrices de la diagonale correspondent aux matrices \mathbf{D}^k mentionnées en (2.22) après permutation des inconnues. Les sous-matrices extra-diagonales regroupent les termes de transmission entre les cellules dans la direction axiale X.

Si nous reprenons la renumérotation des cellules en commençant par l'axe des Y d'abord, nous obtenons une nouvelle structure pour \mathbf{M} dont

les propriétés sont semblables à un changement d'axe près. Finalement, le même processus est aussi réalisé suivant l'axe des Z (voir figure 2.1). Cette procédure nous permet de décomposer la matrice $L + L^T$ selon:

$$L + L^T = P_x X P_x^T + P_y Y P_y^T + P_z Z P_z^T \quad (2.23)$$

où les matrices X , Y et Z contiennent uniquement les éléments extradiagonaux de transmission entre les interfaces dans les directions X, Y et Z respectivement. Les matrices P_x , P_y et P_z sont des matrices de permutation qui permettent de retrouver la numérotation originale de l'utilisateur pour les inconnues des cellules, et qui ont la propriété suivante:

$$P_x P_x^T = P_y P_y^T = P_z P_z^T = I$$

Définissons maintenant les trois matrices symétriques bloc-tridiagonales suivantes:

$$\begin{aligned} \tilde{X} &= X + P_x^T D P_x \\ \tilde{Y} &= Y + P_y^T D P_y \\ \tilde{Z} &= Z + P_z^T D P_z \end{aligned} \quad (2.24)$$

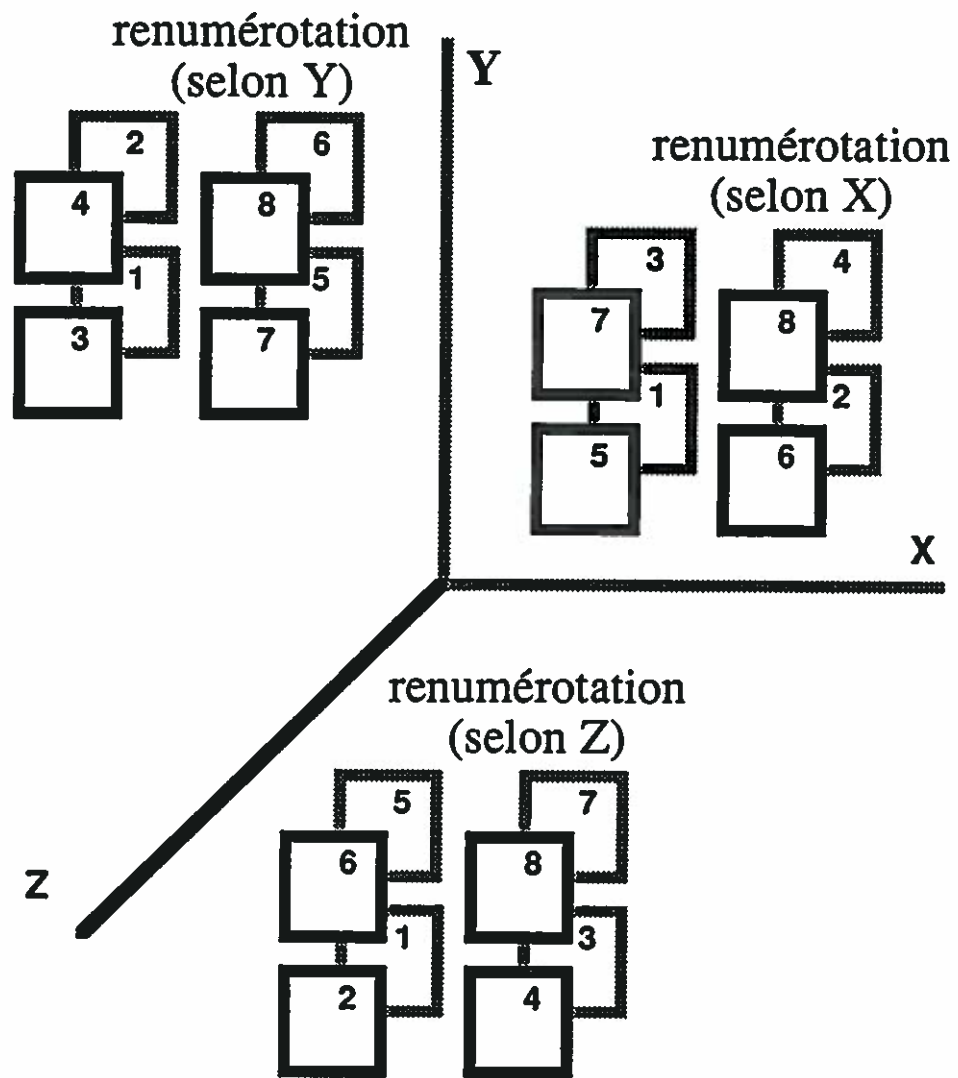


Figure 2.1 Renumérotations ADI des cellules.

où la matrice D a déjà été définie en (2.22). La procédure ADI consiste à résoudre le système (2.22) à l'aide des matrices (2.24) en utilisant une méthode itérative qui comporte trois étapes. Chacune de ces étapes correspond à une solution selon des directions axiales fixes. En supposant un vecteur initial e_0 qui sert de première approximation pour e dans le processus itératif, chaque étape de cette procédure se résume en une nouvelle approximation:

1. trouver $e_{1/3}$ tel que:

$$(D + P_x X P_x^T) e_{1/3} = b - P_y Y P_y^T e_0 - P_z Z P_z^T e_0$$

2. trouver $e_{2/3}$ tel que:

$$(D + P_y Y P_y^T) e_{2/3} = b - P_x X P_x^T e_{1/3} - P_z Z P_z^T e_{1/3}$$

3. trouver e_1 tel que:

$$(D + P_z Z P_z^T) e_1 = b - P_x X P_x^T e_{2/3} - P_y Y P_y^T e_{2/3}$$

Le vecteur e_1 devient alors le vecteur initial de l'itération suivante. Cette procédure peut être formulée aisément en utilisant les matrices \tilde{X} , \tilde{Y} et \tilde{Z} , matrices qui se prêtent à une factorisation de Choleski. L'évaluation pratique de ces approximations successives devient alors:

1. trouver $d_{1/3}$ et $e_{1/3}$ tels que:

$$\tilde{X} d_{1/3} = P_x^T \{ b - P_y Y P_y^T e_0 - P_z Z P_z^T e_0 \}$$

$$e_{1/3} = P_x d_{1/3}$$

2. trouver $\mathbf{d}_{2/3}$ et $\mathbf{e}_{2/3}$ tels que:

$$\tilde{\mathbf{Y}} \mathbf{d}_{2/3} = \mathbf{P}_y^T \{ \mathbf{b} - \mathbf{P}_x \mathbf{X} \mathbf{P}_x^T \mathbf{e}_{1/3} - \mathbf{P}_z \mathbf{Z} \mathbf{P}_z^T \mathbf{e}_{1/3} \}$$

$$\mathbf{e}_{2/3} = \mathbf{P}_y \mathbf{d}_{2/3}$$

3. trouver \mathbf{d}_1 et \mathbf{e}_1 tels que:

$$\tilde{\mathbf{Z}} \mathbf{d}_1 = \mathbf{P}_z^T \{ \mathbf{b} - \mathbf{P}_x \mathbf{X} \mathbf{P}_x^T \mathbf{e}_{2/3} - \mathbf{P}_y \mathbf{Y} \mathbf{P}_y^T \mathbf{e}_{2/3} \}$$

$$\mathbf{e}_1 = \mathbf{P}_z \mathbf{d}_1$$

Comme cela a déjà été mentionné par Hébert [16], cette procédure conduit à une approximation $\tilde{\mathbf{M}}$ pour la matrice globale \mathbf{M} , qui s'écrit:

$$\tilde{\mathbf{M}} = \mathbf{P}_x \tilde{\mathbf{X}} \mathbf{P}_x^T [\mathbf{D}^{-1} \mathbf{P}_y \tilde{\mathbf{Y}} \mathbf{P}_y^T] [\mathbf{D}^{-1} \mathbf{P}_z \tilde{\mathbf{Z}} \mathbf{P}_z^T] \quad (2.25)$$

Le résultat combiné des trois étapes précédentes qui correspond à une itération ADI complète peut être démontré identiquement équivalent à:

$$\mathbf{e}_1 = \tilde{\mathbf{M}}^{-1} \mathbf{b} + \{ \mathbf{I} - \tilde{\mathbf{M}}^{-1} \mathbf{M} \} \mathbf{e}_0$$

où \mathbf{I} est la matrice identité. Dans les cas monocellulaires, le résultat \mathbf{e}_1 correspond d'ores et déjà à la solution exacte du système, et la procédure est équivalente à une résolution directe comme en §2.1.4. Nous verrons dans la prochaine section comment il est possible d'accélérer cette procédure.

2.2.2 Accélération variationnelle

Supposons que le résultat de la $n^{\text{ième}}$ itération du processus itératif soit donnée par \mathbf{e}'_n , alors le résultat de la $(n+1)^{\text{ième}}$ itération ADI est donné par:

$$\mathbf{e}_{n+1} = \tilde{\mathbf{M}}^{-1}\mathbf{b} + \{ \mathbf{I} - \tilde{\mathbf{M}}^{-1}\mathbf{M} \} \mathbf{e}'_n \quad (2.26)$$

La procédure ADI peut être accélérée en introduisant dans le processus itératif un paramètre de relaxation susceptible de corriger le résultat \mathbf{e}_{n+1} donné par l'équation (2.26), de façon à améliorer l'approximation initiale pour l'itération suivante. Notons ce paramètre par ω_{n+1} , le résultat corrigé \mathbf{e}'_{n+1} est alors défini par:

$$\mathbf{e}'_{n+1} = (1 - \omega_{n+1})\mathbf{e}_{n+1} + \omega_{n+1}\mathbf{e}'_n \quad (2.27)$$

Pour calculer ce paramètre, nous présentons une technique de minimisation du reste déjà employée dans des calculs de diffusion [16, 17]. Cette technique nécessite une fonctionnelle qui évalue l'erreur par rapport à la solution exacte. Si la fonctionnelle F (du type Euler-Lagrange) donnée par:

$$F\{\mathbf{e}\} = \mathbf{e}^T \mathbf{M} \mathbf{e} + 2 \mathbf{b}^T \mathbf{e} \quad (2.28)$$

possède un extremum, il correspond à la solution de l'équation (2.21), c'est-

à-dire à la solution de $\mathbf{M} \mathbf{e} = \mathbf{b}$.

La valeur du paramètre ω_{n+1} est choisie de façon à minimiser la fonctionnelle F , c'est-à-dire afin de satisfaire la contrainte:

$$\frac{\partial (F\{\mathbf{e}'_{n+1}\})}{\partial \omega_{n+1}} = 0 \quad (2.29)$$

Après avoir développé l'équation (2.29) à l'aide des définitions (2.27) et (2.28), quelques manipulations algébriques nous conduisent à l'expression suivante pour le paramètre ω_{n+1} :

$$\omega_{n+1} = \frac{\{\mathbf{b} - \mathbf{M} \mathbf{e}'_n\}^T \{\mathbf{e}_{n+1} - \mathbf{e}'_n\}}{\{\mathbf{e}_{n+1} - \mathbf{e}'_n\}^T \mathbf{M} \{\mathbf{e}_{n+1} - \mathbf{e}'_n\}} \quad (2.30)$$

Ce facteur de correction résulte donc d'une évaluation de la forme bilinéaire de (2.28) et du calcul de l'erreur du résultat non corrigé (voir figure 2.2).

Remarquons que ce développement est indépendant de l'expression de $\tilde{\mathbf{M}}$ donnée en (2.25) pour la procédure ADI; il peut donc être appliqué à toute autre méthode itérative faisant intervenir une matrice de ce type. Pour que la fonctionnelle F ait un extremum, il suffit que la matrice \mathbf{M}

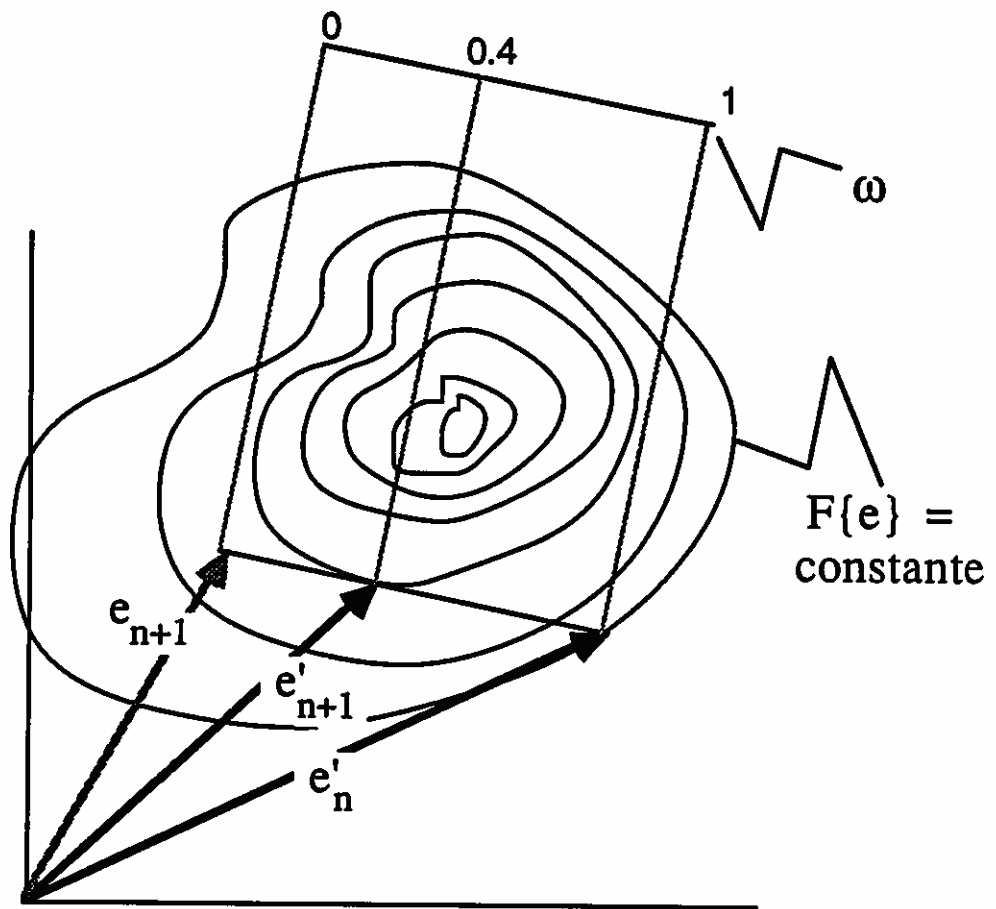


Figure 2.2 Calcul d'un paramètre de correction.

soit symétrique et définie positive (ou définie négative), condition généralement satisfaite par le système (2.21). Notons finalement qu'il n'est pas nécessaire de calculer un paramètre d'accélération à chacune des itérations ADI. Il est possible de choisir de ne pas corriger certaines itérations en imposant $\omega_n = 0$.

CHAPITRE 3

DESCRIPTION DU PROGRAMME 'EXCELL'

Avant de discuter des différentes phases de calcul qui ont été intégrées dans le programme EXCELL, décrivons brièvement le contexte de son développement. Le logiciel EXCELL a été développé pour résoudre l'équation intégrale de transport dans des domaines, les **supercellules**, qui contiennent du combustible, du modérateur et possiblement un ou des mécanismes de contrôle. Ces calculs permettent notamment de produire des sections efficaces homogénéisées sur la supercellule. Comme nous l'avons mentionné à l'introduction, les mécanismes de contrôle de la réactivité dans un réacteur CANDU sont disposés à angle droit par rapport aux canaux de combustible (voir figure 3.1). La géométrie de ces supercellules est tridimensionnelle et généralement composée d'un empilement de sections cartésiennes et cylindriques (voir figure 3.2).

Une supercellule peut être composée à partir de plusieurs **cellules** de différents types (voir figure 3.3). Dans chacune d'elles, un calcul des probabilités de collision est effectué, et les cellules sont couplées à l'aide de la méthode à courants d'interface décrite à la section §1.2. Le principal intérêt de cette approche réside dans le fait qu'il y a souvent moins de proba-

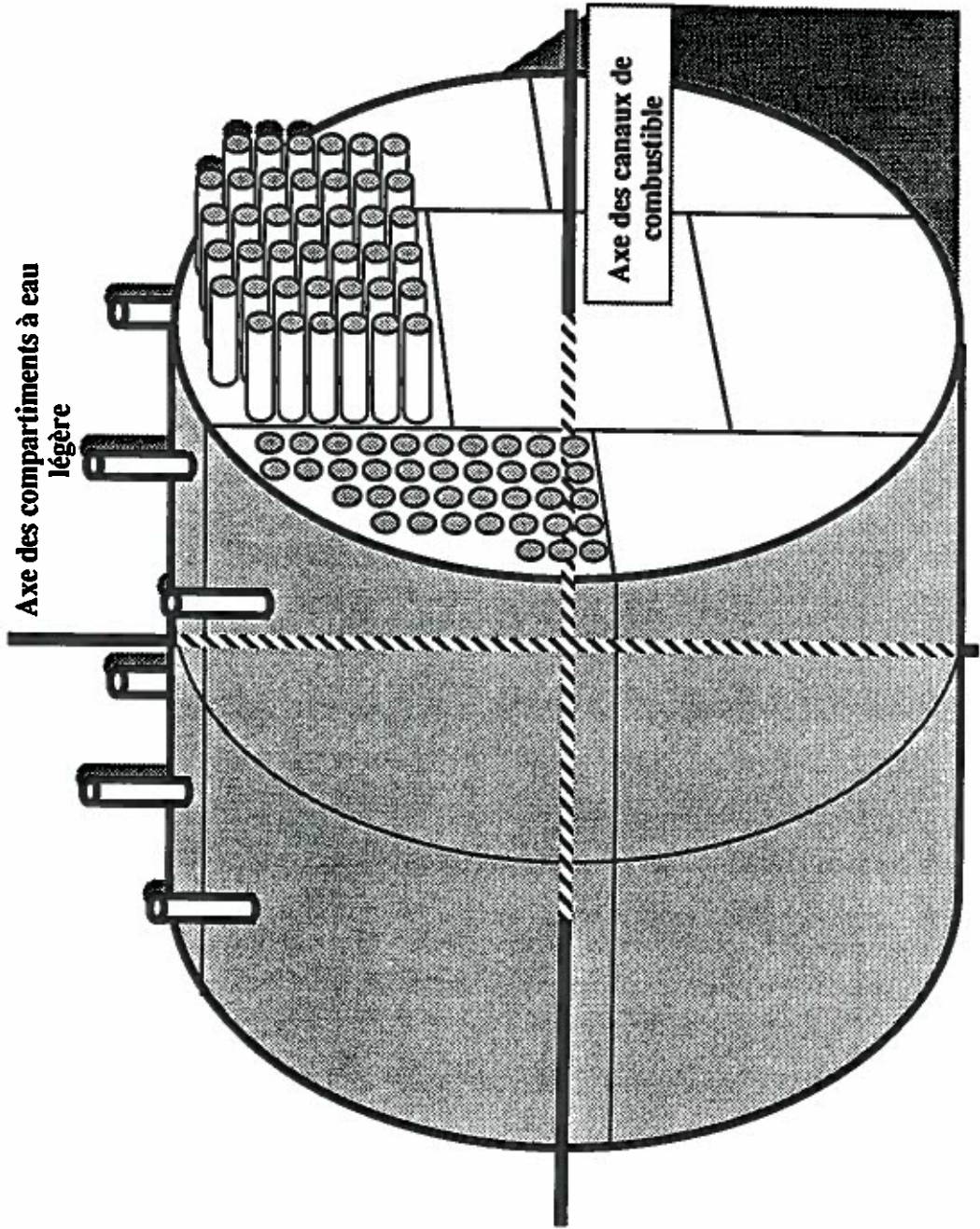


Figure 3.1. Coeur d'un réacteur CANDU

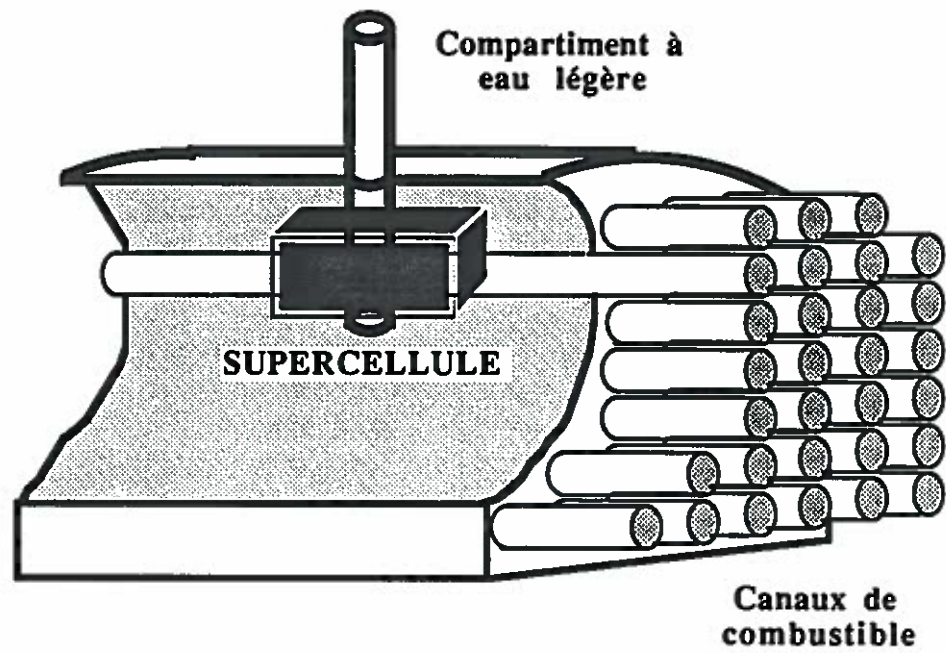


Figure 3.2. Écorché d'une partie du coeur.

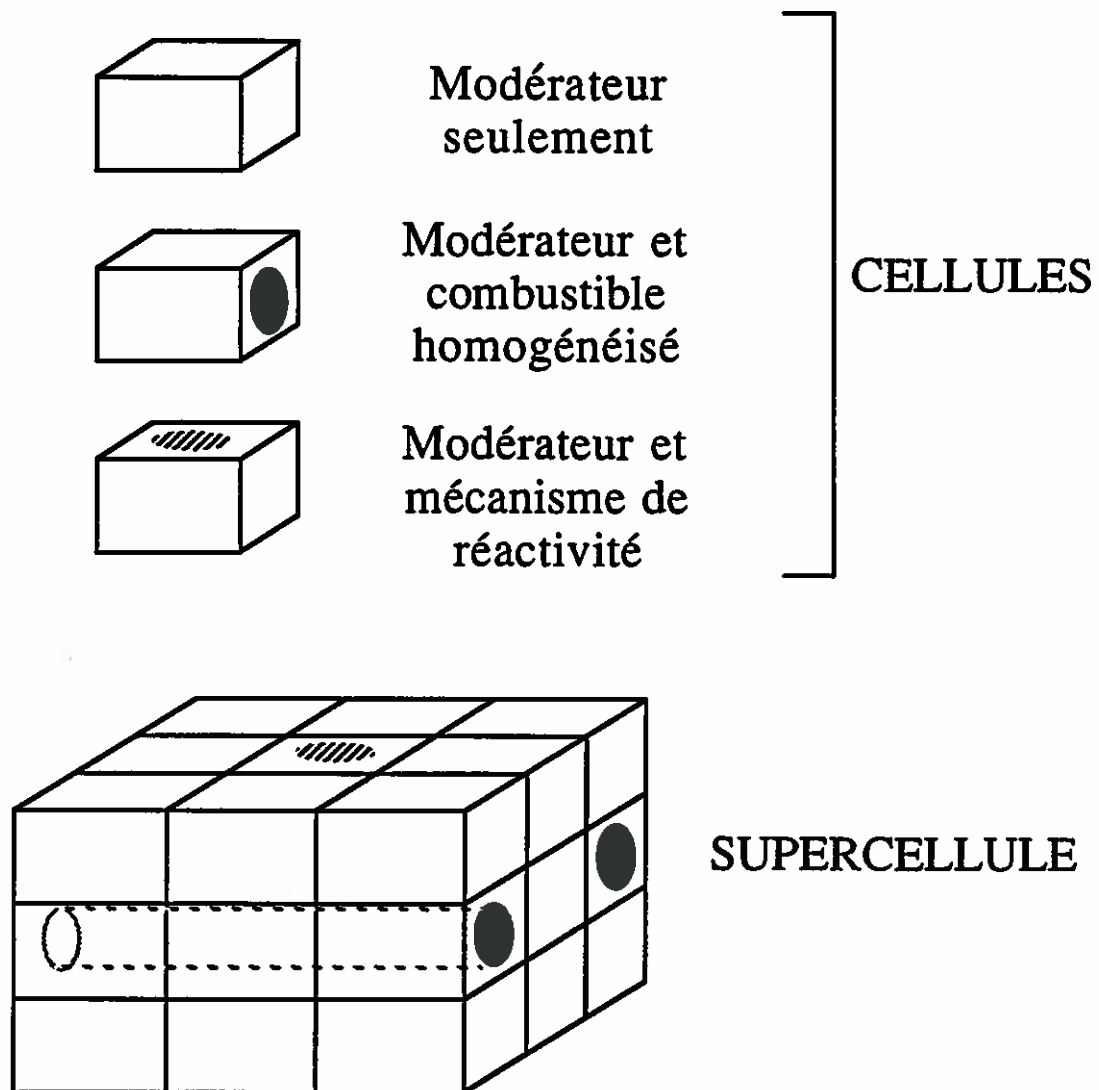


Figure 3.3. Assemblage de cellules.

bilités à calculer pour un ensemble de cellules couplées par la méthode CI que pour la supercellule complète. De plus, les propriétés matérielles et la géométrie d'une cellule donnée peuvent être perturbées sans affecter le traitement des autres cellules de la supercellule.

3.1 Logique de développement

L'utilisation d'EXCELL n'est pas limitée à l'étude des supercellules des réacteurs CANDU, comme le démontrerons les tests numériques du quatrième chapitre. Toutefois, les hypothèses qui ont servi de base lors de son développement nous limitent aux géométries suivantes:

1. les cellules ont la forme d'un parallélépipède droit, nous permettant de choisir une technique de quadrature bien adaptée aux cellules rectangulaires;
2. les supercellules sont constituées d'un assemblage cartésien de ces cellules, ce qui permet d'appliquer la procédure ADI du chapitre précédent.

EXCELL fonctionne en mode semi-automatique, dans le sens où l'utilisateur n'a à spécifier que très peu de paramètres fondamentaux extérieurs à la description géométrique de la supercellule. Plusieurs paramètres

de calcul sont initialisés par défaut à des valeurs recommandées. Il convient toutefois de bien connaître ces paramètres d'intervention.

3.1.1 Paramètres de quadrature des cellules

Pour les cellules homogènes rectangulaires, les réductions analytiques mentionnées à l'Annexe A conduisent à des intégrations unidimensionnelles qu'il est nécessaire d'effectuer numériquement. Ici, nous avons choisi d'utiliser une technique d'intégration standard de Gauss-Legendre à n points pour évaluer les PC.

Pour les cellules hétérogènes, deux paramètres de quadrature doivent être considérés; ces paramètres, qui définissent les lignes d'intégration, représentent respectivement le nombre de directions angulaires et la densité de ces lignes. La quadrature directionnelle doit permettre, dans la mesure du possible, de préserver les propriétés de symétrie pour la cellule au niveau du calcul des probabilités. Une quadrature directionnelle comprenant M directions est ici dénotée par ses poids et ses directions sous la forme:

$$\{ (\omega_j, \Omega_j) \mid j= 1 \text{ à } M \} \quad (3.1)$$

Pour les cellules rectangulaires, il est important qu'aucune des

trois directions cartésiennes ne soit privilégiée par la quadrature directionnelle; dans le cas contraire, des distorsions axiales du flux apparaissent. Des quadratures de ce type ont déjà été développées pour utilisation dans la méthode aux ordonnées discrètes [14]. Nous avons choisi des quadratures directionnelles qui permettent d'associer à chacune des directions angulaires le même poids, ce qui facilite d'autant le traitement numérique des lignes d'intégration. Les principales caractéristiques de ces quadratures symétriques à poids égal, notées \mathcal{E}_M^{Ω} , sont maintenant décrites [15].

