

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL
ÉCOLE POLYTECHNIQUE

Cette thèse intitulée :

RÉSOLUTION PAR LA MÉTHODE DES PROBABILITÉS DE
COLLISION DE L'ÉQUATION INTÉGRALE DU TRANSPORT
A DEUX ET TROIS DIMENSIONS EN GÉOMÉTRIE
HEXAGONALE

présentée par : Mohamed OUISLOUMEN

en vue de l'obtention du grade de : Philosophiæ Doctor (Ph.D.)

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

M. KOCLAS Jean, Ph.D., Président

M. MARLEAU Guy, Ph.D., Directeur de recherche

M. HEBERT Alain, Ph.D., Co-directeur de recherche

M. ROY Robert, Ph.D., Membre

M. MILGRAM Michael, Ph.D., Membre externe

Université de Montréal

RÉSOLUTION PAR LA MÉTHODE DES PROBABILITÉS DE COLLISION
DE L'ÉQUATION INTÉGRALE DU TRANSPORT A DEUX ET TROIS
DIMENSIONS EN GÉOMÉTRIE HEXAGONALE

par

Mohamed OUISLOUMEN
INSTITUT DE GENIE ENERGETIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE

THÈSE PRÉSENTÉE EN VUE DE L'OBTENTION
DU GRADE DE PHILOSOPHIÆ DOCTOR (Ph.D.)
(GENIE NUCLEAIRE)

Août 1993

© droits réservés de Mohamed OUISLOUMEN 1993

SOMMAIRE

Ce travail a été consacré à l'écriture d'un ensemble de modules, dans le code de transport DRAGON, qui permettent de calculer les réacteurs à géométrie hexagonale en théorie intégrale de transport.

Dans un premier stade, on a développé et implanté dans les modules SYBIL et JPM, des méthodes basées sur le formalisme des courants d'interfaces qui permettent de traiter des assemblages hexagonaux en géométrie bidimensionnelle. Les cellules prises en considération dans ces cas peuvent être homogènes ou hétérogènes: cellules hexagonales avec un nombre arbitraire de cylindres concentrés au centre des hexagones.

Nous avons aussi développé et implanté la méthode des probabilités de collision dans le module EXCELL, pour les géométries bidimensionnelle et tridimensionnelle. Cette méthode est basée sur le traçage des lignes d'intégration pour la géométrie complète (l'assemblage) qu'on désire traiter. Ces lignes d'intégration sont ensuite utilisées pour calculer directement et en même temps les probabilités de première collision, de fuites et de transmissions. Les cellules qui peuvent être traitées dans ce cas sont de même structure que dans le cas des modules SYBIL et JPM, avec en

plus la possibilité de sous partitionner davantage les zones homogènes en secteurs: ensemble de cônes ayant leurs foyers au centre de la cellule avec une ouverture qui est fraction multiple de $\frac{\pi}{3}$.

Un ensemble de tests numériques a été présenté, d'une part pour montrer la haute précision de la méthode des probabilités de collision qu'on a comparé à un calcul Monte Carlo, et d'autre part pour comparer les méthodes entre elles et les qualifier.

ABSTRACT

This work was devoted to the generation of a series of routines in DRAGON for the calculation, using the integral transport theory, of hexagonal geometry reactors.

In the first part of my work, I developed and implemented in the SYBIL and JPM modules of DRAGON, using methods based on the interface current technique, routines which permits the treatment of two-dimensional hexagonal reactor assemblies. The cells considered in these assemblies can be homogeneous or heterogeneous, namely the hexagonal cells may contain an arbitrary number of cylindrical zones located at its center.

I also developed and implemented the collision probability method in the EXCELL module for two- and three-dimensional hexagonal assemblies. This method is based on a ray tracing technique applied over the complete geometry. These resulting integration lines can then be used directly to compute simultaneously the collision, leakage and escape probabilities. The cells that can be considered here are identical in structure to those considered while developing the interface current technique. However, I also added the possibility to partition the hexagonal cells into sectors.

I also present in this work numerical calculations which illustrate the relative precision of the various methods developed, and their overall precision with respect to a Monte Carlo calculation.

REMERCIEMENTS

Ce travail de recherche a été réalisé au Groupe d'Analyse Nucléaire de l'Institut de Génie Énergétique.

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude à Monsieur Guy Marleau, chercheur à l'Institut de Génie Énergétique pour son accueil chaleureux et sa haute direction de mes travaux. Je le remercie pour ses suggestions concernant les symétries angulaires.

J'exprime mes remerciements les plus sincères à Messieurs Alain Hébert, professeur à l'Institut de Génie Énergétique, avec qui j'ai traité la partie concernant la méthode multicellules et Robert Roy, chercheur à l'Institut de Génie Énergétique, avec qui j'ai discuté longtemps de la méthode directe des probabilités de collision.

Je remercie Messieurs Jean Koclas, professeur à l'Institut de Génie Énergétique et Michael Milgram, chercheur à Énergie Atomique du Canada Limitée, d'avoir accepté de faire partie du comité de doctorat.

Finalement, je remercie mes parents, mon épouse et mes frères pour leur soutien constant durant toutes mes études.

TABLE DES MATIÈRES

SOMMAIRE	iv
ABSTRACT	vi
REMERCIEMENTS	vii
TABLE DES MATIÈRES	viii
LISTE DES FIGURES	xii
LISTE DES TABLEAUX	xiv
LISTE DES ANNEXES	xv
LISTE DES NOTATIONS ET DES SYMBOLES	xvi
1 Introduction	1
2 Généralité sur l'équation de transport	8
2.1 Introduction	8
2.2 Formulations générales	10
2.2.1 Equation intégrale de transport	10
2.2.2 Equations générales	13
2.2.3 Développement du flux sur les harmoniques sphériques . . .	18

2.3	Méthode des probabilités de première collision	20
2.3.1	Equations discrétisées	20
2.3.2	Relations de réciprocités	25
2.3.3	Relations de conservation	26
2.4	Probabilités de collision en géométrie à deux dimensions	27
2.4.1	Matrice de collision	28
2.4.2	Probabilités de fuite	29
2.4.3	Probabilités de transmission	30
3	Méthode multicellules	31
3.1	Introduction	31
3.2	Méthode des courants d'interfaces	34
3.2.1	Fonctions de représentations	35
3.2.2	Relations de symétries	36
3.2.2.1	Probabilités de transmission	36
3.2.2.2	Probabilités de fuites	41
3.2.3	Résolution du système matriciel	41
3.3	Méthode J_{\pm}	44
3.3.1	Relation entre les probabilités de transmission	45
3.3.1.1	Symétrie de rotation	46
3.3.1.2	Symétrie intrinsèque	47
3.3.2	Résolution algébrique du système multicellule	48

3.4	Module hexagonal du code DRAGON	49
3.4.1	Intégration numérique	50
3.4.2	Normalisations numériques	52
3.4.2.1	Orthonormalisation numérique	53
3.4.2.2	Normalisation des lignes d'intégration	53
3.4.3	Géométrie de base	55
3.4.4	Organisation générale des calculs	57
3.4.4.1	Symétries - Regroupement de cellules	58
3.4.5	Autres approximations multicellules	60
3.4.5.1	Option ROTH	61
3.4.5.2	Option ROTH×6	63
4	Méthode des probabilités de collision	69
4.1	Introduction	69
4.2	Evaluation directe des probabilités de collisions	72
4.2.1	Formulation des probabilités de collision	72
4.2.2	Intégration numérique	76
4.2.2.1	Cas d'une géométrie bidimensionnelle	76
4.2.2.2	Cas d'une géométrie tridimensionnelle	78
4.3	Aspects numériques	80
4.3.1	Calcul des lignes d'intégration	81
4.3.2	Normalisation des probabilités de collision	83

	xi
4.3.3	Regroupement et orientation des cellules 85
5	Tests et résultats numériques 90
5.1	Tests bidimensionnels 91
5.1.1	Probabilités de collision: cas d'une cellule unitaire. 91
5.1.2	Etude du K_{eff} en fonction du rapport de modération 92
5.1.3	Exemple de calcul d'assemblage de réacteur 94
5.1.3.1	Problème à source fixe 94
5.1.3.2	Problème à source de fission. 97
5.2	Tests tridimensionnels. 100
5.2.1	Cellule unitaire. 100
5.2.2	Assemblage tridimensionnel. 102
6	Conclusion 117
	BIBLIOGRAPHIE 154

LISTE DES FIGURES

2.1	Représentation schématique du domaine \mathcal{D} .	14
3.1	Exemple de cellule traitée: numérotation des surfaces	34
3.2	Symétries hexagonales	37
3.3	Cellule type du cas J_{\pm} : numérotation des surfaces	45
3.4	Action de la symétrie S_y	47
3.5	Schéma d'intégration.	65
3.6	Différentes symétries d'assemblages.	66
3.7	Cellules à symétries externes.	67
3.8	Regroupement et orientation cellulaire.	67
3.9	Schéma de cylindrisation.	68
4.1	Exemple de domaine traité.	70
4.2	Domaine d'intégration spatiale pour une direction fixe.	78
4.3	Domaine d'intégration des probabilités de collision tridimensionnelles.	81
4.4	Parcours des neutrons au niveau d'une cellule.	89
4.5	Sectorisation des cellules hexagonales.	89
5.1	Cellule combustible d'un réacteur sous-moderé.	104
5.2	Modèle de la cellule étudiée.	104
5.3	Variation de K_{eff} en fonction de V_m/V_f - approximation DP_0 .	107

5.4	Variation de K_{eff} en fonction de V_m/V_f - approximation DP_1	108
5.5	Assemblage de cellules pour le problème à source fixe.	109
5.6	Assemblage de contrôle RSMVS: problème à source de fission.	110
5.7	Variation de K_{eff} en fonction de V_m/V_f pour une cellule 3D.	111
A.1	Lignes d'intégration.	132
A.2	Effet du développement en serie des fonctions de Bickley-Naylor	133
B.1	Numérotation des surfaces dans le cas J_{\pm}	137
D.1	Types de numérotations.	150
E.1	Parcours optiques pour les probabilités volume-volumé.	154
E.2	Parcours optiques pour les probabilités de fuites.	154

LISTE DES TABLEAUX

3.1	Caractéristique des deux modèles de cylindrization	62
5.1	Sections efficaces pour un groupe d'énergie	105
5.2	Comparaison des probabilités de collision pour une cellule 2D . . .	105
5.3	Spécifications isotopiques pour le modèle de la cellule unitaire. . . .	106
5.4	Sections efficaces à un groupe d'énergie pour le problème à source fixe.	106
5.5	Résultats du problème à source fixe comparé à Monte Carlo. . . .	112
5.6	Effet de la condition de réflexion par la méthode IC.	113
5.7	Calculs de l'assemblage de contrôle du réacteur RSMVS avec le re- groupement des cellules.	114
5.8	Comparaison des méthodes IC, CP et Roth \times 6	114
5.9	Effet de la troisième dimension sur les probabilités de collision. . . .	115
5.10	Comparaison DRAGON et Monte Carlo dans le cas 3D.	116

LISTE DES ANNEXES

A	Probabilités de collision pour une cellule	119
A.1	Cellule hétérogène	119
A.1.1	Probabilités de transmission	121
A.1.1.1	Transmission 1 → 6	121
A.1.1.2	Transmission 1 → 5	122
A.1.1.3	Transmission 1 → 4	123
A.1.2	Probabilités surfaces-volumes	124
A.2	Cellule homogène	127
A.2.1	Transmission 1 → 6	128
A.2.2	Transmission 1 → 5	128
A.2.3	Transmission 1 → 4	128
B	Matrice de transmission J_{\pm}	134
B.1	Transmission côté 1 → surfaces planes	134
B.2	Transmission 1 → 7	135
C	Calcul du maillage d'intégration	141
D	Partie hexagonale du module EXCELL	146
E	Intégration des probabilités de collision	151

LISTE DES NOTATIONS ET DES SYMBOLES

Nous introduisons ici la majorité de nos notations qui sont maintenues le long de cette thèse.

\mathcal{D}	Domaine étudié
$\partial\mathcal{D}$	Surface de $\partial\mathcal{D}$
$\vec{\Omega}$	Direction angulaire du neutron
$\psi(\vec{r}, \vec{\Omega})$	Flux angulaire au point \vec{r} dans la direction $\vec{\Omega}$ (en <i>neutrons/cm²/s/rad</i>)
$\phi(\vec{r})$	Flux scalaire au point \vec{r} (en <i>neutrons/cm²/s</i>)
$\Sigma(\vec{r})$	Section efficace macroscopique totale au point \vec{r} (en <i>cm⁻¹</i>)
$\Sigma_s(\vec{r})$	Section efficace macroscopique de diffusion au point \vec{r} (en <i>cm⁻¹</i>)
$\Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega})$	Section efficace macroscopique de diffusion au point \vec{r} de la direction $\vec{\Omega}'$ vers $\vec{\Omega}$
$\tau(\vec{r}, \vec{r}')$	Parcours optique entre les points \vec{r} et \vec{r}'
$\tau(u)$	Parcours optique pour une longueur u
$\psi_{\pm}(\vec{r}_s, \vec{\Omega})$	Flux angulaire entrant (-) ou sortant (+) du domaine au point \vec{r}_s dans la direction $\vec{\Omega}$
$\delta(x)$	Distribution de Dirac de dimension 1,2 ou 3 selon x
$H(x)$	Distribution de Heaviside

$\mathcal{F}(\vec{r}, \vec{\Omega})$	Densité d'émission au point \vec{r} et dans la direction $\vec{\Omega}$ (en <i>neutrons/cm³/s/rad</i>)
$\mathcal{F}(\vec{r})$	Densité d'émission au point \vec{r} (en <i>neutrons/cm³/s</i>)
$Q(\vec{r}, \vec{\Omega})$	Source de neutrons au point \vec{r} et dans la direction $\vec{\Omega}$ (en <i>neutrons/cm³/s/rad</i>)
$Q(\vec{r})$	Source de neutrons volumique ou surfacique au point \vec{r} (en <i>neutrons/cm³/s</i> ou <i>neutrons/cm²/s</i>)
$n_{\pm, \alpha}$	Normale entrante (+) ou sortante (-) de la surface α
u	Distance entre $\vec{r} \in \mathcal{D}$ et $\vec{r}' \in \mathcal{D}$ (en <i>cm</i>)
s	Distance entre $\vec{r}_s \in \partial\mathcal{D}$ et $\vec{r} \in \mathcal{D}$ (en <i>cm</i>)
s'	Distance entre $\vec{r}_s \in \partial\mathcal{D}$ et $\vec{r}_s' \in \partial\mathcal{D}$ (en <i>cm</i>)
\mathcal{D}_i	Sous-volume du domaine \mathcal{D}
$\partial\mathcal{D}_\alpha$	Sous-surface de $\partial\mathcal{D}$
ϕ_i	Flux moyen (en <i>neutrons/cm²/s</i>)
Σ_i	Section efficace totale moyenne dans le volume i (en <i>cm⁻¹</i>)
$\Sigma_{s,i}$	Section efficace de diffusion moyenne dans le volume i (en <i>cm⁻¹</i>)
a	Côté de l'hexagone (en <i>cm</i>)
s_α	Aire de la surface α (<i>cm²</i> en 3-D, <i>cm</i> en 2-D)
V_i	Volume du domaine i (<i>cm³</i> en 3-D, <i>cm²</i> en 2-D)
$\psi_{\pm}^{\rho, \alpha}(\vec{\Omega})$	Moment du flux angulaire d'ordre ρ à la surface α
J_{\pm}^{ρ}	Moment du courant neutronique d'ordre ρ à la surface α
$S(\vec{\Omega})$	Surface d'intégration

$t_{\alpha,i}^{\beta}$	Distance parcourue par un neutron entrant par la surface α et atteignant la surface β dans le volume i (en cm)
$T_{\alpha,i}^{\beta,k}$	k^{iem} distance parcourue par un neutron entrant par la surface α et atteignant la surface β dans le volume i (en cm)
$D_{\alpha}(x, \varphi)$	Distance minimale entre le centre de la cellule et la ligne d'intégration allant de la surface 1 à la surface α (en cm)
p_{ij}	Probabilité de première collision volume-volume.
$P_{is\alpha}^p$	Probabilité surface-volume
P_{ij}	Probabilité réduite de première collision volume-volume (en cm)
$P_{is\alpha}^p$	Probabilité réduite surface-volume (en cm)
$P_{s\alpha i}^p$	Probabilité de fuite

CHAPITRE 1

Introduction

La configuration hexagonale des réacteurs nucléaires a toujours suscité des intérêts particuliers. Ces dernières années on rencontre dans la littérature plusieurs études de réacteurs de ce type. On pense notamment aux HCLWR (High Conversion Light Water Reactor) [1] [2] et aux RSM (Réacteurs Sous-modérés). Ces nouveaux réacteurs se distinguent de ceux à eau légère classiques, tout d'abord par leur géométrie qui est hexagonale, par leur combustible (MOX) qui contient du plutonium et par leur rapport de modération plus faible. Ces caractéristiques rendent le spectre des neutrons beaucoup plus dur avec une forme plus complexe à cause des absorptions résonnantes. Des méthodes de plus en plus précises sont donc requises pour traiter ces nouveaux réacteurs.

Le calcul des réacteurs se fait généralement en deux étapes: un calcul détaillé en théorie de transport produit des sections efficaces moyennes (homogénéisées et condensées) qui sont utilisées en théorie de diffusion pour un calcul complet de coeur.

Les premières méthodes utilisées pour déterminer un jeu de sections efficaces moyennes consistaient à faire un calcul de cellules en théorie de transport et mode

fondamental: chaque cellule est considérée séparément placée dans un milieu infini et homogène où elle est analysée en théorie de transport. On s'est aperçu ensuite avec les réacteurs à eau légère qu'on ne peut pas négliger le fait que le réseau n'est pas infini [3] [4], et que l'on doit prendre en compte les effets des variations de flux provoqués par la présence d'hétérogénéités dans l'environnement de la cellule. On devrait donc résoudre le problème de l'étude simultanée de plusieurs cellules en interactions.

A part les procédés stochastiques (méthode de Monte Carlo), le principe général de résolution de l'équation de transport consiste en une élimination progressive des sept variables dont dépend le flux neutroniques: $\psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t)$. On suppose tout d'abord que le régime est stationnaire et que le milieu est isotrope. Par la suite, avec l'hypothèse multigroupe, on réduit le problème à un système d'équations couplées, décrivant le comportement des neutrons indépendamment de l'énergie. Chacune des équations ainsi obtenue a la forme de l'équation de transport monocinétique. La résolution de l'équation dépend ensuite de la forme utilisée [5].

Si l'on considère la forme intégral-différentielle, le traitement de la variable angulaire se fait soit par développement tronqué sur les harmoniques sphériques (méthodes DP_N et P_N), soit par discrétisation directe (méthode S_N) [6]. On obtient alors un système d'équations différentielles couplées que l'on résout par des méthodes numériques classiques. Cependant ces méthodes sont très difficiles à met-

tre en application [7] dans le cas d'un assemblage représentant des hétérogénéités spatiales comme le cas des réacteurs à eau légère (difficulté de représenter en détail la géométrie des assemblages, en plus des coûts que peut entraîner une représentation précise).

Si l'on considère la forme intégrale, et que l'on développe à l'ordre N en harmoniques sphériques la section efficace différentielle de diffusion et le terme source, on obtient un système couplé ne dépendant que des $(N + 1)$ premiers moments du flux angulaire. On se ramène donc à résoudre des équations intégrales ne portant que sur la variable d'espace. Dans la pratique, on suppose que le choc et les sources sont isotropes ($N = 0$) ce qui conduit à une seule équation pour le flux. Cependant, on peut tenir compte partiellement de l'anisotropie par la correction de transport. L'intégration sur la variable spatiale se fait par découpage du domaine considéré en zones homogènes, et avec l'hypothèse du flux plat dans ces zones, on aboutit aux formalismes des probabilités de collision, qui sont les mieux adaptés pour la description détaillée des assemblages des réacteurs spatialement très hétérogènes [8]. Ces méthodes requièrent des quadratures numériques multidimensionnelles. La matrice de collision ainsi obtenue est fortement couplée [5]. En conséquence, ces méthodes consomment un temps de calcul considérable pour le calcul de la matrice de collision et pour la résolution du système algébrique du flux, surtout si le domaine est d'assez grandes dimensions et dans le cas de calculs multigroupes.

Dans le cas d'une géométrie bidimensionnelle, une grande variété d'approximation a été développée pour venir à bout de ces difficultés. L'idée de base consiste à décomposer le milieu étudié en plusieurs sous-milieus, et à décrire schématiquement le transport des neutrons entre sous-milieus adjacents. Ces partitions sont soit des zones homogènes, soit des cellules qui peuvent être à leur tour divisées en plusieurs zones. Dans le premier cas, le couplage entre zones est fait par les courants aux interfaces. Dans le second cas, l'interaction entre zones dans une même cellule est calculée directement, tandis que celle entre zones situées dans les cellules différentes se fait par un couplage par les flux angulaires à la surface des cellules.

Généralement le couplage entre sous-milieus est réalisé en faisant un développement fini du flux angulaire sur les surfaces des sous-milieus [9], ce qui entraîne des approximations en variables angulaire et spatiale. Tous les développements angulaires qui seront considérés dans ce travail sont des développements double P_N , spatialement uniforme sur chaque surface du sous-domaine. Par double nous entendons que deux développements indépendants sont effectués pour les flux angulaires rentrant et sortant des surfaces du sous-milieu; P_N est le développement sur les harmoniques sphériques jusqu'à l'ordre N .

Le cas où les sous-milieus sont des zones homogènes (qui requiert une sorte de pré-homogénéisation) a été vite abandonné pour le cas des cellules hétérogènes

couplés via leur surfaces [3] [4]. La méthode la plus connue et qui est souvent utilisée dans les codes de transport, fut suggéré par ROTH. L'auteur proposa de faire un développement du flux angulaire double P_0 et uniforme sur toute la surface de la cellule. Ce modèle introduit deux erreurs physiques importantes: la proportion de neutrons traversant la cellule d'un côté à son opposé est surestimée (l'hétérogénéité de la cellule est mal prise en compte) et il y a des neutrons sans choc qui ressortent par la surface d'entrée (c'est l'effet de retour). Le modèle de ROTH est généralement associé à une représentation cylindrique des cellules pour effectuer des calculs à deux dimensions à bas prix.

Des améliorations ont été apportées au modèle de ROTH. Elles consistaient d'une part à faire la distinction des côtés de la cellule en permettant au flux angulaire d'être uniforme sur chaque côté; et d'autre part de remplacer l'approximation P_0 par une approximation P_1 [9].

Dans une partie de ce travail nous avons appliqué, pour la géométrie exacte des cellules, la méthode multicellules avec le formalisme des courants d'interfaces pour effectuer des calculs à deux dimensions dans une configuration hexagonale. Nous avons aussi développé la méthode J_{\pm} basé sur des sous-milieux qui sont homogènes, dans le but de l'utiliser dans le calcul des probabilités de collision pour les calculs d'autoprotection. En effet, cette méthode requiert moins de probabilités à calculer et en conséquence elle est avantageuse dans le gain en temps de calcul.

Le but du développement de ces modèles est de minimiser au maximum le coût des calculs de routine avec une précision acceptable [10]. Mais d'une part avec le développement d'outils informatiques de plus en plus rapides (ordinateur à architecture parallèle), et d'autre part l'avènement de réacteurs à géométrie très complexes [11], les méthodes multicellules sont de plus en plus abandonnées au profit des méthodes beaucoup plus rigoureuses [12] [13] [14]. Dans ce cadre, nous avons développé dans cette thèse la méthode dite de probabilité de collision. Nous supposons toujours que notre domaine est décomposé en cellules qui peuvent être hétérogènes. Nous traitons alors le domaine directement tel qu'il est décomposé. Le couplage entre les différentes zones non seulement d'une cellule mais de deux cellules différentes, est alors directement pris en compte. Nous avons appliqué ce formalisme pour des assemblages en deux et trois dimensions.

Dans le premier chapitre, nous exposons le formalisme des probabilités de collision. Nous y avons regroupé l'ensemble des équations générales aux deux méthodes: multicellule et probabilités de collision.

Le deuxième chapitre est consacré au formalisme multicellule. On y a décrit la méthode des courants d'interfaces et la méthode J_{\pm} . L'ensemble des techniques numériques associées à ce formalisme ont été aussi abordées.

Nous avons consacré le chapitre trois à la méthode des probabilités de collision pour les cas de géométrie en deux et trois dimensions. On y a surtout discuté le processus d'évaluation des probabilités de collision.

Tous les tests numériques ont été regroupés au chapitre quatre. Nous présentons des tests monocinétiques et en théorie multigroupe réalisés à l'aide de nos méthodes.

Le détail des calculs a été renvoyé, comme il est d'usage, aux annexes. En particulier on trouvera dans l'annexe A les formules des probabilités de collision pour une cellule dans le cas de la méthode des courants d'interfaces, et dans l'annexe B les expressions des éléments de la matrice de transmission dans le cas de la méthode J_{\pm} .

CHAPITRE 2

Généralité sur l'équation de transport

2.1 Introduction

Toute étude de conception ou de gestion d'un réacteur nucléaire suppose une étude détaillée du transport des neutrons à l'échelle microscopique. La migration des neutrons dans un milieu physique donné (réacteur, assemblage, cellule d'assemblage, etc) engendre un phénomène de transport décrit par l'équation de transport neutronique, qui n'est autre qu'une forme linéaire adaptée de l'équation cinétique des gaz développée par Boltzmann [15].

L'équation de transport des neutrons existe sous trois formes équivalentes [5]. Les plus souvent utilisées dans les études de projet des réacteurs nucléaires sont les formes intégró-différentielle et intégrale. Chacune de ces formes a ses particularités mathématiques et physique qui la rendent intéressante pour certaines situations particulières. Le choix de l'une ou de l'autre forme est souvent fonction des considérations physiques et numériques. Ainsi la forme intégró-différentielle est généralement utilisée pour le traitement des domaines de grand parcours optiques (par rapport au libre parcours moyen), alors que la forme intégrale est mieux appropriée aux milieux de faible parcours optique. En ce qui concerne les critères

numériques, on considère généralement la mémoire d'ordinateur requise, le temps machine (temps CPU) nécessaire aux calculs des éléments de la matrice à inverser, le temps machine consommé pour résoudre le système algébrique et le taux de convergence de la méthode. Notons aussi qu'avec la forme intégral-différentielle il est plus facile de considérer n'importe quel degré d'anisotropie de diffusion, alors que dans le cas de la formulation intégrale, le nombre d'équations à résoudre croît considérablement avec ce paramètre. Cependant, la forme intégrale devient plus avantageuse dans le cas de fortes hétérogénéités spatiales qui rendent le flux angulaire très anisotrope et donc l'application des méthodes numériques pour résoudre l'équation intégral-différentielle difficiles et onéreuses [7]. Cet avantage est dû au fait que, pour une loi de chocs et des sources isotropes, la forme intégrale comporte pour seule inconnue le flux intégré. Or, dans la majorité des calculs de transport désirés, c'est cette quantité (le flux intégré) qui est directement lié aux résultats recherchés (taux de réaction, facteur de multiplication effectif, etc).

L'équation intégrale de transport peut être établie de deux façons différentes: soit à partir de la forme intégral-différentielle, où on inverse l'opérateur différentiel [3]. Soit tout simplement en établissant le bilan des neutrons en un point de l'espace selon une direction donnée des neutrons [15]. Notons finalement que cette équation est généralement utilisée de concert avec l'approximation que les sections efficaces macroscopiques sont indépendantes du temps [15].

On ne considèrera tout au long de cette thèse que la forme intégrale de l'équation de transport. Dans ce premier chapitre, nous discuterons l'aspect général de cette équation. On y traitera aussi les différentes approximations aboutissant à la méthode numérique des probabilités de collision. On en profitera pour y donner quelques propriétés de celles-ci. La fin de ce chapitre sera consacré aux probabilités de collision en deux dimensions.

Nous avons veillé à garder un aspect général des choses. L'application aux cas particuliers est traitée dans les chapitres suivants.

2.2 Formulations générales

2.2.1 Equation intégrale de transport

Etant donné un domaine convexe \mathcal{D} qui contient une distribution de source volumique et qui est soumis à des conditions aux limites mixtes à sa frontière $\partial\mathcal{D}$. En se plaçant en théorie monocinétique et en régime stationnaire, le flux angulaire $\psi(\vec{r}, \vec{\Omega})$ en un point $\vec{r} \in \mathcal{D}$ et dans une direction $\vec{\Omega}$, donné par l'équation intégrale de transport, peut être écrit sous la forme:

$$\psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \int_{(\infty)} d^3\vec{r}' \delta(\vec{\Omega}'_s - \vec{\Omega}) T(\vec{r}', \vec{r}) \{ \psi(\vec{r}', \vec{\Omega}'_s) \delta(u-s) + H(s-u) \mathcal{F}(\vec{r}', \vec{\Omega}'_s) \}, \quad (2.1)$$

où le vecteur unitaire

$$\vec{\Omega}'_s = \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{\|\vec{r} - \vec{r}'\|}, \quad (2.2)$$

et les symboles $\delta(x)$ et $H(x)$ désignent respectivement les distributions de Dirac et de Heaviside. Dans l'équation ci-dessus, le noyau:

$$T(\vec{r}', \vec{r}) = \frac{\exp(-\tau(\vec{r}', \vec{r}))}{\|\vec{r} - \vec{r}'\|^2} \quad (2.3)$$

représente la probabilité pour qu'un neutron atteigne le point \vec{r} à partir de \vec{r}' sans subir de chocs. On définit les parcours optique $\tau(u)$, $\tau(s)$ et $\tau(s')$ par:

$$\begin{aligned} \tau(u) &= \tau(\vec{r}', \vec{r}) = \int_0^u \Sigma(\vec{r} - x\vec{\Omega}'_s) dx = \int_0^u \Sigma(\vec{r}' + x\vec{\Omega}'_s) dx \\ \tau(s) &= \tau(\vec{r}_s, \vec{r}) = \int_0^s \Sigma(\vec{r} - x\vec{\Omega}'_s) dx = \int_0^s \Sigma(\vec{r}_s + x\vec{\Omega}'_s) dx \\ \tau(s') &= \tau(\vec{r}_s', \vec{r}_s) = \int_0^{s'} \Sigma(\vec{r}_s - x\vec{\Omega}'_s) dx = \int_0^{s'} \Sigma(\vec{r}_s' + x\vec{\Omega}'_s) dx \end{aligned} \quad (2.4)$$

où $\Sigma(\vec{r})$ est la section efficace totale, et les variables u , s et s' désignent respectivement, les distances données par:

$$\begin{aligned} \vec{r}' &= \vec{r} - u\vec{\Omega}'_s \\ \vec{r}_s &= \vec{r} - s\vec{\Omega}'_s \\ \vec{r}_s' &= \vec{r}_s - s'\vec{\Omega}'_s \end{aligned}$$

La densité d'émission des neutrons en un point $\vec{r}' \in \mathcal{D}$ et dans la direction $\vec{\Omega}'_s$ est donnée par:

$$\mathcal{F}(\vec{r}', \vec{\Omega}'_s) = Q(\vec{r}', \vec{\Omega}'_s) + \int_{(4\pi)} \Sigma_s(\vec{r}', \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}'_s) \psi(\vec{r}', \vec{\Omega}') d^2\Omega'. \quad (2.5)$$

Ici, $Q(\vec{r}', \vec{\Omega}'_s)$ sont les sources volumiques: autonomes et/ou de fissions et $\Sigma_s(\vec{r}', \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}'_s)$ est la section efficace de transfert au point \vec{r}' de la direction $\vec{\Omega}'$ vers $\vec{\Omega}'_s$ [15].

Notons en passant que le noyau $T(\vec{r}', \vec{r})$ est symétrique par rapport à \vec{r} et \vec{r}' ($\vec{r}' \rightarrow \vec{r}, \vec{\Omega}'_s \rightarrow -\vec{\Omega}_s$). Cette propriété très importante sera bien exploitée lors du traitement numérique de l'équation de transport et plus particulièrement au moment du calcul de la matrice des probabilités de première collision.

Le terme entre crochet $\{ \}$ dans l'équation (2.1) exprime la densité des neutrons produits au point \vec{r}' et dans la direction $\vec{\Omega}'_s$ (pour la nomenclature, voir la référence [15] par exemple). On remarque que cette densité est due à deux phénomènes, tout d'abord les neutrons provenant de la surface jusqu'au point \vec{r}' : $\psi(\vec{r}', \vec{\Omega}'_s) \delta(u - s)$ et puis la densité d'émission en ce point même: $H(s - u) \mathcal{F}(\vec{r}', \vec{\Omega}'_s)$. Cette densité est multipliée par $T(\vec{r}', \vec{r})$ qui exprime la probabilité pour que les neutrons au point \vec{r}' soient acheminés jusqu'au point \vec{r} sans subir de chocs. Finalement, la fonction $\delta(\vec{\Omega}_s - \vec{\Omega})$ sélectionne de toutes les directions possibles $\vec{\Omega}_s$ la direction $\vec{\Omega}$.

La formule (2.1) renferme deux singularités: une au niveau du noyau de l'opérateur intégral $T(\vec{r}', \vec{r})$ et une autre au niveau de la discontinuité des sections efficaces. En effet, dans les cas pratiques le domaine \mathcal{D} est un ensemble de sous-domaines disjoints connectés entre eux qui sont tels que chaque sous-domaine est constituée d'un matériau physiquement différent des autres sous-domaines (exemple: \mathcal{D} est une cellule formée du combustible de la gaine et du modérateur). Avec la méthode des probabilités de première collision, que nous allons utiliser pour résoudre l'équation (2.1), la deuxième singularité disparaît automatiquement. En

effet, cette méthode est basée sur une discrétisation du milieu \mathcal{D} en sous-volumes plus petits, homogènes où les sections efficaces sont continues, et qu'on appelle zones. La portée de l'intégration est alors sur l'ensemble de ces zones prisent une à une. En ce qui concerne la première singularité, on verra que dans notre cas, elle disparaîtra par un simple changement de variables. La méthode des probabilités de collision est donc bien appropriée au traitement des singularités que présente l'équation de transport. Mais ceci se fait quand même au prix d'une intégration introduite par l'élimination de la première singularité comme il sera éclairci plus loin. Notons cependant que le sens à donner à la première singularité, qui est qualifiée de faible, dépend du choix de l'espace sur lequel est étudié le noyau $T(\vec{r}', \vec{r})$ (ou plus exactement l'opérateur correspondant). On peut montrer en analyse fonctionnelle, que $T(\vec{r}', \vec{r})$ est parfaitement continu dans l'espace $L_2(\mathcal{D})$ des fonctions à carrées sommable [16].

La méthode des probabilités de collision n'est pas l'unique méthode pour résoudre l'équation intégrale de transport [5]. Mais elle est de loin la plus utilisée dans les calculs des réacteurs nucléaires surtout au niveau cellulaire.

2.2.2 Equations générales

Il est évident que dans la pratique on ne résout pas l'équation intégrale sous la forme donné par (2.1), mais sous la forme la plus simple possible. Pour cela, supposons que notre domaine \mathcal{D} est un domaine fermé et orienté suivant les normales

extérieure \vec{n}_+ et intérieure \vec{n}_- (ce qui est le cas dans la réalité: cellule, assemblage ...). Compte tenu du fait que $\vec{r}' = \vec{r} - u\vec{\Omega}'_s$, il est facile de voir que l'équation (2.1) peut s'écrire sous la forme:

$$\psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \psi_-(\vec{r}_s, \vec{\Omega}) e^{-\tau(s)} + \int_0^s du \mathcal{F}(\vec{r}') \frac{e^{-\tau(u)}}{4\pi}, \quad (2.6)$$

où on a distingué le flux $\psi_-(\vec{r}_s, \vec{\Omega})$ entrant par la surface $\partial\mathcal{D}$ au point $\vec{r}_s = \vec{r} - s\vec{\Omega}$ et dans la direction $\vec{\Omega}$ (voir figure 2.1).

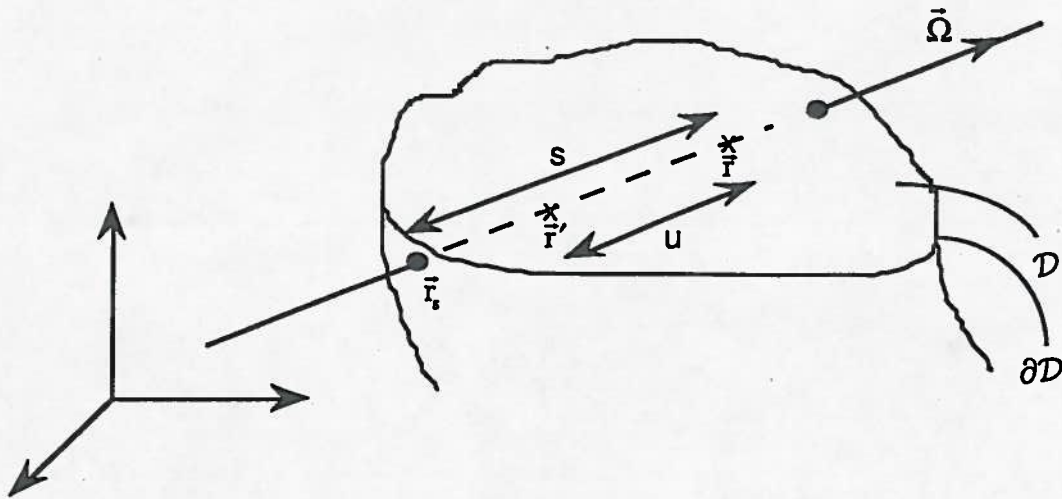


Figure 2.1: Représentation schématique du domaine \mathcal{D} .

