

Titre: Méthodes d'optimisation des paramètres 2D du réflecteur dans un
Title: réacteur à eau pressurisée

Auteur: Thomas Clerc
Author:

Date: 2013

Type: Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

Référence: Clerc, T. (2013). Méthodes d'optimisation des paramètres 2D du réflecteur dans
un réacteur à eau pressurisée [Master's thesis, École Polytechnique de Montréal].
Citation: PolyPublie. <https://publications.polymtl.ca/1154/>

Document en libre accès dans PolyPublie

Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: <https://publications.polymtl.ca/1154/>
PolyPublie URL:

Directeurs de recherche: Alain Hébert, & Hadrien Leroyer
Advisors:

Programme: Génie mécanique
Program:

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

MÉTHODES D'OPTIMISATION DES PARAMÈTRES 2D DU RÉFLECTEUR DANS
UN RÉACTEUR À EAU PRESSURISÉE

THOMAS CLERC
DÉPARTEMENT DE GÉNIE MÉCANIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES
(GÉNIE MÉCANIQUE)
JUILLET 2013

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé :

MÉTHODES D'OPTIMISATION DES PARAMÈTRES 2D DU RÉFLECTEUR DANS
UN RÉACTEUR À EAU PRESSURISÉE

présenté par : CLERC Thomas

en vue de l'obtention du diplôme de : Maîtrise ès sciences appliquées

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

M. MARLEAU Guy, Ph.D., président

M. HÉBERT Alain, D.ING., membre et directeur de recherche

M. LEROYER Hadrien, M.Sc.A., membre et codirecteur de recherche

M. COURAU Tanguy, Ph.D., membre

À ma mère et ma soeur, Véronique Broutard et Iris Clerc

REMERCIEMENTS

J'aimerais tout d'abord remercier mon directeur de recherche, Pr. Alain Hébert de m'avoir accepté comme étudiant en maîtrise recherche, pour la qualité de son encadrement, sa disponibilité et sa rapidité à répondre à mes questions, qui m'ont permis de mener à bien ce projet.

Je tiens également à remercier Yves Dutheillet pour son accueil au sein du département SINETICS d'Électricité De France (EDF) R&D à Clamart (France). Je remercie spécialement mon co-directeur de recherche et directeur de stage Hadrien Leroyer, responsable du partenariat entre l'école Polytechnique de Montréal et EDF, pour son encadrement très enrichissant, son intérêt pour mes travaux et son soutien durant la durée de mon stage.

Je veux également remercier Jean-Philippe Argaud, Angélique Ponçot, Bertrand Bouriquet pour leur aide concernant les problèmes numériques et d'optimisation que j'ai rencontrés pendant mon stage, et pour leur aide dans la rédaction d'un article de conférence. Merci également à Marie Fliscounakis et David Couyras leur aide précieuse concernant l'utilisation de COCAGNE. Merci bien sûr aussi à l'ensemble des membres du département avec qui je n'ai pas eu la chance de travailler, mais avec qui j'ai pu entretenir des échanges amicaux durant toute la durée de mon stage. Merci à tous pour leur accueil.

Enfin, je remercie Marina, ainsi que ma famille pour leur soutien.

RÉSUMÉ

Les Réacteurs à Eau Pressurisée (REP) constituent la majorité des réacteurs nucléaires civils en exploitation aujourd’hui à travers le monde. En particulier, c'est cette technologie qui équipe l'ensemble du parc nucléaire d'Électricité De France (EDF). Les réacteurs à eau pressurisée sont classés dans la catégorie des réacteurs thermiques, car ce sont principalement les neutrons lents, de faible énergie qui contribuent à la réaction de fission. L'eau légère, maintenue sous pression, joue à la fois le rôle de caloporteur et de modérateur. La partie active du cœur est constituée d'assemblages combustibles contenant de l'uranium faiblement enrichi en isotope 235. Autour de la partie active se situe le réflecteur : il s'agit d'une zone principalement constituée d'eau et d'acier qui sert à la fois à protéger la cuve des radiations, à ralentir les neutrons et à les réfléchir vers l'intérieur du cœur. Les neutrons participant à la réaction de fission, l'étude de leur comportement est primordiale pour comprendre le fonctionnement du réacteur. Ce comportement est régi par l'équation de transport des neutrons, qui est très complexe à résoudre numériquement et nécessite un temps de calcul très important. Les codes de cœur que nous allons utiliser ici résolvent donc une équation simplifiée afin d'approcher le comportement des neutrons dans le cœur, en un temps acceptable. Il s'agit de l'équation de la diffusion, ou d'équations de transport approchées de type SP_N , ou de transport pur S_N . Le réflecteur possédant des caractéristiques physiques radicalement différentes de celles du combustible, son dimensionnement est essentiel afin de décrire convenablement le comportement des neutrons. Les méthodes actuelles de calcul des paramètres du réflecteur d'EDF reposent sur la méthode de Lefebvre-Lebigot. Cette méthode s'applique lorsque l'on discrétise le continuum d'énergie des neutrons en deux groupes d'énergie, et que l'on travaille avec un opérateur de diffusion. Cette méthode permet de calculer les paramètres d'un réflecteur homogène.

L'objectif de cette étude est de mettre en place un schéma de calcul capable d'évaluer les paramètres de réflecteurs hétérogènes, pour un maillage énergétique quelconque supérieur ou égal à 2 groupes, et pouvant s'appliquer à des opérateurs de diffusion ou SP_N/S_N .

Pour ce faire, nous allons mettre en place deux schémas permettant de réaliser un tel calcul de réflecteur. La stratégie commune à ces deux schémas est de minimiser les écarts entre la distribution de puissance calculée par un code de cœur, et une distribution de puissance de référence, obtenue à partir d'un calcul APOLLO2 basé sur la méthode des caractéristiques (MOC).

- D'une part notre premier schéma de calcul utilise les modules d'OPTEX du code de cœur DONJON, développé par l'École Polytechnique de Montréal (EPM). La stratégie employée ici sera de minimiser une fonctionnelle représentant les écarts entre la distribution de puissance calculée par DONJON et la distribution de puissance de référence, en utilisant la méthode Generalized Perturbation Theory (GPT). La minimisation sera effectuée à l'aide de l'algorithme d'optimisation Parametric Linear Complementarity Pivoting (PLCP).
- D'autre part un schéma de calcul utilisant le code de cœur COCAGNE, développé par EDF. La stratégie employée ici est de mettre en place un problème d'assimilation de données à l'aide du module Assimilation de Données et Aide à l'Optimisation (ADAO) de la plate-forme SALOME, également développée par EDF. Ce problème équivaut à la minimisation d'une fonctionnelle, qui sera réalisée à l'aide de l'algorithme d'optimisation Limited Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (L-BFGS).

Dans les deux cas, les variables de contrôle de l'optimisation seront les coefficients de diffusion de chaque zone du réflecteur pour des calculs de diffusion, et les sections macroscopiques totales corrigées P-1 de chaque zone du réflecteur pour des calculs SP_N (ou des facteurs de correction de ces propriétés nucléaires).

Après une première étape de validation des schémas de calcul, des choix de modélisation relatifs aux opérateurs de transport et au maillage spatial du réflecteur ont été effectués. Les réflecteurs calculés par nos schémas ont été comparés aux réflecteurs initiaux, d'une part par rapport à une solution de transport de référence : on compare les nappes des écarts de puissance à la référence APOLLO2, homogènes par assemblage puis crayon par crayon. Puis, par rapport aux données expérimentales sur des indicateurs 3D macroscopiques : des calculs de concentration en bore critique lors de l'insertion successive de groupes de barres de contrôle ainsi que d'efficacité intégrale de ces barres.

Dans un premier temps, les calculs ont été effectués avec un opérateur de diffusion. On a évalué des réflecteurs à 2 groupes d'énergie en initialisant les paramètres à l'aide du modèle de Lefebvre-Lebigot. Celui-ci est très bien évalué, et l'effet de l'optimisation est faible, mais permet quand même d'obtenir des nappes d'écarts de puissance à la référence plus homogènes qu'initialement. Pour les comparaisons d'exploitation, on ne constate pas d'amélioration significative due à l'optimisation. Lorsque l'on raffine le maillage énergétique à 4 groupes, on initialise le réflecteur par condensation/homogénéisation du calcul de référence. Cette fois, on observe une amélioration significative des résultats avec le réflecteur obtenu en utilisant

nos schémas de calcul, sur les nappes des écarts de puissance. Cependant, les résultats sont toujours moins satisfaisants que lors des calculs à 2 groupes. Par contre, on retrouve les mêmes résultats qu'à 2 groupes lors des comparaisons à l'exploitation, ce qui est un résultat intéressant. On effectue ensuite des calculs en SP₃ à 4 et 8 groupes. On initialise alors toujours le réflecteur par condensation/homogénéisation du calcul de référence. À 4 groupes, on constate un net effet de l'opérateur SP₃ : on retrouve des nappes d'écarts comparables à celles obtenues avec le modèle Lefebvre-Lebigot. On observe encore une amélioration lorsque l'on raffine le maillage énergétique à 8 groupes. Le tableau 0.1 rassemble des indicateurs sur les nappes d'écarts de puissance à la référence, pour les différentes configurations de calculs, avant et après optimisation. E_{Δ_{abs}} est la moyenne des valeurs absolues des écarts de puissance à la référence, σ_Δ est l'écart type de la distribution des écarts, Δ_{max} et Δ_{min} sont respectivement l'écart maximum et minimum de la distribution des écarts. De plus, Δ_{Cb} et Δ_{eff} sont respectivement l'écart maximum de concentration en bore critique à la valeur expérimentale, sur l'ensemble des groupes de barres insérés et l'écart maximal d'efficacité des groupes de barres à la valeur expérimentale, sur l'ensemble des groupes de barres insérés.

Tableau 0.1 Tableau récapitulatif des résultats

		E _{Δ_{abs}} (%)	σ _Δ (%)	Δ _{max} (%)	Δ _{min} (%)	Δ _{Cb} (%)	Δ _{eff} (%)	
Diff	2 groupes	Avant	0.69	0.90	1.46	-2.54	7.2	5.5
		Après	0.54	0.66	1.04	2.10	7.3	5.5
	4 groupes	Avant	10.1	11.9	22.2	-19.3	8.8	9.3
		Après	1.01	1.42	3.83	-2.92	6.6	5.5
SP ₃	4 groupes	Avant	10.1	11.9	22.2	-19.3	X ¹	X ¹
		Après	0.66	0.82	1.69	-1.30	X ¹	X ¹
	8 groupes	Avant	10.4	12.2	22.8	-19.6	X ¹	X ¹
		Après	0.67	0.83	1.64	-1.36	X ¹	X ¹

Nos schémas de calcul permettent donc de simuler correctement des réflecteurs hétérogènes 2 groupes ou multi-groupes, pour des opérateurs de diffusion ou SP_N. L'optimisation permet de réduire les écarts de puissance à la référence. Cependant on observe de forts écarts dans les dernières rangées de crayon de la partie active du cœur, à l'interface cœur/réflecteur, dus d'une part à la modélisation en milieu infini des assemblages de la partie active qui atteint ses limites au voisinage du réflecteur. D'autre part, la modélisation homogène par assemblage du réflecteur ne permet pas de reproduire fidèlement les hétérogénéités de structure de celui-ci au niveau de l'interface. Ces deux pistes doivent être explorées dans des travaux futurs.

1. Non disponible.

ABSTRACT

With a third of the reactors in activity, the Pressurized Water Reactor (PWR) is today the most used reactor design in the world. This technology equips all the 19 EDF power plants. PWRs fit into the category of thermal reactors, because it is mainly the thermal neutrons that contribute to the fission reaction. The pressurized light water is both used as the moderator of the reaction and as the coolant. The active part of the core is composed of uranium, slightly enriched in uranium 235. The reflector is a region surrounding the active core, and containing mostly water and stainless steel. The purpose of the reflector is to protect the vessel from radiations, and also to slow down the neutrons and reflect them into the core. Given that the neutrons participate to the reaction of fission, the study of their behavior within the core is capital to understand the general functioning of how the reactor works. The neutrons behavior is ruled by the transport equation, which is very complex to solve numerically, and requires very long calculation. This is the reason why the core codes that will be used in this study solve simplified equations to approach the neutrons behavior in the core, in an acceptable calculation time. In particular, we will focus our study on the diffusion equation and approximated transport equations, such as SP_N or S_N equations. The physical properties of the reflector are radically different from those of the fissile core, and this structural change causes important tilt in the neutron flux at the core/reflector interface. This is why it is very important to accurately design the reflector, in order to precisely recover the neutrons behavior over the whole core. Existing reflector calculation techniques are based on the Lefebvre-Lebigot method. This method is only valid if the energy continuum of the neutrons is discretized in two energy groups, and if the diffusion equation is used. The method leads to the calculation of a homogeneous reflector.

The aim of this study is to create a computational scheme able to compute the parameters of heterogeneous, multi-group reflectors, with both diffusion and SP_N/S_N operators.

For this purpose, two computational schemes are designed to perform such a reflector calculation. The strategy used in both schemes is to minimize the discrepancies between a power distribution computed with a core code and a reference distribution, which will be obtained with an APOLLO2 calculation based on the method Method Of Characteristics (MOC).

- The first computational scheme is based on the OPTEX modules in DONJON, the core code developed at EPM. The strategy used here is to minimize a functional that

represents the discrepancies between the power distribution computed with DONJON and the reference power distribution, using the GPT. The minimization will be carried out with the Parametric Linear Complementarity Pivoting (PLCP) algorithm.

- The second scheme is based on the new core code COCAGNE, developed by EDF. The strategy used here is to set up a data assimilation problem, using the module ADAO of the platform SALOME, also developed by EDF. In our study, this problem is equivalent to minimizing a functional, which will be carried out using the Limited Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (L-BFGS) algorithm.

In both computational schemes, the optimization parameters, also called control variables, are the diffusion coefficients in each zone of the reflector, for diffusion calculations, and the P-1 corrected macroscopic total cross-sections in each zone of the reflector, for SP_N/S_N calculations (or correction factors on these parameters).

After a first validation of our computational schemes, the results are computed, always by optimizing the fast diffusion coefficient for each zone of the reflector. All the tools of the data assimilation have been used to reflect the different behavior of the solvers in the different parts of the core. Moreover, the reflector is refined in six separated zones, corresponding to the physical structure of the reflector. There will be then six control variables for the optimization algorithms. Simulations have been carried out to compare the results obtained by our computational schemes to those obtained with the initial reflectors, using several tools. First, a comparison to a reference power distribution where the discrepancies with respect to the reference APOLLO2 results are evaluated. We also evaluate the discrepancies with respect to the reference APOLLO2 power, down to the pin-by-pin scale. Then, comparisons with experimental data are considered, where 3D indicators such as critical boron concentration calculations when inserting control rods into the core, and integral efficiencies of these rod banks are evaluated.

First, the calculations are carried out using the diffusion operator. 2-group reflectors are computed using the Lefebvre-Lebigot reflector as the initial reflector. The initial reflector being well dimensioned, the effect of the optimization performed by our computational schemes is not important. Although we obtain discrepancies that are more homogeneous than the initial one, no significant improvement is observed when comparing the 3D indicators. We then chose to refine the energy mesh to perform 4-group reflectors. The initial reflector is obtained with a collapsing/homogenization of the reference calculation. This time, significant improvements in the results are observed for the discrepancies. Nevertheless, the results are

still less satisfying than the 2-group optimized reflector. On the 3D indicators, the results are very similar to those obtained with the 2-group optimized reflector, which is a very interesting result. Next, 4-group and 8-group simulations are carried out using a SP_3 operator. The initial reflector is still obtained by collapsing/homogenization of the reference calculation. The 4-group reflector shows a strong effect of the SP_3 operator: the discrepancies are similar to those obtained with the 2-group optimized reflector. A slight improvement is observed when the energy mesh is refined to 8-group calculations. The Table 0.2 sums up the results, with indicators on the power discrepancies distributions for the different cases. $E_{\Delta_{abs}}$ is the mean of the absolute values of the discrepancies, σ_{Δ} is the standard deviation of the discrepancies distributions, and Δ_{max} and Δ_{min} are respectively the maximum and minimum discrepancy. Δ_{Cb} and Δ_{eff} are respectively the maximum discrepancy between the computed and experimental critical boron, and the maximum discrepancy between the computed and experimental integral efficiency of the rod banks.

Table 0.2 Summary of the results

		$E_{\Delta_{abs}}$ (%)	σ_{Δ} (%)	Δ_{max} (%)	Δ_{min} (%)	$ \Delta_{Cb} $ (%)	$ \Delta_{eff} $ (%)
Diff	2 groups	Before	0.69	0.90	1.46	-2.54	7.2
		After	0.54	0.66	1.04	2.10	5.5
	4 groups	Before	10.1	11.9	22.2	-19.3	8.8
		After	1.01	1.42	3.83	-2.92	5.5
SP_3	4 groups	Before	10.1	11.9	22.2	-19.3	X ¹
		After	0.66	0.82	1.69	-1.30	X ¹
	8 groups	Before	10.4	12.2	22.8	-19.6	X ¹
		After	0.67	0.83	1.64	-1.36	X ¹

Our computational schemes are then able to compute heterogeneous, 2-group or multi-group reflectors, using diffusion or SP_N/S_N operators. The optimization performed reduces the discrepancies distribution between the power computed with the core codes and the reference power. However, there are two main limitations to this study: first the homogeneous modeling of the reflector assemblies doesn't allow to properly describe its physical structure near the core/reflector interface. Moreover, the fissile assemblies are modeled in infinite medium, and this model reaches its limit at the core/reflector interface. These two problems should be tackled in future studies.

1. Not available.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE	iii
REMERCIEMENTS	iv
RÉSUMÉ	v
ABSTRACT	viii
TABLE DES MATIÈRES	xi
LISTE DES TABLEAUX	xiv
LISTE DES FIGURES	xv
LISTE DES ANNEXES	xvii
LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS	xviii
CHAPITRE 1 INTRODUCTION	1
CHAPITRE 2 ÉLÉMENTS DE THÉORIE	4
2.1 Équations de la neutronique	4
2.1.1 L'équation de transport	5
2.1.2 Équations SP _N	8
2.1.3 L'équation de la diffusion	9
2.1.4 Homogénéisation et condensation	10
2.1.5 Méthode des éléments finis de Raviart-Thomas	12
2.2 Méthode des perturbations généralisées (GPT)	15
2.2.1 Position du problème	15
2.2.2 Résolution de l'équation singulière à sources	16
2.2.3 Calcul des dérivées	18
2.3 Assimilation de données	19
2.3.1 Position du problème	19
2.3.2 Approche BLUE	20
2.3.3 Approche 3D-VAR	21
2.4 Codes utilisés	22

2.4.1	Le code de cœur déterministe DONJON	22
2.4.2	Le code de cœur déterministe COCAGNE	24
2.4.3	Les modules d'OPTEX dans DONJON	28
2.4.4	Le module ADAO de la plateforme SALOME	29
CHAPITRE 3 CADRE GÉNÉRAL DE L'ÉTUDE ET MÉTHODES		30
3.1	Position du problème	30
3.1.1	Modélisation du cœur	30
3.1.2	Initialisation du réflecteur	31
3.2	Mise en place des méthodes de résolution	34
3.2.1	Le modèle de réflecteur OPTEX (EPM)	35
3.2.2	Le schéma de calcul COCAGNE/ADAO (EDF)	39
CHAPITRE 4 VALIDATION PRÉLIMINAIRE ET CHOIX DE MODÉLISATION		43
4.1	Conditions de validation	44
4.1.1	Mise en cohérence des fonctions objectifs	44
4.1.2	Initialisation du réflecteur	44
4.1.3	Choix des paramètres de résolution	44
4.2	Réalisation des cas test de validation	45
4.2.1	Réflecteur homogène - optimisation sur $D_{1,R}$	45
4.2.2	Réflecteur homogène - optimisation sur $(D_{1,R}, D_{2,R})$	49
4.2.3	Réflecteur à 2 zones - optimisation sur $(D_{1,R1}, D_{1,R2})$	52
4.2.4	Cas de calculs à 4 groupes d'énergie	55
4.3	Conclusions sur la validation	57
4.3.1	Résultats	57
4.3.2	Comparaison des deux schémas de calcul	57
4.4	Choix de modélisation	59
4.4.1	Modélisation de la partie active	59
4.4.2	Modélisation de la fonction objectif	59
4.4.3	Maillage du réflecteur	62
CHAPITRE 5 RÉSULTATS EN DIFFUSION		66
5.1	Résultats à 2 groupes d'énergie	66
5.1.1	Comparaisons à la nappe de puissance de référence	67
5.1.2	Recherche de concentration en bore critique	69
5.1.3	Efficacité intégrale des barres	71
5.1.4	Cartes d'activité	73

5.1.5	Conclusion sur les résultats à 2 groupes d'énergie	73
5.2	Résultats à 4 groupes d'énergie	74
5.2.1	Comparaisons à la nappe de puissance de référence	74
5.2.2	Recherche de concentration en bore critique	77
5.2.3	Efficacité intégrale des barres	78
5.2.4	Cartes d'activité	79
5.3	Conclusions sur les calculs en diffusion	79
CHAPITRE 6 RÉSULTATS EN SP ₃		81
6.1	Résultats à 4 groupes d'énergie	81
6.1.1	Comparaisons assemblage	82
6.1.2	Comparaisons crayon par crayon	83
6.1.3	Conclusion sur les calculs à 4 groupes d'énergie	85
6.2	Résultats à 8 groupes d'énergie	85
6.2.1	Comparaisons à la nappe de puissance de référence	86
6.3	Conclusions sur les calculs SP ₃	88
CHAPITRE 7 DISCUSSION ET CONCLUSION		91
RÉFÉRENCES		96
ANNEXES		99

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 0.1	Tableau récapitulatif des résultats	vii
Table 0.2	Summary of the results	x
Tableau 3.1	Comparaisons des réflecteurs initiaux	34
Tableau 4.1	Coefficients de diffusion après optimisation	47
Tableau 4.2	Coefficients de diffusion après optimisation	50
Tableau 4.3	Coefficients de diffusion après optimisation	54
Tableau 5.1	Concentration en bore critique avant et après optimisation	71
Tableau 5.2	Efficacité intégrale des groupes de barres avant et après optimisation . .	72
Tableau 5.3	écart aux réactivités expérimentales avant et après optimisation	73
Tableau 5.4	Concentration en bore critique avant et après optimisation	77
Tableau 5.5	Efficacité intégrale des groupes de barres avant et après optimisation . .	78
Tableau 5.6	écart aux réactivités expérimentales avant et après optimisation	79
Tableau 6.1	Comparaison des résultats à 4 groupes d'énergie en diffusion et en SP ₃	89
Tableau 6.2	Comparaison des résultats à 4 groupes et à 8 groupes d'énergie (calculs SP ₃)	89

LISTE DES FIGURES

Figure 3.1	Modélisation du huitième de cœur (1 à 33 : combustible ; R : réflecteur)	30
Figure 3.2	Schéma de calcul du modèle de réflecteur OPTEX (Hébert, 2013)	37
Figure 3.3	Schéma de calcul ADAO/COCAGNE	41
Figure 4.1	Nappe des écarts de puissance avant optimisation	46
Figure 4.2	Variations de la fonctionnelle en fonction de $D_{1,R}$	48
Figure 4.3	Nappes des écarts de puissance après optimisation	48
Figure 4.4	Nappes des écarts de puissance après optimisation	50
Figure 4.5	Variations de la fonctionnelle en fonction de $D_{1,R}$ et $D_{2,R}$	51
Figure 4.6	Modélisation du huitième de cœur (1 à 33 : combustible ; R ₁ , R ₂ : réflecteur)	53
Figure 4.7	Variations de la fonctionnelle en fonction de $D_{1,R1}$ et $D_{1,R2}$	53
Figure 4.8	Nappes des écarts de puissance après optimisation	55
Figure 4.9	Variations de la fonctionnelle en fonction de ($D_{1,R}, D_{2,R}$) (à gauche) et en fonction de ($D_{1,R}, D_{3,R}$) (à droite)	56
Figure 4.10	Nappes des écarts de puissance après optimisation - pondération de la fonctionnelle	61
Figure 4.11	Schéma général d'un huitième de réflecteur dans un REP	63
Figure 4.12	Modélisation du huitième de cœur (1 à 33 : combustible ; [R ₁ ;R ₆] : réflecteur)	63
Figure 4.13	Nappes des écarts de puissance après optimisation - maillage du réflecteur (2 zones à gauche, 6 zones à droite)	64
Figure 5.1	Nappes des écarts de puissance avant et après optimisation - 6 zones réflecteur	67
Figure 5.2	Nappes des écarts de puissance crayon par crayon avant et après optimisation - 6 zones réflecteur	69
Figure 5.3	Coupe de la modélisation neutronique d'un cœur de REP en 3D	70
Figure 5.4	Nappes des écarts de puissance avant et après optimisation - 4 groupes d'énergie, 6 zones réflecteur	75
Figure 5.5	Nappe des écarts de puissance crayon par crayon après optimisation - 4 groupes d'énergie, 6 zones réflecteur	76
Figure 6.1	Nappes des écarts de puissance après optimisation - 4 groupes d'énergie, calcul en SP ₃ , 6 zones réflecteur	82

Figure 6.2	Nappe des écarts de puissance crayon par crayon après optimisation - 4 groupes d'énergie, calcul SP ₃ , 6 zones réflecteur	84
Figure 6.3	Nappes des écarts de puissance après optimisation - 8 groupes d'énergie, calcul SP ₃ , 6 zones réflecteur	86
Figure 6.4	Nappe des écarts de puissance crayon par crayon après optimisation - 8 groupes d'énergie, calcul SP ₃ , 6 zones réflecteur	87
Figure A.1	Les deux situations possibles lors d'une itération de l'algorithme d'optimisation	101

LISTE DES ANNEXES

Annexe A	Méthode d'optimisation PLCP	99
Annexe B	Méthode d'optimisation L-BFGS	103

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

REP	Réacteur à Eau Pressurisée
PWR	Pressurized Water Reactor
EPM	École Polytechnique de Montréal
IGN	Institut de Génie Nucléaire
GAN	Groupe d'Analyse Nucléaire
EDF	Électricité De France
SINETICS	Simulation Neutronique, Technologie de l'Information et Calculs Scientifiques
CEA	Commissariat à l'Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives
GPT	Generalized Perturbation Theory
BLUE	Best Linear Unbiased Estimate
ADAO	Assimilation de Données et Aide à l'Optimisation
ADI	Alternating Direction Implicit
MOC	Method Of Characteristics
PLCP	Parametric Linear Complementarity Pivoting
L-BFGS	Limited Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno
TBH	Toutes Barres Hautes

CHAPITRE 1

INTRODUCTION

Avec deux tiers des réacteurs en service, les Réacteurs à Eau Pressurisée (REP) représentent aujourd’hui la technologie de réacteur nucléaire civil la plus répandue dans le monde. Ces réacteurs utilisent de l’eau légère sous pression (environ 150 MPa) à la fois comme modérateur et comme caloporteur. Il s’agit de réacteurs thermiques, c’est-à-dire que les neutrons participant à la réaction de fission doivent être ralentis. La partie active du cœur est composée d’assemblages combustibles contenant de l’oxyde d’uranium (UO_2) faiblement enrichi en uranium 235 ou bien d’un mélange d’oxyde d’uranium et d’oxyde de plutonium (MOX). Les REP ont un rendement thermique estimé à 33 %.