De façon générale, les directions et les poids de la quadrature sont choisis de façon à satisfaire certains moments angulaires intégraux appliqués lors du développement angulaire du flux [19]. Ces moments angulaires, dont nous n'écrivons ici que les trois premiers, satisfont les relations:

$$\begin{aligned}
 \int d^2\Omega &= \sum_j w_j = 4\pi \\
 \int d^2\Omega \Omega &= \sum_j w_j \Omega_j = \mathbf{0} \\
 \int d^2\Omega \Omega \otimes \Omega &= \sum_j w_j \Omega_j \otimes \Omega_j = (4\pi/3) \mathbf{I}_{3 \times 3}
 \end{aligned}
 \tag{3.2}$$

Afin de permettre le respect des symétries pour une cellule rectangulaire, les directions choisies pour une quadrature donnée doivent être **axialement invariantes** (ou invariantes par rapport à des rotations d'axes), à savoir que si Ω est une direction choisie et si:

$$\Omega = (\mu, \eta, \zeta)$$

où μ , η et ζ sont respectivement les cosinus directeurs par rapport à chacun des axes X, Y et Z, alors les directions définies par:

$$\begin{aligned} &(\pm\mu, \pm\eta, \pm\zeta), (\pm\eta, \pm\mu, \pm\zeta), (\pm\zeta, \pm\eta, \pm\mu), \\ &(\pm\eta, \pm\zeta, \pm\mu), (\pm\mu, \pm\zeta, \pm\eta), (\pm\zeta, \pm\mu, \pm\eta) \end{aligned}$$

appartiennent aussi à la quadrature.

Compte tenu de la remarque précédente, nous n'utilisons pour décrire les directions de la quadrature que l'octant principal de la sphère unitaire qui est défini par l'ensemble (voir figure 3.4):

$$\{ (\mu, \eta, \zeta) \mid 0 \leq \mu, \eta, \zeta \leq 1 \text{ et } \mu^2 + \eta^2 + \zeta^2 = 1 \}$$

Les autres directions sont déduites par de simples changements de signes agissant sur les cosinus directeurs μ , η et ζ . L'ensemble de quadrature EQ_n se compose de $n(n+2)/8$ directions Ω_j (en ne considérant toujours que l'octant principal) auxquelles sont associés les poids:

$$w_j = 4\pi / n(n+2) \quad j = 1, 2, \dots, n(n+2)/8$$

chacun des poids correspondant à une portion égale de la sphère unitaire. La

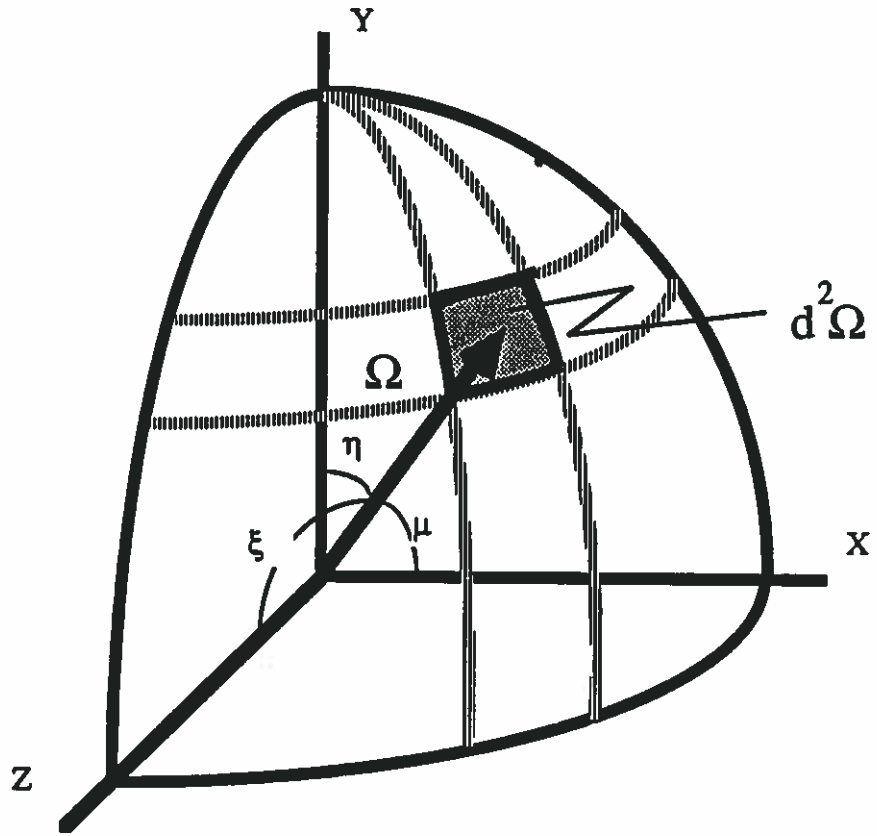


Figure 3.4. Octant principal des quadratures angulaires.

valeur de n est toujours paire et elle marque le degré de la quadrature. Sur cet octant, sont disposées $n/2$ courbes de niveau avec $n/2 - i + 1$ directions pour le niveau i .

De façon plus spécifique, les cosinus directeurs satisfont les équations suivantes:

$$\sum_{\text{oct. } j} \sum \mathbf{w}_j \mu_j^m = \sum_{\text{oct. } j} \sum \mathbf{w}_j \eta_j^m = \sum_{\text{oct. } j} \sum \mathbf{w}_j \zeta_j^m = \begin{cases} 0 & \text{si } m \text{ est impair,} \\ 4\pi / (m+1) & \text{si } m \text{ est pair.} \end{cases} \quad (3.3)$$

Les relations ci-haut sont satisfaites pour les moments d'ordre impair à cause de l'invariance axiale et du fait que les poids sont tous égaux.

Pour illustrer cette technique, nous donnons ici les développements pour $n=2$ et 4. Pour $n=2$, dans l'octant principal, nous retrouvons l'unique direction, à savoir ($\mu = \eta = \zeta$):

$$\Omega = (\sqrt{3}/3, \sqrt{3}/3, \sqrt{3}/3)$$

et l'ensemble des 8 directions choisies satisfait les moments d'ordre 2. Pour $n=4$, nous cherchons les directions qui satisfont les moments d'ordre 4, ce qui impose la condition:

$$2\mu^4 + \zeta^4 = 3/5$$

ce qui joint au fait que:

$$2\mu^2 + \zeta^2 = 1 \quad \text{et} \quad \eta = \mu$$

conduit directement aux valeurs:

$$\mu = 0,3500212... \quad \text{et} \quad \zeta = 0,8688903...$$

qui nous procurent, après permutation, les trois directions de l'octant principal de cette quadrature (voir figure 3.5). Pour des valeurs supérieures de n , il faudra appliquer la relation (3.3) à des ordres supérieurs. Des tables des différentes valeurs des cosinus directeurs pour $n = 6, 8, 10, 12, 16$ ont été compilées à la référence 15.

Une fois le choix des directions effectué, la réduction des probabilités de collision effectuée au paragraphe §1.4.2 nécessite une quadrature selon un plan perpendiculaire à chacune des directions. Il nous est apparu souhaitable de choisir une méthode élémentaire de quadrature. Pour cette quadrature, nous adjoignons deux autres vecteurs (vecteurs directeurs du plan perpendiculaire) à la direction angulaire choisie afin de former une base orthonormée de \mathbb{R}^3 . Cette procédure de complétion de la base est effectuée en fixant à zéro une des composantes axiales d'un des vecteurs directeurs. N'ayant aucune raison de privilégier un axe plutôt qu'un autre, trois bases sont ainsi constituées, une selon chaque axe (voir figure 3.6):

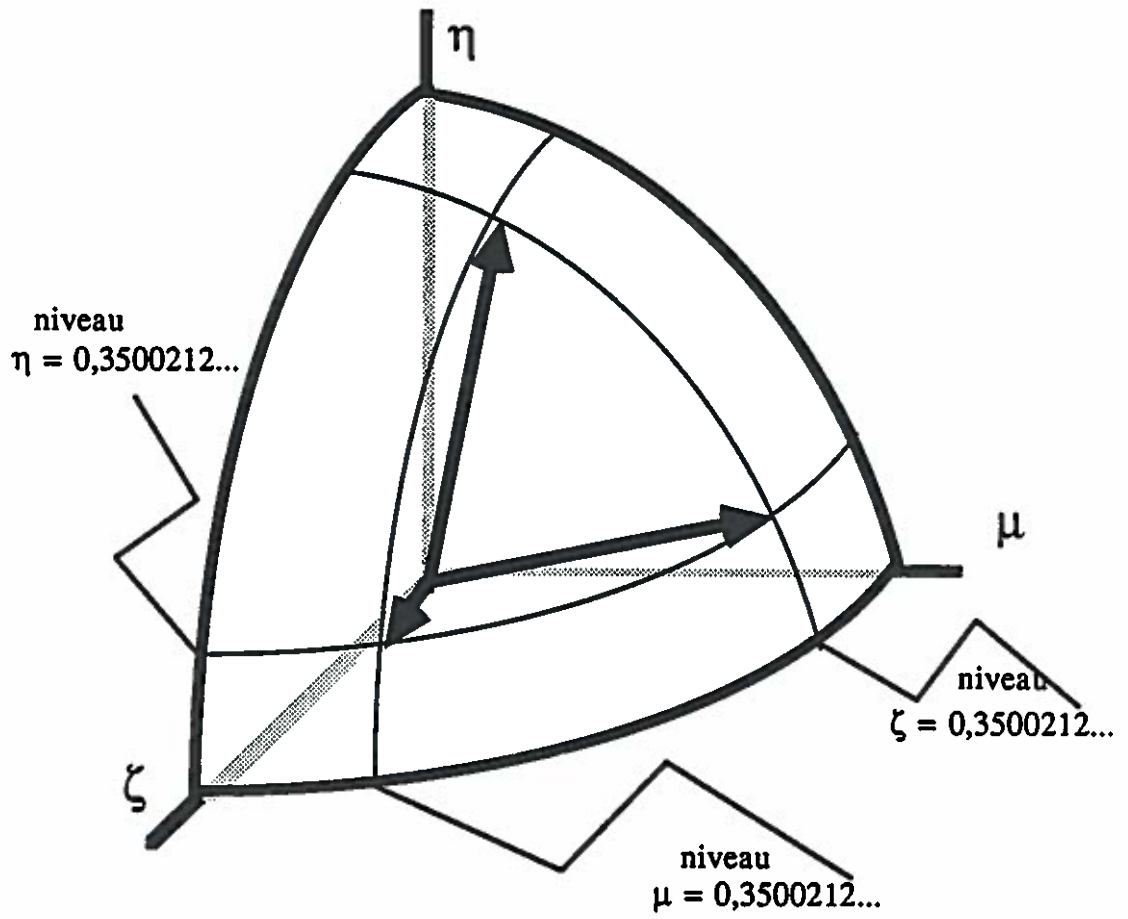


Figure 3.5. Angles de la quadrature EQ_4 .

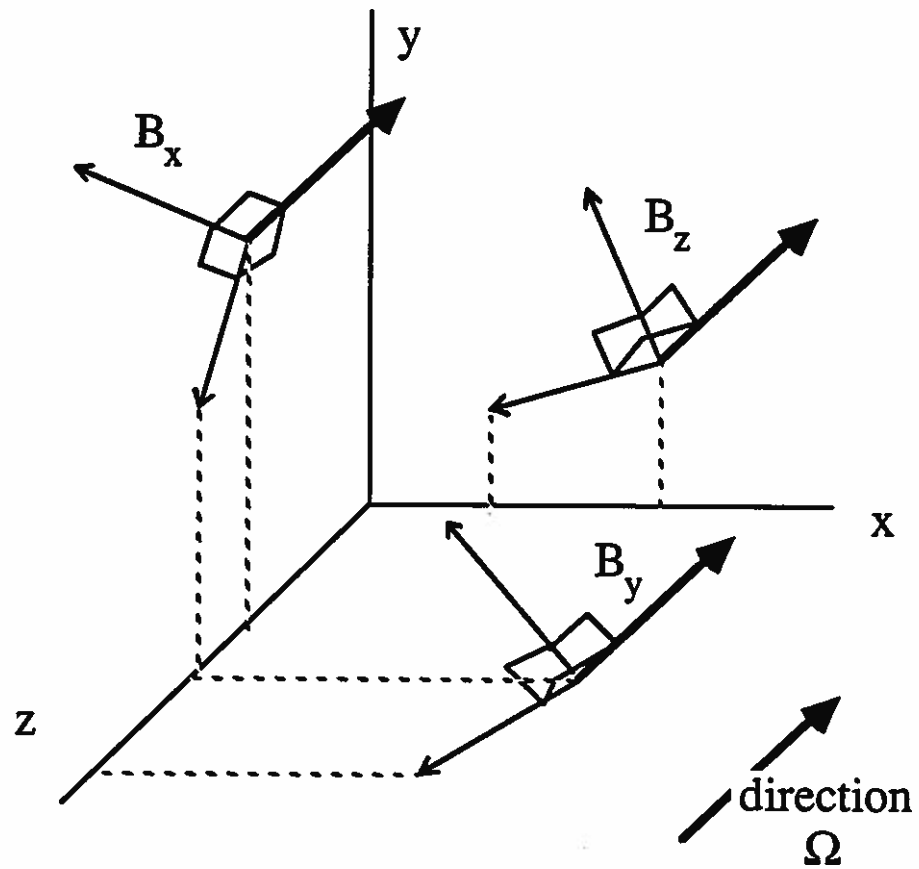


Figure 3.6. Bases orthonormées pour la quadrature planaire.

$$\begin{aligned}
 B_x &= \{ (\mu, \eta, \zeta); (0, \zeta\sqrt{1-\mu^2}, -\eta\sqrt{1-\mu^2}); (-\sqrt{1-\mu^2}, \eta\mu\sqrt{1-\mu^2}, \zeta\mu\sqrt{1-\mu^2}) \} \\
 B_y &= \{ (\mu, \eta, \zeta); (\zeta\sqrt{1-\eta^2}, 0, -\mu\sqrt{1-\eta^2}); (\mu\eta\sqrt{1-\eta^2}, -\sqrt{1-\eta^2}, \zeta\eta\sqrt{1-\eta^2}) \} \\
 B_z &= \{ (\mu, \eta, \zeta); (\eta\sqrt{1-\zeta^2}, -\mu\sqrt{1-\zeta^2}, 0); (\mu\zeta\sqrt{1-\zeta^2}, \eta\zeta\sqrt{1-\zeta^2}, -\sqrt{1-\zeta^2}) \}
 \end{aligned}$$

Chacune des bases B_x , B_y et B_z est utilisée à tour de rôle dans le processus de calcul des lignes d'intégration. Nous avons choisi d'utiliser un maillage carré, dont les côtés sont perpendiculaires aux vecteurs directeurs, pour diviser le plan perpendiculaire. Les trajectoires, ou lignes d'intégration, sont alors les droites joignant le centre des mailles ainsi définies. L'utilisateur ne mentionne qu'un seul paramètre de quadrature: il s'agit de la densité des trajectoires par unité de surface.

3.1.2 Paramètres du traitement itératif

La résolution polycellulaire expliquée à la section §2.2 se fait normalement entièrement en mode automatique, en utilisant des valeurs de défaut des paramètres du traitement itératif; il peut toutefois arriver que, pour certaines applications, un calcul plus précis (ou moins précis) s'avère essentiel. C'est le cas notamment lorsque les sources de fission font elles-mêmes l'objet d'un calcul itératif. Il est alors possible de redéfinir certains paramètres du traitement itératif, tel le critère de convergence et le nombre

maximum d'itérations ADI.

Le critère de convergence ε utilisé pour stopper la procédure ADI a été choisi comme fonction de la différence entre deux itérations complètes:

$$\frac{\max | \mathbf{e}_k - \mathbf{e}_{k-1} |}{\max | \mathbf{e}_k |} \leq \varepsilon \quad (3.4)$$

La valeur de défaut de ce critère a été fixée à 10^{-4} . Nous avons aussi décidé d'itérer selon des cycles de n itérations comprenant chacun m itérations libres, suivies de $n-m$ itérations accélérées. Les itérations libres permettent de restabiliser la solution après quelques itérations accélérées. Ainsi, un cycle complet sera décrit par:

$$\mathbf{e}'_k = \begin{cases} \mathbf{e}_k & \text{si } 0 < \text{mod}(k-1, n) \leq m \\ (1 - \omega_k) \mathbf{e}'_{k-1} + \omega_k \mathbf{e}_k & \text{si } m < \text{mod}(k-1, n) \leq n \end{cases} \quad (3.5)$$

où $\text{mod}(k-1, n)$ désigne le reste de la division entière de $k-1$ par n (fonction modulo). Les valeurs de défaut de ces deux paramètres sont fixées à $(3, 3)$; c'est-à-dire des cycles de 6 itérations dont les 3 dernières sont accélérées. Nous avons finalement imposé un maximum au nombre d'itérations ADI complètes qui seront effectuées dans un même calcul. La valeur de défaut de ce paramètre a été fixée à 25 itérations.

3.2 Structure du programme

EXCELL regroupe six modules interdépendants, tous écrits en FORTRAN-77. Le transfert de l'information entre les différents modules s'effectue de deux manières: à l'aide d'une base hiérarchique de données (fichier XSM [24]) dont la structure est véhiculée d'un module à l'autre, et par le biais de zones communes de mémoires identifiées par des pointeurs (ou adresses) regroupés dans des blocs communs ("common block", en anglais).

Chacun de ces modules occupe une fonction spécifique au niveau d'une chaîne de calculs:

1. un module géométrique qui a pour fonction de définir et de traiter la géométrie de l'ensemble des cellules,
2. un module de libération de mémoire, qui permet de libérer les zones de mémoire allouées dynamiquement,
3. un module d'assemblage des cellules, qui a deux fonctions: le calcul des probabilités de chacune des cellules d'un assemblage et le regroupement des cellules pour former les matrices itératives du système,
4. un module de calcul complet des PC, qui est employé surtout pour évaluer les PC complètes dans des domaines à une seule cel-

lule,

5. un module de résolution itérative qui procure les valeurs de flux correspondant à une source donnée,
6. un module non itératif d'évaluation de la source qui permet un calcul du reste à partir d'une valeur donnée du flux.

Les deux premiers modules ne sont utilisés qu'une seule fois pour un calcul de supercellule; les quatre autres peuvent toutefois être sollicités à plusieurs reprises lors d'un calcul à plusieurs groupes d'énergie. Avant d'examiner le fonctionnement de chacun de ces modules, décrivons la structure d'un assemblage de cellules.

La structure d'une supercellule peut faire apparaître plusieurs cellules de même géométrie. Il est donc commode de regrouper les cellules par géométrie pour ne pas répéter inutilement le traitement géométrique, une **géométrie** étant définie comme un domaine à l'intérieur duquel des mailles cartésiennes et des mailles cylindriques sont dressées. Chaque géométrie doit ensuite être utilisée pour définir des types de cellules; un **type** de cellule étant formé d'une géométrie et d'un identificateur des matériaux pour chacune des zones de cette géométrie:

type = (**géométrie**, **matériaux**)

Chaque type de cellule peut être utilisé pour définir une cellule particulière de l'assemblage de la supercellule:

cellule = (type, position dans l'assemblage)

Cette manière de construire la structure permet de hiérarchiser les niveaux de calculs nécessaires à la résolution de l'assemblage des cellules.

3.2.1 Module géométrique

Ce module lit la structure (géométries, types et cellules) de la supercellule. Lors de la définition des géométries, les mailles cartésiennes sont données en découpant les trois axes, et les mailles cylindriques sont spécifiées en donnant l'orientation axiale et les coordonnées du centre du cylindre et séparées par les valeurs des différents rayons du cylindre. Ces mailles imposent différentes zones à l'intérieur des cellules, mais aussi des surfaces externes. Ces zones (ou surfaces) sont numérotées au gré de l'utilisateur, mais en ordre croissant de 1 au nombre total de zones (ou surfaces). L'identification des zones et des surfaces, à l'intérieur du maillage, est effectuée à l'aide d'un **vecteur de positionnement** dont la longueur dépend du nombre de cylindres présents dans la cellule. S'il y a N_{CYL} cylindres, ce vecteur ∇_i de longueur $3 + N_{CYL}$ identifie la zone (ou la surface) de numéro i sous la forme:

zone d'indice $i \leftrightarrow \nabla_i = (I_x, I_y, I_z, I'_c[1], \dots, I'_c[NCYL])$

où les indices I_x , I_y et I_z réfèrent à la position de la zone (ou de la surface) selon le maillage axial en abscisse, en ordonnée et en cote respectivement, et où les indices I'_c réfèrent à la position de la zone (ou de la surface) selon le maillage des rayons des différents cylindres.

Le module géométrique génère les lignes d'intégration qui servent à l'évaluation des probabilités de collision. Comme il a été mentionné à la section §3.1, ce calcul est effectué en se servant de certains paramètres de quadrature:

1. Pour les cellules homogènes, il faut spécifier le nombre de points de base (et de poids) de l'intégration de Gauss-Legendre; nous n'avons retenu que quelques valeurs paires de ce paramètre d'intégration (noté N_{GAUSS}) soit:

$$N_{\text{GAUSS}} \in \{ 2, 4, 8, 16, 32, 64 \}.$$

2. Pour les cellules hétérogènes, l'ensemble $E(\varphi)_R$ sert à la quadrature angulaire; le module géométrique permet l'utilisation des valeurs suivantes de ce paramètre angulaire, noté N_{ANGLE} :

$$N_{\text{ANGLE}} \in \{ 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16 \}$$

Le nombre de directions générées par ces quadratures est de 4, 12, 24, 40, 60, 72, 112, 144 respectivement, ce qui est amplement suffisant pour la majorité des applications. Nous avons choisi, pour décrire l'ensemble des lignes d'intégration selon une direction fixée, de définir la densité des lignes d'intégration (généralement donnée en cm^{-2}) qui sera notée DENSITE:

$$\text{DENSITE} \in]0, \infty[.$$

Ces paramètres permettent de construire les fichiers séquentiels de lignes d'intégration qui seront attachés à chaque géométrie. Dans le cas des cellules homogènes, ces fichiers contiennent une description de la géométrie de la cellule, ainsi que la numérotation des zones et des surfaces, en vue d'un calcul futur des probabilités. Dans le cas de cellules hétérogènes, ces fichiers contiennent la description des trajectoires de ces lignes. Illustrons plus précisément cette description.

Le choix d'une direction angulaire $\Omega = (\omega_x, \omega_y, \omega_z)$ donnée par la quadrature angulaire et le déplacement selon le maillage d'un plan perpendiculaire à cette direction définit une droite qui peut traverser le domaine géométrique qui nous intéresse. Rappelons que le calcul des mailles est fait successivement à partir de trois bases distinctes (voir paragraphe §3.1.1)

afin de préserver les symétries axiales. Nous recherchons d'abord les deux points d'intersection $P_0 = (X_0, Y_0, Z_0)$ et $P_1 = (X_1, Y_1, Z_1)$ de cette droite avec les surfaces extérieures du domaine; si ces deux points sont identifiables à deux surfaces externes distinctes, alors la droite devient une ligne d'intégration, sinon elle est rejetée. Nous recherchons ensuite l'ensemble des segments de cette ligne, qui peut traverser plusieurs zones distinctes, dont l'union est définie par (voir figure 3.7):

$$\{ (X_0 + k \omega_x, Y_0 + k \omega_y, Z_0 + k \omega_z) \mid 0 \leq k \leq |P_1 P_0| \}$$

Un procédé inductif a été développé pour faciliter le calcul de ces segments. Au départ de ce procédé, une valeur initiale du vecteur de positionnement est déterminée (celle de la surface contenant P_0 par exemple); cette valeur sera appelée la position courante. Selon chacun des axes cartésiens et cylindriques, l'intersection de la ligne avec la maille suivant celle de la position courante est ensuite calculée. Comme exemple de ce calcul, supposons que la valeur $Z = Z_c$ corresponde à une valeur du découpage de l'axe des cotes, on recherche alors la valeur K_1 telle que:

$$Z_0 + K_1 \omega_z = Z_c$$

Supposons aussi un cylindre d'orientation axiale Z et de centre (X_c, Y_c) , l'intersection (si elle existe) de la ligne avec le rayon R de ce cylindre corres-

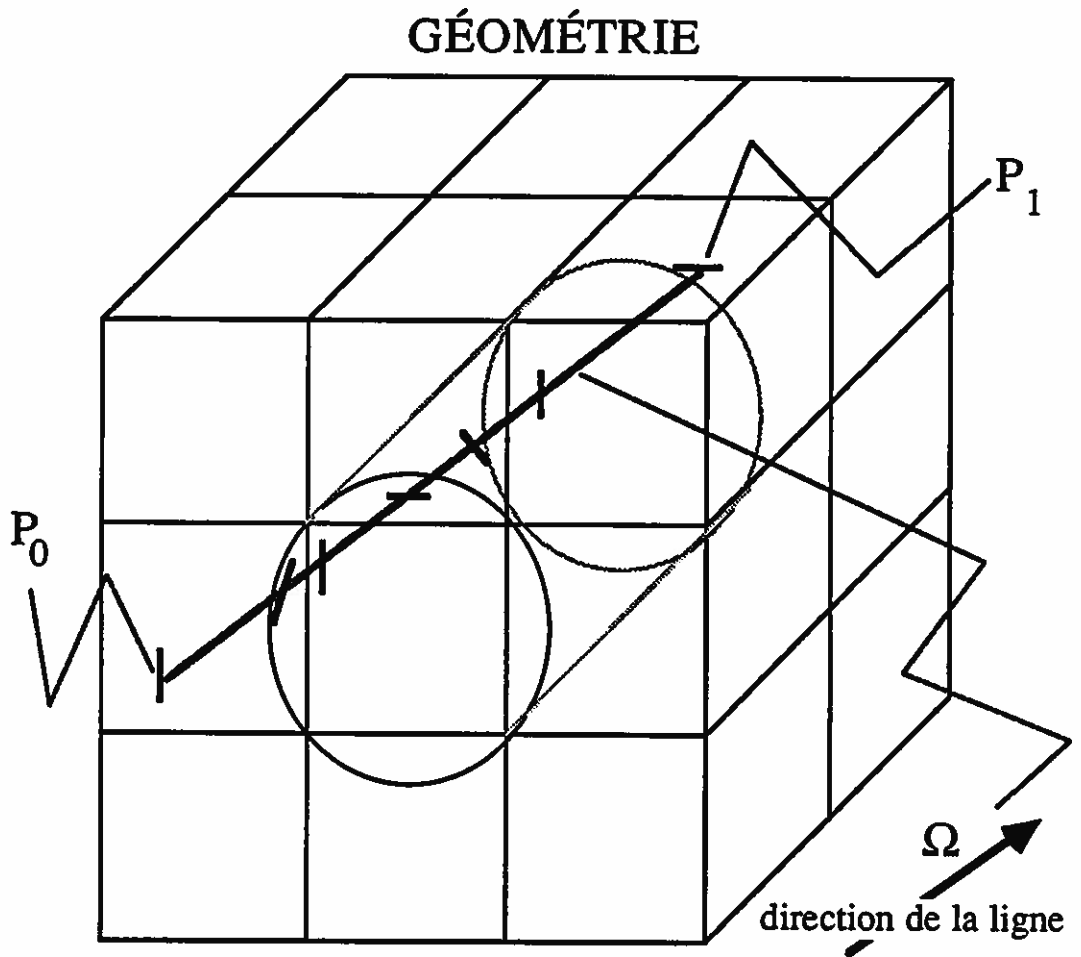


Figure 3.7. Segments d'une ligne d'intégration.

pond à une valeur K_2 qui est solution du système:

$$(X - X_c)^2 + (Y - Y_c)^2 = R^2$$

$$X = X_0 + K_2 \omega_x$$

$$Y = Y_0 + K_2 \omega_y$$

Pour savoir si la ligne traverse l'axe des cotes avant ou après avoir traversé une surface interne du cylindre, il suffit de considérer laquelle des valeurs K_1 ou K_2 est la plus grande. Ce procédé permet de déterminer tous les segments en identifiant bien chacune des mailles présentes et en évitant d'avoir des segments de longueur nulle.