Nous avons supposé ici, et pour la suite de cette thèse, que le milieu, les sources et les chocs sont isotropes dans le référentiel du laboratoire. Dans ces conditions, la densité d'émission au point \vec{r}' s'écrit:

$$\mathcal{F}(\vec{r}') = Q(\vec{r}') + \Sigma_s(\vec{r}')\phi(\vec{r}'), \quad (2.7)$$

où $\Sigma_s(\vec{r}')$ est la section de diffusion isotrope (dans les calculs pratiques, on tient compte partiellement de l'anisotropie en utilisant des sections efficaces de transport [17]) et où on a défini le flux scalaire $\phi(\vec{r}')$ et les sources par:

$$\phi(\vec{r}') = \int_{(4\pi)} \psi(\vec{r}', \vec{\Omega}) d^2\Omega \quad (2.8)$$

$$Q(\vec{r}') = \int_{(4\pi)} Q(\vec{r}', \vec{\Omega}) d^2\Omega. \quad (2.9)$$

A noter qu'on emploie ici la même notation pour les variables angulaires ($Q(\vec{r}', \vec{\Omega})$ et $\mathcal{F}(\vec{r}', \vec{\Omega})$) et isotropes ($Q(\vec{r})$ et $\mathcal{F}(\vec{r})$).

Comme on l'avait mentionné plus haut, la méthode des probabilités de collision a pour inconnu le flux scalaire. Ce dernier est obtenu en intégrant l'équation (2.6) sur l'ensemble des directions possibles $\vec{\Omega}$ du neutron:

$$\phi(\vec{r}) = \int_{\partial\mathcal{D}} d^2r_s \psi_-(\vec{r}_s, \vec{\Omega}) \frac{e^{-\tau(s)}}{s^2} (\vec{\Omega} \cdot \vec{n}_-) + \int_{\mathcal{D}} d^3r' \mathcal{F}(\vec{r}') \frac{e^{-\tau(u)}}{4\pi u^2}, \quad (2.10)$$

où on a employé, pour obtenir cette expression de (2.6), les relations:

$$\vec{\Omega} \cdot \vec{n}_- d^2r_s = s^2 d^2\Omega \quad \text{et} \quad d^3r' = u^2 du d^2\Omega.$$

L'équation ci-dessus donne le flux scalaire à l'intérieur du domaine \mathcal{D} . On voit qu'il est fonction des sources $Q(\vec{r})$ et du flux angulaire rentrant dans le domaine $\psi_-(\vec{r}_s, \vec{\Omega})$. A cette équation, on ajoute l'équation donnant le flux sortant du do-

maine en fonction des mêmes variables $\psi_-(\vec{r}_s, \vec{\Omega})$ et $Q(\vec{r})$:

$$\psi_+(\vec{r}'_s, \vec{\Omega}) = \psi_-(\vec{r}_s, \vec{\Omega})e^{-\tau(s)} + \int_0^{s'} du \mathcal{F}(\vec{r}') \frac{e^{-\tau(u)}}{4\pi}, \quad (2.11)$$

Cette formule, comme on peut le remarquer tout de suite, est simplement un cas particulier de l'équation (2.6) où on a posé $\vec{r} = \vec{r}'_s$ avec bien entendu $\vec{r}'_s \in \partial\mathcal{D}$ et $s' = \|\vec{r}'_s - \vec{r}_s\|$.

Les équations (2.10) et (2.11) écrites pour le domaine \mathcal{D} renferment trois inconnues $\psi_+(\vec{r}'_s, \vec{\Omega})$, $\psi_-(\vec{r}_s, \vec{\Omega})$ et $\phi(\vec{r})$. Pour constituer un système fermé, on ajoute à ces équations une troisième équation, dite équation géométrique, qui relie le flux angulaire rentrant aux conditions frontières [3].

$$\psi_-(\vec{r}_s, \vec{\Omega}) = \int_{(2\pi)} t(\vec{r}_s, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \psi_+(\vec{r}_s, \vec{\Omega}') d^2\Omega'. \quad (2.12)$$

Ici $t(\vec{r}_s, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega})$ est un facteur de transmission arbitraire à la surface $\partial\mathcal{D}$ et $\psi_+(\vec{r}_s, \vec{\Omega})$ est un flux imposé à cette surface. On a négligé dans cette équation les sources stationnaires à la surface.

Dans le cas du formalisme multicellule, comme on le verra dans ce qui suit, le domaine \mathcal{D} est une cellule unitaire et $\psi_+(\vec{r}_s, \vec{\Omega})$ peut être alors le flux sortant de la cellule adjacente à \mathcal{D} . Dans ce cas, l'équation (2.12) exprime la condition de continuité du flux angulaire aux interfaces du domaine étudié [3]. Dans le cas où \mathcal{D} est un assemblage, $\psi_+(\vec{r}_s, \vec{\Omega})$ peut être le flux angulaire sortant de l'assemblage

en question. Dans tous les cas, l'équation (2.12) est une équation de continuité du flux angulaire à la limite du milieu considéré.

Pour calculer $t(\vec{r}_s, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega})$, il faut faire des hypothèses sur le comportement des neutrons qui traversent une surface, c'est-à-dire sur la transmission et la réflexion des neutrons. Nous supposons que les facteurs de transmission sont spatialement uniformes sur chaque surface partielle α :

$$t(\vec{r}_s, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) = t_\alpha t(\vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega})$$

En ce qui concerne la partie angulaire $t(\vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega})$, on distingue généralement [5] dans les calculs neutroniques deux types de comportement:

- Un comportement du type ponctuel où on suppose que la transmission se fait sans déviation:

$$t(\vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) = \delta(\vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega})$$

et que la réflexion est spéculaire [5]:

$$t(\vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) = \delta(\vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}_R)$$

où $\vec{\Omega}_R = \vec{\Omega} - 2(\vec{\Omega}' \cdot \vec{n}_+) \vec{n}_+$.

- Un comportement du type intégral (ou global) où la transmission et la réflexion sont isotropes:

$$t(\vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) = \frac{1}{\pi} (\vec{\Omega}' \cdot \vec{n}_+).$$

Nous nous limiterons dans cette étude aux réflexions isotropes. Signalons cependant qu'il existe des travaux où on a utilisé la réflexion spéculaire pour traiter la

géométrie cartésienne [19].

2.2.3 Développement du flux sur les harmoniques sphériques

La première approximation qui sera adoptée consiste à utiliser une représentation approchée des flux angulaires mis en jeu dans le système d'équations précédent. Deux variables sont à considérer ici: la variable spatiale et la variable angulaire. Dans ce paragraphe, on portera notre attention sur la partie angulaire; quant à la variable spatiale, elle sera traitée au moment opportun. On peut développer $\psi_{\pm}(\vec{r}_s, \vec{\Omega})$ sur toute base complète, mais en théorie des probabilités de collision, on choisit généralement les harmoniques sphériques pour développer la partie du flux angulaire qui dépend de $\vec{\Omega}$. Ainsi, toute fonction $\vec{\Omega}$, et en particulier le flux angulaire, peut être approchée par:

$$\psi_{\pm}(\vec{r}_s, \vec{\Omega}) \sim \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n Y_n^m(\vec{\Omega}) J_{\pm, n}^m(\vec{r}_s) \quad (2.13)$$

où les $Y_n^m(\vec{\Omega})$ sont les harmoniques sphériques [15] [7]. Les poids $J_{\pm, n}^m(\vec{r}_s)$ sont donnés par:

$$J_{\pm, n}^m(\vec{r}_s) = \int_{(4\pi)} \psi_{\pm}(\vec{r}_s, \vec{\Omega}) \bar{Y}_n^m(\vec{\Omega}) d^2\Omega \quad (2.14)$$

avec $\bar{Y}_n^m(\vec{\Omega})$ le complexe conjugué de $Y_n^m(\vec{\Omega})$. Dans le développement (2.13), on se limite généralement à l'ordre un ($n = 1$), c'est-à-dire qu'on suppose notre flux angulaire linéairement anisotrope. Dans ce cas, on montre [18][7] que les harmoniques $Y_1^{-1}(\vec{\Omega})$, $Y_1^0(\vec{\Omega})$ et $Y_1^1(\vec{\Omega})$ sont liées aux composantes de $\vec{\Omega} = (\Omega_1, \Omega_2, \Omega_3)$ (voir la

référence [18] appendice A) par les relations suivantes:

$$\begin{aligned}\Omega_1 &= \sqrt{\frac{2\pi}{3}} [-Y_{1,1}(\vec{\Omega}) + Y_{1,-1}(\vec{\Omega})] \\ \Omega_2 &= i \sqrt{\frac{2\pi}{3}} [Y_{1,1}(\vec{\Omega}) + Y_{1,-1}(\vec{\Omega})] \\ \Omega_3 &= \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_0^1(\vec{\Omega})\end{aligned}\quad (2.15)$$

où $Y_{l,m}(\vec{\Omega}) = (-1)^m \bar{Y}_l^m(\vec{\Omega})$. Dans ces équations, i est le symbole désignant la partie complexe ($i^2 = -1$).

Compte tenu de ces relations, l'équation (2.13) peut être mise sous la forme générale suivante:

$$\psi_{\pm}(\vec{r}_s, \vec{\Omega}) \sim \sum_{\rho} J_{\pm}^{\rho}(\vec{r}_s) \psi_{\pm}^{\rho}(\vec{\Omega}), \quad (2.16)$$

où les fonctions $\psi_{\pm}^{\rho}(\vec{\Omega})$ correspondent à des combinaisons linéaires des $Y_n^m(\vec{\Omega})$, ne dépendent que de $\vec{\Omega}$ et forment un ensemble fini de fonctions linéairement indépendantes. Pour une surface plane par exemple, elles sont données par:

$$\begin{aligned}\psi_{\pm,\alpha}^0(\vec{\Omega}) &= 1, \\ \psi_{\pm,\alpha}^1(\vec{\Omega}) &= 2(\vec{\Omega} \cdot \vec{k}_{\pm,\alpha}), \\ \psi_{\pm,\alpha}^2(\vec{\Omega}) &= 3\sqrt{2}(\vec{\Omega} \cdot \vec{n}_{\pm,\alpha} - \frac{2}{3}) \\ \psi_{\pm,\alpha}^3(\vec{\Omega}) &= 2(\vec{\Omega} \cdot \vec{l}_{\pm,\alpha}).\end{aligned}$$

où $(\vec{n}_{\pm,\alpha}, \vec{k}_{\pm,\alpha}, \vec{l}_{\pm,\alpha})$ sont les vecteurs unitaires du trièdre défini sur la surface α . Les fonctions $\psi_{\pm}^{\rho}(\vec{\Omega})$ vérifient aussi les conditions d'orthonormalisation suivantes:

$$\int_{(2\pi)} (\vec{\Omega} \cdot \vec{n}_{\pm}) \psi_{\pm}^{\rho}(\vec{\Omega}) \psi_{\pm}^{\nu}(\vec{\Omega}) d^2\Omega = \pi \delta_{\rho\nu} \quad (2.17)$$

où $\delta_{\rho\nu}$ est le symbole de Kronecker.

Notons que pour respecter la condition de continuité du flux angulaire, on choisit le même développement pour les flux sortant et entrant. Dans le cas où ces développements sont tronqués à l'ordre un ($n = 1$), on dit qu'on fait un développement double P_1 noté DP_1 .

2.3 Méthode des probabilités de première collision

Ce paragraphe sera consacré aux différentes approximations utilisées pour résoudre l'équation de transport par la méthode des probabilités de collision. Nous y discuterons aussi de quelques propriétés de ces probabilités après qu'on ait établi le système matriciel.

2.3.1 Equations discrétisées

Nous avons vu, au premier paragraphe, qu'on a éliminé la variable angulaire $\vec{\Omega}$ dans le système d'équations en développant les flux angulaires sur les harmoniques sphériques. La variable spatiale sera éliminée de la même manière en adoptant une formulation approchée pour le flux scalaire sur le domaine \mathcal{D} :

$$\phi(\vec{r}) \sim \sum_i \phi_i \Theta_i(\vec{r}) \quad (2.18)$$

et pour le flux angulaire sur la surface $\partial\mathcal{D}$:

$$\psi_{\pm}(\vec{r}_s, \vec{\Omega}) \sim \sum_{\alpha, \rho} J_{\pm, \alpha}^{\rho} \psi_{\pm, \alpha}^{\rho}(\vec{\Omega}) \Theta_{\pm, \alpha}(\vec{r}_s) \quad (2.19)$$

les fonctions ϕ_i sont à support compact sur une sous partition \mathcal{D}_i de \mathcal{D} . Les sous ensembles \mathcal{D}_i sont homogènes, bornés et tels que:

$$\mathcal{D} = \bigcup_i \mathcal{D}_i \text{ et } \mathcal{D}_i \cap \mathcal{D}_j = \emptyset, \forall i \neq j.$$

De manière équivalente, nous avons supposé que la surface $\partial\mathcal{D}$ est partitionnée en sous-surfaces $\partial\mathcal{D}_\alpha$ d'intersections nulles:

$$\partial\mathcal{D} = \bigcup_\alpha \partial\mathcal{D}_\alpha.$$

Les composantes $J_{\pm,\alpha}^\rho$ sont bien entendu définies sur $\partial\mathcal{D}_\alpha \times S_\pm$, avec S_\pm la demi-sphère (de rayon unité) dont la base est superposé à la surface $\partial\mathcal{D}_\alpha$. Physiquement, les quantités $J_{\pm,\alpha}^\rho$ représentent les moments du courant entrant et sortant à la surface partielle $\partial\mathcal{D}_\alpha$. On a aussi défini dans ces relations des fonctions caractéristiques $\Theta_i(\vec{r})$ et $\Theta_{\pm,\alpha}(\vec{r})$ à support dans \mathcal{D}_i et $\partial\mathcal{D}_\alpha \times S_\pm$

$$\Theta_i(\vec{r}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \vec{r} \in \mathcal{D}_i \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.20)$$

et définition similaire pour $\Theta_{\pm,\alpha}(\vec{r})$. Ceci n'est autre chose que l'approximation du flux plat. D'un point de vue mathématique, cette approche n'est autre que celle de Galerkin [5].

En utilisant les approximations (2.18) et (2.19) dans le système (2.10)-(2.12), et après projection sur les fonctions de représentations, on obtient:

$$\sum_i V_i \phi_i = \sum_{\alpha,\rho} p_{i_s\alpha}^\rho \frac{4}{s_\alpha} J_{-,\alpha}^\rho + \sum_j V_j p_j \mathcal{F}_j$$

$$\begin{aligned} \frac{4}{s_\alpha} J_{+, \alpha}^p &= \sum_{\beta, \nu} P_{s_\alpha s_\beta}^{\rho\nu} \frac{4}{s_\beta} J_{-, \beta}^\nu + \sum_i V_i P_{s_\alpha i}^p \mathcal{F}_i, \\ \frac{4}{s_\alpha} J_{-, \alpha}^p &= \sum_{\beta, \nu} A_{\alpha\beta}^{\rho\nu} \frac{4}{s_\beta} J_{+, \beta}^\nu \end{aligned} \quad (2.21)$$

Nous avons adopté la même technique de projection que dans (2.18)-(2.19) pour obtenir les sources Q_i . La densité d'émission au volume \mathcal{D}_i s'en déduit alors par:

$$\mathcal{F}_i = \Sigma_{s_i} \phi_i + Q_i.$$

D'après la relation (2.8), ϕ_i est définie par

$$\phi_i = \frac{1}{V_i} \int_{\mathcal{D}_i} \phi(\vec{r}) d^3r$$

où V_i est le volume de la zone \mathcal{D}_i . Les sections efficaces moyennes de diffusion et totale sont données par:

$$\Sigma_{s_i} = \frac{1}{V_i \phi_i} \int_{\mathcal{D}_i} \phi(\vec{r}) \Sigma_s(\vec{r}) d^3r \quad (2.22)$$

$$\Sigma_i = \frac{1}{V_i \phi_i} \int_{\mathcal{D}_i} \phi(\vec{r}) \Sigma(\vec{r}) d^3r \quad (2.23)$$

Au système (2.21), on a les définitions implicites suivantes:

- Les probabilités de première collision:

$$p_{ij} = \frac{1}{V_j} \int_{\mathcal{D}_i} d^3r \int_{\mathcal{D}_j} d^3r' \Sigma(\vec{r}) \frac{e^{-\tau(u)}}{4\pi u^2}, \quad (2.24)$$

qui représentent la probabilité pour qu'un neutron émis dans le volume j , proportionnellement à la densité réelle uniforme des départs dans j , subisse son premier choc dans le volume i . C'est la quantité qui couple les différents

sous domaines de \mathcal{D} .

- Les probabilités surface-volume:

$$p_{i s_\alpha}^\rho = \frac{1}{\pi s_\alpha} \int_{\mathcal{D}_i} d^3 r \int_{\partial \mathcal{D}_\alpha} d^2 r_s \psi_{-, \alpha}^\rho(\vec{\Omega})(\vec{\Omega} \cdot \vec{n}_{-, \alpha}) \Sigma(\vec{r}) \frac{e^{-\tau(s)}}{s^2}, \quad (2.25)$$

qui reflètent la probabilité de premier choc dans i , pour un neutron entrant par la surface partielle $\partial \mathcal{D}_\alpha$ d'aire s_α suivant le mode ρ .

- Les probabilités de fuites:

$$P_{s_\alpha i}^\rho = \frac{1}{4\pi V_i} \int_{\mathcal{D}_i} d^3 r \int_{\partial \mathcal{D}_\alpha} d^2 r_s \psi_{+, \alpha}^\rho(\vec{\Omega})(\vec{\Omega} \cdot \vec{n}_{+, \alpha}) \frac{e^{-\tau(s)}}{s^2}, \quad (2.26)$$

qui expriment la probabilité pour qu'un neutron apparaissant dans i atteigne la surface $\partial \mathcal{D}_\alpha$ suivant le mode ρ sans subir de choc.

- Les probabilités de transmission:

$$P_{s_\alpha s_\beta}^{\rho\nu} = \frac{1}{\pi s_\beta} \int_{\partial \mathcal{D}_\alpha} d^2 r'_s \int_{\partial \mathcal{D}_\beta} d^2 r_s \psi_{+, \alpha}^\rho(\vec{\Omega}) \psi_{-, \beta}^\nu(\vec{\Omega}) (\vec{\Omega} \cdot \vec{n}_{+, \alpha}) (\vec{\Omega} \cdot \vec{n}_{-, \beta}) \frac{e^{-\tau(s')}}{s'^2} \quad (2.27)$$

qui ne sont autres que les probabilités pour qu'un neutron, entrant par la surface $\partial \mathcal{D}_\beta$ suivant le mode ν , atteigne la surface $\partial \mathcal{D}_\alpha$ suivant le mode ρ .

Comme $\Sigma(\vec{r})$ est supposée constante et égale à Σ_i dans le domaine \mathcal{D}_i , on défini

les probabilités réduites suivantes:

$$P_{i s_\alpha}^\rho = \frac{p_{i s_\alpha}^\rho}{\Sigma_i} = \frac{1}{\pi s_\alpha} \int_{\mathcal{D}_i} d^3 r \int_{\partial \mathcal{D}_\alpha} d^2 r_s \psi_{-, \alpha}^\rho(\vec{\Omega})(\vec{\Omega} \cdot \vec{n}_{-, \alpha}) \frac{e^{-\tau(s)}}{s^2} \quad (2.28)$$

$$P_{ij} = \frac{p_{ij}}{\Sigma_i} = \frac{1}{V_i} \int_{\mathcal{D}_i} d^3 r \int_{\mathcal{D}_j} d^3 r' \frac{e^{-\tau(u)}}{4\pi u^2} \quad (2.29)$$

Dans ces équations, $s' = \|\vec{r}_s - \vec{r}_{s'}\|$ et $\vec{n}_{\pm, k}$ est la normale entrante (-) ou sortante (+) de la surface partielle $k = \alpha, \beta, \nu, \dots$

En ce qui concerne les coefficients de transmission (matrice albedo) aux surfaces partielles, ils sont donnés par [3]:

$$A_{\alpha\beta}^{\rho\nu} = \frac{1}{\pi s_\beta} \int_{\partial \mathcal{D}_\alpha} d^2 r_s \int_{(2\pi)} d^2 \Omega \psi_{-, \alpha}^\rho(\vec{\Omega})(\vec{\Omega} \cdot \vec{n}_{-, \alpha}) \int_{(2\pi)} d^2 \Omega' \psi_{+, \beta}^\nu(\vec{\Omega}') t(\vec{r}_s, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \quad (2.30)$$

L'établissement du système d'équations (2.21) est donc basé sur une discrétisation d'une part du domaine \mathcal{D} en sous domaine de plus petites tailles et d'autre part de la surface $\partial \mathcal{D}$ en surfaces partielles. Il est évident que la solution de ce système est d'autant plus précise que la discrétisation est fine (l'approximation du flux plat est mieux réalisée). Mais ceci peut engendrer de faible précision si les domaines \mathcal{D}_i sont trop faibles, en plus des coûts de calculs considérable du fait que le nombre de probabilités à calculer varie en N^2 (N est le nombre de zone \mathcal{D}_i) [5]. L'utilisation de la méthode des probabilités de collision pour calculer de large domaine ou des domaines à flux très anisotropes est donc pratiquement impossible. C'est pour cela que cette méthode est souvent limitée à la génération de propriétés cellulaires des assemblages des réacteurs nucléaires.

Dans les expressions des probabilités (2.27)-(2.29), nous avons supposé des flux plats par zone homogène \mathcal{D}_i (equation (2.18) et (2.20)). On peut envisager, pour diminuer le degré de N , une approximation polynomiale d'ordre élevé du flux. Mais ceci va conduire au calcul d'autres probabilités de collisions qui ne seront pas faciles ni moins dispendieuses à calculer.

Nous nous limiterons donc à l'approximation du flux plat par zone homogène et nous supposerons que la convergence spatiale est atteinte lorsque tous les parcours optiques sont inférieurs au plus petit libre parcours moyen rencontré dans le domaine calculé \mathcal{D} (c'est même l'une des hypothèses physique implicite de la théorie des probabilités de collision qui est basée sur le parcours rectiligne des neutrons).

2.3.2 Relations de réciprocités

La résolution du système (2.21), exige le calcul des probabilités (2.27)-(2.29) pour les divers fonctions de représentations des flux (2.18)-(2.19). Cependant, l'existence des relations de réciprocités et de conservation permet de réduire le nombre de probabilités à évaluer. Ces relations sont des conséquences directes des propriétés de l'équation de transport. Il existe d'autres symétries propres aux configurations géométriques du domaine (géométrie hexagonale dans notre cas) qui réduisent d'avantage la quantité des calculs à faire. Elles seront considérées ultérieurement.

En ce qui concerne les relations de réciprocités, elles sont une conséquence directe de la symétrie du noyau de collision $T(\vec{r}, \vec{r}') = T(\vec{r}', \vec{r})$. En effet, comme les fonctions de représentations angulaires sont supposées satisfaire la relation [3] $\psi_{+, \alpha}^{\rho}(\vec{\Omega}) = \psi_{-, \alpha}^{\rho}(-\vec{\Omega})$ et comme le parcours optique est symétrique, $\tau(\vec{r}, \vec{r}') = \tau(\vec{r}', \vec{r})$, il est facile de déduire des relations (2.27)-(2.29) que:

$$\begin{aligned} V_j P_{ij} &= V_i P_{ji}, \\ P_{is_{\alpha}}^{\rho} &= \frac{4V_i}{s_{\alpha}} P_{s_{\alpha}i}^{\rho}, \\ s_{\beta} P_{s_{\alpha}s_{\beta}}^{\rho\nu} &= s_{\alpha} P_{s_{\beta}s_{\alpha}}^{\nu\rho}. \end{aligned} \quad (2.31)$$

Ces relations permettent de réduire de moitié le nombre de probabilités à évaluer.

2.3.3 Relations de conservation

Pour établir ces relations [3] [20] [4], nous supposons tout d'abord que notre domaine \mathcal{D} est purement absorbant et ne contient que des sources volumiques isotropes sans sources de surfaces. Dans ces conditions, le flux sans chocs et le courant sans chocs produit par ces sources sont:

$$\phi(\vec{r}) = \int_{\mathcal{D}} Q(\vec{r}') \frac{e^{-\tau(u)}}{u^2} d^3 r'. \quad (2.32)$$

$$\vec{J}(\vec{r}) = \int_{\mathcal{D}} Q(\vec{r}') \frac{e^{-\tau(u)}}{u^2} \vec{\Omega} d^3 r'. \quad (2.33)$$

L'équation de transport intégro-différentielle s'écrit dans ce cas:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J}(\vec{r}) = Q(\vec{r}) - \Sigma(\vec{r})\phi(\vec{r}), \quad (2.34)$$

Cette équation n'est autre que la relation de conservation des neutrons où tout neutron subissant un choc est considéré comme absorbé.

Intégrons cette dernière équation sur \mathcal{D} en utilisant le théorème de divergence.

On trouve:

$$\int_{\partial\mathcal{D}} \vec{J}(\vec{r}_s) \cdot \vec{n}_+ d^2r_s = \int_{\mathcal{D}} \{Q(\vec{r}) - \Sigma(\vec{r})\phi(\vec{r})\} d^3r \quad (2.35)$$

Supposons que notre source est indépendante de \vec{r} : $Q(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi}$, $\forall \vec{r} \in \mathcal{D}$, alors l'équation (2.35) devient, compte tenu des relations (2.18), (2.19) et (2.27)-(2.29):

$$\sum_{\alpha} P_{s_{\alpha}i}^0 = 1 - \sum_j \Sigma_j P_{ji} \quad (2.36)$$

Supposons maintenant qu'on n'a que des sources surfaciques sur notre domaine, dues aux flux entrant $\psi_-(\vec{r}_s, \vec{\Omega})$. En posant $Q(\vec{r}_s, \vec{\Omega}) = \psi_{-, \alpha}^{\rho}(\vec{\Omega})(\vec{\Omega} \cdot \vec{n}_-) \Theta_{-, \alpha}(\vec{r}_s)$ dans les équations ci-dessus et après quelques manipulations algébriques on obtient:

$$\sum_{\beta} P_{s_{\beta} s_{\alpha}}^{0\rho} = \delta_{\rho 0} - \sum_j \Sigma_j P_{j s_{\alpha}}^{\rho} \quad (2.37)$$

Ces relations de conservations sont généralement utilisées comme condition de normalisation des probabilités de collision de façon à assurer la conservation des neutrons.

2.4 Probabilités de collision en géométrie à deux dimensions

Dans les calculs pratiques, on se place souvent dans une situation où les propriétés neutroniques du domaine \mathcal{D} ainsi que les sources et les conditions aux limites

sont invariantes suivant l'axe z . Autrement dit, notre domaine est considéré infini selon la direction z . Il en résulte donc que le flux sera aussi invariant le long de cet axe et donc indépendant de la variable spatiale z . On aura alors tout intérêt à intégrer le système d'équations (2.21) sur z . En d'autres termes, faire une projection sur le plan xy et donc passer au traitement de l'équation de transport dans une géométrie à deux dimensions. On se propose dans ce paragraphe d'établir les expressions des éléments de la matrice du système (2.21) dans cette configuration. Nous avons choisi de ne pas expliciter ici ces relations; ce qui nous intéresse c'est la forme générale des probabilités, le détail des calculs sera considéré plus loin.

2.4.1 Matrice de collision

Pour évaluer les expressions (2.27)-(2.29), il est plus commode d'intégrer le long de la trajectoire des neutrons. Pour se faire, introduisons le changement de variable $d^3r = u^2 du d\vec{\Omega}$ dans l'équation (2.29), il vient:

$$P_{ij} = \frac{1}{4\pi V_j} \int_{\mathcal{D}_j} d^3r' \int du d\vec{\Omega} e^{-\tau(u)}. \quad (2.38)$$

Projetons celle-ci sur le plan xy ; avec les relations $\sin\theta du = dt$, $d\vec{\Omega} = \sin\theta d\theta d\varphi$ et $\tau(u) = \frac{\tau(t)}{\sin\theta}$ on trouve:

$$P_{ij} = \frac{1}{2\pi V_j} \int_{\mathcal{D}_j} d^2r' \int dt d\varphi Ki_1(\tau(t)). \quad (2.39)$$

Où on a défini les fonctions de Bickley-Naylor [4] par:

$$Ki_n(x) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin^{n-1}\theta e^{-\frac{x}{\sin\theta}} d\theta. \quad (2.40)$$

On utilise encore ici les notations \mathcal{D}_i pour désigner les domaines d'intégration qui sont maintenant des domaines plans. Les volumes V_i sont par conséquent les surfaces géométriques des \mathcal{D}_i .

Les limites des trois intégrales dans (2.39) dépendent de la configuration géométrique des domaines de départ et d'arrivée et de leur position relative. L'intégration sur φ portera sur tous les angles permettant à une trajectoire plane, repérée par l'angle polaire φ , de croiser à la fois les domaines \mathcal{D}_i et \mathcal{D}_j .

2.4.2 Probabilités de fuite

En introduisant le même changement de variable que précédemment dans l'équation (2.26), on obtient après projection sur le plan xy :

$$P_{s\alpha i}^\rho = \frac{1}{4\pi V_i} \int_{\partial\mathcal{D}_\alpha} d^2\tau_s \int dt \int d\varphi \int_0^\pi d\theta \psi_{+, \alpha}^\rho(\vec{\Omega})(\vec{\Omega} \cdot \vec{n}_{+, \alpha}) e^{-\frac{\tau(t)}{\sin\theta}} \quad (2.41)$$

L'intégration sur $\partial\mathcal{D}_\alpha$ se réduit ici à l'intégration à une dimension.

On peut encore réduire cette équation en remarquant que sur le plan xy , l'expression $(\vec{\Omega} \cdot \vec{n}_{+, \alpha})$ peut se factoriser sous la forme:

$$(\vec{\Omega} \cdot \vec{n}_{+, \alpha}) = \sin\theta \Omega_{+, \alpha}(\varphi), \quad (2.42)$$

où $\Omega_{+, \alpha}(\varphi)$ ne dépend que de l'angle φ . D'autre part, on a vu dans le paragraphe 2.2 que les moments $\psi_{\pm, \alpha}^\rho(\vec{\Omega})$ qui nous intéressent sont proportionnels aux harmoniques

sphériques. Il est possible alors d'écrire [9]:

$$\psi_{+,\alpha}^\rho(\vec{\Omega}) = f_{+,\alpha}^\rho(\varphi) \sin^{\bar{\rho}} \theta, \quad (2.43)$$

où $\bar{\rho}$ est un entier qui dépend de ρ et $f_{+,\alpha}^\rho(\varphi)$ ne dépend que de φ (voir annexe A).

En remplaçant ces expressions dans l'équation précédente, on obtient:

$$P_{s_\alpha i}^\rho = \frac{1}{4\pi V_i} \int_{\partial \mathcal{D}_\alpha} d^2 r_s \int dt \int d\varphi f_{+,\alpha}^\rho(\varphi) \Omega_{+,\alpha}(\varphi) K i_{\bar{\rho}+2}(\tau(t)) \quad (2.44)$$

2.4.3 Probabilités de transmission

En adoptant la même technique de changement de variable dans l'équation (2.27) à savoir: $(\vec{\Omega} \cdot \vec{n}_{-,\beta}) d^2 r_s = s'^2 d^2 \Omega$, et après projection sur le plan xy , il vient:

$$P_{s_\alpha s_\beta}^{\rho\nu} = \frac{1}{\pi s_\beta} \int_{\partial \mathcal{D}_\alpha} d^2 r'_s \int_{(2\pi)} d^2 \Omega \psi_{+,\alpha}^\rho(\vec{\Omega}) \psi_{-,\beta}^\nu(\vec{\Omega}) (\vec{\Omega} \cdot \vec{n}_{+,\alpha}) e^{-\frac{\tau(t')}{\sin \theta}} \quad (2.45)$$

Avec les factorisations (2.42) et (2.43), la formule ci-dessus s'écrit:

$$P_{s_\alpha s_\beta}^{\rho\nu} = \frac{1}{\pi s_\beta} \int_{\partial \mathcal{D}_\alpha} d^2 r'_s \int d\varphi f_{+,\alpha}^\rho(\varphi) f_{-,\beta}^\nu(\varphi) \Omega_{+,\alpha}(\varphi) K i_{\bar{\rho}+\bar{\nu}+3}(\tau(t')). \quad (2.46)$$

où $f_{-,\beta}^\nu(\varphi)$ est liée à $\psi_{-,\beta}^\nu(\vec{\Omega})$ par une relation similaire à l'équation (2.43).

En conclusion, les formules donnant les probabilités de collision en dimension deux font apparaître des fonctions de Bickley-Naylor. Ces fonctions sont généralement tabulées plutôt qu'évaluées (par fractions rationnelles), afin de sauver du temps CPU lors des calculs de production.

CHAPITRE 3

Méthode multicellules

3.1 Introduction

Pour calculer les assemblages des réacteurs nucléaires, on décompose ces derniers en un ensemble de cellules connectées entre elles. La méthode multicellules [9] [4] consiste à résoudre l'équation de transport dans chaque cellule et de connecter celle-ci avec le reste de l'assemblage par les courants neutroniques en surface.

Les premiers calculs neutroniques se faisaient en supposant que chaque cellule est placée dans un milieu infini et homogène. Mais une telle situation ne reflète pas la réalité. Il existe bien des situations où on ne peut pas négliger l'hétérogénéité des assemblages. C'est le cas par exemple des réacteurs à eau légère. Des améliorations ont été portées ensuite à cette situation. Il s'agit notamment de l'approximation ROTH [9] [4], qui consiste à remplacer les frontières d'une cellule à géométrie donnée (rectangle ou hexagone) par une frontière unique avec ou sans cylindrisation. Ceci implique que la cellule interagit avec l'extérieur via une seule surface. Il en résulte alors que le nombre de courants inconnus sera réduit de six à un inconnu dans le cas de la géométrie hexagonale.

Cette méthode a deux inconvénients majeurs (voir 3.4.5): Elle suppose d'une part qu'un neutron entrant dans la cellule peut en sortir par la même surface; et puis elle considère mal l'hétérogénéité de la cellule: surestimation des probabilités de transmission.

On a amélioré cette approximation [9] en supposant que la cellule cylindrisée possède la même surface que la cellule initiale. Mais même avec cette amélioration des calculs de cellules peuvent s'avérer imprécis dans certaines situations pratiques [2].

Dans ce travail, on se propose de toujours utiliser la méthode multicellules mais avec un traitement de la cellule tel qu'elle, sans l'approximation de cylindrisation. Nous résoudrons donc l'équation de transport dans une cellule hexagonale qui peut éventuellement contenir des cylindres concentriques en son centre. Cette méthode sera nommé ici méthode à courants d'interfaces. Pour calculer une telle cellule, on aura besoin de calculer les différentes probabilités de transmission pour les différentes surfaces et différents modes d'approximation, en plus des probabilités de fuites pour chaque région et pour chaque mode d'approximation angulaire aux surfaces. La méthode des courants d'interfaces sera donc coûteuse pour des calculs de transport de routine qui nécessitent des calculs d'autoprotection des résonances où l'on fait appel aux calculs des probabilités de collision [24].

En parallèle à cette méthode, qui en formalisme multicellules devrait être théoriquement la plus précise, on a développé une méthode J_{\pm} [26] [28], qui consiste à résoudre l'équation de transport dans chaque zone homogène de la cellule. Le couplage des zones est fait par l'intermédiaire de leurs surfaces. La cellule est ensuite couplée au reste de l'assemblage de la même manière que dans le cas de la méthode des courants d'interfaces. C'est donc un autre degré d'approximation au niveau de la résolution de l'équation de transport. Cette méthode ne nécessite cependant que le calcul des probabilités de transmission et sera donc moins coûteuse que la méthode des courants d'interfaces. Elle est cependant beaucoup moins précise. Elle sera surtout utilisée pour calculer les sections efficaces autoprotégées.

Nous examinerons dans cette partie les différentes méthodes citées ci-dessus. Ensuite, nous traiterons les techniques numériques implantées dans le code DRAGON. Nous insisterons en particulier sur les différentes symétries hexagonales prises en considération. On en profitera pour définir les notions de regroupement et d'orientation des cellules qui nous permettent de réduire l'ordre du problème (de la matrice de collision) à résoudre.

En ce qui concerne la résolution du système matriciel, nous ne ferons que citer de manière très générale les méthodes usuellement utilisées. Pour celles implantées dans DRAGON, le lecteur intéressé pourra consulter la référence [29].

3.2 Méthode des courants d'interfaces

Dans le cadre du formalisme multicellules [3] [4], nous appliquerons dans ce chapitre la méthode des courants d'interfaces pour résoudre l'équation de transport dans des assemblages de cellules hexagonales. Nous devons donc évaluer les différentes probabilités de collision qui forment les éléments de la matrice à inverser (voir plus loin). Nous considérerons des cellules qui peuvent être homogènes comme hétérogènes avec un nombre quelconques de cylindres concentriques (figure 3.1).

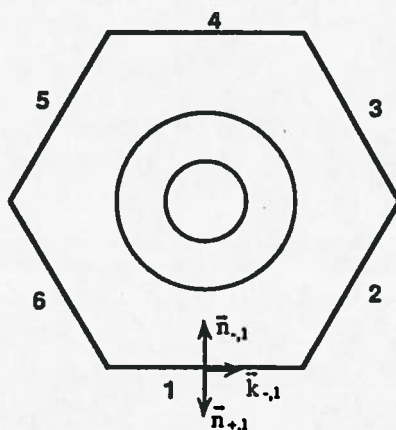


Figure 3.1: Exemple de cellule traitée: numérotation des surfaces

Grâce aux relations de conservation et de réciprocité démontrées à la section 2.3, nous n'aurons à calculer que les probabilités surfaces-volumes et les probabilités de transmissions. Les probabilités de première collision des zones cylindriques seront évaluées séparément par l'utilisation d'un logiciel limité au cas 1-D cylindrique [25]. Finalement les probabilités de collision concernant le volume à bordure hexagonale seront obtenues par les relations de conservations et de réciprocités. En effet,

comme les probabilités de premières collisions ne dépendent que des parcours des neutrons dans les volumes de départ et d'arrivée et du milieu entre ces volumes, on peut calculer les probabilités du bloc de cylindres indépendamment du reste de la cellule. Ceci a un avantage, car la symétrie de révolution équivaut à un problème à une dimension.