Les réactions de fissions dans le réacteur sont dues à une interaction neutron-matière, lorsqu’un neutron entre en collision avec un noyau lourd. On comprend alors que l’étude des populations de neutrons et de leur comportement au sein du réacteur est essentielle pour décrire le fonctionnement de celui-ci. Ce comportement est régi par l’équation de transport des neutrons. Il existe plusieurs méthodes de résolution de cette équation, qui peuvent être distinguées en deux classes : les méthodes stochastiques et les méthodes déterministes. Dans cette étude, nous travaillerons uniquement avec des codes déterministes. L’équation de transport est néanmoins très lourde à résoudre numériquement et dans les codes de cœur que nous expliciterons plus loin, on préfère résoudre des équations approchées telles que l’équation de diffusion ou les équations SP_N développées dans la suite de ce document.

Dans un REP, le cœur du réacteur est entouré par des composants appelés globalement réflecteur. Ce réflecteur, constitué principalement de métal et d’eau, sert à protéger la cuve des radiations engendrées par les réactions de fissions au sein du cœur. Le réflecteur sert également à ralentir les neutrons et les réfléchir à l’intérieur du cœur afin d’augmenter l’efficacité du réacteur. Le réflecteur possède des propriétés radicalement différentes de celles du cœur. La discontinuité induite à l’interface cœur/réflecteur représente une difficulté pour calculer le flux neutronique de manière précise dans le cœur. La modélisation du réflecteur est donc une étape cruciale de la simulation neutronique des coeurs. Actuellement, EDF utilise une modélisation des réflecteurs pour des calculs de diffusion à deux groupes d’énergie basée sur la méthode de Lefebvre (Marguet, 2011). Cette méthode consiste à imposer les rapports $\frac{J_1}{\Phi_1}$, $\frac{J_2}{\Phi_2}$ et $\frac{\Phi_2}{\Phi_1}$ à l’interface cœur/réflecteur par rapport à un calcul de transport 1D.

Φ_j et J_j sont respectivement le flux et le courant neutronique du groupe d'énergie j à l'interface cœur/réflecteur. Ce système étant sous-déterminé, les coefficients de diffusion de la partie active sont fixés à une valeur moyenne. Cependant, le champ d'application de cette méthode est restreint à des calculs de diffusion à deux groupes d'énergie. Lorsque l'on sort de ce champ d'application, on peut obtenir le réflecteur de manière explicite, à partir d'un calcul MOC (Sanchez *et al.*, 2010) détaillé, ce qui peut engendrer une volumétrie importante des données. Afin d'obtenir un modèle de réflecteur simplifié, homogène par assemblage et pour des opérateurs simplifiés tels que l'opérateur de diffusion ou SP_N , il faut faire appel à des procédures d'optimisation sur différents paramètres du cœur. On peut envisager par exemple d'optimiser les albédos à l'interface cœur/réflecteur, en minimisant les écarts avec des valeurs de référence obtenues à la suite de calculs de transport plus précis (Sandrin, 2010).

L'objectif de cette étude est de développer une méthode de calcul de réflecteurs minimisant les écarts entre la nappe de puissance calculée à l'aide d'un code de cœur et une nappe de puissance de référence. La nappe de puissance de référence est obtenue à partir d'un calcul utilisant le code de réseau APOLLO2, développé par le Commissariat à l'Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives (CEA) (Sanchez *et al.*, 2010). L'intérêt principal de la méthode développée ici est qu'elle permet de modéliser des réflecteurs multi-groupes, hétérogènes, et pouvant être utilisés pour des calculs de diffusion ou des calculs SP_N .

La première étape de cette étude est l'implémentation de cette méthode de calcul des réflecteurs à l'aide du code de cœur DONJON (Hébert *et al.*, 2012b), développé par l'EPM, en utilisant les modules d'OPTEX (Chambon, 2012). Par la suite, une méthode similaire de calcul de réflecteurs sera implémentée à l'aide du code de cœur COCAGNE (Courau *et al.*, 2008) développé par EDF R&D, et du module ADAO de la plateforme SALOME (Ribes, 2007) (disponible en open source dans la version 7 de SALOME). L'intérêt de cette démarche est d'obtenir un modèle de réflecteur adaptable aux schémas de calculs de l'EPM et d'EDF, et de pouvoir valider correctement les deux méthodes en comparant leurs résultats.

Nous débuterons ce document par un premier chapitre rassemblant les éléments de théorie nécessaires à la compréhension des méthodes mises en place. Par la suite, nous explicitrons notre cadre général de travail : la description du cœur sur lequel les méthodes seront testées, ainsi que les différents schémas de calcul. Ensuite, nous exposerons la démarche de validation préliminaire de nos méthodes sur des cas tests identifiés, et également les choix de modélisation découlant de cette première étape de validation. Enfin, dans les deux chapitres suivant cette étape de validation, nous exposerons nos résultats à la fois pour des calculs en diffusion et pour des calculs SP_3 . Dans cette partie, nous identifierons les effets des réflecteurs

évalués par nos méthodes. Ces réflecteurs seront calculés principalement à 2, 4 et 8 groupes d'énergie. Nous obtenons, dans la majorité des cas, une amélioration significative pour les nappes d'écarts de puissance à la distribution de référence dans le cœur, ainsi que pour des comparaisons aux données d'exploitation, ce qui confirme l'intérêt des méthodes de calcul de réflecteurs développées dans ce document.

CHAPITRE 2

ÉLÉMENTS DE THÉORIE

Ce chapitre est consacré aux éléments de théorie nécessaires à la mise en place des schémas de calculs de réflecteurs de cette étude. Dans un premier temps, nous introduirons les notions et les équations principales de la neutronique (équation de transport, équations simplifiées SP_N, équation de la diffusion). Par la suite, nous expliciterons les méthodes numériques et d'optimisation utilisées dans cette étude (théorie des perturbations généralisées, théorie de l'assimilation de données). Enfin, nous décrirons les différents codes utilisés pour cette étude, ainsi que leurs fonctionnalités principales.

On note que dans tout ce chapitre, les lettres en caractères gras désigneront des grandeurs vectorielles, et les lettres en caractères simples désigneront des grandeurs scalaires.

2.1 Équations de la neutronique

Dans cette partie, nous travaillerons avec la grandeur fondamentale de la neutronique des réacteurs : le flux neutronique noté $\Phi(\mathbf{r}, V_n, \boldsymbol{\Omega}, t)$ où :

- \mathbf{r} est la variable position.
- V_n est la variable vitesse telle que $\mathbf{V}_n = \frac{d\mathbf{r}}{dt}$, $V_n = |\mathbf{V}_n|$ et $\boldsymbol{\Omega} = \frac{\mathbf{V}_n}{V_n}$.
- t est la variable temporelle.

En notant $n(\mathbf{r}, V_n, \boldsymbol{\Omega}, t)$ la densité de particules, on définit alors le flux neutronique par :

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

En intégrant le flux neutronique sur l'angle solide $d^2\boldsymbol{\Omega}$ autour de $\boldsymbol{\Omega}$, on obtient le flux intégré :

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

Ce flux intégré représente la distance parcourue par tous les neutrons contenus dans un volume de 1 cm³ (Hébert, 2009). Cette grandeur a plus de sens physique que le flux neutronique, et

c'est celle-ci qui sera étudiée par la suite.

2.1.1 L'équation de transport

Présentation de l'équation

L'équation de transport est l'équation de base de la neutronique des réacteurs. Il s'agit d'un bilan neutronique sur l'hypervolume $d^3\mathbf{r} d^2\Omega dV_n(\mathbf{r})$ autour du point $(\mathbf{r}, \Omega, V_n(\mathbf{r}))$ pendant un intervalle de temps Δt . Elle se présente sous la forme :

$$\begin{aligned} n(\mathbf{r}, V_n, \Omega, t + \Delta t) - n(\mathbf{r}, V_n, \Omega, t) = & - \Sigma_t(\mathbf{r}, V_n) \Phi(\mathbf{r}, V_n, \Omega, t) \Delta t \\ & - \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \Phi(\mathbf{r}, V_n, \Omega, t) \Delta t \\ & + Q(\mathbf{r}, V_n, \Omega, t) \Delta t \end{aligned} \quad (2.3)$$

où :

- $n(\mathbf{r}, V_n, \Omega, t + \Delta t) - n(\mathbf{r}, V_n, \Omega, t)$ est la variation de la quantité de neutrons dans l'hypervolume pendant l'intervalle Δt .
- $\Sigma_t(\mathbf{r}, V_n) \Phi(\mathbf{r}, V_n, \Omega, t) \Delta t$ est la quantité de neutrons perdus par collision. $\Sigma_t(\mathbf{r}, V_n)$ est la section macroscopique totale du milieu.
- $\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \Phi(\mathbf{r}, V_n, \Omega, t) \Delta t$ est la quantité de neutrons qui sortent du volume $d^3\mathbf{r}$ pendant Δt .
- $Q(\mathbf{r}, V_n, \Omega, t) \Delta t$ est la quantité de neutrons créées dans l'hypervolume pendant Δt . Ce terme est appelé terme de source.

En divisant l'équation 2.4 par Δt et en faisant tendre Δt vers 0, on obtient :

$$\frac{1}{V_n} \frac{\partial \Phi(\mathbf{r}, V_n, \Omega, t)}{\partial t} + \Sigma_t(\mathbf{r}, V_n) \Phi(\mathbf{r}, V_n, \Omega, t) + \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \Phi(\mathbf{r}, V_n, \Omega, t) = Q(\mathbf{r}, V_n, \Omega, t) \quad (2.4)$$

En conditions stationnaires, ce qui sera le cas tout au long de cette étude, le premier terme de l'équation 2.4 s'annule. De plus, on pose la variable énergie E telle que $E = \frac{mV_n^2}{2}$. L'équation de transport devient alors :

$$\Sigma_t(\mathbf{r}, E) \Phi(\mathbf{r}, E, \Omega, t) + \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \Phi(\mathbf{r}, E, \Omega, t) = Q(\mathbf{r}, E, \Omega, t) \quad (2.5)$$

Terme de source

Explicitons maintenant le terme de source présent dans l'équation de transport. En conditions stationnaires, et dans un milieu isotrope, ce terme s'écrit :

$$Q(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) = \frac{1}{2\pi} \int_{4\pi} d^2\boldsymbol{\Omega}' \int_0^\infty dE' \Sigma_s(\mathbf{r}, E \leftarrow E', \boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{\Omega}') \Phi(\mathbf{r}, E', \boldsymbol{\Omega}') + \frac{1}{4\pi k_{\text{eff}}} Q^{\text{fiss}}(\mathbf{r}, E) \quad (2.6)$$

où :

- $\Sigma_s(\mathbf{r}, E \leftarrow E', \boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{\Omega}')$ est la section efficace macroscopique de diffusion de l'énergie E' vers l'énergie E , et de l'angle solide $\boldsymbol{\Omega}'$ vers l'angle solide $\boldsymbol{\Omega}$. Celle-ci inclut les réactions de diffusion ainsi que les réactions (n, xn).
- k_{eff} est le facteur multiplicatif. Il s'agit d'un facteur multiplicatif sur les sources de fission afin de maintenir le système en état stationnaire. En effet, si le taux de production des neutrons de fission n'est plus égal à la somme de l'absorption et du taux de fuites, on perd la condition de stationnarité.
- $Q^{\text{fiss}}(\mathbf{r}, E)$ est le terme de source de fission :

$$Q^{\text{fiss}}(\mathbf{r}, E) = \sum_{j=1}^{J^{\text{fiss}}} \chi_j(E) \int_0^\infty dE' \nu \Sigma_{f,j}(\mathbf{r}, E') \Phi(\mathbf{r}, E') \quad (2.7)$$

où J^{fiss} est le nombre total d'isotopes fissiles ; $\chi_j(E)$ est le spectre de fission de l'isotope j , c'est-à-dire la densité de probabilité qu'a l'isotope j d'émettre un neutron à l'énergie E ; et $\nu \Sigma_{f,j}(\mathbf{r}, E')$ est le nombre de neutrons émis par fission multiplié par la section efficace macroscopique de fission de l'isotope j .

L'équation de transport multi-groupe

L'équation de transport multi-groupe est obtenue par une discréétisation en énergie de l'équation de transport différentielle donnée par l'équation 2.5. Le continuum d'énergie est ainsi discréétisé en intervalles $[E_g; E_{g-1}[$, ($g \in [1; G]$). L'équation de transport devient alors :

$$\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \Phi_g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) + \Sigma_g(\mathbf{r}) \Phi_g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = Q_g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) \quad (2.8)$$

où le terme de source multi-groupe est donné par :

$$Q_g(\mathbf{r}, \Omega) = \sum_{h=1}^G \int_{4\pi} d^2\Omega' \Sigma_{s,g \leftarrow h}(\mathbf{r}, \Omega') \Phi_h(\mathbf{r}') + \frac{1}{4\pi k_{\text{eff}}} \sum_{j=1}^{J^{\text{fiss}}} \chi_{j,g} \sum_{h=1}^G \nu \Sigma_{f,j,h}(\mathbf{r}) \Phi_h(\mathbf{r}) \quad (2.9)$$

On obtient alors un système d'équations couplées très complexe à résoudre numériquement. Les codes que nous allons utiliser dans cette étude s'appuient sur la résolution d'équations simplifiées : les équations SP_N et l'équation de la diffusion, issues de l'approximation P_n des harmoniques sphériques. Cependant, il est important de noter que ces équations prennent en compte des hypothèses supplémentaires qui ne relèvent pas de l'approximation P_n, comme on le verra par la suite.

Conditions de continuité et conditions aux frontières

Afin de résoudre l'équation de transport, il est nécessaire de définir des conditions aux frontières, reliant le flux entrant au flux sortant d'un élément de volume donné. Soit un élément de volume V entouré par une frontière ∂V. Soit la normale à la frontière au point \mathbf{r}_s , notée $\mathbf{N}(\mathbf{r}_s)$. Les différentes conditions aux frontières rencontrées sont :

- La réflexion spéculaire : c'est une condition de symétrie qui impose que le flux sortant soit égal au flux entrant :

$$\Phi(\mathbf{r}_s, E, \Omega^+) = \Phi(\mathbf{r}_s, E, \Omega^-) \quad (2.10)$$

où $\Omega^+ \cdot \mathbf{N}(\mathbf{r}_s) = -\Omega^- \cdot \mathbf{N}(\mathbf{r}_s)$ et $(\Omega^+ \times \Omega^-) \cdot \mathbf{N}(\mathbf{r}_s) = 0$

- La condition de réflexion isotrope : on suppose que chaque neutron sortant de l'élément de volume V est réfléchi dans le même volume de manière isotrope. Ainsi :

$$\Phi(\mathbf{r}_s, E, \Omega^-) = \frac{\beta}{\pi} \int_{\Omega^+ \cdot \mathbf{N}(\mathbf{r}_s) > 0} d^2\Omega^+ [\Omega^+ \cdot \mathbf{N}(\mathbf{r}_s)] \Phi(\mathbf{r}_s, E, \Omega^+) \quad (2.11)$$

avec $\Omega^- \cdot \mathbf{N}(\mathbf{r}_s) < 0$, et où β est un coefficient compris entre 0 et 1 et appelé albedo. Lorsque $\beta = 0$, on a une condition de flux nul à la frontière et l'ensemble des neutrons sortent de l'élément de volume V. Lorsque $\beta = 1$, les neutrons incidents sont réfléchis à l'intérieur de l'élément de volume V. Cette condition aux frontières est évidemment une approximation. Cependant, elle reflète assez bien le comportement des neutrons thermiques, ce qui est intéressant, car ce sont principalement ces derniers qui sont res-

ponsables de la réaction de fission au sein du réacteur. De plus, elle donne lieu à des calculs moins complexes que la réflexion spéculaire.

2.1.2 Équations SP_N

L'approximation P_n

L'approximation P_n consiste à découpler la dépendance du flux neutronique et du terme de source par rapport à la variable spatiale et angulaire. Pour ce faire, on réalise un développement en séries harmoniques sphériques de ces deux grandeurs (Hébert, 2006). On écrit :

$$\Phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \sum_{l=0}^n \frac{2l+1}{4\pi} \sum_{m=-l}^l \Phi_l^m(\mathbf{r}) R_l^m \quad (2.12)$$

$$Q(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \sum_{l=0}^n \frac{2l+1}{4\pi} \sum_{m=-l}^l Q_l^m(\mathbf{r}) R_l^m \quad (2.13)$$

où le terme R_l^m est une harmonique sphérique décomposable en polynômes de Legendre (Hébert, 2009).

Les équations SP_N

Les équations SP_N sont issues de l'approximation P_n en 1D. Dans ce cas, les deux approximations sont équivalentes, et les équations SP_N s'écrivent alors :

$$\frac{l}{2l+1} \frac{d}{dx} \Phi_{l-1}(x) + \frac{l+1}{2l+1} \frac{d}{dx} \Phi_{l+1}(x) + \Sigma(x) \Phi_l(x) = Q_l(x) \quad (2.14)$$

Pour passer aux équations SP_N généralisées en 2D ou 3D, une technique consiste à remplacer le terme $\frac{d}{dx}$ par l'opérateur de divergence lorsque l est pair et par l'opérateur gradient lorsque l est impair (Gelbard, 1960). On obtient alors le système des équations SP_N :

$$\begin{cases} \frac{l}{2l+1} \nabla \cdot \Phi_{l-1}(\mathbf{r}) + \frac{l+1}{2l+1} \nabla \cdot \Phi_{l+1}(\mathbf{r}) + \Sigma(\mathbf{r}) \Phi_l(\mathbf{r}) = Q_l(\mathbf{r}) & \text{si } l \text{ est pair} \\ \frac{l}{2l+1} \nabla \Phi_{l-1}(\mathbf{r}) + \frac{l+1}{2l+1} \nabla \Phi_{l+1}(\mathbf{r}) + \Sigma(\mathbf{r}) \Phi_l(\mathbf{r}) = \mathbf{Q}_l(\mathbf{r}) & \text{si } l \text{ est impair} \end{cases} \quad (2.15)$$

Ce sont ces équations qui seront résolues par les codes de cœur utilisés dans cette étude lorsque nous évaluerons des réflecteurs dans le cadre de calculs SP₃.

2.1.3 L'équation de la diffusion

L'équation de diffusion est également issue de l'approximation P_n des harmoniques sphériques développée à l'ordre $n=1$. Seuls les deux premiers termes sont alors conservés, et l'équation 2.12 discrétisée s'écrit alors :

$$\Phi_g(\mathbf{r}, \Omega) = \frac{1}{4\pi} [\Phi_g(\mathbf{r}) + 3\Omega \cdot \mathbf{J}_g(\mathbf{r})] \quad (2.16)$$

Ici, $\mathbf{J}_g(\mathbf{r})$ est la densité de courant angulaire : $\mathbf{J}_g(\mathbf{r}) = \int_{4\pi} d^2\Omega \ \Omega \cdot \Phi_g(\mathbf{r}, \Omega)$. En intégrant l'équation 2.16 dans l'équation 2.8 et en intégrant sur l'angle solide, on obtient l'équation de la diffusion comme suit :

$$\Sigma_g(\mathbf{r})\Phi_g(\mathbf{r}) + \nabla \cdot \mathbf{J}_g = \sum_{h=0}^G \Sigma_{s,g \leftarrow h}(\mathbf{r})\Phi_h(\mathbf{r}) + \frac{\chi(E)}{k_{\text{eff}}} \sum_{h=0}^G \nu \Sigma_{f,h}(\mathbf{r})\Phi_h(\mathbf{r}) \quad (2.17)$$

La loi de Fick

La loi de Fick est une loi classique de la physique qui relie le courant de diffusion au flux. Cette loi générale est applicable à la neutronique et s'écrit :

$$\mathbf{J}_g(\mathbf{r}) = -D_g(\mathbf{r})\nabla\Phi_g(\mathbf{r}) \quad (2.18)$$

où D_g est appelé coefficient de diffusion. Cette grandeur est fondamentale dans notre étude, il s'agit d'un des paramètres que nous allons chercher à optimiser pour le réflecteur par la suite. La précision des calculs de diffusion repose en effet en grande partie sur la manière dont est modélisé ce coefficient. En introduisant la loi de Fick dans l'équation 2.17, on obtient :

$$-\nabla \cdot D_g(\mathbf{r})\nabla\Phi_g(\mathbf{r}) + \Sigma_g(\mathbf{r})\Phi_g(\mathbf{r}) = \sum_{h=0}^G \Sigma_{s,g \leftarrow h}(\mathbf{r})\Phi_h(\mathbf{r}) + \frac{\chi(E)}{k_{\text{eff}}} \sum_{h=0}^G \nu \Sigma_{f,h}(\mathbf{r})\Phi_h(\mathbf{r}) \quad (2.19)$$

L'équation de diffusion, comme les équations SP_N , est donc en fait un problème aux valeurs propres. La solution triviale $\Phi(\mathbf{r}) = 0$ n'a évidemment pas de sens physique. Il existe une infinité de solutions à ce problème pour différentes valeurs de k_{eff} . Cependant une seule de ces solutions a un sens physique : la solution fondamentale, qui correspond au k_{eff} le plus grand parmi toutes les solutions possibles. En effet, seule cette solution permet de conserver un flux positif en tout point. Les autres valeurs de k_{eff} solutions du problème 2.19 sont appelées harmoniques. Physiquement, le k_{eff} correspond au rapport entre les nombres de neutrons entre deux générations successives. On dit alors que lorsque $k_{\text{eff}} \geq 1$, le réacteur est sur-critique,

et lorsque $k_{\text{eff}} \leq 1$, qu'il est sous-critique. Enfin lorsque $k_{\text{eff}} = 1$, le réacteur est dit critique. C'est la situation qui est recherchée dans l'état stationnaire et le contrôle du réacteur doit être effectué dans ce sens.

Conditions de continuité et conditions aux frontières

Comme dans le cas de l'équation de transport, il convient de traiter les conditions de continuité ainsi que les conditions aux frontières. On impose au flux et au courant d'être continus à l'interface entre deux matériaux différents au sein du réacteur. Si l'on suppose une interface plane infinie entre deux matériaux située en x_0 et de normale $\mathbf{N} = (1,0,0)$, la condition de continuité sur cette interface se traduit alors par :

$$\begin{aligned} \forall (y, z) \in \mathbb{R}^2 \quad & \Phi_g(x_0^-, y, z) = \Phi_g(x_0^+, y, z) \\ \forall (y, z) \in \mathbb{R}^2 \quad & \mathbf{J}_g(x_0^-, y, z) \cdot \mathbf{N} = \mathbf{J}_g(x_0^+, y, z) \cdot \mathbf{N} \end{aligned} \quad (2.20)$$

Aux frontières du réacteur, il existe plusieurs conditions possibles. Considérons une frontière notée ∂W_i :

- La condition de flux nul : $\Phi_g(\mathbf{r}) = 0$ si $\mathbf{r} \in \partial W_i$. Cette condition est néanmoins peu physique puisqu'elle suppose une absence de neutrons sur la frontière ∂W_i .
- La condition d'albédo :

$$D_g(\mathbf{r}) \nabla \Phi_g(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{N}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \frac{1 - \beta(\mathbf{r})}{1 + \beta(\mathbf{r})} \Phi_g(\mathbf{r}) = 0 \quad \text{si } \mathbf{r} \in \partial W_i \quad (2.21)$$

où $\beta(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{J}_g^-}{\mathbf{J}_g^+}$ est appelé l'Albedo, et \mathbf{J}_g^- et \mathbf{J}_g^+ sont les courants respectivement sortant et entrant. Lorsque $\beta(\mathbf{r}) = 0$, on a une condition de courant nul à la frontière et l'ensemble des neutrons sorts de l'élément de volume. Lorsque $\beta(\mathbf{r}) = 1$, on a une condition de symétrie.

2.1.4 Homogénéisation et condensation

Dans cette étude, nous allons faire appel à des procédures de condensation et d'homogénéisation des sections et des flux (Courau, 2004). Nous disposerons souvent de bibliothèques de

sections et de flux à 26 groupes d'énergie, avec une discréétisation fine en espace et nous aurons besoin d'obtenir les mêmes données avec un maillage énergétique et spatial plus grossier. L'objet de ces procédures de condensation et d'homogénéisation est de conserver les taux de réaction dans le cœur, lorsque l'on modélise le maillage énergétique ou spatial plus ou moins grossièrement.

Les flux et les sections sont définis dans un espace à $N \times G$ dimensions (N régions spatiales et G groupes d'énergie). On définit alors des macro-régions (N_m , $m \in [1, M]$) et des macro-groupes d'énergie (G_k , $k \in [1, K]$). Les flux et les sections homogénisés et condensés sont alors définis dans un espace à $M \times K$ dimensions. La réunion des macro-groupes d'énergie redonne l'ensemble complet des groupes d'énergie de départ, et la réunion des macro-régions redonne l'ensemble des régions de départ. Les différentes grandeurs utiles sont condensées et homogénisées comme suit (on ne notera pas la dépendance en espace, afin d'alléger les notations) :

- Les volumes :

$$V_m = \sum_{i \in N_m} V_i \quad (2.22)$$

- Les flux :

$$\Phi_{m,k} = \frac{1}{V_m} \sum_{i \in N_m} \sum_{g \in G_k} \Phi_{i,g} V_i \quad (2.23)$$

- Les sections efficaces totales :

$$\Sigma_{m,k} = \frac{1}{V_m \Phi_{m,k}} \sum_{i \in N_m} \sum_{g \in G_k} \Phi_{i,g} V_i \Sigma_{i,g} \quad (2.24)$$

- Les sections efficaces de diffusion :

$$\Sigma_{s,m,k \leftarrow l} = \frac{1}{V_m \Phi_{m,k}} \sum_{i \in N_m} \sum_{g \in G_k} \sum_{h \in G_l} \Phi_{i,h} V_i \Sigma_{s,i,g \leftarrow h} \quad (2.25)$$

- Les sections efficaces de fission :

$$\nu \Sigma_{f,m,k} = \frac{1}{V_m \Phi_{m,k}} \sum_{i \in N_m} \sum_{g \in G_k} \Phi_{i,g} V_i \nu \Sigma_{f,i,g} \quad (2.26)$$

- Les spectres de fission :

$$\chi_{m,k} = \frac{\sum_{i \in N_m} V_i \sum_{j=1}^{J_{\text{fiss}}} \sum_{g \in G_k} \chi_{g,j} \sum_{h=1}^G \nu \Sigma_{f,i,h,j} \Phi_{i,h}}{V_m \sum_{j=1}^{J_{\text{fiss}}} \sum_{h=1}^K \nu \Sigma_{f,m,h,j} \Phi_{m,h}} \quad (2.27)$$

où $\nu\Sigma_{f,m,h,j}$ est la section efficace de fission de l'isotope fissile désigné par l'indice j .