Une fois le traitement d'une ligne d'intégration terminé, un enregistrement correspondant à cette ligne est créé sur le fichier séquentiel.

Chaque enregistrement comprend:

1. le nombre N de segments de la ligne,
2. le numéro de la surface de départ de la ligne,
3. le numéro de la surface d'arrivée de la ligne,
4. la longueur de chacun des N segments ordonnés en partant de la surface de départ jusqu'à la surface d'arrivée,
5. le numéro de la zone correspondant à chacun des N segments.

En plus de ces informations, le début du fichier séquentiel con-

tient quelques informations géométriques générales, telles le nombre de volumes et de surfaces distinctes.

La structure géométrique de la supercellule est transmise aux autres modules d'EXCELL par l'intermédiaire de la base de donnée mentionnée précédemment et les adresses sont transportées par des blocs communs.

3.2.2 Module de libération de mémoire

Ce module permet de libérer la mémoire allouée dynamiquement lors de l'appel au module géométrique précédent et utilisée par les différents modules d'EXCELL. Les parties de la mémoire qu'un calcul avait nécessitées peuvent ensuite être réallouées pour un autre calcul de transport, et ce à l'intérieur de la même tâche. L'utilisateur commande cette option de libération et peut alors interconnecter les différentes séquences d'une tâche en faisant intervenir plusieurs logiciels ou plusieurs tâches d'un même logiciel et ce, sans utiliser une quantité excessive de mémoire.

3.2.3 Module d'assemblage des cellules

Ce module procède dans un premier temps à l'intégration des PC en utilisant les développements présentés à la section §1.4. Cette intégration est effectuée géométrie par géométrie. Les réductions analytiques et le fractionnement décrit au paragraphe §1.4.1 sont appliqués aux cellules ho-

mogènes, une fois récupérées les informations géométriques de la cellule.

Les cellules hétérogènes sont traitées via le fichier séquentiel de lignes d'intégration construit dans le module géométrique. Chaque ligne de ce fichier sert à l'évaluation simultanée des probabilités de collision, de fuite et de transmission associées à tous les types de cellule pour géométrie donnée. Cette évaluation nécessite le calcul des parcours optiques pour les différentes zones d'une ligne d'intégration, de la manière décrite au paragraphe §1.4.2. Nous obtenons ainsi une matrice de réponse associée à chaque type; cette matrice décrit le comportement des neutrons pour toutes les cellules de ce type. Les sections efficaces des matériaux intervenant au niveau de la définition de chaque type sont transmises au module d'assemblage par le programme appelant. Il est donc nécessaire de faire plusieurs appels à ce module lors d'une application polycinétique.

Grâce aux lois de réciprocité, ces matrices sont stockées sous forme symétrique en ne conservant que les éléments appartenant à la partie triangulaire inférieure (voir figure 3.8). La seconde partie du travail de ce module consiste à assembler toutes les cellules formant la supercellule. Cet assemblage est réalisé de façon à former les matrices \tilde{X} , \tilde{Y} et \tilde{Z} , décrites aux équations (2.24). Ces matrices, qui interviennent lors de la résolution multi-

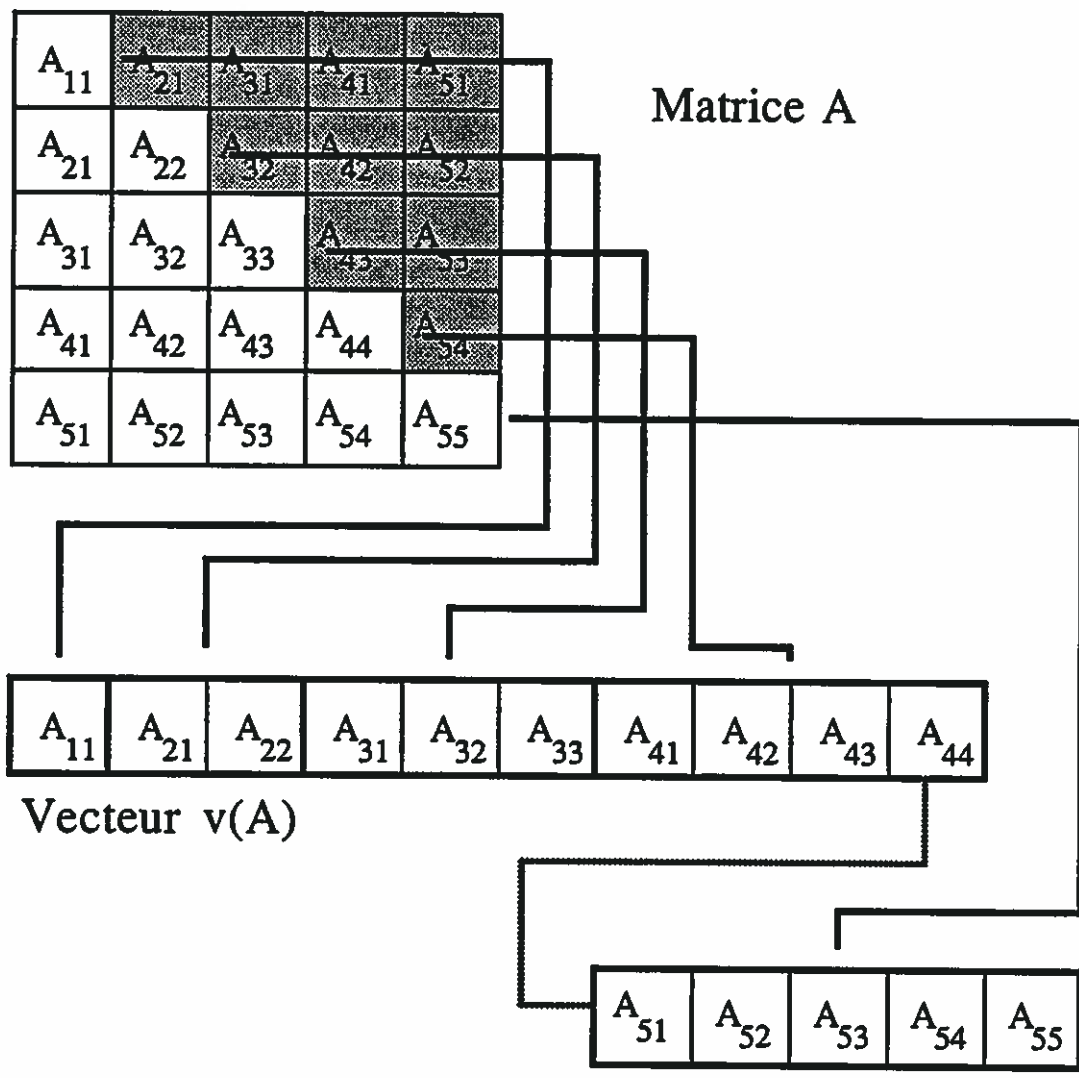


Figure 3.8. Stockage vectoriel utilisé pour les matrices symétriques.

cellulaire, sont ensuite factorisées à l'aide d'une décomposition de Choleski; cette factorisation conduit aux décompositions suivantes:

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{X}} &= \mathbf{L}_x \mathbf{D}_x \mathbf{L}_x^T \\ \tilde{\mathbf{Y}} &= \mathbf{L}_y \mathbf{D}_y \mathbf{L}_y^T \\ \tilde{\mathbf{Z}} &= \mathbf{L}_z \mathbf{D}_z \mathbf{L}_z^T\end{aligned}\tag{3.6}$$

où les matrices \mathbf{L}_x , \mathbf{L}_y , \mathbf{L}_z représentent des matrices triangulaires inférieures à diagonale unité et les matrices \mathbf{D}_x , \mathbf{D}_y , \mathbf{D}_z des matrices diagonales. Il est possible d'effectuer ces décompositions sur place, et de sauver le résultat dans les matrices originales. Les systèmes d'équations linéaires faisant intervenir ces matrices sont ensuite plus facilement résolus, en utilisant de simples substitutions avant et arrière.

3.2.4 Module de calcul complet des PC

Ce module est utilisé pour les supercellules constituées d'une cellule unique. Dans un premier temps, le calcul des probabilités de collision, de fuite et de transmission est effectué comme au module précédent. Il est ensuite possible d'utiliser les conditions aux frontières des surfaces externes pour réduire l'ordre du système des PC. Nous effectuons l'élimination algébrique des courants tel que décrit à l'équation (2.11), ce qui nous conduit à un système complet de PC.

La matrice du système complet PC associé à une cellule est stockée sous forme symétrique, comme dans le cas du module d'assemblage, et peut être utilisée pour différents calculs (calcul de Laplacien-matière, par exemple).

3.2.5 Module de résolution

Ce module résout l'équation de transport dans un assemblage polycellulaire par la procédure ADI décrite au chapitre précédent. Il s'agit donc de trouver les valeurs des émissions de neutrons des différentes zones présentes dans l'assemblage, et les courants entrants par les surfaces externes et les interfaces. Le programme appelant fournit les sources fixes de neutrons présentes dans l'assemblage. Commence alors la procédure itérative monocinétique de la section §2.2:

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_{n+1} &= \tilde{\mathbf{M}}^{-1} \mathbf{b} + \{ \mathbf{I} - \tilde{\mathbf{M}}^{-1} \mathbf{M} \} \mathbf{e}'_n \quad ; n=1, N \\ \mathbf{f}_N &= \mathbf{B}^{-1} \mathbf{e}_N \end{aligned}$$

Le vecteur \mathbf{f} contient alors les valeurs du flux et des courants sortants du système. Les valeurs de défaut ont déjà été mentionnées pour le nombre maximum d'itérations ($N \leq N_{\max}$), le critère de convergence et le nombre d'itérations par cycle. Ces valeurs peuvent toutefois être changées

en cours d'exécution pour satisfaire les besoins de l'utilisateur. Toutes les itérations accélérées nécessitent le calcul du paramètre de relaxation (2.29).

Il est à noter que le test de convergence, calculé à l'aide de l'expression (3.4), est réalisé avant le calcul du paramètre de relaxation, ce qui permet d'économiser parfois du temps de calcul.

3.2.6 Module d'évaluation de la source

Ce module sert à réévaluer les sources de neutrons dans la supercellule. L'utilisateur fournit alors une valeur du flux dans chaque zone et du courant sortant par chaque surface, et le module permet de calculer le bilan monocinétique correspondant aux équations (2.21) et (2.22):

$$\mathbf{b} = \mathbf{M}(\mathbf{B} \mathbf{f})$$

$$\mathbf{e}^{*k} = (\mathbf{Q}^k)^{-1} \mathbf{b}^k$$

afin de recomposer les sources présentes \mathbf{e}^{*k} dans chaque cellule de l'assemblage. Ce module est utilisé dans les applications polycinétiques où des itérations externes à la procédure ADI doivent être accélérées ou pour forcer le respect de la relation de conservation des neutrons par rééquilibrage externe des flux et des émissions.

3.3 Instructions d'utilisation

Cette section regroupe quelques instructions pour l'utilisation d'EXCELL dans des calculs de transport. Dans un premier paragraphe, nous décrivons sommairement le schéma d'un calcul de transport à plusieurs groupes d'énergie. Nous expliquons au second paragraphe les difficultés qu'il est possible de rencontrer dans certaines applications et qui proviennent le plus souvent d'erreurs de troncature générées lors d'un calcul en simple précision.

EXCELL, comme code de supercellule, peut servir à corriger les paramètres résultant d'un calcul de cellule élémentaire pour tenir compte des mécanismes de contrôle de la réactivité. Dans la chaîne globale du calcul neutronique (voir figure 3.9), les sections efficaces moyennées et les coefficients de diffusion des cellules élémentaires sont affectées par la présence d'une barre d'arrêt ou d'un compartiment de réglage par exemple. Les calculs effectués par les codes de supercellules sont donc une composante essentielle du calcul de cellule.

3.3.1 Schéma de calcul polycinétique

Décrivons ici le schéma de fonctionnement d'EXCELL dans une application polycinétique. Supposons un découpage en N groupes d'énergie. Voici l'ordre d'appel des différents modules:

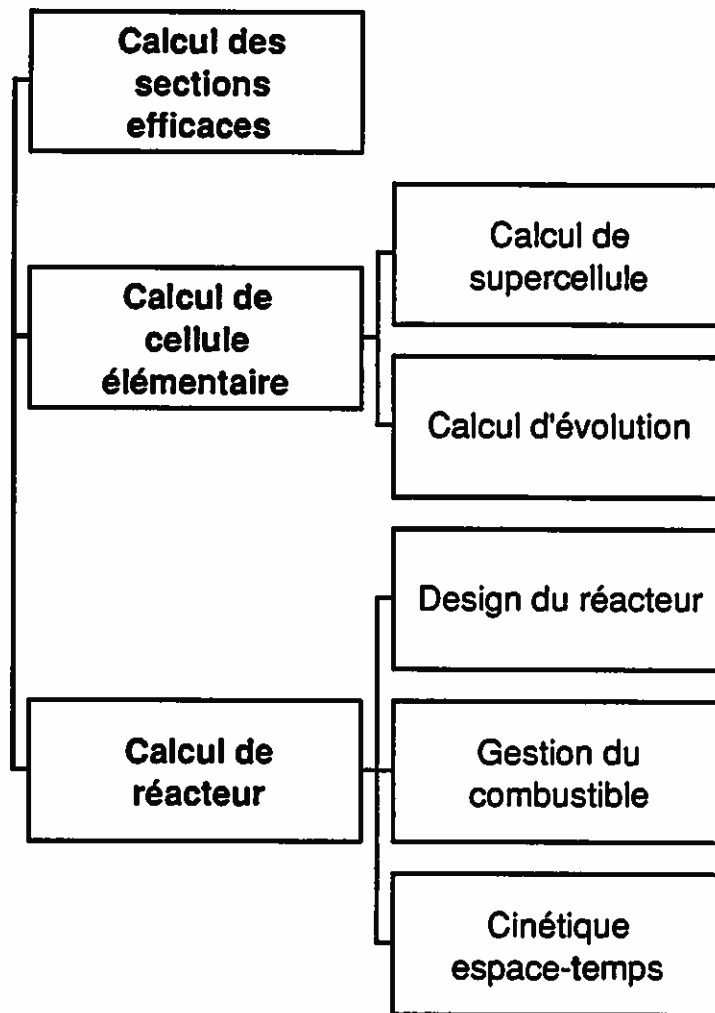


Figure 3.9. Schéma global du calcul neutronique.

1. le module géométrique est appelé une fois,
2. le module d'assemblage de cellules (ou le module de calcul complet des PC dans les cas monocellulaires) est appelé N fois en changeant les sections efficaces des différents matériaux de la supercellule,
3. le module de résolution monocinétique (aussi, possiblement, le module d'évaluation de la source) est appelé autant de fois que nécessaire pour la convergence polycinétique de l'application,
4. si un autre calcul utilisant une nouvelle géométrie est nécessaire, le module de libération de mémoire est appelé, puis retour à 1.

Un exemple de ce schéma simplifié est présenté à la figure 3.10. Pour employer efficacement ce schéma, les sections efficaces sont stockées d'abord par groupe d'énergie, ensuite par matériel en utilisant le format GOXS [25], qui permet de récupérer les sections efficaces venant d'autres codes de transport.

3.3.2 Difficultés d'opération

Ce paragraphe résume les principales difficultés rencontrées lors du développement du code EXCELL. Ces difficultés sont essentiellement

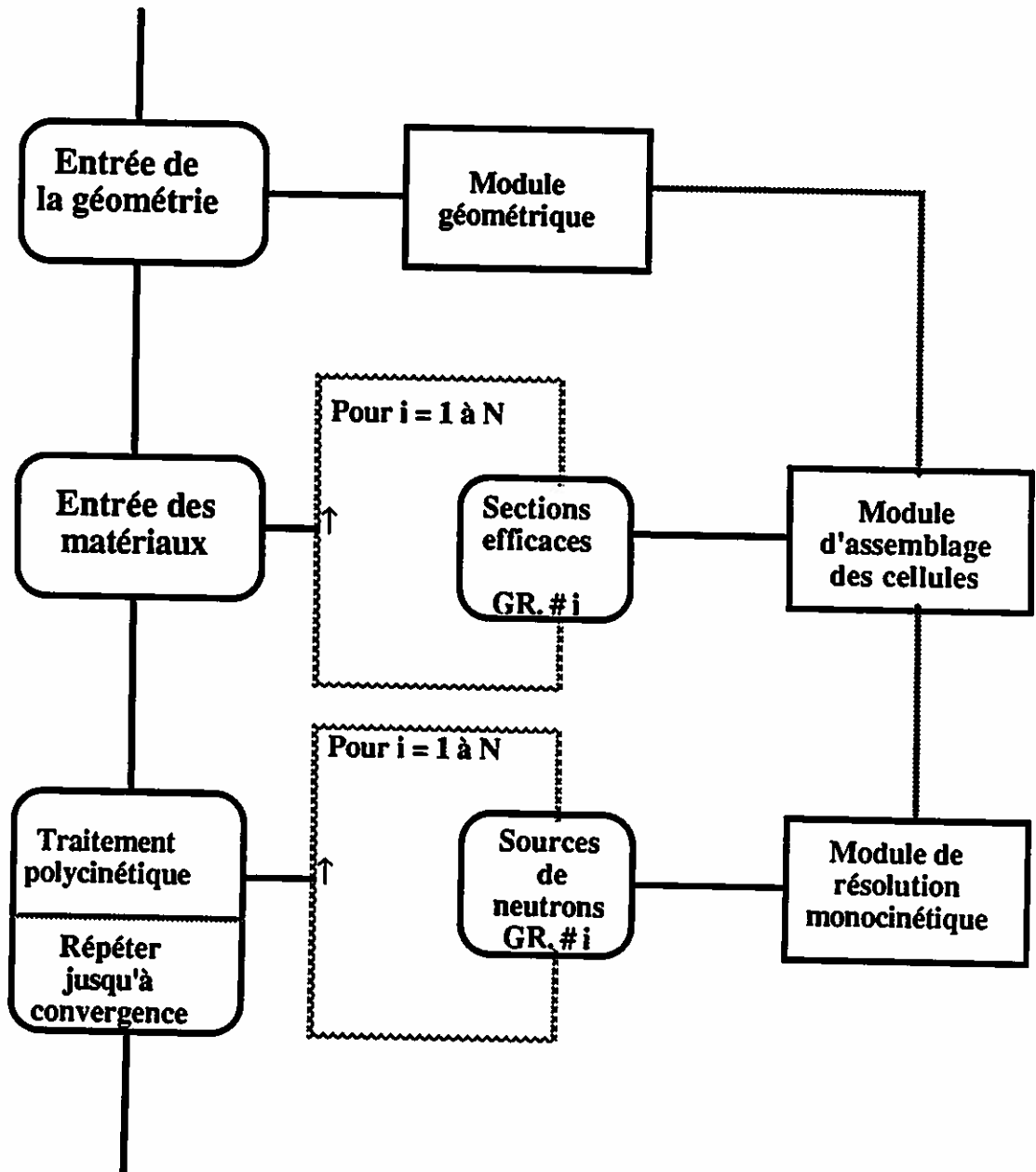


Figure 3.10. Schéma simplifié du traitement polycinétique.

d'ordre numérique, et elles proviennent notamment d'erreurs de troncature normalement rencontrées dans tout logiciel scientifique.

La première source de difficulté provient des quadratures numériques appliquées aux cellules hétérogènes (voir paragraphe §1.4.2). Comment choisir une quadrature adéquate pour le problème considéré ? Les volumes et les surfaces calculés numériquement sont différents des volumes et des surfaces exacts. En théorie, plus le nombre de lignes d'intégration est grand, plus les valeurs calculées se rapprochent des valeurs réelles. Dans la pratique toutefois, un trop grand nombre de lignes d'intégration ralentit considérablement le calcul des probabilités de collision, et peut même détériorer certains résultats à cause de l'accumulation des erreurs de troncature inhérente à la représentation des nombres réels sur ordinateur. Nous avons donc décidé d'implanter une normalisation des lignes d'intégration qui assure la conservation exacte des volumes dans toutes les cellules. Ainsi, à l'aide de l'information provenant du fichier séquentiel des lignes d'intégration généré par le module géométrique, les volumes V_i des différentes zones associées à une géométrie donnée sont évalués en se servant de la relation:

$$V_i = \frac{1}{4\pi} \int d^2\Omega \int d^2s \chi(V_i) \int dt$$

qui procure les estimés:

$$V'_i = \frac{1}{4\pi} \sum \Delta^2 \Omega [\sum \Delta^2 s [\sum \Delta t'(V_i)]]$$

où $\Delta t'(V_i)$ représente un segment de ligne traversant la zone i . Ensuite, un nouveau fichier séquentiel est formé en corrigeant la longueur de chaque segment pour assurer la conservation des volumes par l'équation:

$$\Delta t(V_i) = \{ V_i / V'_i \} \Delta t'(V_i)$$

où $\Delta t(V_i)$ représente un segment normalisé de ligne traversant la zone i . Cette méthode permet d'utiliser des paramètres de quadrature d'ordre plus faible.

Les surfaces ne sont pas correctement évaluées. L'identification même des surfaces de départ et d'arrivée des lignes d'intégration peut poser problème. Qu'arrive-t-il lorsqu'une ligne d'intégration intersecte la jonction de plusieurs surfaces ? Ces effets de coin ont été analysés: des différents tests numériques que nous avons effectués, nous avons observé que, pour une quadrature fine, les surfaces sont généralement surévaluées. Les lignes

d'intégration dont la surface d'origine ou d'arrivée n'est pas clairement identifiable ont donc été éliminées. Cette élimination permet en outre de préserver la symétrie axiale d'une manière simple. En effet, choisir une parmi deux surfaces intersectées peut conduire à des distorsions axiales du flux. De la même façon, choisir de distribuer la moitié des contributions sur chacune des deux surfaces alourdit la programmation.

Une seconde source de difficulté provient des lois de conservation des neutrons de l'équation (1.12). Pour les applications en simple précision sur ordinateurs à 32 bits, ces bilans théoriquement exacts sont entachés d'erreurs d'arrondi. Une normalisation des PC s'avère aussi nécessaire. Celle-ci doit cependant être faite de façon à préserver les lois de réciprocité, ce qui limite passablement les choix possibles. Nous avons choisi de recalculer les éléments diagonaux des probabilités de collision et de transmission, donc d'imposer (à partir de (1.12)):

$$P_{ii} = 1 - \left\{ \sum_{j \neq i} P_{ij} + \sum P_{i\beta} \right\}$$

$$P_{\alpha\alpha} = 1 - \left\{ \sum P_{\alpha j} + \sum_{\beta \neq \alpha} P_{\alpha\beta} \right\}$$

Cette façon de procéder permet de préserver la symétrie des matrices de réponse, mais peut introduire certaines probabilités négatives. Toutefois, ceci n'affecte en rien les différentes phases du calcul, et l'utilisateur a le choix d'utiliser ou de ne pas utiliser cette dernière normalisation pouvant ainsi juger lui-même de ses effets.

CHAPITRE 4

TESTS NUMÉRIQUES

Dans ce chapitre, nous présentons les tests numériques que nous avons effectués dans le but de qualifier les méthodes développées dans cette thèse. Deux types de tests sont présentés:

1. des tests de validation (voir aussi [26]) où nous avons comparé nos résultats à ceux obtenus à l'aide d'autres logiciels,
2. des applications tridimensionnelles qui illustrent le traitement polycinétique, dans des états monocellulaire et polycellulaire.

Tous ces tests ont été réalisés à l'aide de la version 1.0 d'EXCELL sur un ordinateur IBM-4381 (groupe 2) en simple précision. Pour valider la technique de discrétisation utilisée dans EXCELL, nous avons établi des statistiques sur les taux de réaction à l'intérieur de la supercellule. Un taux de référence a été établi pour chaque zone, ou combinaison de zones, de la supercellule. Le taux de réaction de type x pour la zone i , $\tau_x^* i$, est donné par:

$$\tau_x^* i = \frac{1}{V_i} \int_{V_i} d^3r \Sigma_x(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r})$$

où Σ_x représente la section efficace de ce type de réaction. Les taux résultant de différents calculs ont ensuite été comparés aux taux de référence afin de mesurer l'écart maximum et l'écart moyen par rapport au calcul de référence, écarts qui sont définis par:

$$E_{x \max} = \max_i \left\{ \frac{|\tau_{x^*i} - \tau_{xi}|}{\tau_{x^*i}} \right\} \quad (4.1)$$

et par:

$$\bar{E}_x = \frac{1}{V_{sc}} \sum_i \frac{|\tau_{x^*i} - \tau_{xi}| V_i}{\tau_{x^*i}} \quad (4.2)$$

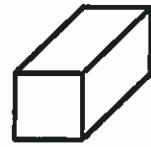
où V_{sc} désigne le volume de la supercellule. Pour les résultats présentés ci-bas, en l'absence d'une mention spécifique, nous utilisons le même critère de convergence, soit 10^{-4} ce qui correspond à la valeur de défaut de ce paramètre (voir paragraphe §3.1.2). Nous donnons les écarts correspondant aux taux de collision (section efficace totale); de plus, pour les tests polycinétiques, seuls les écarts maxima sur tous les groupes d'énergie sont présentés. Le nombre de lignes d'intégration dans le cas d'une quadrature en cellule hétérogène est exprimé en milliers (ci-bas noté par K).

4.1 Assemblage 15x15 de crayons de combustible (test REP)

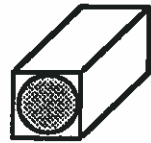
Le premier cas-test a pour but de vérifier la cohérence des résultats obtenus par EXCELL en comparant ceux-ci aux résultats d'un calcul bidimensionnel. Pour ce test, nous modélisons un assemblage 15x15 de crayons de combustible, assemblage typique des réacteurs à eau légère sous pression. Dans cet assemblage, il y a quatre types de cellules: des cellules contenant du modérateur seulement (ici de l'eau légère), des cellules avec du combustible, des cellules empoisonnées et des cellules avec combustible et plaque d'acier homogénéisés. La figure 4.1 présente ces types de cellules et les propriétés nucléaires monocinétiques associées à chaque zone. En joignant ces cellules, nous avons formé l'assemblage de la figure 4.2 qui est représenté ici avec deux symétries planaires.

Nous avons utilisé le logiciel EURYDICE [18] pour générer des valeurs de référence du flux neutronique; ce logiciel utilise la méthode à courants d'interface pour coupler les cellules comme EXCELL, mais pour une géométrie bidimensionnelle. Nous avons effectué des calculs tridimensionnels en utilisant le logiciel EXCELL et en faisant varier la hauteur h des cellules:

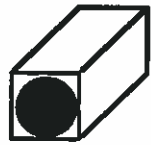
$$h = 1.25 \text{ cm}, 2.50 \text{ cm}, 5.00 \text{ cm}, 10.00 \text{ cm et } 20 \text{ cm}.$$



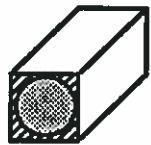
Modérateur
seulement



Modérateur
et combustible



Modérateur
et poison



Modérateur,
combustible
et plaque d acier

4
TYPES
DE
CELLULES

 d= 0.90 cm L= 1.25 cm

Matériel	Σ_t (cm ⁻¹)	Σ_a (cm ⁻¹)	Source (cm ⁻³)
Combustible	0.625	0.270	0.000
Eau légère	1.250	0.008	1.000
Eau + Acier	2.000	0.758	1.000
Poison	14.000	14.000	0.000

Figure 4.1. Données pour le test REP.

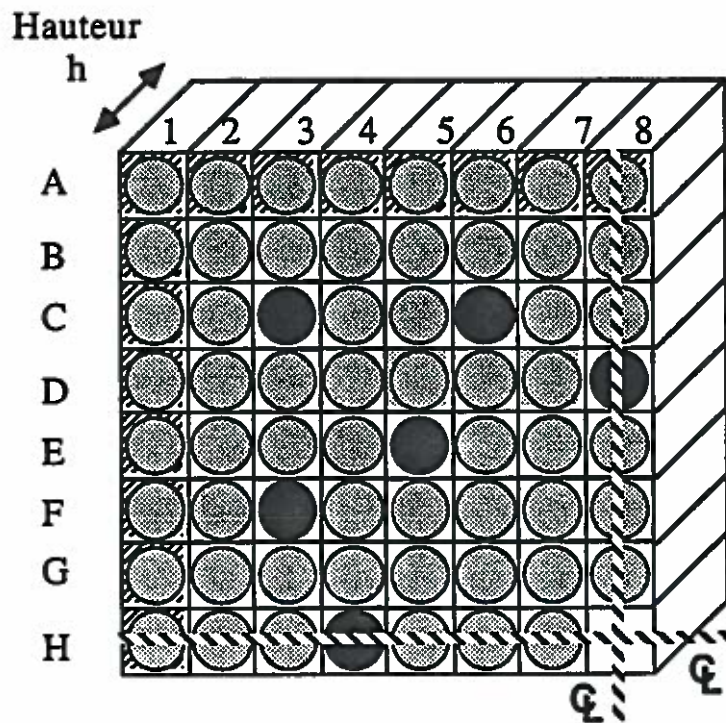


Figure 4.2. Assemblage de cellules (test REP).