3.2.1 Fonctions de représentations

La représentation du flux angulaire repose sur la partition de la surface de la cellule en surfaces partielles et le développement du flux sur ces surfaces. Dans notre cas, nous assimilerons chaque face de l'hexagone à une surface partielle où le flux angulaire sera supposé spatialement uniforme avec deux représentations possibles: soit qu'on tronque le développement (2.13) à l'ordre zéro ($n = 0$) soit qu'on le tronque à l'ordre 1 ($n = 1$). Dans le premier cas, le flux angulaire est représenté par une seule fonction constante et on fait donc l'approximation familière du flux isotrope (ou flux en cosinus). Dans le second cas, le flux sera représenté par quatre fonctions; on fait donc un développement P_1 (flux linéairement anisotrope). Dans tous les cas, on fera deux développements indépendant pour les flux angulaires entrant et sortant. Ce sont les approximations dites double P_0 (DP_0) ou double P_1 (DP_1) respectivement .

Compte tenu des relations (2.13) et (2.16), les composantes des moments $\psi_{\pm}^l(\vec{\Omega})$

sont données par:

$$\psi_{\pm,\alpha}^0(\vec{\Omega}) = 1, \quad (3.1)$$

$$\psi_{\pm,\alpha}^1(\vec{\Omega}) = 2(\vec{\Omega} \cdot \vec{k}_{\pm,\alpha}), \quad (3.2)$$

$$\psi_{\pm,\alpha}^2(\vec{\Omega}) = 3\sqrt{2}(\vec{\Omega} \cdot \vec{n}_{\pm,\alpha} - \frac{2}{3}) \quad (3.3)$$

$$\psi_{\pm,\alpha}^3(\vec{\Omega}) = 2(\vec{\Omega} \cdot (\vec{n}_{\pm,\alpha} \wedge \vec{k}_{\pm,\alpha})). \quad (3.4)$$

où $(\vec{n}_{\pm,\alpha} \wedge \vec{k}_{\pm,\alpha})$ désigne le produit vectoriel soit de $\vec{n}_{+,\alpha}$ et $\vec{k}_{+,\alpha}$, soit de $\vec{n}_{-,\alpha}$ et $\vec{k}_{-,\alpha}$. Les vecteurs $\vec{n}_{+,\alpha}$ et $\vec{k}_{+,\alpha}$ forment une base orthonormée (figure 3.1) sur chaque surface α (et de même pour les composantes $\vec{n}_{-,\alpha}$ et $\vec{k}_{-,\alpha}$).

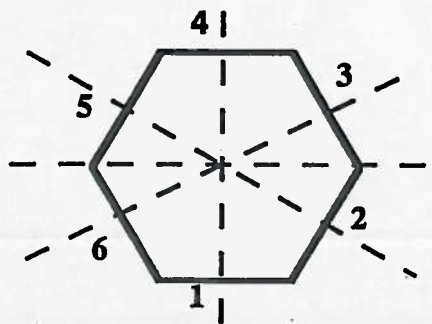
Du fait de l'invariance suivant l'axe des z , la composante $\psi_{\pm,\alpha}^3(\vec{\Omega})$ n'interviendra pas dans les calculs des probabilités de collision. Notons que ces fonctions satisfont d'une part les relations d'orthonormalisation (2.17) et d'autre part les relations de réciprocités (2.31).

3.2.2 Relations de symétries

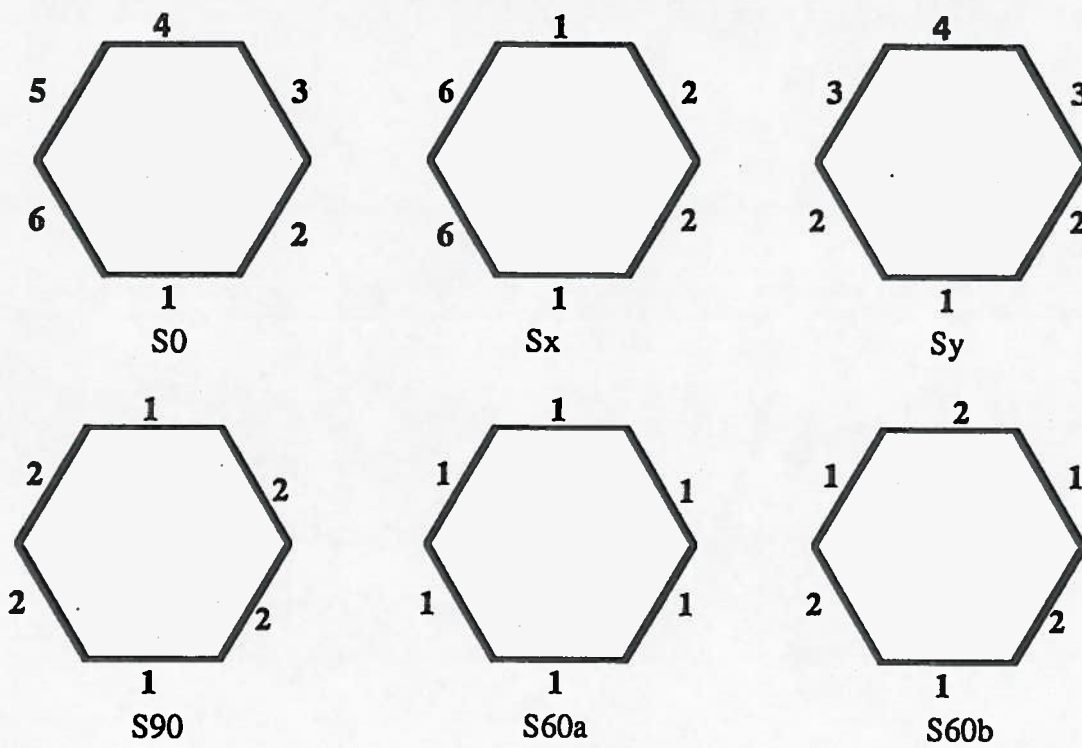
Nous allons profiter de la symétrie que présente la géométrie hexagonale (figure 3.2), ainsi que des symétries de représentation pour établir des relations entre les différentes probabilités de transmission et entre les probabilités de fuites. Ce qui a pour conséquence de réduire considérablement le nombre de probabilités à évaluer.

3.2.2.1 Probabilités de transmission

Nous observons tout d'abord que la cellule hexagonale est invariante pour une



Axes de symétries hexagonales



Groupe de symétrie

Figure 3.2: Symétries hexagonales

rotation de $\frac{\pi}{3}$. Si r_β est la rotation qui nous permet de placer la face β à la position du côté 1 (figure 3.2) c'est-à-dire:

$$r_\beta s_\beta = s_1$$

$$r_\beta s_\alpha = s_k$$

et

$$\psi_{\pm,\beta}(\vec{\Omega}) = \psi_{\pm,1}(\vec{\Omega})$$

$$\psi_{\pm,\alpha}(\vec{\Omega}) = \psi_{\pm,k}(\vec{\Omega})$$

alors on peut écrire [9]:

$$P_{s_\alpha s_\beta}^{\rho\nu} = P_{s_k s_1}^{\rho\nu} \quad (3.5)$$

où la face k est la position que prend la face α sous l'action de r_β . Cette symétrie intrinsèque nous montre que l'on ne doit calculer les probabilités de transmission que pour le côté d'entrée 1.

D'autre part, la cellule présente cinq autres symétries internes qui sont schématisées dans la figure 3.2. Sous l'action de ces symétries, les fonctions de représentations s'écrivent simplement [9]:

$$\psi_{\pm,\alpha}^\rho(\vec{\Omega}) = (-1)^\rho \psi_{\pm,H,\alpha}^\rho(\vec{\Omega}) \quad (3.6)$$

où H représente l'une des symétries de la figure 3.2, et $H.\alpha$ l'image de la surface α

due à l'action de cette symétrie.

On appliquera les différentes symétries sur les probabilités de transmission données par (2.27). On emploiera le fait que le noyau de transport reste invariant sous l'action de ces symétries et que le jacobien des transformations:

$$\frac{\partial(\vec{r}, \vec{r}', \vec{\Omega})}{\partial(H.\vec{r}, H.\vec{r}', H.\vec{\Omega})} = 1.$$

On écrit alors:

$$P_{s_\alpha s_\beta}^{\rho\nu} = (-1)^{\rho+\nu} P_{s_{H.\alpha} s_{H.\beta}}^{\rho\nu}. \quad (3.7)$$

Distinguons maintenant les différentes symétries une par une en utilisant la relation de réciprocité si nécessaire:

- Symétrie S_x :

Elle interchange les faces 1 et 4, d'où

$$P_{s_4 s_1}^{\rho\nu} = (-1)^{\rho+\nu} P_{s_1 s_4}^{\rho\nu} = (-1)^{\rho+\nu} P_{s_4 s_1}^{\nu\rho} \quad (3.8)$$

- Symétrie S_y :

Elle laisse les côtes 1 et 4 inchangés, soit:

$$P_{s_2 s_1}^{\rho\nu} = (-1)^{\rho+\nu} P_{s_6 s_1}^{\rho\nu}, \quad (3.9)$$

$$P_{s_3 s_1}^{\rho\nu} = (-1)^{\rho+\nu} P_{s_5 s_1}^{\rho\nu}, \quad (3.10)$$

$$P_{s_4 s_1}^{\rho\nu} = (-1)^{\rho+\nu} P_{s_4 s_1}^{\rho\nu}. \quad (3.11)$$

Cette dernière relation montre que $P_{s_4 s_1}^{\rho\nu} = 0$ si $\rho + \nu$ est impair.

- Symétrie $S60a$:

Elle interchange les faces 1 et 6, ce qui donne:

$$P_{s_6 s_1}^{\rho\nu} = (-1)^{\rho+\nu} P_{s_1 s_6}^{\rho\nu} = (-1)^{\rho+\nu} P_{s_6 s_1}^{\nu\rho} \quad (3.12)$$

- Symétrie $S60b$:

Elle interchange les faces 1 et 5, on obtient:

$$P_{s_5 s_1}^{\rho\nu} = (-1)^{\rho+\nu} P_{s_1 s_5}^{\rho\nu} = (-1)^{\rho+\nu} P_{s_5 s_1}^{\nu\rho} \quad (3.13)$$

De plus il est facile de montrer (à partir des expressions des différentes probabilités (voir annexe A)) que:

$$\sqrt{2}P_{s_6 s_1}^{20} = \sqrt{3}P_{s_6 s_1}^{10} - 4P_{s_6 s_1}^{00}, \quad (3.14)$$

$$P_{s_6 s_1}^{22} = -\frac{9}{2}P_{s_6 s_1}^{11} + \sqrt{6}P_{s_6 s_1}^{21} - 8\sqrt{3}P_{s_6 s_1}^{10} + 8P_{s_6 s_1}^{00}, \quad (3.15)$$

$$\sqrt{2}P_{s_5 s_1}^{20} = -3\sqrt{3}P_{s_5 s_1}^{10} - 4P_{s_5 s_1}^{00}, \quad (3.16)$$

$$P_{s_5 s_1}^{22} = -\frac{9}{2}P_{s_5 s_1}^{11} - \sqrt{6}P_{s_5 s_1}^{21} - 8\sqrt{3}P_{s_5 s_1}^{10} + 8P_{s_5 s_1}^{00}. \quad (3.17)$$

Avec toutes ces relations, on ne devra calculer, pour une cellule hexagonale donnée, que les probabilités de transmission suivantes:

$$P_{s_6 s_1}^{00}, P_{s_6 s_1}^{10}, P_{s_6 s_1}^{11}, P_{s_6 s_1}^{21}, \quad (3.18)$$

$$P_{s_5 s_1}^{00}, P_{s_5 s_1}^{10}, P_{s_5 s_1}^{11}, P_{s_5 s_1}^{21}, \quad (3.19)$$

$$P_{s_4 s_1}^{00}, P_{s_4 s_1}^{11}, P_{s_4 s_1}^{20}, P_{s_4 s_1}^{22}. \quad (3.20)$$

Nous avons donc réduit le nombre de probabilités de transmission de 324 probabilités à seulement 12 probabilités à évaluer.

3.2.2.2 Probabilités de fuites

Comme nous supposons que tous les volumes de la cellule sont à symétrie de révolution, on peut alors écrire:

$$P_{s_\alpha i}^\rho = (+1)^\rho P_{s_{H.\alpha} i}^\rho. \quad (3.21)$$

On en déduit alors qu'on ne calculera les probabilités de fuites, pour les différents mode ρ , que pour un seul côté de l'hexagone.

Si nous considérons maintenant la symétrie pure de la cellule, qui laisse invariant le côté α , on peut alors écrire:

$$P_{s_\alpha i}^\rho = (-1)^\rho P_{s_\alpha i}^\rho. \quad (3.22)$$

Ce qui laisse entendre que pour $\rho = 1$, la probabilité correspondante $P_{s_\alpha i}^1 = 0$. On aura donc à évaluer: $P_{s_1 i}^0$ et $P_{s_1 i}^2$ pour l'ensemble des sous domaines i de la cellule.

3.2.3 Résolution du système matriciel

Nous énumérerons très brièvement deux méthodes qui peuvent être utilisées pour résoudre le système (2.21). Il s'agit d'une méthode directe et d'une autre

itérative.

Méthode directe:

Commençons tout d'abord par écrire le système (2.21) sous une forme matricielle. Il vient:

$$\vec{\phi} = P_{IS}\vec{J}_- + P\vec{F}, \quad (3.23)$$

$$\vec{J}_+ = P_{SS}\vec{J}_- + P_{SI}\vec{F}, \quad (3.24)$$

$$\vec{J}_- = A\vec{J}_+. \quad (3.25)$$

Où P_{IS} , P , P_{SS} et P_{SI} sont des matrices de probabilités globales, $\vec{\phi} = \{\phi_1, \phi_2, \dots\}$ et $\vec{J}_\pm = \{J_{\pm,1}^0, J_{\pm,1}^1, \dots, J_{\pm,2}^0, J_{\pm,2}^1, \dots\}$ représentent les vecteurs de flux et de courants et $\vec{F} = \Sigma_s \vec{\phi} + \vec{Q}$. Il est sous entendu que nous avons numérotés globalement toutes les composantes des flux et des courants de toutes les cellules de l'assemblage. Les matrices citées ci-dessus sont bloc-diagonales, où chaque bloc correspond à une cellule de l'assemblage.

On calculera le courant entrant \vec{J}_- en éliminant le courant \vec{J}_+ entre les équations (3.24) et (3.25). On trouve:

$$\vec{J}_- = \tilde{P}_{SS}P_{SI}\vec{F} \quad (3.26)$$

où

$$\tilde{P}_{SS} = [I - P_{SS}A]^{-1}A \quad (3.27)$$

est une matrice pleine contrairement à P_{SS} .

Utilisant maintenant l'équation (3.26) dans l'équation (3.23), on obtient la relation recherchée qui est:

$$\vec{\phi} = [P_{IS}\tilde{P}_{SS}P_{SI} + P]\vec{F} \quad (3.28)$$

Une partie importante du calcul numérique réside dans l'évaluation de la matrice \tilde{P}_{SS} . On utilise souvent une méthode directe de Gauss [4] pour calculer la matrice inverse $[I - P_{SS}A]^{-1}$. Cette méthode nécessite le stockage simultanée en mémoire rapide des matrices globales P et deux fois P_{SS} [4] [3].

Méthode itérative [3]:

La méthode précédente ne profite pas de la structure en bloc des matrices P_{IS} , P , P_{SS} et P_{SI} . En tenant compte de ce fait, on peut décomposer le système d'équations (3.23)-(3.25) en un ensemble de systèmes plus petit, un par cellule couplés entre eux.

Remarquons que les deux premières équations du système (3.23)-(3.25) donnent le flux et le courant sortant en fonction des sources et du courant entrant; et que la troisième équation donne le courant entrant en fonction du courant sortant. Il est tout à fait possible de procéder à une résolution itérative où l'on calculerait, cellule par cellule, le courant sortant en fonction du courant entrant, utilisant ensuite

le courant sortant obtenu pour calculer un nouveau courant entrant à l'aide de l'équation géométrique et continuer ainsi les itérations. Différent processus itérative peuvent être envisagés comme par exemple celui de Gauss- Seidel.

Sans trop rentrer dans les détails, cette méthode parait à fortiori plus avantageuse, du point de vue temps de calcul et de la mémoire utilisée, que la précédente.

3.3 Méthode J_{\pm}

La méthode J_{\pm} consiste à résoudre l'équation de transport des neutrons dans chaque zone homogène de la cellule. On couple ensuite les différentes zones via leurs surfaces. C'est donc une autre approche de la solution de l'équation de transport. Toujours dans le cadre du formalisme multicellules, on appliquera cette méthode aux cellules hexagonales hétérogènes. Comme on résout l'équation de transport dans un milieu homogène, on ne calculera alors que les probabilités de transmissions. Cette situation est similaire au cas d'une cellule homogène du formalisme des courants d'interfaces dont les probabilités sont données à l'annexe A. On aura cependant affaire ici à sept surfaces au lieu de six précédemment: six surfaces de l'hexagone plus la surface cylindrique. Les autres probabilités: de fuites, de surfaces-volumes et de première collision sont obtenues à l'aide des relations de conservation et de réciprocités démontrées dans le premier chapitre de ce manuscrit.

Nous considérerons donc les cellules du type de la figure 3.3. Comme dans le cas de la méthode à courants d'interfaces, la partie cylindrique, c'est à dire l'ensemble

des cylindres concentrés au milieu de la cellule, sera traitée indépendamment [26]. Notre attention sera portée sur la partie à bordure hexagonale, partie non hachurée de la figure 3.3.

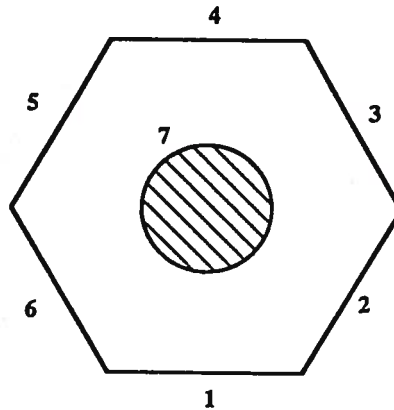


Figure 3.3: Cellule type du cas J_{\pm} : numérotation des surfaces

Nous décrivons dans ce qui suit la façon de calculer les différentes probabilités, puis de manière brève la résolution algébrique du système d'équations "multizones" qu'engendre cette méthode. Le système multicellules (2.21) sera écrit ici pour chaque zone, d'où l'appellation multizone.

3.3.1 Relation entre les probabilités de transmission

Toutes les relations de symétries, démontrées dans le paragraphe précédent pour les six faces hexagonales (côtes 1 à 6 sur la figure 3.3), restent valides.

La nouveauté par rapport à la méthode des courants d'interfaces est l'introduction ici de la face cylindrique (côté 7). La situation est telle que tout neutron

touchant la surface 7 est supposé perdu (pour le milieu à bordure hexagonale). Le nombre de neutrons transmis directement de la face 1 aux autres faces dans ce cas de figure sera donc d'autant plus petit que le rayon R du cylindre est grand. Mais si on considère la cellule au complet, il devrait être identique au cas de la méthode des courants d'interfaces. La présence de la face 7 nécessite donc un développement supplémentaire des flux angulaires sur cette surface. Or la plus grande source d'erreurs dans le formalisme multicellules est justement à ce niveau: c'est à dire au niveau du couplage des zones dans le cas J_{\pm} (ou cellules dans le cas des courants d'interfaces). On s'attend à ce que cette méthode (J_{\pm}) soit moins précise que la méthode des courants d'interfaces. Nous examinerons donc les transmissions relatives à la face 7.

3.3.1.1 Symétrie de rotation

Comme le cylindre central est à symétrie de révolution, on peut écrire:

$$P_{S_7 S_{\alpha}}^{\rho\nu} = (+1)^{\rho+\nu} P_{S_7 S_{H \cdot \alpha}}^{\rho\nu} \quad (3.29)$$

où $H \cdot \alpha$ est l'image de la surface α résultante de l'application de cette symétrie de rotation.

On en conclut donc qu'on ne calculera que la probabilité de transmission de la face 1 à la face 7. Les autres probabilités $P_{S_7 S_{\alpha}}^{\rho\nu}, \forall \alpha = 2, 6$ sont identiques à $P_{S_7 S_1}^{\rho\nu}$.

3.3.1.2 Symétrie intrinsèque

Sous l'action de la symétrie S_y qui laisse inchangé les faces 1 et 7, figure 3.4, on peut écrire:

$$P_{S_7 S_1}^{\rho\nu} = (-1)^{\rho+\nu} P_{S_7 S_1}^{\rho\nu}. \quad (3.30)$$

Ce qui montre que $P_{S_7 S_1}^{\rho\nu} = 0$ si $\rho + \nu$ est impair.

On doit donc évaluer pour la transmission de la face 1 à la face 7 les probabilités suivantes:

$$P_{S_7 S_1}^{00}, P_{S_7 S_1}^{20}, P_{S_7 S_1}^{02}, P_{S_7 S_1}^{11}, P_{S_7 S_1}^{22}.$$

A noter que $P_{S_7 S_1}^{\rho\nu} \neq P_{S_7 S_1}^{\nu\rho}$, du fait que les faces 7 et 1 ne sont pas de même nature: face 7 cylindrique, face 1 plane.

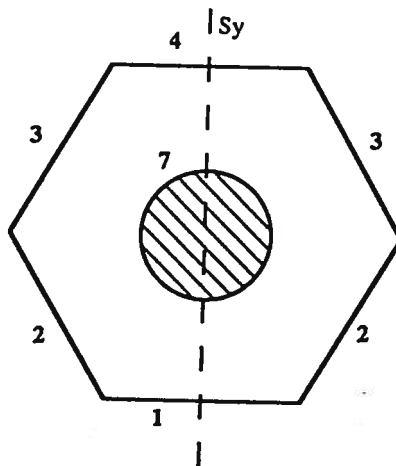


Figure 3.4: Action de la symétrie S_y

3.3.2 Résolution algébrique du système multicellule

Lorsque le domaine où l'équation de transport est résolue est homogène, le système (2.21) se réduit à:

$$\vec{\phi} = P_{IS}\vec{J}_- + P_{ii}\vec{F}, \quad (3.31)$$

$$\vec{J}_+ = P_{SS}\vec{J}_- + P_{SI}\vec{F}, \quad (3.32)$$

$$\vec{J}_- = A\vec{J}_+. \quad (3.33)$$

Où P_{IS} , P_{SS} , P_{SI} et A gardent la même définition que dans le chapitre précédent.

Mais P_{ii} est une matrice diagonale.

Les différentes expressions des probabilités de transmissions, nécessaires aux calculs des éléments de ces matrices, sont données dans l'annexe B.

Pour solutionner le système précédent, on procède au départ de la même manière que dans le cas de la méthode des courants d'interfaces, c'est à dire en éliminant le courant sortant J_+ entre les équations (3.32) et (3.33); ce qui donne:

$$\vec{\phi} = P_{IS}\vec{J}_- + P_{ii}\vec{F}, \quad (3.34)$$

$$\vec{J}_- = [I - P_{SS}A]^{-1}AP_{SI}\vec{F}. \quad (3.35)$$

La matrice P_{SS} est bloc diagonale, chaque bloc représente une zone homogène. Par rapport à la méthode des courants d'interfaces, cette matrice est de dimension

très large. Ceci est dû d'une part au grand nombre de zone qu'on peut avoir dans un assemblage, et d'autre part chaque zone peut avoir d'une à sept surfaces avec un (approximation DP_0) à trois (approximation DP_1) modes de représentation des flux angulaires pour chaque surface.

La grande dimension de la matrice à inverser $[I - P_{SS}A]$, pour calculer le courant J_+ , a probablement influencé le choix de la méthode de décomposition LU utilisée dans le code DRAGON [26] pour traiter le système (3.31)-(3.33). Comme il est connu, cette méthode LU est surtout avantageuse pour l'économie de l'espace mémoire qu'elle offre.

La méthode itérative décrite dans le paragraphe précédent peut théoriquement être aussi utilisée pour résoudre le système (3.31)-(3.33). Les sous systèmes d'équations seront ici associés aux zones homogènes où le processus itératif sera appliqué. On ignore cependant la performance de cette méthode par rapport à la méthode LU .

3.4 Module hexagonal du code DRAGON

Nous avons établi, au cours des sections précédentes, les équations multicellules qu'on peut appliquer aux calculs d'assemblages des réacteurs nucléaires. Nous avons établi plusieurs relations entre les différentes probabilités de collision qu'on va utiliser avantageusement pour réduire au maximum possible les coûts des calculs

sur ordinateurs.

Les méthodes à courants d'interfaces et J_{\pm} ont été implanté dans le code de transport DRAGON [29]. La première dans le module SYBIL, la seconde dans le module JPM.

La partie SYBIL produit un maillage d'intégration dans les cellules génératrices définies par l'utilisateur. Ensuite on y calcule les types de probabilités de collision intervenant dans le système matricielle à résoudre. Le module JPM permet la même chose mais avec la méthode J_{\pm} . Dans les deux modules, on peut faire l'approximation ROTH.

Nous allons insister dans ce paragraphe sur les techniques utilisées dans les parties de ces modules qui traitent la géométrie hexagonale.

3.4.1 Intégration numérique

Une particularité importante de la géométrie hexagonale est les différentes symétries qu'elle présente. Elles ont été bien exploitées pour mettre les probabilités de collision sous une forme fort intéressante. Qu'il s'agisse des probabilités de fuite ou de transmission, celles-ci sont toujours sous la forme:

$$\int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \int_0^a dx f(x, \varphi). \quad (3.36)$$

Où a est le côté de l'hexagone. Dans le cas d'une cellule homogène, l'intégration sur x est analytique; on aura alors qu'une seule intégrale à calculer.

Pour évaluer d'une manière générale l'expression 3.36, on a introduit dans DRAGON la possibilité d'utiliser soit une double quadrature de Gauss-Legendre, soit trapézoïdale. Avant de rentrer dans les détails de l'intégration numérique, remarquons tout d'abord que les fonctions à intégrer K_i peuvent présenter des dérivés divergentes pour certaines lignes d'intégrations, qui sont tangentes aux cylindres c'est à dire aux frontières des différentes zones constituant la cellule. On peut le voir facilement en se rappelant que les parcours optiques sont proportionnels à $\sqrt{|R_i^2 - (D_\alpha(x, \varphi))^2|}$, où $D_\alpha(x, \varphi)$ est défini dans la figure A.1 de l'annexe A ($\alpha = 5$ dans cette figure), R_i est le rayon i de la zone traversée par la ligne d'intégration.

Pour éviter ce problème, on décomposera, pour chaque angle φ , le domaine de variation de la variable x en un ensemble de sous domaine; autrement dit:

$$[0, a] = \bigcup_i [x_i(\varphi), x_{i+1}(\varphi)] \quad (3.37)$$

Les limites des différents domaines sont bien entendu obtenues en résolvant l'ensemble des équations (pour autant de cylindres contenus dans la cellule):

$$D_\alpha(x, \varphi) = R_i. \quad (3.38)$$

On utilise ensuite une double quadrature du type précédent dans chaque intervalle

$[x_i(\varphi), x_{i+1}(\varphi)]$:

$$\int_0^a dx \int_0^{\frac{\pi}{8}} d\varphi f(x, \varphi) = \int_0^{\frac{\pi}{8}} d\varphi \sum_k \int_{x_k(\varphi)}^{x_{k+1}(\varphi)} dx f(x, \varphi) \sim \sum_i w_i \sum_{k,j} w_j^{ki} f(x_j^{ki}, \varphi_i). \quad (3.39)$$

Les poids w_j^{ki} et points d'intégration x_j^{ki} dépendent donc de l'angle φ . Pour illustrer ce qu'on vient d'expliquer, on a représenté dans la figure 3.5 un exemple pour un angle φ arbitraire. Les lignes pleines indiquent la limite des domaines et les lignes en pointillés les lignes d'intégration.

Le fait de décomposer le domaine de la variable x en un ensemble de sous-domaine dont les limites sont les points singuliers des dérivées des fonctions K_i (fonctions à intégrer), permet d'avoir une meilleure précision mais surtout d'utiliser les quadratures du type Gaus-Legendre [30].

3.4.2 Normalisations numériques

Il existe deux types de normalisations dans les calculs de transport neutronique. Une théorique, dûe aux propriétés de l'équation de transport et qui implique la conservation des neutrons: les relations (2.36) et (2.37). L'autre purement numérique qui résulte des calculs sur ordinateur: effet de différence, troncature numérique, etc. Il sera question dans cette partie de ce dernier cas. Pour mieux contrôler la précision des calculs des probabilités de collision, nous étudierons trois sortes de normalisations numériques.

3.4.2.1 Orthonormalisation numérique

Nous avons vu que les composantes des flux angulaires $\psi_{\pm}^{\rho}(\vec{\Omega})$ vérifient la relation d'orthonormalisation donnée par la formule (2.17) qu'on pose:

$$\chi_{\rho\nu} = \int_{4\pi} \psi_{\pm}^{\rho}(\vec{\Omega}) \psi_{\pm}^{\nu}(\vec{\Omega}) (\vec{\Omega} \cdot \vec{n}_{\pm}) d^2\Omega = \pi \delta_{\rho\nu} \quad (3.40)$$

L'orthonormalisation numérique [4] consiste à calculer numériquement l'intégrale en φ ci-dessus, à partir des données servant à calculer les probabilités de collision; c'est-à-dire les poids et les points d'intégration relatives à la variable φ . Ensuite, on pondérera les différentes probabilités mettant en jeu les flux angulaires $\psi_{\pm}^{\rho}(\vec{\Omega})$ et $\psi_{\pm}^{\nu}(\vec{\Omega})$ par les rapports des résultats exacts $\chi_{\rho\nu}$ aux résultats numériques $\tilde{\chi}_{\rho\nu}$ soit:

$$\begin{aligned} P_{s_{\alpha}s_{\beta}}^{\rho\nu} &\longrightarrow \frac{\tilde{\chi}_{\rho\nu}}{\chi_{\rho\nu}} P_{s_{\alpha}s_{\beta}}^{\rho\nu}, \\ P_{is_{\alpha}}^{\rho} &\longrightarrow \frac{\tilde{\chi}_{\rho 0}}{\chi_{\rho 0}} P_{is_{\alpha}}^{\rho}. \end{aligned}$$

Pour évaluer $\tilde{\chi}_{\rho\nu}$ et $\chi_{\rho\nu}$, nous avons adopté pour le module hexagonal de DRAGON, le procédé décrit à la référence [4] et qui est aussi utilisé pour le module traitant la géométrie cartésienne. Le lecteur intéressé pourra consulter cette référence pour le détails des calculs.

3.4.2.2 Normalisation des lignes d'intégration

Toujours dans le but d'améliorer la précision des calculs des probabilités de collision, on peut envisager de normaliser les lignes d'intégration par les rapports

des volumes exacts $V_i(\varphi)$ aux volumes calculés par une intégration numérique $\tilde{V}_i(\varphi)$, des domaines que traversent les neutrons (voir figure 3.5). On emploiera le maillage d'intégration produit initialement pour calculer les probabilités de collision. De plus, cette normalisation se fera pour chaque angle φ . Le volume calculé de la zone i sera donc donné par:

$$\tilde{V}_i(\varphi) = \int_{x_i}^{x_{i+1}} dx t_i(x, \varphi) \cos\varphi \simeq \sum_k \frac{1}{2} (x_{i+1} - x_i) \cos\varphi t_i(x_k, \varphi) w_k. \quad (3.41)$$

Quant aux volumes analytiques, ils sont calculés explicitement. De manière générale, pour une zone j (voir figure 3.5), le volume exact est donné par:

$$\begin{aligned} V_j(\varphi) = & R_j^2 \left(\cos^{-1} \left(\frac{D_\alpha(x, \varphi)}{R_j} \right) - \cos^{-1} \left(\frac{R_{j-2}}{R_j} \right) \right) - D_\alpha(x, \varphi) \sqrt{R_j^2 - (D_\alpha(x, \varphi))^2} \\ & + R_{j-2} \sqrt{R_j^2 - R_{j-2}^2} - \sum_{k=m}^{j-1} V_k(\varphi). \end{aligned} \quad (3.42)$$

Où m est le plus petit indice i des volumes de la cellule telle que $R_i = D_\alpha(x, \varphi)$.

Cette normalisation a été développée dans le but de diminuer l'ordre des quadratures spatiale et angulaire. En normalisant les parcours optiques on espère produire un résultat approché de celui d'une quadrature d'ordre élevé. Par ce fait, on réduit aussi le temps nécessaire au calculs des probabilités de collision qui croit très rapidement avec le nombre de lignes d'intégration produites.

Dans le cas de la méthode J_\pm , on a vu que certaines probabilités de transmission requièrent le calcul d'un angle qu'on a noté μ_α (angle entre la normale de la

surface cylindrique et la direction du neutron (voir équation (B.10))). Or cet angle est évalué en fonction des lignes d'intégration. Le fait de les normaliser entraînera le changement de la valeur de cet angle. Si cette modification est trop brutale, on peut perdre complètement le sens d'interprétation physique de cet angle.

Il est à noter que dans le cas de la méthode des probabilités de collision (chapitre suivant), la normalisation des lignes d'intégration est faite par le rapport des volumes des zones homogènes en totalité (couronne cylindrique dans le cas de la figure 3.5), et non le volume indiqué à la figure 3.5

3.4.3 Géométrie de base

Les deux méthodes J_{\pm} et courants d'interfaces traitent la même géométrie, à savoir un domaine de forme hexagonale qu'on décompose en un ensemble d'hexagones de côtés identiques qu'on appelle cellules. Une cellule peut être homogène: "une pâte" ou hétérogène: renferme des cylindres concentriques en son centre. L'ensemble de ces cellules forme un assemblage. On y définit des cellules génératrices [4] [31] comme étant des cellules ayant même structure et même dimension géométriques; autrement dit même nombre de cylindres de même rayons (même symétrie de révolution). Une cellule génératrice peut être placée dans différent endroit de l'assemblage, mais deux cellules identiques situées dans deux emplacements différents seront considérées comme deux cellules différentes dans les calculs (les flux y régnant sont généralement différents).

Dans tout calcul, on doit imposer une condition au limite à la frontière de l'assemblage. Cette condition peut être: une réflexion, une frontière non réentrante (vide) ou une symétrie. La réflexion est considérée soit spéculaire (si on utilise l'approximation DP_1), soit isotrope (cas DP_0). On a cependant le choix d'imposer un albedo fixe et quelconque à la frontière. La symétrie indique celle de l'assemblage par rapport à un axe passant par le centre des cellules situées à la périphérie. En d'autres termes, l'assemblage se répète infiniment dans l'espace.

En plus de ces conditions aux frontières, un assemblage de cellules hexagonales peut présenter des symétries intrinsèques. On peut en distinguer huit [31] en plus de la symétrie relative au groupe identité où l'assemblage au complet est représenté et où toutes les cellules seront considérées dans les calculs. Ces différentes symétries sont données à la figure 3.6. A part R120 et R180 qui sont des symétries de rotation, toutes les autres sont des symétries pures de l'assemblage. Dans la symétrie S30, on représente le $\frac{1}{12}$ d'assemblage, dans SA60 et SB60 c'est le $\frac{1}{6}$, dans S90 c'est le $\frac{1}{4}$ et dans SA180 et SB180 c'est la moitié.

La présence de ces symétries permet d'alléger les données du code; mais surtout de diminuer le nombre d'inconnus à traiter et par conséquent le temps de calcul consommé.

3.4.4 Organisation générale des calculs

Le code DRAGON [29] est organisé sous forme modulaire. Chaque module a une tâche bien particulière. Nous décrirons ici quelque partie de deux modules auxquels on a apporté une contribution majeure. Il s'agit des modules calculant le maillage d'intégration et celui qui calcule les probabilités de collision (pour la géométrie hexagonale bien entendu).

Nous avons déjà mentionné auparavant qu'une particularité importante du formalisme multicellule est que l'équation de transport est résolue localement dans des cellules. Ceci aura donc pour conséquence de ne produire que les matrices locales pour les cellules génératrices non identiques.

Les deux méthodes J_{\pm} et courants d'interfaces sont utilisées dans des calculs multigroupes, le couplage s'effectuant alors par le terme source. Il y a donc intérêt à décomposer le calcul en deux étapes: une étape géométrique où toutes les opérations indépendantes de l'énergie sont effectuées, et une étape de calcul où on fait les opérations dépendantes cette fois-ci des sections efficaces. On mettra surtout l'accent dans cette partie sur la première étape.

Dans l'étape géométrique, on numérotera les cellules et on les classifera selon leurs cellules génératrices. Ensuite, on construira les maillages d'intégration pour toutes les cellules génératrices. On prendra en compte l'ensemble des symétries per-

mettant de calculer les matrices locales associées aux différentes représentations. L'ensemble des données ainsi produites seront gardées en mémoire sous forme d'un ensemble de vecteurs.

Finalement dans l'étape de calcul on utilise les données stockées dans l'étape géométrique et le jeu de sections efficaces pour le groupe en question pour effectuer le calcul des matrices locales en employant le maillage d'intégration correspondant, pour chaque cellule génératrice. On finira par résoudre le système d'équations et obtenir la distribution des flux dans l'assemblage.

Dans un calcul multigroupe, le traitement géométrique ne sera fait qu'une seule fois. L'étape de calcul sera utilisée autant de fois qu'il y a de groupes.

3.4.4.1 Symétries - Regroupement de cellules

Avant de commencer à discuter les conséquences des symétries ultérieurement énoncées, notons tout d'abord les différentes numérotations des surfaces relatives à une cellule génératrice introduites à la figure 3.1 (ou figure 3.3). Les cellules dans le cas d'un assemblage sont numérotées comme indiqué dans la figure 3.6 .