2.1.5 Méthode des éléments finis de Raviart-Thomas

Les codes de cœur déterministes utilisés tout au long de cette étude reposent sur la méthode des éléments finis de Raviart-Thomas pour résoudre numériquement l'équation de la diffusion ou les équations SP_N et calculer le flux neutronique dans l'ensemble du réacteur.

Les méthodes des éléments finis permettent d'approcher la solution d'équations aux dérivées partielles linéaires sur un domaine compact, et avec des conditions aux bords et à l'intérieur du domaine. Ces méthodes reposent sur le découpage de l'espace en un grand nombre de parallélépipèdes. On choisit ensuite une base de fonctions dans laquelle les grandeurs du problème sont décomposées. Un élément est défini par l'association d'une géométrie et d'une base de fonctions. La méthode de Raviart-Thomas est issue d'une formulation duale des éléments finis, présentée par Raviart et Thomas (Raviart et Thomas, 1977). Il s'agit d'une méthode des éléments finis caractérisée par :

- Une condition essentielle (condition imposée a priori) qui impose à la composante du courant neutronique \mathbf{J} orthogonale à chaque interface de chaque élément d'être continue.
- Une condition naturelle (obtenue à la convergence de la méthode) : le flux sera continu aux interfaces entre les éléments après convergence.

Cette formulation est intéressante, car elle permet d'appliquer une méthode de préconditionnement des matrices \mathbb{A} et \mathbb{B} (voir 2.4.2) Alternating Direction Implicit (ADI) (Hébert, 1986), afin de simplifier la résolution des équations aux valeurs propres telles que l'équation de la diffusion ou les équations SP_N et de calculer le flux neutronique dans le réacteur.

Soit une équation aux valeurs propres :

$$\mathbb{A}\Phi = \mathbf{S} \quad (2.28)$$

La méthode ADI consiste à introduire une matrice \mathbb{M} suffisamment proche de \mathbb{A}^{-1} . Pour cela, on décompose \mathbb{A} selon :

$$\mathbb{A} = \mathbb{U} + \mathbb{P}_x \mathbb{X} \mathbb{P}_x^T + \mathbb{P}_y \mathbb{Y} \mathbb{P}_y^T + \mathbb{P}_z \mathbb{Z} \mathbb{P}_z^T \quad (2.29)$$

où \mathbb{U} est la matrice diagonale contenant les éléments diagonaux de \mathbb{A} . \mathbb{X} , \mathbb{Y} et \mathbb{Z} sont des matrices contenant les éléments non diagonaux de \mathbb{A} . \mathbb{P}_x , \mathbb{P}_y et \mathbb{P}_z sont des matrices de permutation. On a alors :

$$\mathbb{M} = (\mathbb{P}_z \tilde{\mathbb{Z}}^{-1} \mathbb{P}_z^T) \mathbb{U} (\mathbb{P}_y \tilde{\mathbb{Y}}^{-1} \mathbb{P}_y^T) \mathbb{U} (\mathbb{P}_x \tilde{\mathbb{X}}^{-1} \mathbb{P}_x^T) \quad (2.30)$$

avec :

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbb{X}} &= \mathbb{X} + \mathbb{P}_x^T \mathbb{U} \mathbb{P}_x \\ \tilde{\mathbb{Y}} &= \mathbb{Y} + \mathbb{P}_y^T \mathbb{U} \mathbb{P}_y \\ \tilde{\mathbb{Z}} &= \mathbb{Z} + \mathbb{P}_z^T \mathbb{U} \mathbb{P}_z\end{aligned}\quad (2.31)$$

Alors on peut multiplier l'équation 2.28 par \mathbb{M} et on résout l'équation 2.28 par itérations successives comme suit :

$$\begin{cases} \Phi^{(0)} \text{ donné} \\ \forall j \geq 0, \quad \Phi^{(j+1)} = \Phi^{(j)} + \mathbb{M}(\mathbf{S} - \mathbf{A}\Phi^{(j)}) \end{cases} \quad (2.32)$$

Cette méthode est applicable si l'équation 2.29 est valide et si la norme de \mathbb{M} est strictement inférieure à 1 ce qui est le cas si l'on utilise les éléments finis de Raviart-Thomas.

Notons l'équation de diffusion monocinétique : $-\nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}) \nabla \phi(\mathbf{r}) + \Sigma_r(\mathbf{r})\Phi(\mathbf{r}) = Q(\mathbf{r})$. Les grandeurs de cette équation sont décomposées dans deux bases polynomiales : la base de polynômes scalaires $\{u_k(\mathbf{r}), k \in [1, K_1]\}$ et la base de polynômes vectoriels $\{\mathbf{v}_k(\mathbf{r}), k \in [1, K_2]\}$. Les grandeurs de la neutronique sont alors décomposées dans ces bases comme suit :

$$\begin{aligned}\Phi(\mathbf{r}) &= \sum_{k=1}^{K_1} \phi_k u_k(\mathbf{r}) \quad ; \quad \delta\Phi(\mathbf{r}) = \sum_{k=1}^{K_1} \delta\phi_k u_k(\mathbf{r}) \\ \mathbf{J}(\mathbf{r}) &= \sum_{k=1}^{K_2} J_k \mathbf{v}_k(\mathbf{r}) \quad ; \quad \delta\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \sum_{k=1}^{K_2} \delta J_k \mathbf{v}_k(\mathbf{r}) \\ Q(\mathbf{r}) &= \sum_{k=1}^{K_1} \pi_k \Sigma_x(\mathbf{r}) u_k(\mathbf{r})\end{aligned}\quad (2.33)$$

Les bases polynomiales explicitées plus haut sont elles-mêmes décomposées dans des bases polynomiales bien connues. Lorsque cela est possible, on choisira une base de polynômes de Legendre, notés $\tilde{P}_k(u)$ pour leur simplicité. Cependant, ces derniers n'assurent pas de

continuité aux bords des éléments. Dans les cas où l'on impose la continuité du courant neutronique comme on l'a développé plus haut, on choisira des polynômes de Lagrange, notés $L_k(u)$. On a ainsi :

Soit un élément e de dimensions telles que $x_{l-\frac{1}{2}} \leq x \leq x_{l+\frac{1}{2}}$, $y_{m-\frac{1}{2}} \leq y \leq y_{m+\frac{1}{2}}$, et $z_{n-\frac{1}{2}} \leq z \leq z_{n+\frac{1}{2}}$. On note :

$$\begin{aligned} u &= \frac{1}{\Delta x_e} \left(x - \frac{1}{2} (x_{l+\frac{1}{2}} + x_{l-\frac{1}{2}}) \right) \\ v &= \frac{1}{\Delta y_e} \left(y - \frac{1}{2} (y_{m+\frac{1}{2}} + y_{m-\frac{1}{2}}) \right) \\ w &= \frac{1}{\Delta z_e} \left(z - \frac{1}{2} (z_{n+\frac{1}{2}} + z_{n-\frac{1}{2}}) \right) \end{aligned} \quad (2.34)$$

où :

$$\begin{aligned} \Delta x_e &= x_{l+\frac{1}{2}} - x_{l-\frac{1}{2}} \\ \Delta y_e &= y_{m+\frac{1}{2}} - y_{m-\frac{1}{2}} \\ \Delta z_e &= z_{n+\frac{1}{2}} - z_{n-\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (2.35)$$

alors les fonctions $u_k(\mathbf{r})$ et $\mathbf{v}_k(\mathbf{r})$ se décomposent sur l'ensemble de l'espace comme suit :

- Pour une fonction scalaire $u_k(\mathbf{r})$:

$$u_k(\mathbf{r}) = \sum_{e=1}^E \sum_{k_1=1}^{K-1} \delta_{e,k_1}^k \sum_{k_2=1}^{K-1} \delta_{e,k_2}^k \sum_{k_3=1}^{K-1} \delta_{e,k_3}^k \tilde{P}_{k_1}(u) \tilde{P}_{k_2}(v) \tilde{P}_{k_3}(w) \quad (2.36)$$

- Pour une fonction vectorielle parallèle à l'axe des abscisses :

$$\mathbf{v}_k(\mathbf{r}) = \sum_{e=1}^E \sum_{k_1=0}^K \delta_{e,k_1}^k \sum_{k_2=1}^{K-1} \delta_{e,k_2}^k \sum_{k_3=1}^{K-1} \delta_{e,k_3}^k \begin{pmatrix} L_{k_1}(u) \tilde{P}_{k_2}(v) \tilde{P}_{k_3}(w) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.37)$$

- Pour une fonction vectorielle parallèle à l'axe des ordonnées :

$$\mathbf{v}_k(\mathbf{r}) = \sum_{e=1}^E \sum_{k_1=0}^K \delta_{e,k_1}^k \sum_{k_2=1}^{K-1} \delta_{e,k_2}^k \sum_{k_3=1}^{K-1} \delta_{e,k_3}^k \begin{pmatrix} 0 \\ \tilde{P}_{k_1}(u) L_{k_2}(v) \tilde{P}_{k_3}(w) \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.38)$$

- Pour une fonction vectorielle parallèle à l'axe des côtes :

$$\mathbf{v}_k(\mathbf{r}) = \sum_{e=1}^E \sum_{k_1=0}^K \delta_{e,k_1}^k \sum_{k_2=1}^{K-1} \delta_{e,k_2}^k \sum_{k_3=1}^{K-1} \delta_{e,k_3}^k \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \tilde{P}_{k_1}(u) \tilde{P}_{k_2}(v) L_{k_3}(w) \end{pmatrix} \quad (2.39)$$

où E est le nombre total d'éléments dans la géométrie, et δ_{e,k_1}^k est la fonction delta des éléments finis définie par :

$$\forall e \in [1, E], \delta_{e,k_1}^k = \begin{cases} 1 & \text{si } k = k_1 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.40)$$

À partir de cette décomposition, l'équation de la diffusion 2.19 peut être réécrite sous forme matricielle et résolue à l'aide de méthodes de résolution de systèmes linéaires connus. Il est cependant important de garder à l'esprit que l'on n'obtient qu'une approximation de la fonction flux neutronique. La précision du résultat obtenu par la méthode des éléments finis de Raviart-Thomas dépend en grande partie du maillage choisi et de l'ordre des polynômes. Les choix effectués dans les codes de cœur que nous utiliserons permettent d'approcher le flux neutronique avec une grande précision.

2.2 Méthode des perturbations généralisées (GPT)

La méthode des perturbations généralisées est une méthode destinée à étudier la sensibilité d'une grandeur caractéristique du réacteur (le rapport entre deux taux de réaction par exemple), appelée caractéristique, par rapport à une variable d'état (la valeur du coefficient de diffusion par exemple) (Pomraning, 1967). La théorie des perturbations classique correspond au cas particulier où la caractéristique du réacteur considérée est le facteur de multiplication effectif k_{eff} . La GPT est également très utile pour calculer le gradient d'une fonctionnelle pour des études d'optimisation par rapport à des variables continues. Ceci constituera notre cadre d'utilisation de la GPT dans cette étude.

2.2.1 Position du problème

Tout d'abord, nous délimiterons l'utilisation de la GPT à des situations dans lesquelles :

- Le réacteur est à l'état stationnaire et le flux est une solution de l'équation de diffusion.

- La caractéristique étudiée est une fonctionnelle homogène F . C'est-à-dire que l'on a :

$$\forall \alpha \in \mathbb{R}, \quad F\{\alpha \Phi(\mathbf{r})\} = F\{\Phi(\mathbf{r})\} \quad (2.41)$$

Comme nous l'avons vu dans la section 2.1.3, le flux neutronique est solution d'une équation aux valeurs propres 2.19. Ici, afin de simplifier les notations, nous noterons cette équation :

$$[\mathbb{A}(\mathbf{r}) - \mu \mathbb{B}(\mathbf{r})] \Phi(\mathbf{r}) = 0 \quad (2.42)$$

où $\mu = \frac{1}{k_{\text{eff}}}$. Par ailleurs, nous noterons de manière analogue l'équation aux valeurs propres adjointe :

$$[\mathbb{A}^T(\mathbf{r}) - \mu \mathbb{B}^T(\mathbf{r})] \Phi^*(\mathbf{r}) = 0 \quad (2.43)$$

Il est important de noter ici qu'une équation aux valeurs propre comme 2.42 peut être associée à une équation singulière à source du type :

$$[\mathbb{A}(\mathbf{r}) - \mu \mathbb{B}(\mathbf{r})] \Gamma(\mathbf{r}) = \mathbf{S}(\mathbf{r}) \quad (2.44)$$

où $\mathbf{S}(\mathbf{r})$ est un terme de source. On définit alors une équation singulière à source adjointe associée :

$$[\mathbb{A}^T(\mathbf{r}) - \mu \mathbb{B}^T(\mathbf{r})] \Gamma^*(\mathbf{r}) = \mathbf{S}^*(\mathbf{r}) \quad (2.45)$$

où $\mathbf{S}^*(\mathbf{r})$ est le terme de source adjoint. Cette équation n'admet de solution que si $\mathbf{S}^*(\mathbf{r})$ est orthogonal au flux neutronique.

2.2.2 Résolution de l'équation singulière à sources

Une approche de résolution de l'équation singulière à source est proposée dans (Hébert, 2009). Elle est basée sur la méthode inverse de la puissance. Soit une équation aux valeurs propre 2.42 et son équation singulière à source associée 2.44. L'algorithme le plus simple pour résoudre ce problème est le suivant (on n'a pas noté la dépendance par rapport à la variable spatiale pour alléger les notations) :

$$\begin{cases} \Gamma^{(k+1)} = \mathbb{A}^{-1}(\mathbf{S} + \mu \mathbb{B} \Gamma^{(k)}) & \text{si } k \geq 0 \\ \Gamma^{(0)} & \text{donné} \end{cases} \quad (2.46)$$

Cet algorithme simple est susceptible de ne pas converger dans tous les cas, et on enrichit donc le problème en effectuant une procédure de décontamination basée sur la déflation de

Hotelling décrite dans la référence (Hébert, 2009). L'algorithme de résolution devient alors :

$$\begin{cases} \Gamma^{(k+1)} = \mathbb{A}^{-1}\mathbf{S} + (\mu\mathbb{A}^{-1} - \frac{\Phi \otimes \Phi^*}{\Phi^* \cdot \Phi})\mathbb{B}\Gamma^{(k)} & \text{si } k \geq 0 \\ \Gamma^{(0)} & \text{donné} \end{cases} \quad (2.47)$$

où le signe \otimes représente le produit dyadique. Celui-ci est défini, pour un vecteur $\boldsymbol{\Omega} = (\Omega_x, \Omega_y, \Omega_z)^T$ par :

$$\boldsymbol{\Omega} \otimes \boldsymbol{\Omega} = \begin{bmatrix} \Omega_x^2 & \Omega_x\Omega_y & \Omega_x\Omega_z \\ \Omega_x\Omega_y & \Omega_y^2 & \Omega_y\Omega_z \\ \Omega_x\Omega_z & \Omega_y\Omega_z & \Omega_z^2 \end{bmatrix} \quad (2.48)$$

Soit alors une base de vecteurs propres de l'équation 2.45, que l'on note $\{v_l, l \in [1;L]\}$. Chaque vecteur v_l est alors solution de l'équation $[\mathbb{A}(\mathbf{r}) - \mu_l \mathbb{B}(\mathbf{r})]v_l = 0$, où μ_l est la valeur propre associé au vecteur propre v_l . Alors la solution de l'équation singulière à source peut s'écrire comme une combinaison linéaire des vecteurs v_l :

$$\Gamma^{(k)} = \sum_{l=1}^L c_l^{(k)} v_l \quad (2.49)$$

Lorsque l'on injecte l'équation 2.49 dans la relation de récurrence 2.47, on obtient après simplifications :

$$\Gamma^{(k+1)} = \mathbb{A}^{-1}\mathbf{S} + \sum_{l=2}^L \frac{\mu_1}{\mu_l} c_l^{(k)} v_l \quad (2.50)$$

De même, le terme de source peut également être exprimé comme une combinaison linéaire des vecteurs propres v_l comme suit :

$$\mathbb{A}^{-1}\mathbf{S} = \sum_{l=2}^L s_l v_l \quad (2.51)$$

Alors la relation de récurrence 2.50 devient :

$$\Gamma^{(k+1)} = \sum_{l=2}^L (s_l + \frac{\mu_1}{\mu_l} c_l^{(k)}) v_l \quad (2.52)$$

Il suffit alors de faire tendre k vers l'infini, en remarquant que $\frac{\mu_1}{\mu_l} \leq 1$. En effet, $\mu_1 = \frac{1}{k_{\text{eff}}}$ et est donc d'après la définition de k_{eff} la plus petite des valeurs propres de l'équation 2.42. On obtient alors :

$$\Gamma = \lim_{k \rightarrow \infty} \Gamma(k) = \sum_{l=2}^L \frac{s_l}{1 - \frac{\mu_1}{\mu_l}} v_l \quad (2.53)$$

2.2.3 Calcul des dérivées

Dans cette étude, la GPT est utilisée afin de calculer le gradient d'une caractéristique du réacteur F . On note ce gradient $\nabla F\{\Phi(\mathbf{r})\}$. La variation de la caractéristique F par rapport au flux neutronique $\delta F_{\delta\Phi}\{\Phi(\mathbf{r})\}$ est donnée par :

$$\delta F_{\delta\Phi}\{\Phi(\mathbf{r})\} = <\delta\Phi(\mathbf{r}), \nabla F\{\Phi(\zeta); \mathbf{r}\}> \quad (2.54)$$

où $\nabla F\{\Phi(\zeta); \mathbf{r}\}$ désigne le gradient de la caractéristique F pris au point \mathbf{r} .

Il est important de noter ici que le gradient de la caractéristique F est orthogonal au flux neutronique. En effet, on a :

$$\begin{aligned} \delta F_{\Phi}\{\Phi(\mathbf{r})\} = <\Phi(\mathbf{r}), \nabla F\{\Phi(\zeta); \mathbf{r}\}> &= [\frac{d}{d\epsilon} F\{\Phi(\mathbf{r}) + \epsilon\Phi(\mathbf{r})\}]_{\epsilon \rightarrow 0} \\ &= [\frac{d}{d\epsilon} F\{(1 + \epsilon)\Phi(\mathbf{r})\}]_{\epsilon \rightarrow 0} \end{aligned} \quad (2.55)$$

or F est supposée homogène donc $F\{(1 + \epsilon)\Phi(\mathbf{r})\} = F\{\Phi(\mathbf{r})\}$, et :

$$\delta F_{\Phi}\{\Phi(\mathbf{r})\} = [\frac{d}{d\epsilon} F\{\Phi(\mathbf{r})\}]_{\epsilon \rightarrow 0} = 0 \quad (2.56)$$

Le gradient de la caractéristique est donc orthogonal au flux. Ce résultat est fondamental puisqu'il suppose que le problème singulier à source adjoint 2.57 admet au moins une solution.

$$[\mathbb{A}^T(\mathbf{r}) - \mu\mathbb{B}^T(\mathbf{r})]\Gamma^*(\mathbf{r}) = -\nabla F\{\Phi(\zeta); \mathbf{r}\} \quad (2.57)$$

La variation de la caractéristique définie précédemment (voir 2.54) s'écrit donc :

$$\begin{aligned} \delta F_{\delta\Phi(\mathbf{r})}\{\Phi(\mathbf{r})\} &= <\delta\Phi(\mathbf{r}), \nabla F\{\Phi(\zeta); \mathbf{r}\}> \\ &= <\delta\Phi, [\mathbb{A}^T(\mathbf{r}) - \mu\mathbb{B}^T(\mathbf{r})]\Gamma^*(\mathbf{r})> \\ &= - <[\delta\mathbb{A}(\mathbf{r}) - \mu\delta\mathbb{B}(\mathbf{r}) - \delta\mu\mathbb{B}(\mathbf{r})]\Phi(\mathbf{r}), \Gamma^*(\mathbf{r})> \end{aligned} \quad (2.58)$$

À partir de cette variation, on peut calculer les dérivées de F par rapport aux variables de contrôle du problème. On note ces dernières $\mathbf{x} = \{\mathbf{x}_i, i \in [1, N]\}$. Alors chaque dérivée de F

par rapport à la variable de contrôle x_i , prise en \mathbf{x} est notée $\frac{\partial}{\partial x_i} F(\mathbf{x}, \mathbf{r})$ et est définie par :

$$\frac{\partial}{\partial x_i} F(\mathbf{x}, \mathbf{r}) = - < [\frac{\partial}{\partial x_i} [\mathbb{A}(\mathbf{r}) - \mu \mathbb{B}(\mathbf{r})] \Phi(\mathbf{r}), \Gamma^*(\mathbf{r}) > \quad (2.59)$$

Ainsi, on obtient les dérivées de la caractéristique F par rapport aux variables de contrôle. Ces dérivées sont nécessaires afin de résoudre un problème d'optimisation que nous développerons par la suite.

2.3 Assimilation de données

La théorie de l'assimilation de données a été développée à des fins d'études météorologiques (Bouttier et Courtier, 1999). Elle s'applique notamment à la reconstruction de champs ou à des études paramétriques. En simulation neutronique des réacteurs, la théorie de l'assimilation de données peut par exemple être utilisée pour déterminer un ensemble de points de mesure de flux neutronique optimal afin de reconstruire au mieux le flux sur l'ensemble du réacteur (Bouriquet *et al.*, 2012). Dans notre étude, nous nous pencherons uniquement sur des études paramétriques, cependant, il est important de disposer d'une introduction globale à la théorie de l'assimilation de données. Dans cette section, nous utiliserons les notations conventionnelles trouvées de la littérature relative à cette théorie.

2.3.1 Position du problème

L'objet de l'assimilation de donnée est de trouver l'« état vrai » (ou « true state ») \mathbf{x}^t d'un système, en prenant en compte le maximum d'informations dont on dispose pour décrire ce système, en terme de modèles physiques régissant le comportement du système, de modèles d'observations et de statistiques d'erreur. Le fait de pouvoir prendre en compte des statistiques d'erreur sur les modèles d'observation permet d'étudier des systèmes partiellement observés, ou décrits par des modèles physiques approchés. Cependant, il est important de noter que l'on n'obtiendra par assimilation de données qu'un estimé de l'état vrai, noté \mathbf{x}^a .

Initialement, on dispose d'une mesure sur le système, représenté par un vecteur \mathbf{y}^0 . Par exemple en météorologie, il peut s'agir de mesure de la température ou de la pression en certains points du système. En neutronique, il s'agira de mesures du flux neutronique ou de la puissance en certains points du réacteur. Par ailleurs, on définit une ébauche du système, notée \mathbf{x}^b , qui est une estimation a priori de l'état vrai, que l'on définit avec une certaine incertitude que l'on décrira plus loin.

Une notion importante de l'assimilation de données est l'opérateur d'observation, noté H .

C'est l'opérateur qui permet de passer de l'espace des variables de contrôle à l'espace des observations (ces deux espaces n'ont bien entendu pas nécessairement la même dimension). Ainsi, dans le cas général où H n'est pas linéaire, les observations seront définies par les vecteurs $H(\mathbf{x}^t)$. Cependant, on cherchera toujours à linéariser H pour obtenir l'opérateur d'observation linéarisé, aussi appelé modèle tangent, \mathbf{H} . Les observations seront alors définies par le vecteur \mathbf{Hx}^t . Dans ce cas, \mathbf{H} sera égal à sa transposée, aussi appelée modèle adjoint, notée \mathbf{H}^T .

Définissons à présent les statistiques d'erreur qui caractérisent le système. Tout d'abord, l'ébauche \mathbf{x}^b est entachée d'une erreur supposée non biaisée, notée $\epsilon^b = \mathbf{x}^b - \mathbf{x}^t$. On définit alors la matrice de covariance de l'erreur sur l'ébauche : $\mathbf{B} = \mathbb{E}[\epsilon^b \cdot (\epsilon^b)^T]$. De la même manière, l'erreur sur les observations, également supposée non biaisée, est donnée par $\epsilon^0 = \mathbf{y}^0 - H(\mathbf{x}^t)$. La matrice de covariance de cette erreur est notée $\mathbf{R} = \mathbb{E}[\epsilon^0 \cdot (\epsilon^0)^T]$. Les éléments des diagonales de \mathbf{B} et \mathbf{R} représentent les variances des erreurs sur les différentes composantes de l'ébauche (respectivement des observations), et les termes non diagonaux représentent les covariances entre les différentes erreurs. Lorsque les variables de contrôle (respectivement les observations) sont indépendantes, les matrices \mathbf{B} et \mathbf{R} sont donc diagonales. Dans ce cas, on notera $\mathbf{B} = \text{diag}(\sigma_{B,i}, i \in [1,N])$ et $\mathbf{R} = \text{diag}(\sigma_{R,j}, j \in [1,M])$, où N et M sont respectivement le nombre de variables de contrôle et d'observations.