Pour ces valeurs de la hauteur, nous avons choisi les paramètres de quadrature suivants (voir section §3.1):

$$\text{NANGLE} = 8$$

et

$$\text{DENSITE} = 60 \text{ cm}^{-2}.$$

Les résultats des calculs EXCELL présentés à la table 4.1 montrent un bon accord avec les flux d'EURYDICE à mesure que la hauteur augmente, ce qui résulte du fait que le calcul d'EURYDICE correspond à une valeur théorique de $h=\infty$. En fait, à cause du principe de conservation des neutrons dans un milieu infini, une légère variation du flux dans les zones de poison (matériel fortement absorbant) doit être compensée par des changements notables du flux dans les autres zones. Toutes les valeurs du flux restent à 1% près des flux d'EURYDICE pour $h = 5$ cm. Cette remarque s'applique aussi à toutes les valeurs du flux pour $h = 10$ cm et $h = 20$ cm. Seulement 10 itérations ADI ont été nécessaires pour atteindre la convergence de 10^{-4} pour ce test de validation, ce qui démontre la puissance de la procédure ADI qui a été décrite au chapitre §2.

Hauteur (cm)	# de lignes (K)	$E_{\max}^{(a)}$ (%)	$\bar{E}^{(b)}$ (%)
1.25	5.62	5.77	1.24
2.50	9.38	1.76	0.67
5.00	17.23	0.94	0.21
10.00	32.11	0.54	0.23
20.00	62.35	0.41	0.20

a: Écart maximum sur les taux de collision.
b: Écart moyen sur les taux de collision.

Table 4.1. Comparaison des taux de collisions
(test REP).

4.2 Cube fractionné 2x2x2

Le deuxième test présente les résultats du calcul des probabilités de collision résultant du fractionnement d'un cube, dont l'arête mesure 2 cm, en 8 sous-cubes identiques (voir figure 4.3). Ce fractionnement a été réalisé avec les sections efficaces

$$\Sigma = 1 \text{ cm}^{-1}$$

ou

$$\Sigma = 0 \text{ cm}^{-1}$$

et comparé aux résultats donnés par les quadratures de SHETAN et d'EXCELL en mode hétérogène. Ce test a pour but de valider la quadrature d'EXCELL dans les zones (vides ou non); remarquons que SHETAN n'est pas en mesure de calculer les probabilités de collision réduites dans les zones vides.

Les résultats présentés à la table 4.2 montrent des valeurs de probabilités de collision telles que calculées par fractionnement après simplification, et par quadrature multidimensionnelle des logiciels SHETAN et EXCELL. Nous pouvons considérer comme exactes les valeurs obtenues par fractionnement (voir paragraphe §1.4.1), en utilisant une intégration de Gauss à 32 points. Ces résultats démontrent que, pour un nombre de lignes

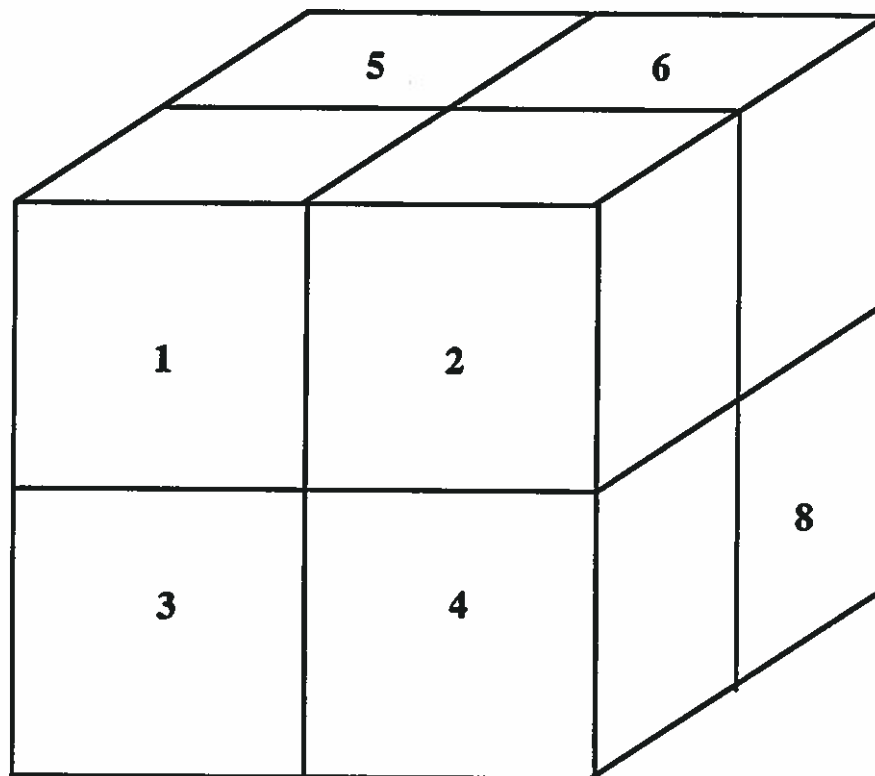


Figure 4.3. Numérotation des zones d'un cube fractionné en 8 parties égales.

$\Sigma = 1 \text{ cm}^{-1}$	Fractionnement	SHETAN 15.52 K lignes	EXCELL 14.06 K lignes
P ₁₁	.33096	.33334	.32812
P ₁₂	.04524	.04566	.04553
P ₁₄	.01398	.01318	.01396
P ₁₈	.00631	.00584	.00651

$\Sigma = 0 \text{ cm}^{-1}$	Fractionnement	SHETAN	EXCELL 14.06 K lignes
P ₁₁	.44832	non disponible	.44293
P ₁₂	.09512		.09461
P ₁₄	.04477		.04470
P ₁₈	.02864		.03028

Table 4.2. Probabilités calculées par quadratures multidimensionnelles.

d'intégration à peu près équivalent, les probabilités de collision en mode hétérogène s'avèrent plus précises en utilisant la quadrature d'EXCELL, où on a choisi les mêmes paramètres de quadrature qu'au test précédent:

$$\text{NANGLE} = 8$$

et

$$\text{DENSITE} = 60 \text{ cm}^{-2}.$$

Les probabilités calculées par SHETAN ont été moyennées sur toutes les zones de l'assemblage.

4.3 Problème IAEA-3D résolu en transport (test IAEA3D)

Ce cas-test a pour but de valider la procédure ADI en comparant celle-ci à un calcul direct. Le problème provient d'un test classique à deux groupes d'énergie (groupe 1: rapide, groupe 2: thermique) utilisé pour valider les codes de diffusion [27]. Il s'agit d'un réseau de 9 x 9 x 4 cellules rectangulaires homogènes présentées par plan à la figure 4.4; des conditions aux frontières de symétrie s'appliquent sur la diagonale (XY) et au bas (Y négatif) de l'assemblage, alors que des conditions de courant réentrant nul s'appliquent à gauche (X positif), à l'avant (Z positif) et à l'arrière (Z négatif) de l'assemblage. Les dimensions des cellules et les données nucléaires relatives aux cinq différents types de cellules sont illustrées à la figure 4.5. Les différentes sections efficaces sont définies par:

Σ_i : section efficace totale du groupe i

$\Sigma_{i \rightarrow j}$: section efficace de transfert du groupe i vers le groupe j

Σ_i^f : section efficace de fission du groupe i

ν : nombre de neutrons émis par fission.

Tous les neutrons sont issus des fissions thermiques et naissent dans le groupe rapide. Ce problème a été traité en utilisant les réductions analytiques qui s'appliquent aux cellules homogènes (voir annexe A). Deux

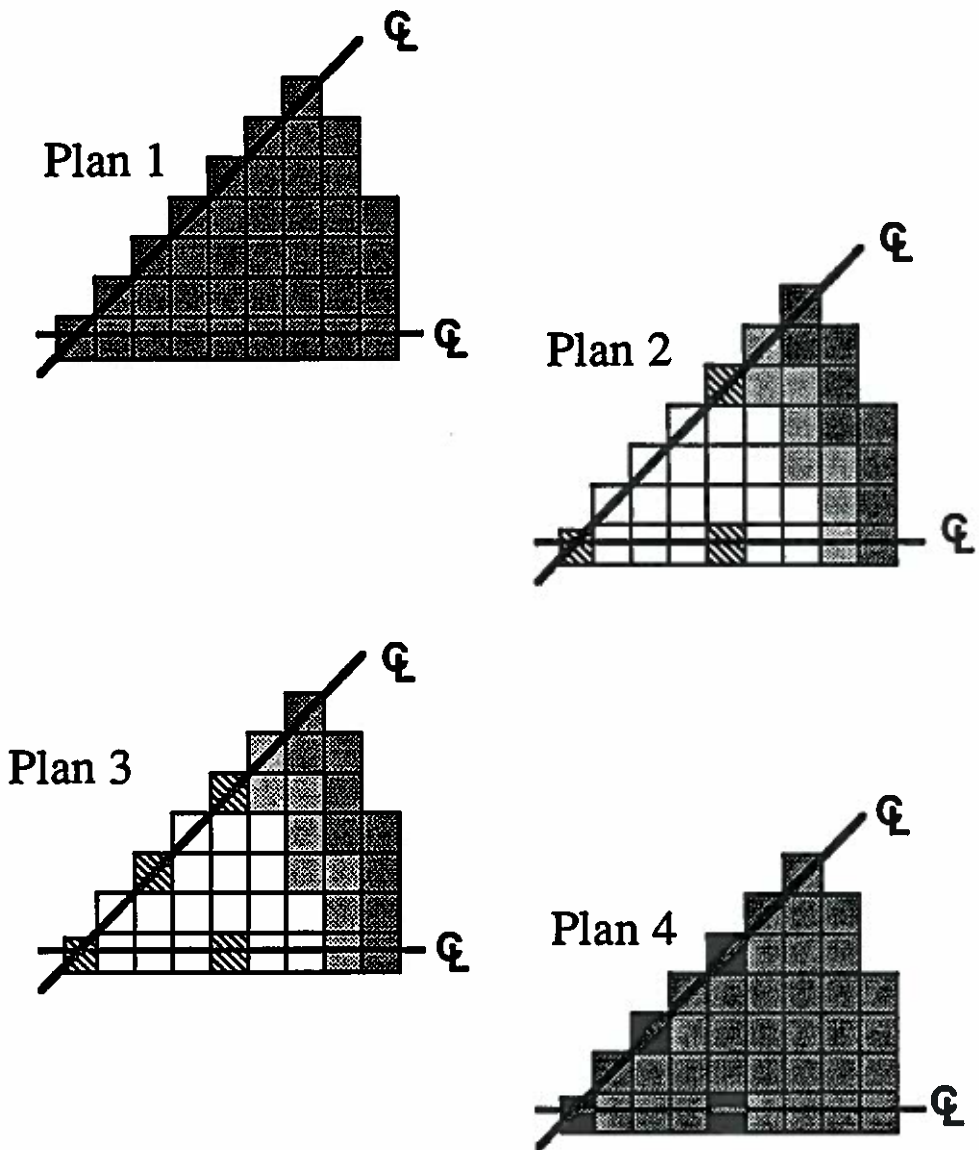
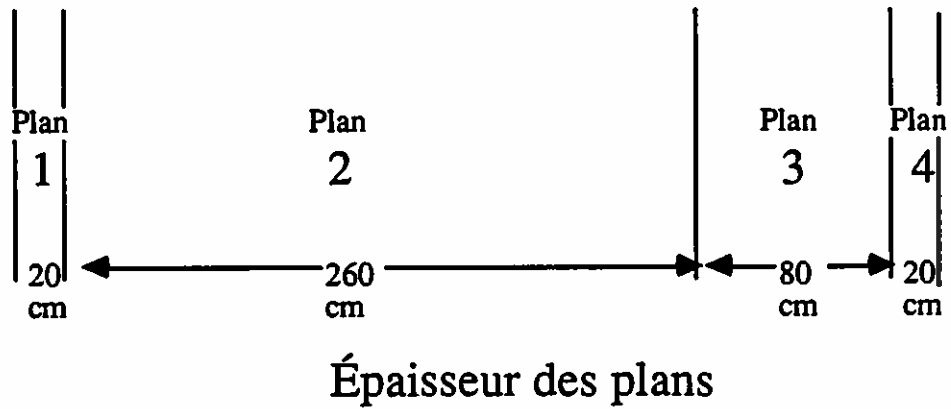


Figure 4.4. Description du problème IAEA-3D.



Dimensions des cellules 20 cm
20 cm

Sections efficaces

	Σ_1	Σ_2	$\Sigma_{1>1}$	$\Sigma_{1>2}$	$\Sigma_{2>2}$	$\nu \Sigma_2^f$
	0.222222	0.833333	0.192222	0.020000	0.753333	0.135000
	0.222222	0.833333	0.192222	0.020000	0.748333	0.135000
	0.222222	0.833333	0.192222	0.020000	0.703333	0.135000
	0.166667	1.111111	0.126667	0.040000	1.101111	0.000000
	0.166667	1.111111	0.126667	0.040000	1.056111	0.000000

$$\Sigma_{2>1} = 0.$$

Figure 4.5. Données pour le problème IAEA-3D.

calculs ont été effectués. Un premier calcul en huitième d'assemblage a été effectué en utilisant une méthode d'inversion directe de la matrice du système (option $\$4$ du module SYBIL [28]). Le second calcul d'EXCELL en quart d'assemblage utilise la procédure des directions alternées avec accélération variationnelle telle que présentée à la section §2.2.

Les résultats de ce test sont présentés à la table 4.3. Aucune différence significative n'a été observée sur les flux dans les deux calculs. Seule la valeur de k_{eff} est légèrement différente, cette différence étant attribuable au critère de convergence. Ce test démontre que la procédure ADI avec accélération variationnelle permet de traiter des applications comportant un grand nombre de cellules sans dégradation de la solution et à un coût de beaucoup inférieur à une méthode directe. Nous présentons à la figure 4.6 un bilan représentant une génération de 1000 neutrons. Remarquons que 51 neutrons furent par les frontières extérieures. Notons finalement que ces résultats ont été obtenus avec une approximation de source plane, ce qui est injustifiable pour traiter des assemblages de REP complets; nos résultats ne doivent donc pas servir de référence absolue.

Méthode de calcul	k_{eff}	$E_{\text{max}}^{(a)}$ (%)	T cpu (s)
ADI (1/4 de coeur)	0.96795	0.01	394.5
directe (1/8 de coeur)	0.96787	référence	8895.6

a: Écart maximum sur les taux de collision.

Table 4.3. Méthode directe vs procédure ADI
(test IAEA-3D).

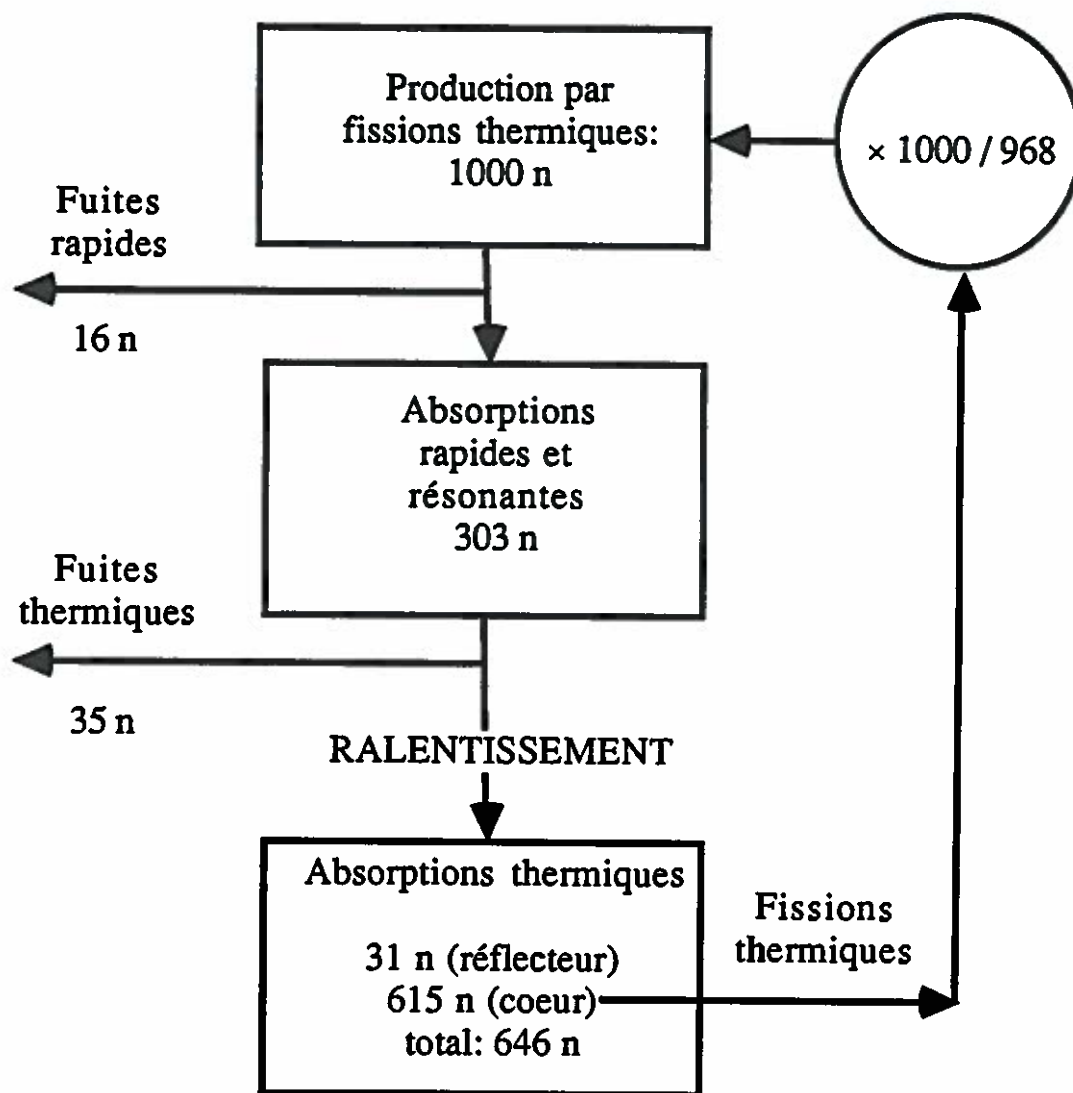


Figure 4.6. Bilan des 1000 neutrons (test IAEA-3D).

4.4 Croix de poison dans une cellule modérée à l'eau lourde (test CRdP)

Le but de ce problème est de démontrer la stabilité des résultats d'EXCELL. Pour cette démonstration, nous avons placé une croix de poison dans la partie supérieure d'une cellule modérée à l'eau lourde (voir figure 4.7 et 4.8). Des conditions de réflexion ont été appliquées aux surfaces extérieures d'une cellule unique pour représenter un assemblage complet. En utilisant le module de calcul complet des PC du code EXCELL, nous avons comparé nos résultats à ceux du code SHETAN [10]. La densité des lignes d'intégration a été fixée à

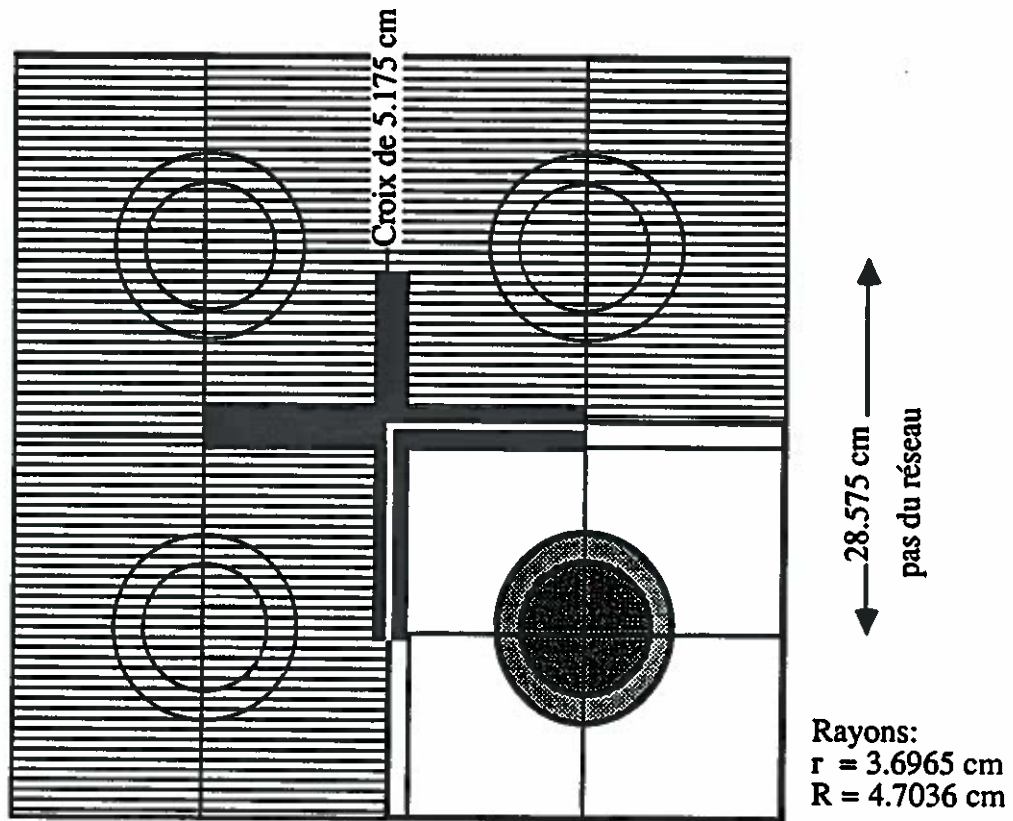
$$\text{DENSITE} = 1.0 \text{ cm}^{-2}$$

pour les calculs EXCELL. Pour les calculs SHETAN, les lignes d'intégration sont générées en utilisant une intégration trapézoïdale selon quatre paramètres: R , Z , θ et ϕ (voir figure 4.9); nous avons surimposé l'axe Z et l'axe du cylindre et nous avons fixé les valeurs des deux paramètres de quadrature correspondant à la densité

$$\Delta Z = 50$$

et

$$\Delta R = 20.$$



Sections efficaces $\Sigma_{2>1} = 0.$

	Σ_1	Σ_2	$\Sigma_{1>1}$	$\Sigma_{1>2}$	$\Sigma_{2>2}$	$v\Sigma_1^f$	$v\Sigma_2^f$
	0.4200	0.4989	0.4048	0.0003	0.3823	0.0129	0.1671
	0.2412	0.2742	0.2394	0.0002	0.2677	0.0000	0.0000
	0.2672	0.3929	0.2543	0.0129	0.3929	0.0000	0.0000
	0.0882	0.8148	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

Figure 4.7. Cellule avec une croix de poison (vue de quatre cellules).

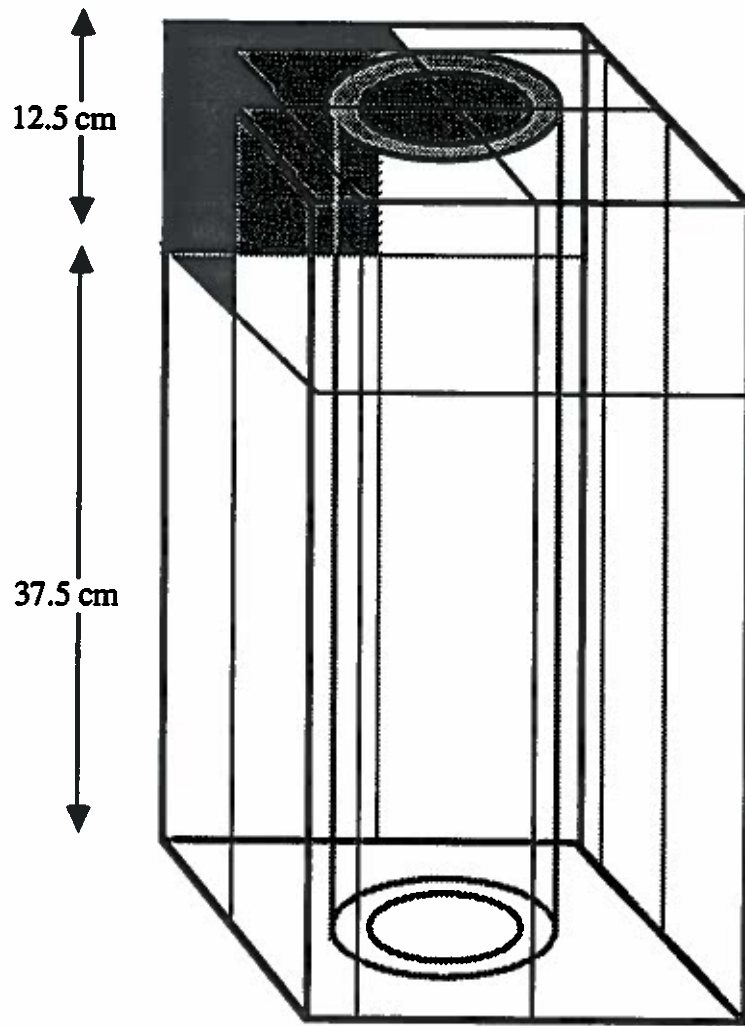


Figure 4.8. Cellule avec une croix de poison
(vue en hauteur).

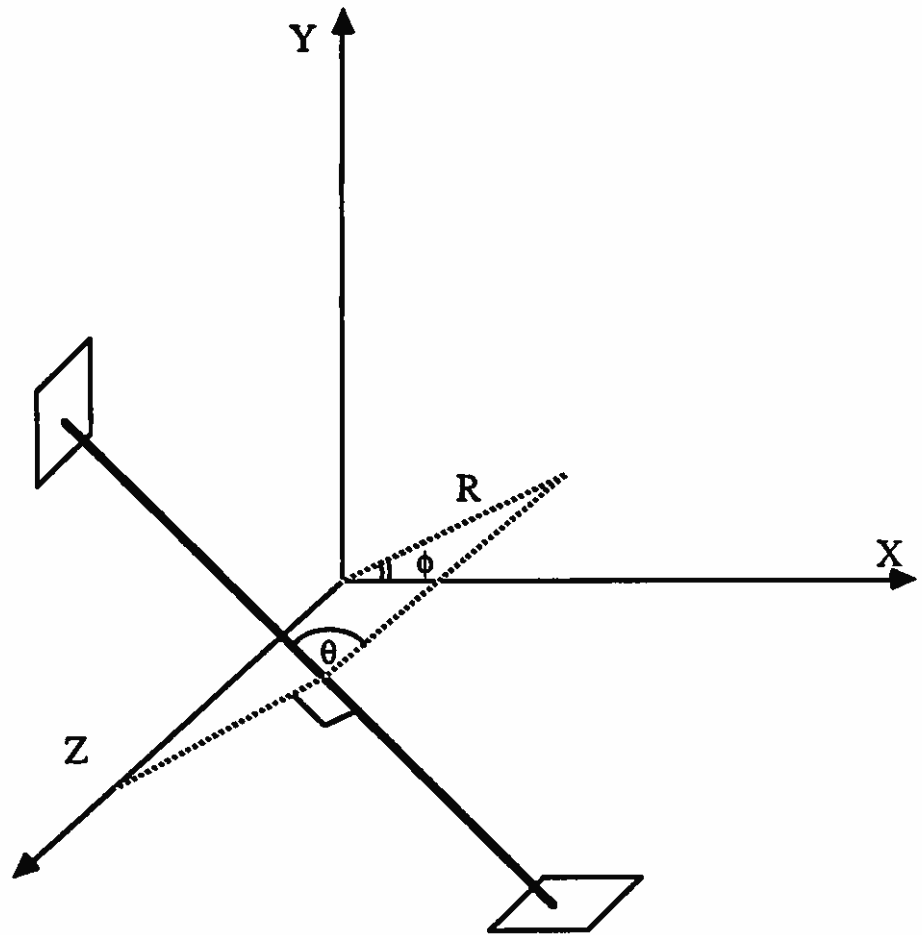


Figure 4.9. Système de coordonnées utilisé dans SHETAN.