Nous avons défini précédemment deux types de symétries: une liée aux conditions frontières, et l'autre représente les symétries propres aux assemblages. Dans tous les cas, ces symétries ont pour conséquence de réduire le nombre d'inconnus

des courants d'interfaces. Les cellules affectées par ces symétries sont représentées dans la figure 3.7.

Dans le cas 1 (voir figure 3.7), on réduit le nombre d'inconnus local de courants d'interfaces de $6n$ à $4n$; où $n = 6$ dans le cas DP_1 et $n = 2$ dans le cas DP_0 . Dans le cas 2, on passe de $6n$ à $3n$.

On peut d'avantage gagner en réduction d'inconnus en tirant profit des conditions frontières de réflexion ou frontière non réentrante. Dans ce cas, les cellules périphériques peuvent connecter avec l'extérieur avec deux (type 1) ou trois faces (type 2) (voir figure 3.6). Dans ce cas on passe pour une cellule de type 2 de $6n$ à $6n - \frac{3}{2}n$ et dans le cas du type 1 de $6n$ à $5n$.

Une autre hypothèse peut être formulée pour réduire davantage l'ordre de la matrice de collision à traiter. Il s'agit du regroupement de cellules [4] [9]. Comme, en formalisme multigroupe, les flux dans les cellules ne dépendent que du voisinage immédiat de la cellule, on peut alors supposer que le flux régnant dans deux cellules, situées dans deux localités différentes, est le même si leurs voisinage est similaire. C'est donc une approximation physique qui peut introduire des erreurs sur les résultats de calcul. Cette hypothèse impliquera une renumérotation des courants d'interfaces. Pour améliorer cette approximation, on introduit la notion de l'orientation des cellules, qui n'est autre qu'une meilleure façon de réaliser la connexion des courants d'interfaces des cellules regroupées. Notons cependant, que

le regroupement réduit aussi le nombre d'inconnus relatives aux volumes et par conséquent le temps de calcul.

La figure 3.8 illustre les différentes notions introduites ici. On a recours à la notion de "cellule physique" pour désigner l'ensemble des cellules génératrices regroupées. Les deux points associés aux surfaces sur la figure 3.8 indiquent l'orientation des cellules [31].

Des calculs préliminaires sont généralement requis pour faire le regroupement de cellules. Ceux-ci peuvent être fait de la manière la plus économique possible à l'aide par exemple d'autres approximations multicellules qu'on va introduire dans ce qui suit.

3.4.5 Autres approximations multicellules

Nous avons jusqu'à présent discuté, dans le cadre du formalisme multicellule, de la méthode rigoureuse pour la résolution de l'équation de transport sans faire aucune hypothèse sur la géométrie des cellules. Il existe pourtant des modèles simplifiés pour évaluer les probabilités de collision. Nous discuterons dans ce paragraphe de l'approximation ROTH associée au modèle de cylindrisation. Ces approches ont déjà été incorporées au code DRAGON avant cette étude. Elles constituent en fait l'approche la plus élémentaire pour un calcul de cellule. Nous en donnerons ici un bref aperçu car elles nous serviront dans ce qui suit à titre de

comparaison.

3.4.5.1 Option ROTH

Les calculs de probabilités de collision se font dans ce cas sur une cellule à périphérie cylindrique équivalente à la cellule hexagonale initiale [9]. Pour une cellule avec symétrie interne de rotation, la cylindrisation est l'approximation à priori la plus naturelle pour transformer un problème à deux dimensions en un problème à une dimension, en évitant par là une intégration numérique dans le calcul des probabilités de collision associées aux zones qui n'ont pas la symétrie de rotation (zone périphérique de la cellule).

La cylindrisation est une approximation qui a été longtemps utilisée dans les calculs des cellules situées dans un assemblage infini: la cellule de contour hexagonale et avec des conditions aux limites de réflexion spéculaire est remplacée, dans les calculs, par une cellule à contour circulaire et avec conditions de réflexion uniforme et isotrope [4].

Le modèle cylindrique de la cellule se construit en remplaçant le milieu situé entre la dernière couronne cylindrique et la bordure hexagonale (le modérateur dans le cas des réacteurs à eau légère), de volume V et section efficace Σ , par une couronne homogène de volume V^* et section efficace Σ^* ; la substitution se faisant

de manière à conserver le nombre total d'atomes (voir figure 3.9):

$$\Sigma V = \Sigma^* V^* \quad (3.43)$$

Deux modèles de cylindrisation sont disponibles dans DRAGON [31]: le modèle de Wigner et le modèle de Askew. Les caractéristiques de ceux-ci sont rassemblées dans le tableau 3.1

Tableau 3.1: Caractéristiques des deux modèles de cylindrisation: a est le côté de l'hexagone et $r = \sqrt{\frac{3a^2\sqrt{3}-2\pi R^2}{2\pi(R^{*2}-R^2)}} < 1$

	Section efficace du modérateur Σ^*	Volume du modérateur V^*	Surface de la cellule S^*	Rayon de cylindrisation R^*
Wigner	Σ	V	rS	$\sqrt{\frac{3a^2\sqrt{3}}{2\pi}}$
Askew	$r^2\Sigma$	$r^{-2}V$	S	$\frac{3a}{\pi}$

Le modèle de Wigner est la cylindrisation usuelle de Wigner-Seitz, qui conserve le volume du milieu cylindrisé et sa section efficace macroscopique totale. La cellule résultante se retrouve avec une surface plus petite que celle de la cellule originale.

Le modèle de Askew est basé sur la cylindrisation suggéré par Askew: le modérateur est dilué de manière à conserver la surface de la cellule. L'auteur a montré qu'à la limite noire (quand la section efficace du modérateur devient in-

fini; $\Sigma \rightarrow \infty$) le modèle de Wigner sous estime les courants traversant la surface de la cellule, tandis que son modèle donne des valeurs plus correctes [3].

En utilisant la cellule cylindrisée, on calcule les différentes probabilités de collision nécessaires aux équations multicellules: probabilités de première collision, de fuites et transmission. On emploie dans ces calculs l'approximation de ROTH, qui consiste:

- à remplacer les six surfaces de la cellule par une seule surface
- à faire un développement DP_0 pour le flux angulaire sur cette surface
- à supposer que les courants d'interfaces sortant des six côtés d'une même cellule sont égaux.

En plus de l'erreur due à la cylindrisation, la méthode de ROTH introduit ce qu'on appelle l'effet de retour. En effet, le fait d'avoir un courant d'interface unique implique qu'un neutron entrant par la face de la cellule a une probabilité non nulle d'en ressortir sans subir de chocs ($P_{s_1 s_1}^{00} \neq 0$).

3.4.5.2 Option ROTH×6

Il s'agit toujours de calculer les probabilités de collision entre zones et les probabilités de fuites entre zones et côtés de la cellule dans le modèle cylindrique de la cellule.

Pour se faire, on décompose la surface de la cellule cylindrisée en six régions que l'on fait correspondre avec les six côtés de la cellule originale; la partition se faisant de manière à conserver les surfaces relatives. On associe alors à chaque surface un courant d'interface obtenu par un développement DP_0 sur chaque surface. Notons que la cylindrisation se fait toujours de la même manière que dans le modèle de ROTH. C'est cette option qui existe dans DRAGON. Une amélioration avec une approximation DP_1 a été suggérée par Sanchez [9]

Les probabilités de fuites et de transmission requises par les équations d'interfaces sont obtenues par:

$$P_{s_{\alpha}i}^0 = \frac{1}{6} \sum_{\beta} P_{s_{\beta}i}^0 \quad (3.44)$$

$$P_{s_{\alpha}s_{\beta}}^{00} = \frac{1}{3} (1 - \delta_{\alpha\beta}) \sum_{\eta} P_{s_{\eta}s_{\beta}}^{00} \quad (3.45)$$

où $\delta_{\alpha\beta}$ est la fonction de Kronecker.

On espère corriger par ce modèle l'effet de retour introduit par le modèle de ROTH.

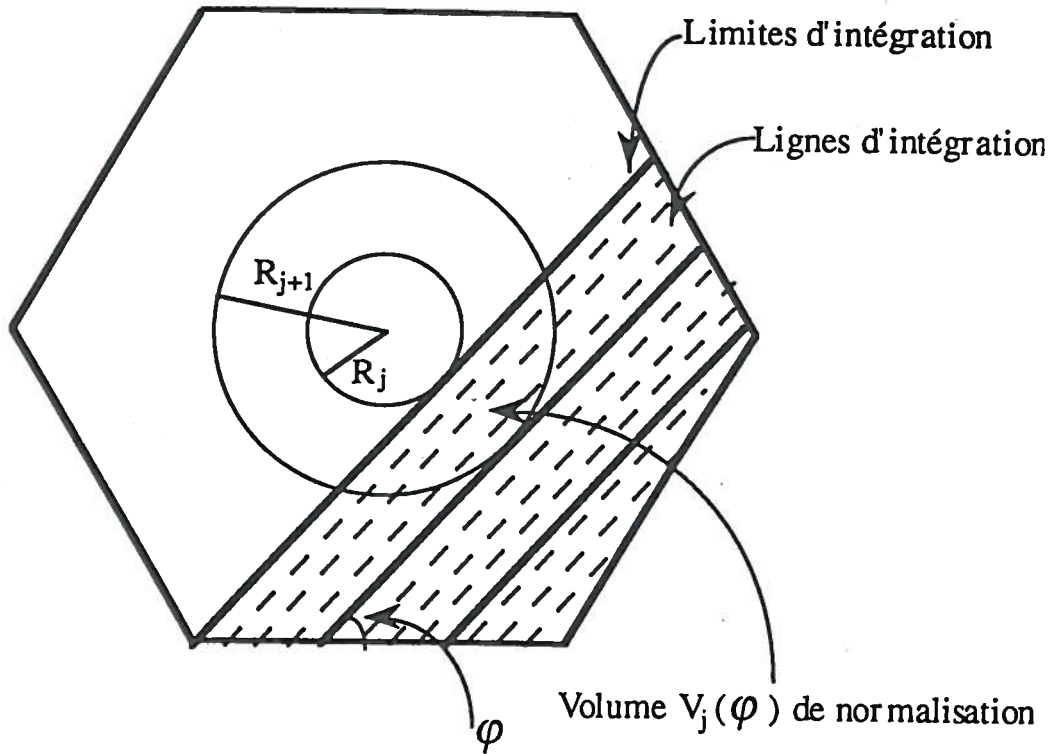


Figure 3.5: Schéma d'intégration.

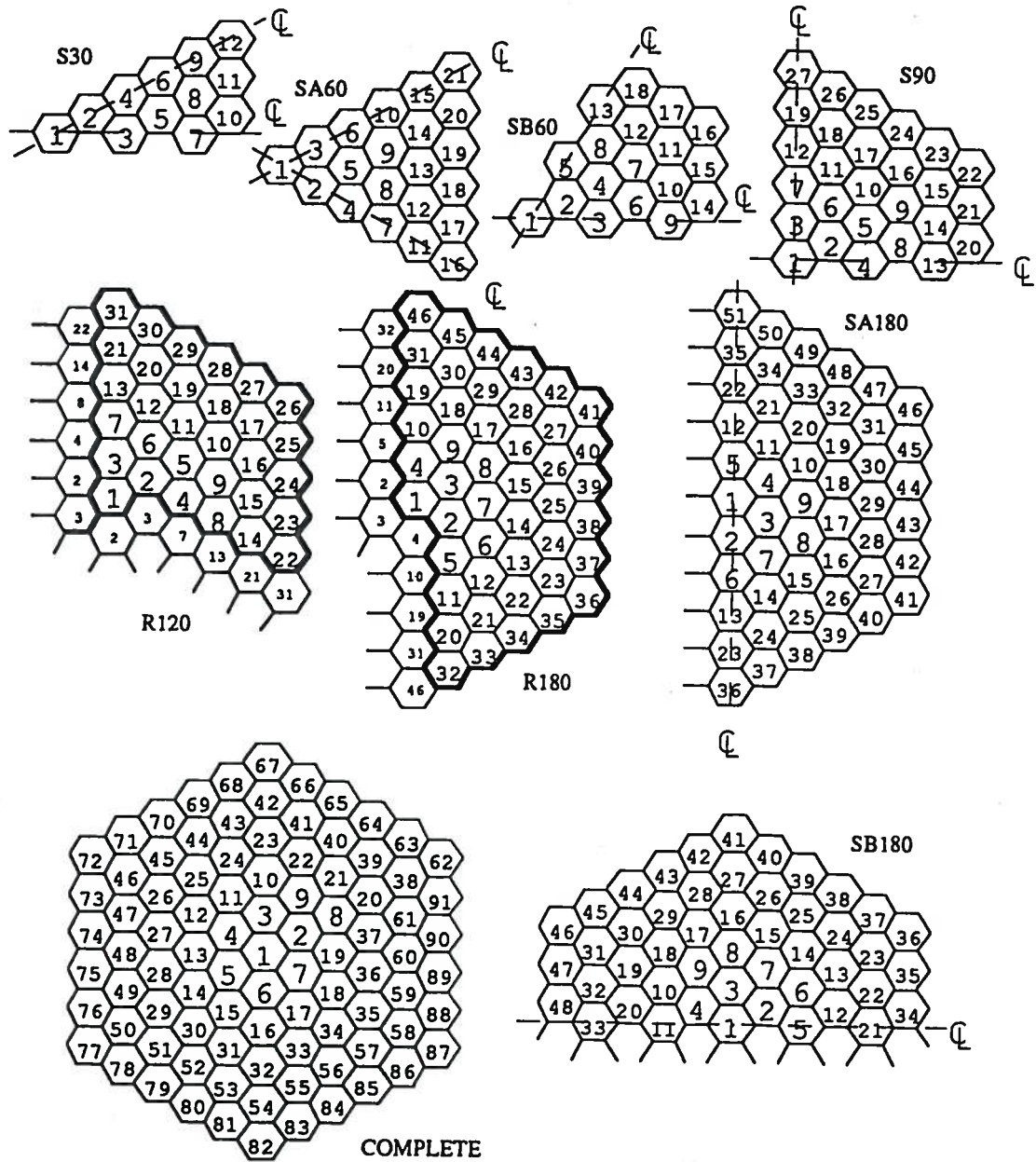


Figure 3.6: Différentes symétries d'assemblages.

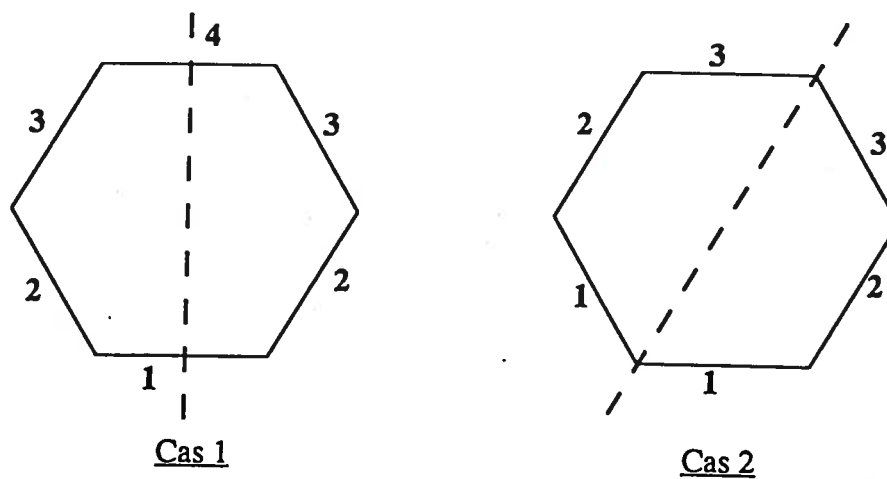


Figure 3.7: Cellules à symétries externes.

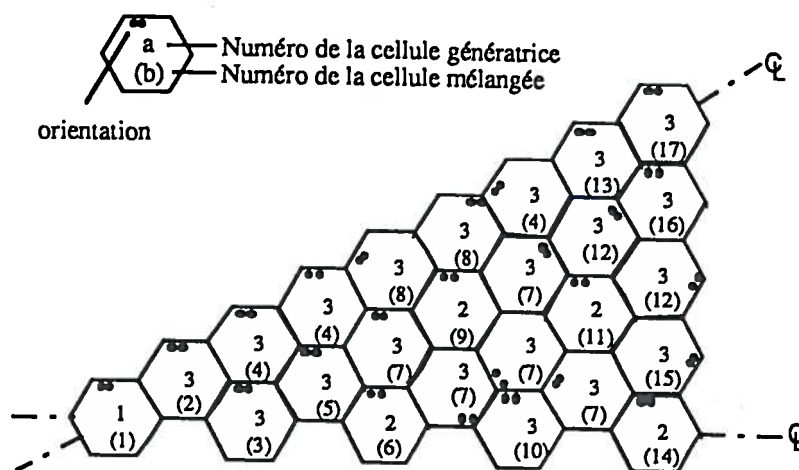


Figure 3.8: Regroupement et orientation cellulaire.

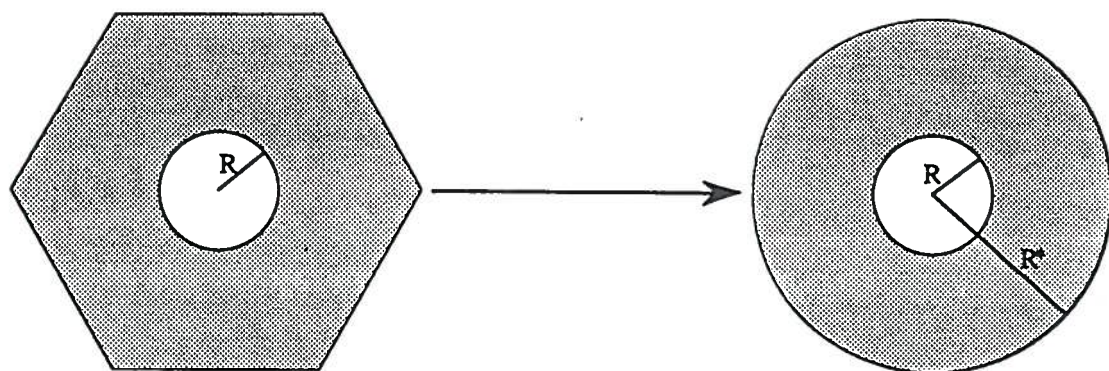


Figure 3.9: Schéma de cylindrisation.

CHAPITRE 4

Méthode des probabilités de collision

4.1 Introduction

Le sujet des chapitres précédents a été focalisé sur la résolution de l'équation de transport au niveau d'une cellule. Lorsqu'on voulait calculer un assemblage ou un domaine plus grand, constitué d'un ensemble de cellules connectées entre elles, on traitait séparément les différentes cellules (ou zones dans le cas de la méthode J_{\pm}) et puis on les couple entre elles par l'intermédiaire des courants neutroniques à leurs surfaces. L'introduction de ces surfaces fictives n'est donc qu'une approximation de la situation réelle.

A notre connaissance, la méthode des courants d'interfaces n'a été utilisée avec succès que pour des géométries bidimensionnelles. Une tentative pour une généralisation aux cas tridimensionnels n'a pas abouti aux résultats escomptés [22] [23].

Nous allons abandonner dans cette partie la méthode des courants d'interfaces pour une méthode plus rigoureuse et facilement applicable dans le cas de géométries tridimensionnelles. Cette méthode est basée sur le traçage des lignes d'intégration directement dans le domaine qu'on veut étudier. L'interaction entre les différents

milieu est donc directement prise en compte.

Nous continuerons à supposer que notre domaine est un ensemble de cellules hexagonales qui peuvent contenir à leurs centres un nombre arbitraire de cylindres concentriques (d'axes z dans le cas 3D). Elles sont du type de celles de la figure 4.1.

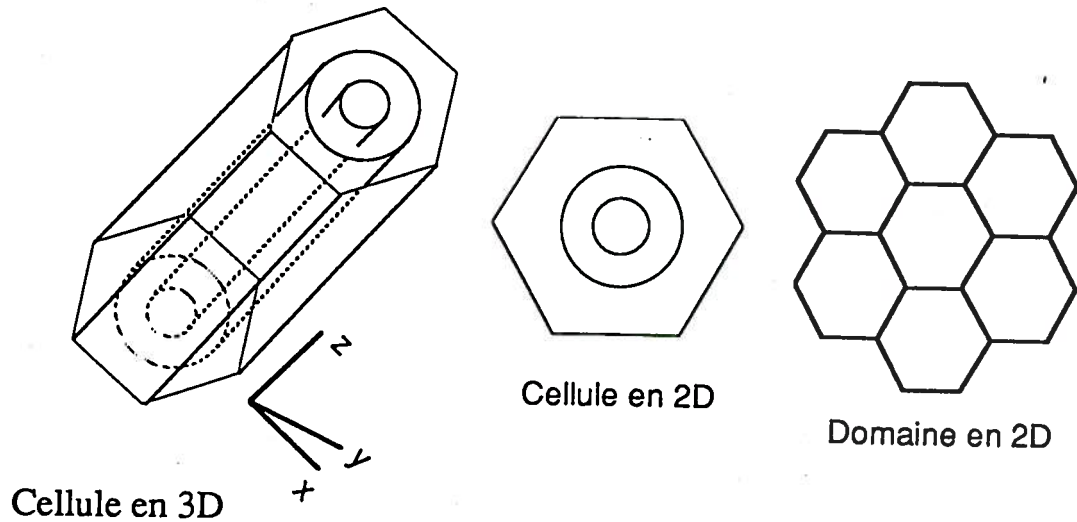


Figure 4.1: Exemple de domaine traité.

La communication du domaine avec le milieu extérieur se fait par le biais des surfaces externes des cellules périphériques. On peut donc imposer des conditions frontières similaires à celles étudiées auparavant. Dans le cas d'une réflexion, on supposera, cependant qu'elle est isotrope (développement du flux angulaire en DP_0).

Le système d'équations à résoudre est donc le même que (2.21). La seule chose qui change c'est la manière de calculer les éléments de la matrice de collision: P_{ij}, P_{is}, P_{ss} (voir equations 2.21). Les probabilités de collision volume-volume sont directement calculées dans ce cas en même temps que les probabilités de fuites, de transmissions et de surfaces-volumes. Le calcul de celles-ci requiert une quadruple intégration dans le cas 3D (deux en espaces et deux en angles) et une double intégration dans le cas 2D (une en angle et l'autre en espace).

Avec cette méthode, on perd complètement le caractère local de l'équation de transport. On a vu que c'était un avantage majeur dans le cas du formalisme des courants d'interfaces. On est donc "obligé" de considérer en entier le domaine à traiter. Si on a affaire à un domaine de grande dimension, comme un réacteur par exemple, il est pratiquement impossible d'utiliser cette méthode à cause de la dimension de la matrice qu'on peut générer, surtout dans le cas 3D, et qui va donc nécessiter beaucoup d'espace mémoire et de temps calcul pour la stocker et l'inverser. En plus des fichiers informatiques immenses qui seront nécessaire pour le stockage des lignes d'intégration.

Nous avons réduit partiellement ce problème, en considérant les différentes symétries que peut présenter un assemblage telles que celles décrites au paragraphe 3.4. On a aussi introduit la possibilité de regrouper et d'orienter des cellules à la manière de la méthode des courants d'interfaces.

Nous examinerons dans un premier paragraphe la formulation générale du problème; en particulier, l'évaluation des probabilités de collision en deux et trois dimensions. L'aspect numérique de la chose sera traité dans un dernier paragraphe de ce chapitre et dans l'annexe D.

4.2 Evaluation directe des probabilités de collisions

Pour calculer les probabilités de collision à partir des lignes d'intégration tracées directement dans le domaine à étudier, nous devons tout d'abord opérer des changements de variables dans les formules de ces probabilités données dans le premier chapitre de cette thèse. Nous étudierons aussi les différentes techniques pour rechercher les domaines d'intégration en 2D et en 3D.

4.2.1 Formulation des probabilités de collision

Le domaine \mathcal{D} dont il a été question au paragraphe 2.2 est ici l'assemblage au complet, ou encore tout le réacteur. Les sous domaine \mathcal{D}_i sont des zones homogènes formées après discrétisation: elles peuvent être des cellules hexagonales, des couronnes cylindriques ou encore des triangles. Si le domaine \mathcal{D} se réduit à une cellule, cette méthode est strictement équivalente à celle des courants d'interfaces.

Rappelons que le système à résoudre est donné par:

$$\begin{aligned}
V_i \phi_i &= \sum_{\alpha} P_{i s_{\alpha}} \frac{4}{s_{\alpha}} J_{-, \alpha} + \sum_j V_i P_{ij} \mathcal{F}_j \\
\frac{4}{s_{\alpha}} J_{+, \alpha} &= \sum_{\beta} P_{s_{\alpha} s_{\beta}} \frac{4}{s_{\beta}} J_{-, \beta} + \sum_i V_i P_{s_{\alpha} i} \mathcal{F}_i, \\
\frac{4}{s_{\alpha}} J_{-, \alpha} &= \sum_{\beta} A_{\alpha \beta} \frac{4}{s_{\beta}} J_{+, \beta}
\end{aligned} \tag{4.1}$$

où la définition des différents termes intervenants dans ces équations reste la même que celle de la section 2.3. Comme on n'aura affaire qu'à la réflexion isotrope et que nous n'utiliserons que l'approximation DP_0 , pour alléger la notation nous avons enlevé les indices ρ et ν .

La manière d'évaluer les probabilités de collision est dorénavant complètement différente de celle étudiée jusqu'à présent. Rappelons que les composantes de la matrice de collision sont données par:

$$\begin{aligned}
P_{ij} &= \frac{1}{V_j} \int_{\mathcal{D}_i} d^3 r \int_{\mathcal{D}_j} d^3 r' \frac{e^{-\tau(u)}}{4\pi u^2} \\
P_{i s_{\alpha}} &= \frac{1}{\pi s_{\alpha}} \int_{\mathcal{D}_i} d^3 r \int_{\partial \mathcal{D}_{\alpha}} d^2 r_s \psi_{-, \alpha}^0(\vec{\Omega})(\vec{\Omega} \cdot \vec{n}_{-, \alpha}) \frac{e^{-\tau(s)}}{s^2} \\
P_{s_{\alpha} s_{\beta}} &= \frac{1}{\pi s_{\beta}} \int_{\partial \mathcal{D}_{\alpha}} d^2 r'_s \int_{\partial \mathcal{D}_{\beta}} d^2 r_s \psi_{+, \alpha}^0(\vec{\Omega}) \psi_{-, \beta}^0(\vec{\Omega})(\vec{\Omega} \cdot \vec{n}_{+, \alpha})(\vec{\Omega} \cdot \vec{n}_{-, \beta}) \frac{e^{-\tau(s')}}{s'^2}
\end{aligned} \tag{4.2}$$

Pour calculer ces expressions, nous allons simuler les parcours des neutrons dans le domaine \mathcal{D} en traçant un ensemble de lignes droites directement dans le domaine [22]. Autrement dit, les intégrations dans (4.2) seront faites suivant une caractéristique $\vec{\Omega}$. Ceci nous amène donc à opérer des changements de variables

dans le système (4.2), afin de faire apparaître une intégrale sur $\vec{\Omega}$ dans chaque type de probabilité. L'intégration sur les directions des neutrons revient à passer des coordonnées cartésiennes aux coordonnées sphériques.

Etant donné un repère orthonormé fixe, tout point \vec{r} dans l'espace sera repéré par ces coordonnées cartésiennes: $\vec{r}(x, y, z)$. Les directions $\vec{\Omega}$ seront quant à elles repérées par les coordonnées polaires: $\vec{\Omega}(\varphi, \theta)$. Le jacobien de la transformation de (x, y, z) à $(u = \|\vec{r}\|, \varphi, \theta)$ est alors donné par:

$$\left| \frac{\partial(x, y, z)}{\partial(u, \varphi, \theta)} \right| = u^2 \sin \theta \quad (4.3)$$

Lorsqu'il s'agit d'une intégrale de surface, le jacobien de la transformation est donnée par:

$$\sqrt{\left(\frac{\partial(x, y)}{\partial(\varphi, \theta)} \right)^2 + \left(\frac{\partial(y, z)}{\partial(\varphi, \theta)} \right)^2 + \left(\frac{\partial(z, x)}{\partial(\varphi, \theta)} \right)^2} = u^2 \sin \theta \quad (4.4)$$

De manière plus usuelle, on écrira pour une surface et un volume respectivement:

$$d^2\tau = u^2 d^2\Omega \quad (4.5)$$

$$d^3\tau = u^2 d^2\Omega du$$

En appliquant ces changements de variables dans l'expression des probabilités de premières collisions on trouve:

$$P_{ij} = \frac{1}{4\pi V_j} \int_{(4\pi)} d^2\Omega \int_{S(\vec{\Omega})} d^2\tau' H_{ij} \int du du' e^{-\tau(u, u')} \quad (4.6)$$

On a choisi une surface $S(\vec{\Omega})$ dont la normale est colinéaire à $\vec{\Omega}$. Nous verrons dans ce qui suit que les limites de $S(\vec{\Omega})$ dépendront de la direction $\vec{\Omega}$. La fonction $H_{ij} = 1$ si la ligne d'intégration intersecte à la fois les volumes i et j , sinon elle est nulle.

Pour les probabilités de fuites, nous utiliserons toujours le même changement de variables pour d^3r . Mais pour la surface, on se ramènera à la surface $S(\vec{\Omega})$ par une rotation d'un angle égal à l'angle formé par la normale de la surface considérée $\vec{n}_{+, \alpha}$ et $\vec{\Omega}$, ceci en posant:

$$(\vec{\Omega} \cdot \vec{n}_{+, \alpha}) d^2r_s = d^2r' \quad (4.7)$$

on obtient:

$$P_{s_{\alpha i}} = \frac{1}{4\pi V_i} \int_{(4\pi)} d^2\Omega \int_{S(\vec{\Omega})} d^2r' \psi_{+, \alpha}^0(\vec{\Omega}) H_{\alpha i} \int ds e^{-\tau(s)} \quad (4.8)$$

La fonction $H_{\alpha i}$ a une définition similaire à H_{ij} .

En ce qui concerne les probabilités de transmission surface-surface, on fera apparaître l'intégration sur la surface $S(\vec{\Omega})$ par la même technique que précédemment (équation (4.7)). Pour l'autre surface, on la parcourra de l'angle solide sous lequel on la voit à partir de d^2r' , ce qui revient à poser:

$$(\vec{\Omega} \cdot \vec{n}_{+, \alpha}) d^2r'_s = s^2 d^2\Omega$$

$$(\vec{\Omega} \cdot \vec{n}_{-, \beta}) d^2r'_s = d^2r'$$

les probabilités de transmission se réduisent alors à:

$$P_{s_\alpha s_\beta} = \frac{1}{\pi S_\beta} \int_{(4\pi)} d^2\Omega \int_{S(\vec{\Omega})} d^2r' \psi_{+, \alpha}^0(\vec{\Omega}) \psi_{-, \beta}^0(\vec{\Omega}) H_{\alpha\beta} e^{-\tau(\vec{r}', \vec{\Omega})} \quad (4.9)$$

où $H_{\alpha\beta}$ a la même signification que H_{ij} .

Dans les équations (4.6) et (4.8), l'intégration sur u et u' est analytique (voir annexe E). Mais l'intégration sur la surface $S(\vec{\Omega})$ et sur $\vec{\Omega}$ se feront de manière numérique. Remarquons que l'intégration dans tous les types de probabilités, que ce soit de collision, de fuite ou de transmission, porte sur le même domaine à savoir $(4\pi) \times S(\vec{\Omega})$. Nous pouvons donc les évaluer en même temps, ce qui engendre un gain en espace mémoire (stockage des lignes d'intégration) et en temps de calcul.

4.2.2 Intégration numérique

4.2.2.1 Cas d'une géométrie bidimensionnelle

Pour la géométrie bidimensionnelle, on devrait tout d'abord projeter les relations (4.2) sur le plan xy . On aboutit alors à des expressions similaires à celles trouvées dans le cas de la méthode des courants d'interfaces, qui sont décrites au paragraphe 2.4. Le domaine à traiter est cependant plus complexe dans ce cas: plusieurs ensemble de couronnes cylindriques à l'intérieur de plusieurs hexagones.

Avant de procéder à une intégration numérique proprement dite, il est primordial de choisir un repère xy fixe. Nous le prendrons au centre de l'assemblage.

Toute direction $\vec{\Omega}$ sera alors repérée dans ce référentiel par un angle φ que fait la projection de cette direction sur xy avec l'axe des x . Le domaine que décrit φ est de $[0, 2\pi]$, qui, par raison de symétrie, sera ramené à $[0, \pi]$. La détermination du domaine d'intégration spatial est d'un autre degré de complexité. On commence toujours par intégrer par rapport à l'angle puis par rapport à l'espace. Notons que ces variables ne sont pas indépendantes; mais rien ne nous empêche de faire le contraire. C'est donc un choix purement arbitraire. Nous voulons cependant garder une cohérence avec la partie cartésienne du code DRAGON qui est faite de manière similaire [22]. Comme les limites des assemblages hexagonaux est irrégulière, il est alors très difficile de déterminer les bornes exactes de la surface $S(\vec{\Omega})$. On contourne cette difficulté en incluant notre domaine dans un cercle de rayon R calculé par la connaissance du côté des hexagones. Pour un angle donné, on détermine les limites d'intégration en espace en résolvant le système suivant:

$$\begin{cases} x^2 + y^2 = R^2 \\ y = y_0 + (x - x_0) \tan \varphi \\ x \cos \varphi + y \sin \varphi = 0 \end{cases}$$

Nous entendons par résolution, l'élimination des inconnus x et y et l'obtention d'une équation qui lie les variables qu'on cherche x_0 et y_0 . On cherchera ensuite les points extrêmes $M_{min}(x_0, y_0)$ et $M_{max}(x_0, y_0)$ qui déterminent la longueur de l'axe d'intégration en espace [32] (voir figure 4.2).

Revenons au système précédent: la première équation est celle du cercle englobant le domaine à traiter. La seconde c'est l'équation de la droite dans le plan.

La dernière impose l'orthogonalité entre la normale du cercle et la direction du neutron sur le plan; les intervalles d'intégration en espace sont donc un ensemble de droites perpendiculaires aux directions des neutrons dans le plan.

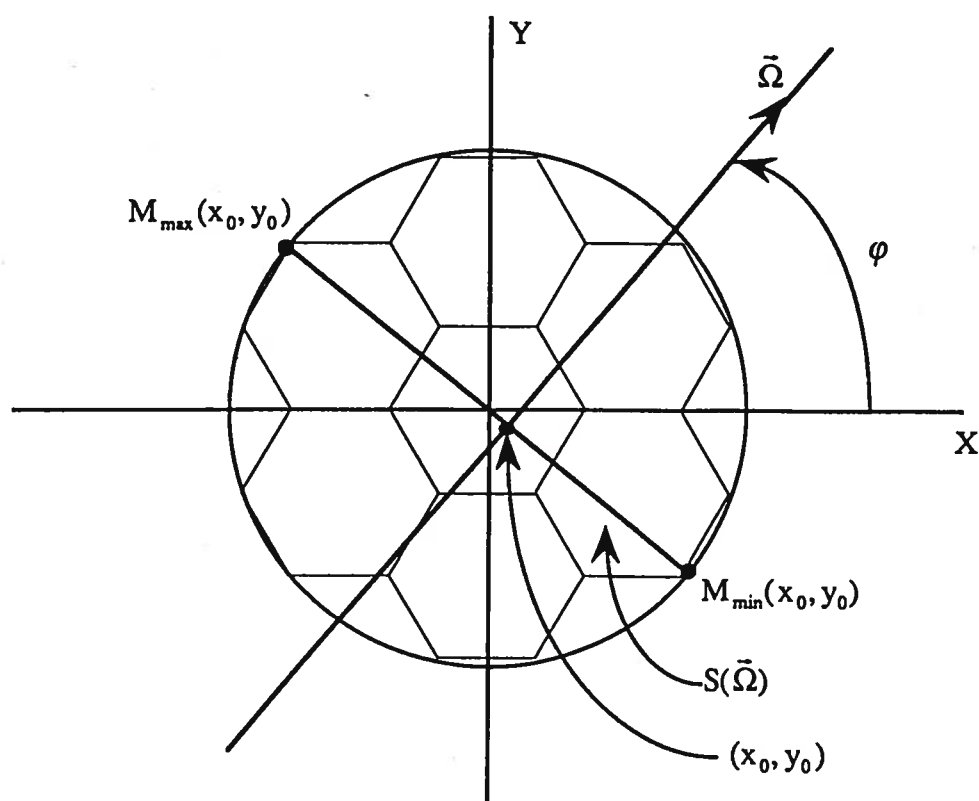


Figure 4.2: Domaine d'intégration spatiale pour une direction fixe.

4.2.2.2 Cas d'une géométrie tridimensionnelle

La même technique a été utilisée dans la recherche des limites d'intégration dans le cas d'une représentation tridimensionnelle; mais avec plus de complexité bien entendu (voir figure 4.3). On commence toujours la double intégration (spatiale et angulaire) des équations (4.2) par intégrer par rapport à la direction $\vec{\Omega}$; qui dans

ce cas est repérée par deux angles: φ et θ décrivant respectivement la longitude et la colatitude . Le domaine de variation de φ est de $[0, 2\pi]$ qui, comme dans le cas précédent, est ramené à $[0, \pi]$ toujours par raison de symétrie. La latitude θ décrit $[0, \pi]$. Une fois la direction $\vec{\Omega}$ fixée, on détermine la surface $S(\vec{\Omega})$ en commençant par inclure notre domaine dans un volume fermé. On pourrait choisir une sphère, une ellipsoïde ou toute autre figure. Une sphère est désavantageuse dans le cas d'un assemblage ayant une grande hauteur selon l'axe z , mais une dimension très petite sur le plan xy où vice versa. Nous risquons donc de nous retrouver avec des points d'intégration inutiles et qui peuvent contribuer à une augmentation des coûts des calculs. Il en est de même du cas d'une ellipsoïde. Notre choix a été orienté sur un cylindre d'axe z ; et pour avoir un volume fermé, nous lui avons inclus deux demi-sphères à ces extrémités. Une surface fermée judicieusement choisie permet d'obtenir exactement les bonnes limites d'intégration.