2.3.2 Approche BLUE

Dans l'approche Best Linear Unbiased Estimator (BLUE), on suppose que l'opérateur d'observation est linéaire, et on cherche une estimation de l'état vrai du système, appelé analyse et noté \mathbf{x}^a , que l'on suppose non biaisée, comme une combinaison linéaire de l'ébauche et des observations. Cette estimation est entachée d'une erreur $\epsilon^a = \mathbf{x}^a - \mathbf{x}^t$

$$\mathbf{x}^a = \mathbf{Lx}^b + \mathbf{Ky}^0 \quad (2.60)$$

En tenant compte des erreurs faites sur l'ébauche, les observations et l'analyse dans l'équation 2.60, on obtient :

$$\mathbf{x}^t + \epsilon^a = \mathbf{Lx}^t + \mathbf{L}\epsilon^b + \mathbf{Khx}^t + \mathbf{K}\epsilon^0 \quad (2.61)$$

En prenant l'espérance mathématique de l'équation 2.61, et en tenant compte du non-biais des erreurs, on déduit la relation : $\mathbf{L} = \mathbf{I} - \mathbf{Kh}$, où \mathbf{I} est la matrice identité. L'équation 2.60 devient alors :

$$\mathbf{x}^a = \mathbf{x}^b + \mathbf{K}(\mathbf{y}^0 - \mathbf{H}\mathbf{x}^b) \quad (2.62)$$

L'analyse est donc égale à l'ébauche à laquelle on ajoute un terme correctif fonction de l'erreur sur les observations. Il est démontré dans (Bouttier et Courtier, 1999) que la matrice \mathbf{K} s'écrit :

$$\mathbf{K} = \mathbf{B}\mathbf{H}^T(\mathbf{H}\mathbf{B}\mathbf{H}^T + \mathbf{R})^{-1} \quad (2.63)$$

Il est important ici de comprendre les deux situations extrêmes suivantes :

- Si l'on accorde une très grande confiance à l'ébauche, alors $\mathbf{B} = 0$ et donc $\mathbf{K} = 0$ d'après 2.63. Il vient alors d'après 2.62 : $\mathbf{x}^a = \mathbf{x}^b$.
- Si au contraire on accorde une très grande confiance aux observations, alors $\mathbf{R} = 0$ et donc $\mathbf{K} = \mathbf{H}^{-1}$ d'après 2.63, et il vient alors $\mathbf{x}^a = \mathbf{H}^{-1}\mathbf{y}^0$.

2.3.3 Approche 3D-VAR

Dans le cadre de l'approche 3D-VAR, on cherche la meilleure estimation de l'état vrai, toujours appelée analyse, en minimisant une fonctionnelle, que l'on note J . Cette méthode de résolution est plus aisée à mettre en place lorsque l'opérateur d'observation est non linéaire, et lorsque l'on n'a pas facilement accès au modèle tangent. C'est cette approche que nous allons privilégier dans notre étude. En effet, on verra plus loin que l'opérateur d'observation que nous retiendrons est hautement non linéaire, et le choix naturel dans notre cas est donc l'approche 3D-VAR.

La fonctionnelle J est basée sur la méthode des moindres carrés. Elle comprend une contribution de l'ébauche pondérée par l'erreur faite sur cette ébauche, et une contribution des observations, elle aussi pondérée par son erreur.

$$J(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^b)^T \mathbf{B}^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^b) + \frac{1}{2}(\mathbf{y}^0 - H(\mathbf{x}))^T \mathbf{R}^{-1}(\mathbf{y}^0 - H(\mathbf{x})) \quad (2.64)$$

où \mathbf{x} est la valeur du vecteur de contrôle courant. L'analyse \mathbf{x}^a est alors la valeur du vecteur de contrôle qui minimise J : $\mathbf{x}^a = \text{argmin}(J(\mathbf{x}))$.

Remarquons ici que lorsque l'opérateur d'observation est linéaire, les deux approches sont équivalentes. En effet, le gradient de J est donné par :

$$\nabla J(\mathbf{x}) = \mathbf{B}^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^b) - \mathbf{H}^T \mathbf{R}^{-1}(\mathbf{y}^0 - H(\mathbf{x})) \quad (2.65)$$

En $\mathbf{x} = \mathbf{x}^a$, le gradient de J est nul ce qui équivaut à écrire :

$$\mathbf{x}^a = \mathbf{x}^b + \mathbf{K}(\mathbf{y}^0 - \mathbf{Hx}^b) \quad (2.66)$$

où \mathbf{K} est donné par l'équation 2.63. On retrouve alors la valeur de \mathbf{x}^a trouvée en 2.62.

2.4 Codes utilisés

Ici, nous allons utiliser plusieurs codes de coeurs déterministes, s'appuyant sur les équations et les méthodes de résolution décrites dans ce chapitre. L'objectif est de mettre au point des méthodes analogues avec les codes d'EDF et de l'EPM.

2.4.1 Le code de cœur déterministe DONJON

Le code DONJON (Hébert *et al.*, 2012b) est un code de cœur déterministe développé par l'Institut de Génie Nucléaire (IGN) à l'EPM. Il est utilisé pour résoudre des équations SP_N ou l'équation de la diffusion dans un réacteur, et s'appuie sur la méthode des éléments finis de Raviart-Thomas présentée au chapitre 2 de ce document. Initialement destiné à étudier les réacteurs de type CANDU, DONJON est aujourd'hui généralisé pour l'étude d'autres types de réacteurs comme les REP.

Le code DONJON fait partie d'un ensemble de modules mis en synergie par l'intermédiaire du programme de contrôle généralisé CLE-2000 (Roy, 1999) développé au Groupe d'Analyse Nucléaire (GAN). Ce programme permet la gestion des flots de données entre les codes et librairies UTILIB, GANLIB, TRIVAC (Hébert, 2012) et DRAGON (Marleau *et al.*, 2013). Ces codes sont tous composés de modules indépendants entre eux, ainsi que d'objets, dont les structures sont décrites dans (Hébert *et al.*, 2012a), appelés dans des jeux de données utilisateur écrits en CLE-2000.

Le code DRAGON est un code de réseau utilisé pour charger les bibliothèques de sections macroscopiques à partir de formats variés. Dans cette étude, nous utiliserons uniquement des bibliothèques au format Saphyb calculées par le code APOLLO2 (Sanchez *et al.*, 2010) développé par le CEA. Ces bibliothèques sont ensuite converties en un objet compatible avec les codes du programme GAN : l'objet *Macrolib*. Par ailleurs, DRAGON sert également à définir la géométrie étudiée. Le solveur TRIVAC est un code d'éléments finis. Son rôle est d'effectuer une discréttisation spatiale de la géométrie définie par la méthode de Raviart-Thomas décrite précédemment, ainsi qu'à fournir des résultats numériques selon les choix de l'utilisateur. Les modules principaux de TRIVAC sont :

- Le module **GEO**: sert à créer ou modifier un objet *Geometry* contenant la géométrie de réacteur paramétrée par l'utilisateur.
- Le module **TRIVAT**: sert à définir un objet *Tracking* contenant l'analyse de la géométrie définie précédemment, relativement à l'opérateur de calcul (équation de diffusion ou équations SP_N), et à l'ordre des éléments finis. Il admet donc comme entrée un objet *Geometry* et comme sortie un objet *Tracking*.
- Le module **TRIVAA**: sert à construire un objet *System* contenant les matrices \mathbb{A} et \mathbb{B} de l'équation 2.42 à partir de l'objet *Tracking* défini précédemment, et des sections efficaces contenues dans un objet *Macrolib*. Le module admet donc comme entrées un objet *Tracking* et un objet *Macrolib*, et comme sortie un objet *System*.
- Le module **GPTFLU**: sert à résoudre l'équation singulière à source adjointe décrite à l'équation 2.45, et à stocker le résultat dans un objet *Delta Flux*. Il admet donc comme entrées :
 - un objet *Tracking*.
 - un objet *System*.
 - un objet *GPT Source*.
 et comme sortie un objet *Delta Flux*.
- Le module **OUT**: sert à stocker le résultat d'un calcul de taux de réactions dans un objet *Macrolib* dédié. Il admet donc comme entrées :
 - un objet *Geometry*.
 - un objet *Tracking*.
 - un objet *Flux* qui contient le résultat d'un calcul de flux au sein du réacteur.
 et comme sortie un objet *Macrolib*.

Le code UTILIB rassemble des utilitaires d'algèbre linéaire. Enfin, le module GANLIB contrôle les flux de données et les échanges entre l'ensemble des codes. Le langage de programmation utilisé est le FORTRAN77.

Les trois principaux codes de simulation neutronique des coeurs sont donc DRAGON, TRIVAC et DONJON. Le code DONJON contient le code TRIVAC qui contient lui-même le code DRAGON. Ainsi, DONJON peut faire appel aux modules de TRIVAC et de DRAGON afin d'effectuer un calcul de cœur.

Le code DONJON est composé de plusieurs modules, dont la fonction est relative aux données du cœur entier. Dans le cadre de cette étude, nous utiliserons principalement les modules suivants, dont nous allons détailler la fonctionnalité :

- Le module **SCR**: sert à charger les bibliothèques de sections efficaces macroscopiques dans un objet *Macrolib*. Il admet donc comme entrée une bibliothèque de sections efficaces au format Saphyb par exemple et comme sortie un objet *Macrolib*.
- Le module **DELTA**: sert à créer un objet *GPT Source* contenant le terme de source d'une équation singulière à source (voir 2.45). Il admet comme entrées :
 - un objet *Tracking*.
 - un objet *System*.
 - un objet *Flux*.
 - un objet *DSystem* : il s'agit d'un objet *System* crée à partir d'un objet *Macrolib* perturbé appelé *DMacro*.
 et comme sortie un objet *GPT Source*.

- Le module **EDI**: sert à créer un objet *Edit* contenant les taux de réactions issus d'un calcul de flux et des sections efficaces. Il admet donc comme entrées :
 - un objet *Tracking*.
 - un objet *System*.
 - un objet *Flux*.
 - un objet *Macrolib*
 et comme sortie un objet *Edit*.

2.4.2 Le code de cœur déterministe COCAGNE

Le code COCAGNE (Courau *et al.*, 2008) (Plagne et Ponçot, 2005) est un code de cœur déterministe développé par EDF dans le cadre du projet F3C. Le code COCAGNE vise à

remplacer le code COCCINELLE, actuellement utilisé par les équipes de gestion de l'exploitation. Comme DONJON, le code COCAGNE s'appuie sur des méthodes SP_N (Plagne et Ponçot, 2005) associées à des éléments finis de Raviart-Thomas. Son fonctionnement est néanmoins bien différent de celui de DONJON sur le plan informatique.

Pour créer ses propres bibliothèques de sections efficaces, COCAGNE utilise les bibliothèques multiparamétrées Saphyb fournies par APOLLO2. Dans le schéma de calcul d'EDF, ces bibliothèques sont calculées en milieu infini, dans le cadre de l'approximation du mode fondamental. Ces Saphyb sont ensuite converties par COCAGNE en DKLIB. Il s'agit de bibliothèques multiparamétrées basées sur le format HDF5. Lors de ses calculs, COCAGNE fera des appels à ces DKLIB afin d'extraire les sections efficaces et les données relatives au calcul.

Dans les DKLIB, COCAGNE stocke plusieurs types de données :

- Les sections efficaces : une DKLIB peut contenir plusieurs jeux de sections efficaces, correspondant à plusieurs modélisations des assemblages du cœur. Au cours de cette étude, nous utiliserons des sections efficaces homogènes par assemblage lors des calculs de diffusion, et des sections homogènes par crayon lors des calculs SP_N.
- Des facteurs d'équivalence : il s'agit de facteurs qui seront utilisés dans le cadre de calculs hétérogènes, afin de conserver les taux de réactions par rapport au calcul de transport effectué avec des assemblages calculés en milieu infini. Dans cette étude, ces facteurs seront donc utilisés lors des calculs SP_N. Ces facteurs d'équivalence seront explicités plus loin.
- Des facteurs de normalisation : ces facteurs sont utilisés afin de conserver le flux par rapport au flux de transport sur l'ensemble du réacteur, ou bien d'assurer la continuité du flux aux interfaces entre les assemblages. Il existe deux types de coefficients de normalisation : la normalisation flux-volume qui sera utilisée lors de calculs homogènes par crayon en SP_N/S_N multi-groupes, et la normalisation de Selengut qui sera utilisée dans toutes les autres configurations.
- Des facteurs de forme : ces facteurs sont utilisés lors de calculs homogènes par assemblage. Il s'agit de facteurs reflétant la forme des flux à l'échelle du crayon. Ils permettent alors de reconstruire le flux homogène par crayon à partir du flux homogène par assemblage obtenu par le calcul. Ces facteurs seront donc utilisés dans cette étude lors des

calculs de diffusion, car une modélisation homogène par assemblage est choisie dans ce cas.

L'ensemble des ces grandeurs peut être stocké dans une DKLIB, pour plusieurs points de fonctionnement paramétrés par plusieurs grandeurs telles que l'irradiation, la puissance, le niveau de Xénon, etc. À partir de ces bibliothèques, COCAGNE est capable de mener ses calculs. Pour cela, le code effectue une interpolation des données contenues dans la DKLIB. En effet, le point de fonctionnement considéré est peu susceptible d'être un des points pour lesquels sont calculées les grandeurs stockées dans la DKLIB. COCAGNE interpole donc les données de la DKLIB pour le point de fonctionnement donné.

Les grandeurs contenues dans les DKLIB vont à présent être explicitées.

Facteurs d'équivalence

Ces facteurs seront utilisés dans cette étude lorsque l'on effectuera des calculs homogènes par crayon, donc lors de nos calculs SP_N. Lors de ces calculs, COCAGNE applique des facteurs d'équivalence (semblables aux facteurs SPH de DRAGON et DONJON) au flux afin de conserver les taux de réaction par rapport au un calcul de transport réalisé avec des assemblages calculés en milieu infini. Ainsi, si on considère un groupe d'énergie g et un assemblage i , le taux de réaction obtenu par résolution de l'équation de transport s'écrit :

$$R_{T,i}^g = \Sigma_i^g \cdot \Phi_{T,i}^g \quad (2.67)$$

où $\Phi_{T,i}^g$ et Σ_i^g sont respectivement le flux de transport et la section efficace totale du groupe g dans l'assemblage i . De la même manière, le taux de réaction obtenu par un calcul de diffusion est donné par :

$$R_{D,i}^g = \Sigma_i^g \cdot \Phi_{D,i}^g \quad (2.68)$$

où $\Phi_{D,i}^g$ est le flux de diffusion dans l'assemblage i . On observe alors que les taux de réactions $R_{T,i}^g$ et $R_{D,i}^g$ sont différents. Si l'on veut conserver le taux de réaction, il faut alors appliquer un facteur d'équivalence λ_i^g aux sections efficaces. On obtient alors un nouveau flux de diffusion $\tilde{\Phi}_{D,i}^g$ tel que :

$$R_{D,i}^g = \lambda_i^g \Sigma_i^g \cdot \tilde{\Phi}_{D,i}^g = \Sigma_i^g \cdot \Phi_{T,i}^g = R_{T,i}^g \quad (2.69)$$

Pour calculer ces coefficients de normalisation, on procède par itération comme il est expliqué dans (Courau *et al.*, 2008). Ces coefficients sont ensuite normalisés selon les techniques

suivantes.

Normalisation flux/volume

Cette normalisation est utilisée dans cette étude lorsque l'on effectue des calculs homogènes par crayon en SP_N multi-groupe. La normalisation flux/volume consiste à multiplier le flux et la section par un coefficient, ce qui ne modifie pas les taux de réaction et assure la conservation du flux par rapport au flux de transport sur l'ensemble du réacteur. Ainsi, le facteur de normalisation appliqué est :

$$f_{Flux/Vol} = \frac{\sum_i V_i \tilde{\Phi}_{D,i}^g}{\sum_i V_i \Phi_{T,i}^g} \quad (2.70)$$

Normalisation de Selengut

La normalisation de Selengut est quant à elle utilisée dans cette étude lors de calculs de diffusion. Son objectif est d'assurer la continuité du flux reconstruit aux interfaces entre assemblages. Notons $\bar{\Phi}^g$ le flux moyen sur un assemblage, Φ_{lame}^g le flux à la frontière de l'assemblage, calculé comme étant le flux dans la lame d'eau, et $\Phi_{rangée}^g$ le flux dans la dernière rangée de crayons. Il existe deux types de coefficients de normalisation de Selengut : le coefficient de Selengut standard noté $f_{Selengut}^S$ et le coefficient de Selengut généralisé noté $f_{Selengut}^G$. Ces coefficients sont définis par :

$$\begin{aligned} f_{Selengut}^S &= \frac{\bar{\Phi}^g}{\Phi_{lame}^g} \\ f_{Selengut}^G &= \frac{\Phi_{rangée}^g}{\Phi_{lame}^g} \end{aligned} \quad (2.71)$$

Reconstruction fine de puissance

Lorsque l'on effectue des calculs homogènes par assemblages, on obtient un flux neutronique constant sur chaque assemblage. Avec COCAGNE, on a la possibilité de reconstruire le flux neutronique à l'échelle du crayon (appelé flux crayon par crayon) selon un procédé appelé reconstruction fine de puissance. On considère que le flux neutronique dans un assemblage $\Phi^g(\mathbf{r})$ est le produit d'un flux constant sur l'assemblage noté $\tilde{\phi}^g(\mathbf{r})$, et d'un flux microscopique de structure fine noté $\tilde{\psi}^g(\mathbf{r})$. On a ainsi : $\Phi^g(\mathbf{r}) = \tilde{\phi}^g(\mathbf{r}) \cdot \tilde{\psi}^g(\mathbf{r})$. Le flux de structure fine est calculé par le code de transport (ici APOLLO2) qui prend en compte la structure d'un assemblage à l'échelle du crayon. Il est également stocké dans la DKLIB et appelé par COCAGNE lors du calcul. Le flux homogène est quant à lui issu du calcul COCAGNE.

Il est important de noter que l'approximation faite sur la décomposition du flux neutronique permet d'obtenir des résultats exacts uniquement dans le cas où les assemblages sont calculés en milieu infini. Dans les autres cas cependant, elle permet d'approcher le flux crayon par crayon avec une très bonne précision.

2.4.3 Les modules d'OPTEX dans DONJON

Les modules d'OPTEX ont été utilisés afin de réaliser des calculs d'optimisation dans DONJON. Initialement, les modules d'OPTEX ont été utilisés pour optimiser la gestion de combustibles dans les réacteurs CANDU. Dans cette étude, le modèle de réflecteur développé à l'IGN et détaillé au chapitre 3 de ce document s'appuie sur la minimisation d'une fonctionnelle et utilise les modules d'OPTEX décrits ci-dessous :

- Le module **DLEAK**: sert à spécifier la nature et le nombre des variables de contrôle de l'optimisation (coefficients de diffusion ou sections macroscopiques totales). Il sert également à perturber l'objet *Macrolib* initial. Ainsi, ce module calcule les dérivées des sections macroscopiques efficaces par rapport aux variables de contrôle. Ces dérivées sont utilisées pour calculer les dérivées des matrices \mathbb{A} et \mathbb{B} par rapport aux variables de contrôle de l'équation 2.59. Ce module admet donc comme entrée un objet *Macrolib* et comme sortie un objet *DMacro* et un objet *Optimization*.
- Le module **DREF**: sert à calculer la fonctionnelle (voir 3.3) et son gradient par rapport au flux neutronique (voir 3.6), et à stocker le résultat dans un objet *GPT Source*. Il admet donc comme entrées :
 - un objet *Macrolib*.
 - un objet *Flux*.
 - un objet *Tracking*.
 et comme sortie un objet *GPT Source*.

- Le module **GRAD**: sert tout d'abord à calculer les gradients de la fonction objectif par rapport aux variables de contrôle (voir 2.59), à partir de l'objet *Delta Flux* calculé par le module **GPTFLU**. De plus, il sert également à définir ou actualiser les options d'optimisation : le rayon initial d'une contrainte quadratique par exemple. Il pourra enfin réduire ce rayon au besoin au cours de l'exécution de l'algorithme d'optimisation. Ce module admet donc comme entrées :

- un objet *Delta Flux*.
- un objet *GPT Source*.
- un objet *Optimization*.

et comme sortie un objet *Optimization*.

- Le module **PLQ**: sert à résoudre un problème d'optimisation quasi-linéaire avec contrainte quadratique mis en place par le module **GRAD**. Il admet comme entrée et comme sortie un objet *Optimization*.

2.4.4 Le module ADAO de la plateforme SALOME

Le module Assimilation de Données et Aide à l'Optimisation (ADAO) est disponible en open-source dans la version 7 de la plateforme SALOME (Ribes, 2007) (sit, 2013). C'est un module qui permet de réaliser des études d'assimilation de données, selon les méthodes développées dans la section 2.4 de ce document. Ce module ne dépend pas de la physique étudiée, et est actuellement utilisé pour des applications très variées en mécanique ou en simulation neutronique des coeurs par exemple. Chez EDF R&D, il est notamment utilisé en reconstruction de champs, pour étudier l'influence du réseau de points de mesure du flux neutronique dans le réacteur sur le flux reconstruit (Bouriquet *et al.*, 2011), ou pour définir un ensemble optimal de points de mesure pour obtenir une meilleure estimation du flux neutronique dans l'ensemble du cœur (Bouriquet *et al.*, 2012)

L'objectif de ce module est de fournir à l'utilisateur un outil pour construire son étude d'assimilation de données. L'opérateur d'observation ainsi que tous les modèles physiques sont externes au module ADAO. Ils doivent être implémentés par l'utilisateur par l'intermédiaire de scripts Python. Dans notre cas, il s'agira de jeux de données COCAGNE, dont le langage utilisateur est Python.

CHAPITRE 3

CADRE GÉNÉRAL DE L'ÉTUDE ET MÉTHODES

3.1 Position du problème

3.1.1 Modélisation du cœur

L'objectif de notre étude est d'établir une méthode de calcul de réflecteurs 2-groupes ou multi-groupes, hétérogènes, pour des opérateurs de calcul de diffusion, SP_N ou S_N , en minimisant les écarts entre la nappe de puissance calculée par un code de cœur déterministe (DONJON ou COCAGNE) et une nappe de puissance de référence.

Tout au long de notre étude, les tests seront effectués sur un huitième de réacteur contenant 33 assemblages combustibles, comme présenté en Figure 3.1. Ces assemblages seront calculés en milieu infini, dans le cadre de l'approximation du mode fondamental. Le réflecteur sera composé de 33 assemblages, qui pourront être différenciés ou homogénéisés selon les choix que nous exposerons dans le chapitre 5.

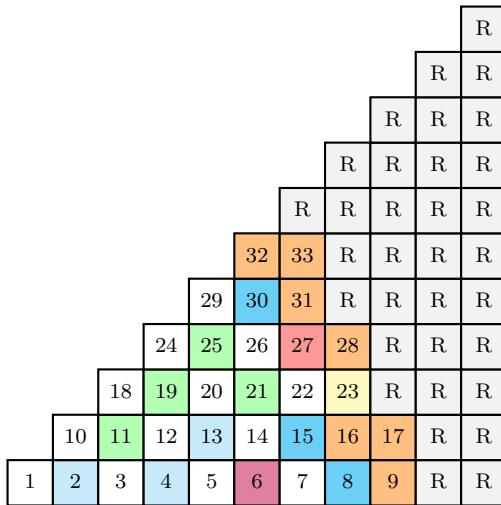


Figure 3.1 Modélisation du huitième de cœur (1 à 33 : combustible ; R : réflecteur)

La nappe de puissance de référence est obtenue à partir d'un calcul APOLLO2 sur un huitième de réacteur tel que présenté sur la figure Fig. 3.1, basé sur la méthode MOC, à 281 groupes d'énergie et 142 872 régions. Ce calcul est ensuite condensé à 26 groupes d'énergie

et homogénéisé sur les 66 régions de la figure Fig. 3.1. Enfin, ce calcul de référence validé par rapport au code stochastique TRIPOLI (Both et Peneliau, 1996). Ce calcul de référence sera ensuite condensé sur le maillage énergétique auquel on désire calculer le réflecteur, et homogénéisé selon le maillage spatial que l'on choisit pour le réflecteur. On obtient ainsi une nappe de puissance de référence cohérente avec les choix de maillages spatiaux et énergétiques choisis pour le réflecteur.

Lors de notre étude, nous allons minimiser les écarts entre la nappe de puissance calculée et la nappe de puissance de référence en modifiant certains paramètres du réflecteur, que l'on appellera variables de contrôle. Les variables de contrôle de notre problème seront les coefficients de diffusion du réflecteur lorsque l'on travaillera avec un opérateur de diffusion (noté D_{g,R_i} pour le groupe d'énergie g et la zone du réflecteur R_i), et les sections efficaces macroscopiques totales du réflecteur lorsque l'on travaillera avec un opérateur SP_N (notées Σ_{tr,g,R_i} pour le groupe d'énergie g et la zone du réflecteur R_i).

3.1.2 Initialisation du réflecteur

Position du problème

Afin de mettre en place nos procédures de calcul de réflecteurs, il est nécessaire de choisir un réflecteur initial, que ce soit dans le cadre de la GPT ou de l'assimilation de données (voir le chapitre 2). Ce réflecteur initial est d'une importance cruciale pour la suite de l'étude. En effet, seules certaines des sections efficaces du réflecteur seront modifiées durant la procédure (les coefficients de diffusion ou les sections efficaces macroscopiques totales), et les autres sections restant inchangées tout au long du processus d'optimisation. Il est donc primordial que les sections qui ne seront pas modifiées soient calculées de façon pertinente au départ.

Le réflecteur initial est obtenu à partir du calcul de référence APOLLO2. En effet, celui-ci contient un jeu de sections efficaces à 26 groupes d'énergie et 66 régions. Cependant, ce calcul ne contient pas de coefficients de diffusion. Lorsque l'on effectue des calculs de diffusion, on devra donc calculer ces coefficients de diffusion à partir des sections efficaces. Le coefficient de diffusion s'obtient à partir de la section efficace macroscopique totale corrigée P-1, comme suit (on n'a pas noté ici la dépendance à la zone du réflecteur afin d'alléger les notations) :

$$\Sigma_{tr,g} = \Sigma_g - \sum_{h=1}^G \Sigma_{s,1,g \leftarrow h} \quad (3.1)$$

où :

- $\Sigma_{\text{tr},g}$ est la section efficace macroscopique totale corrigée P-1 du groupe g .
- Σ_g est la section efficace macroscopique totale du groupe g .
- $\Sigma_{s,1,g \leftarrow h}$ est la section efficace de diffusion anisotrope du groupe h au groupe g .
- G est le nombre total de groupes d'énergie.

On a donc deux choix pour calculer ces coefficients de diffusion :

- Calculer d'abord les coefficients de diffusion à 26 groupes directement à partir des sections efficaces macroscopiques totales corrigées P-1 du calcul de référence, puis condenser ces coefficients de diffusion selon le maillage énergétique choisi pour le réflecteur.
- Condenser d'abord les sections efficaces macroscopiques totales corrigées P-1 contenues dans le calcul de référence selon le maillage énergétique choisi pour le réflecteur, puis calculer les coefficients de diffusion du réflecteur à partir de ces sections efficaces macroscopiques totales corrigées P-1 condensées.