Nous avons ensuite fait varier le nombre d'angles dans les deux codes. La figure 4.10 montre la variation de k_{∞} en fonction du nombre d'angles, et nous pouvons remarquer une stabilisation plus rapide de la valeur dans les calculs effectués par EXCELL. Deux calculs SHETAN, correspondant respectivement aux valeurs des paramètres angulaires

$$\Delta\theta = \Delta\phi = 16$$

et

$$\Delta\theta = \Delta\phi = 12,$$

ont été comparés à deux calculs EXCELL, correspondant à EQ8 et à EQ12 (EXCELL EQ12 sert de calcul de référence). La comparaison des taux de collision de la table 4.4 utilise la section efficace totale de chacune des zones de la cellule, mais les écarts les plus importants sur les taux se retrouvent dans les régions de poison. Comme ces régions empoisonnées influencent fortement le calcul des sections efficaces homogénéisées, les écarts maximums observés peuvent signifier, au niveau du calcul de réacteur, des différences importantes de la réactivité. Nous remarquons toutefois que le cas EXCELL EQ8, dont la valeur de k_{∞} est assez éloignée de celle de EQ12, se situe à 1% en moyenne de la référence, ce qui démontre encore la stabilité du code EXCELL.

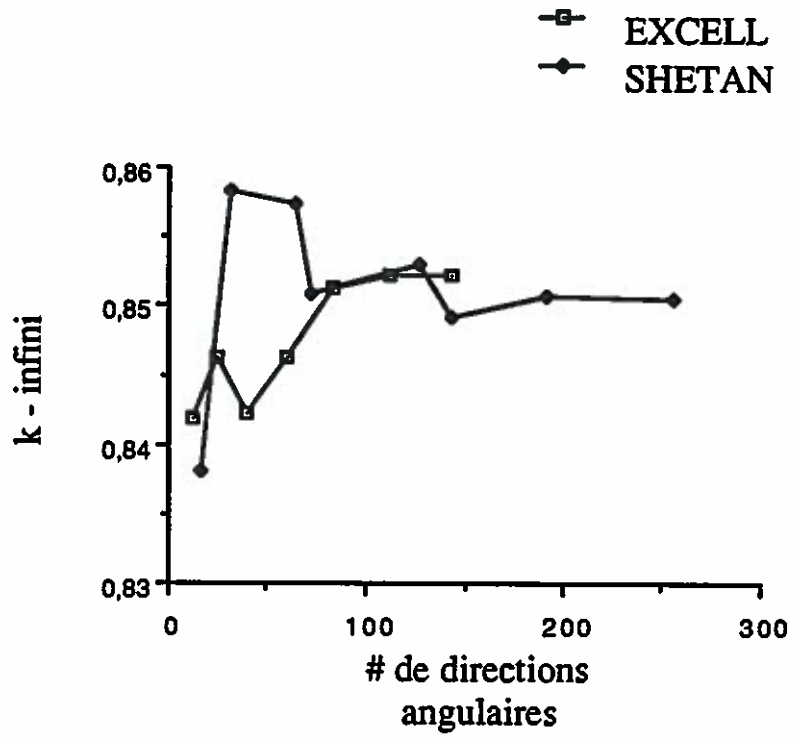


Figure 4.10. Graphe de $k - \text{infini}$ (test CRdP).

	k_{∞}	T cpu (s)	$E_{\max}^{(a)}$ (%)	$\overline{E}^{(b)}$ (%)
SHETAN 12x12	0.84907	265.4	8.80	1.43
SHETAN 16x16	0.85043	455.3	5.40	1.35
EXCELL EQ8	0.84224	264.2	5.65	0.76
EXCELL EQ12	0.85125	544.9	référence	référence

a: Écart maximum sur les taux de collision.
b: Écart moyen sur les taux de collision.

Table 4.4. Comparaison des taux de collision
(test CRdP).

4.5 Étude du compartiment à eau légère (test CEL)

Le dernier problème étudie l'effet de l'approximation aux interfaces dans une supercellule contenant un compartiment de réglage à eau légère typique aux réacteurs CANDU. Ces compartiments verticaux, insérés perpendiculairement aux canaux de combustible (voir figure 3.1), font partie du système de régulation de la plupart des réacteurs de puissance canadiens. Le compartiment contient trois petites tiges et trois grandes tiges (voir figure 4.11), qui sont utilisées pour ajuster le niveau d'eau légère. Nous représentons à la figure 4.12 une supercellule composée de deux canaux de combustible et du compartiment et entourée de modérateur (ici de l'eau lourde); remarquons que le compartiment descend perpendiculairement aux canaux tout le long du pas de réseau.

Les différents matériaux de ce problème ont été représentés via des sections efficaces à deux groupes d'énergie obtenues par condensation à partir d'un calcul WIMS [7]. Un premier calcul complet a été effectué en considérant la supercellule comme une cellule unique comprenant 53 zones avec des conditions de réflexion aux frontières extérieures; ce calcul, appelé CEL complet, a été établi à l'aide de la quadrature

$$N_{\text{ANGLE}} = 4$$

et

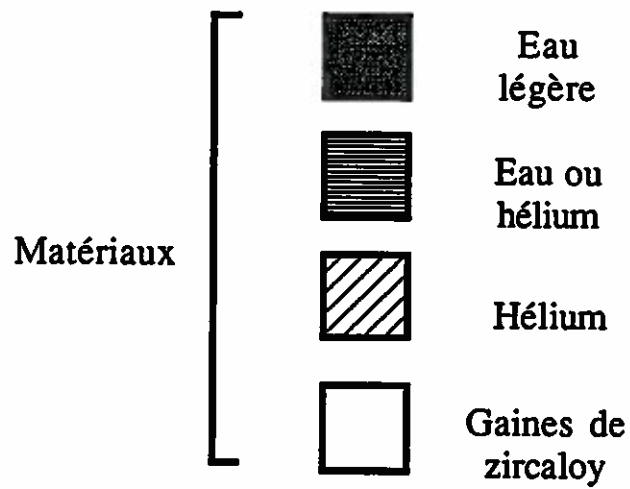
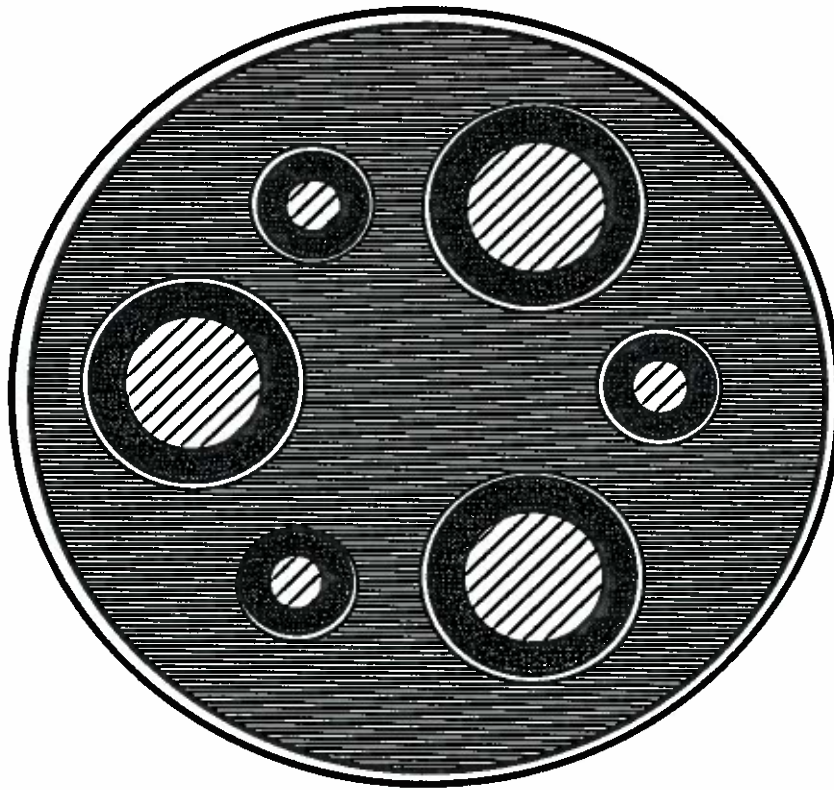


Figure 4.11. Compartiment à eau légère.

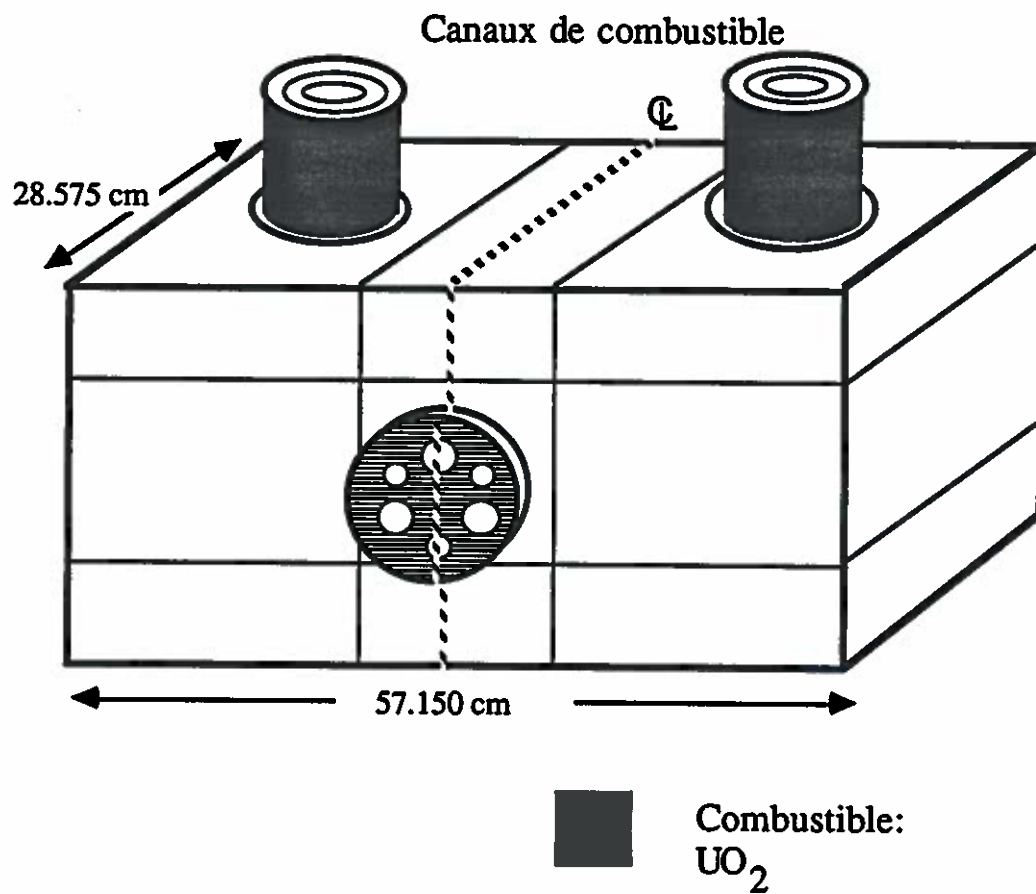


Figure 4.12. Supercellule contenant un compartiment à eau légère.

$$\text{DENSITE} = 5 \text{ cm}^{-2}.$$

Un second calcul a ensuite été établi en considérant un assemblage de 6 cellules distinctes, et en se servant de la condition de symétrie planaire illustrée à la figure 4.12. Ces cellules sont obtenues en considérant les décomposition axiales de la supercellule initiale:

$$X = -28.57500 \text{ cm}, -7.14375 \text{ cm}, 7.14375 \text{ cm}, 28.57500 \text{ cm};$$

$$Y = -25.00000 \text{ cm}, -8.33333 \text{ cm}, 8.33333 \text{ cm}, 25.00000 \text{ cm};$$

$$Z = -14.28750 \text{ cm}, 14.2875 \text{ cm}.$$

Les cellules situées entièrement dans le demi-espace $X < 0$ ne sont donc pas représentées dans ce second calcul, appelé CEL / CI6. L'objectif de cette application est d'apprécier l'effet de l'approximation supplémentaire créée lors de l'introduction d'interfaces dans la supercellule; la même quadrature que pour le calcul CEL complet a été employée.

La table 4.5 résume l'effet de ces interfaces sur les taux de collision et sur la valeur de k_{∞} . Disons qu'une différence sensible peut être observée entre les deux calculs; l'écart maximum se produit à l'intérieur d'une région centrale de combustible. En observant le bilan des 1000 neutrons de

Méthode de calcul	k_{∞}	$E_{\max}^{(a)}$ (%)	$\overline{E}^{(b)}$ (%)	T cpu (s)
CEL / CI6 (6 cellules)	0.96465	1.56	0.46	448.5
CEL complet (cellule unique)	0.96618	référence	référence	2307.3

a: Écart maximum sur les taux de collision.
b: Écart moyen sur les taux de collision.

Table 4.5. Effets des interfaces sur les taux de collision (test CEL).

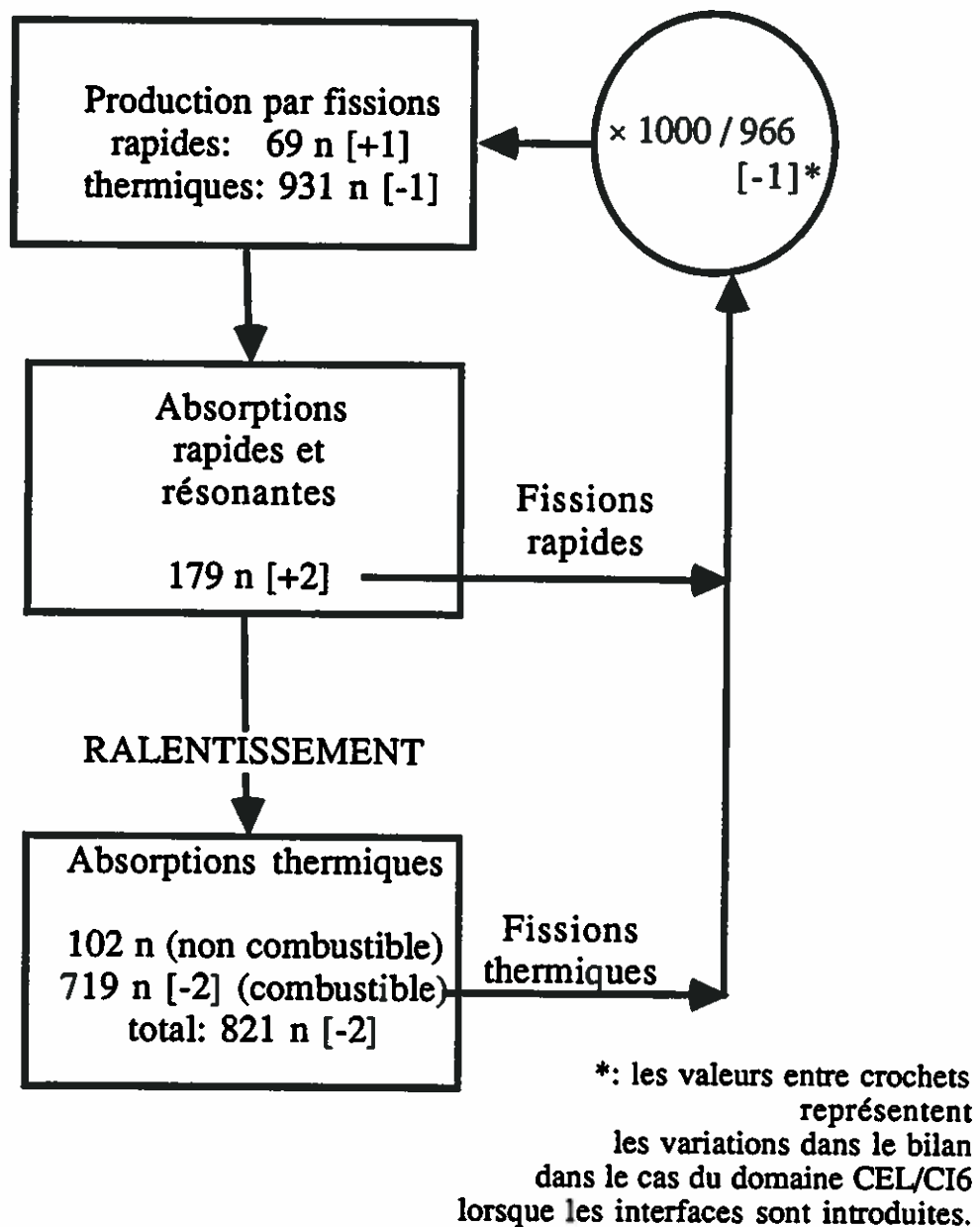


Figure 4.13. Bilan des 1000 neutrons (test CEL).

la figure 4.13, nous voyons un déplacement de quelques neutrons du groupe thermique vers le groupe rapide. L'écart moyen sur les taux se situe quand même en deçà de 0.5%, et la différence sur la valeur de k_{∞} est de l'ordre de 1.5 mk. L'introduction d'interfaces, même de grandes surfaces comme c'est le cas dans ce problème, ne dégrade pas notablement la qualité de la solution et permet des économies substantielles de temps CPU.

CONCLUSION

Ce travail de recherche a permis de concevoir un logiciel performant pour résoudre l'équation de transport des neutrons en utilisant une méthode déterministe pour obtenir la distribution du flux à l'intérieur d'assemblages polycellulaires exigeant un traitement tridimensionnel. Nous avons donc développé EXCELL comme une alternative qui présente l'avantage d'être moins coûteuse en temps de calcul que les méthodes stochastiques, tout en demeurant relativement précise; en ce sens, EXCELL et SHETAN [10] représentent une nouvelle génération par rapport au logiciel canadien MULTICELL [9], ce dernier utilisant la théorie de diffusion. Toutefois, EXCELL possède certains avantages comparativement à SHETAN: il est entièrement modulaire, préserve les symétries des cellules rectangulaires et converge rapidement. Dans la chaîne globale du calcul neutronique, le logiciel EXCELL peut être avantageusement utilisé pour évaluer les coefficients de diffusion et les sections efficaces macroscopiques des cellules élémentaires perturbées par la présence d'un mécanisme de régulation ou d'arrêt d'urgence.

Les applications pratiques possibles d'EXCELL regroupent un large éventail de problèmes, allant du simple cas monocellulaire monociné-

tique à des assemblages polycellulaires utilisant plusieurs groupes d'énergie. La nouvelle procédure permettant de préserver la symétrie et la réciprocité des probabilités de collision réduit les possibilités de basculements axiaux du flux, créés artificiellement.

Il est également possible de générer une solution approximative, en se servant de courants d'interface, et de représenter adéquatement les effets spatiaux à un coût généralement inférieur à la solution utilisant uniquement les probabilités de collision. L'effet de ces interfaces sur le flux neutronique dépend du problème considéré; il s'est avéré négligeable pour les applications que nous avons considérées.

Nous avons développé des réductions analytiques des PC pour des géométries 3D simples (hexaèdre et cylindre troué); d'autres réductions analytiques pourront être utiles en autant qu'elles ne conduisent pas à des intégrations multiples. Pour traiter les réseaux de cellules rectangulaires, nous avons qualifié une procédure des directions alternées, déjà utilisée avec succès en diffusion [16]. La vitesse de convergence de ce processus itératif, accéléré par des paramètres de relaxation, a déjà été démontrée [26] par plusieurs tests numériques.

Deux types particuliers de problèmes ont été rapportés dans cette thèse afin de démontrer le bon fonctionnement des modules d'EXCELL:

1. des tests de validation du calcul de flux dans les cas où un code de référence est disponible;
2. des applications particulières, donnant un aperçu de la gamme de problèmes qu'il est possible de résoudre.

Afin de poursuivre les tests de validation, il faudrait envisager dans un futur rapproché de comparer les résultats des calculs d'EXCELL avec d'autres codes de type Monte-Carlo [6]. Il faudrait également considérer les possibilités de vectorisation et de parallélisation des modules pour mettre au point la prochaine génération du logiciel sur super-ordinateurs. Finalement, il serait intéressant de concevoir une interface infographique permettant la visualisation des géométries tridimensionnelles sur écran graphique.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] ROUBEN, B., "Le CANDU - étude du coeur et gestion du combustible", Rapport AECL-8333(F), Énergie Atomique du Canada Limitée (1984)

- [2] BUSSAC, J. et REUSS, P., "Traité de neutronique. Physique et calcul des réacteurs nucléaires", (2ème édition) Hermann, Paris (1985)

- [3] HÉBERT, A., "Neutronique", Notes de cours, Institut de génie énergétique, École Polytechnique de Montréal (1983)

- [4] SANCHEZ, R., "Approximate Solutions of the Two-Dimensional Integral Transport Equations by Collision Probability Methods", Nucl. Sci. Eng. 64, 384 (1977)

- [5] ROZON, D., "Optimization of In-Core Fuel Management in CANDU Nuclear Reactors", Ph.D. Thesis, McMaster University, Hamilton, Ontario (1985)

- [6] PETRIE, L.M. et LANDERS, N.F., "Keno V.a An improved Monte Carlo Criticality Program with Supergrouping", Rapport NUREG/CR-0200, Volume 2, Section F11, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee (1984)

- [7] ASKEW, J.R., FAYERS, F.J. et KEMSHELL, P.B., "A General Description of the Lattice Code WIMS ", Journal of British Nuclear Energy Society 5, 564 (1966)
- [8] CARLYIK, I., "Collision Probabilities for Finite Cylinders and Cuboids", Nucl. Sci. Eng. 30, 150 (1967)
- [9] DASTUR, A.R. et BUSS, D.B., "MULTICELL - A 3D Program for the Simulation of Reactivity Devices in CANDU Reactors", Rapport AECL-7544, Énergie Atomique du Canada Limitée (1983)
- [10] CHOW, H.C. et ROSHD M.H.M., "SHETAN - A Three-Dimensional Integral Transport Code for Reactor Analysis", Rapport AECL-6878, Énergie Atomique du Canada Limitée (1980)
- [11] ROY, R., "Application de la méthode des courants d'interface aux calculs de supercellule", Rapport GAN-61, École Polytechnique de Montréal, Montréal (1985)
- [12] BEAUDET, M., "Modélisation des barres de cobalt dans SHETAN", Rapport GAN-165, École Polytechnique de Montréal, Montréal (1987)

- [13] ROY, R., HÉBERT, A. et MARLEAU, G., "EXCELL - A New Code for Modelling Reactivity Devices", Twelfth Symp. on Simulation of Reactor Dynamics and Plant Control, Hamilton, Ontario (1986)
- [14] LEWIS, E.E. et MILLER, W.F. Jr, "Computational Methods of Neutron Transport", (1ère édition) Wiley-Interscience, New-York (1984)
- [15] CARLSON, B.G., "Tables of Equal Weight Quadrature EQn Over the Unit Sphere", Rapport LA-4734, Los Alamos Scientific Laboratory, Los Alamos, New Mexico (1971)
- [16] HÉBERT, A., "Preconditioning the Power Method for Reactor Calculations", Nucl. Sci. Eng. 94, 1 (1986)
- [17] HÉBERT, A., "Variational Principles and Convergence Acceleration Strategies for the Neutron Diffusion Equation", Nucl. Sci. Eng. 91, 414 (1985)
- [18] HÉBERT, A., "Développement de la méthode SPH: Homogénéisation de cellules dans un réseau non uniforme et calcul des paramètres de réflecteur", Note CEA-N-2209, Commissariat à l'Énergie Atomique, France (1981)

- [19] STAMM'LER, R.J.J. et ABBATE, M.J., "Methods of Steady-State Reactor Physics in Nuclear Design", (1ère édition) Academic Press, Londres (1983)
- [20] SANCHEZ, R. et McCORMICK, R.C., "A Review of Neutron Transport Approximations", Nucl. Sci. Eng. 80, 481 (1982)
- [21] LEONARD, A., "Collision Probabilities and Response Matrices", Proc. Conf. Comp. Methods in Nucl. Eng., CONF-750413, Vol. II, p. III-15, Charleston, South Carolina (1975)
- [22] MARLEAU, G. et HÉBERT, A., "Interface Current Method for Cluster Geometry", Nucl. Sci. Eng. 92, 240 (1986)
- [23] MARLEAU, G., HÉBERT, A. et ROY, R., "Acceleration Strategies for the Interface Current Method", Proc. Second Int. Conf. on Simulation Methods in Nucl. Eng., Montréal (1986)
- [24] HÉBERT, A. et MARLEAU, G., " Guide des utilitaires informatiques de la section neutronique", Rapport GAN-179, École Polytechnique de Montréal, Montréal (1987)

- [25] MACFARLANE, R. E., "TRANSX-CRT: A Code for Interfacing MATXS Cross-Section Libraries to Nuclear Transport Codes for Fusion Systems Analysis", Rapport LA-9863-MS, Los Alamos Scientific Laboratory, Los Alamos, New Mexico (1984)
- [26] ROY, R., HÉBERT, A. et MARLEAU, G., "A Transport Method for Treating 3D Lattices of Heterogeneous Cells", Proc. Int. Top. Mtg. in Reactor Physics, Mathematics and Computation, Vol. II, p. 665, Paris, France (1987)
- [27] "Argonne Code Center: Benchmark Problem Book", ANL-7416, Suppl.2, ID11-42, p. 277 et 437, Argonne National Laboratory (1977)
- [28] MARLEAU G., HÉBERT A. et ROY R., "Guide de l'usager du code DRAGON et des modules SHIBA-F, SYBIL et EXCELL. Version 1.0", Rapport GAN-183, École Polytechnique de Montréal, Montréal (1987)
- [29] ABRAMOWITZ A. et STEGUN I.A., "Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs and Mathematical Tables", Dover, New York (1964)

ANNEXE A

CALCUL DES PROBABILITÉS DE COLLISION
D'UNE CELLULE HOMOGÈNE

Dans cette annexe, nous simplifions les différentes probabilités pour les cellules homogènes de section efficace Σ qui ont la forme d'un hexaèdre droit ou d'un cylindre troué.

A.1 Réductions analytiques pour un hexaèdre droit.

Réduisons d'abord le calcul des probabilités de transmission dans le cas d'un hexaèdre homogène droit. Cette structure géométrique du parallélépipède rectangle est la plus simple de celles qui peuvent être rencontrées en trois dimensions, mais un assemblage de tels parallélépipèdes peut quand même représenter adéquatement de nombreux problèmes.

Considérons donc un hexaèdre droit dont les côtés sont notés a, b, c. Cet hexaèdre possède trois faces distinctes, et la mesure de ces faces, ainsi que du volume, est donnée par:

$$S_a = bc \quad S_b = ac \quad S_c = ab \quad V = abc$$

Comme il n'y a pas de transmission entre une surface plane et elle-même, nous ne distinguons pas a priori deux surfaces parallèles correspondant à des rectangles semblables; ainsi aucune confusion ne résulte de ces notations. La frontière de l'hexaèdre se décompose donc en six surfaces (voir figure A. 1):

$$\partial V = 2 \times \{ S_a + S_b + S_c \}$$

Ainsi P_{cc} désigne la probabilité de transmission entre les deux surfaces parallèles de mesure a. b, et P_{ca} la probabilité de transmission entre une surface de mesure a. b et une surface de mesure b. c, surfaces qui sont donc perpendiculaires et attachées par l'arête b. Nous utilisons le symbole \bullet pour désigner le volume, ainsi $P_{\bullet a}$ indique la probabilité de fuite par la surface S_a .