Rappelons que la surface recherchée $S(\vec{\Omega})$ est décrite dans l'espace. Un point $M \in S(\vec{\Omega})$ sera alors décrit par trois coordonnées $M(x, y, z)$. D'autre part, une droite dans l'espace est donnée par:

$$\frac{x - x_0}{\cos \alpha} = \frac{y - y_0}{\cos \beta} = \frac{z - z_0}{\cos \zeta} \quad (4.10)$$

où $\cos \alpha$, $\cos \beta$ et $\cos \zeta$ sont les cosinus directeurs de la droite de vecteur unitaire $\vec{\Omega}$ et $M_0(x_0, y_0, z_0)$ est un point arbitraire où passe la droite en question. La recherche des dimensions de $S(\vec{\Omega})$ revient alors à trouver les extremums des points $M_0(x_0, y_0, z_0)$

où la droite croise le domaine qu'on veut calculer. Nous devons donc trouver une équation qui groupe les inconnus x_0 , y_0 et z_0 et puis chercher les différents extremums. Pour établir cette équation, on résout trois systèmes d'équations.

Deux relatives aux deux demi-sphères:

$$\begin{cases} x^2 + y^2 + (z - z_{\pm})^2 = R^2 \\ \frac{x-x_0}{\cos \alpha} = \frac{y-y_0}{\cos \beta} = \frac{z-z_0}{\cos \zeta} \\ x \cos \alpha + y \cos \beta + (z - z_{\pm}) \cos \zeta = 0 \end{cases}$$

où z_{\pm} indique la position, selon l'axe z , des centres des sphères choisies.

Le troisième système est relative au cylindre:

$$\begin{cases} x^2 + y^2 = R^2 \\ z_- \leq z \leq z_+ \\ \frac{x-x_0}{\cos \alpha} = \frac{y-y_0}{\cos \beta} = \frac{z-z_0}{\cos \zeta} \\ x \cos \alpha + y \cos \beta = 0 \end{cases}$$

où z_- et z_+ sont les cotes, selon z , délimitant le cylindre. Notons que ce dernier système est équivalent à celui du cas bidimensionnel. Un exemple d'illustration est donné à la figure 4.3.

4.3 Aspects numériques

Nous allons décrire au cours de ce paragraphe les différentes procédures numériques pour intégrer les probabilités de collision. Souvent, nous ne nous intéresserons qu'au cas tridimensionnel en sachant que le lecteur peut facilement déduire le cas bidimensionnel. Nous insisterons sur la manière dont on évalue les lignes d'intégration qui seront stockées après évaluation dans des fichiers informatiques, et utilisées dans une étape ultérieure du calcul pour produire les probabilités de collision. Nous parlerons aussi de quelques techniques, incorporé dans le module

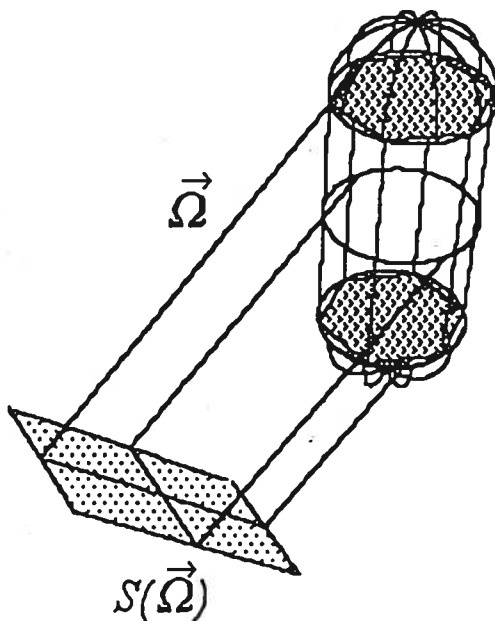


Figure 4.3: Domaine d'intégration des probabilités de collision tridimensionnelles.

EXCELL, qui permettent de réduire le système matricielle à résoudre. Il s'agit plus particulièrement des mélanges et de l'orientation des cellules.

4.3.1 Calcul des lignes d'intégration

Les parcours optiques interviennent dans les calculs numériques des probabilités de collision. Nous avons vu au paragraphe précédent, que toutes les probabilités de collision s'écrivent sous la forme d'une quadruple intégrale en 3D ou d'une double intégration en 2D. On emploiera toujours une quadrature trapézoïdale pour évaluer les intégrales selon l'espace. Quant aux variables angulaires, on a le choix entre une double quadrature de Gauss-Legendre ou trapézoïdale. Les probabilités de

première collision peuvent être écrites sous la forme:

$$P_{ij} = \int_0^\pi d\varphi \int_0^\pi d\theta \int_{S(\varphi, \theta)} dx dy f(x, y, \varphi, \theta, \tau(x, y, \varphi, \theta)) \quad (4.11)$$

qui numériquement se transforme en:

$$P_{ij} \simeq \sum_{m,n} w_{mn} \sum_{k,l} w_{kl}^{mn} f(x_k, y_l, \varphi_m, \theta_n, \tau(x_k, y_l, \varphi_m, \theta_n)) \quad (4.12)$$

où $\tau(x_k, y_l, \varphi_m, \theta_n)$ est le parcours qu'on doit évaluer. Il est à noter que tous les ordres des quadratures dans la formule ci-dessus sont indépendants et peuvent être quelconque.

Rappelons que les probabilités de collision ainsi définies sont basées sur une approximation du flux plat dans chaque région homogène 2.18 et 2.20. Les sections efficaces macroscopiques correspondantes sont aussi supposées constantes par zone. Pour un volume homogène i , le parcours optique s'écrit:

$$\tau_I(x_k, y_l, \varphi_m, \theta_n) = \sum_i t_i(x_k, y_l, \varphi_m, \theta_n) \quad (4.13)$$

où $t_i(x_k, y_l, \varphi_m, \theta_n)$ est la distance parcourue par le neutron, de direction $\vec{\Omega}(\varphi, \theta)$, dans le volume i . C'est en fait l'ensemble des lignes d'intégration $t_i(x_k, y_l, \varphi_m, \theta_n)$ qui est stocké et utilisé ensuite dans le calcul des probabilités de collision.

Pour évaluer les lignes d'intégration, nous commençons en premier lieu par choisir un référentiel au centre et à la cote z inférieure du cylindre formant le domaine. Toutes les cellules hexagonales du milieu considéré (assemblage ou réacteur)

sont alors repérées par rapport à ce référentiel, par les coordonnées de leurs centres et leurs hauteurs selon l'axe z . S'il y a présence de cellules hétérogènes contenant des cylindres concentriques, ces derniers sont aussi repérés par les mêmes coordonnées de la cellule à qui ils appartiennent en plus de leurs rayons. Nous supposons ensuite, que chaque cellule est limitée par huit plans (ou six dans le cas 2D). Les équations de ces plans sont définies par rapport à un repère local pris au centre et à la cote z inférieure de la cellule. Les équations des cylindres sont aussi définies localement. Après toutes ces définitions, le calcul des parcours des neutrons dans différentes cellules est trivial. En effet, notre domaine se réduit à un ensemble de plan et de cylindre d'équations connues. Le calcul des lignes d'intégration revient alors à chercher l'intersection d'une droite dans l'espace d'équation donnée par:

$$\frac{x - x_0}{\cos \alpha} = \frac{y - y_0}{\cos \beta} = \frac{z - z_0}{\cos \zeta} = t, \quad (4.14)$$

avec l'ensemble des plans et d'éventuels cylindres. Comme l'équation ci-dessus est une équation paramétrée par t , la recherche des lignes d'intégration dans une cellule k donnée se réduit à la recherche de l'ensemble des parcours $\{t_i^k\}$ telle que t_i^k est la distance entre l'origine de la droite (sur le repère fixe) et son intersection avec le plan ou le cylindre i de la cellule k . Les lignes d'intégration dans une zone j de la cellule k se déduisent alors par une simple différence: $t_{j+1}^k - t_j^k$ (voir figure 4.4).

4.3.2 Normalisation des probabilités de collision

Les différentes probabilités de collision obéissent aux relations de conservations (2.36) et (2.37) et de réciprocités (2.31) déjà discuté précédemment. Il se peut,

que dans certain cas, ces lois ne soient plus vérifiées à cause des différentes erreurs numériques accumulées lors des étapes de calcul des probabilités de collision.

Pour forcer les probabilités calculées à respecter ces lois, trois techniques de normalisation sont disponibles dans le code DRAGON [21]. Nous ne ferons que les énoncer ici sans rentrer dans les détails des calculs.

Normalisation diagonale

Elle consiste à corriger les éléments diagonaux de la matrice de collision en leurs ajoutant un terme correctif:

$$P_{ij} \longrightarrow P_{ij} + \varepsilon_{ij} \delta_{ij}, \quad (4.15)$$

où δ_{ij} est la fonction de Kronecker. Nous entendons par matrice de collision soit les probabilités volume-volume, ou volume-surface ou surface-surface.

Cette technique n'est cependant pas applicable au calcul des cellules contenant des zones transparentes.

Normalisation de type Gelbard

Elle est basé sur le même principe que la première c'est à dire:

$$P_{ij} \longrightarrow P_{ij} + \varepsilon_{ij}. \quad (4.16)$$

Elle diffère de la précédente par la manière d'évaluer le terme correctif ε_{ij} en plus du fait qu'elle s'intéresse à tous les éléments de la matrice de collision. Les zones vides ne sont pas un inconvénient dans ce cas. Cependant, ces deux méthodes peuvent conduire à des probabilités négatives qui n'ont pas de sens physique [21].

Normalisation multiplicative

Un autre sens de raisonnement a été suivi ici pour rétablir les lois de conservations. Il s'agit de corriger les éléments de la matrice de collision en les multipliant par un terme correctif:

$$P_{ij} \longrightarrow \varepsilon_{ij} P_{ij}. \quad (4.17)$$

Pour calculer les termes ε_{ij} , un système non linéaire est résolu. Notons que cette normalisation ne fait pas apparaître de probabilités négatives.

4.3.3 Regroupement et orientation des cellules

On avait vu, au cours de l'étude du formalisme multicellule, que l'orientation des cellules permettait d'améliorer le mélange de celles-ci. Mais que cette orientation était liée aux courants aux interfaces intercellulaires. Or, dans cette méthode basée sur le traçage des lignes d'intégration, seuls les courants aux surfaces externes du

domaine (cellule, assemblage, réacteur,...) interviennent dans les équations. Et par cette méthode, on veut justement éviter l'approximation multicellule. Pour profiter de l'avantage qu'offre l'orientation des cellules dans le cadre de cette méthode, on introduit la notion de secteur. Une cellule peut être subdivisée en un ensemble de sous volumes qu'on appelle secteurs.

Ces secteurs sont obtenus en subdivisant l'intervalle $[0, 2\pi]$ en six intervalles égaux (figure 4.5(a)), en opérant bien entendu à partir du centre de la cellule. Chaque intervalle ainsi formé $[(n-1)\frac{\pi}{3}, n\frac{\pi}{3}]$ peut être à son tour subdivisé en plusieurs autres sous intervalles égaux. Cette sectorisation est appliquée à l'ensemble des six intervalles d'une même zone homogène (figure 4.5(b)). L'utilisateur du code peut ainsi à son guise décider d'introduire ou de ne pas introduire des secteurs non seulement dans une cellule donnée mais dans une zone homogène de cette cellule.

On peut alors orienter nos cellules de la même manière que dans le cas du formalisme multicellule. On faisait donc une orientation des surfaces, mais ici c'est plutôt une orientation des volumes. En effet, on a besoin d'une orientation lorsqu'une même cellule se trouve dans différentes localités de l'assemblage. Comme l'environnement (les cellules voisines) de celle-ci peut varier d'une localité à une autre, l'intérêt d'orienter une cellule sectorisée paraît donc évident: on peut être obligé de faire subir des rotations à la cellule en question d'une localité à une

autre pour retrouver l'environnement approprié des différentes faces, et donc des différents secteurs.

Le regroupement des cellules se fait aussi de la même façon que précédemment, c'est à dire qu'on peut décider, par des raisons physiques, que deux cellules dans deux localités différentes ont même flux.

Notons que la sectorisation des cellules permet, en plus d'améliorer le regroupement, d'augmenter la précision des calculs. N'oublions pas que le formalisme des probabilités de collision utilisé ici, est basé sur une approximation du flux plat par volume homogène. Or plus le volume est petit, mieux est satisfaite cette condition. Ceci se caractérise surtout dans les zones à bordures hexagonales. En effet, supposant une cellule A entourée d'autres cellules de structures isotopiques complètement différentes par exemple, une cellule combustible entourée d'un absorbeur fort, d'une cellule à eau et d'autres cellules à combustibles fertiles et fissiles. L'environnement de la cellule A est donc très hétérogène. Le flux dans cette cellule va certainement présenter des variations très brusques; surtout dans la zone à bordure hexagonale. L'introduction des secteurs nous permettra certainement de mieux réaliser la condition de flux plat dans nos volumes et donc de bien calculer la matrice de collision.

L'introduction des secteurs complique d'avantage le calcul des lignes d'intégra-

tion. Si on a affaire à une cellule sectorisée, nous traitons ces secteurs par la même technique avec laquelle on a abordé les plans formant les bords de la cellule. C'est à dire qu'on ajoute aux données d'autres plans locaux et passant tous par le centre de la cellule. En effet, du moment que les secteurs sont formés par des équipartitions angulaires, il est facile d'écrire les équations des différents plans délimitants ces secteurs, donc de calculer les distances $\{t_i^k\}$. En fin de compte, notre domaine ressemble à un ensemble de plans et de cylindres qui se croisent entre eux. Les lignes d'intégrations sont alors les distances parcourues par les neutrons, entre deux limites d'un volume formées par l'intersection des plans et éventuellement des cylindres. D'autres problèmes techniques sont décrit à l'annexe D.

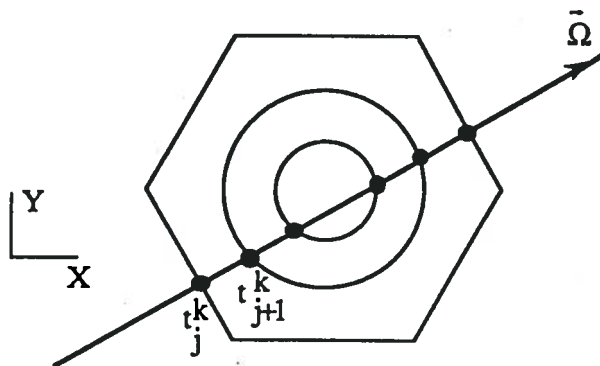


Figure 4.4: Parcours des neutrons au niveau d'une cellule.

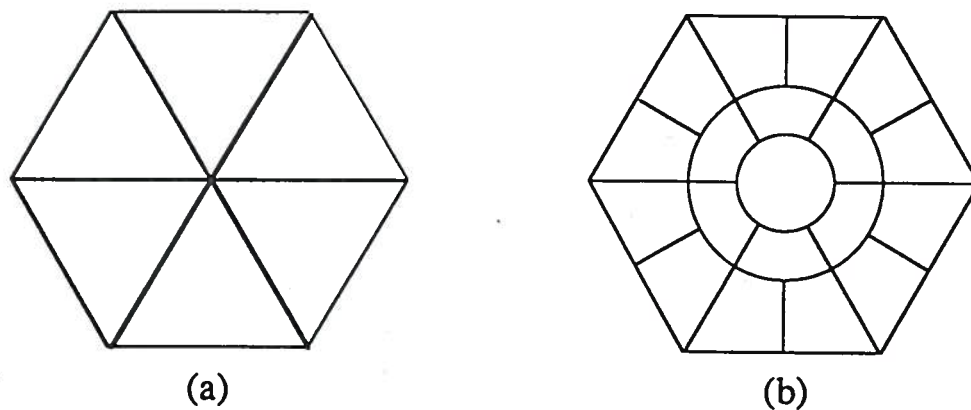


Figure 4.5: Sectorisation des cellules hexagonales.

CHAPITRE 5

Tests et résultats numériques

Ce dernier chapitre sera consacré à un ensemble de tests numériques qui ont été effectués dans le but de valider les différentes méthodes développées dans cette thèse. Toutes les méthodes en question sont implantées dans le code de transport multigroupe DRAGON. La méthode J_{\pm} a été incorporée au module JPM, la méthode des courants d'interfaces (IC) au module SYBIL et finalement la méthode des probabilités de collision (CP) au module EXCELL. Nous présenterons des tests en deux et trois dimensions pour une cellule unitaire comme pour un assemblage.

Pour tous nos calculs, on a utilisé des méthodes directes pour résoudre les systèmes matriciels mis en jeu. Pour les méthodes multicellules, la méthode de résolution est celle du paragraphe 3.2. Pour la méthode des probabilités de collision, DRAGON utilise un algorithme LDL' sur un système matriciel symétrisé du type 4.1. Cette méthode est décrite à la référence [22]. Tous nos calculs ont été fait sur l'ordinateur IBM ES9000.

Nous commencerons par traiter une cellule 2D où on étudiera surtout la variation du facteur de multiplication effectif avec le rapport de modération. Ensuite on traitera deux assemblages: un avec des sources fixes, l'autre avec des sources

de fissions. Dans le cas 3D on fera la même chose, c'est à dire qu'on essayera de voir l'influence de la troisième dimension sur une cellule puis sur des assemblages à sources fixes.

Pour les problèmes à sources fixes, nous avons comparé nos résultats avec ceux du code MCNP [27]. Ce dernier est basé sur la méthode Monté Carlo qui est une méthode stochastique totalement différente de la méthode déterministe utilisé dans DRAGON pour résoudre l'équation de transport des neutrons.

5.1 Tests bidimensionnels

5.1.1 Probabilités de collision: cas d'une cellule unitaire.

Dans le calcul intégral de transport, de grands efforts sont fournis pour calculer au mieux les probabilités de collision (contrairement au calcul intégral-différentiel où la réflexion est surtout portée sur la résolution du système matriciel). Il est donc tout à fait naturel de commencer par comparer les probabilités de collision obtenues par la variété des méthodes étudiées dans cette thèse.

Considérons la cellule de la figure (5.1) qui est une cellule combustible typique d'un assemblage de réacteurs sous modérés. Les caractéristiques physiques (sections efficaces) de ses milieux sont données au tableau (5.1).

Pour un groupe d'énergie et en supposant que la cellule est parfaitement réfléchie, nous avons calculé les probabilités de première collision pour l'ensemble des méthodes J_{\pm} , IC, Roth et CP. Au tableau (5.2), nous avons comparé les éléments de la matrice réduite (voir équation (3.28)) des méthodes multicellules à la méthode CP qui est supposée être la plus précise.

Dans ces calculs, nous avons utilisé la quadrature de Gauss-Legendre d'ordre 12 en angle et en espace, sauf pour la méthode CP où on a utilisé la quadrature trapézoïdale avec 150 points pour la variable spatiale. Nous avons considéré les deux approximations (DP_1 et DP_0) du flux angulaire à la surface. Notons cependant que les surfaces cylindriques dans le cas J_{\pm} seront toujours traitées dans nos tests avec une approche DP_1 .

D'après les résultats obtenus, on voit que dans le cas DP_0 les quatre méthodes sont presque identiques pour cette cellule isolée. Ce qu'on peut retenir dans ce test c'est le grand écart entre les méthodes J_{\pm} en DP_1 et CP, qui est beaucoup plus marquant que l'écart entre IC en DP_1 et CP.

5.1.2 Etude du K_{eff} en fonction du rapport de modération

L'étude du facteur de multiplication effectif (K_{eff}) en fonction du rapport de modération, défini comme le rapport du volume du modérateur (V_m) au volume du combustible (V_f), revêt une importance particulière dans les études de projet [2].

En effet, pour les réacteurs sous modérés K_{eff} croit avec $\frac{V_m}{V_f}$, mais le facteur de conversion, défini comme le rapport du taux de capture fertile au taux d'absorption fissile, décroît avec $\frac{V_m}{V_f}$, d'où la nécessité de la recherche d'un rapport de modération optimum dans le design de ces réacteurs.

Nous nous contenterons ici de l'étude de K_{eff} en fonction de $\frac{V_m}{V_f}$ pour comparer nos différentes méthodes. Considérons à cet effet la cellule de la figure 5.2. Le volume central (volume 1) contient du combustible MOX, qui est entouré (volume 2) d'une gaine en zircaloy. Le volume 3 est rempli avec de l'eau légère. Les constituants isotopiques de ces matériaux et les températures correspondantes sont données au tableau (5.3).

Nous supposons cette cellule parfaitement réfléchie. Nous avons utilisé la bibliothèque APOLLIB [31] à 99 groupes d'énergie dans nos calculs. Avec une approximation DP_0 aux surfaces externes, nous avons obtenu les résultats de la figure (5.3). Si nous prenons comme référence la méthode CP, les méthodes J_{\pm} et IC ont tendances à sous estimer le K_{eff} . Cette sous estimation n'est cependant pas trop importante ($< 100 \text{ pcm}$). En fait, pour une cellule avec les mêmes conditions frontières les méthodes CP et IC sont pratiquement équivalentes. La seule différence réside dans la manière de calculer les intégrales dans les formules des probabilités de collision.

Nous avons cherché à savoir l'effet de l'approximation du flux angulaire aux surfaces frontières. Nous avons alors utilisé une approximation DP_1 dans les calculs par IC et J_{\pm} . Les résultats obtenus sont comparés à la méthode CP (avec DP_0) à la figure (5.4). L'effet est surprenant pour une cellule. L'écart maximum entre CP et IC est de l'ordre de 1500 pcm. Entre CP et J_{\pm} il est de l'ordre de 3400 pcm. On remarque que l'écart entre DP_0 et DP_1 croît avec le rapport de modération c'est-à-dire avec les dimensions des surfaces externes. En comparant les courbes des figures (5.3) et (5.4) on peut facilement remarquer que la méthode J_{\pm} est la plus écartée de la méthode CP. C'est probablement dû au découplage entre les zones de la cellule introduit par J_{\pm} .

5.1.3 Exemple de calcul d'assemblage de réacteur

Nous considérerons ici deux types de problèmes: un assemblage à source fixe et un autre à source de fission. Le premier cas nous permettra de comparer les flux à un groupe d'énergie obtenus par les trois méthodes (IC, CP et J_{\pm}) aux flux calculés par la méthode Monte Carlo. Au second cas, on s'intéressera aux facteurs de multiplication effectif des trois méthodes. Les calculs Monte Carlo ont été réalisés à l'aide du code MCNP [27].

5.1.3.1 Problème à source fixe

Considérons pour ce cas le $\frac{1}{12}$ d'assemblage sous modéré de la figure 5.5, qui est limité par des axes de symétries supposés parfaitement réfléchis. Pour la méthode

CP, on ne peut pas représenter un assemblage infini. L'axe de symétrie à la périphérie (axe D sur la figure 5.5) est remplacé dans ce cas par une condition de réflexion isotrope aux surfaces externes de l'assemblage. Pour simuler le cas 2D dans MCNP, nous avons supposé cet assemblage haut de 1. *cm* avec des réflexions spéculaires aux limites supérieure et inférieure.

Quatre types de cellules constituent cet assemblage (voir figure 5.5). Il s'agit de la cellule à eau (cellule 1 sur la figure), de la cellule tube-guide (cellule 7), de la cellule à combustible fertile (cellule 13) et de la cellule à combustible fissile (toutes les autres cellules). Nous considérerons un groupe d'énergie dans nos calculs. La source des neutrons est placée dans le modérateur et est supposée de densité unité ($Q = 1 \text{ neutrons/cm}^3/\text{s}$). Le tableau (5.4) donne les sections efficaces utilisées dans les calculs. Elles ont été tirées de la référence [9].

Un total de 46 zones a été considéré dans les calculs: une zone pour la cellule à eau, trois (combustible, gaine et modérateur) pour les cellules à combustible fertile et fissile et trois pour la cellule tube guide (modérateur, tube et modérateur). Avec les symétries à la frontière de l'assemblage, le nombre de surfaces est réduit, dans le cas des méthodes multicellules, de 96 à 63 surfaces partielles dans le cas DP_0 et de 288 à 189 dans le cas DP_1 . Le nombre de surfaces considéré dans la méthode CP est de 7.

La quadrature numérique utilisée est du type Gauss-Legendre et est d'ordre 12 en angle et en espace pour le cas multicellules, pour la méthode CP son ordre est 12 en angle mais 400 en espace (trapézoïdale). Pour contrôler la précision des quadratures, DRAGON produit les erreurs sur les volumes numériques utilisés dans la normalisation des lignes d'intégration (voir section (3.4)). Pour cet exemple, la méthode CP conduit à des erreurs moyennes sur les volumes et surfaces de l'ordre de .003% et .14% respectivement. Pour les méthodes multicellules, l'erreur relative maximale sur les volumes est de l'ordre de 2.65×10^{-5} . Dans le cas de la méthode CP, nous avons utilisé la normalisation Gelbard des probabilités de collision pour forcer la conservation des neutrons.

Les résultats obtenus (flux de neutrons) par les différentes méthodes avec différentes approximations sont comparés dans le tableau (5.5) au calcul Monte Carlo. Ce dernier a été effectué avec un tirage de 10^5 neutrons. L'écart type obtenu est inférieur à 1.0%. A noter que les résultats Monte Carlo ont été normalisé pour assurer la conservation des neutrons.

Les écarts observés entre les flux calculés par MCNP et DRAGON sont relativement élevés mais parfaitement acceptable si on tient compte du fait que: pour la méthode CP les conditions frontières sont différentes dans les deux calculs, pour les méthodes multicellules on peut attribuer ce grand écart aux approximations sur lesquelles elles sont basées. Cet effet se manifeste surtout dans le cas de la méthode

J_{\pm} qui est de loin la moins précise.

Pour estimer l'erreur introduite par la différence des conditions frontières (assemblage infini et assemblage réfléchi), nous avons fait deux calculs correspondant à ces deux conditions frontières avec la méthode IC. Les résultats sont présentés au tableau 5.6. Nous remarquons que quelle que soit la méthode de couplage entre les cellules (DP_1 et DP_0), l'écart entre les deux calculs est presque constant pour chaque cellule. L'effet des conditions frontières sur la cellule 16 (voir tableau 5.6) est assez élevé (de l'ordre de 2.0%). Or c'est sur cette cellule qu'on a observé le plus grand écart entre Monte Carlo et la méthode CP. Ces résultats nous laissent donc penser que la surestimation des calculs par la méthode CP (la plus rigoureuse) par rapport à Monte Carlo, est en partie due à cet effet.

5.1.3.2 Problème à source de fission.

Le calcul du facteur de multiplication effectif K_{eff} est d'une importance capitale dans les études de projets où dans le suivi de l'évolution du fonctionnement des réacteurs. La précision sur K_{eff} dépend entre autre de la méthode de calcul des probabilités de collision comme on a déjà vu au moment de l'étude d'une cellule unitaire. Afin d'étudier l'influence des formalismes multicellules et CP sur le K_{eff} , nous utiliserons ces méthodes pour calculer un assemblage de contrôle du Réacteur Sous Modéré à Variation du Spectre (RSMVS) [31].

Considérons le $\frac{1}{12}$ d'assemblage de la figure (5.6) supposé parfaitement réfléchi à sa frontière et sur ses axes de symétries. On y distingue quatre types de cellule génératrice: une cellule tube-guide (cellule 1), quatre cellules barres de contrôle (cellule 2), six cellules périphériques à combustible fissile (cellule 4) et toutes les autres cellules (cellule 3) sont à combustible fissile. Pour mettre en oeuvre le concept du regroupement et d'orientation des cellules, nous y avons défini 23 cellules physiques au lieu de 36 que nous avons orientées tel qu'indiqué à la figure (5.6). Pour regrouper les cellules dans le cas de la méthode CP, nous avons sectorisé les zones à bordure hexagonale de toutes les cellules en six secteurs.

Cet assemblage de contrôle a été calculé avec la bibliothèque APOLLIB des sections efficaces à 99 groupes d'énergies (la composition isotopique est donnée à la référence [31]). Nous l'avons supposé critique et nous avons cherché à calculer le facteur de multiplication infini K_{∞} et le laplacien critique B^2 qui est dans ce cas la valeur propre de ce calcul de transport. Les tableaux (5.7) et (5.8) résument l'ensemble des résultats obtenus.

Au tableau (5.7) nous avons présenté le calcul d'assemblage précédent en tenant compte du regroupement et de l'orientation des cellules. Tous les calculs d'autoprotection des résonances ont été fait avec la méthode J_{\pm} à l'exception d'un seul qui a été réalisé par la méthode IC (voir tableau (5.7)). On voit clairement qu'il y a un gain substantiel en temps de calcul CPU, sans pratiquement perte

de précision sur K_∞ , lorsqu'on autoprotège les sections efficaces en utilisant la méthode J_\pm . Le tableau (5.8) regroupe des calculs qui ont été fait sans regrouper les cellules, avec une autoprotection en J_\pm .

Dans les calculs multicellules, nous avons utilisé une quadrature de Gauss-Legendre d'ordre 12 pour les intégrations spatiale et angulaire. Pour les calculs avec CP, nous avons utilisé 24 angles et 800 points en espace pour effectuer les calculs avec présence des secteurs dans le maillage (colonne 4 au tableau (5.7) et 3 au tableau (5.8)); nous n'avons pas cherché à optimiser le coût des calculs dans ce cas, il existe certainement une quadrature beaucoup moins fine qui peut donner les mêmes résultats à prix bas. La colonne 6 du tableau (5.8) représente cependant un calcul optimisé; et le temps de calcul obtenu dans ce cas est très comparable à celui de la méthode IC- DP_1 .

L'ensemble des résultats montre que plus on fait d'approximation sur le couplage des différentes zones de l'assemblage, plus l'écart à la méthode CP s'accroît. La méthode IC introduit pour cet exemple un écart de l'ordre de 430 pcm et l'amélioration de l'approximation des flux angulaires aux surfaces, donc du couplage, n'introduit presque pas d'effet (voir tableau (5.8)). Les méthodes J_\pm et Roth donnent une surévaluation importante du K_∞ à cause des approximations sur lesquels elles sont basées. Elles sont donc peu appropriées aux calculs de ce type d'assemblage. Notons aussi que l'effet du regroupement sur la méthode CP

est seulement de l'ordre de 190 pcm (comparaison des tableaux (5.7) et (5.8)), avec un gain en temps de calcul non négligeable. Mais sur la méthode IC il est de l'ordre de 460 pcm. Cette étude nous révèle aussi l'effet important des secteurs. L'écart observé entre les calculs avec et sans secteurs (voir tableau (5.8)) est dans ce cas de l'ordre de 600 pcm; ce qui est appréciable. Cet écart peut être expliqué par le fait que dans le cas des secteurs, on calcul bien le gradient des flux dans les différentes cellules autrement dit l'environnement des cellules est mieux pris en compte.

5.2 Tests tridimensionnels.

Comme pour le cas bidimensionnel, nous allons commencer par étudier une cellule unitaire; en l'occurrence l'effet de la troisième dimension sur le K_{eff} . On s'intéressera ensuite à l'étude d'un assemblage à source fixe où on comparera les flux calculés par DRAGON à un résultat Monte Carlo.

5.2.1 Cellule unitaire.

Pour passer d'une représentation en 3D à celle en 2D, on suppose que la cellule est infini selon l'axe z . Nous allons donc examiner dans un premier lieu l'effet de la troisième dimension sur les probabilités de première collision. Dans le tableau (5.9), on a représenté les résultats pour le cas de la cellule de la figure (5.1) avec des hauteurs de .2 cm, .5 cm et 2.0 cm selon z , qu'on compare à 2D. La cellule a été supposée réfléchie sur toutes ses frontières. Les sections efficaces utilisées sont données au tableau (5.1). Le but de ce test est de voir l'influence de la réflexion isotrope sur

le calcul 3-D. Autrement dit, nous voulons étudier l'effet d'une réflexion isotrope en géométrie 3-D comparativement à une réflexion spéculaire (qui correspond au cas 2-D).

Notons que le libre parcours moyen minimal dans cette cellule est de l'ordre de 0.928 cm (la cellule peut être considérée infinie si ses dimensions sont supérieures à quelques libres parcours moyens). On voit qu'on tend rapidement vers le cas 2-D. On a quand même besoin d'une certaine hauteur pour tendre vers 2-D. Si la réflexion était spéculaire, quelque soit la hauteur, ceci devrait correspondre à 2-D.

Nous avons repris ici l'étude du K_{eff} en fonction du rapport de modération mais en faisant varier la hauteur de la cellule. On a gardé la même composition isotopique (voir tableau (5.3)) et la même structure géométrique (voir figure (5.2)). La cellule est supposée parfaitement réfléchie sur toutes ses surfaces. Les sections efficaces autoprotégées ont été calculées à l'aide des probabilités de collision obtenues par la méthode CP. La quadrature angulaire utilisée est de (6, 2) (6 en longitude et 2 en colatitude) quant aux variables spatiales, on a utilisé (100,100). Les résultats obtenus sont schématisés dans la figure (5.7).

On peut en conclure, d'après cette figure, que l'effet 3D est pratiquement négligeable dans le calcul du K_{eff} pour une cellule parfaitement réfléchie.

5.2.2 Assemblage tridimensionnel.

Pour qualifier le module hexagonal 3D dans DRAGON, nous allons présenter ici un calcul de flux qu'on va comparer à un résultat Monte Carlo [32]. Considérons donc l'assemblage à source fixe du cas 2D (voir figure (5.5)) avec une hauteur de 0.5 *cm*. Nous avons ajouté à cet assemblage un bloc de modérateur de hauteur 1.0 *cm* au dessus et au dessous de telle sorte que l'assemblage à traiter fasse une hauteur totale de 2.5 *cm* selon l'axe *z*. La source est supposée fixe et en plus elle est localisée seulement dans le modérateur de la partie centrale de l'assemblage. On a gardé les mêmes données physiques que dans le cas 2D (voir tableau (5.4)). En ce qui concerne les blocs de modérateur ajoutés, ils sont supposés avoir les mêmes propriétés que la cellule à eau: ces parties d'assemblage sont formées de 16 cellules à eau (voir figure (5.5)).

Le calcul Monte Carlo a été réalisé à l'aide du code MCNP, avec 2×10^5 tirages aléatoires de neutrons, avec bien entendu des conditions de réflexion spéculaire sur les axes de symétries, représentés à la figure (5.5)) et sur les surfaces supérieures et inférieures selon *z*. L'écart type maximum observé est inférieur à 1.0%. Le calcul DRAGON a été fait en utilisant une quadrature de (6,2) en angle et de (200,200) en espace. L'erreur moyenne obtenue sur le calcul numériques des volumes et surfaces est autour de .11% et .4% respectivement. Après normalisation des lignes d'intégration, nous avons imposé une normalisation des probabilités de collision de type Gelbard pour forcer la conservation des neutrons. Pour le même motif, nous

avons aussi normalisé les résultats de Monte Carlo. Des conditions de réflexion isotrope ont été imposés à toutes les surfaces de l'assemblage (à noter que l'axe de symétrie à la périphérie n'est pas considéré dans les calcul DRAGON). Un total de 78 zones homogènes ont été considérées dans les calculs DRAGON avec 53 surfaces partielles. Les résultats obtenus sont donnés au tableau (5.10), où les cellules 17, 21, 23, 29 et 32 sont les cellules du bloc de modérateur supérieur (l'assemblage est symétrique selon l'axe z).

Les flux calculés par DRAGON sont très proches de ceux obtenus par la méthode Monte Carlo, à l'exception des cellules périphériques (cellule 16 par exemple) où l'influence des conditions frontières différentes dans MCNP et DRAGON est non négligeable.

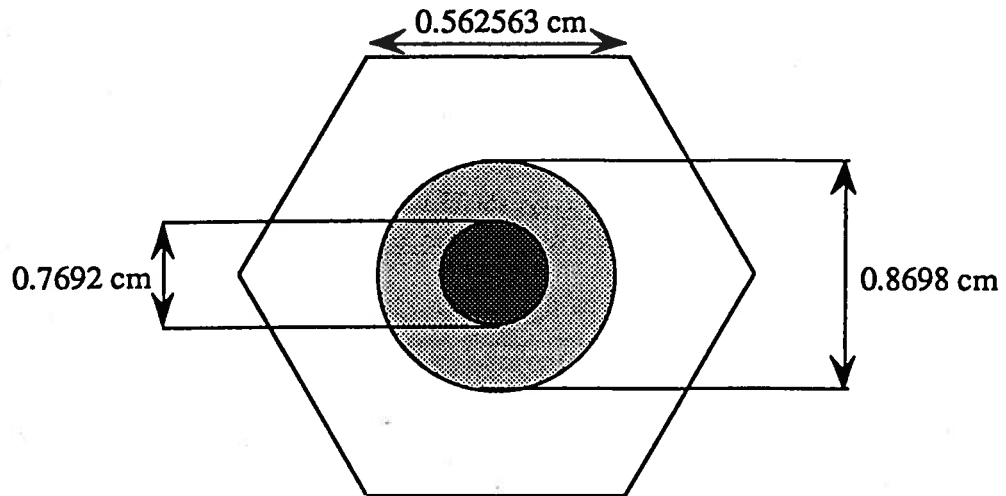


Figure 5.1: Cellule combustible d'un réacteur sous-moderé.