Nous avons donc effectué la comparaison entre les deux approches, à deux groupes d'énergie, en utilisant un opérateur de diffusion et avec un réflecteur homogène. Nous avons également comparé les résultats donnés par les deux approches aux résultats donnés par le réflecteur de Lefebvre-Lebigot. Les trois réflecteurs initiaux testés sont alors les suivants :

- Un réflecteur dont les coefficients de diffusion 2 groupes sont calculés en utilisant les sections macroscopiques totales 2 groupes corrigées P-1 issues d'un calcul MOC d'APOLLO2 à 26 groupes d'énergies condensé à 2 groupes d'énergie (correspondant à « référence » dans le tableau 3.1). Les coefficients de diffusion du réflecteur sont donc exprimés dans ce cas par : $D = \frac{1}{3 \int_E \Sigma_{\text{tr}}(E) dE}$. En effet, on intègre les sections macroscopiques totales corrigées P-1 sur le maillage énergétique à 26 groupes pour obtenir des sections macroscopiques totales 2 groupes corrigées P-1.
- Un réflecteur dont les coefficients de diffusion 2 groupes sont calculés en condensant les coefficients de diffusion 26 groupes. Ceux-ci sont obtenus directement à partir des

sections efficaces macroscopiques totales pondérées P-1 à 26 groupes issues du calcul MOC d'APOLLO2 à 26 groupes d'énergie (correspondant à « cond/hom » dans le tableau 3.1). Les coefficients de diffusion sont donc exprimés dans ce cas par :

$$D = \int_E \frac{1}{3\Sigma_{tr}(E)} dE$$

- Un réflecteur calculé par la méthode de Lefebvre-Lebigot (Marguet, 2011) (correspondant à « Lefebvre-Lebigot » dans le tableau 3.1).

On a comparé les résultats de ces trois réflecteurs initiaux en les associant à trois types de calculs pour les assemblages de la partie active (correspondant à « Comb. » dans le tableau 3.1) :

- Des assemblages dont les coefficients de diffusion 2 groupes sont calculés en utilisant les sections macroscopiques totales 2 groupes corrigées P-1 issues d'un calcul MOC d'APOLLO2 à 26 groupes d'énergies condensé à 2 groupes d'énergie (correspondant à « référence » dans le tableau 3.1).
- Des assemblages dont les coefficients de diffusion 2 groupes sont calculés en condensant les coefficients de diffusion 26 groupes. Ceux-ci sont obtenus directement à partir des sections efficaces macroscopiques totales corrigées P-1 à 26 groupes issues du calcul MOC d'APOLLO2 à 26 groupes d'énergie (correspondant à « cond/hom » dans le tableau 3.1).
- Des assemblages calculés en milieu infini (correspondant à « Milieu infini » dans le tableau 3.1). En pratique c'est ce calcul que l'on privilégiera pour la suite de l'étude, car c'est le choix industriel pour les calculs de diffusion à 2 groupes d'énergie.

Les comparaisons sont rassemblées dans le tableau 3.1. On a comparé les nappes d'écart entre la puissance calculée par COCAGNE dans les différentes configurations à la nappe de puissance de référence APOLLO2 (Δ_j , $j \in [1,281]$). On présente dans le tableau la moyenne des écarts (notée $E_{\Delta_{abs}}$) en %, et l'écart maximal (noté \max_{Δ}) en %, et définis par :

$$E_{\Delta_{abs}} = \frac{1}{281} \sum_{j=1}^{33} |\Delta_j| \quad ; \quad \max_{\Delta} = \max_{j \in [1,281]} (\Delta_j) \quad (3.2)$$

Tableau 3.1 Comparaisons des réflecteurs initiaux

Réfl. Comb.	cond/hom $D = \int \frac{1}{3\Sigma_{tr}}$		référence $D = \frac{1}{3 \int \Sigma_{tr}}$		Lefebvre Lebigot	
	\max_{Δ} (%)	$E_{\Delta_{abs}}$ (%)	\max_{Δ} (%)	$E_{\Delta_{abs}}$ (%)	\max_{Δ} (%)	$E_{\Delta_{abs}}$ (%)
cond/hom $D = \int \frac{1}{3\Sigma_{tr}}$	13.7	4.7	32.5	14.6	X ¹	X ¹
référence $D = \frac{1}{3 \int \Sigma_{tr}}$	46.3	22.8	63.4	31.7	X ¹	X ¹
Milieu infini	18.7	8.6	36.5	17.9	2.5	0.7

Solution retenue

Aux vues des résultats obtenus, il est évident que le réflecteur obtenu par la méthode de Lefebvre-Lebigot donne de meilleurs résultats que ceux obtenus à partir du calcul de référence APOLLO2. Cependant, comme on l'a spécifié en introduction de cette étude, cette méthode n'est valide que dans le cas d'un calcul à deux groupes d'énergie utilisant un opérateur de diffusion. Par conséquent, nous retiendrons la stratégie suivante pour le calcul du réflecteur initial :

- Lorsque l'on travaille à deux groupes d'énergie en utilisant un opérateur de diffusion, on utilisera comme réflecteur initial le réflecteur obtenu par la méthode de Lefebvre-Lebigot.
- Lorsque l'on dépasse le champ d'application de cette méthode, on utilisera le réflecteur obtenu par condensation/homogénéisation du calcul de référence APOLLO2 à 26 groupes d'énergie.

3.2 Mise en place des méthodes de résolution

Dans le chapitre 2, on a exposé les éléments de théorie nécessaires à la compréhension des schémas de calcul que nous mettons maintenant en place afin de répondre à notre problématique. On rappelle que l'objectif de notre étude est d'établir un schéma de calcul de calcul de

1. Non disponible.

réflecteurs en minimisant les écarts entre la nappe de puissance calculée par un code de cœur déterministe et la nappe de référence obtenue avec APOLLO2. Nous avons alors développé deux schémas de calcul différents :

- Le schéma de calcul implémenté à l'EPM avec les modules d'OPTEX. Ce schéma de calcul repose sur la minimisation d'une fonctionnelle dont les dérivées sont calculées avec la méthode GPT.
- Le schémas de calcul implémenté à EDF avec le code de cœur COCAGNE et le module ADAO, qui repose sur la théorie de l'assimilation de données.

3.2.1 Le modèle de réflecteur OPTEX (EPM)

Dans cette section, nous allons expliciter ici comment la méthode GPT est appliquée dans les modules d'OPTEX pour répondre à notre problématique, ainsi que le schéma de calcul mis en place.

Fonctionnelle mise en place

La fonctionnelle que nous allons minimiser la suivante :

$$F\{\mathbf{x}, \Phi(\mathbf{r})\} = \sum_{i=1}^{33} \left(\frac{P_i(\mathbf{x}, \Phi(\mathbf{r}))}{\sum_{j=1}^{33} P_j(\mathbf{x}, \Phi(\mathbf{r}))} - \frac{P_i^*}{\sum_{j=1}^{33} P_j^*} \right)^2 \quad (3.3)$$

où l'on a :

- $P_i(\mathbf{x})$, $\forall i \in [1, 33]$ est la puissance calculée par le code de cœur (DONJON ici) dans l'assemblage i , telle que :

$$P_i(\mathbf{x}) = \langle H, \Phi(\mathbf{x}, \mathbf{r}) \rangle_i = \int_0^\infty dE \int_{V_i} d^3\mathbf{r} H(\mathbf{r}, E) \Phi(\mathbf{x}, \mathbf{r}, E) \quad (3.4)$$

où V_i est le volume de l'assemblage i , et $H(\mathbf{r}, E)$ est le facteur de puissance donné par :

$$H(\mathbf{r}, E) = \kappa_F \langle \Sigma_F \Phi(\mathbf{r}, E) \rangle + \kappa_\gamma \langle \Sigma_\gamma \Phi(\mathbf{r}, E) \rangle \quad (3.5)$$

$\kappa_F \langle \Sigma_F \Phi(\mathbf{r}, E) \rangle$ est le terme de puissance produite par fission (κ_F se situe autour de 200 MeV et dépend de l'isotope considéré),

et $\kappa_\gamma < \Sigma_\gamma \Phi(\mathbf{r}, E) >$ est le terme de puissance produite par capture radiative ($\kappa_\gamma = 8\text{MeV}$).

- P_j^* , $\forall j \in [1, 33]$ est la puissance issue du calcul de référence APOLLO2 dans l'assemblage j .
- \mathbf{x} est le vecteur de contrôle, qui contiendra les coefficients de diffusion du réflecteur dans le cas de calculs de diffusion, ou les sections efficaces macroscopiques totales corrigées P-1 dans le cas de calculs SP_N.

Cette fonctionnelle est bien homogène puisque la puissance est normalisée (on a $F\{\mathbf{x}, \alpha\Phi(\mathbf{r})\} = F\{\mathbf{x}, \Phi(\mathbf{r})\}$, $\forall \alpha \in \mathbb{R}$). Le gradient de F s'exprime par :

$$\nabla F\{\mathbf{x}, \mathbf{r}\} = \frac{2}{\sum_{j=1}^{33} P_j(\mathbf{x})} \sum_{i=1}^{33} \left(\frac{P_i(\mathbf{x})}{\sum_{j=1}^{33} P_j(\mathbf{x})} - \frac{P_i^*}{\sum_{j=1}^{33} P_j^*} \right) \left(\delta_i(\mathbf{r}) - \frac{P_i(\mathbf{x})}{\sum_{j=1}^{33} P_j(\mathbf{x})} \right) \cdot \begin{bmatrix} H_1(\mathbf{r}) \\ H_2(\mathbf{r}) \\ \vdots \\ H_G(\mathbf{r}) \end{bmatrix} \quad (3.6)$$

où G est le nombre de groupes d'énergie considérés et pour tout $g \in [1, G]$, $H_g(\mathbf{r})$ est le facteur de puissance multi-groupe du groupe d'énergie g .

Or d'après (Hébert, 2009), le gradient d'une fonctionnelle homogène par rapport aux flux est orthogonal au flux. Étant donné que la fonctionnelle F est homogène par rapport aux flux, le gradient de F est bien orthogonal au flux, comme le requiert la méthode GPT. On peut donc calculer les dérivées de F afin de mettre en place un algorithme de minimisation de type PLCP (Ferland, 1984) pour trouver le minimum de F . La résolution pratique de ce problème d'optimisation sera présentée en Annexe A et est détaillée dans (Hébert, 2013).

La Figure 3.2 représente le schéma de calcul du modèle de réflecteur OPTEX.

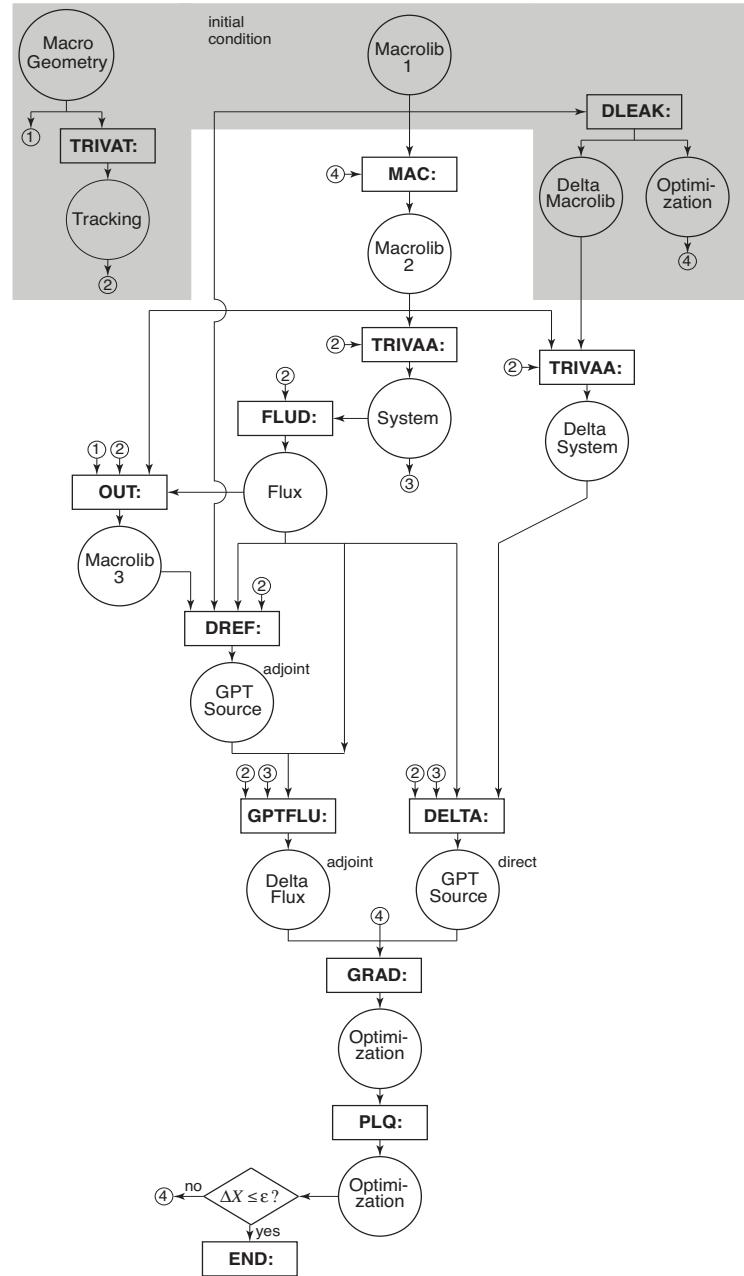


Figure 3.2 Schéma de calcul du modèle de réflecteur OPTEX (Hébert, 2013)

Sur cette figure :

- Les cercles représentent des objets DONJON sur lesquels on va effectuer des opérations.
- Les rectangles représentent des modules. Il peut s'agir soit de modules de DONJON,

comme un calcul de puissance, soit de modules DRAGON comme l'actualisation d'un objet *Macrolib*, ou OPTEX, comme une étape de minimisation de la fonctionnelle.

Le schéma de calcul comprend les modules DONJON et OPTEX décrits au chapitre 2, ainsi que les modules suivants :

- Le module **MAC**: est un module de DRAGON. Il sert à copier un objet Macrolib ou à en modifier certaines sections. Il a donc comme entrée et comme sortie un objet *Macrolib*. Dans le modèle de réflecteur OPTEX, il est utilisé pour copier *Macrolib 1* dans *Macrolib 2* (voir Figure 3.2), et également pour actualiser *Macrolib 2* avec le nouveau vecteur de contrôle contenant les nouveaux paramètres du réflecteur à l'issu d'une itération de l'algorithme d'optimisation.
- Le module **OUT**: est un module de TRIVAC. Il sert à stocker le résultat d'un calcul de taux de réactions dans un objet Macrolib dédié. Il a donc comme entrées :
 - un objet *Geometry*.
 - un objet *Tracking*.
 - un objet *Macrolib*.
 - un objet *Flux*.

Et comme sortie un objet *Macrolib*.

- Le module **DELTA**: est un module de TRIVAC. Il sert à calculer le terme de source de l'équation singulière à source décrite au chapitre 2 (voir 2.57). Il prend donc comme entrée :
 - un objet *Tracking*.
 - un objet *System*.
 - un objet *DSystem*.
 - un objet *Flux*.

Et comme sortie un objet *GPT Source*.

- Le module **END**: est un module de GANLIB. Il sert à effacer la mémoire, fermer les fichiers ouverts lors de l'exécution du jeu données, ou encore stopper cette exécution.

Ces modules s'enchainent comme dans le schéma de calcul de la Figure 3.2.

3.2.2 Le schéma de calcul COCAGNE/ADAO (EDF)

Position du problème

La méthode mise en place chez EDF repose quant à elle sur la théorie de l'assimilation de données décrite au chapitre 2. Nous allons tout d'abord expliciter les grandeurs de l'assimilation de données dans notre cas, en reprenant les notations de la section 3.1.3 :

- Le vecteur vrai noté \mathbf{x}^t est le vecteur contenant les paramètres du réflecteur (ou variables de contrôle) qui minimisent les écarts entre la nappe de puissance calculée et la nappe de puissance de référence.
- L'ébauche, notée \mathbf{x}^b est le vecteur contenant les paramètres initiaux du réflecteur, choisis dans la section 3.1.2.
- L'état du système, noté \mathbf{x} est le vecteur courant contenant les paramètres du réflecteur.
- La mesure du système, notée \mathbf{y}^0 est le vecteur contenant les valeurs de la puissance issue du calcul de référence APOLLO2, dans chaque assemblage du huitième de cœur présenté en Figure 3.1, et normalisées sur le huitième de cœur. On a donc : $\mathbf{y}^0 = \left(\frac{P_i^*}{\sum_{j=1}^{33} P_j^*}, i \in [1, 33] \right)$
- Les observations sont les valeurs de la puissance calculées par le code de cœur (COCAGNE ici), normalisées sur le huitième de cœur : $H(\mathbf{x}) = \left(\frac{P_j(\mathbf{x})}{\sum_{j=1}^{33} P_j(\mathbf{x})}, i \in [1, 33] \right)$.

Notre opérateur d'observation étant clairement non linéaire, nous nous placerons donc dans le cadre de l'approche 3D-VAR décrite au chapitre 2. Il est important de noter ici que l'on suppose que les observations sont indépendantes entre elles, ainsi que les variables de contrôles (composantes du vecteur \mathbf{x}). Cela implique alors que les matrices de covariance des erreurs sur l'ébauche et les observations sont diagonales. On note alors :

$$\mathbf{B} = \text{diag}(\sigma_{B,i}, i \in [1, N]) \quad (3.7)$$

$$\mathbf{R} = \text{diag}(\sigma_{R,j}, j \in [1, 33]) \quad (3.8)$$

où N est la taille du vecteur de contrôle contenant les paramètres du réflecteur. Avec les grandeurs de l'assimilation de données identifiées ci-dessus, la fonctionnelle associée à l'ap-

proche 3D-VAR 2.64 s'écrit comme suit (on n'a pas noté ici la dépendance en \mathbf{r} afin d'alléger les notations) :

$$J(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2\sigma_{B,i}} (\mathbf{x} - \mathbf{x}^b)^2 + \sum_{j=1}^{33} \frac{1}{2\sigma_{R,j}} \left(\frac{P_j(\mathbf{x})}{\sum_{k=1}^{33} P_k(\mathbf{x})} - \frac{P_j^*}{\sum_{k=1}^{33} P_k^*} \right)^2 \quad (3.9)$$

Le choix des valeurs des éléments diagonaux de \mathbf{B} ($\sigma_{B,i}$, $i \in [1,N]$) et de \mathbf{R} ($\sigma_{R,j}$, $j \in [1,33]$) sera détaillé dans les chapitres suivants.

Dans COCAGNE, on ne dispose pas de la méthode GPT pour calculer les dérivées de la fonctionnelle J . On calcule donc des dérivées approchées avec la méthode des différences finies. On utilisera ici une méthode de type quasi-Newton, appelée L-BFGS (Nocedal, 1980), pour trouver le minimum de J .

Le schéma de calcul ADAO/COCAGNE

Dans ce paragraphe, nous allons expliciter la manière avec laquelle les étapes de calculs s'enchainent dans le cadre du schéma de calcul ADAO/COCAGNE. La Figure 3.3 représente le schéma de calcul ADAO/COCAGNE.

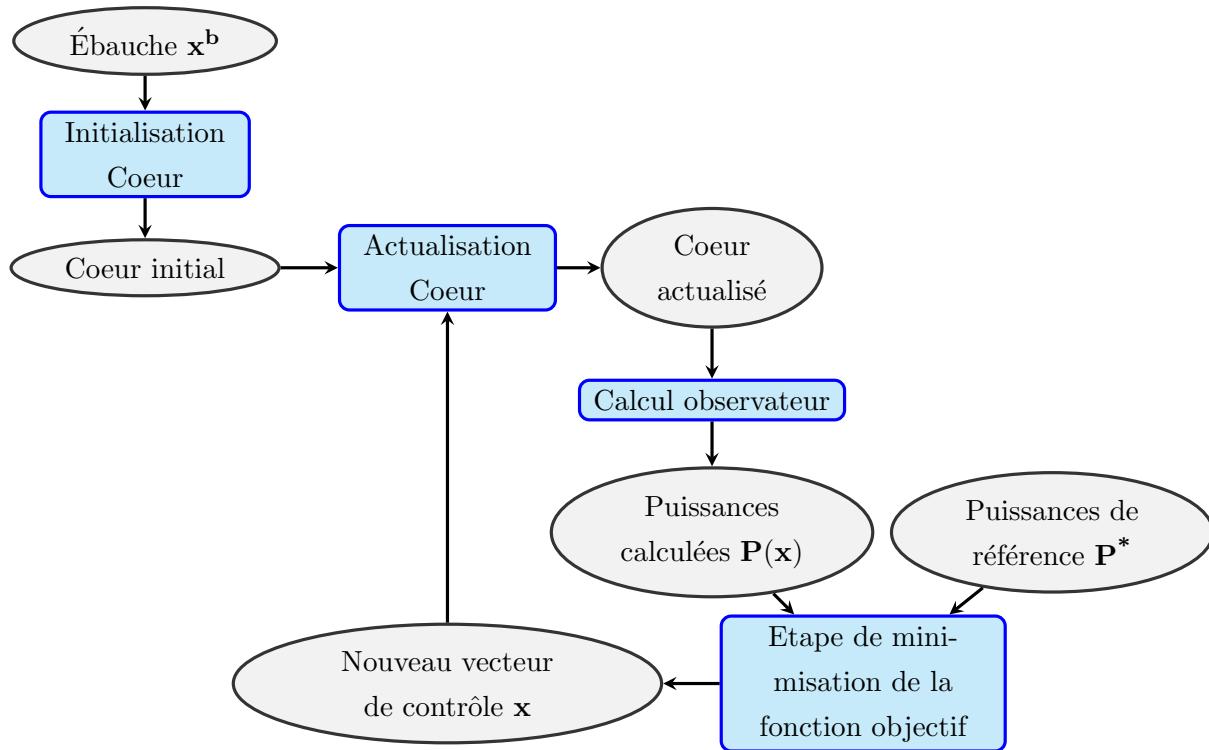


Figure 3.3 Schéma de calcul ADAO/COCAGNE

On a gardé les mêmes symboles qu'au paragraphe précédent :

- Les ovales représentent des objets COCAGNE sur lesquels on va effectuer des opérations.
- Les rectangles représentent des fonctions. Il peut s'agir soit de fonctions COCAGNE, comme un calcul de puissance, soit de fonctions gérées par le module ADAO, comme une étape de minimisation de la fonctionnelle.

Ainsi, le schéma de calcul ADAO/COCAGNE fonctionne de la manière suivante :

1. On construit un objet « Cœur » (objet COCAGNE) initial avec comme réflecteur le réflecteur initial que l'on a choisi (Lefebvre-Lebigot ou condensation/homogénéisation du calcul de référence).

2. On actualise cet objet « Cœur » avec les nouveaux paramètres du réflecteur (ou les paramètres initiaux si l'on rentre pour la première fois dans la boucle). On obtient ainsi un objet « Cœur » actualisé.
3. On effectue le calcul de l'observateur, c'est-à-dire un calcul de réactivité cœur 3D CO-CAGNE. On obtient ainsi le vecteur des observations, contenant les valeurs de la puissance dans l'ensemble des 33 assemblages du huitième de réacteur présenté en Figure 3.1.
4. La fonction « étape de minimisation de la fonctionnelle » prend comme argument l'observateur calculé précédemment, ainsi que le vecteur contenant les valeurs de la puissance de référence dans chaque assemblage de la partie active (Figure 3.1). On en obtient un nouveau vecteur de paramètres du réflecteur.
5. On réitère le processus à partir de l'étape 2, jusqu'à convergence, c'est-à-dire jusqu'à ce que l'on ait :

$$\frac{|F(\mathbf{x}^{(i)}) - F(\mathbf{x}^{(i-1)})|}{F(\mathbf{x}^{(i)})} \leq \epsilon \quad (3.10)$$

où $\mathbf{x}^{(i)}$ est le vecteur contenant les paramètres du réflecteur à l'itération i et ϵ est le critère de convergence. En pratique, on impose $\epsilon = 10^{-4}$.

CHAPITRE 4

VALIDATION PRÉLIMINAIRE ET CHOIX DE MODÉLISATION

Comme nous l'avons montré au chapitre 3, nous disposons de deux schémas de calcul permettant de calculer les paramètres du réflecteur 2D qui minimisent les écarts entre une nappe de puissance 2D calculée par un code de cœur déterministe et une nappe de puissance de référence 2D APOLLO2.

- Le premier schéma de calcul, exposé à la section 3.2.1, s'appuie sur les modules d'OPTEX dans DONJON, et utilise la méthode GPT pour calculer les dérivées d'une fonctionnelle 3.3, minimisée par l'algorithme PLCP.
- Le deuxième, exposé à la section 3.2.2, s'appuie sur le code de cœur COCAGNE et le module d'assimilation de données ADAO. Il calcule les dérivées de la fonctionnelle de l'assimilation de données 3.9 avec la méthode des différences finies, et il utilise l'algorithme d'optimisation L-BFGS.

Nous avons donc à notre disposition deux schémas de calcul répondant à le même problématique, en utilisant des méthodes et algorithmes très différents. De plus, on a vu que les codes de cœur déterministes utilisés dans les deux schémas de calcul utilisent la même méthode de résolution (les éléments finis de Raviart-Thomas). Leurs résultats en termes de valeur du k_{eff} et de nappe de puissance devraient être égaux pour des conditions de calculs identiques. Ceci constitue un outil puissant de validation de nos schémas de calcul. Dans ce chapitre, nous allons exposer notre démarche de validation, en comparant les résultats obtenus par nos deux schémas de calcul pour des cas tests simples.

Lors de cette étape de validation préliminaire, les calculs seront d'abord effectués à deux groupes d'énergie avec un opérateur de type diffusion. On exposera un cas supplémentaire de validation en diffusion à 4 groupes d'énergie dans le paragraphe 4.2.4.

4.1 Conditions de validation

4.1.1 Mise en cohérence des fonctions objectifs

Tout d'abord, on remarque que les fonctionnelles relatives à nos deux schémas de calcul sont a priori différentes. Il convient d'égaliser les fonctionnelles F (voir 3.3) et J (voir 3.9) dans nos cas test. Ceci est fait simplement en choisissant les valeurs suivantes pour les valeurs des termes diagonaux des matrices \mathbf{B} et \mathbf{R} :

$$\forall i \in [1, N], \quad \sigma_{B,i} \gg 1 \quad (4.1)$$

$$\forall i \in [1, 33], \quad \sigma_{R,i} = \frac{1}{2} \quad (4.2)$$

En pratique, l'équation 4.1 signifie que l'on considère une erreur importante sur l'ébauche. L'équation 4.2 signifie que l'on considère que le calcul de l'observateur dans les assemblages de la partie active est réalisé avec la même erreur dans chaque assemblage. Ainsi, on a :

$$F(\mathbf{x}) = J(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{33} \left(\frac{P_i(\mathbf{x})}{\sum_{j=1}^{33} P_j(\mathbf{x})} - \frac{P_i^*}{\sum_{j=1}^{33} P_j^*} \right)^2 \quad (4.3)$$

4.1.2 Initialisation du réflecteur

Tous les calculs sont effectués ici à deux groupes d'énergie avec un opérateur de diffusion. Les meilleurs choix de coefficients de diffusion initiaux du réflecteur sont les coefficients obtenus par la méthode de Lefebvre-Lebigot. Cependant, on n'a pas accès à ces coefficients dans DONJON. On choisira donc ici des coefficients de diffusion issus de la condensation/homogénéisation du calcul de référence APOLLO2.