Voyons comment les relations de réciprocity et de conservation des neutrons nous permettent, à partir des probabilités de transmission, de décrire autant les probabilités de fuite que la probabilité de première collision, qui apparaissent dans l'équation de transport dans le cas d'un hexaèdre. Les relations de conservation s'expriment par:

$$P_{aa} + 2 P_{ab} + 2 P_{ac} + P_{a\bullet} = 1$$

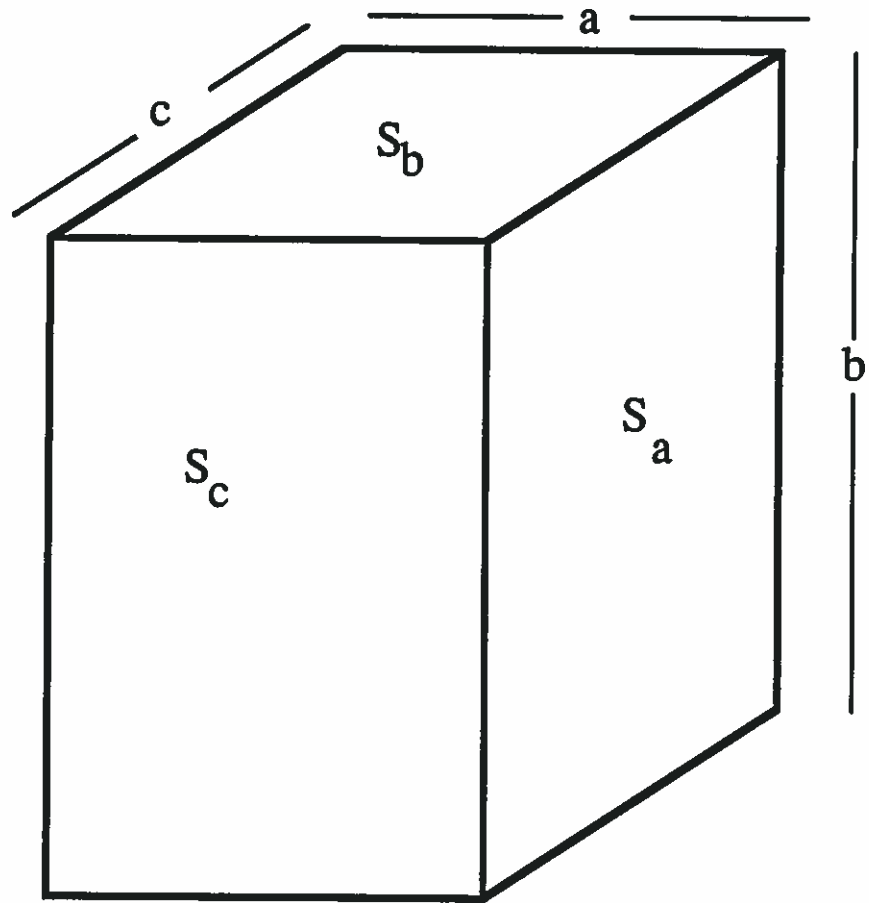


Figure A.1 Hexaèdre droit homogène.

$$2 P_{ba} + P_{bb} + 2 P_{bc} + P_{b\bullet} = 1$$

$$2 P_{ca} + 2 P_{cb} + P_{cc} + P_{c\bullet} = 1$$

(A.1)

$$2 P_{\bullet a} + 2 P_{\bullet b} + 2 P_{\bullet c} + P_{\bullet\bullet} = 1$$

Ces quatre équations linéaires jointes aux lois de réciprocité

$$4 \sum V P_{\bullet a} = S_a P_{a\bullet}$$

$$4 \sum V P_{\bullet b} = S_b P_{b\bullet}$$

$$4 \sum V P_{\bullet c} = S_c P_{c\bullet}$$

(A.2)

$$S_a P_{ab} = S_b P_{ba}$$

$$S_a P_{ac} = S_c P_{ca}$$

$$S_b P_{bc} = S_c P_{cb}$$

font que seul le calcul de six de ces probabilités s'avère nécessaire à la connaissance du système au complet. Nous pouvons choisir de ne présenter que le calcul des probabilités de transmission P_{aa} , P_{bb} , P_{cc} , P_{ab} , P_{ac} et P_{bc} . Même parmi ces probabilités, il n'y a que deux archétypes différents:

celui de la transmission entre faces parallèles et celui de la transmission entre faces perpendiculaires. Ainsi, seules P_{cc} et P_{ca} sont complètement développées, les autres s'obtenant en permutant simplement les indices a, b et c.

1. Transmission entre deux surfaces parallèles.

Calculons dans un premier temps la probabilité de transmission d'une surface à la surface directement opposée de l'autre côté de l'hexaèdre:

$$\pi S_c P_{cc} = \int_{S_c} d^2r'_s \int_{S_c} d^2r_s \frac{(\Omega \cdot N_-)(\Omega \cdot N_+) \exp(-\Sigma s)}{s^2}$$

Décrivons les surfaces de départ et d'arrivée par un système de coordonnées cartésiennes:

$$d^2r'_s = dx' dy' \quad d^2r_s = dx dy$$

$$s^2 = (x-x')^2 + (y-y')^2 + c^2$$

$$\Omega \cdot N_- = \Omega \cdot N_+ = \frac{c}{s}$$

L'expression de cette probabilité devient alors:

$$\pi S_c P_{cc} = c^2 \int_0^a dx' \int_0^b dy' \int_0^a dx \int_0^b dy \frac{\exp(-\Sigma s)}{s^4}$$

Il est maintenant possible de réduire cette intégrale quadruple en une intégrale double par les changements de variables:

$$u = (x-x') \quad v = (y-y')$$

$$u' = (x+x') \quad v' = (y+y')$$

Par rapport aux nouvelles variables, l'expression devient après intégration sur les variables u' et v' :

$$\pi S_c P_{cc} = 4 c^2 \int_0^a du (a-u) \int_0^b dv (b-v) \frac{\exp(-\Sigma R)}{R^4}$$

avec $R^2 = u^2 + v^2 + c^2$.

Définissons maintenant la fonction E_3 qui nous sert à simplifier

les notations ultérieures:

$$E_3(t) = \int_0^1 v \exp(-t/v) dv \quad \text{pour } t \geq 0.$$

Cette fonction E_3 est appelée fonction exponentielle-intégrale d'ordre 3, et appartient à une famille de fonctions qui a déjà été analysée ailleurs [29].

Nous décomposons maintenant la dernière intégrale en quatre parties distinctes:

$$\pi S_c P_{cc} = 4c^2 \{ I_{ab} - I_a - I_b + I_0 \}$$

afin de pouvoir réduire explicitement chacune de ces parties. Nous utilisons par la suite la relation:

$$\int_s^t \frac{dR \exp(-\Sigma R)}{R^3} = \frac{E_3(\Sigma s)}{s^2} - \frac{E_3(\Sigma t)}{t^2} \quad (\text{A.3})$$

En utilisant cette relation, les trois dernières intégrales I_a , I_b et I_0 deviennent unidimensionnelles. Pour I_0 , nous trouvons que:

$$\begin{aligned}
I_0 &= \int_0^a du u \int_0^b dv v \frac{\exp(-\Sigma R)}{R^4} \\
&= \int_0^a du u \left\{ \frac{E_3(\Sigma \sqrt{u^2+c^2})}{u^2+c^2} - \frac{E_3(\Sigma \sqrt{u^2+b^2+c^2})}{u^2+b^2+c^2} \right\} \\
&= \int_0^b dv v \left\{ \frac{E_3(\Sigma \sqrt{v^2+c^2})}{v^2+c^2} - \frac{E_3(\Sigma \sqrt{a^2+v^2+c^2})}{a^2+v^2+c^2} \right\} \\
&= \frac{1}{2} \int_0^a du u \left\{ \frac{E_3(\Sigma \sqrt{u^2+c^2})}{u^2+c^2} - \frac{E_3(\Sigma \sqrt{u^2+b^2+c^2})}{u^2+b^2+c^2} \right\} \\
&\quad + \frac{1}{2} \int_0^b dv v \left\{ \frac{E_3(\Sigma \sqrt{v^2+c^2})}{v^2+c^2} - \frac{E_3(\Sigma \sqrt{a^2+v^2+c^2})}{a^2+v^2+c^2} \right\}
\end{aligned}$$

cette dernière expression permettant mieux d'exprimer la symétrie du traitement des variables a et b . Pour I_a et I_b , nous trouvons que:

$$I_a = a \int_0^a du \int_0^b dv v \frac{\exp(-\Sigma R)}{R^4}$$

$$= a \int_0^a du \left\{ \frac{E_3(\Sigma \sqrt{u^2+c^2})}{u^2+c^2} - \frac{E_3(\Sigma \sqrt{u^2+b^2+c^2})}{u^2+b^2+c^2} \right\}$$

$$I_b = b \int_0^a du u \int_0^b dv \frac{\exp(-\Sigma R)}{R^4}$$

$$= b \int_0^b dv \left\{ \frac{E_3(\Sigma \sqrt{v^2+c^2})}{v^2+c^2} - \frac{E_3(\Sigma \sqrt{a^2+v^2+c^2})}{a^2+v^2+c^2} \right\}$$

La réduction de la première intégrale I_{ab} demande toutefois une transformation en coordonnées polaires:

$$\begin{aligned} u &= r \cos \theta & v &= r \sin \theta \\ du dv &= r dr d\theta & R^2 &= r^2 + c^2 \end{aligned}$$

et, nous déduisons de cette transformation que:

$$I_{ab} = ab \int_0^a du \int_0^b dv \frac{\exp(-\Sigma R)}{R^4}$$

$$= ab \int dr r \int d\theta \frac{\exp(-\Sigma R)}{R^4}$$

où les bornes d'intégration peuvent s'exprimer par (voir figure A.2):

$$\begin{aligned} \int_0^a du \int_0^b dv f(r) &= \int_0^{\rho} r dr f(r) \int_0^{\pi/2} d\theta \\ &- \int_a^{\rho} r dr f(r) \int_0^{\arccos(a/r)} d\theta \\ &- \int_b^{\rho} r dr f(r) \int_{\arcsin(b/r)}^{\pi/2} d\theta \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

avec $\rho^2 = a^2 + b^2$ et $f(r) = \exp(-\Sigma R) / R^4$.

En utilisant la relation (A.3) et quelques manipulations algébriques, nous retrouvons ensuite la forme:

$$\begin{aligned} I_{ab} &= ab \left[b \int_0^a \frac{du}{u^2+b^2} \left\{ \frac{E_3(\Sigma c)}{c^2} - \frac{E_3(\Sigma \sqrt{u^2+b^2+c^2})}{u^2+b^2+c^2} \right\} \right. \\ &\quad \left. + a \int_0^b \frac{dv}{a^2+v^2} \left\{ \frac{E_3(\Sigma c)}{c^2} - \frac{E_3(\Sigma \sqrt{a^2+v^2+c^2})}{a^2+v^2+c^2} \right\} \right] \end{aligned}$$

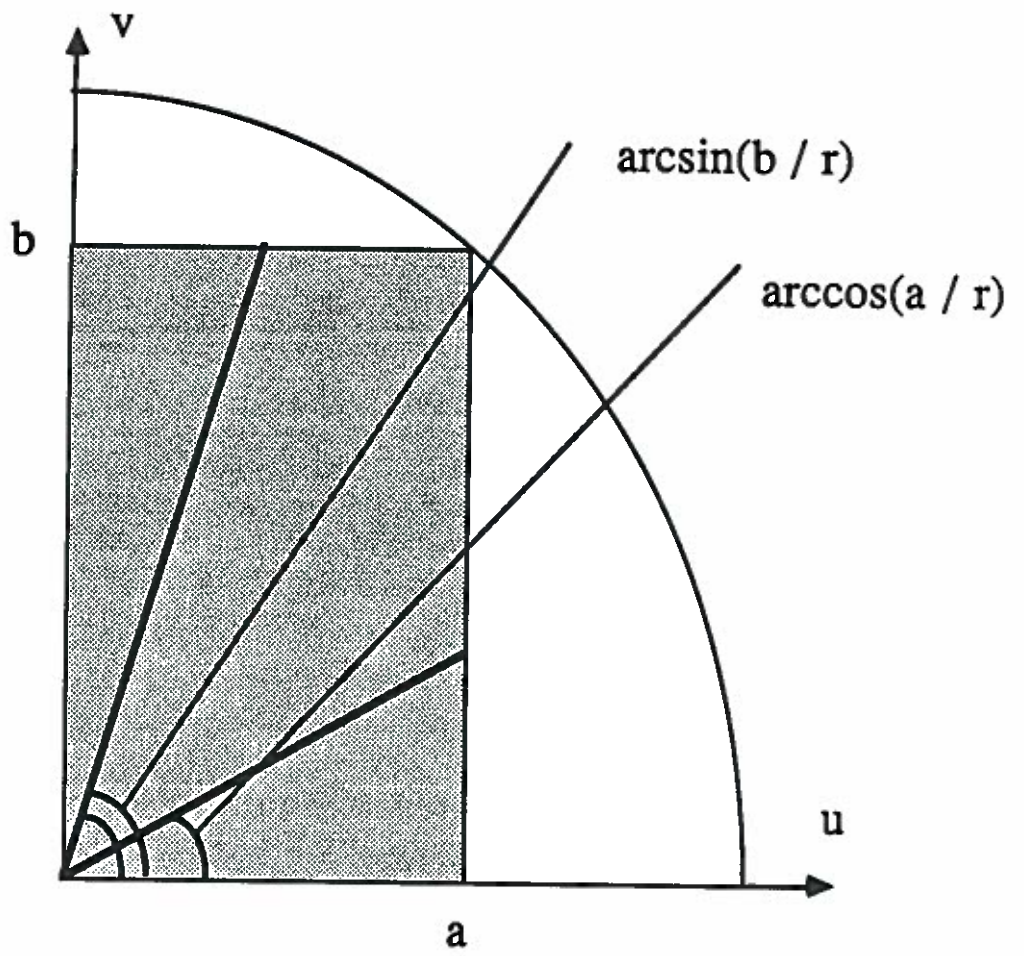


Figure A.2. Angles en coordonnées polaires.

En combinant toutes ces intégrales, il est possible d'exprimer la probabilité initiale sous la forme:

$$\begin{aligned}
 \pi S_c P_{cc} = 2c^2 & \left[\int_0^a du (u-2a) \left\{ \frac{E_3(\Sigma \sqrt{u^2+c^2})}{u^2+c^2} - \frac{E_3(\Sigma \sqrt{u^2+b^2+c^2})}{u^2+b^2+c^2} \right\} \right. \\
 & + \int_0^b dv (v-2b) \left\{ \frac{E_3(\Sigma \sqrt{v^2+c^2})}{v^2+c^2} - \frac{E_3(\Sigma \sqrt{a^2+v^2+c^2})}{a^2+v^2+c^2} \right\} \\
 & \left. + ab \int_0^a \frac{du}{u^2+b^2} \frac{2b}{c^2} \left\{ \frac{E_3(\Sigma c)}{c^2} - \frac{E_3(\Sigma \sqrt{u^2+b^2+c^2})}{u^2+b^2+c^2} \right\} \right. \\
 & \left. + ab \int_0^b \frac{dv}{a^2+v^2} \frac{2a}{c^2} \left\{ \frac{E_3(\Sigma c)}{c^2} - \frac{E_3(\Sigma \sqrt{a^2+v^2+c^2})}{a^2+v^2+c^2} \right\} \right] \quad (A.5)
 \end{aligned}$$

Nous développons maintenant cette probabilité comme fonction de la section efficace totale Σ . Ce développement (en série de Taylor) s'avère très utile dans les cas où la section totale est nulle (hexaèdre vide), mais peut aussi être utilisé pour une section de faible amplitude. Nous recherchons donc les coefficients $B_{cc,m}$ de l'expression:

$$\pi S_c P_{cc} = \sum_{m \geq 0} B_{cc,m} \Sigma^m$$

En nous servant du développement de la fonction exponentielle-intégrale E_3 au voisinage de zéro [29]:

$$E_3(t) = \sum_{m=2} \frac{(-t)^m}{m!(2-m)} + \frac{t^2}{2} [3/2 - \gamma - \ln(t)]$$

(où $\gamma = 0,557215665\dots$ est la constante d'Euler), il est facile d'obtenir l'expression des coefficients $B_{cc,m}$:

$$B_{cc,m} = \frac{2c^2(-1)^m}{m!(2-m)} \left[\int_0^a du (u-2a) \{ (u^2+c^2)^{m/2-1} - (u^2+b^2+c^2)^{m/2-1} \} \right. \\ (m=2) \quad \left. + \int_0^b dv (v-2b) \{ (v^2+c^2)^{m/2-1} - (a^2+v^2+c^2)^{m/2-1} \} \right. \\ \left. + ab \int_0^a \frac{du}{u^2+b^2} 2b \{ (c^2)^{m/2-1} - (u^2+b^2+c^2)^{m/2-1} \} \right. \\ \left. + ab \int_0^b \frac{dv}{a^2+v^2} 2a \{ (c^2)^{m/2-1} - (a^2+v^2+c^2)^{m/2-1} \} \right]$$

(A.6)

$$\begin{aligned}
B_{cc,2} = & -\frac{c^2}{2} \left[\int_0^a du (u-2a) \{ \ln(u^2+c^2) - \ln(u^2+b^2+c^2) \} \right. \\
& + \int_0^b dv (v-2b) \{ \ln(v^2+c^2) - \ln(a^2+v^2+c^2) \} \\
& + ab \int_0^a \frac{du}{u^2+b^2} 2b \{ \ln(c^2) - \ln(u^2+b^2+c^2) \} \\
& \left. + ab \int_0^b \frac{dv}{a^2+v^2} 2a \{ \ln(c^2) - \ln(a^2+v^2+c^2) \} \right]
\end{aligned}$$

Dans le cas où $m=2$, le coefficient du développement fait plutôt intervenir des fonctions logarithmiques; dans tous les autres cas, nous retrouvons des expressions rationnelles. Des réductions analytiques ont été effectuées pour les valeurs de $m=0$ et 1 ; ce sont les valeurs les plus utilisées. Ces réductions permettent des formulations analytiques de ces coefficients:

$$\begin{aligned}
B_{cc,0} = & c^2 \{ \ln(a^2+c^2) + \ln(b^2+c^2) - \ln(a^2+b^2+c^2) - \ln(c^2) \} \\
& + 2a (b^2+c^2)^{1/2} \arctan(a (b^2+c^2)^{-1/2}) \\
& + 2b (a^2+c^2)^{1/2} \arctan(b (a^2+c^2)^{-1/2}) \\
& - 2ac \arctan(a / c) - 2bc \arctan(b / c)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B_{cc,1} = & -2c^2 [2a \ln(a + (a^2+b^2+c^2)^{1/2}) + 2a \ln(c) \\
& - 2a \ln(a + (a^2+c^2)^{1/2}) - 2a \ln((b^2+c^2)^{1/2}) \\
& + b \ln(b + (a^2+b^2+c^2)^{1/2}) + b \ln(b + (b^2+c^2)^{1/2}) \\
& - b \ln((a^2+b^2+c^2)^{1/2} - b) - b \ln((b^2+c^2)^{1/2} - b) \\
& + (b^2+c^2)^{1/2} + (a^2+c^2)^{1/2} - (a^2+b^2+c^2)^{1/2} - c] \\
& - 4abc \arctan((ab) / (c (a^2+b^2+c^2)^{1/2}))
\end{aligned}$$

La réduction analytique de toutes les intégrales du terme d'ordre 2 n'a pas été possible.

2. Transmission entre deux surfaces perpendiculaires.

Calculons maintenant la probabilité de transmission entre deux surfaces perpendiculaires de l'hexaèdre:

$$\pi S_c P_{ca} = \int_{S_c} d^2r'_s \int_{S_a} d^2r_s (\Omega \cdot N_-) (\Omega \cdot N_+) \frac{\exp(-\Sigma s)}{s^2}$$

Décrivons les surfaces de départ et d'arrivée par un système de coordonnées cartésiennes:

$$d^2r'_s = dx' dy' \quad d^2r_s = dx dy$$

$$s^2 = x'^2 + (y-y')^2 + z^2$$

$$\Omega.N^- = \frac{z}{s} \quad \Omega.N^+ = \frac{x'}{s}$$

L'expression de cette probabilité devient alors:

$$\pi S_c P_{ca} = \int_0^a dx' x' \int_0^b dy \int_0^b dy' \int_0^c dz z \frac{\exp(-\Sigma s)}{s^4}$$

L'intégration analytique dans la variable z est encore une fois de la forme (A.3). Il est maintenant possible de réduire cette intégrale quadruple par les changements de variables:

$$v = (y-y') \quad v' = (y+y')$$

et par l'intégration analytique des variables z et v' , l'intégrale devient double et de la forme:

$$\pi S_c P_{ca} = 2 \int_0^a du u \int_0^b dv (b-v) \left\{ \frac{E_3(\Sigma \sqrt{u^2+v^2})}{u^2+v^2} - \frac{E_3(\Sigma \sqrt{u^2+v^2+c^2})}{u^2+v^2+c^2} \right\}$$

Il nous faut maintenant introduire un système de coordonnées polaires:

$$\begin{aligned} u &= r \cos \theta & v &= r \sin \theta \\ du dv &= r dr d\theta & u^2 + v^2 &= r^2 \end{aligned}$$

La probabilité de transmission devient alors:

$$\pi S_c P_{ca} = 2 \int dr r \left\{ \frac{E_3(\Sigma r)}{r^2} - \frac{E_3(\Sigma \sqrt{r^2+c^2})}{r^2+c^2} \right\} \int d\theta r \cos \theta (b-r \sin \theta)$$

Les bornes d'intégration sont disposées de la même manière qu'en (A.4). Après intégration selon la variable angulaire et quelques manipulations algébriques, nous obtenons:

$$\begin{aligned}
\pi S_c P_{ca} &= \int_0^b dr (2b-r) r^2 \left\{ \frac{E_3(\Sigma r)}{r^2} - \frac{E_3(\Sigma \sqrt{r^2+c^2})}{r^2+c^2} \right\} \\
&\quad - \int_a^{\sqrt{a^2+b^2}} dr r (2b \sqrt{r^2+a^2} - r^2) \left\{ \frac{E_3(\Sigma r)}{r^2} - \frac{E_3(\Sigma \sqrt{r^2+c^2})}{r^2+c^2} \right\} \\
&\quad - a^2 \int_a^{\sqrt{a^2+b^2}} dr r \left\{ \frac{E_3(\Sigma r)}{r^2} - \frac{E_3(\Sigma \sqrt{r^2+c^2})}{r^2+c^2} \right\} \\
&\quad - b^2 \int_b^{\sqrt{a^2+b^2}} dr r \left\{ \frac{E_3(\Sigma r)}{r^2} - \frac{E_3(\Sigma \sqrt{r^2+c^2})}{r^2+c^2} \right\}
\end{aligned}$$

Les changements de variables suivants:

$$v^2 = r^2 - a^2 \quad u^2 = r^2 - b^2$$

nous permettent de réécrire l'expression de la probabilité de transmission sous une forme plus facile à manipuler:

$$\begin{aligned}
\pi S_c P_{ca} = & \int_0^b dv (2b-v) v^2 \left\{ \frac{E_3(\Sigma v)}{v^2} + \frac{E_3(\Sigma \sqrt{a^2+v^2+c^2})}{a^2+v^2+c^2} \right. \\
& \left. - \frac{E_3(\Sigma \sqrt{v^2+c^2})}{v^2+c^2} - \frac{E_3(\Sigma \sqrt{a^2+v^2})}{a^2+v^2} \right\} \\
& + \int_0^a du u b^2 \left\{ \frac{E_3(\Sigma \sqrt{u^2+c^2})}{u^2+c^2} - \frac{E_3(\Sigma \sqrt{u^2+b^2+c^2})}{u^2+b^2+c^2} \right\}
\end{aligned} \tag{A.7}$$

En interchangeant simplement le rôle des lettres a et b, il est possible de déduire la probabilité de transmission vers l'autre surface perpendiculaire qui devient alors:

$$\begin{aligned}
\pi S_c P_{cb} = & \int_0^a du (2a-u) u^2 \left\{ \frac{E_3(\Sigma u)}{u^2} + \frac{E_3(\Sigma \sqrt{u^2+b^2+c^2})}{u^2+b^2+c^2} \right. \\
& \left. - \frac{E_3(\Sigma \sqrt{u^2+c^2})}{u^2+c^2} - \frac{E_3(\Sigma \sqrt{u^2+b^2})}{u^2+b^2} \right\} \\
& + \int_0^b dv v a^2 \left\{ \frac{E_3(\Sigma \sqrt{a^2+v^2})}{a^2+v^2} - \frac{E_3(\Sigma \sqrt{a^2+v^2+c^2})}{a^2+v^2+c^2} \right\}
\end{aligned} \tag{A.8}$$

Développons maintenant ces probabilités comme fonction de la

section efficace totale Σ , comme nous l'avons précédemment fait pour la probabilité de transmission entre deux surfaces parallèles. Nous recherchons les coefficients $B_{ca,m}$ de l'expression:

$$\pi S_c P_{ca} = \sum_{m \geq 0} B_{ca,m} \Sigma^m$$

En nous servant du développement à l'origine de la fonction exponentielle-intégrale E_3 , il est facile d'obtenir, comme précédemment, l'expression générale pour les coefficients $B_{ca,m}$:

$$B_{ca,m} = \frac{(-1)^m}{m!(2-m)} \left[\int_0^b dv (2b-v)v^2 \left\{ (v^2)^{m/2-1} + (a^2+v^2+c^2)^{m/2-1} \right. \right. \\ \left. \left. - (a^2+v^2)^{m/2-1} - (v^2+c^2)^{m/2-1} \right\} \right. \\ (m=2) \quad \left. + \int_0^a du u b^2 \left\{ (u^2+b^2)^{m/2-1} - (u^2+b^2+c^2)^{m/2-1} \right\} \right]$$

(A.9)

$$B_{ca,2} = \frac{-1}{4} \left[\int_0^b dv (2b-v)v^2 \left\{ \ln(v^2) + \ln(a^2+v^2+c^2) \right. \right. \\ \left. \left. - \ln(a^2+v^2) - \ln(v^2+c^2) \right\} \right. \\ \left. + \int_0^a du u b^2 \left\{ \ln(u^2+b^2) - \ln(u^2+b^2+c^2) \right\} \right]$$

Des réductions analytiques ont été effectuées pour les valeurs de $m= 0, 1$.

Les formulations analytiques pour ces premiers coefficients sont:

$$\begin{aligned}
 B_{ca,0} = \frac{1}{4} [& (a^2+c^2-b^2) \ln(a^2+b^2+c^2) - (a^2+c^2) \ln(a^2+c^2) \\
 & + (b^2-a^2) \ln(a^2+b^2) + (b^2-c^2) \ln(b^2+c^2) \\
 & + a^2 \ln(a^2) + b^2 \ln(b^2) - c^2 \ln(c^2)] \\
 & + a b \arctan(b/a) + bc \arctan(b/c) \\
 & - b (a^2+c^2)^{1/2} \arctan(b (a^2+c^2)^{-1/2})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 B_{ca,1} = -1 [& a^2 b \ln(b+(a^2+b^2)^{1/2}) + c^2 b \ln(b+(b^2+c^2)^{1/2}) \\
 & - (a^2+c^2) b \ln(b+(a^2+b^2+c^2)^{1/2}) \\
 & - a^2 b \ln(a) - c^2 b \ln(c) \\
 & + (a^2+c^2) b \ln((a^2+c^2)^{1/2}) \\
 & + 2/3 a^3 + 2/3 c^3 - 2/3 b^3 - 2/3 (a^2+c^2)^{3/2} \\
 & + ((b^2-2a^2)/3) (a^2+b^2)^{1/2} + ((b^2-2c^2)/3) (b^2+c^2)^{1/2} \\
 & - ((b^2-2a^2-2c^2)/3) (a^2+b^2+c^2)^{1/2}]
 \end{aligned}$$

La réduction analytique du terme d'ordre 2 est aussi possible, mais n'est pas présentée ici.

3. Autres probabilités (fuite et première collision).

Les autres probabilités de transmission, ainsi que les termes de leurs développements respectifs, sont déduites à partir des expressions (A.5) à (A.9) en interchangeant les indices a, b et c qui désignent les arêtes. En nous servant des lois de réciprocité et de conservation énoncées en (A.1) et (A.2), il est aussi possible de retrouver l'expression des trois probabilités de fuite et de la probabilité de première collision.