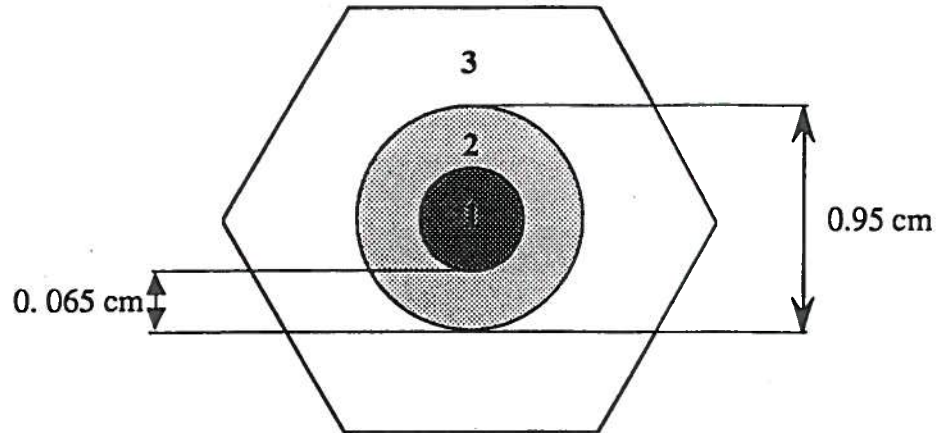


Figure 5.2: Modèle de la cellule étudiée. 1: combustible, 2: gaine, 3: modérateur.

Tableau 5.1: Sections efficaces pour un groupe d'énergie

Volume	1 Combustible	2 Gaine	3 Modérateur
$\Sigma(cm^{-1})$.67799	.68288	1.07708
$\Sigma_s(cm^{-1})$.44228	.67187	1.07670

Tableau 5.2: Comparaison des probabilités de collision pour une cellule 2D

Matrice réduite	Méthode CP	Ecart à la méthode CP (%)				
p_{ij}	DP_0	DP_0			DP_1	
$p_{i \rightarrow j}$	CP	$\frac{J_{\pm}-CP}{CP}$	$\frac{IC-CP}{CP}$	$\frac{Roth-CP}{CP}$	$\frac{J_{\pm}-CP}{CP}$	$\frac{IC-CP}{CP}$
$p_{1 \rightarrow 1}$.797720	.47	-.02	-.06	5.30	2.83
$p_{1 \rightarrow 2}$.665374	-.25	.09	-.01	-2.37	-.58
$p_{1 \rightarrow 3}$.629136	-.67	-.02	-.11	-7.73	-4.39
$p_{2 \rightarrow 2}$.242472	.46	-.15	-.32	1.04	-.07
$p_{2 \rightarrow 3}$.202095	.10	-.05	.15	2.32	.69
$p_{3 \rightarrow 3}$.404282	.65	.03	-.14	6.83	4.06

Tableau 5.3: Spécifications isotopiques pour le modèle de la cellule unitaire.

Isotopes	Densités($\times 10^{24}/cm^3$)
combustible MOX à une température de 900°K	
^{235}U	6.1940×10^{-5}
^{238}U	2.0580×10^{-2}
^{239}Pu	1.3670×10^{-3}
^{240}Pu	6.0090×10^{-4}
^{241}Pu	2.4140×10^{-4}
^{242}Pu	1.8440×10^{-4}
^{16}O	4.6080×10^{-2}
Gaine à une température de 600°K	
Zircaloy	3.7020×10^{-2}
modérateur à une température de 600°K	
^1H	4.7440×10^{-2}
^{16}O	2.3720×10^{-2}

Tableau 5.4: Sections efficaces à un groupe d'énergie pour le problème à source fixe.

	eau	combustible		gaine
		fissile	fertile	
$\Sigma(cm^{-1})$	1.07708	.67799	.48160	.68288
$\Sigma_s(cm^{-1})$	1.07670	.44228	.42592	.67187

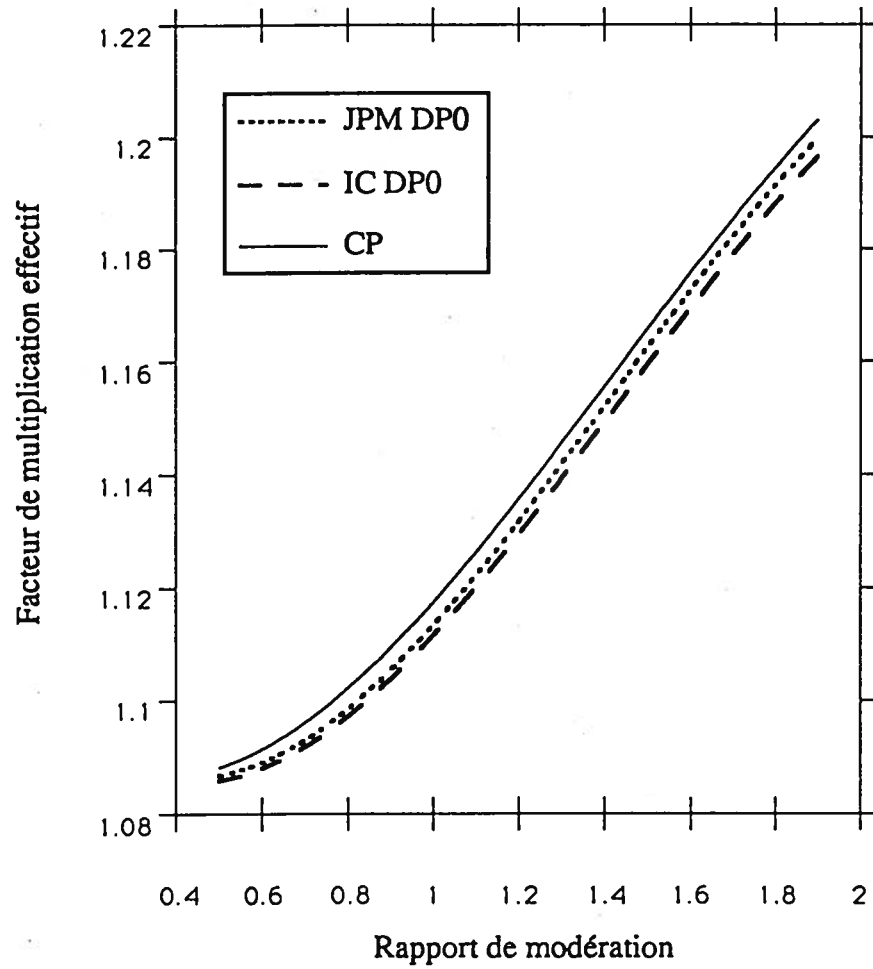


Figure 5.3: Variation de K_{eff} en fonction de V_m/V_f - approximation DP_0 .

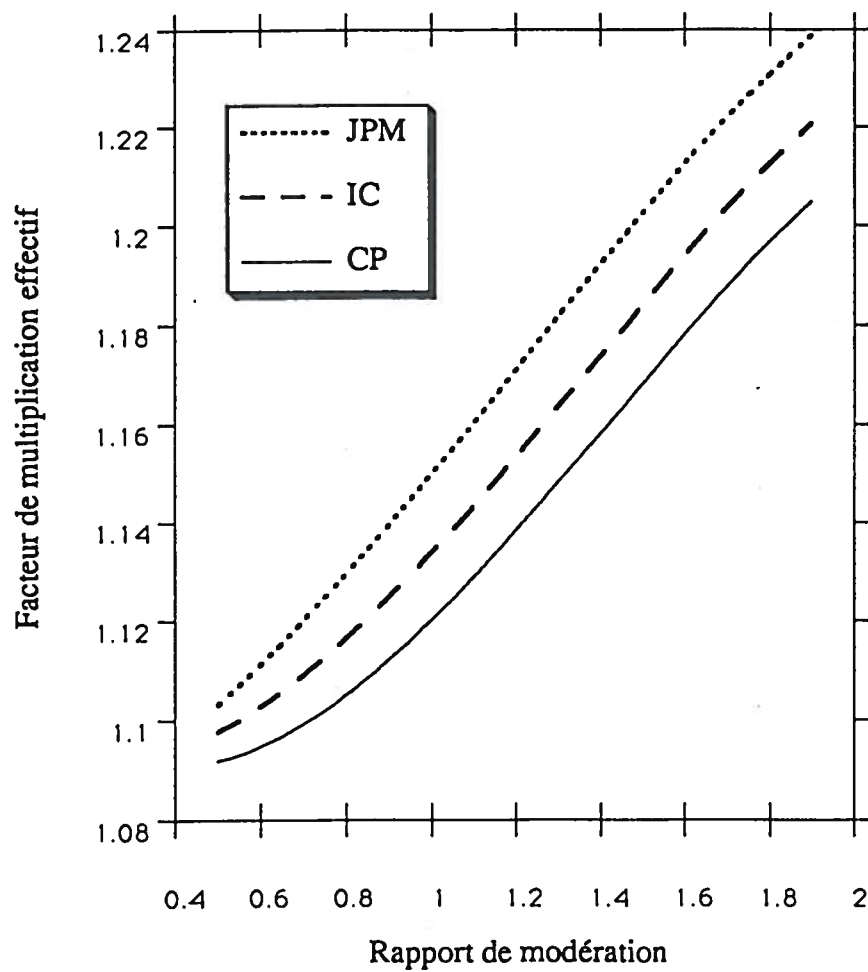


Figure 5.4: Variation de K_{eff} en fonction de V_m/V_f - approximation DP_1 .

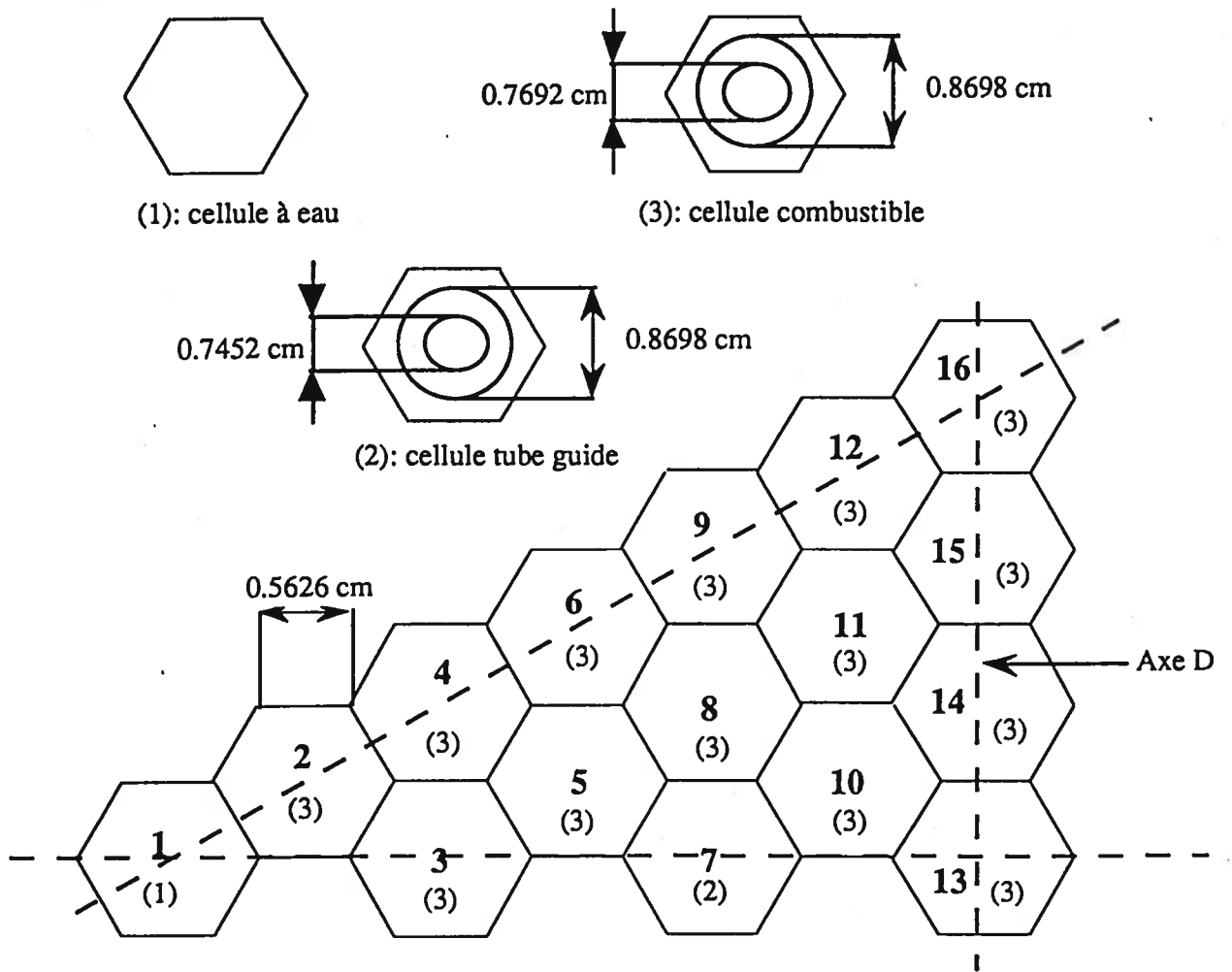


Figure 5.5: Assemblage de cellules pour le problème à source fixe. L'axe D n'existe pas dans le cas de la méthode CP

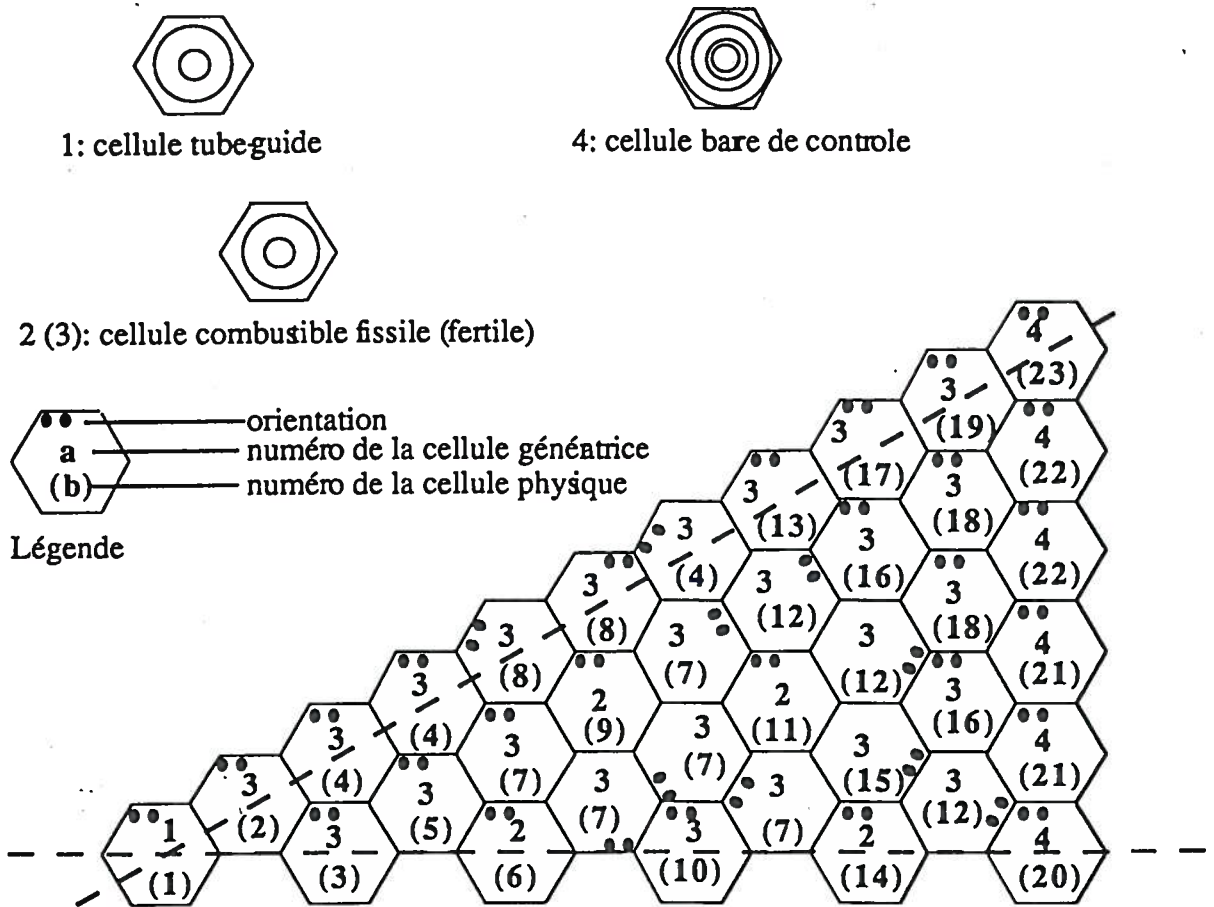


Figure 5.6: Assemblage de contrôle RSMVS: problème à source de fission.

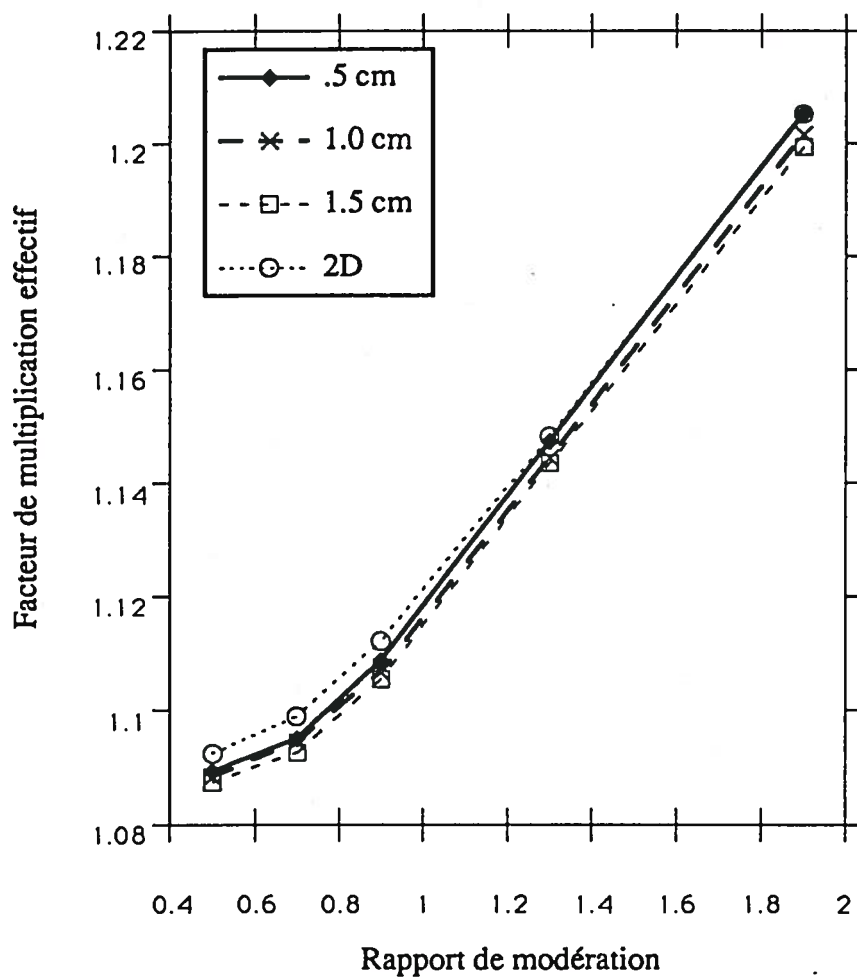


Figure 5.7: Variation de K_{eff} en fonction de V_m/V_f pour une cellule 3D.

Tableau 5.5: Résultats du problème à source fixe comparé à Monte Carlo.

		Méthodes et approximations (les écarts sont en %)				
		Monte carlo (MC)	DP_1		DP_0	
Cellule	Flux moyen	$\frac{MC-J_{\pm}}{MC}$	$\frac{MC-IC}{MC}$	$\frac{MC-J_{\pm}}{MC}$	$\frac{MC-IC}{MC}$	$\frac{MC-CP}{MC}$
1	3.2775 (\pm .0100)	-9.40	-4.31	-8.20	-4.55	-3.96
2	2.6147 (\pm .0060)	-3.64	-1.27	-3.91	-2.34	-1.27
	2.7692 (\pm .0064)	-6.37	-2.54	-4.00	-2.15	-1.66
	2.8603 (\pm .0061)	-7.65	-3.44	-3.93	-1.98	-2.39
5	2.5693 (\pm .0038)	-2.75	-1.16	-2.81	-1.79	-1.05
	2.7235 (\pm .0041)	-5.27	-2.30	-2.84	-1.53	-1.23
	2.8267 (\pm .0037)	-5.99	-2.69	-2.31	-0.90	-1.55
7	3.2176 (\pm .0049)	-6.05	-3.30	-6.75	-4.18	-3.46
	3.0887 (\pm .0048)	-6.83	-3.05	-5.07	-2.51	-2.21
	3.0950 (\pm .0043)	-6.55	-2.36	-3.19	-0.60	-1.21
11	2.4877 (\pm .0037)	-2.64	1.10	2.65	1.63	1.84
	2.6314 (\pm .0039)	-0.78	-0.45	2.31	1.59	1.33
	2.7236 (\pm .0035)	-2.20	-1.28	2.45	1.87	0.82
13	2.7313 (\pm .0071)	-1.40	-0.37	-1.68	-0.86	-2.02
	2.8304 (\pm .0072)	-2.88	-0.34	-0.32	0.66	-0.83
	2.8904 (\pm .0063)	-3.94	-0.97	-0.08	1.16	-0.97
16	2.4352 (\pm .0086)	5.37	1.93	5.63	3.48	4.83
	2.5867 (\pm .0089)	2.25	0.77	5.63	3.81	4.87
	2.6844 (\pm .0080)	1.00	0.18	5.95	4.29	4.94

Tableau 5.6: Effet de la condition de réflexion par la méthode IC: assemblage réfléchi (IC_r); assemblage infini (IC_s)

Cellule	Approximations (les écarts sont en %)			
	DP_0		DP_1	
	Flux moyen IC_s	$\frac{IC_s - IC_r}{IC_s}$	Flux moyen IC_s	$\frac{IC_s - IC_r}{IC_s}$
1	3.4266	.08	3.4189	.20
2	2.6759	.10	2.6479	.24
	2.8287	.10	2.8393	.23
	2.9169	.10	2.9588	.23
5	2.6153	.17	2.5990	.32
	2.7653	.17	2.7861	.31
	2.8521	.17	2.9028	.30
7	3.5321	.14	3.3240	.28
	3.1663	.15	3.1829	.29
	3.1136	.15	3.1682	.29
11	2.4472	.70	2.4605	.91
	2.5895	.69	2.6433	.86
	2.6726	.68	2.7586	.82
13	2.7547	-1.32	2.7413	-1.66
	2.8118	-1.31	2.8817	-1.47
	2.8568	-1.30	2.9184	-1.33
16	2.3504	2.32	2.3882	2.32
	2.4882	2.29	2.5667	2.23
	2.5693	2.26	2.6797	2.17

Tableau 5.7: Calculs de l'assemblage de contrôle du réacteur RSMVS avec le regroupement des cellules.

Méthode d'autoprotection	$J_{\pm} - DP_0$	IC - DP_0	$J_{\pm} - DP_0$	$J_{\pm} - DP_0$
Méthode de résolution	IC - DP_0	IC - DP_0	CP - DP_0	$J_{\pm} - DP_0$
K_{∞}	.72331	.72334	.71901	.74176
$B^2(10^{-3}cm^{-2})$	-5.016	-5.015	-5.100	-4.659
Temps CPU (s) IBM ES9000	185.80	842.20	12853.99	158.91

Tableau 5.8: Comparaison des méthodes IC, CP et Roth×6

	IC - DP_1	CP - DP_0 avec secteurs	Roth×6	IC - DP_0	CP- DP_0 sans secteurs
K_{∞}	.716592	.720912	.733503	.727973	.714886
$B^2(10^{-3}cm^{-2})$	-5.143	-5.066	-4.819	-4.925	-5.177
Temps CPU (s) IBM ES9000	2397.43	16304.54	325.68	354.69	2294.62

Tableau 5.9: Effet de la troisième dimension sur les probabilités de collision.

P_{ij}	Hauteur de la cellule en <i>cm</i>			
$P_{i \rightarrow j}$	0.2	0.5	2.	∞ (2D)
$P_{1 \rightarrow 1}$.11248	.16491	.22559	.25506
$P_{1 \rightarrow 2}$.04916	.08024	.12488	.14753
$P_{1 \rightarrow 3}$.02721	.04931	.08463	.10414
$P_{2 \rightarrow 2}$.04280	.05476	.06832	.07450
$P_{2 \rightarrow 3}$.01719	.02577	.03699	.04166
$P_{3 \rightarrow 3}$.08408	.10907	.13711	.15208

Tableau 5.10: Comparaison DRAGON et Monte Carlo dans le cas 3D.

Cellule	Flux moyens		erreur relative (%)
	CP	MC	$\frac{MC-CP}{MC}$
1	3.0044	2.9987 ($\pm .0057$)	-0.19
5	2.5103	2.5359 ($\pm .0023$)	1.01
	2.6288	2.6670 ($\pm .0025$)	1.43
	2.7226	2.7547 ($\pm .0023$)	1.17
7	2.9690	2.9486 ($\pm .0029$)	-0.69
	2.8446	2.8466 ($\pm .0030$)	0.07
	2.8464	2.8614 ($\pm .0027$)	0.52
13	2.6244	2.6341 ($\pm .0041$)	0.36
	2.6822	2.6912 ($\pm .0043$)	0.33
	2.7448	2.7761 ($\pm .0038$)	1.13
16	2.4012	2.4754 ($\pm .0050$)	3.00
	2.5186	2.6105 ($\pm .0053$)	3.52
	2.6003	2.6775 ($\pm .0047$)	2.88
17	2.6898	2.7566 ($\pm .0025$)	2.42
21	2.5971	2.6329 ($\pm .0010$)	1.36
23	2.6491	2.7138 ($\pm .0012$)	2.38
29	2.5942	2.6380 ($\pm .0016$)	1.66
32	2.4966	2.5590 ($\pm .0019$)	2.44

CHAPITRE 6

Conclusion

Nous avons incorporé dans DRAGON un ensemble de modules permettant de traiter la géométrie hexagonale en théorie intégrale de transport. On peut maintenant résoudre l'équation intégrale de transport soit dans une connexion de zones homogènes par la méthode J_{\pm} , soit dans un ensemble de cellules spatialement hétérogènes par la méthode multicellule avec le formalisme des courants d'interfaces, ou encore directement dans un assemblage multicellulaire en deux et trois dimensions, par la méthode directe des probabilités de collisions.

L'ensemble des tests numériques de qualification de ces modules, nous ont montré que les méthodes classiques comme ROTH et J_{\pm} sont peu précises pour un traitement correct des réacteurs sous-modérés. La méthode J_{\pm} est cependant bien appropriée au calcul d'autoprotection. La combinaison d'un côté de la méthode J_{\pm} pour autoprotéger les sections efficaces et de l'autre côté de méthodes plus précises comme courants d'interfaces et probabilités de collision pour résoudre le système matriciel peut engendrer un gain non négligeable en temps de calcul.

La comparaison des résultats numériques de la méthode des probabilités de collision au calcul Monte Carlo montre la haute précision de ce formalisme mais à un

prix non compétitif aux méthodes traditionnelles. Avec l'avènement d'ordinateurs de plus en plus rapides, et de réacteurs à géométrie très complexe où les méthodes conventionnelles sont mises à échec, la méthode des probabilités de collision est appelée à jouer un grand rôle dans le développement futur des logiciels de calcul des réacteurs. La méthode des probabilités de collision employée ici constitue un autre pas dans ce domaine, surtout pour le cas 3D. Le coût élevé qu'engendre cette méthode, nous laisse penser qu'il faut chercher d'autres moyens pour contourner cet handicap. On peut à cet effet tenir compte davantage de la symétrie que présente les assemblages hexagonaux lors de la production des lignes d'intégration. Il semblerait cependant que cette méthode est beaucoup plus intéressante d'un point de vue coût de calcul si elle est associée aux ordinateurs à architecture parallèle ou vectorielle.

ANNEXE A

Probabilités de collision pour une cellule

Nous allons examiner dans cet annexe les formulations explicites des probabilités de transmission et de surfaces-volumes pour une cellule hexagonale. Celles-ci sont évaluées dans tout calcul multicellules. On distinguera une cellule hétérogène d'une cellule homogène.

A.1 Cellule hétérogène

Considérons la cellule de la figure A.1 qui, pour simplifier ne contient qu'un cylindre de rayon R .

Les probabilités de transmissions (2.46) et de fuites (2.44), dépendent des parcours optiques dans différentes zones de la cellule. On supposera, pour chaque zone i , la section efficace Σ_i constante et donnée par (2.22). Désignons par $t_\alpha^\beta(x, \varphi)$ le parcours d'un neutron entrant par la surface α à la position x et dans la direction repérée par φ et atteignant la face β . Rappelons que $t_\alpha^\beta(x, \varphi)$ est la projection du parcours $u(\vec{r}, \vec{r}')$ sur le plan de la cellule. Comme notre cellule peut contenir plusieurs zones homogènes, $t_\alpha^\beta(x, \varphi)$ sera donc fractionné en un ensemble de parcours dans ces différentes zones (voir annexe C). En plus, nous avons affaire à des cylindres concentriques formant des couronnes, le parcours du neutron peut donc

croiser une zone plus d'une fois. On peut alors écrire le parcours optique sous la forme:

$$\tau(t_{\alpha}^{\beta}(x, \varphi)) = \sum_i \sum_k T_{\alpha,i}^{\beta,k}(x, \varphi), \quad (\text{A.1})$$

où $T_{\alpha,i}^{\beta,k}(x, \varphi)$ est le k^{iem} parcours dans la zone i d'un neutron allons de surface α à la surface β . La sommation sur k porte sur l'ensemble des interactions avec la zone i , au maximum deux dans notre cas (voir annexe C). Le parcours total dans la zone i sera désigné par:

$$t_{\alpha,i}^{\beta}(x, \varphi) = \sum_k T_{\alpha,i}^{\beta,k}(x, \varphi), \quad (\text{A.2})$$

Les parcours $T_{\alpha,i}^{\beta,k}(x, \varphi)$ seront appelés dans tout ce manuscrit les *lignes d'intégrations*. On peut tout de suite remarquer sur la figure A.1 qu'ils dépendent de la position x où le neutron pénètre à la cellule et de l'angle φ que fait la direction du neutron avec la normale (entrante) du côté 1.

Pour l'exemple de la figure A.1, les différents parcours sont donnés par:

$$t_{1,1}^{\beta}(x, \varphi) = T_{1,1}^{\beta,1}(x, \varphi) = 2\sqrt{R^2 - (D_{\beta}(x, \varphi))^2}, \quad (\text{A.3})$$

$$T_{1,2}^{\beta,1}(x, \varphi) = a \cos \frac{\pi}{6} \cos \varphi + (x - \frac{a}{2}) \sin \varphi - \frac{t_{1,1}^{\beta}(x, \varphi)}{2}. \quad (\text{A.4})$$

Avec $D_{\beta}(x, \varphi) = a \cos \frac{\pi}{6} \sin \varphi - (x - \frac{a}{2}) \cos \varphi$, où a est le côté de l'hexagone. Ces expressions sont valides quelque soit la face de sortie β . Quant au parcours $T_{1,2}^{\beta,2}(x, \varphi)$, il dépend de la face de sortie (voir figure A.1):

- Pour la face 6 on a:

$$T_{1,2}^{6,2}(x, \varphi) = \frac{x \cos \frac{\pi}{6}}{\sin(\varphi - \frac{\pi}{6})} \quad (\text{A.5})$$

- Pour la face 5 c'est:

$$T_{1,2}^{5,2}(x, \varphi) = \frac{(a+x) \sin \frac{\pi}{3}}{\sin(\varphi + \frac{\pi}{6})} \quad (\text{A.6})$$

- Pour la face 4:

$$T_{1,2}^{4,2}(x, \varphi) = \frac{2a \cos \frac{\pi}{6}}{\cos \varphi} \quad (\text{A.7})$$

A.1.1 Probabilités de transmission

Réécrivons les éléments de la matrice de transmission (2.46) sous la forme:

$$P_{s_\beta s_\alpha}^{\nu\rho} = \frac{1}{\pi s_\alpha} \int_{s_\alpha} d^2 r \int_0^\pi d\varphi F_{\alpha,\beta}^{\rho\nu}(x, \varphi), \quad (\text{A.8})$$

où on a posé:

$$F_{\alpha,\beta}^{\rho\nu}(x, \varphi) = \cos \varphi \int_0^\pi \sin^2 \theta \psi_{-, \alpha}^\rho(\vec{\Omega}) \psi_{+, \beta}^\nu(\vec{\Omega}) e^{-(\tau(t_a^2(x, \varphi))/\sin \theta)} d\theta. \quad (\text{A.9})$$

Nous allons montrer que toutes les probabilités de transmissions peuvent s'écrire sous la forme:

$$P_{s_\beta s_\alpha}^{\nu\rho} = \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \int_0^a dx f(x, \varphi). \quad (\text{A.10})$$

Ceci présente l'avantage numérique de calculer toutes ces probabilités en même temps. Examinons donc séparément les transmissions de la face 1 vers les côtés 6, 5 et 4.