4.1.3 Choix des paramètres de résolution

Les paramètres de résolution des deux codes de cœur doivent être les mêmes afin de valider correctement nos deux schémas de calcul. On choisira pour tous les cas test :

- Des éléments finis de Raviart-Thomas cubiques (notés RT2 dans COCAGNE), c'est-à-dire que l'on décompose les grandeurs de la neutronique dans une base de polynômes d'ordre 3 dans chaque élément.
- Une précision du calcul sur les flux à 10^{-9} . Il s'agit d'une précision importante, cependant, si l'on veut calculer la fonctionnelle avec une précision suffisante, il faut une

grande précision sur les valeurs de la puissance et donc sur les valeurs du flux étant donnée l'expression de notre fonctionnelle (voir 3.9).

- Un raffinement spatial égal à 8×8 , c'est-à-dire que chaque assemblage sera divisé en 64 éléments.

Ces paramètres nous permettent d'avoir un écart de 2 pcm sur un calcul de k_{eff} entre un calcul COCAGNE et un calcul DONJON. Ceci correspond à un écart de puissance maximal de 0.2 % avec un écart-type de 0.07 % sur les distributions de puissance calculées par les deux codes. Les cas test de validation seront tous résolus avec ces paramètres. Les divergences potentielles entre les résultats pourront donc être imputées à des comportements différents des méthodes d'optimisation utilisées.

4.2 Réalisation des cas test de validation

4.2.1 Réflecteur homogène - optimisation sur $D_{1,R}$

Mise en place du cas test

Le premier cas test de notre étude est très simple. Il s'agit du cas linéaire où l'on choisit un réflecteur homogène tel que présenté en Figure 3.1 et où la seule variable de contrôle est le coefficient de diffusion du groupe rapide dans le réflecteur, noté $D_{1,R}$.

Ce premier cas test étant très simple, nous devrions retrouver les mêmes résultats quel que soit le schéma de calcul utilisé. Pour contrôler les résultats obtenus par nos deux schémas de calcul, nous allons également les comparer à la solution obtenue par une méthode de dichotomie. On montre en Figure 4.1 la nappe des écarts de puissance à la référence obtenue avec notre réflecteur initial. Les écarts sont toujours notés Δ_j , $j \in [1, 281]$. Cette nappe correspond aux résultats présentés dans le tableau 3.1 ; elle a été obtenue avec les coefficients de diffusion du réflecteur obtenus par homogénéisation/condensation du calcul de référence APOLLO2. Dans ce cas test, le coefficient de diffusion du groupe rapide vaut $D_{1,R}^i = 1.26$ cm.

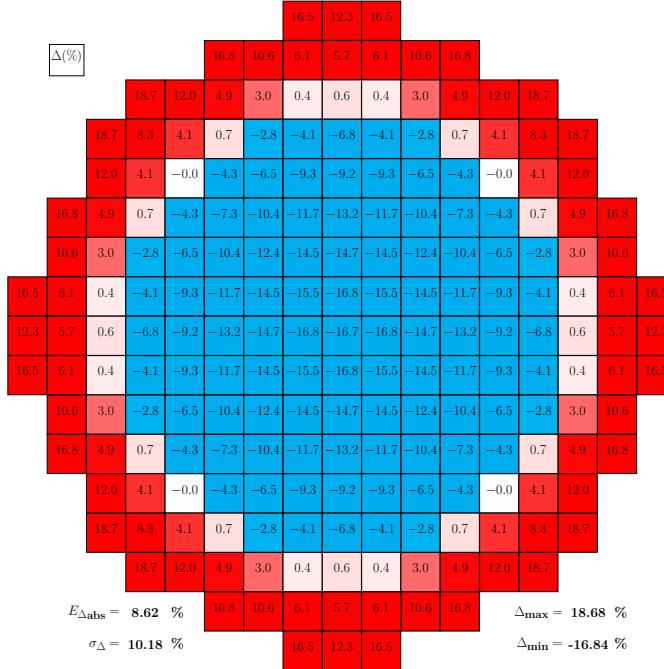


Figure 4.1 Nappe des écarts de puissance avant optimisation

Sur cette nappe, un assemblage est coloré en rouge lorsque l'écart de puissance à la référence est positif, c'est-à-dire lorsque le code de cœur surévalue la valeur de la puissance dans cet assemblage. A l'inverse, un assemblage est coloré en bleu lorsque l'écart de puissance à la référence est négatif, c'est-à-dire lorsque le code de cœur sous-évalue la valeur de la puissance dans cet assemblage. On applique à ces couleurs un filtre dépendant de la valeur absolue des écarts. Plus la couleur est foncée et plus l'écart est important. A l'inverse, plus la couleur est claire et plus l'écart est faible. On définit par ailleurs :

- $E_{\Delta_{\text{abs}}}$ est la valeur moyenne des écarts de puissance à la référence, définie par :

$$E_{\Delta_{abs}} = \frac{1}{281} \sum_{j=1}^{281} |\Delta_j| \quad (4.4)$$

- σ_A est la valeur RMS des écarts de puissance à la référence, définie par :

$$\sigma_{\Delta} = \sqrt{\sum_{j=1}^{281} \frac{(\Delta_j - \bar{\Delta})^2}{281}} \quad (4.5)$$

où $\bar{\Delta} = \frac{1}{281} \sum_{j=1}^{281} \Delta_j$.

- Δ_{\max} est l'écart de puissance maximal.
- Δ_{\min} est l'écart de puissance minimal.

Cette nappe correspond aux résultats donnés dans le tableau 3.1. On remarque asymétrie radiale sur cette nappe d'écart. En effet, le réflecteur initial est mal évalué, puisqu'il est obtenu par condensation/homogénéisation du calcul de transport de référence. On observe donc des écarts de puissance à la référence positifs très importants au niveau de l'interface cœur/réflecteur. Par effet de normalisation des flux, on observe donc des écarts très importants, négatifs cette fois, au centre du cœur. C'est en premier lieu cette asymétrie radiale que nos schémas de calcul vont permettre de supprimer. Par la suite, on verra que lorsque l'on supprime cette asymétrie radiale, on constate l'apparition d'une asymétrie azimutale, d'amplitude plus faible. Cette nouvelle asymétrie sera supprimée en raffinant le maillage du réflecteur.

Comparaisons des variables de contrôle après optimisation

Dans le tableau 4.1, on présente les coefficients de diffusion obtenus par nos différents schémas de calcul. Dans ce tableau, $D_{1,R}^f$ est le coefficient de diffusion du réflecteur uniforme obtenu après optimisation de nos schémas de calcul. $\Delta_{D_{1,R}^f}$ est l'écart à la valeur de $D_{1,R}^f$ obtenue par le modèle de réflecteur OPTEX

Tableau 4.1 Coefficients de diffusion après optimisation

	$D_{1,R}^f$ (cm)	$\Delta_{D_{1,R}^f}$ (%)
OPTEX	1.80	0
COCAGNE/ADAO	1.80	0.01

La forme très simple de la fonctionnelle présentée à la Figure 4.2 dans ce cas permet d'en trouver le minimum de façon très précise avec des méthodes très différentes (moins de 0.01% d'écart entre les résultats obtenus par les deux schémas de calcul).

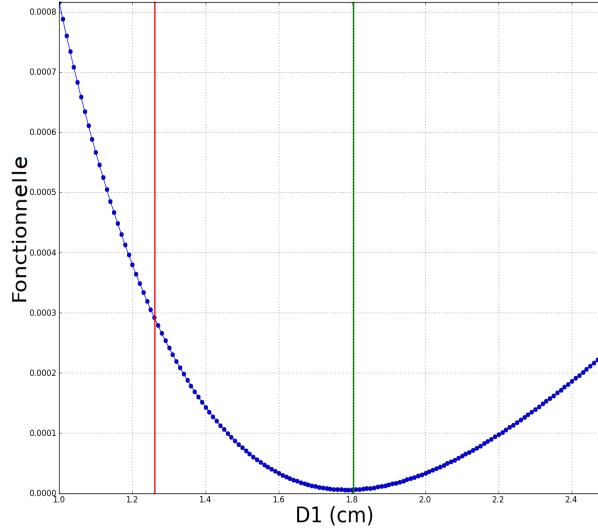


Figure 4.2 Variations de la fonctionnelle en fonction de $D_{1,R}$

Le marqueur rouge correspond à $D_{1,R}^i$ et le marqueur vert à $D_{1,R}^f$.

Nappes des écarts de puissance à la référence

On présente également à la Figure 4.3 les nappes des écarts de puissance après optimisation pour le modèle OPTEX (à gauche) et le schéma de calcul ADAO/COCAGNE (à droite).

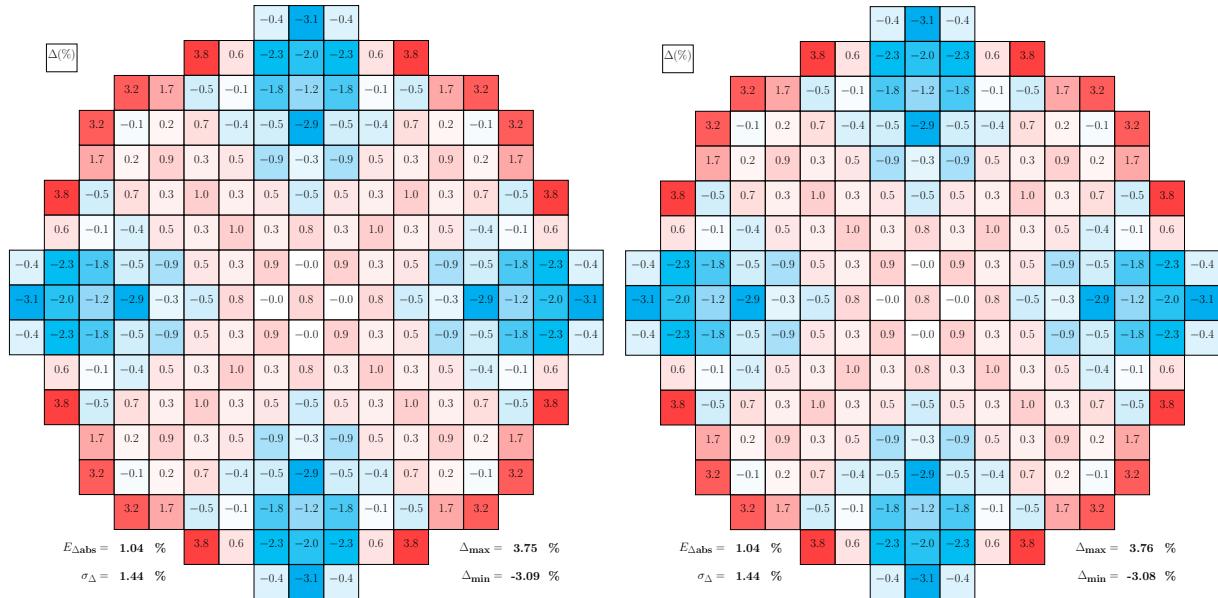


Figure 4.3 Nappes des écarts de puissance après optimisation

On obtient la même nappe d'écarts de puissance avec le modèle OPTEX et le schéma de calcul ADAO/COCAGNE. Ces résultats montrent que dans le cas simple d'une optimisation à un seul paramètre, les deux méthodes donnent des résultats très proches.

De plus, on remarque que l'effet de l'optimisation est d'augmenter le coefficient de diffusion du groupe rapide dans le réflecteur. En effet, la nappe des écarts de puissance à la référence initiale (voir 4.1) présente des écarts positifs à la périphérie du cœur et des écarts négatifs au centre du cœur. En augmentant le coefficient de diffusion du groupe rapide dans le réflecteur, les fuites de neutrons vers le réflecteur augmentent. La conséquence directe est une diminution de la puissance à la périphérie du cœur, et une augmentation de la puissance au centre du cœur par effet de normalisation. On comprend donc pourquoi l'augmentation du coefficient de diffusion du groupe rapide a tendance à diminuer les écarts de puissance à la référence dans l'ensemble du cœur.

On a donc bien validé les deux schémas de calcul dans ce cas test simple. On va à présent tenter de valider nos schémas de calcul sur des cas tests plus complexes.

4.2.2 Réflecteur homogène - optimisation sur ($D_{1,R}$, $D_{2,R}$)

Mise en place du cas test

Dans ces cas test, on garde un réflecteur homogène. Cependant, on va maintenant réaliser une optimisation à deux paramètres sur les coefficients de diffusion des deux groupes d'énergie, que l'on note $D_{1,R}$ et $D_{2,R}$. On obtient toujours les coefficients de diffusion initiaux par homogénéisation/condensation du calcul de référence APOLL2 : $D_{1,R}^i = 1.26$ cm et $D_{2,R}^i = 0.27$ cm. La nappe des écarts de puissance initiale est donc toujours celle présentée en Figure 4.1.

Comparaison des variables de contrôle après optimisation

De la même manière que dans le cas test précédent, on présente au tableau 4.2 les valeurs des coefficients de diffusion après optimisation pour le modèle OPTEX et le schéma de calcul ADAO/COCAGNE. Dans ce tableau, $D_{1,R}^f$ et $D_{2,R}^f$ représentent respectivement le coefficient de diffusion du groupe rapide et du groupe thermique, après optimisation de nos schémas de calcul. $\Delta_{D_{1,R}^f}$ et $\Delta_{D_{2,R}^f}$ sont respectivement les écarts aux valeurs de $D_{1,R}^f$ et de $D_{2,R}^f$ obtenues avec le modèle OPTEX.

Tableau 4.2 Coefficients de diffusion après optimisation

	$D_{1,R}^f$ (cm)	$D_{2,R}^f$ (cm)	$\Delta_{D_{1,R}^f}$ (%)	$\Delta_{D_{2,R}^f}$ (%)
OPTEX	1.52	0.0127	0	0
COCAGNE/ADAO	1.77	0.18	16	1313

On obtient ici des résultats très différents en termes de coefficients de diffusion avec nos deux schémas de calcul. Les nappes d'écart de puissance pour les deux schémas de calcul sont présentées en Figure 4.4 (le modèle OPTEX à gauche et le schéma de calcul ADAO/COCAGNE à droite).

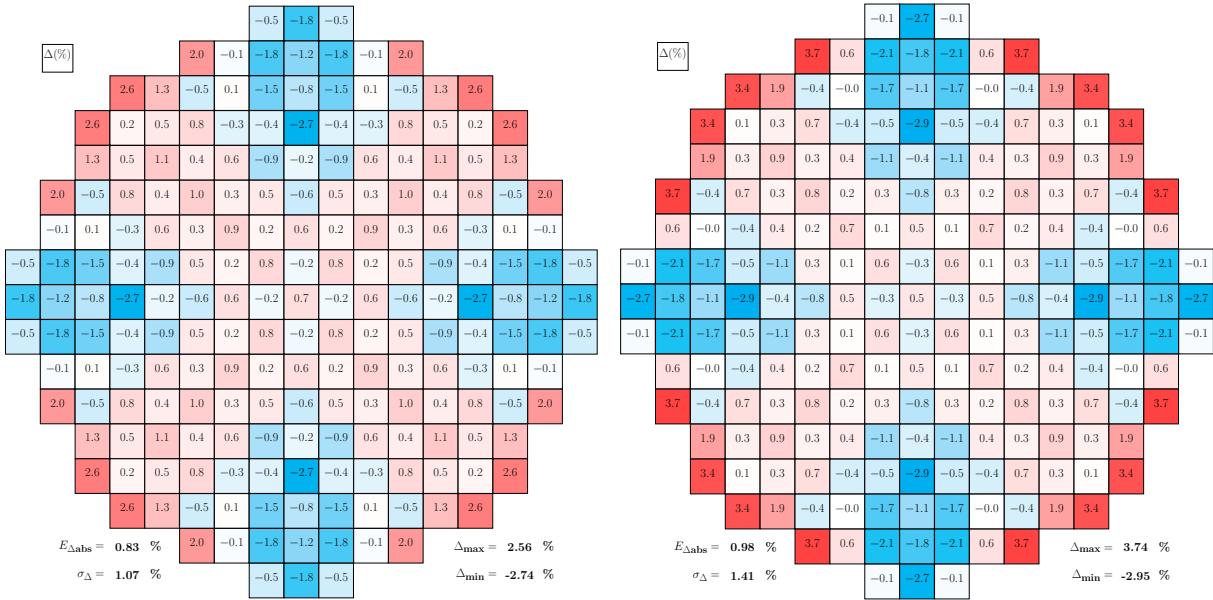


Figure 4.4 Nappes des écarts de puissance après optimisation

Ici aussi les résultats sont différents en termes de maxima (2.56 % pour le modèle OPTEX contre 3.74 % pour le schéma de calcul ADAO/COCAGNE). Cependant, les nappes ne sont pas très différentes en moyenne avec 0.83 % (OPTEX) contre 0.98 % (ADAO/COCAGNE), ce qui représente un écart faible par rapport à la nappe des écarts de puissance à la référence initiale (8.6 %). Deux vecteurs de coefficients de diffusion différents donnent des résultats assez similaires en termes de nappe des écarts de puissance à la référence, par rapport à la nappe des écarts initiale.

Identification des problèmes

Les résultats obtenus tendent à montrer que la fonctionnelle a une forme particulière, avec beaucoup de points équivalents au sens de l'optimisation. C'est ce que l'on illustre à la Figure 4.5.

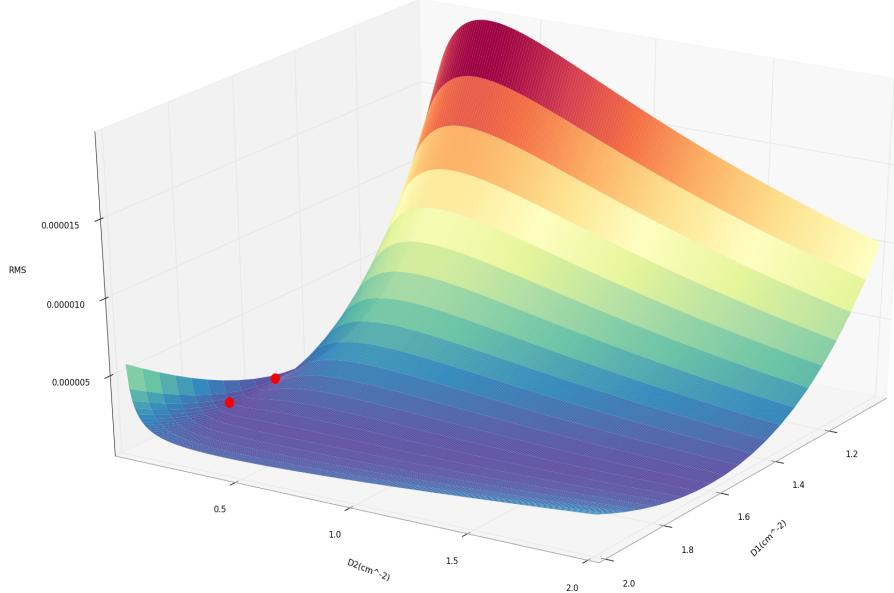


Figure 4.5 Variations de la fonctionnelle en fonction de $D_{1,R}$ et $D_{2,R}$

Les points rouges marquent les optima trouvés par les deux schémas de calcul. La forme de la fonctionnelle explique le problème rencontré : les deux paramètres d'optimisation sont dépendants. Il existe un large intervalle de $(D_{1,R}, D_{2,R})$ dans lequel les variations de la fonctionnelle sont très faibles pour des variations importantes de $D_{1,R}$ et de $D_{2,R}$: pour $(D_{1,R}, D_{2,R}) \in [1.5 \text{ cm}; 2.0 \text{ cm}] \times [0.01 \text{ cm}; 2.0 \text{ cm}]$. Les points trouvés par nos deux schémas de calcul sont situés dans cet intervalle. Les valeurs prises par la fonctionnelle en ces deux points sont proches, ce qui explique la similarité des deux nappes d'erreurs.

De plus, on remarque que dans les deux cas, les écarts de puissance à la référence diminuent nettement par rapport aux écarts initiaux. L'optimisation réalisée par nos schémas de calculs permet de supprimer l'effet d'asymétrie radiale observé initialement. Cet effet correspond à la zone de la Figure 4.5 présentant des valeurs de la fonctionnelle importantes. Lorsque l'on supprime cet effet, on se trouve dans la zone de faibles variations de la fonctionnelle.

On a donc montré que dans ce cas test, on obtient un problème à paramètres dépendants,

qui permet d'obtenir une infinité de réflecteurs équivalents au sens de l'optimisation, possédant cependant des coefficients de diffusion très différents. Les paramètres étant dépendants, le résultat des algorithmes d'optimisation dépend en grande partie des conditions que l'on fixe initialement. Or les deux schémas de calcul utilisent des méthodes de calcul du gradient différentes (la méthode GPT pour le modèle OPTEX et la méthode des différences finies pour le schéma de calcul ADAO/COCAGNE). Les gradients initiaux sont donc différents dans les deux cas et il est alors naturel que l'on obtienne des optima différents. Le choix d'optimiser sur les deux groupes d'énergie constitue un cadre de travail peu adapté à notre étude, puisque notre objectif est de calculer un seul réflecteur optimal. De plus, cela contredit l'hypothèse d'indépendance des variables de contrôle faite dans la section 3.2.2. Par la suite, nous chercherons à confirmer l'hypothèse de dépendance des coefficients de diffusion des différents groupes d'énergie pour des calculs à plus de 2 groupes.

Par ailleurs, on remarque une forte asymétrie azimutale des écarts de puissance à la référence sur la Figure 4.5, avec un écart de -3.1 % pour l'assemblage 9 et de 1.7 % pour l'assemblage 33 (voir Figure 3.1). Cette asymétrie est due au fait que le réflecteur calculé est homogène. La modélisation du réflecteur ne tient pas compte de l'asymétrie azimutale de sa structure (entrainée par la présence du bouclier thermique entre autres). Dans la suite, nous raffinerons le maillage spatial du réflecteur pour pallier cette asymétrie.

4.2.3 Réflecteur à 2 zones - optimisation sur ($D_{1,R1}$, $D_{1,R2}$)

Mise en place du cas test

Dans ce cas test, nous allons comparer nos deux schémas de calcul, là encore pour une optimisation à deux variables de contrôle. Cependant, on choisit ici de différencier le réflecteur en deux zones distinctes, comme présenté en Figure 4.6, et d'optimiser sur le coefficient de diffusion du groupe rapide de chacune des deux zones du réflecteur, notés $D_{1,R1}$ et $D_{1,R2}$.

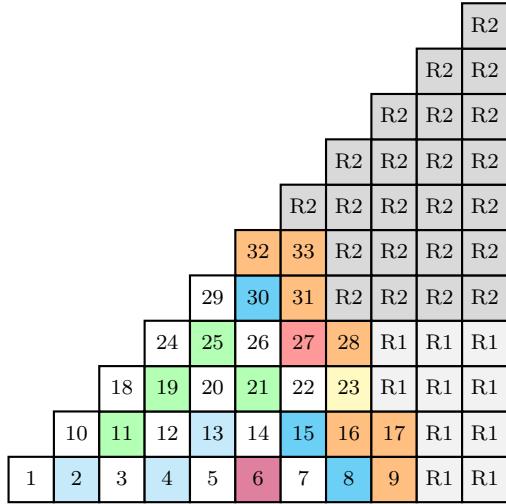


Figure 4.6 Modélisation du huitième de cœur (1 à 33 : combustible; R1, R2 : réflecteur)

Tout d'abord, on a tracé les variations de la fonctionnelle en fonction de $D_{1,R1}$ et de $D_{1,R2}$ dans ce cas, comme représenté en Figure 4.7.

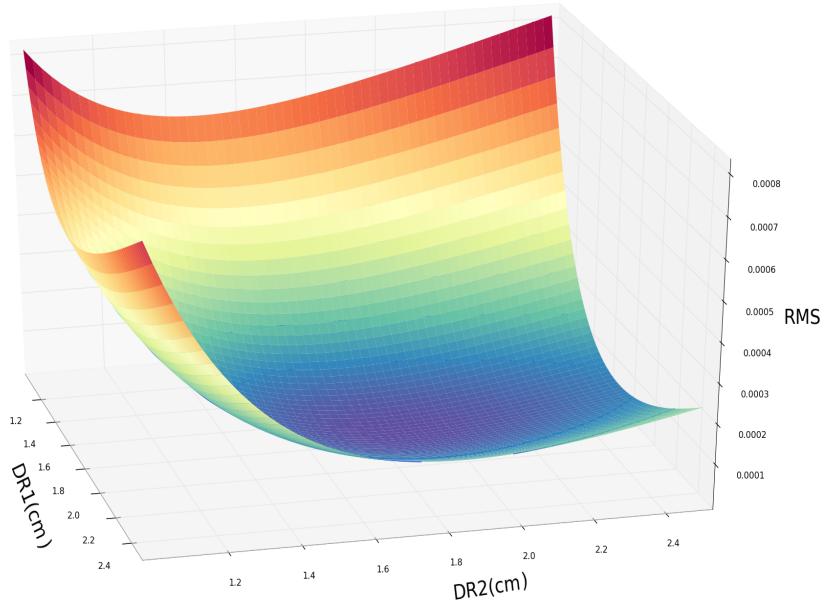


Figure 4.7 Variations de la fonctionnelle en fonction de $D_{1,R1}$ et $D_{1,R2}$

Cette fois-ci, la fonctionnelle a une forme parabolique avec un minimum global bien identifié, et en dehors de ce minimum, des variations importantes de $D_{1,R1}$ et de $D_{1,R2}$ entraînent des

variations importantes de la fonctionnelle. On s'attend donc à trouver les mêmes coefficients de diffusion avec nos deux schémas de calcul.

Comparaison des variables de contrôle après optimisation

On obtient toujours les coefficients de diffusion initiaux par condensation/homogénéisation du calcul de référence APOLLO2 : $D_{1,R1}^i = 1.24$ cm et $D_{1,R2}^i = 1.29$ cm. On reporte les valeurs de $D_{1,R1}^f$ et de $D_{1,R2}^f$ obtenues avec nos deux schémas de calcul dans le tableau 4.3. Dans ce tableau, $\Delta_{D_{1,R1}^f}$ et $\Delta_{D_{1,R2}^f}$ sont toujours respectivement les écarts aux valeurs de $D_{1,R1}^f$ et de $D_{1,R2}^f$ obtenues avec le modèle OPTEX.