En nous servant de ces relations et des séries de Taylor présentées aux sections précédentes, les développements suivants sont déduits pour les probabilités de fuite:

$$\pi S_a P_{a\bullet} = 4 \pi V P_{\bullet a} = (-1) \sum_{m \geq 0} [B_{aa,m+1} + 2B_{ab,m+1} + 2B_{ac,m+1}] \Sigma^m$$

$$\pi S_b P_{b\bullet} = 4 \pi V P_{\bullet b} = (-1) \sum_{m \geq 0} [2B_{ba,m+1} + B_{bb,m+1} + 2B_{bc,m+1}] \Sigma^m$$

$$\pi S_c P_{c\bullet} = 4 \pi V P_{\bullet c} = (-1) \sum_{m \geq 0} [2B_{ca,m+1} + 2B_{cb,m+1} + B_{cc,m+1}] \Sigma^m$$

La probabilité de première collision peut aussi être développée en série en nous servant de la dernière des relations de conservation (A.1):

$$\begin{aligned}
4\pi V p_{\bullet\bullet} &= \sum_{m \geq 0} [2B_{aa,m+2} + 4B_{ab,m+2} + 4B_{ac,m+2} \\
&\quad 4B_{ba,m+2} + 2B_{bb,m+2} + 4B_{bc,m+2} \\
&\quad 4B_{ca,m+2} + 4B_{cb,m+2} + 2B_{cc,m+2}] \Sigma^m \\
&= \sum_{m \geq 0} [2B_{aa,m+2} + 2B_{bb,m+2} + 2B_{cc,m+2} \\
&\quad 8B_{ab,m+2} + 8B_{ac,m+2} + 8B_{bc,m+2}] \Sigma^m
\end{aligned}$$

Dans le cas d'un hexaèdre vide, ces probabilités sont aisément calculables, et nous donnons ici les expressions obtenues en posant $\Sigma=0$ pour toutes les probabilités:

$$\pi S_a P_{aa} = B_{aa,0} \quad \pi S_b P_{bb} = B_{bb,0} \quad \pi S_c P_{cc} = B_{cc,0}$$

$$\pi S_a P_{ab} = \pi S_b P_{ba} = B_{ab,0} = B_{ba,0}$$

$$\pi S_a P_{ac} = \pi S_c P_{ca} = B_{ac,0} = B_{ca,0}$$

$$\pi S_b P_{bc} = \pi S_c P_{cb} = B_{bc,0} = B_{cb,0}$$

$$\pi S_a P_{a\bullet} = 4 \pi V P_{\bullet a} = B_{aa,1} + 2B_{ab,1} + 2B_{ac,1}$$

$$\pi S_b P_{b\bullet} = 4 \pi V P_{\bullet b} = 2B_{ba,1} + B_{bb,1} + 2B_{bc,1}$$

$$\pi S_a P_{a\bullet} = 4 \pi V P_{\bullet a} = 2B_{ca,1} + 2B_{cb,1} + B_{cc,1}$$

$$\begin{aligned}
 4\pi V p_{..} &= 2B_{aa,2} + 4B_{ab,2} + 4B_{ac,2} \\
 &\quad 4B_{ba,2} + 2B_{bb,2} + 4B_{bc,2} \\
 &\quad 4B_{ca,2} + 4B_{cb,2} + 2B_{cc,2} \\
 &= 2B_{aa,2} + 2B_{bb,2} + 2B_{cc,2} + 8B_{ab,2} + 8B_{ac,2} + 8B_{bc,2}
 \end{aligned}$$

Les termes d'ordre supérieur ($m= 3, 4 \dots$) peuvent servir principalement pour évaluer les probabilités lorsque la section efficace Σ est très près de zéro.

A.2 Réductions analytiques pour un cylindre troué.

Dans cette section, nous examinons le calcul des probabilités de transmission et de fuite dans le cas d'un cylindre troué, homogène et de section efficace Σ . Cette structure géométrique permet de modéliser adéquatement certaines cellules présentes dans un réacteur CANDU; un assemblage de tels cylindres peut être utilisé notamment pour résoudre l'équation de transport des neutrons dans un crayon ou même dans une grappe de combustible.

Considérons donc un cylindre troué de hauteur h , et de rayons a (rayon intérieur) et A (rayon extérieur). Ce cylindre possède trois faces distinctes, et la mesure de ces faces, ainsi que du volume, est donnée par (voir figure A.3):

$$V = \pi (A^2 - a^2) h$$

$$S_h = \pi (A^2 - a^2) \quad S_a = 2 \pi a h \quad S_A = 2 \pi A h$$

La frontière du cylindre se décompose donc en quatre surfaces:

$$\partial V = S_a + S_A + 2 \times S_h$$

Encore une fois, nous ne distinguons pas les deux surfaces planes parallèles, et P_{hh} désigne la probabilité de transmission entre les surfaces parallèles si-

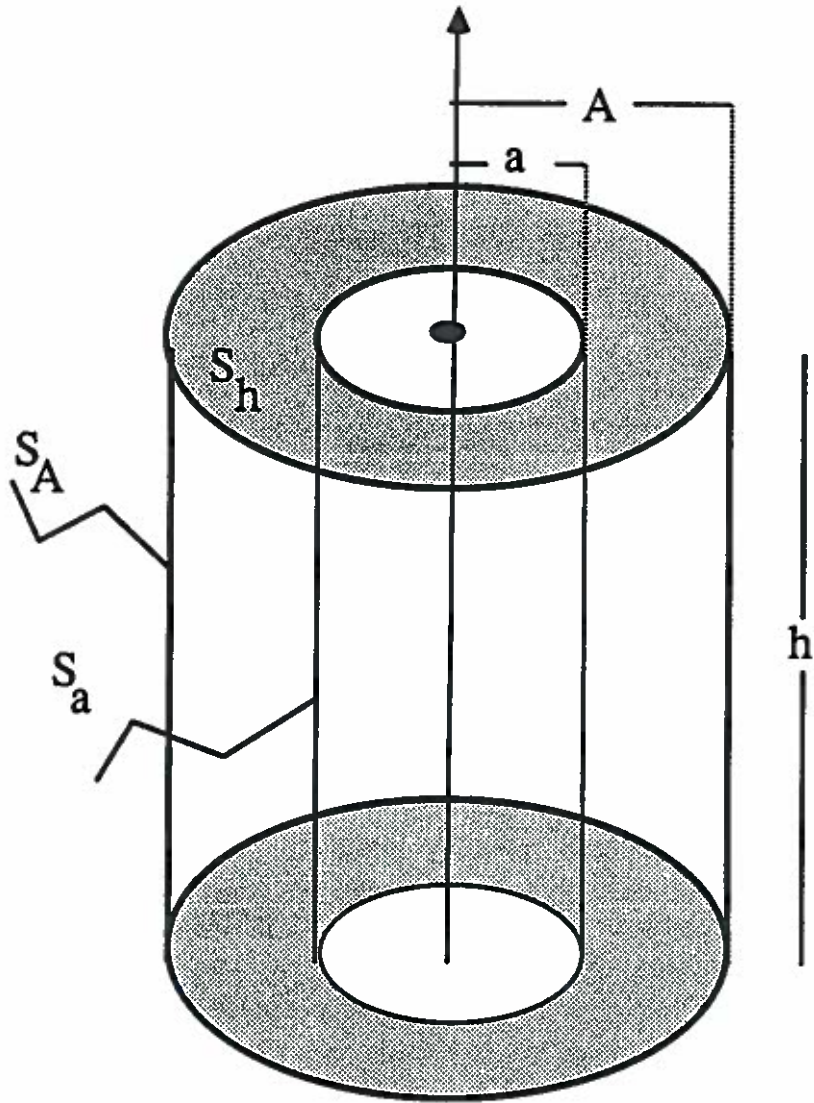


Figure A.3. Cylindre troué homogène.

tuées aux extrémités du cylindre. Le symbole \bullet désigne le volume, ainsi $P_{\bullet h}$ indique la probabilité de fuite par une surface S_h .

Voyons comment les relations de conservation et de réciprocité des probabilités de collision nous permettent de réduire le nombre de probabilités qui apparaissent dans l'équation de transport dans le cas d'un domaine cylindrique. Les relations de conservation se traduisent par:

$$\begin{aligned} P_{hh} + P_{ha} + P_{hA} + P_{h\bullet} &= 1 \\ 2P_{ah} + P_{aa} + P_{aA} + P_{a\bullet} &= 1 \\ 2P_{Ah} + P_{Aa} + P_{AA} + P_{A\bullet} &= 1 \end{aligned} \tag{A.10}$$

$$2P_{\bullet h} + P_{\bullet a} + P_{\bullet A} + P_{\bullet\bullet} = 1$$

S'ajoutent à ces quatre relations les lois de réciprocité:

$$\begin{aligned} 4 \sum V P_{\bullet h} &= S_h P_{h\bullet} \\ 4 \sum V P_{\bullet a} &= S_a P_{a\bullet} \\ 4 \sum V P_{\bullet A} &= S_A P_{A\bullet} \end{aligned} \tag{A.11}$$

$$S_h P_{ha} = S_a P_{ah}$$

$$S_h P_{hA} = S_A P_{Ah}$$

$$S_a P_{aA} = S_A P_{Aa}$$

Nous remarquons que la transmission entre la surface cylindrique interne et elle-même est impossible ($P_{aa} = 0$). Pour résoudre le système présenté ci-haut, le calcul de cinq probabilités s'avère suffisant. Nous avons choisi de présenter les réductions pour P_{hh} , $P_{\bullet h}$, P_{ha} , $P_{\bullet a}$ et $P_{\bullet A}$. Les probabilités de transmission manquantes ainsi que la probabilité de première collision se déterminent ensuite aisément avec (A. 10) et (A. 11).

En nous servant de ces relations et de développements en séries de Taylor, il est possible de retrouver les expressions de ces probabilités dans le cas d'un cylindre vide, ce qui ne sera pas présenté ici.

1. Transmission entre les surfaces de bout.

Calculons dans un premier temps la probabilité de transmission entre la surface située à une extrémité du cylindre et la surface qui lui est directement opposée de l'autre côté du cylindre:

$$\pi S_h P_{hh} = \int_{S_h} d^2r'_s \int_{S_h} d^2r_s (\Omega \cdot N_-) (\Omega \cdot N_+) \frac{\exp(-\Sigma s)}{s^2}$$

Décrivons d'abord les surfaces de départ et d'arrivée par un système de coordonnées cylindriques:

$$d^2r'_s = r dr d\theta \quad d^2r_s = \rho d\rho d\varphi$$

$$s^2 = r^2 + \rho^2 - 2r\rho \cos \alpha + h^2 \quad \text{où } \alpha = \theta - \varphi$$

$$\Omega \cdot N_- = \Omega \cdot N_+ = \frac{h}{s}$$

Après une rotation, il est possible d'intégrer selon une direction angulaire de sorte que l'expression de cette probabilité devient:

$$\pi S_h P_{hh} = 2 \pi h^2 \int r dr \int \rho d\rho \int d\alpha \frac{\exp(-\Sigma s)}{s^4}$$

Il est maintenant possible de simplifier cette intégrale triple par le changement de variables (voir figure A.4):

$$\rho d\rho d\alpha = t dt d\beta$$

où t représente la projection du parcours optique dans le plan des surfaces.

Par rapport aux nouvelles variables, l'expression devient:

$$\pi S_h P_{hh} = 2 \pi h^2 \int dr r \int d\beta \int dt t \frac{\exp(-\Sigma R)}{R^4}$$

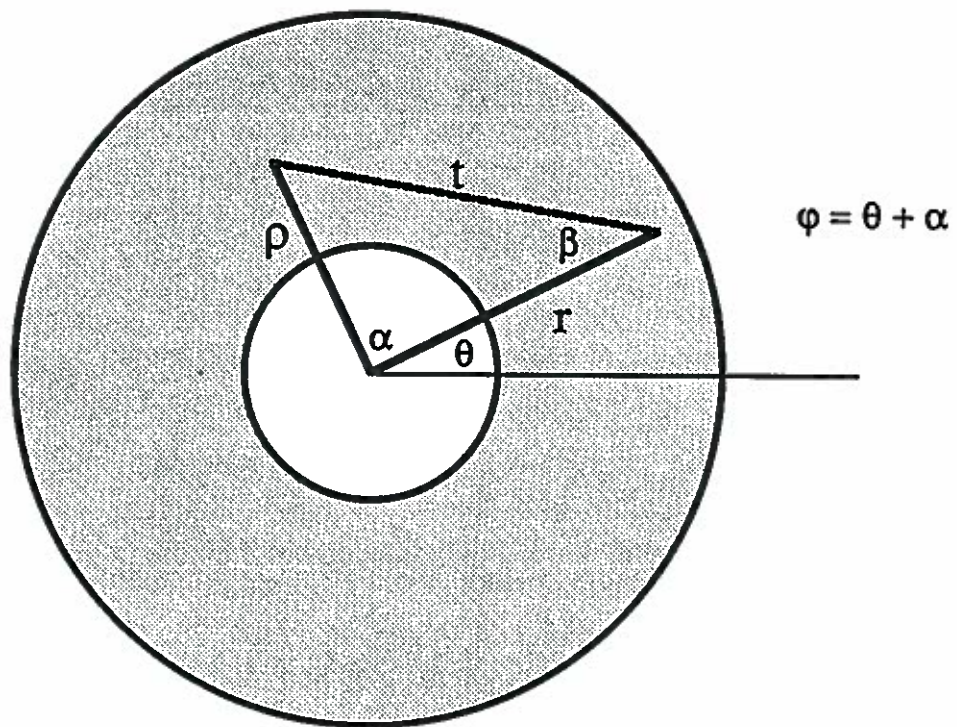


Figure A.4. Projection sur la surface de bout.

avec $R^2 = t^2 + h^2$. Nous voyons que la dernière intégration en t est de la forme (A.3) et il nous suffit de décrire les autres intégrales.

Introduisons un système de coordonnées cartésiennes suivant l'axe de la trace sur le plan du parcours optique. Dans ces coordonnées, la variable x représente la distance minimale de la trace à l'axe du cylindre (voir figure A.5). Le changement des coordonnées s'exprime selon

$$r dr d\beta = dx dy_t$$

et l'intégrale sur la variable y_t peut être effectuée directement:

$$\begin{aligned} \pi S_h P_{hh} &= 2 \pi h^2 \int dx \int dt t \frac{\exp(-\Sigma R)}{R^4} \int dy_t \\ &= 2 \pi h^2 \int dx \int_0^{t_{\max}} dt t \frac{\exp(-\Sigma R) \{ t_{\max} - t \}}{R^4} \end{aligned}$$

Après une intégration par parties, nous retrouvons une expression faisant réapparaître la fonction E_3 définie à la section précédente:

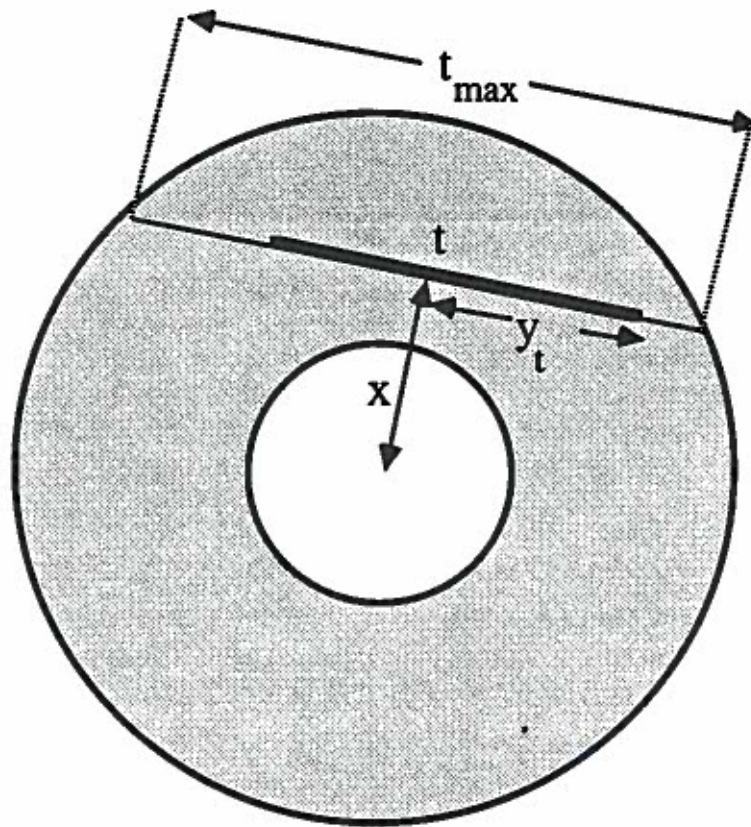


Figure A.5. Coordonnées cartésiennes sur l'anneau.

$$\begin{aligned} \pi S_h P_{hh} &= 2 \pi h^2 \int dx \int_0^{t_{\max}} dt \left\{ \frac{E_3(\Sigma h)}{h^2} - \frac{E_3(\Sigma \sqrt{t^2+h^2})}{t^2+h^2} \right\} \\ &= 2 \pi h^2 \int_0^{t_{\max}} dt \left\{ \frac{E_3(\Sigma h)}{h^2} - \frac{E_3(\Sigma \sqrt{t^2+h^2})}{t^2+h^2} \right\} \int dx_t \end{aligned}$$

Nous avons interchangé les variables d'intégration car x dépend maintenant de t .

Il suffit maintenant de faire un décompte de la variation de x en fonction de t . Ce décompte peut être obtenu en considérant deux zones de variation de t (voir figure A.6):

ZONE II:

$$\forall t \in [0, (4A^2-4a^2)^{1/2}] \quad \int dx_t = (4A^2-t^2)^{1/2} - 2a$$

ZONE I:

(A.12)

$$\forall t \in [0, A-a] \quad \int dx_t = 4a$$

$$\forall t \in [A-a, (A^2-a^2)^{1/2}] \quad \int dx_t = 4a - \frac{2[4A^2a^2 - (A^2+a^2-t^2)^2]^{1/2}}{t}$$

En combinant toutes ces évaluations, il est possible d'exprimer la probabilité initiale sous la forme:

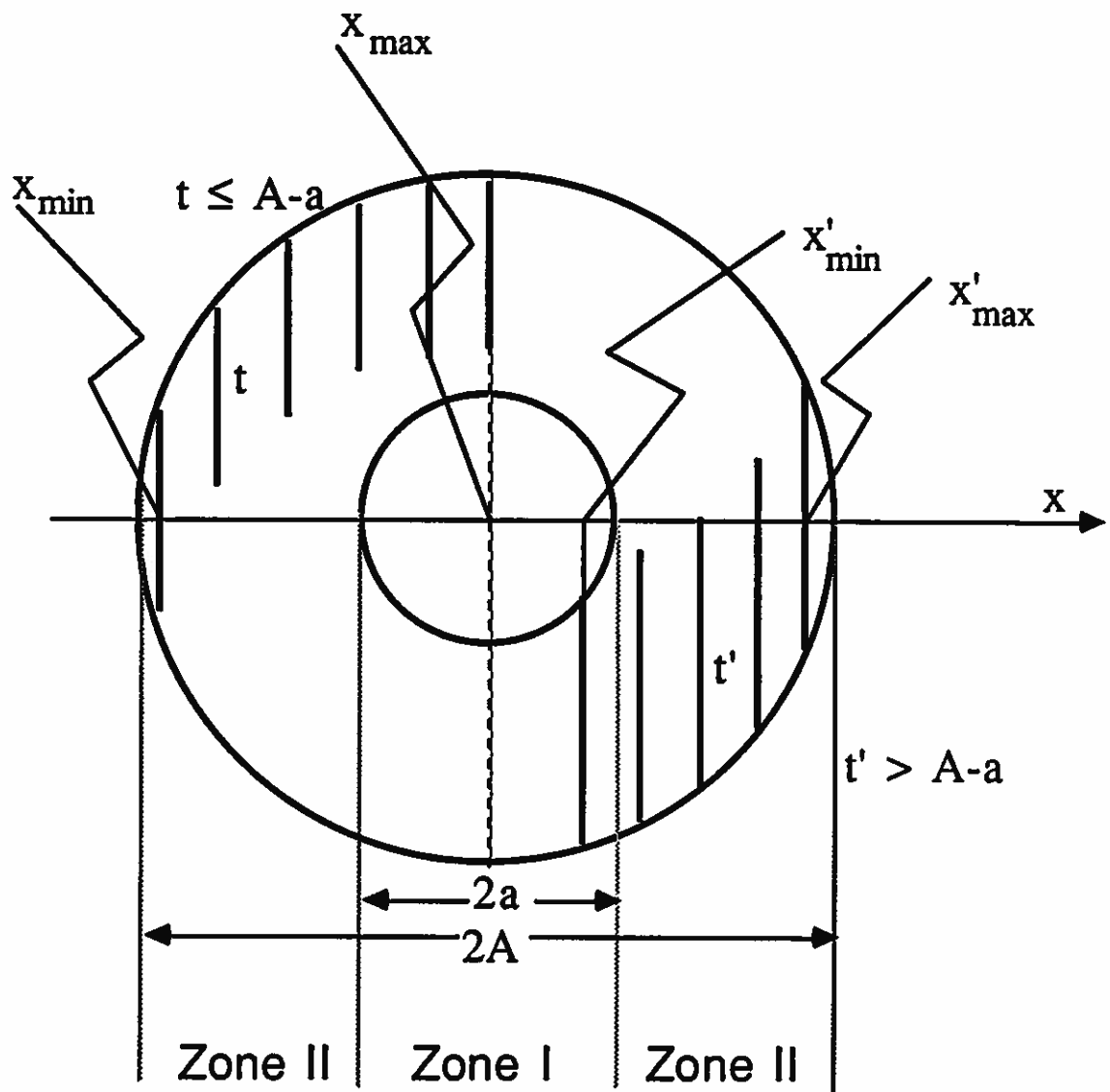


Figure A.6. Variations de la distance à l'axe.

$$\begin{aligned}
\pi S_h P_{hh} = & 2 \pi h^2 \left[\int_0^{\sqrt{4A^2-4a^2}} dt \left\{ \frac{E_3(\Sigma h)}{h^2} - \frac{E_3(\Sigma \sqrt{t^2+h^2})}{t^2+h^2} \right\} \{ \sqrt{4A^2-t^2} - 2a \} \right. \\
& + 2 \int_0^{\sqrt{A^2-a^2}} dt \left\{ \frac{E_3(\Sigma h)}{h^2} - \frac{E_3(\Sigma \sqrt{t^2+h^2})}{t^2+h^2} \right\} \{ 2a \} \quad (A.13) \\
& \left. - 2 \int_{A-a}^{\sqrt{A^2-a^2}} dt \left\{ \frac{E_3(\Sigma h)}{h^2} - \frac{E_3(\Sigma \sqrt{t^2+h^2})}{t^2+h^2} \right\} \{ 4A^2a^2 - (A^2+a^2-t^2)^2 \}^{1/2} \right]
\end{aligned}$$

2. Fuite par les surfaces de bout.

Calculons maintenant la probabilité de fuite par une surface située à une extrémité du cylindre:

$$4\pi V P_{\bullet h} = \int_V d^3r' \int_{S_h} d^2r_s (\Omega \cdot \mathbf{N}_+) \frac{\exp(-\Sigma s)}{s^2}$$

Décrivons le volume et la surface d'arrivée par un système de coordonnées cylindriques:

$$d^3r' = r dr d\theta dz \quad d^2r_s = \rho d\rho d\varphi$$

$$s^2 = r^2 + \rho^2 - 2r\rho \cos \alpha + z^2 \quad \text{où } \alpha = \theta - \varphi$$

$$\Omega \cdot \mathbf{N}_+ = \frac{z}{s}$$

Après une rotation, intégrons selon une direction angulaire de sorte que l'expression de cette probabilité devienne:

$$4\pi V P_{\bullet h} = 2\pi \int r dr \int \rho d\rho \int d\alpha \int z dz \frac{\exp(-\Sigma s)}{s^3}$$

Il est maintenant possible de réduire cette intégrale quadruple par le changement de variables (voir figure A.4):

$$\rho d\rho d\alpha = t dt d\beta$$

où t représente la projection du parcours optique dans le plan des surfaces.

Par rapport aux nouvelles variables, l'expression devient:

$$4\pi V P_{\bullet h} = 2\pi \int dr r \int d\beta \int dt t \left\{ \frac{E_2(\Sigma t)}{t} - \frac{E_2(\Sigma \sqrt{t^2+h^2})}{\sqrt{t^2+h^2}} \right\}$$

où nous avons introduit, pour simplifier les notations, la fonction E_2 , appelée exponentielle-intégrale de degré 2 et définie par:

$$E_2(t) = \int_0^1 \exp(-t/v) dv \quad \text{pour } t \geq 0.$$

Introduisons maintenant, comme lors du calcul de la probabilité de transmission précédente, un système de coordonnées cartésiennes suivant

l'axe de la trace sur le plan du parcours optique. Dans ces coordonnées, la variable x représente la distance de la trace à l'axe du cylindre (voir figure A.5). Le changement des coordonnées s'exprime selon:

$$r dr d\beta = dx dy_t$$

et nous obtenons:

$$\begin{aligned} 4\pi V P_{\bullet h} &= 2\pi \int dx \int dt t \left\{ \frac{E_2(\Sigma t) - E_2(\Sigma \sqrt{t^2 + h^2})}{t \sqrt{t^2 + h^2}} \right\} \int dy_t \\ &= 2\pi \int dx \int_0^{t_{\max}} dt t \left\{ \frac{E_2(\Sigma t) - E_2(\Sigma \sqrt{t^2 + h^2})}{t \sqrt{t^2 + h^2}} \right\} (t_{\max} - t) \end{aligned}$$

Après intégration par parties, nous retrouvons une expression faisant réapparaître la fonction exponentielle-intégrale E_3 définie à la section précédente:

$$\begin{aligned} 4\pi V P_{\bullet h} &= 2\pi \int dx \int_0^{t_{\max}} dt \{ E_3(0) - E_3(\Sigma h) - E_3(\Sigma t) - E_3(\Sigma \sqrt{t^2 + h^2}) \} \\ &= 2\pi \int_0^{t_{\max}} dt \{ E_3(0) - E_3(\Sigma h) - E_3(\Sigma t) - E_3(\Sigma \sqrt{t^2 + h^2}) \} \int dx_t \end{aligned}$$

Le décompte de la variation de x en fonction de t a déjà été décrit par les équations (A.12) et, en combinant toutes ces évaluations, il est possi-

ble d'exprimer la probabilité $P_{\bullet h}$ sous la forme:

$$4\pi V P_{\bullet h} = 2\pi \times [$$

$$\int_0^{\sqrt{4A^2-4a^2}} dt \{ E_3(0) - E_3(\Sigma h) - E_3(\Sigma t) - E_3(\Sigma \sqrt{t^2+h^2}) \} \{ \sqrt{4A^2-t^2} - 2a \}$$

$$+ 2 \int_0^{\sqrt{A^2-a^2}} dt \{ E_3(0) - E_3(\Sigma h) - E_3(\Sigma t) - E_3(\Sigma \sqrt{t^2+h^2}) \} \{ 2a \} \quad (A.14)$$

$$- 2 \int_{A-a}^{\sqrt{A^2-a^2}} dt \{ E_3(0) - E_3(\Sigma h) - E_3(\Sigma t) - E_3(\Sigma \sqrt{t^2+h^2}) \} \left\{ \frac{4A^2a^2 - (A^2+a^2-t^2)^2}{t} \right\}^{1/2}]$$

3. Transmission entre surface de bout et surface interne.

Calculons maintenant la probabilité de transmission entre une surface de bout et la surface cylindrique interne:

$$\pi S_h P_{ha} = \int_{S_h} d^2r'_s \int_{S_a} d^2r_s (\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{N}_-) (\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{N}_+) \frac{\exp(-\Sigma s)}{s^2}$$

Décrivons encore les surfaces de départ et d'arrivée par un système de coordonnées cylindriques (voir figure A.7):

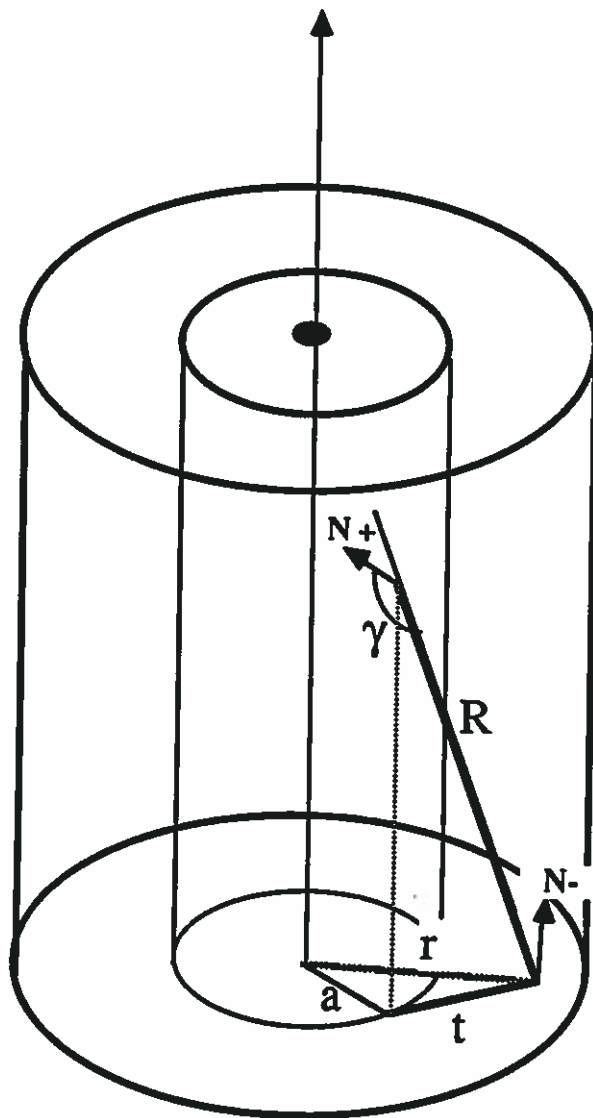


Figure A.7. Transmission à la surface interne.

$$d^2r'_s = r dr d\theta \quad d^2r_s = a dz d\varphi$$

$$s^2 = r^2 + a^2 - 2ra \cos \alpha + z^2 \quad \text{où } \alpha = \theta - \varphi$$

$$\Omega \cdot N_- = \frac{z}{s} \quad \Omega \cdot N_+ = \cos \gamma$$

Après une rotation, intégrons selon une direction angulaire de sorte que l'expression de cette probabilité devienne:

$$\pi S_h P_{ha} = 2\pi a \int r dr \int d\alpha \int z dz \frac{\cos \gamma \exp(-\Sigma s)}{s^3}$$

Nous réduisons cette intégrale triple par le changement de variables (voir figure A.8):

$$r dr d\alpha = t dt d\beta \quad \text{où } \cos \gamma = \frac{t \cos(\pi - \beta)}{s} = \frac{-t \cos(\beta)}{s}$$

où t représente la projection du parcours optique sur la surface de bout.