A.1.1.1 Transmission 1 \rightarrow 6

Le domaine d'intégration sur φ dans ce cas se décompose en deux parties: $[\varphi(x), \frac{\pi}{3}]$ et $[\frac{\pi}{3}, \frac{\pi}{2}]$, avec $\varphi(x) = \tan^{-1}(\frac{x+a \sin \frac{\pi}{6}}{a \cos \frac{\pi}{6}})$. La probabilité (A.8) s'écrit:

$$P_{s_6 s_1}^{\nu\rho} = \frac{1}{\pi a} \int_0^a dx \left\{ \int_{\varphi(x)}^{\frac{\pi}{3}} d\varphi F_{1,6}^{\rho\nu}(x, \varphi) + \int_{\frac{\pi}{3}}^{\frac{\pi}{2}} d\varphi F_{1,6}^{\rho\nu}(x, \varphi) \right\}. \quad (\text{A.11})$$

Après un changement d'ordre d'intégration dans cette expression, puis un changement de variable $\varphi \rightarrow \frac{2\pi}{3} - \varphi$ dans le premier terme suivi d'un autre changement de variable $\varphi \rightarrow \frac{\pi}{2} - \varphi$, on peut finalement écrire:

$$P_{s_6 s_1}^{\nu\rho} = \frac{1}{\pi a} \int_0^a dx \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \left\{ \frac{\sin \varphi}{\cos(\varphi + \pi/6)} F_{1,6}^{\rho\nu}(x \frac{\sin \varphi}{\cos(\varphi + \pi/6)}, \varphi + \frac{\pi}{6}) + F_{1,6}^{\rho\nu}(x, \frac{\pi}{2} - \varphi) \right\}. \quad (\text{A.12})$$

Pour calculer les fonctions $F_{1,6}^{\rho\nu}(x, \varphi)$, nous aurons besoins des composantes:

$$\begin{aligned} \psi_{+,6}^1(\vec{\Omega}) &= 2 \sin \theta \cos(\varphi - \pi/6), \\ \psi_{+,6}^2(\vec{\Omega}) &= 3\sqrt{2}[\sin \theta \sin(\varphi - \pi/6) - \frac{2}{3}], \\ \psi_{-,1}^1(\vec{\Omega}) &= -2 \sin \theta \sin \varphi, \\ \psi_{\pm,\alpha}^0(\vec{\Omega}) &= 1, \forall \alpha = 1, 4, 5, 6 \end{aligned}$$

Nous obtenons alors pour les quatres probabilités qu'on doit évaluer:

$$P_{s_6 s_1}^{00} = \frac{4}{\pi a} \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \sin \varphi \int_0^a dx K i_3(\tau(t_1^6(x, \varphi))), \quad (\text{A.13})$$

$$P_{s_6 s_1}^{10} = \frac{4\sqrt{3}}{\pi a} \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \sin \varphi \cos(\varphi - \frac{\pi}{6}) \int_0^a dx K i_4(\tau(t_1^6(x, \varphi))), \quad (\text{A.14})$$

$$P_{s_6 s_1}^{11} = -\frac{16}{\pi a} \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \cos \varphi \sin \varphi \sin(\varphi + \frac{\pi}{6}) \int_0^a dx K i_5(\tau(t_1^6(x, \varphi))), \quad (\text{A.15})$$

$$P_{s_6 s_1}^{21} = -\frac{6\sqrt{6}}{\pi a} \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \sin \varphi \int_0^a dx K i_5(\tau(t_1^6(x, \varphi))) + 2\sqrt{2} P_{s_6 s_1}^{10}. \quad (\text{A.16})$$

A.1.1.2 Transmission 1 \rightarrow 5

La même technique a été appliquée pour cette face, avec un domaine d'intégration sur φ de: $[\varphi_1(x), \frac{\pi}{6}] \times [\frac{\pi}{6}, \varphi(x)]$; où $\varphi_1(x) = \tan^{-1}(\frac{x}{2a \cos \frac{\pi}{6}})$. On obtient:

$$P_{s_5 s_1}^{\nu\rho} = \frac{1}{\pi a} \int_0^a dx \left\{ \int_{\varphi_1(x)}^{\frac{\pi}{6}} d\varphi F_{1,5}^{\rho\nu}(x, \varphi) + \int_{\frac{\pi}{6}}^{\varphi(x)} d\varphi F_{1,5}^{\rho\nu}(x, \varphi) \right\}. \quad (\text{A.17})$$

qui, après quelque manipulations algébriques similaires aux précédentes, se réduit

à:

$$P_{s_5 s_1}^{\nu\rho} = \frac{1}{\pi a} \int_0^a dx \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \left\{ \frac{2 \sin \varphi \cos \frac{\pi}{6}}{\sin(\varphi + \pi/6)} F_{1,5}^{\rho\nu} \left(\frac{2x \cos \frac{\pi}{6} \sin \varphi + a \sin(\frac{\pi}{6} - \varphi)}{\sin(\varphi + \pi/6)}, \frac{\pi}{3} - \varphi \right) + \sqrt{3} \tan \varphi F_{1,5}^{\rho\nu}(x\sqrt{3} \tan \varphi, \varphi) \right\}. \quad (\text{A.18})$$

Avec les composantes du flux angulaires:

$$\begin{aligned} \psi_{+,5}^1(\vec{\Omega}) &= 2 \sin \theta \cos(\varphi + \pi/6), \\ \psi_{+,5}^2(\vec{\Omega}) &= 3\sqrt{2} [\sin \theta \sin(\varphi + \pi/6) - \frac{2}{3}], \\ \psi_{-,1}^1(\vec{\Omega}) &= -2 \sin \theta \sin \varphi, \\ \psi_{-,1}^2(\vec{\Omega}) &= 3\sqrt{2} [\sin \theta \cos \varphi - \frac{2}{3}]. \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

On obtient finalement:

$$\begin{aligned} P_{s_5 s_1}^{00} &= \frac{4\sqrt{3}}{\pi a} \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \sin \varphi \int_0^a dx K i_3(\tau(t_1^5(x, \varphi))), \\ P_{s_5 s_1}^{10} &= \frac{4\sqrt{3}}{\pi a} \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \sin \varphi \cos(\varphi - \frac{\pi}{6}) \int_0^a dx K i_4(\tau(t_1^5(x, \varphi))), \\ P_{s_5 s_1}^{11} &= -\frac{16\sqrt{3}}{\pi a} \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \sin^2 \varphi \cos(\varphi + \frac{\pi}{6}) \int_0^a dx K i_5(\tau(t_1^5(x, \varphi))), \\ P_{s_5 s_1}^{21} &= -\frac{18\sqrt{2}}{\pi a} \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \sin \varphi \int_0^a dx K i_5(\tau(t_1^5(x, \varphi))) + 2\sqrt{2} P_{s_5 s_1}^{10}. \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

A.1.1.3 Transmission 1 → 4

Dans le cas de la face 4, les domaines d'intégrations sont: $[0, \frac{\pi}{6}] \times [a\sqrt{3} \tan \varphi, a]$ et $[-\frac{\pi}{6}, 0] \times [0, a - a\sqrt{3} \tan \varphi]$. Les probabilités de transmission s'écrivent:

$$P_{s_4 s_1}^{\nu\rho} = \frac{1}{\pi a} \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \left\{ \int_{a\sqrt{3} \tan \varphi}^a dx F_{1,4}^{\rho\nu}(x, \varphi) + \int_0^{a - a\sqrt{3} \tan \varphi} dx F_{1,4}^{\rho\nu}(x, -\varphi) \right\}. \quad (\text{A.21})$$

qui, après quelques changements de variables, peut se mettre sous la forme:

$$P_{s_4 s_1}^{\nu\rho} = \frac{2}{\pi a} \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \left\{ \int_0^a dx (1 - \sqrt{3} \tan \varphi) F_{1,4}^{\rho\nu}(a\sqrt{3} \tan \varphi + x(1 - \sqrt{3} \tan \varphi), \varphi) \right\} \quad (\text{A.22})$$

Nous obtenons alors pour les probabilités recherchées:

$$P_{s_4 s_1}^{00} = \frac{8}{\pi a} \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \sin\left(\frac{\pi}{6} - \varphi\right) \int_0^a dx K i_3(\tau(t_1^4(x, \varphi))) \quad (\text{A.23})$$

$$P_{s_4 s_1}^{20} = \frac{24\sqrt{2}}{\pi a} \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \cos \varphi \sin\left(\frac{\pi}{6} - \varphi\right) \int_0^a dx K i_4(\tau(t_1^4(x, \varphi))) - 2\sqrt{2} P_{s_4 s_1}^{00},$$

$$P_{s_4 s_1}^{11} = -\frac{32}{\pi a} \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \sin^2 \varphi \sin\left(\frac{\pi}{6} - \varphi\right) \int_0^a dx K i_5(\tau(t_1^4(x, \varphi))),$$

$$P_{s_4 s_1}^{22} = -\frac{144}{\pi a} \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \cos^2 \varphi \sin\left(\frac{\pi}{6} - \varphi\right) \int_0^a dx K i_5(\tau(t_1^4(x, \varphi))) \quad (\text{A.24})$$

$$- 4\sqrt{2} P_{s_4 s_1}^{20} - 2P_{s_4 s_1}^{00}.$$

A.1.2 Probabilités surfaces-volumes

Au lieu de la relation (2.44), nous considérerons les probabilités surface-volume. On distinguera deux cas: le cas où le volume i est vide ($\Sigma_i = 0$) et le cas contraire. Nous désignerons par $\tau_{\alpha \rightarrow i}^*(t_\alpha^*(x, \varphi))$, le parcours optique, avant d'atteindre le volume i , d'un neutron entrant par la surface α et sortant par une surface quelconque (d'où le symbole "*"). C'est dans un esprit de généralité que nous ne spécifions pas la face de sortie.):

$$\tau_{\alpha \rightarrow i}^*(t_\alpha^*(x, \varphi)) = \sum_{j=i+1}^N \Sigma_j t_{\alpha, j}^*(x, \varphi) \quad (\text{A.25})$$

où N est le nombre totale de zones dans la cellule. Les probabilités à évaluer $P_{i s_\alpha}^0$ et $P_{i s_\alpha}^2$ s'obtiennent par:

- Si $\Sigma_i \neq 0$

$$\begin{aligned}
 P_{is_\alpha}^0 &= \frac{4}{\pi a \Sigma_i} \int_0^a dx \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\varphi \cos \varphi [Ki_3(\tau_{1 \rightarrow i}^*(t_\alpha^*(x, \varphi)) - Ki_3(\tau_{1 \rightarrow i}^*(t_\alpha^*(x, \varphi)) \\
 &\quad + \Sigma_i t_{\alpha, i}^*(x, \varphi))], \\
 P_{is_\alpha}^2 &= \frac{12\sqrt{2}}{\pi a \Sigma_i} \int_0^a dx \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\varphi \cos^2 \varphi [Ki_4(\tau_{1 \rightarrow i}^*(t_\alpha^*(x, \varphi))) - Ki_4(\tau_{1 \rightarrow i}^*(t_\alpha^*(x, \varphi)) \\
 &\quad + \Sigma_i t_{\alpha, i}^*(x, \varphi))] - 2\sqrt{2}P_{is_\alpha}^0
 \end{aligned} \tag{A.26}$$

- Si $\Sigma_i = 0$

$$P_{is_\alpha}^0 = \frac{4}{\pi a} \int_0^a dx \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\varphi t_{\alpha, i}^*(x, \varphi) \cos \varphi Ki_2(\tau_{1 \rightarrow i}^*(t_\alpha^*(x, \varphi))) \tag{A.27}$$

$$\begin{aligned}
 P_{is_\alpha}^2 &= \frac{12\sqrt{2}}{\pi a} \int_0^a dx \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\varphi t_{\alpha, i}^*(x, \varphi) \cos^2 \varphi Ki_3(\tau_{1 \rightarrow i}^*(t_\alpha^*(x, \varphi))) \\
 &\quad - 2\sqrt{2}P_{is_\alpha}^0
 \end{aligned} \tag{A.28}$$

A noter qu'on a supposé que les volumes i sont à symétrie de révolution. D'un point de vue numérique, il est plus avantageux d'évaluer les probabilités surfaces-volumes et de transmission en même temps. En conséquence, on doit mettre les relations ci-dessus sous une forme similaire à l'expression (A.10). Pour cela, remarquons tout d'abord que l'intégration sur φ couvre de 0 à $\frac{\pi}{2}$. Un neutron entrant en un point x de la surface 1 par exemple a donc des chances d'aller dans des directions des surfaces 4, 5 et 6.

Notons par $\tau_{1 \rightarrow i}^*(t_\alpha^\beta(x, \varphi))$ le parcours du neutron avant d'atteindre le volume i dans la direction de la surface β et posons:

$$\tau_{1 \rightarrow i+}^\beta(t_{\alpha,i}^\beta(x, \varphi)) = \tau(t_{\alpha,i}^\beta(x, \varphi)) - \tau_{1 \rightarrow i}^\beta(t_{\alpha,i}^\beta(x, \varphi)) - \sum_{j=1}^i \Sigma_j t_{\alpha,j}^\beta(x, \varphi).$$

Il est alors facile de montrer que:

- Pour $\Sigma_i = 0$

$$\begin{aligned} P_{is_1}^0 &= \frac{4}{\pi a} \int_0^a dx \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \{ \sin \varphi [T_{1,i}^{6,1}(x, \varphi) Ki_2(\tau_{1 \rightarrow i}^6(t_{1,i}^6)) \\ &\quad + T_{1,i}^{6,2}(x, \varphi) Ki_2(\tau_{1 \rightarrow i+}^6(t_{1,i}^6))] \\ &\quad + \sqrt{3} \sin \varphi [T_{1,i}^{5,1}(x, \varphi) Ki_2(\tau_{1 \rightarrow i}^5(t_{1,i}^5)) + T_{1,i}^{5,2}(x, \varphi) Ki_2(\tau_{1 \rightarrow i+}^5(t_{1,i}^5))] \} \quad (A.29) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &+ \sin\left(\frac{\pi}{6} - \varphi\right) [T_{1,i}^{4,1}(x, \varphi) Ki_2(\tau_{1 \rightarrow i}^4(t_{1,i}^4)) + T_{1,i}^{4,2}(x, \varphi) Ki_2(\tau_{1 \rightarrow i+}^4(t_{1,i}^4))] \} \\ P_{is_1}^2 &= \frac{12\sqrt{2}}{\pi a} \int_0^a dx \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \{ \sin \varphi [T_{1,i}^{6,1}(x, \varphi) \sin \varphi Ki_3(\tau_{1 \rightarrow i}^6(t_{1,i}^6)) + T_{1,i}^{6,2}(x, \varphi) \\ &\quad \times \cos\left(\varphi + \frac{\pi}{6}\right) Ki_3(\tau_{1 \rightarrow i+}^6(t_{1,i}^6))] + \sqrt{3} \sin \varphi [T_{1,i}^{5,1}(x, \varphi) \cos \varphi Ki_3(\tau_{1 \rightarrow i}^5(t_{1,i}^5)) \\ &\quad + T_{1,i}^{5,2}(x, \varphi) \sin\left(\varphi + \frac{\pi}{6}\right) Ki_3(\tau_{1 \rightarrow i+}^5(t_{1,i}^5))] - \sin\left(\varphi - \frac{\pi}{6}\right) \cos \varphi \quad (A.30) \\ &\quad \times [T_{1,i}^{4,2}(x, \varphi) Ki_3(\tau_{1 \rightarrow i+}^4(t_{1,i}^4)) + T_{1,i}^{4,1}(x, \varphi) Ki_3(\tau_{1 \rightarrow i}^4(t_{1,i}^4))] \} - 2\sqrt{2} P_{is_1}^0 \end{aligned}$$

- Pour $\Sigma_i \neq 0$

$$\begin{aligned} P_{is_1}^0 &= \frac{4}{\pi a \Sigma_i} \int_0^a dx \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \{ \sin \varphi [Ki_3(\tau_{1 \rightarrow i}^6(t_{1,i}^6)) - Ki_3(\tau_{1 \rightarrow i}^6(t_{1,i}^6) + \Sigma_i T_{1,i}^{6,1}(x, \varphi)) \\ &\quad + Ki_3(\tau_{1 \rightarrow i+}^6(t_{1,i}^6)) - Ki_3(\tau_{1 \rightarrow i+}^6(t_{1,i}^6) + \Sigma_i T_{1,i}^{6,2}(x, \varphi))] \\ &\quad + \sqrt{3} \sin \varphi [Ki_3(\tau_{1 \rightarrow i}^5(t_{1,i}^5)) - Ki_3(\tau_{1 \rightarrow i}^5(t_{1,i}^5) + \Sigma_i T_{1,i}^{5,1}(x, \varphi)) \\ &\quad + Ki_3(\tau_{1 \rightarrow i+}^5(t_{1,i}^5)) - Ki_3(\tau_{1 \rightarrow i+}^5(t_{1,i}^5) + \Sigma_i T_{1,i}^{5,2}(x, \varphi))] \\ &\quad + \sin\left(\frac{\pi}{6} - \varphi\right) [Ki_3(\tau_{1 \rightarrow i}^4(t_{1,i}^4)) - Ki_3(\tau_{1 \rightarrow i}^4(t_{1,i}^4) + \Sigma_i T_{1,i}^{4,1}(x, \varphi)) \\ &\quad + Ki_3(\tau_{1 \rightarrow i+}^4(t_{1,i}^4)) - Ki_3(\tau_{1 \rightarrow i+}^4(t_{1,i}^4) + \Sigma_i T_{1,i}^{4,2}(x, \varphi))] \} \quad (A.31) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
P_{is_1}^2 = & \frac{12\sqrt{2}}{\pi a \Sigma_i} \int_0^a dx \int_0^{\frac{\pi}{8}} d\varphi \{ \sin \varphi [\sin \varphi [Ki_4(\tau_{1 \rightarrow i}^6(t_{1,i}^6)) \\
& - Ki_4(\tau_{1 \rightarrow i}^6(t_{1,i}^6) + \Sigma_i T_{1,i}^{6,1}(x, \varphi))] \\
& + \cos(\frac{\pi}{6} + \varphi) [Ki_4(\tau_{1 \rightarrow i+}^6(t_{1,i}^6)) - Ki_4(\tau_{1 \rightarrow i+}^6(t_{1,i}^6) + \Sigma_i T_{1,i}^{6,2}(x, \varphi))]] \\
& + \sqrt{3} \sin \varphi [\cos \varphi [Ki_4(\tau_{1 \rightarrow i}^5(t_{1,i}^5)) - Ki_4(\tau_{1 \rightarrow i}^5(t_{1,i}^5) + \Sigma_i T_{1,i}^{5,1}(x, \varphi))] \\
& + \sin(\frac{\pi}{6} + \varphi) [Ki_4(\tau_{1 \rightarrow i+}^5(t_{1,i}^5)) - Ki_4(\tau_{1 \rightarrow i+}^5(t_{1,i}^5) + \Sigma_i T_{1,i}^{5,2}(x, \varphi))]] \\
& + \sin(\frac{\pi}{6} - \varphi) [Ki_4(\tau_{1 \rightarrow i}^4(t_{1,i}^4)) - Ki_4(\tau_{1 \rightarrow i}^4(t_{1,i}^4) + \Sigma_i T_{1,i}^{4,1}(x, \varphi)) \\
& + Ki_4(\tau_{1 \rightarrow i+}^4(t_{1,i}^4)) - Ki_4(\tau_{1 \rightarrow i+}^4(t_{1,i}^4) + \Sigma_i T_{1,i}^{4,2}(x, \varphi))]] \} - 2\sqrt{2} P_{is_1}^0 \quad (A.32)
\end{aligned}$$

La manière pratique de calculer les lignes d'intégrations et les probabilités de collisions ci-dessus est décrite à la l'annexe C

A.2 Cellule homogène

Une cellule homogène est une cellule du style de la figure A.1, mais privée des anneaux cylindriques. C'est donc une sorte de "pâte" homogène. Dans ce cas de figure, on ne calculera que les probabilités de transmissions. Les autres probabilités sont obtenues grâce aux relations de réciprocités et de conservation. Du fait de la linéarité du parcours $t_a^\beta(x, \varphi)$ en fonction de x , on peut éliminer l'intégration sur l'espace et on n'évaluera numériquement qu'une seule intégrale. Toutes les propriétés démontrées pour le cas de cellule hétérogène restent valident dans le cas homogène.

A.2.1 Transmission 1 → 6

$$\begin{aligned}
P_{s_6 s_1}^{00} &= \frac{8}{\pi a \Sigma \sqrt{3}} \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \sin \varphi \cos(\varphi + \frac{\pi}{6}) \left[\frac{2}{3} - K i_4\left(\frac{\Sigma a \sqrt{3}}{2 \cos(\varphi + \frac{\pi}{6})}\right) \right], & (A.33) \\
P_{s_6 s_1}^{10} &= \frac{8}{\pi a \Sigma} \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \sin \varphi \cos(\varphi - \frac{\pi}{6}) \cos(\varphi + \frac{\pi}{6}) \left[K i_5(0) - K i_5\left(\frac{\Sigma a \sqrt{3}}{2 \cos(\varphi + \frac{\pi}{6})}\right) \right], \\
P_{s_6 s_1}^{11} &= -\frac{32}{\pi a \Sigma \sqrt{3}} \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \cos \varphi \sin \varphi \cos(\varphi + \frac{\pi}{6}) \sin(\varphi + \frac{\pi}{6}) \left[K i_6(0) \right. \\
&\quad \left. - K i_6\left(\frac{\Sigma a \sqrt{3}}{2 \cos(\varphi + \frac{\pi}{6})}\right) \right], \\
P_{s_6 s_1}^{21} &= -\frac{12\sqrt{2}}{\pi a \Sigma} \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \sin \varphi \cos(\varphi + \frac{\pi}{6}) \left[K i_6(0) - K i_6\left(\frac{\Sigma a \sqrt{3}}{2 \cos(\varphi + \frac{\pi}{6})}\right) \right] \\
&\quad + 2\sqrt{2} P_{s_6 s_1}^{10}
\end{aligned}$$

A.2.2 Transmission 1 → 5

$$\begin{aligned}
P_{s_5 s_1}^{00} &= \frac{8}{\pi a \Sigma \sqrt{3}} \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \cos \varphi \sin(\varphi + \frac{\pi}{6}) \left[K i_4(\bar{\tau}_1) - K i_4(\bar{\tau}_0) \right], & (A.34) \\
P_{s_5 s_1}^{10} &= \frac{8}{\pi a \Sigma \sqrt{3}} \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \cos \varphi \cos(\varphi - \frac{\pi}{6}) \sin(\varphi + \frac{\pi}{6}) \left[K i_5(\bar{\tau}_1) - K i_5(\bar{\tau}_0) \right], \\
P_{s_5 s_1}^{11} &= -\frac{32}{\pi a \Sigma \sqrt{3}} \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \cos \varphi \sin \varphi \cos(\varphi + \frac{\pi}{6}) \sin(\varphi + \frac{\pi}{6}) \left[K i_6(\bar{\tau}_1) - K i_6(\bar{\tau}_0) \right], \\
P_{s_5 s_1}^{21} &= -\frac{12\sqrt{2}}{\pi a \Sigma} \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \cos \varphi \sin(\varphi + \frac{\pi}{6}) \left[K i_6(\bar{\tau}_1) - K i_6(\bar{\tau}_0) \right] - 2\sqrt{2} P_{s_6 s_1}^{01}
\end{aligned}$$

$$\text{Où } \bar{\tau}_1 = \frac{\Sigma a \sqrt{3}}{2 \sin(\varphi + \frac{\pi}{6})} \text{ et } \bar{\tau}_0 = \frac{\Sigma a \sqrt{3}}{\cos \varphi}.$$

A.2.3 Transmission 1 → 4

$$P_{s_4 s_1}^{00} = \frac{8}{\pi} \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \sin\left(\frac{\pi}{6} - \varphi\right) K i_4(\bar{\tau}_0), \quad (A.35)$$

$$\begin{aligned}
P_{s_4 s_1}^{20} &= \frac{24\sqrt{2}}{\pi} \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \cos \varphi \sin\left(\frac{\pi}{6} - \varphi\right) K i_4(\bar{\tau}_0) - 2\sqrt{2} P_{s_4 s_1}^{00}, \\
P_{s_4 s_1}^{11} &= -\frac{32}{\pi} \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \sin^2 \varphi \sin\left(\varphi - \frac{\pi}{6}\right) K i_5(\bar{\tau}_0), \\
P_{s_4 s_1}^{22} &= \frac{144}{\pi} \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \cos^2 \varphi \sin\left(\frac{\pi}{6} - \varphi\right) K i_5(\bar{\tau}_0) - 4\sqrt{2} P_{s_4 s_1}^{20} - 8P_{s_4 s_1}^{00}
\end{aligned}$$

Lorsque les parcours optiques sont faibles, pratiquement si $\Sigma a \leq 10^{-2}$ (des tests ont été fait pour qualifier cette coupure). Ils ne figurent cependant pas dans ce manuscrit. Le même procédé est utilisé dans le cas de la géométrie cartésienne voir ref [4]), on peut faire un développement asymptotique des fonctions de Bickley-Naylor, ce qui nous permet une intégration analytique sur φ . Ces fonctions au voisinage de zéro s'écrivent:

$$\begin{aligned}
K i_4(x) &= \frac{2}{3} - \frac{\pi}{4}x + \frac{1}{2}x^2 - \frac{\pi}{12}x^3 + O(x^4), \\
K i_5(x) &= \frac{3\pi}{16} - \frac{2}{3}x + \frac{\pi}{8}x^2 - \frac{1}{6}x^3 + O(x^4), \\
K i_6(x) &= \frac{8}{15} - \frac{3\pi}{16}x + \frac{1}{3}x^2 - \frac{\pi}{24}x^3 + O(x^4).
\end{aligned}$$

et les probabilités associées s'obtiennent par:

$$\begin{aligned}
P_{s_6 s_1}^{00} &\simeq \frac{1}{2} \left[2 - \sqrt{3} - \left(\frac{\sqrt{3}}{\pi} \ln 3 - \frac{1}{3} \right) (\bar{\tau}_0) + \frac{2}{3} \left(\sqrt{3} - 1 - \frac{1}{2} \ln \left(\frac{\sqrt{3} + 1}{3 - \sqrt{3}} \right) \right) (\bar{\tau}_0)^2 \right], \\
P_{s_6 s_1}^{10} &\simeq \frac{\sqrt{3}}{4\pi} \left[\frac{4\pi}{9} - \pi \left(\frac{3}{2} \ln \left(\frac{2 + \sqrt{3}}{\sqrt{3}} \right) (\bar{\tau}_0) + 1 - \sqrt{3} \right) + \frac{4}{3} \left(\sqrt{3} - \frac{\pi}{3} \right) (\bar{\tau}_0)^2 \right], \\
P_{s_6 s_1}^{22} &\simeq \frac{9}{16} (5\sqrt{3} - 8) - 2(\bar{\tau}_0) \left(1 - \frac{3\sqrt{3}}{2\pi} \right) + \frac{3}{4} (\bar{\tau}_0)^2 \times \left(3 \ln \left(\frac{2 + \sqrt{3}}{\sqrt{3}} \right) - 2 \right) \\
&\quad - 4\sqrt{3} P_{s_6 s_1}^{10} - 2\sqrt{2} P_{s_6 s_1}^{20}, \\
P_{s_6 s_1}^{21} &\simeq -\frac{\sqrt{6}}{4} \left[\frac{9}{4} (2 - \sqrt{3}) - 2(\bar{\tau}_0) \left(\frac{\sqrt{3}}{\pi} \ln 3 - \frac{1}{3} \right) + (\bar{\tau}_0)^2 \times (\sqrt{3} - 1 \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{2} \ln \left(\frac{\sqrt{3} + 1}{3 - \sqrt{3}} \right) \right] - 2\sqrt{2} P_{s_6 s_1}^{01},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
P_{s_5 s_1}^{00} &\simeq \sqrt{3} - \frac{3}{2} + (\tilde{\tau}_0) \times \left(\frac{\sqrt{3}}{\pi} \ln(9 \frac{\sqrt{3}}{16}) - \frac{1}{2} \right) - \frac{1}{3} (\tilde{\tau}_0)^2 \times (5\sqrt{3} - 9 - 2 \ln 3 \\
&\quad + \frac{1}{2} \ln(\frac{\sqrt{3}+1}{3-\sqrt{3}})), \\
P_{s_5 s_1}^{10} &\simeq \frac{\sqrt{3}}{9} + \frac{1}{8} (\tilde{\tau}_0) (10\sqrt{3} - 18 - \sqrt{3} \ln(\frac{27-9\sqrt{3}}{\sqrt{3}+1})) + \frac{2}{3\pi} (\tilde{\tau}_0)^2 \times (-\frac{3}{2} \\
&\quad - 8 \ln 2 + 9 \ln \sqrt{3}), \\
P_{s_5 s_1}^{22} &\simeq 18 [\frac{3}{8} (\frac{\sqrt{3}}{3} - \frac{1}{4}) - \frac{1}{3} (\tilde{\tau}_0) \times (\frac{\sqrt{3}}{2\pi} - 1) - \frac{1}{12} (\tilde{\tau}_0)^2 \times (18 - 9\sqrt{3} \\
&\quad - \frac{3}{2} \ln(\frac{3-\sqrt{3}}{\sqrt{3}} + 1) - 6 \ln 3)] - 4\sqrt{2} P_{s_5 s_1}^{20} - 8 P_{s_5 s_1}^{00}, \\
P_{s_5 s_1}^{21} &\simeq -3\sqrt{6} [\frac{3}{16} (2\sqrt{3} - 3) - \frac{1}{3} (\tilde{\tau}_0) (\frac{\sqrt{3}}{\pi} \ln(\frac{9}{16} \sqrt{3}) - \frac{1}{2}) - \frac{1}{12} (\tilde{\tau}_0)^2 \times (5\sqrt{3} \\
&\quad - 9 - 2 \ln 3 + \frac{1}{2} \ln(\frac{\sqrt{3}+1}{3-\sqrt{3}}))] - 2\sqrt{2} P_{s_5 s_1}^{01}, \\
P_{s_4 s_1}^{00} &\simeq 2 - \sqrt{3} + 8(\tilde{\tau}_0) \times (\frac{\sqrt{3}}{\pi} \ln(\frac{\sqrt{3}}{2}) + \frac{1}{6}) + 2(\tilde{\tau}_0)^2 \times (2\sqrt{3} - 4 + 2 \ln \sqrt{3}), \\
P_{s_4 s_1}^{22} &\simeq 2 [\frac{9}{4} (-\sqrt{3} + \frac{5}{2}) - 4(\tilde{\tau}_0) + 18(\tilde{\tau}_0)^2 \times (2 - \sqrt{3} - 12(\tilde{\tau}_0)^3 (\frac{2}{3} + 4 \frac{\sqrt{3}}{\pi} \ln \frac{\sqrt{3}}{2}))] \\
&\quad - 4\sqrt{2} P_{s_4 s_1}^{20} - 8 P_{s_4 s_1}^{00}, \\
P_{s_4 s_1}^{20} &\simeq \frac{2}{3} \sqrt{3} - 12\sqrt{2} (\tilde{\tau}_0) \times (1 - \frac{\sqrt{3}}{2}) + 24\sqrt{2} (\tilde{\tau}_0)^2 \times (\frac{1}{6} + \frac{\sqrt{3}}{\pi} \ln(\frac{\sqrt{3}}{2})) \\
&\quad - 8\sqrt{2} (\tilde{\tau}_0)^3 (\ln \sqrt{3} + \sqrt{3} - 2) - 2\sqrt{2} P_{s_4 s_1}^{00}, \\
P_{s_4 s_1}^{11} &\simeq \frac{1}{2} (7 - 4\sqrt{3}) - \frac{64}{3} (\tilde{\tau}_0) \times (\frac{1}{12} + \frac{\sqrt{3}}{\pi} \ln(\frac{\sqrt{3}}{2})) + 8(\tilde{\tau}_0)^2 \\
&\quad \times (\ln \sqrt{3} + 2\sqrt{3} - 4) - \frac{64}{3\pi} (\tilde{\tau}_0)^3 (\frac{\sqrt{3}}{6} - \frac{\pi}{6} - \sqrt{3} \ln \frac{\sqrt{3}}{2}).
\end{aligned}$$

où on a encore utilisé $\tilde{\tau}_0 = \frac{\Sigma a \sqrt{3}}{\cos \varphi}$.

La figure A.2 montre un calcul de deux probabilités $P_{s_6 s_1}^{00}$ et $P_{s_1 s_1}^0$, pour une cellule homogène de côté $a = .7072 \text{ cm}$ au voisinage de la coupure asymptotique $\Sigma \simeq 1.41 \times 10^{-2} \text{ cm}^{-1}$. La position de cette coupure est indiquée par la ligne verticale

en pointillés. Cette figure montre le bon raccordement entre le développement en serie et le calcul direct (à partir des tables) des fonctions de Bickley-Naylor.

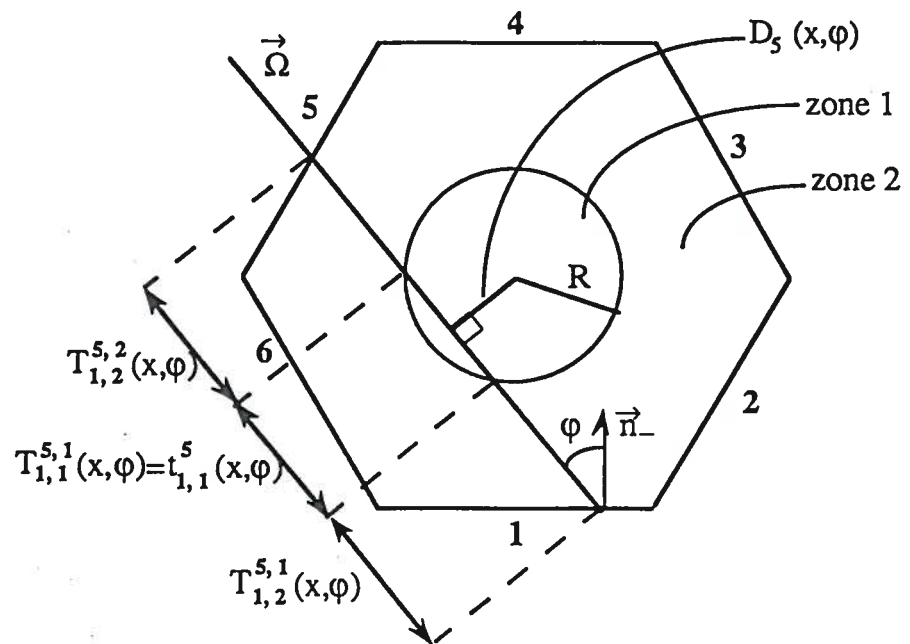


Figure A.1: Lignes d'intégration.

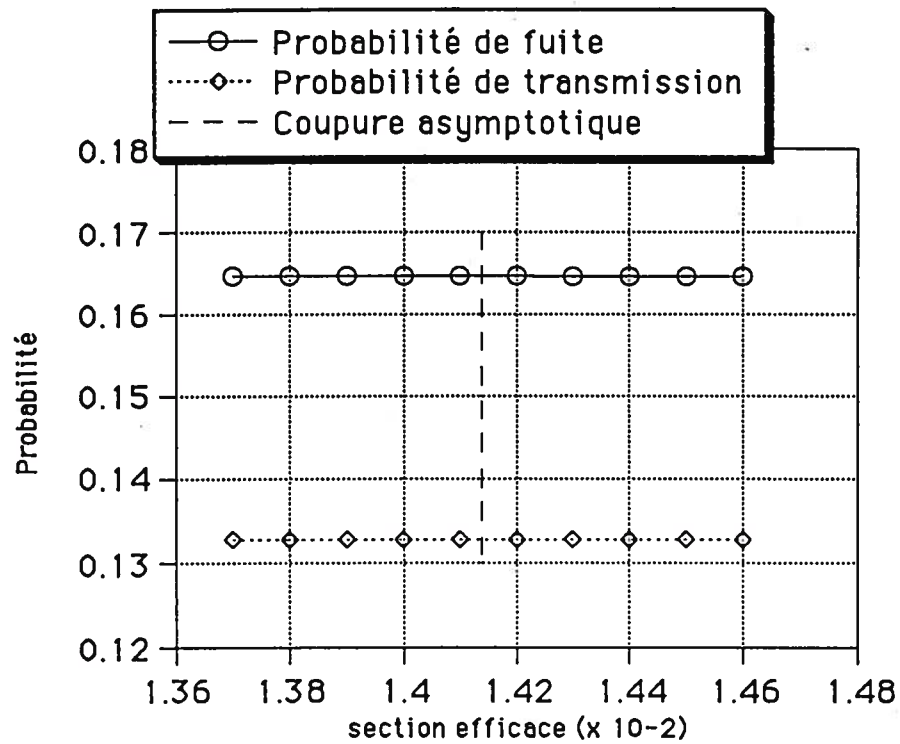


Figure A.2: Effet du développement en serie des fonctions de Bickley-Naylor sur les probabilités de collision $P_{s_0 s_1}^{00}$ et $P_{s_1}^0$. Les sections efficaces sur l'axe des x sont à multiplier par 10^{-2} (d'où $\times 10^{-2}$ sur la figure) pour avoir les valeurs exactes. Elles sont en cm^{-1} . La ligne verticale en pointillés indique la position de la coupure asymptotique sur l'axe des x .

ANNEXE B

Matrice de transmission J_{\pm}

Du fait de l'intercalation de la surface 7 entre le côté 1 et les autres côtés, les bornes d'intégration dans la formule (A.7) devraient être différentes des précédentes. Ces limites d'intégration seront introduites par le biais de la distribution de Heaviside. Nous garderons cependant la même forme des probabilités de transmission, c'est à dire que nous écrirons celles-ci sous la forme:

$$P_{s_{\alpha}s_{\beta}}^{\rho\nu} = \int_0^a dx \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi f^{\rho\nu}(x, \varphi) \quad (\text{B.1})$$

Nous verrons, au moment de l'évaluation de ces probabilités, que cette forme est très avantageuse dans le sens où on utilisera le même procédé du maillage d'intégration pour évaluer les différentes probabilités dans les méthodes J_{\pm} et courants d'interfaces.

B.1 Transmission côté 1 → surfaces planes

Pour les faces 4, 5 et 6 (voir figure B.1), les expressions des probabilités de transmission restent les mêmes avec seulement le changement des bornes des intégrales. Nous avons choisi d'inclure ces changements à l'aide d'une distribution de Heaviside $H(x)$. On peut alors écrire:

$$P_{s_\alpha s_1}^{\nu\rho} = \frac{1}{\pi a} \int_0^a dx \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \bar{F}_{1,\alpha}^{\rho\nu}(x, \varphi) H((D_\alpha(x, \varphi))^2 - R^2), \quad \forall \alpha = 4, 5, 6 \quad (\text{B.2})$$

où R est le rayon du cylindre centrale, les fonctions $D_\alpha(x, \varphi)$ sont données par:

$$D_6(x, \varphi) = a \cos \frac{\pi}{6} \cos \varphi - (x - a) \sin \varphi, \quad (\text{B.3})$$

$$D_5(x, \varphi) = a \sin\left(\frac{\pi}{6} + \varphi\right) - x\sqrt{3} \sin \varphi, \quad (\text{B.4})$$

$$D_4(x, \varphi) = (a - 2x) \sin \varphi, \quad (\text{B.5})$$

et $\bar{F}_{1,\alpha}^{\rho\nu}(x, \varphi)$ s'obtient à partir des relations (A.12), (A.18) et (A.22) par:

$$\begin{aligned} \bar{F}_{1,6}^{\rho\nu}(x, \varphi) &= \frac{\sin \varphi}{\cos(\varphi + \pi/6)} F_{1,6}^{\rho\nu}\left(x \frac{\sin \varphi}{\cos(\varphi + \pi/6)}, \varphi + \frac{\pi}{6}\right) + F_{1,6}^{\rho\nu}\left(x, \frac{\pi}{2} - \varphi\right), \\ \bar{F}_{1,5}^{\rho\nu}(x, \varphi) &= \frac{2 \sin \varphi \cos \frac{\pi}{6}}{\sin(\varphi + \pi/6)} F_{1,5}^{\rho\nu}\left(\frac{2x \cos \frac{\pi}{6} \sin \varphi + a \sin(\frac{\pi}{6} - \varphi)}{\sin(\varphi + \pi/6)}, \frac{\pi}{3} - \varphi\right) + \\ &\quad \sqrt{3} \tan \varphi F_{1,5}^{\rho\nu}(x\sqrt{3} \tan \varphi, \varphi), \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

$$\bar{F}_{1,4}^{\rho\nu}(x, \varphi) = (1 - \sqrt{3} \tan \varphi) F_{1,4}^{\rho\nu}(a\sqrt{3} \tan \varphi + x(1 - \sqrt{3} \tan \varphi), \varphi).$$

où $F_{1,\alpha}^{\rho\nu}(x, \varphi)$ est donnée par la relation (A.9).

Notons que le fait d'avoir $H((D_\alpha(x, \varphi))^2 - R^2)$ dans l'expression (B.2), élimine tous les neutrons entrant par la face 1 et intersectant la face cylindrique.

B.2 Transmission 1 → 7

Les fonctions de représentation du flux angulaire sur la surface cylindrique seront différentes de celles des surfaces planes. Elles gardent cependant la forme

générale donnée par les équations (2.16) du paragraphe 2.2.

La forme cylindrique de cette surface va introduire un nouvel angle qui sera calculé en fonction du parcours fictif du neutron à l'intérieur du cylindre (ce qui va nous amener à stocker ces parcours, comme on va le voir plus loin, lors de l'évaluation du maillage d'intégration).

Nous rappelons les fonctions de représentation pour la face 1 qui s'obtient par:

$$\psi_{-,1}^1(\vec{\Omega}) = -2 \sin \theta \sin \varphi, \quad (\text{B.7})$$

$$\psi_{-,1}^2(\vec{\Omega}) = 3\sqrt{2}[\sin \theta \cos \varphi - \frac{2}{3}], \quad (\text{B.8})$$

$$\psi_{-,1}^0(\vec{\Omega}) = 1. \quad (\text{B.9})$$

Pour la face 7, les composantes de la base $(\vec{n}_{-,7}, \vec{k}_{-,7})$ (voir figure B.1) sont données par:

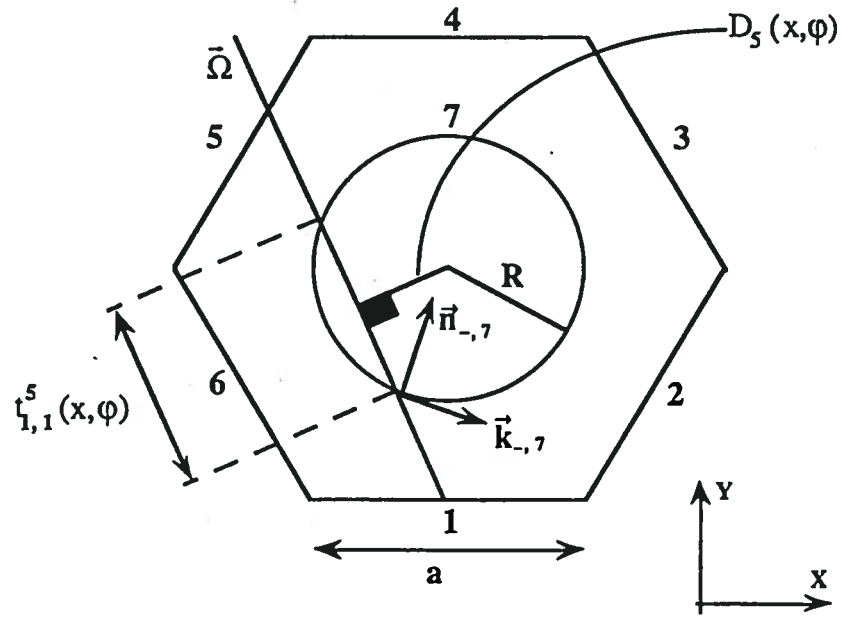
$$\vec{n}_{-,7} = \begin{pmatrix} -\sin(\varphi - \mu_\alpha) \\ \cos(\varphi - \mu_\alpha) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{k}_{-,7} = \begin{pmatrix} \cos(\varphi - \mu_\alpha) \\ \sin(\varphi - \mu_\alpha) \\ 0 \end{pmatrix}.$$

L'angle μ_α est défini par:

$$\cos \mu_\alpha = \|\vec{\Omega} \cdot \vec{n}_{-,7}\| = \frac{t_{1,1}^\alpha(x, \varphi)}{2R}. \quad (\text{B.10})$$

avec $t_{1,1}^\alpha(x, \varphi)$ le parcours qu'aurait fait le neutron s'il traversait le cylindre. On remarquera que l'angle μ_α dépend de la face de sortie.