Tableau 4.3 Coefficients de diffusion après optimisation

	$D_{1,R1}^f$ (cm)	$D_{1,R2}^f$ (cm)	$\Delta_{D_{1,R1}^f}$ (%)	$\Delta_{D_{1,R2}^f}$ (%)
OPTEX	1.76	1.87	0	0
COCAGNE/ADAO	1.77	1.85	0.5	1

Cette fois-ci, on obtient le même optimum avec les deux schémas de calcul, avec moins de 1 % d'écart sur les coefficients de diffusion après optimisation.

Nappe d'écarts de puissance à la référence

On présente maintenant en Figure 4.8 les nappes des écarts de puissance à la référence APOLLO2 (modèle OPTEX à gauche et schéma de calcul ADAO/COCAGNE à droite).

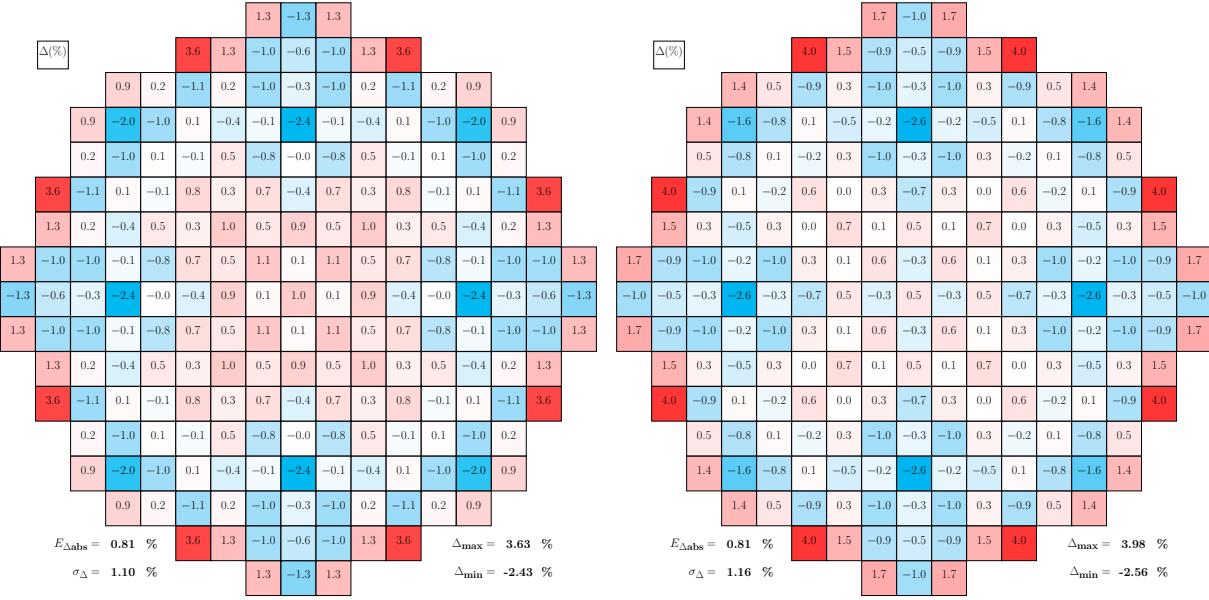


Figure 4.8 Nappes des écarts de puissance après optimisation

Les nappes des écarts de puissance à la référence sont ici extrêmement proches, avec 0.81 % d'écart moyen pour les deux nappes et une valeur RMS des écarts de 1.10 % pour le modèle OPTEX et 1.16 % pour le schéma de calcul ADAO/COCAGNE. Les écarts maximaux sont un peu plus éloignés (3.63 % pour le modèle OPTEX et 3.98 % pour le schéma de calcul ADAO/COCAGNE), cependant, ces écarts maximaux se situent à la périphérie du cœur, où les calculs sont moins précis et plus variables en fonction du code de cœur utilisé.

De manière générale, les résultats obtenus dans ce troisième cas test sont très satisfaisants : on vérifie ici l'indépendance des variables de contrôle de l'optimisation, et on obtient des résultats très similaires avec les deux schémas de calcul : moins de 1 % d'écart sur les coefficients de diffusion finaux du réflecteur, la même moyenne des écarts à la référence avec des valeurs RMS très proches. De plus, on constate sur la Figure 4.8 que dans ce cas, on n'observe plus l'asymétrie azimutale que l'on observait à la Figure 4.4. En effet, le maillage spatial du réflecteur a été raffiné et on décrit donc mieux l'asymétrie azimutale de structure du réflecteur.

4.2.4 Cas de calculs à 4 groupes d'énergie

Dans cette section, on a effectué des calculs de diffusion à 4 groupes d'énergie. En effet, si on a remarqué une dépendance des coefficients en énergie pour la minimisation de la fonctionnelle F (voir 4.3) lors des calculs à 2 groupes d'énergie, on va confirmer ici que l'on observe

le même résultat pour des calculs à 4 groupes d'énergie. On va donc calculer un réflecteur homogène comme présenté à la Figure 3.1, à 4 groupes d'énergie. On a donc 4 coefficients de diffusion dans le réflecteur, que l'on note $D_{1,R}$, $D_{2,R}$, $D_{3,R}$ et $D_{4,R}$. On va mettre en place deux cas tests d'optimisation :

- On optimise uniquement sur le couple $(D_{1,R}, D_{2,R})$. La nappe représentant les variations de la fonctionnelle en fonction de $(D_{1,R}, D_{2,R})$ est présentée à gauche sur la Figure 4.9.
- On optimise uniquement sur le couple $(D_{1,R}, D_{3,R})$. La nappe représentant les variations de la fonctionnelle en fonction de $(D_{1,R}, D_{3,R})$ est présentée à droite sur la Figure 4.9.

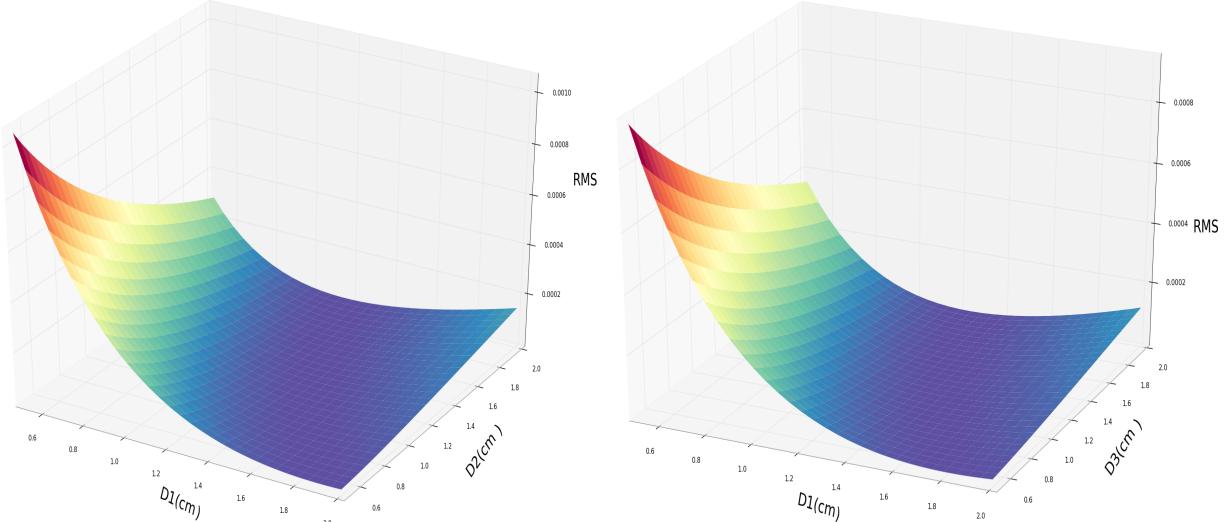


Figure 4.9 Variations de la fonctionnelle en fonction de $(D_{1,R}, D_{2,R})$ (à gauche) et en fonction de $(D_{1,R}, D_{3,R})$ (à droite)

On observe là encore des variations très faibles de la fonctionnelle pour des variations importantes des coefficients de diffusion du réflecteur. Les coefficients de diffusion sont donc ici aussi clairement des paramètres dépendants pour l'optimisation de la fonctionnelle. Pour la suite de notre étude, nous ne retiendrons pas cette configuration et nous chercherons à avoir des variables de contrôle indépendantes.

4.3 Conclusions sur la validation

4.3.1 Résultats

Nous avons validé nos deux schémas de calcul sur trois cas tests : un cas linéaire d'optimisation à un paramètre, un cas d'optimisation à deux paramètres dépendants, et enfin un cas d'optimisation à deux paramètres indépendants.

Nous avons pu observer que dans le premier cas, on obtient le même résultat avec les deux schémas de calcul. Dans le deuxième cas, les paramètres sont dépendants et on ne parvient pas à trouver le même résultat avec les deux schémas de calcul, comme on l'a expliqué dans les paragraphes 4.2.2 et 4.2.4. Enfin, dans le dernier cas, on obtient les mêmes résultats avec les deux schémas de calcul, ce qui valide les deux schémas de calcul lorsque l'on se trouve en présence d'un problème à variables de contrôles indépendantes.

Cette première étude nous a permis d'une part de valider nos schémas de calcul sur des cas test simples, mais aussi de faire un choix des variables de contrôle permettant l'indépendance de ceux-ci : dans toutes les études ultérieures, on optimisera uniquement sur le coefficient de diffusion du groupe rapide dans chaque zone du réflecteur, comme on l'a fait dans la section 4.2.3.

4.3.2 Comparaison des deux schémas de calcul

Lors de la validation des deux schémas de calcul, on a également comparé leurs performances respectives en termes de temps d'exécution et de nombre d'itérations, dans le cas des calculs que nous avons menés. Il ressort que :

- Une itération exécutée par le schéma de calcul ADAO/COCAGNE est plus longue qu'une itération exécutée par le modèle OPTEX. En effet, le schéma de calcul ADAO/COCAGNE utilise la méthode des différences finies pour calculer le gradient de la fonctionnelle F (voir 4.3). On doit donc faire deux appels à COCAGNE par variable de contrôle. Dans le cas du modèle de réflecteur OPEX, la méthode GPT ne nécessite que 2 appels à DONJON (problème direct et problème adjoint). Ceci explique la différence de durée des itérations.
- L'algorithme d'optimisation du schéma de calcul ADAO/COCAGNE converge en un nombre d'itérations inférieur au nombre d'itérations nécessaire à l'algorithme d'optimisation du modèle OPTEX. En ordre de grandeur, le schéma de calcul ADAO/COCAGNE

converge en une dizaine d’itérations tandis que le modèle de réflecteur OPTEX converge en une centaine d’itérations pour des calculs en diffusion à 2 groupes d’énergie.

- Le flot de données ADAO/COCAGNE converge plus rapidement que le modèle OPTEX, pour une précision similaire du résultat. Le temps de convergence du schéma de calcul ADAO/COCAGNE est de l’ordre de la minute tandis que le temps de convergence du modèle de réflecteur OPTEX est de la horde de la dizaine de minutes pour des calculs en diffusion à 2 groupes d’énergie.

Cependant, on a effectué ces constatations dans le cas où le vecteur de contrôle est de petite taille : lors des calculs en diffusion à 2 groupes d’énergie avec peu de zones réflecteur, on aura moins de 10 variables de contrôle. Intuitivement, on peut penser que pour des vecteurs de contrôle de taille plus importante (plus de 100 variables), le modèle OPTEX convergera plus rapidement. En effet, dans le cas du schéma de calcul ADAO/COCAGNE, on utilise la méthode des différences finies pour calculer le gradient de la fonctionnelle, ce qui nécessite beaucoup de calculs lorsque la taille du vecteur de contrôle augmente. A l’inverse, la méthode GPT ne nécessite pas plus de calculs lorsque la taille du vecteur de contrôle augmente puisque le gradient est calculé de manière exacte comme exposé au chapitre 2.

La taille du vecteur de contrôle pourrait augmenter pour deux raisons :

- Le maillage énergétique est raffiné et l’optimisation est réalisée sur un grand nombre de groupes.
- Le maillage du réflecteur est raffiné.

Or la première option a été écartée dans ce chapitre. En effet, l’optimisation sur un grand nombre de groupes mène à un problème d’optimisation à paramètres dépendants ce qui est préjudiciable à notre démarche. De manière générale, pour les cas d’applications de cette étude, le schéma de calcul ADAO/COCAGNE converge plus rapidement. Pour des problèmes de taille plus importante, il faudrait privilégier le modèle de réflecteur OPTEX.

4.4 Choix de modélisation

4.4.1 Modélisation de la partie active

Calculs en diffusion

Dans le cas de calculs en diffusion, la partie active du cœur sera composée d'assemblages calculés en milieu infini, afin d'être cohérent avec les choix industriels d'EDF. La suite de cette étude sera réalisée uniquement avec le schéma de calcul ADAO/COCAGNE. Cependant, on a montré dans la partie précédente que les deux schémas de calcul permettent d'obtenir les mêmes résultats lorsque les variables de contrôle sont indépendantes.

Calculs SP_N

Dans le cadre des calculs SP_N, on dispose toujours des assemblages calculés en milieu infini pour la partie active (voir Figure 3.1). Cependant, les sections efficaces seront modélisées à l'échelle crayon par crayon, et non plus homogènes par assemblage comme c'était le cas dans le chapitre précédent. On pourra se reporter au chapitre 1 pour les choix de modélisation de la partie active dans le cadre de l'approximation SP_N.

On disposera donc des valeurs de la puissance à l'échelle du crayon, que l'on pourra homogénéiser pour obtenir les nappes des écarts de puissance homogènes par assemblages comparables à celles présentées au chapitre précédent.

4.4.2 Modélisation de la fonction objectif

Calculs en diffusion

Lors de la validation des schémas de calcul, on a choisi d'accorder un poids égal à chaque assemblage de la partie active (voir 4.2) afin de minimiser la même fonctionnelle 4.3 avec nos deux schémas de calcul. Cependant, cette modélisation ne reflète pas le comportement de l'opérateur de diffusion sur l'ensemble du cœur. Dans la réalité, cet opérateur est moins précis dans les zones de haute hétérogénéité. Ainsi, la puissance calculée avec un opérateur de diffusion est moins précise dans les assemblages situés à l'interface cœur/réflecteur qu'à l'intérieur du cœur. Il convient donc de dimensionner la matrice de covariance liée aux observations \mathbf{R} de manière à ce que les termes de variance associés aux assemblages de la périphérie du cœur soient plus grands que les termes de variances associés aux assemblages du centre du cœur. Par ailleurs, l'assemblage 6 (voir 3.1) est également situé dans une zone hautement hétérogène, car ses propriétés d'enrichissement sont très différentes de celles des assemblages voisins. Il sera donc naturellement moins bien calculé par l'opérateur de diffusion.

On définit ainsi deux classes d'assemblages pour la partie active :

- La classe A : comprend les assemblages situés au centre du cœur. Les termes de la matrice \mathbf{R} associés à ces assemblage sont définis comme :

$$\forall j \notin \{6, 9, 17, 23, 28, 31, 33\}, \quad \sigma_{R,j} = \sigma_{R,A} = 0.5 \quad (4.6)$$

- La classe B : comprend les assemblages situés à l'interface cœur/réflecteur ainsi que l'assemblage 6. Les termes de la matrice \mathbf{R} associés à ces assemblage sont définis comme :

$$\forall j \in \{6, 9, 17, 23, 28, 31, 33\}, \quad \sigma_{R,j} = \sigma_{R,B} = 5 \quad (4.7)$$

On choisit de garder une contribution nulle de l'ébauche. En effet, dans de nombreux cas, on choisira d'initialiser les paramètres du réflecteur par condensation/homogénéisation du calcul de référence. On a vu avec la nappe des écarts de puissance à la référence présentée à la Figure 4.1 que ces paramètres donnent de très mauvais résultats. On accorde donc une confiance très faible à l'ébauche et on a :

$$\forall i \in [1, N], \quad \sigma_{B,i} \gg 1 \quad (4.8)$$

Il est important de noter que l'on conserve ce choix même dans le cas où le réflecteur initial donne des résultats corrects, comme avec le réflecteur Lefebvre-Lebigot pour les calculs de diffusion à 2 groupes. En effet, la prise en compte de l'ébauche dans la minimisation a pour effet de lisser la fonctionnelle et donc d'obtenir un problème plus aisé à minimiser. Cependant, en prenant en compte l'ébauche, on modifie le problème de minimisation. Dans notre cas, on ne constate pas de problème de minimisation, et on ne souhaite pas que l'ébauche ait une influence sur la minimisation des écarts de puissance à la référence. L'objectif de l'étude est de minimiser la distribution des écarts de puissance et la contribution de l'ébauche n'est pas pertinente ici. C'est pourquoi on choisit de ne pas prendre en compte la contribution de l'ébauche dans la fonctionnelle. La fonctionnelle de l'équation 3.9 devient alors, en posant $\mathbf{x} = \mathbf{D}$:

$$J(\mathbf{D}) = \sum_{j=1}^{33} \frac{1}{2\sigma_{R,j}} \left(\frac{P_j(\mathbf{D})}{\sum_{k=1}^{33} P_k(\mathbf{D})} - \frac{P_j^*}{\sum_{k=1}^{33} P_k^*} \right)^2 \quad (4.9)$$

Et avec les valeurs des termes de variance $\sigma_{R,j}$ choisies ici (voir 4.6 et 4.7), en notant $B = \{6, 9, 17, 23, 28, 31, 33\}$, et $A = \{j, \forall j \notin B\}$:

$$J(\mathbf{x}) = \sum_{j \in A} \left(\frac{P_j(\mathbf{x})}{\sum_{k=1}^{33} P_k(\mathbf{x})} - \frac{P_j^*}{\sum_{k=1}^{33} P_k^*} \right)^2 + \sum_{j \in B} \frac{1}{10} \left(\frac{P_j(\mathbf{x})}{\sum_{k=1}^{33} P_k(\mathbf{x})} - \frac{P_j^*}{\sum_{k=1}^{33} P_k^*} \right)^2 \quad (4.10)$$

On représente alors en Figure 4.10 les nappes des écarts de puissance à la référence obtenue après optimisation avec le schéma de calcul ADAO/COCAGNE, pour le réflecteur à deux zones présenté en Figure 4.6. Ces nappes sont calculées en accordant des poids égaux à tous les assemblages de la partie active (à gauche), et en différenciant les deux classes A et B (à droite).

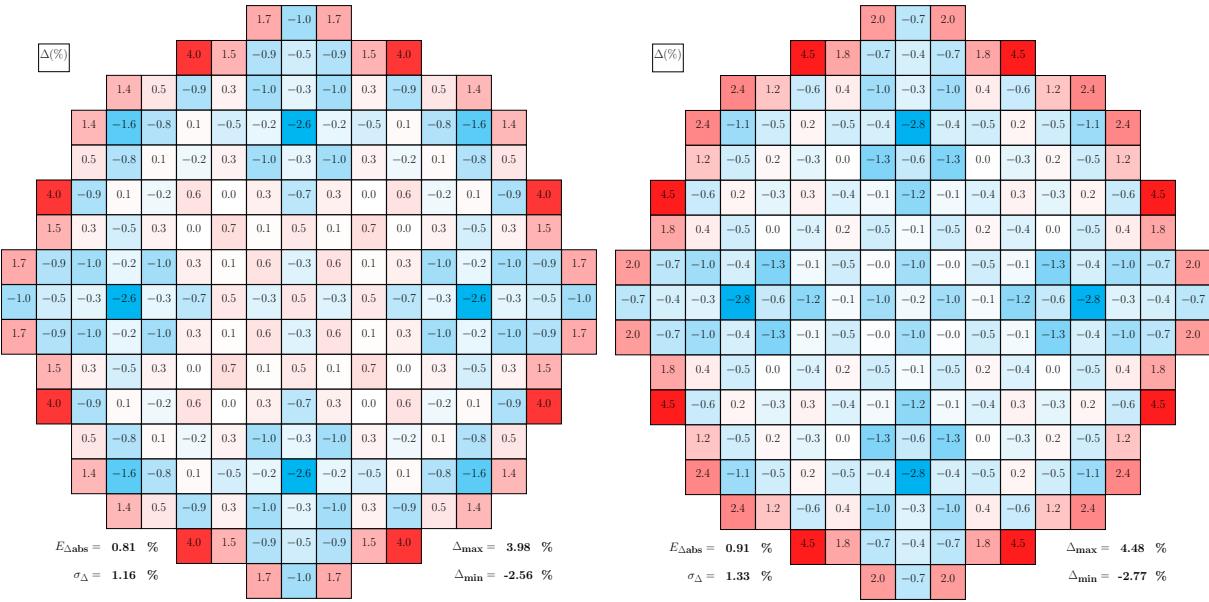


Figure 4.10 Nappes des écarts de puissance après optimisation - pondération de la fonctionnelle

On remarque que l'on obtient des écarts à l'interface cœur/réflecteur plus importants lorsque l'on pondère la fonctionnelle suivant la position des assemblages. Ceci est logique puisqu'en augmentant l'erreur faite par l'opérateur de diffusion au niveau de ces assemblages, on a diminué leur poids dans la fonctionnelle. Les écarts de puissance à la référence sont donc moins minimisés dans ces assemblages. On obtient alors de moins bons résultats que dans le cas d'une fonctionnelle non pondérée (écart maximal de 3.98 % sans pondération contre 4.48 % avec pondération). Cependant, cette modélisation pondérée de la fonctionnelle constitue une représentation plus fidèle du comportement réel de l'opérateur de diffusion dans les zones hétérogènes. Dans le cas présent, cette pondération entraîne de moins bons résultats sur la nappe des écarts de puissance à la référence, cependant, étant donné qu'il s'agit d'une meilleure représentation du comportement de l'opérateur de diffusion, on peut penser que

l'on obtient un modèle de réflecteur plus prédictif, qui permettra de calculer de meilleurs réflecteurs sur d'autres plans de chargement par exemple. Cela constitue l'intérêt de pondérer la fonctionnelle, et c'est ce choix que nous retiendrons par la suite pour les calculs de diffusion.

Calculs SP_N

Dans le cadre de l'approximation SP_N, nous modélisons les assemblages de la partie active crayon par crayon. Dans ce cas, l'opérateur SP_N se comporte aussi bien dans les zones forte hétérogénéité que dans les zones homogènes. Ainsi, on ne peut plus faire l'hypothèse que le calcul de la puissance est moins précis dans les assemblages situés à l'interface cœur/réflecteur. La modélisation de la fonctionnelle que l'on a mis en place dans le chapitre précédent n'est donc pas applicable ici.

Il est important de noter que ce choix de modélisation n'implique pas que les résultats seront meilleurs dans les zones de forte hétérogénéité. Au niveau de l'interface cœur/réflecteur par exemple, la qualité des résultats dépendra du réflecteur utilisé. Ici, on fait simplement l'hypothèse que les calculs sont aussi précis dans chacun des assemblages. On n'accorde donc pas d'erreur de modèle plus importante dans certains assemblages.

On va donc modifier la fonctionnelle, et plus particulièrement les valeurs des termes diagonaux des matrices **B** et **R**. Ainsi, on définit ici une seule classe d'assemblage, et on pose :

$$\forall j \in [1, 33], \quad \sigma_{R,j} = 0.5 \quad (4.11)$$

De plus, comme dans le chapitre précédent, on considère que l'erreur faite sur l'ébauche est très importante puisque l'on obtient celle-ci par condensation/homogénéisation du caclul de référence. On pose alors :

$$\forall i \in [1, 6], \quad \sigma_{B,i} \gg 1 \quad (4.12)$$

La fonctionnelle présentée à l'équation 3.9 devient donc dans ce cas, en posant $\mathbf{x} = \Sigma_{\text{tr}}$:

$$J(\Sigma_{\text{tr}}) = \sum_{j=1}^{33} \left(\frac{P_j(\Sigma_{\text{tr}})}{\sum_{k=1}^{33} P_k(\Sigma_{\text{tr}})} - \frac{P_j^*}{\sum_{k=1}^{33} P_k^*} \right)^2 \quad (4.13)$$

4.4.3 Maillage du réflecteur

Après avoir choisi une modélisation traduisant au mieux le comportement de l'opérateur de diffusion dans les différents assemblages, nous nous intéressons au maillage du réflecteur. Nos schémas de calcul nous permettent de calculer des réflecteurs hétérogènes, or le réflecteur est

composé de plusieurs matériaux métalliques et d'eau. Il est donc essentiel de traduire cette hétérogénéité dans notre modélisation. On présente en Figure 4.11 un schéma général du réflecteur dans un REP.

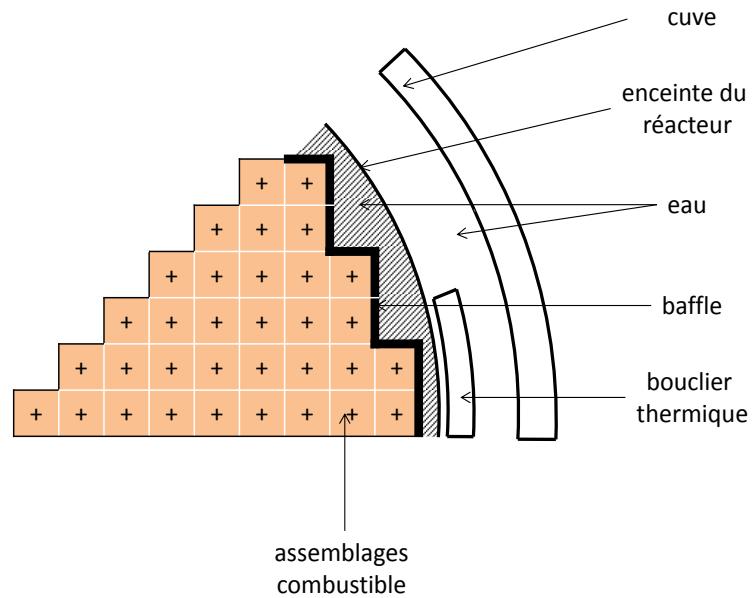


Figure 4.11 Schéma général d'un huitième de réflecteur dans un REP

On fait alors le choix de modéliser le réflecteur avec le maillage présenté en Figure 4.12.