Par rapport aux nouvelles variables, l'expression devient:

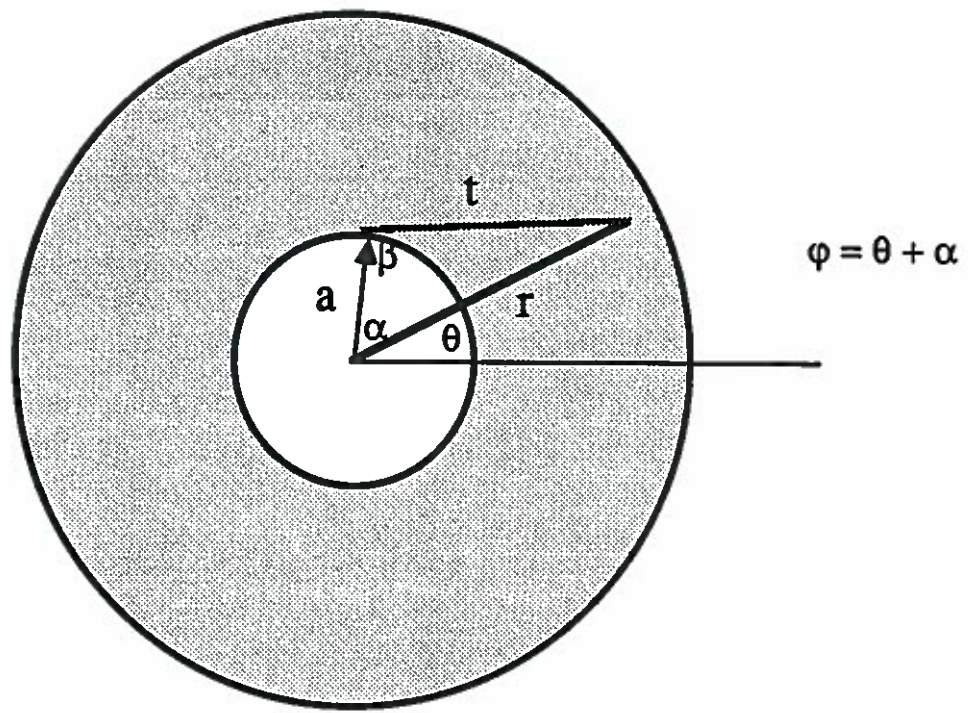


Figure A.8. Projection sur la surface de bout
(transmission par la surface interne).

$$\pi S_h P_{ha} = -2\pi a \int dt t^2 \int d\beta \cos \beta \int_0^h dz z \frac{\exp(-\Sigma R)}{R^4}$$

avec $R^2 = t^2 + r^2$. Effectuons analytiquement la dernière intégrale en utilisant (A. 12):

$$\pi S_h P_{ha} = -2\pi a \int dt t^2 \int d\beta \cos \beta \left\{ \frac{E_3(\Sigma h)}{h^2} - \frac{E_3(\Sigma \sqrt{t^2+h^2})}{t^2+h^2} \right\}$$

et l'intégrale angulaire (pour $\beta \leq \pi$) se traite en deux étapes:

$$\begin{aligned} \forall t \in [0, A-a] \quad \beta \in [\pi/2, \pi] \\ \int d\beta \cos \beta = -1 \end{aligned} \quad (A. 15)$$

$$\begin{aligned} \forall t \in [A-a, \sqrt{A^2-a^2}] \quad \beta \in [\pi/2, \arccos((a^2-A^2+t^2)/2at)] \\ \int d\beta \cos \beta = \frac{\{4A^2a^2-(A^2+a^2-t^2)^2\}^{1/2} - 1}{2at} \end{aligned}$$

En combinant toutes ces évaluations, nous exprimons la probabilité P_{ha} sous la forme:

$$\begin{aligned}
\pi S_h P_{ha} = & \pi \left[2 \int_0^{\sqrt{A^2-a^2}} dt t^2 \left\{ \frac{E_3(\Sigma h)}{h^2} - \frac{E_3(\Sigma \sqrt{t^2+h^2})}{t^2+h^2} \right\} \{ 2a \} \right. \\
& \left. - 2 \int_{A-a}^{\sqrt{A^2-a^2}} dt t^2 \left\{ \frac{E_3(\Sigma h)}{h^2} - \frac{E_3(\Sigma \sqrt{t^2+h^2})}{t^2+h^2} \right\} \frac{[4A^2a^2 - (A^2+a^2-t^2)^2]^{1/2}}{t} \right]
\end{aligned}$$

(A.16)

4. Fuite par la surface cylindrique interne.

Calculons maintenant la probabilité de fuite par la surface cylindrique située à l'intérieur du cylindre:

$$4\pi V P_{\bullet a} = \int_V d^3r' \int_{S_a} d^2r_s \frac{(\Omega \cdot \mathbf{N}_+) \exp(-\Sigma s)}{s^2}$$

Décrivons d'abord le volume de départ et la surface d'arrivée par le système de coordonnées cylindriques:

$$d^3r' = r dr d\theta dz \quad d^2r_s = a d\zeta d\varphi$$

$$s^2 = r^2 + a^2 - 2ra \cos \alpha + (z-\zeta)^2 \quad \text{où } \alpha = \theta - \varphi$$

$$\Omega \cdot \mathbf{N}_+ = \cos \gamma$$

Après une rotation, intégrons selon une direction angulaire de sorte que l'expression de cette probabilité devienne:

$$4\pi V P_{\bullet a} = 2\pi a \int r dr \int d\alpha \int_0^h dz \int_0^h d\zeta \cos \gamma \frac{\exp(-\Sigma s)}{s^2}$$

Posons ensuite:

$$w = z - \zeta \quad w' = z + \zeta$$

Par rapport aux nouvelles variables, l'expression devient après intégration sur w' :

$$4\pi V P_{\bullet a} = 4\pi a \int r dr \int d\alpha \int_0^h dw (h-w) \cos \gamma \frac{\exp(-\Sigma R)}{R^2}$$

où $R^2 = t^2 + w^2$. Nous réduisons cette intégrale triple par le changement de variables (figure A.8):

$$r dr d\alpha = t dt d\beta \quad \text{où} \quad \cos \gamma = \frac{-t}{R} \cos \beta$$

où t représente la projection du parcours optique sur la surface de bout.

Par rapport aux nouvelles variables, l'expression devient:

$$4\pi V P_{\bullet a} = -4\pi a \int dt t^2 \int d\beta \cos \beta \int_0^h d\omega (h-\omega) \frac{\exp(-\Sigma R)}{R^3}$$

et l'intégrale angulaire (pour $b \leq \pi$) se traite en deux étapes comme en (A. 15).

En combinant toutes ces évaluations, il est possible d'exprimer la probabilité $P_{\bullet a}$ sous la forme de deux intégrales doubles:

$$4\pi V P_{\bullet a} = 4\pi \left[\int_0^h d\omega (h-\omega) \int_0^{\sqrt{A^2-a^2}} dt t^2 \frac{\exp(-\Sigma R)}{R^3} \{ 2a \} \right. \\ \left. - \int_0^h d\omega (h-\omega) \int_{A-a}^{\sqrt{A^2-a^2}} dt t \frac{\exp(-\Sigma R)}{R^3} \{ 4A^2a^2 - (A^2+a^2-t^2)^2 \}^{1/2} \right] \quad (A.17)$$

5. Fuite par la surface cylindrique externe.

Nous calculons finalement la probabilité de fuite par la surface cylindrique située à l'extérieur du cylindre:

$$4\pi V P_{\bullet A} = \int_V d^3r' \int_{S_A} d^2r_s (\Omega \cdot \mathbf{N}_+) \frac{\exp(-\Sigma s)}{s^2}$$

Décrivons le volume de départ et la surface d'arrivée par un système de coordonnées cylindriques:

$$d^3r' = r dr d\theta dz \quad d^2r_s = A d\zeta d\varphi$$

$$s^2 = r^2 + A^2 - 2rA \cos \alpha + (z-\zeta)^2 \quad \text{où } \alpha = \theta - \varphi$$

$$\Omega \cdot N_+ = \cos \gamma$$

Après rotation, intégrons selon une direction angulaire; l'expression de cette probabilité devient alors:

$$4\pi V P_{\bullet A} = 2\pi A \int r dr \int d\alpha \int_0^h dz \int_0^h d\zeta \cos \gamma \frac{\exp(-\Sigma s)}{s^2}$$

Posons ensuite:

$$w = z - \zeta \quad w' = z + \zeta$$

ce qui permet de réduire une première fois en intégrant sur w' obtenant:

$$4\pi V P_{\bullet A} = 4\pi A \int r dr \int d\alpha \int_0^h dw (h-w) \cos \gamma \frac{\exp(-\Sigma R)}{R^2}$$

où $R^2 = t^2 + w^2$. Nous réduisons cette intégrale triple par le changement de variables (voir figure A.9):

$$r \, dr \, d\alpha = t \, dt \, d\beta \quad \text{où} \quad \cos \gamma = \frac{-t \cos \beta}{R}$$

où t représente la projection du parcours optique sur la surface de bout.

Par rapport aux nouvelles variables, l'expression devient:

$$4\pi V P_{\bullet A} = -4\pi A \int dt \, t^2 \int d\beta \cos \beta \int_0^h dw \, (h-w) \frac{\exp(-\Sigma R)}{R^3}$$

et l'intégrale angulaire (pour $\beta \geq 0$) se traite en trois étapes, selon la valeur de t :

$$\forall t \in [0, A-a] \quad \beta \in [0, \arccos(t/2A)]$$

$$\int d\beta \cos \beta = - \{1 - t^2 / 4A^2\}^{1/2}$$

$$\forall t \in [A-a, \sqrt{A^2 - a^2}] \quad \beta \in [\arccos((A^2 + a^2 - t^2) / 2at), \arccos(t/2A)]$$

$$\int d\beta \cos \beta = \frac{\{4A^2 a^2 - (A^2 + a^2 - t^2)^2\}^{1/2}}{2at} - \{1 - t^2 / 4A^2\}^{1/2}$$

$$2at$$

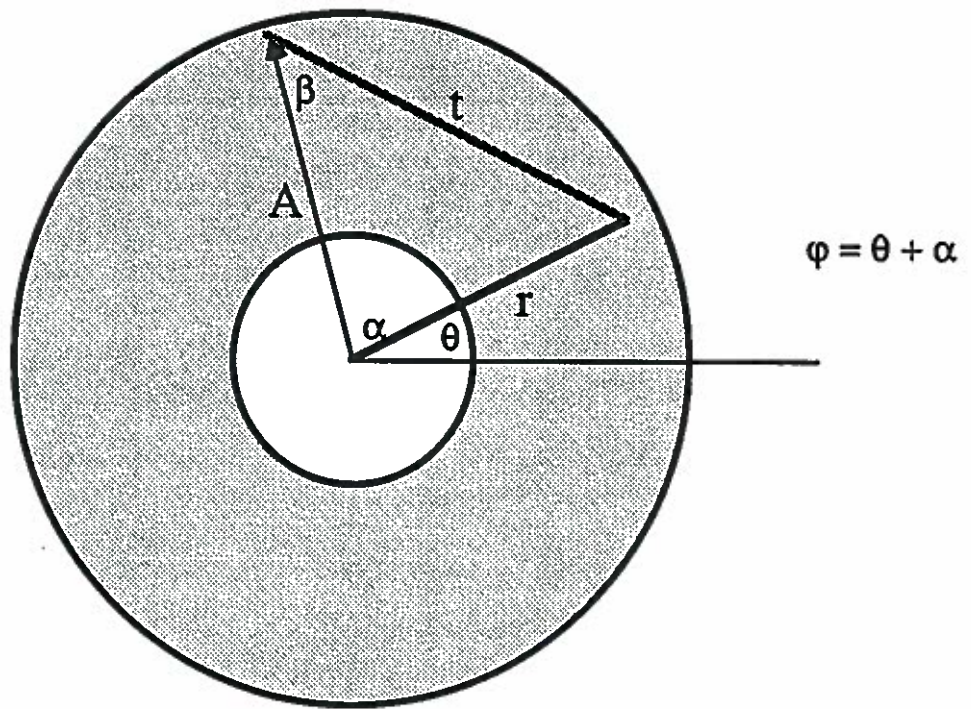


Figure A.9. Projection sur la surface de bout
(transmission par la surface externe).

$$\forall t \in [\sqrt{A^2 - a^2}, \sqrt{4A^2 - 4a^2}] \quad \beta \in [\arcsin(a/A), \arccos(t/2A)]$$

$$\int d\beta \cos \beta = a/A - \{1 - t^2/4A^2\}^{1/2}$$

En combinant toutes ces évaluations, il est possible d'exprimer la probabilité $P_{\bullet A}$ sous la forme de trois intégrales doubles:

$$4\pi V P_{\bullet A} = 4\pi \left[\int_0^h dw (h-w) \int_0^{\sqrt{4A^2 - 4a^2}} dt t^2 \frac{\exp(-\Sigma R)}{R^3} \{4A^2 - 4a^2\}^{1/2} \right.$$

$$- \int_0^h du (h-u) \int_{A-a}^{\sqrt{A^2 - a^2}} dt t \frac{\exp(-\Sigma R)}{R^3} \{4A^2 a^2 - (A^2 + a^2 - t^2)^2\}^{1/2}$$

$$\left. - \int_0^h du (h-u) \int_{A-a}^{\sqrt{4A^2 - 4a^2}} dt t^2 \frac{\exp(-\Sigma R)}{R^3} \{2a\} \right] \quad (A.18)$$

Les autres probabilités peuvent être déduites des relations (A.10) et (A.11), comme il est expliqué au début de la section. Étudions maintenant le cas-limite où $a = 0$, cas qui correspond à un cylindre sans trou.

6. Un cas particulier: le cylindre non troué.

Considérons donc un cylindre (non troué) de hauteur h , et de rayon A (voir figure A.10). Ce cylindre possède deux faces distinctes, et la mesure du volume et de ces faces est donnée par:

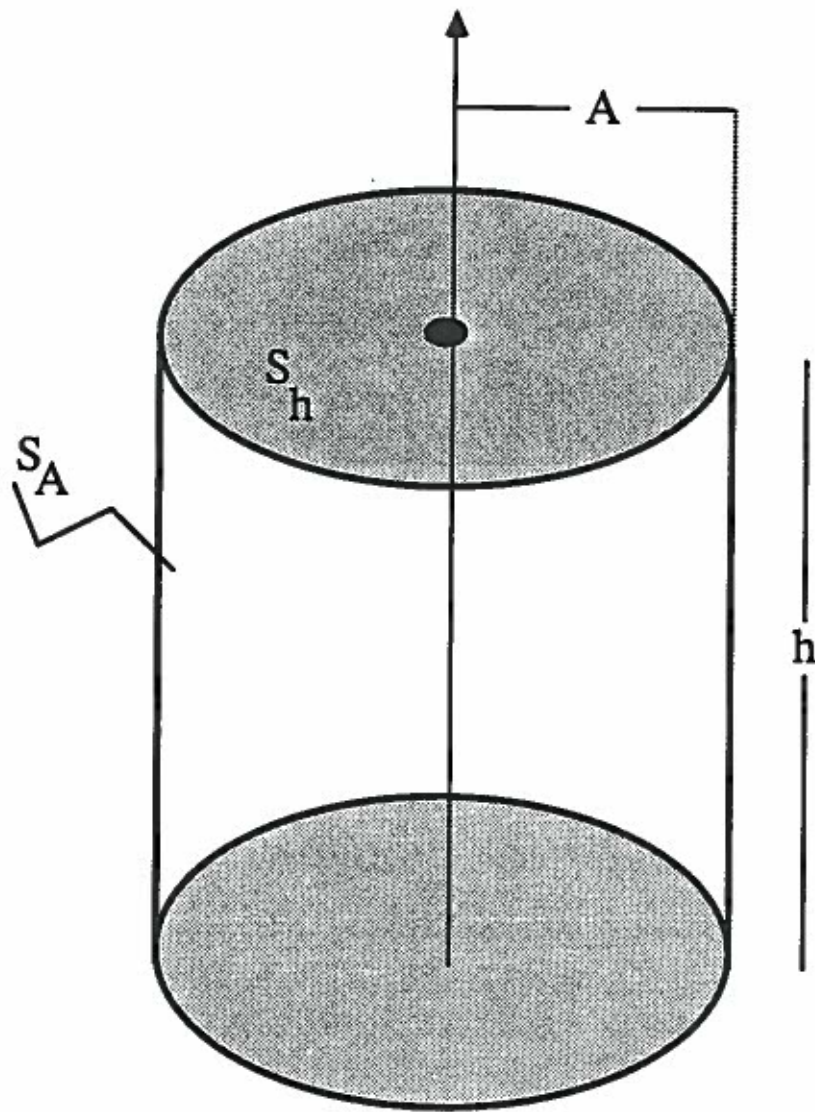


Figure A.10. Cylindre homogène sans trou.

$$V = \pi A^2 h \quad S_h = \pi A^2 \quad S_A = 2 \pi A h$$

La frontière du cylindre se décompose donc en trois surfaces:

$$\partial V = S_A + 2 \times S_h$$

Nous résumons ici les probabilités de transmission, de fuite et de première collision qu'il est possible de déduire des équations du cylindre troué:

$$\pi S_h P_{hh} = 2\pi h^2 \int_0^{2A} dt \left\{ \frac{E_3(\Sigma h)}{h^2} - \frac{E_3(\Sigma \sqrt{t^2+h^2})}{t^2+h^2} \right\} \{\sqrt{4A^2-t^2}\}$$

$$\pi S_h P_{hA} = \pi S_A P_{Ah} = 2\pi \int_0^{2A} dt t^2 \left\{ \frac{E_3(\Sigma h)}{h^2} - \frac{E_3(\Sigma \sqrt{t^2+h^2})}{t^2+h^2} \right\} \{\sqrt{4A^2-t^2}\}$$

$$4\pi V P_{\cdot h} = 2\pi \int_0^{2A} dt \{E_3(0) - E_3(\Sigma h) - E_3(\Sigma t) - E_3(\Sigma \sqrt{t^2+h^2})\} \{\sqrt{4A^2-t^2}\}$$

$$\pi S_A P_{AA} = 4\pi \int_0^h dw (h-w) \int_0^{2A} dt \frac{t^4 \exp(-\Sigma R)}{\sqrt{4A^2-t^2} R^4}$$

$$4\pi V P_{\cdot A} = \pi S_A P_{A\cdot} = 4\pi \int_0^h dw (h-w) \int_0^{2A} dt t^2 \{\sqrt{4A^2-t^2}\} \frac{\exp(-\Sigma R)}{R^3}$$

$$4\pi V P_{\cdot\cdot} = 2\pi \int_0^h dw (h-w) \int_0^{2A} dt t \frac{\exp(-\Sigma R) [4A^2 \arccos(t/2A) - t \sqrt{4A^2-t^2}]}{R^2}$$

$$\text{où } R^2 = t^2 + w^2.$$

ANNEXE B

DESCRIPTION STANDARDISÉE DE EXCELL

1) Nom du programme:

EXCELL

2) Ordinateurs pour lesquels est conçu le programme:

Une version IBM (MODÈLE 4381) est disponible pour le système d'exploitation MVS.

Une version CYBER (CDC MODÈLE 170 / 835 OU 170 / 855) est également disponible pour le système d'exploitation NOS / BE.

3) Description du problème traité:

Ce code a pour but de résoudre l'équation intégrale de transport des neutrons dans un domaine tridimensionnel de géométrie mixte (cartésienne et cylindrique) en régime stationnaire avec les hypothèses suivantes:

- DOMAINE DE GÉOMÉTRIE 3D ARBITRAIRE;
- ASSEMBLAGE MIXTE DE ZONES HOMOGENES (RECTANGULAIRES OU/ET CYLINDRIQUES) FORMANT DES CELLULES PARALLÉLÉPIPÉDIQUES;

EXCELL utilise la méthode des probabilités de collision (notées "PC") de concert avec la technique des courants d'interface (notée "CI") afin de calculer les paramètres suivants:

- LE FLUX NEUTRONIQUE MONOCINÉTIQUES DANS CHACUNE DES ZONES DU DOMAINE;
- LES COURANTS DE NEUTRONS AUX INTERFACES;
- LES COURANTS SORTANTS EN CHAQUE SURFACE.

EXCELL sert de module monocinétique pour des applications définies dans un contexte polycinétique. Le logiciel "DRAGON" (réf. #1) est utilisé comme itérateur multi-groupe et les différents modules d'EXCELL y sont appelés au besoin.

4) Méthode de solution:

Le domaine étudié (appelé "supercellule") est formé d'un assemblage polycellulaire (appelé "réseau de cellules"). Chaque cellule a la forme d'un parallélépipède et est divisée en zones homogènes. Pour chacune des zones, il faut fournir à EXCELL les données matérielles suivantes:

- SECTION EFFICACE DE TRANSPORT (cm^{-1})
- SECTION EFFICACE DE DIFFUSION (cm^{-1})
- SOURCE DE NEUTRONS PRÉSENTE (cm^{-3}).

Les conditions aux frontières des surfaces externes sont données soit par des albédos donnant les conditions de réflexion, soit par des conditions de symétrie planaire.

La version 1.0 d'EXCELL permet l'utilisation des deux méthodes de calcul des probabilités de collision suivantes:

A] pour des cellules constituées de zones rectangulaires toutes de même matériel, des simplifications analytiques des PC réduisent les calculs à une intégration numérique standard;

B] pour des cellules de type mixte (zones rectangulaires et cylindriques s'entrecoupant), une méthode de traçage des lignes d'intégration multidimensionnelle permet de conserver les symétries fondamentales du calcul au niveau du domaine modélisé.

Après l'étape du calcul des PC, la solution du problème de transport s'effectue par la méthode préconditionnée des puissances avec accélération variationnelle à un paramètre (réf. #2).

La solution polycinétique est obtenue après une succession de résolutions monocinétiques. Pour chaque résolution monocinétique, la procédure A.D.I. avec accélération variationnelle est employée, permettant de coupler les cellules selon chacun des trois axes de référence. Les matrices as-

sociées à chaque ligne de cellules sont générées de façon profilée après renu-
mérotation des inconnues. Ces matrices sont ensuite décomposées sur place
par l'algorithme de Choleski avant d'être stockées dans un fichier à accès di-
rect.

5) Restriction à la complexité du problème:

L'utilisation de fichiers à accès direct pour le stockage des données
peut engendrer des frais d'entrée/sortie considérables sur les ordinateurs
CYBER.

6) Temps machine typique:

Ce temps dépend du cas traité et du type de mémoire de masse utilisée.

7) Particularités du programme:

EXCELL est écrit de façon modulaire afin de servir de bibli-
othèque de routines pour des applications polycinétiques de transport neu-
tronique. Ainsi, EXCELL est formé de 6 modules distincts:

EXCELG: lecture des paramètres nécessaires au calcul de super-
cellule et pré-traitement des données géométriques. Calcul des lignes
d'intégration nécessaires au calcul des PC;

EXCELR: module de libération de la mémoire (allouée par EX-

CELG) qui permet le séquençement de tâches en minimisant la demande en mémoire centrale;

EXCELP: module qui permet le calcul complet des probabilités de collision dans le cas d'un domaine constitué d'une seule cellule;

EXCELA: calcule les probabilités de collision d'un ensemble de cellules et fait l'assemblage de ces cellules afin de générer les matrices du système;

EXCELF: module qui trouve le flux neutronique monocinétique correspondant à l'assemblage effectué, en fonction des sources (diffusion et fission);

EXCELS: module qui calcule les sources équivalentes pour un flux fixe. Ce module permet de calculer le reste d'un calcul à source fixe approximatif.

8) Programmes auxiliaires:

L'accès aux sections efficaces se fait via une interface de lecture de type "GOXS" (réf. #3). Cette interface permet d'avoir comme hiérarchie supérieure les différents groupes d'énergie et non les matériaux.

9) Statut:

Version 1.0 ... en développement.

10) Références:

(1) G. Marleau, A. Hébert, R. Roy. "Guide de l'utilisateur du code DRAGON et des modules SHIBA-F, SYBIL et EXCELL. Version 1.0", Rapport GAN-183, École Polytechnique de Montréal, Montréal, 1987.

(2) A. Hébert. "Preconditioning the Power Method for Reactor Calculation", Nucl. Sci Eng, 94, 1 (1986).

(3) R.E. Macfarlane. "TRANSX-CTR: a Code for Interfacing MATXS Cross-section Libraries to Nuclear Transport Codes for Fusion Systems Analysis", Rapport La-9863-Ms, Los Alamos Scientific Laboratories, New Mexico, 1978.

(4) G. Marleau, A. Hébert. "Guide des utilitaires informatiques de la section neutronique", Rapport GAN-179, École Polytechnique de Montréal, Montréal, 1987.

11) Ressource machine requise:

Le chargement du module exécutable demande environ 700000 mots. L'espace nécessaire pour les tableaux est alloué dynamiquement en cours d'exécution en fonction de chaque cas.

12) Compilateurs:

EXCELL est entièrement écrit en FORTRAN 5 ANSI-77.

13) Logiciel requis:

Systeme d'exploitation MVS sur IBM.

Systeme d'exploitation NOS/BE sur CYBER.

XSMGET/PUT/CL/LEN/LIB/OP/SIX sont des programmes utilitaires permettant de gérer les fichiers à accès direct nécessaires à la localisation des variables du calcul (réf. #4).

14) Autres considérations:

Les directives de segmentations sont contenues sur le fichier DATA (voir paragraphe 16 du présent résumé).

15) Auteur:

Robert Roy

Groupe d'analyse nucléaire (G.A.N.)

École Polytechnique de Montréal

6600 Côte des Neiges, suite 215

Montréal, Québec, Canada H3S 2A9





16) Matériel disponible:

EXCELL est disponible sur bande magnétique dans le format:

- 9 pistes;
- 1600 BPI;
- sans étiquette;
- caractère ASCII.

Sur la bande, on trouvera les fichiers suivants:

- le résumé que vous lisez actuellement;
 - le programme source EXCELL;
 - un fichier de données contenant des cas tests types;
 - les directives de segmentation de DRAGON, la procédure de JCL pour exécuter EXCELL sur IBM et la procédure CCL pour exécuter EXCELL sur CYBER.
- un ensemble typique d'exécution.

17) Catégorie:

E-Confidentiel/Commercial développé au GAN, sous licence.