Avec les composantes de $\vec{n}_{-,7}$ et $\vec{k}_{-,7}$ et les relations (2.16) du paragraphe 2.2, on trouve pour les composantes du flux angulaires à la surface cylindrique:

Figure B.1: Numérotation des surfaces dans le cas J_{\pm} .

$$\psi_{+,7}^1(\vec{\Omega}) = -2 \sin \theta \sin \mu_{\alpha}, \quad (\text{B.11})$$

$$\psi_{+,7}^2(\vec{\Omega}) = 3\sqrt{2}[\sin \theta \cos \mu_{\alpha} - \frac{2}{3}], \quad (\text{B.12})$$

$$\psi_{+,7}^0(\vec{\Omega}) = 1. \quad (\text{B.13})$$

Une fois définies les fonctions de représentations, les probabilités de transmission de la face 1 à la face 7 ont alors la même forme que l'expression (A.8) mais avec des bornes d'intégration en espace et en angle différentes. En gardant la fonction d'Heaviside pour le même motif que précédemment, on peut alors écrire:

$$P_{s_7 s_1}^{\nu \rho} = \frac{1}{\pi a} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} d\varphi \int_0^a dx F_{1,7}^{\nu \rho}(\varphi, x) H(R^2 - (D_{\alpha}(x, \varphi))^2) \quad (\text{B.14})$$

En notera dans cette expression que la sommation sur l'angle φ est sur un intervalle de π . En d'autres termes, toutes les directions de $\vec{\Omega}$ allant de la face 1

aux autres faces $\alpha = 4, 5, 6$ peuvent croiser la surface 7 dépendant du rayon R . On peut alors mettre la formule ci-dessus sous la forme:

$$P_{s_7 s_1}^{\nu \rho} = \frac{2}{\pi a} \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \int_0^a dx [\bar{F}_{1,6}^{\rho\nu}(x, \varphi) H(R^2 - (D_6(x, \varphi))^2) + \bar{F}_{1,5}^{\rho\nu}(x, \varphi) H(R^2 - (D_5(x, \varphi))^2) + \bar{F}_{1,4}^{\rho\nu}(x, \varphi) H(R^2 - (D_4(x, \varphi))^2)] \quad (\text{B.15})$$

A partir de cette relation, il est alors facile d'expliciter les différentes probabilités de transmission pour le spectre du mode de représentation des flux angulaires, $\rho = 0, 2$ et $\nu = 0, 2$. On trouve alors:

$$P_{s_7 s_1}^{00} = \frac{4}{\pi a} \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \int_0^a dx \{ \sin \varphi [K i_3(\tau_6^c(x, \varphi)) + K i_3(\tau_6(x, \varphi))] H(R^2 - (D_6(x, \varphi))^2) + \sqrt{3} \sin \varphi [K i_3(\tau_5^c(x, \varphi)) + K i_3(\tau_5(x, \varphi))] H(R^2 - (D_5(x, \varphi))^2) + \sin(\frac{\pi}{6} - \varphi) [K i_3(\tau_4^c(x, \varphi)) + K i_3(\tau_4(x, \varphi))] \times H(R^2 - (D_4(x, \varphi))^2) \},$$

$$P_{s_7 s_1}^{20} = \frac{12\sqrt{2}}{\pi a} \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \int_0^a dx \{ \sin \varphi \cos \mu_6 [K i_4(\tau_6^c(x, \varphi)) + K i_4(\tau_6(x, \varphi))] \times H(R^2 - (D_6(x, \varphi))^2) + \sqrt{3} \sin \varphi \cos \mu_5 [K i_4(\tau_5^c(x, \varphi)) + K i_4(\tau_5(x, \varphi))] \times H(R^2 - (D_5(x, \varphi))^2) + \sin(\frac{\pi}{6} - \varphi) \cos \mu_4 [K i_4(\tau_4^c(x, \varphi)) + K i_4(\tau_4(x, \varphi))] \times H(R^2 - (D_4(x, \varphi))^2) \} - 2\sqrt{2} P_{s_7 s_1}^{00},$$

$$P_{s_7 s_1}^{02} = \frac{12\sqrt{2}}{\pi a} \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \int_0^a dx \{ \sin \varphi [\sin \varphi K i_4(\tau_6^c(x, \varphi)) + \cos(\frac{\pi}{6} + \varphi) K i_4(\tau_6(x, \varphi))] \times H(R^2 - (D_6(x, \varphi))^2) + \sqrt{3} \sin \varphi [\cos \varphi K i_4(\tau_5^c(x, \varphi)) + \sin(\frac{\pi}{6} + \varphi) \times K i_4(\tau_5(x, \varphi))] H(R^2 - (D_5(x, \varphi))^2) + \sin(\frac{\pi}{6} - \varphi) \cos \varphi [K i_4(\tau_4^c(x, \varphi)) + K i_4(\tau_4(x, \varphi))] H(R^2 - (D_4(x, \varphi))^2) \} - 2\sqrt{2} P_{s_7 s_1}^{00},$$

$$\begin{aligned}
P_{s_7s_1}^{11} &= \frac{16}{\pi a} \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \int_0^a dx \{ \sin \varphi \sin \mu_6 [\cos \varphi K i_5(\tau_6^c(x, \varphi)) + \sin(\frac{\pi}{6} + \varphi) \cdot \\
&\quad \times K i_5(\tau_6(x, \varphi))] H(R^2 - (D_6(x, \varphi))^2) + \sqrt{3} \sin \varphi \sin \mu_5 \\
&\quad \times [\sin \varphi K i_5(\tau_5^c(x, \varphi)) + \cos(\frac{\pi}{6} + \varphi) K i_5(\tau_5(x, \varphi))] H(R^2 - (D_5(x, \varphi))^2) \\
&\quad + \sin(\frac{\pi}{6} - \varphi) \sin \varphi \sin \mu_4 [K i_5(\tau_4^c(x, \varphi)) + K i_5(\tau_4(x, \varphi))] \\
&\quad \times H(R^2 - (D_4(x, \varphi))^2) \}, \\
P_{s_7s_1}^{22} &= \frac{72}{\pi a} \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\varphi \int_0^a dx \{ \sin \varphi \cos \mu_6 [\sin \varphi K i_5(\tau_6^c(x, \varphi)) + \cos(\frac{\pi}{6} + \varphi) \\
&\quad \times K i_5(\tau_6(x, \varphi))] H(R^2 - (D_6(x, \varphi))^2) + \sqrt{3} \sin \varphi \cos \mu_5 \\
&\quad \times [\cos \varphi K i_5(\tau_5^c(x, \varphi)) + \sin(\frac{\pi}{6} + \varphi) K i_5(\tau_5(x, \varphi))] H(R^2 - (D_5(x, \varphi))^2) \\
&\quad + \sin(\frac{\pi}{6} - \varphi) \cos \varphi \cos \mu_4 \times [K i_5(\tau_4^c(x, \varphi)) + K i_5(\tau_4(x, \varphi))] \\
&\quad \times H(R^2 - (D_4(x, \varphi))^2) \} - 2\sqrt{2}(P_{s_7s_1}^{02} + P_{s_7s_1}^{00}) - 8P_{s_7s_1}^{00},
\end{aligned}$$

Les différents parcours optiques dans ces expressions sont données par:

$$\begin{aligned}
\tau_4(x, \varphi) &= \Sigma(a \cos(\frac{\pi}{3} - \varphi) + \tan \varphi(a\sqrt{3} \sin(\frac{\pi}{6} - \varphi) + 2x \sin \varphi) - \frac{1}{2}D_4(x, \varphi)), \\
\tau_5(x, \varphi) &= \Sigma(a \cos(\frac{\pi}{6} + \varphi) + x\sqrt{3} \sin \varphi \tan \varphi - \frac{1}{2}D_5(x, \varphi)), \\
\tau_6(x, \varphi) &= \Sigma(a \sin(\varphi - \frac{\pi}{6}) + x \cos \varphi - \frac{1}{2}D_6(x, \varphi)), \\
\tau_\alpha^c(x, \varphi) &= \Sigma(G_\alpha(x, \varphi) - D_\alpha(x, \varphi)) - \tau_\alpha(x, \varphi).
\end{aligned}$$

avec:

$$\begin{aligned}
G_6(x, \varphi) &= x \frac{\cos \frac{\pi}{6}}{\cos(\varphi + \frac{\pi}{6})}, \\
G_5(x, \varphi) &= \sin(\frac{\pi}{3}) \frac{a + x\sqrt{3} \tan \varphi}{\sin(\varphi + \frac{\pi}{6})},
\end{aligned}$$

$$G_4(x, \varphi) = \frac{a\sqrt{3}}{\cos \varphi}.$$

Ici, Σ n'est autre que la section efficace du milieu à bordure hexagonale.

ANNEXE C

Calcul du maillage d'intégration

Le calcul des probabilités de collision se fait en deux étapes: on produit tout d'abord le maillage d'intégration qui n'est autre que l'ensemble de lignes d'intégration tracées dans la cellule; chaque ligne étant définie par le poids d'intégration associé et par les longueurs des segments intersectés avec les différentes zones de la cellule. On utilise ensuite, dans une seconde étape, l'ensemble de ces informations pour évaluer les différentes probabilités de collision intervenant dans le système d'équations multicellules. Nous décrirons, dans cet annexe, la manière utilisée dans le code DRAGON pour produire le maillage d'intégration.

Les probabilités de fuites et de transmission de chaque cellule se calculent par intégration numérique selon les formules obtenues dans les annexes précédents. Si la cellule a une seule zone, les seules probabilités calculées par intégration numérique sont celles de transmission, les probabilités restantes s'en déduisent par des relations de conservation et de symétries. Le maillage d'intégration se réduit à l'étude de l'interaction entre les surfaces de la cellule.

Dans le cas d'une cellule hétérogène, les lignes d'intégration sont définies par une double intégration numérique: en espace (sur le côté d'entrée) et en angle

(sur le côté de sortie). Soit $t_\alpha^\beta(x, \varphi)$ la ligne d'intégration passant par l'abscisse x du côté d'entrée et formant un angle φ avec la normale intérieure au côté d'entrée; l'intersection de cette ligne avec le maillage géométrique de la cellule décompose la ligne en la forme suivante:

$$t_\alpha^\beta \equiv \{t_{\alpha,i}^\beta, m_i, i = 1, k\} \quad (\text{C.1})$$

où $t_{\alpha,i}^\beta$ est la longueur totale de l'interaction de la ligne t_α^β avec la zone m_i , et k est le nombre total des interactions.

La décomposition de la ligne est définie par son interaction avec la famille de cercles:

$$R = R_i, i = 1, N \quad (\text{C.2})$$

définissant le maillage géométrique.

Soit $D_\alpha(x, \varphi)$ la distance de la ligne d'intégration $t_\alpha^\beta(x, \varphi)$ au centre de la cellule (voir figure A.1). Par comparaison entre $D_\alpha(x, \varphi)$ et les rayons R_i on détermine le plus petit rayon R_k dont le cercle a une intersection non nulle avec la ligne $D_\alpha(x, \varphi)$.

La décomposition de la ligne s'écrira:

$$t_{\alpha,k}^\beta = 2\sqrt{(D_\alpha(x, \varphi))^2 - R_k^2} \quad (\text{C.3})$$

$$t_{\alpha,i}^\beta = 2\sqrt{(D_\alpha(x, \varphi))^2 - R_i^2} - t_{\alpha,i-1}^\beta \quad k < i < N \quad (\text{C.4})$$

$$t_{\alpha,N}^\beta = t_\alpha^\beta - t_{N-1}^\beta \quad (\text{C.5})$$

Les expressions de $D_\alpha(x, \varphi)$ et de t_α^β sont données à l'annexe A.

Une fois produite, ces lignes seront utilisées pour calculer les éléments de la matrice des probabilités de collision. On utilisera à cette fin la procédure numérique décrite au paragraphe 3.4. Les probabilités de transmission surface-surface une fois discretisées peuvent s'écrire d'une manière générale en fonction des termes:

$$\bar{P}_{s_\alpha s_\beta}^{\rho\nu} = \sum_{i,k,j} W_{\alpha\beta ikj}^{\rho\nu} K_{i_{3+\bar{\rho}+\bar{\nu}}}(\tau(t)) \quad (\text{C.6})$$

Les éléments $\bar{P}_{s_\alpha s_\beta}^{\rho\nu}$ ne représentent que la partie des expressions des probabilités à évaluer. Par exemple, $P_{s_6 s_1}^{00} = \bar{P}_{s_6 s_1}^{00}$ mais $P_{s_6 s_1}^{21} = \bar{P}_{s_6 s_1}^{21} + 2\sqrt{2}P_{s_6 s_1}^{10}$. Les modes $\bar{\rho}$ et $\bar{\nu}$ dépendront de la face de sortie et des modes ρ et ν . L'indice i est relatif à la quadrature angulaire, les autres k et j à l'espace (les poids $W_{\alpha\beta ikj}^{\rho\nu}$ renferme, en plus des poids numériques $w_{\alpha\beta ikj}^{\rho\nu}$, des expressions découlant des formules des probabilités (voir annexes A et B)).

L'équation (C.6) nous montre que lors de la phase de production du maillage d'intégration, on ne doit stocker en mémoire que les poids $W_{\alpha\beta ikj}^{\rho\nu}$ et les parcours t_i . Dans l'expression de $W_{\alpha\beta ikj}^{\rho\nu}$ intervient une contribution due à l'espace et une autre due aux angles, comme on peut le déduire des formules des annexes A et B. On peut alors écrire:

$$W_{\alpha\beta ikj}^{\rho\nu} = \bar{W}_{\alpha\beta i}^{\rho\nu} \bar{W}_{\alpha\beta kj} \quad (\text{C.7})$$

Il est évident, d'après les expressions des différentes probabilités de transmission, qu'on peut construire l'ensemble des valeurs de $\bar{W}_{\alpha\beta i}^{\rho\nu}$ en stockant uniquement les valeurs de $\cos \varphi$ et $\sin \varphi$ pour un nombre de fois égale à l'ordre de la quadrature en angle donné au départ. Ceci, quelque soit la méthode envisagée: J_{\pm} ou courants d'interfaces. Mais dans la pratique, on a souvent besoin de ne faire qu'un seul calcul du maillage d'intégration pour un ensemble d'autres calculs neutroniques; c'est le cas par exemple, d'un calcul d'autoprotection (qui fait appel au calcul des probabilités de collision) suivit d'un calcul de flux. Ou encore lorsqu'on fait évoluer le combustible nucléaire, un traitement unique de la géométrie est utile dans ce cas pour minimiser le coût des calculs.

L'ensemble de ces considération nous a amené à stocker le minimum possible des valeurs des poids $\bar{W}_{\alpha\beta i}^{\rho\nu}$. Pour les deux méthodes, J_{\pm} et courants d'interfaces, nous avons retenu:

$$\bar{W}_{61i}^{00}, \bar{W}_{61i}^{10}, \bar{W}_{61i}^{11}, \bar{W}_{51i}^{11}, \bar{W}_{41i}^{11}, \bar{W}_{41i}^{20}, \bar{W}_{71i}^{02}, \bar{W}_{71i}^{02}, \bar{W}_{71i}^{02} \quad (C.8)$$

Les poids ${}^j\bar{W}_{71i}^{02}$ sont uniquement utilisés dans le cas de la méthode J_{\pm} (j indique la face hexagonale que devrait atteindre le neutron entrant par la face 1). Ils forment différentes contributions des faces j pour la transmission de la face 1 à la face 7. Les autres poids nécessaires dans les calculs sont directement obtenus à partir de

ceux stockés.

Notons que d'autres informations sont stockées comme le nombre de domaine que traverse une ligne d'intégration pour un angle et une position donnés, le premier domaine intersecté, etc.

Les probabilités de fuites sont aussi calculées à partir de l'information ainsi produite. En effet, on a vu que leurs expressions sont fonctions de celles des probabilités de transmission.

ANNEXE D

Partie hexagonale du module EXCELL

Cet annexe sera consacré à la description des différentes tâches incorporées dans le module EXCELL du code DRAGON. Nous nous limiterons cependant aux développements que nous avons apporté à cette partie du code.

Le module EXCELL est la partie du code qui produit le fichier informatique des lignes d'intégration. Ce fichier sera utilisé par la suite pour calculer les probabilités de collision. Après une étape géométrique, où on analyse les données géométriques de l'utilisateur: on vérifie la compatibilité des données, la cohérence des définitions, etc, vient le calcul des lignes d'intégration.

Symétrie et numérotation

Le programme a été conçu de telle sorte que l'utilisateur rentre le minimum de données possible. Notamment en exploitant au maximum les différentes symétries externes que peut présenter une géométrie hexagonale. En plus des symétries déjà énumérées dans le cas du formalisme multicellule (figure 3.6), et qui sont valides pour les cas 2D et 3D, nous exploitons aussi la possibilité d'une symétrie selon l'axe z (dans le cas 3D). Cette dernière symétrie est définie par rapport à un plan

passant par le centre du premier ou du dernier étage de cellules. Il va de soi que toutes les cellules de l'étage portant ce plan de symétrie sont donc symétriques par rapport à ce plan.

Une fois connue l'ensemble des symétries que présente le domaine, nous procédons à la construction de ce domaine au complet. Nous commençons par d'éventuelles duplications sur le plan xy et ensuite nous dupliquons selon l'axe z s'il s'agit d'un problème 3D.

Deux types de numérotation sont à considérer ici. Une numérotation au niveau de la symétrie initiale qu'on nommera: "numérotation primaire" et une autre numérotation globale. Chaque numérotation englobe celle des volumes et celles des surfaces. La numérotation globale nous sert uniquement pour la production des lignes d'intégration. Le nombre d'inconnus est donc défini dans la numérotation primaire. Nous numéroterons toujours nos volumes du centre de l'assemblage vers la périphérie. Sur chaque couronne, nous progressons dans le sens trigonométrique. Si une cellule est hétérogène, nous commençons la numérotation du cylindre central vers la zone à bordure hexagonale. La figure D.1 donne un exemple des deux types de numérotation, à y remarquer le cas d'une cellule sectorisée. Notons qu'un vecteur permettant la correspondance entre la numérotation globale et primaire est produit et stocké à ce niveau. Dans ce vecteur, on tient compte du mélange et de l'orientation des cellules. Sur la figure D.1, nous avons aussi représenté des exem-

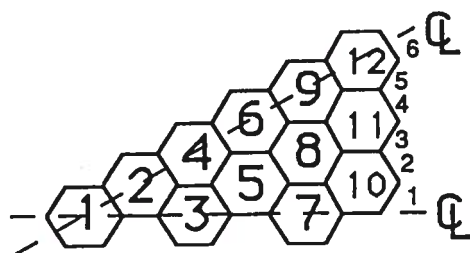
ples de numérotation des surfaces. A noter que dans le cas 3D, nous commençons la numérotation des surfaces par les surfaces latérales à la côte la plus basse. La numérotation des volumes et surfaces se fait alors plan par plan (selon z) et dans chaque plan le principe de numérotation est identique au cas 2D.

Suivis d'une ligne d'intégration: traitement des coins

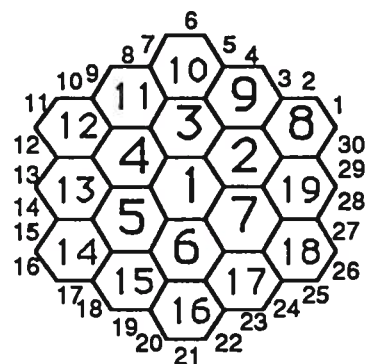
Une fois construit le domaine au complet, nous procédons à la simulation des parcours des neutrons dans ce domaine en y traçant les lignes d'intégration. Nous choisissons les surfaces $S(\vec{\Omega})$ à l'origine du référentiel qui nous sert comme repère absolu. Pour une direction $\vec{\Omega}$ donné, qui est définie par ses cosinus directeur dans le repère en question, nous commençons par déterminer les dimensions de $S(\vec{\Omega})$. Ensuite nous la parcourons dans les deux directions avec des pas d'avancement qui peuvent être différents. Expliquons ceci un peu plus en détails. Attachons à la surface plane $S(\vec{\Omega})$ deux axes orthogonaux x' et y' . L'axe x' correspondra par exemple à la dimension de la surface due au confinement dans le cylindre. L'autre axe y' sera lié, par conséquent, à l'autre dimension due aux deux calottes sphériques du confinement (voir section 4.2). Pour $\vec{\Omega}$ donné, les longueurs de x' et y' sont bien déterminées, on calcul les pas d'avancement sur ces deux axes en divisant ces longueurs par le nombre de points rentré par l'utilisateur. On peut décider d'avoir un nombre de points différent selon l'axe x' et y' . On avance alors sur x' puis sur y' . L'origine de la droite sur $S(\vec{\Omega})$ nous permet de déterminer un

point $M_0(x_0, y_0, z_0)$ où passe cette droite. On connaît alors l'équation de la droite et les équations des différents plans et cylindres. Il ne reste donc qu'à chercher les intersections de cette droite avec les différents volumes. Nous commençons bien entendu par les cellules périphériques, dès qu'on connaît la première cellule, le reste des cellules intersectées se déduit automatiquement par un algorithme de recherche de cellules voisines. La connaissance des cellules de début et de la fin de la ligne d'intégration nous permet de déterminer en même temps les surfaces de départ et d'arrivée. Il arrive cependant qu'une droite arrive sur un coin formé par deux ou plusieurs plans. Si le coin en question est à la périphérie du domaine, alors le neutron sera distribué sur l'ensemble des surfaces formant le coin. Autrement dit, chaque surface contribuera par une fraction donnée dans le calcul des probabilités de transmission. Si ce coin est à l'intérieur du domaine, on testera sur les cellules adjacentes pour déterminer la continuité de la ligne d'intégration.

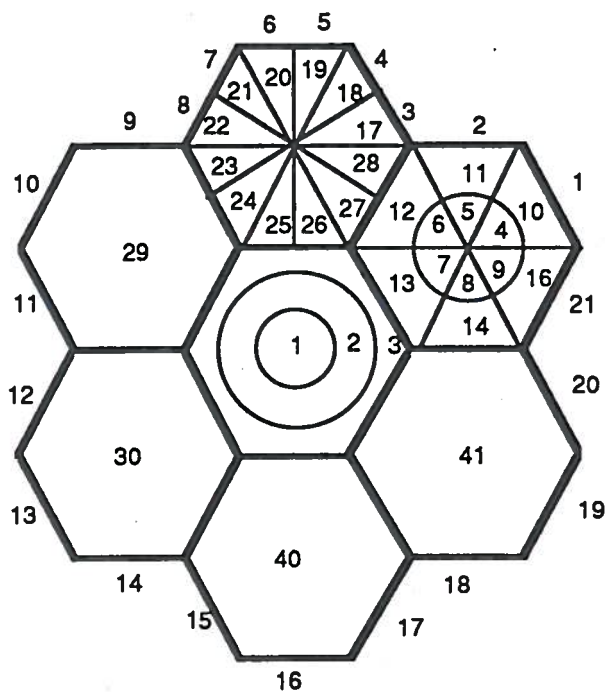
On stocke ensuite l'ensemble des longueurs des droites obtenues dans un fichier temporaire. Ce dernier contient aussi les numéros des volumes, dans la numérotation globale, correspondant aux différentes lignes d'intégration, ainsi que leurs surfaces de début et de la fin et leurs poids associés. Ceci est fait pour chaque angle. Ces lignes seront par suite éventuellement normalisées et utilisées dans le calcul des probabilités de collision. La normalisation est identique à celle décrite dans le cadre du formalisme multicellules.



Numérotation primaire



Numérotation globale



Exemple de numérotation d'un domaine en 2D

Figure D.1: Types de numérotations.

ANNEXE E

Intégration des probabilités de collision

Dans la section 4.2, nous avons mentionné que les probabilités de collision se calculent par une intégration sur les angles et sur des surfaces. Mais dans l'expression de ces probabilités, on n'avait pas intégré le long de la trajectoire, c'est-à-dire par rapport aux variables u et u' (relations (4.6) et (4.8)). C'est ce qu'on se propose de faire dans cette annexe, pour le cas d'une géométrie tridimensionnelle. Pour une configuration bidimensionnelle, les probabilités de collision sont similaires, à un changement de variable près, à celles décrites au moment de l'étude du formalisme multicellules.

Nous avons toujours écrit les probabilités de collision (formule (4.6)) en fonction du parcours optique $\tau(u, u')$ sans expliciter ce dernier. Pour cela, nous distinguerons les probabilités de collision volume-volume et les probabilités de fuites. Pour le premier type de probabilités, l'intégration porte sur les volumes de départ et d'arrivée des neutrons. On peut alors écrire le parcours optique sous la forme (voir figure E.1):

$$\tau(u, u') = \sum_i |u_{i+1} - u| + \tau_{ij} + \sum_j |u' - u_j|, \quad (\text{E.1})$$

où τ_{ij} est le parcours optique à l'extérieur des volumes i et j . L'intégration sur u

et u' est alors immédiate. On trouve:

$$\int du \int du' e^{-\tau(u,u')} = \frac{(1 - e^{-\Sigma_i L_i})(1 - e^{-\Sigma_j L_j})}{\Sigma_i \Sigma_j} e^{-\tau_{ij}} (1 - \delta_{ij}) + 2 \frac{\Sigma_i L_i - 1 + e^{-\Sigma_i L_i}}{\Sigma_i^2} \delta_{ij} \quad (\text{E.2})$$

où on a posé $L_i = |u_{i+1} - u_i|$ et $L_j = |u'_{j+1} - u'_j|$ et δ_{ij} est la fonction de Kronecker. Le premier terme dans l'équation ci-dessus correspond au cas où $i \neq j$ le second au cas où $i = j$.

Si nous avons présence de zones transparentes (vides), c'est à dire $\Sigma_i = 0$.

L'équation précédente devient:

$$\lim_{\Sigma_i \rightarrow 0} \int du \int du' e^{-\tau(u,u')} = e^{-\tau_{ij}} \frac{L_i (1 - e^{-\Sigma_j L_j})}{\Sigma_j} (1 - \delta_{ij}) + L_i^2 \delta_{ij} \quad (\text{E.3})$$

Le rôle des volumes i et j sont symétriques dans ces formules. Le cas où $\Sigma_j = 0$ et $\Sigma_i \neq 0$ se déduit par une simple inversion des indices i et j . Un autre cas intéressant à étudier est lorsque les deux zones sont vides: $\Sigma_i = 0$ et $\Sigma_j = 0$. On obtient alors:

$$\lim_{\substack{\Sigma_i \rightarrow 0 \\ \Sigma_j \rightarrow 0}} \int du \int du' e^{-\tau(u,u')} = e^{-\tau_{ij}} L_i L_j (1 - \delta_{ij}) + L_i^2 \delta_{ij} \quad (\text{E.4})$$

Contrairement à la méthode des courants interfaces, où on ne pouvait pas traiter les zones transparentes à cause du fait que les probabilités de collision volume-volume s'obtenaient à partir des relations de réciprocités et de conservations (où une division par la section efficace apparaissait), cette méthode ne pose aucun problème pour ce genre de situation.

En ce qui concerne les probabilités de fuites, elles se réduisent de la même façon. L'intégration sur u porte sur le volume d'où part le neutron. Dans ce cas le parcours optique s'écrit (voir figure E.2):

$$\tau(u) = \Sigma_i |u - u_i| + \tau_{i\alpha} \quad (\text{E.5})$$

où $\tau_{i\alpha}$ représente le parcours optique minimal des neutrons entre le volume i et la surface α . L'intégration selon u dans la formule (4.8) est alors immédiate. On trouve:

$$\int du e^{-\tau(u)} = \frac{1 - e^{-\Sigma_i L_i}}{\Sigma_i} e^{-\tau_{i\alpha}} \quad (\text{E.6})$$

où, bien entendu, $L_i = |u_{i+1} - u_i|$. Nous pourrions facilement chercher la limite de cette expression lorsque $\Sigma_i \rightarrow 0$. C'est une limite qui existe et est finie.

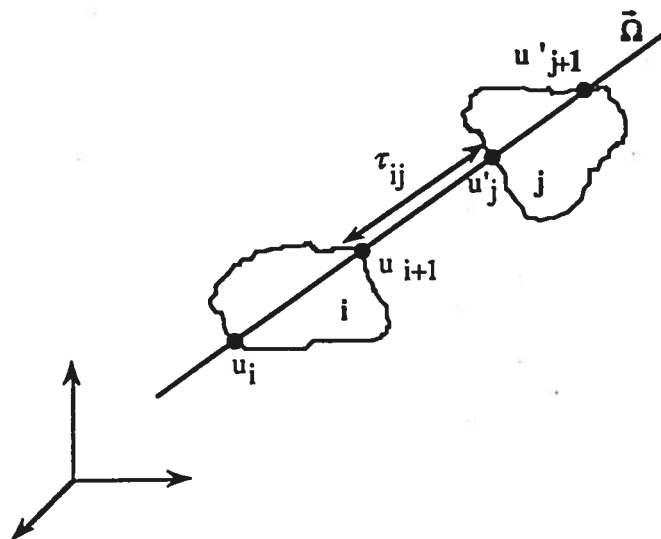


Figure E.1: Parcours optiques pour les probabilités volume-volume.

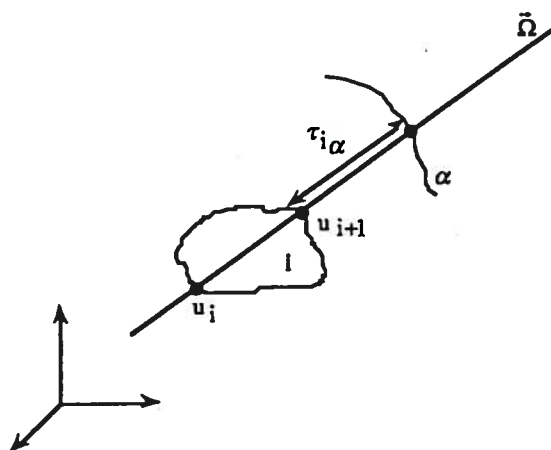


Figure E.2: Parcours optiques pour les probabilités de fuites.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] Y. Tahara, M. Nakano, H. Wakiyama, " *Development of A Hexagonal Assembly Transport Code* ", Proc. Int. Topl. Mtg. Advances in Mathematics, Computations, and Reactor Physics, Pittsburgh, PA, April 28- May 2, 1991.
- [2] C.J.Jeong, K. Okumura, Y. Ishiguru, " *Accuracy of Cell Calculation Methods Used for Analysis of High Conversion Light Water Reactor Lattice* ", J. Nucl. Sci. Technol., 27(6), 515 (1990).
- [3] R. Sanchez, " *Schémas approchés de résolution de l'équation intégrale du transport à deux dimensions. Etude théorique des méthodes mixtes de résolution.* ", CEA-N-2166, Commissariat à l'Energie Atomique, France (1980).
- [4] A. Hébert " *Développement de la méthode SPH: Homogénéisation de cellules dans un réseau non uniforme et calcul des paramètres de réflecteur,* " CEA-N-2166, Commissariat à l'Energie Atomique, France (1981).
- [5] R. Sanchez and N.J. McCormick, " *A Review of Neutron Transport Approximations* ", Nucl. Sci. Eng.,80, 481-535 (1982).
- [6] B. G. Carlson and K. D. Lathrop, " *Transport Theory - The Method of Discrete Ordinates* ", Methods in Computational Physics, Vol. 1, Academic Press, New York.

- [7] R. Sanchez, "*Application de la méthode de Galerkin à la résolution de l'équation intégrale du transport unidimensionnelle*", CEA-N-1793, Commissariat à l'Energie Atomique (1974).
- [8] J. R. Askew, "*Review of the Status of Collision Probability Methods*", Proc. Sem. Numerical Reactor Calculations, 185-196, International Atomic Energy Agency, Vienna.
- [9] Richard Sanchez "*A Transport Multicell Method for Two-Dimensional Lattices of Hexagonal cells*", Nucl. Sci. Eng., 92, 247 (1986).
- [10] F. Wasastjerna, "*An Application of the Transmission Probability to the Calculation of Neutron Flux Distribution in Hexagonal Geometry*", Nucl. Sci. Eng., 72, 9-18 (1979).
- [11] J. L. Vujic, "*GTRAN2: An Advanced Transport Theory Code for Advanced Assembly Calculations*", Joint Int. Conf. on Mathematical Methods and Supercomputing in Nuclear Applications, Karlsruhe, Germany, April 19-23, 1993.
- [12] J. L. Vujic and W. R. Martin, "*Two-Dimensional Collision probability Method With Anisotropic Scattering for Vector and Parallel Processing*", PHYSOR-90 Conference, Marseille, France, April 23-27, 1990.
- [13] E. A. Villardo, R. J. J. Stamm'ler, A. Ferri and J. J. Casal, "*HELIOS: Angular Dependent Collision Probabilities*", Nucl. Sci. Eng., 112, 16 (1992).

- [14] C. R. Calabrese and C. Grant, " *HUEMUL - A Two-Dimensional Multi-group Collision Probability Code for General Geometries*", Ann. Nucl. Energy., 18(2), 63, 1991.
- [15] J. Bussac et P. Reuss, " *Traité de neutronique*", Hermann, Paris (1978).
- [16] Luigi Mangiarotti " *A three-dimensional neutron transport problem*", J. Math. Phys., Vol. 16, No. 9, September 1975.
- [17] E. E. Lewis and W. F. Miller " *Computational Methods of Neutron Transport*", Wiley-Interscience, New York (1984).
- [18] K. M. Case and P. F. Zweifel, " *Linear Transport Theory.*", Addison-Wesley -1967
- [19] R. Roy, " *Anisotropic Scattering for Integral Transport Codes.*", Ann. Nucl. Energy., 18(9), 511, 1991.
- [20] Richard Sanchez " *Approximate Solutions of the Two-Dimensional Integral Transport Equation by Collision Probability Methods*", Nucl. Sci. Eng., 64, 384 (1977).
- [21] R. Roy and G. Marleau, " *Normalization Techniques for Collision Probabilities Matrices*", PHYSOR-90 Conference, Marseille, France, April 23-27, 1990.
- [22] R. Roy, A. Hébert and G. Marleau, " *A Transport Method for Treating Three-Dimensional Lattices of Heterogeneous cells* ", Nucl. Sci. Eng., 101, 217 (1989).

- [23] T. Takeda and H. Ikeda, "3-D Neutron Transport Benchmarks", OECD/NEA Committee on Reactor Physics, report NEACRPL-L-330, March 1991
- [24] A. Hébert and G. Marleau, "Generalization of the Stamm'ler Method for the Self-Shielding of Resonant Isotopes in Arbitrary Geometries", Nucl. Sci. Eng., 108, 230 (1991).
- [25] A. Kavenoky "Calcul et utilisation des probabilités de de première collision pour des milieux hétérogènes à une dimension: les programmes ALCOLL et CORTINE", Note CEA-N 1077 (1969).
- [26] G. Marleau, M.L. Vergain, A. Hébert and R. Roy "Computation of the DP_1 collision probabilities for spherical and cylindrical geometries", Ann. Nucl. Energy., 17, 119 (1990).
- [27] RISC COMPUTER CODE COLLECTION, "MCNP-4: Monte Carlo Neutron and Photon Transport Code System", Los Alamos, report LA-7396-M, Rev.2, Los Alamos National Laboratory, New Mexico (1986).
- [28] M. Ouisloumen, G. Marleau, A. Hébert and R. Roy, "Computation of Collision Probabilities for Mixed Hexagonal-Cylindrical Cells Using the DP_1 Approximation to the J_{\pm} technique", Proc. Int. Topl. Mtg. Advances in Mathematics, Computations, and Reactor Physics, Pittsburgh, PA, April 28- May 2, 1991.

- [29] G. Marleau, A. Hébert and R. Roy, "*New Computational Methods used in the Lattice Code DRAGON*", Topical Meeting on Advances in Reactor Physics, Charleston, SC(1992).
- [30] P. J. Davis, P. Rabinowitz, "*Computer Science and Applied Mathematics: Methods of Numerical Integration*", Second Edition, Academic Press, New York, 1984.
- [31] G. Marleau, A. Hébert and R. Roy, "*Guide de l'utilisateur DRAGON*", Rapport IGE-71R, Ecole Polytechnique de Montréal, (1991).
- [32] M. Ouisloumen, G. Marleau and R. Roy, "*Applying The Collision Probability Method To Hexagonal Assemblies in Two and Three Dimensions* ", Joint Int. Conf. on Mathematical Methods and Supercomputing in Nuclear Applications, Karlsruhe, Germany, April 19-23, 1993.