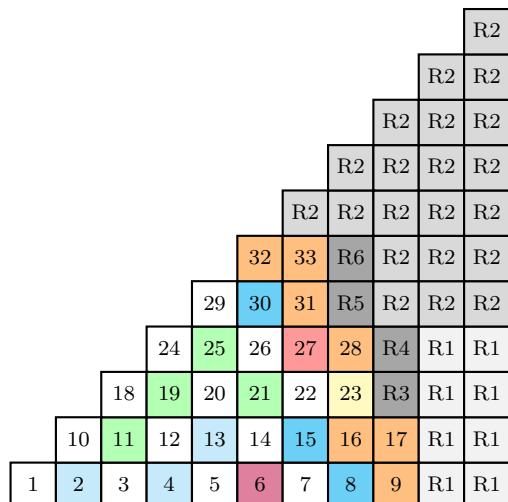


Figure 4.12 Modélisation du huitième de cœur (1 à 33 : combustible ; [R1:R6] : réflecteur)

Cette modélisation est intéressante, car elle prend uniquement en compte la géométrie du réflecteur. Du point de vue de l'optimisation, ce maillage permet également d'augmenter le nombre de variables de contrôle, donc le nombre de degrés de liberté pour l'optimisation. Cela devrait permettre d'obtenir de meilleurs résultats que précédemment, en particulier au niveau de l'interface cœur/réflecteur où l'on a raffiné le maillage du réflecteur de manière importante par rapport aux situations précédentes.

Calculs en diffusion

Dans le cas de calculs de diffusion, le vecteur de contrôle \mathbf{D} est maintenant défini par :

$$\mathbf{D} = (D_{1,R_1}, D_{1,R_2}, D_{1,R_3}, D_{1,R_4}, D_{1,R_5}, D_{1,R_6})^T \quad (4.14)$$

où D_{1,R_i} est le coefficient de diffusion du groupe rapide dans la zone réflecteur R_i ($i \in [1, 6]$).

Dans le cas de calcul de diffusion (donc avec une fonctionnelle pondérée en fonction des erreurs dans chaque assemblage de la partie active), on compare les résultats en termes de nappe des écarts de puissance à la référence, avec le maillage du réflecteur de la Figure 4.6 (2 zones, à gauche sur la Figure 4.13) et le maillage de la Figure 4.12 (6 zones, à droite sur la Figure 4.13).

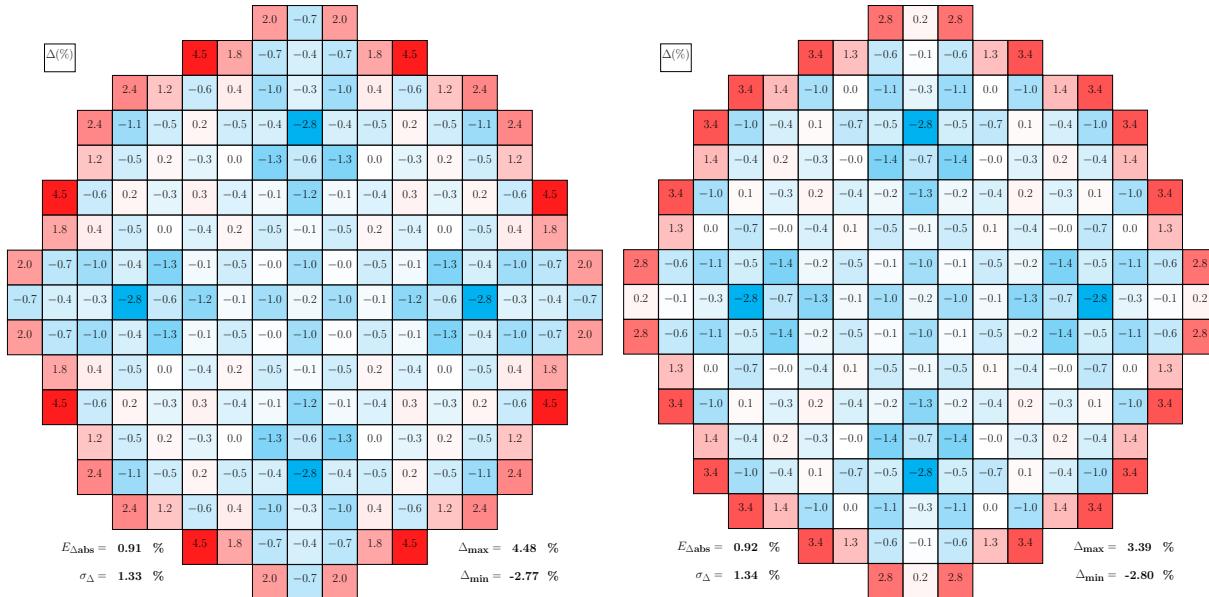


Figure 4.13 Nappes des écarts de puissance après optimisation - maillage du réflecteur (2 zones à gauche, 6 zones à droite)

On note une amélioration des résultats due au maillage plus fin du réflecteur. L'écart maximal

passe de 4.48 % pour un réflecteur à 2 zones à 3.39 % avec un réflecteur à 6 zones. On constate peu d'amélioration sur l'écart moyen et sur la valeur RMS des écarts. La modélisation plus fine du réflecteur permet donc surtout d'améliorer de manière significative les écarts maximaux, au niveau de l'interface cœur/réflecteur.

Calculs SP_N

Dans le cas de calculs SP_N, le vecteur de contrôle Σ_{tr} est maintenant défini, par analogie avec le choix de modélisation effectué en diffusion, par :

$$\Sigma_{\text{tr}} = (\Sigma_{tr,1,R_1}, \Sigma_{tr,1,R_2}, \Sigma_{tr,1,R_3}, \Sigma_{tr,1,R_4}, \Sigma_{tr,1,R_5}, \Sigma_{tr,1,R_6}) \quad (4.15)$$

où $\Sigma_{tr,1,R_i}$ est la section efficace macroscopique totale dans la zone réflecteur R_i ($i \in [1, 6]$). Les résultats obtenus dans le cas de calculs SP_N seront exposés au chapitre 6, pour N=3.

CHAPITRE 5

RÉSULTATS EN DIFFUSION

Dans ce chapitre, nous allons exposer les résultats obtenus lors de notre étude, dans le cas des calculs de diffusion. Ce chapitre est consacré à l'étude des schémas de calcul présentés dans les chapitres précédents pour évaluer les réflecteurs 2-groupes et multi-groupes en utilisant un opérateur de type diffusion. Nous allons travailler dans le cadre des choix de modélisation que nous avons effectués au chapitre 4 :

- Les assemblages de la partie active sont homogènes et calculés en milieu infini.
- Le réflecteur comporte 6 zones distinctes.
- La fonctionnelle est pondérée avec une erreur plus importante pour les assemblages de l'interface cœur/réflecteur et l'assemblage 6 (voir Figure 3.1).

Nous exposons ici les résultats obtenus, en comparant les nappes de puissances obtenues avec les réflecteurs calculés par nos flots de données à une distribution de puissance de référence issue d'un calcul APOLLO2. Également, nous comparerons des indicateurs macroscopiques 3D obtenus avec les réflecteurs simulés par nos schémas de calcul à des données d'exploitation. Enfin, nous comparerons les nappes d'écart entre les activités calculées et les activités mesurées expérimentalement. Nous utiliserons un réflecteur initial obtenu par la méthode de Lefebvre-Lebigot lorsque l'on effectuera des calculs à 2 groupes d'énergie, et on conservera la condensation/homogénéisation du calcul de référence APOLLO2 lorsque l'on effectuera des calculs multi-groupes.

5.1 Résultats à 2 groupes d'énergie

Nous avons effectué deux choix importants de modélisation :

- Nous distinguons deux classes d'assemblages dans la partie active, suivant leur position dans le cœur. Ces deux classes sont caractérisées par des erreurs différentes (voir le paragraphe 4.4.2, et les équations 4.6 et 4.7).

- Nous avons raffiné le maillage du réflecteur en fonction de la géométrie générale de celui-ci (voir Figure 4.12).

Dans cette section, nous allons appliquer ces choix de modélisation pour calculer un réflecteur à deux groupes d'énergie, avec un opérateur de diffusion.

5.1.1 Comparaisons à la nappe de puissance de référence

Comparaisons homogènes par assemblage

Nous présentons à la Figure 5.1 les nappes d'écarts de puissance à la référence APOLLO2 avant optimisation (à gauche) et après optimisation (à droite).

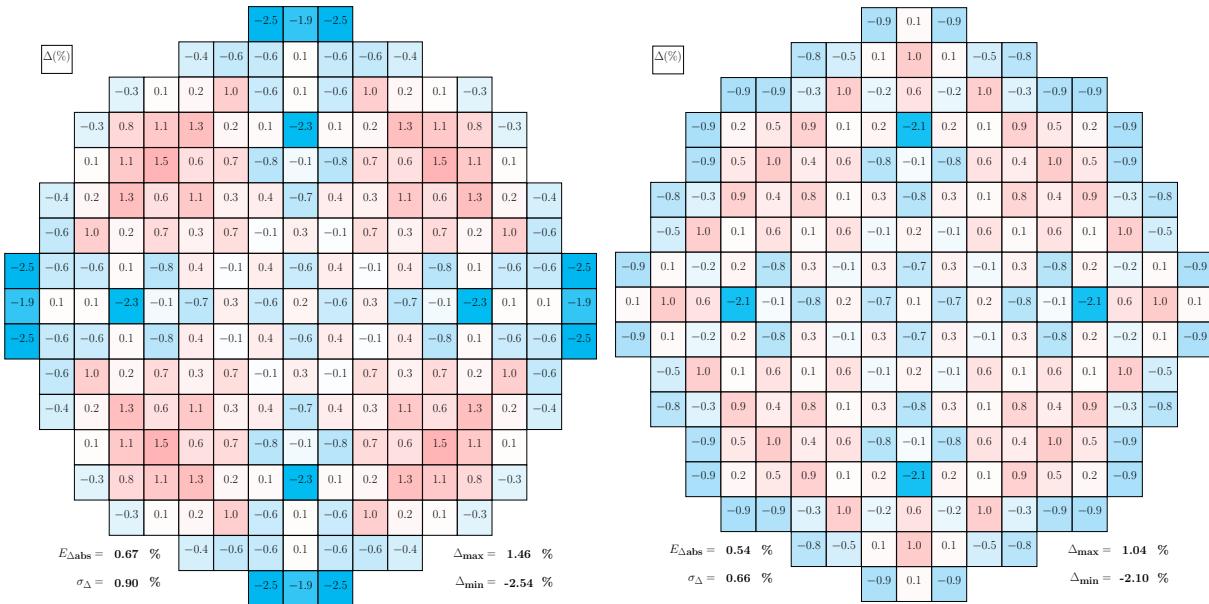


Figure 5.1 Nappes des écarts de puissance avant et après optimisation - 6 zones réflecteur

Le réflecteur initial obtenu par la méthode de Lefebvre-Lebigot donne de bien meilleurs résultats que lorsque l'on utilise la condensation/homogénéisation du calcul de référence. Cela est normal, car le modèle de Lefebvre-Lebigot est basé sur la conservation des rapports entre les flux et les courants des deux groupes d'énergie en diffusion par rapport à la solution de transport, sur un calcul de traverse 1D. Les paramètres du réflecteur obtenus par cette méthode tendent à rapprocher la solution de l'équation de diffusion de la solution de transport. On observe néanmoins un écart important au niveau de l'assemblage 6 (voir Figure 3.1), ce qui confirme que l'opérateur de diffusion calcule mal cet assemblage qui se situe dans une zone très hétérogène.

Après optimisation, on obtient une légère amélioration des résultats sur la nappe des écarts de puissance à la référence : l'écart moyen est de 0.54 % avec un écart-type de 0.66 % après optimisation contre un écart moyen de 0.67 % avec un écart-type de 0.90 % avant optimisation. De même, l'écart maximal est de 1.04 % après optimisation contre 1.46 % avant optimisation. L'amélioration n'est cependant pas aussi significative que lorsque l'on initialise le réflecteur par condensation/homogénéisation du calcul de référence.

Il est important de noter ici que malgré cette légère amélioration du point de vue des indicateurs statistiques sur la nappe des écarts de puissance à la référence, on observe également une amélioration intéressante sur la forme de cette nappe. En effet, on remarque une diminution nette des erreurs à l'interface cœur/réflecteur au niveau du bouclier thermique (voir Figure 4.11), en particulier pour les assemblages 9 et 17 (voir Figure 4.12). Par ailleurs, on remarque que l'optimisation a tendance à homogénéiser la nappe des écarts et à supprimer l'asymétrie azimutale visible sur la nappe initiale (à gauche sur la figure 5.1). Sur cette nappe initiale, on observait des écarts positifs plus importants au niveau des coins du cœur, c'est-à-dire pour les assemblages 24 à 26, 29, 30 et 32 de la figure 4.12. On retiendra que notre méthode permet une amélioration des résultats même dans une situation où le réflecteur initial est déjà très bien évalué.

Reconstruction fine de puissance

Ici, on a effectué une reconstruction fine de puissance à l'aide de la méthode exposée au chapitre 2. On obtient ainsi des distributions des écarts de puissance à la référence à l'échelle du crayon. On a présenté à la figure 5.2 les nappes des écarts de puissance à la référence, crayon par crayon.

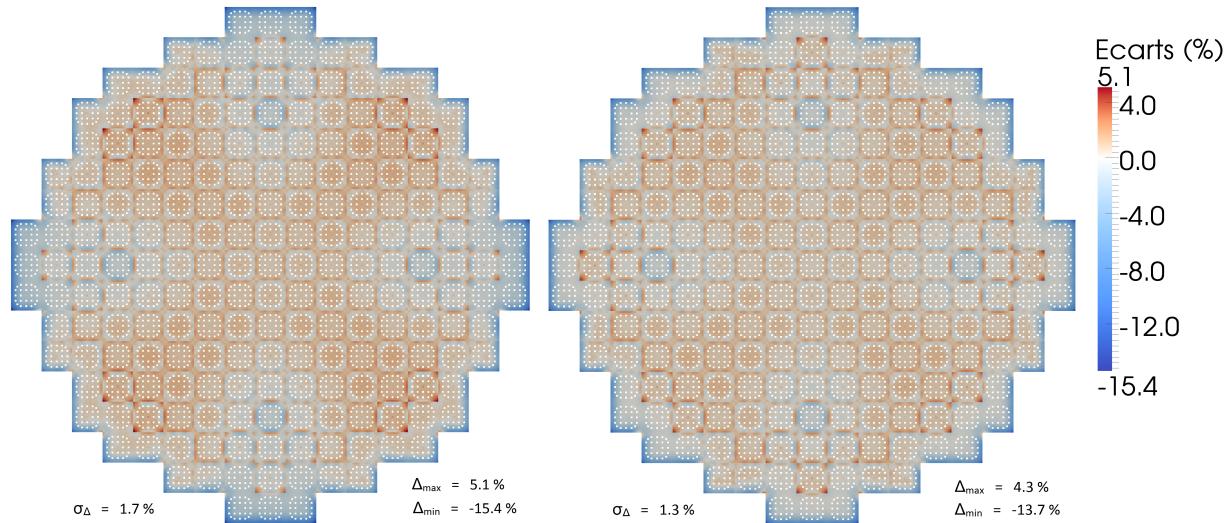


Figure 5.2 Nappes des écarts de puissance crayon par crayon avant et après optimisation - 6 zones réflecteur

Ces nappes correspondent aux nappes à l'échelle de l'assemblage présentées en Figure 5.1. On note ici encore que le processus d'optimisation a pour effet d'homogénéiser la nappe des écarts et de diminuer les écarts dans les assemblages 9 et 17. La reconstruction fine de puissance nous permet d'obtenir une information supplémentaire sur les nappes d'écarts : les écarts importants se situent au niveau des dernières rangées de crayons de la partie active, à l'interface cœur/réflecteur. Par ailleurs, on constate toujours une disparition de l'asymétrie azimutale décrite plus haut sur la nappe après optimisation.

5.1.2 Recherche de concentration en bore critique

Nous allons à présent comparer le réflecteur obtenu avec nos schémas de calcul au réflecteur initial avec d'autres indicateurs plus macroscopiques et 3D, comme la concentration de bore critique lors de l'insertion successive de groupes de barres de contrôle dans le cœur. Pour ce faire, nous allons intégrer notre réflecteur 2D dans une configuration 3D. Ainsi, on a présenté en Figure 5.3 une coupe d'un REP en 3D.

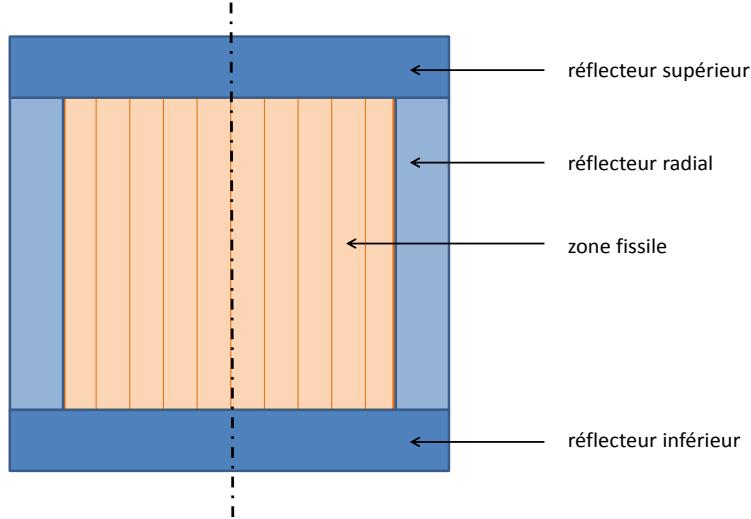


Figure 5.3 Coupe de la modélisation neutronique d'un cœur de REP en 3D

Le réflecteur radial sera alors notre réflecteur 2D (le réflecteur initial, ou celui obtenu par nos schémas de calcul). Les réflecteurs supérieurs et inférieurs seront obtenus ici par la méthode de Lefebvre-Lebigot. Nous verrons dans la section suivante la manière de modéliser ces réflecteurs lorsque l'on n'a pas accès au modèle de Lefebvre-Lebigot.

Nous allons calculer ici la concentration de bore critique en configuration Toutes Barres Hautes (TBH), et également lors de l'insertion de groupes de barres de contrôle dans le cœur. On dispose de plusieurs groupes que l'on note X1, X2, X3, X4, X5, SB, SC, SD. La procédure de recherche de concentration de bore critique pour chacune de configuration est la suivante :

- On insère le premier groupe de barres de contrôle X1.
- On se place à la concentration en bore critique expérimentale pour la configuration considérée.
- On calcule la nouvelle concentration en bore qui assure $k_{\text{eff}} = 1$: c'est la concentration en bore critique théorique.
- On insère le groupe de barre suivant et on réitère le processus à partir de l'étape 2.

On obtient ainsi la concentration en bore critique pour chacune des configurations avec et sans barres de contrôle insérées. Dans le tableau 5.1 on a reporté, pour chaque configuration d'insertion de groupes de barres, les écarts entre la concentration en bore critique théorique et la concentration en bore critique expérimentale, pour le réflecteur initial Lefebvre-Lebigot ($\Delta C_b^{(0)}$) et pour le réflecteur obtenu avec notre schéma de calcul ($\Delta C_b^{(f)}$).

Tableau 5.1 Concentration en bore critique avant et après optimisation

Configuration	$\Delta C_b^{(0)}$ (ppm)	$\Delta C_b^{(f)}$ (ppm)
X1	2.5	2.5
X1+X2	0.2	0.7
D = X1+X2+X3	-2.5	-2.7
D + X4	0.4	0.5
D + X4 + X5	-9.4	-9.7
D + X4 + X5 + SB	-9.8	-9.2
D + X4 + X5 + SB + SC	-6.1	-0.1
D + X4 + X5 + SB + SC + SD	-27.8	-28.1

On ne note donc ici aucune amélioration significative au niveau des écarts entre les concentrations en bore critique expérimentales et calculées lorsque l'on utilise le réflecteur obtenu par nos schémas de calcul. Pour certains groupes de barres, on a même de meilleurs résultats avant optimisation de nos schémas de calcul (lors de l'insertion du groupe de barre SD par exemple, on a un écart à la concentration en bore critique expérimentale de -27.8 ppm avant optimisation et de -28.1 ppm après optimisation). Ces dégradations sont néanmoins relatives : il s'agit d'écarts très faibles devant la valeur de la concentration en bore critique expérimentale, et les légères différences enregistrées entre les résultats avant et après optimisation ne sont pas significatives. Cela est logique puisque l'on a obtenu une amélioration assez faible du point de vue de la nappe des écarts de puissance à la référence.

5.1.3 Efficacité intégrale des barres

Dans ce paragraphe, nous comparons les résultats de nos schémas de calcul sur un nouvel indicateur macroscopique 3D : l'efficacité intégrale des groupes de barres de contrôle. La procédure de calcul de l'efficacité intégrale des groupes barres de contrôle, pour chaque groupe inséré est la suivante :

- On calcule l'efficacité différentielle du bore pour chaque groupe de barres $\frac{\partial \rho}{\partial C_b}$ où $\rho = \frac{1}{k_{\text{eff}}}$

est la réactivité et C_b est la concentration en bore.

- On retire tous les groupes de barres.
- On insère le groupe de barres dont on veut calculer l'efficacité intégrale.
- On se place à la concentration en bore critique théorique pour le groupe de barres considéré.
- On calcule la valeur du k_{eff} correspondant à cette concentration théorique.
- On calcule l'efficacité intégrale à partir de l'efficacité différentielle du bore et du k_{eff} .

Dans le tableau 5.2, on a reporté les écarts entre les efficacités intégrales des groupes de barres théoriques et expérimentales, avec le réflecteur initial ($\Delta \text{Eff}_b^{(0)}$) et avec le réflecteur calculé par nos schémas de calcul ($\Delta \text{Eff}_b^{(f)}$).

Tableau 5.2 Efficacité intégrale des groupes de barres avant et après optimisation

Configuration	$\Delta \text{Eff}_b^{(0)}$ (ppm)	$\Delta \text{Eff}_b^{(f)}$ (ppm)
X1	-6.0	-6.0
X2	11.0	10.0
X3	56.0	56.0
X4	-16.0	-16.0
X5	-36.0	-36.0
SB	1.0	0.0
SC	41.0	47.0
SD	7.0	0.0

Ici également, on ne note pas d'amélioration par rapport au réflecteur initial, celui-ci étant déjà bien évalué. De même que dans le cas des concentrations en bore critique, on dégrade les résultats dans quelques cas : lors de l'insertion du groupe de barre SC, l'écart d'efficacité intégrale à la valeur expérimentale vaut 41 ppm avant optimisation et 47 ppm après. Cependant, comme dans le cas des concentrations en bore critiques, ces écarts entre les résultats avant et après optimisation sont très faibles devant la valeur expérimentale de l'efficacité intégrale et ne sont donc pas significatifs.

5.1.4 Cartes d'activité

Dans cette section, on compare les nappes des écarts entre les activités calculées et les activités expérimentales, en utilisant comme réflecteur le réflecteur Lefebvre-Lebigot initial, puis le réflecteur issu de notre schéma de calcul. Le Tableau 5.3 rassemble les indicateurs statistiques sur ces nappes d'écarts d'activité à l'expérience. $\sigma_{\Delta}^{(0)}$ et $\sigma_{\Delta}^{(f)}$ représentent respectivement la valeur RMS initiale et après optimisation de la distribution des écarts. $\max_{\Delta}^{(0)}$ et $\max_{\Delta}^{(f)}$ représentent respectivement l'écart maximal initial et après optimisation de la distribution des écarts. $\min_{\Delta}^{(0)}$ et $\min_{\Delta}^{(f)}$ représentent respectivement l'écart minimal initial et après optimisation de la distribution des écarts.

Tableau 5.3 écarts aux réactivités expérimentales avant et après optimisation

Configuration	$\sigma_{\Delta}^{(0)} (\%)$	$\min_{\Delta}^{(0)} (\%)$	$\max_{\Delta}^{(0)} (\%)$	$\sigma_{\Delta}^{(f)} (\%)$	$\min_{\Delta}^{(f)} (\%)$	$\max_{\Delta}^{(f)} (\%)$
X1	2.2	-4.5	5.6	2.3	-4.6	6.7
X2	2.6	-5.5	5.3	2.7	-5.6	6.4
X3	2.9	-6.6	6.5	2.9	-5.5	8.1
X4	4.1	-8.2	8.7	4.5	-8.4	10.4
X5	4.7	-8.4	13.7	5.1	-8.4	16.6
SB	4.0	-6.6	10.6	5.5	-7.8	15.0
SD	5.0	-14.4	6.9	4.7	-13.6	7.2

On remarque ici que l'effet de l'optimisation de nos jeux de données en légèrement négatif sur les résultats des écarts des activités calculées aux activités expérimentales. Ceci pourrait être dû au fait que notre modélisation du cœur symétrique par huitième ne prend pas en compte l'asymétrie réelle du cœur. Il faudrait passer à une représentation complète du cœur afin de confirmer cette hypothèse.

5.1.5 Conclusion sur les résultats à 2 groupes d'énergie

Dans cette section, on a examiné les résultats obtenus avec nos schémas de calcul pour des calculs en diffusion à deux groupes d'énergie. Le réflecteur initial a été obtenu par la méthode de Lefebvre-Lebigot. Celui-ci permet d'obtenir de très bons résultats sur les nappes d'écarts de puissance à la référence. Nos schémas de calcul permettent d'optimiser ce réflecteur et d'en améliorer légèrement les résultats sur les nappes d'écarts de puissance à la référence. On peut observer ces résultats sur les nappes des écarts homogènes par assemblages (voir Figure 5.1) et crayon par crayon (voir Figure 5.2).

Lorsque l'on compare les résultats des deux réflecteurs pour des indicateurs macroscopiques, comme la concentration en bore critique lors de l'insertion de groupes de barres de contrôle ou l'efficacité intégrale des groupes de barres, on ne note aucune amélioration significative avec le réflecteur calculé par nos schémas de calcul. En effet, celui-ci n'est que légèrement différent du réflecteur initial, comme en témoignent les nappes d'écart de puissance à la référence.

5.2 Résultats à 4 groupes d'énergie

Dans cette section, nous allons examiner les résultats obtenus avec nos schémas de calcul lorsque l'on se place dans une configuration à 4 groupes d'énergie. Cette configuration sort du cadre d'application du réflecteur de Lefebvre-Lebigot, le réflecteur initial sera donc obtenu par condensation/homogénéisation du calcul de référence APOLLO2. Tous les autres choix de modélisation effectués dans la section précédente seront conservés :

- La pondération de la fonctionnelle de l'équation 4.10.
- Le maillage du réflecteur de la Figure 4.12.
- Les variables de contrôle de l'équation 4.14.

5.2.1 Comparaisons à la nappe de puissance de référence

Comparaisons homogènes par assemblage

Dans un premier temps, nous allons effectuer des comparaisons sur les nappes des écarts de puissance à la référence calculées avec le réflecteur initial, et avec le réflecteur obtenu par nos schémas de calcul (à droite sur la figure). On reporte ces nappes à la Figure 5.4.

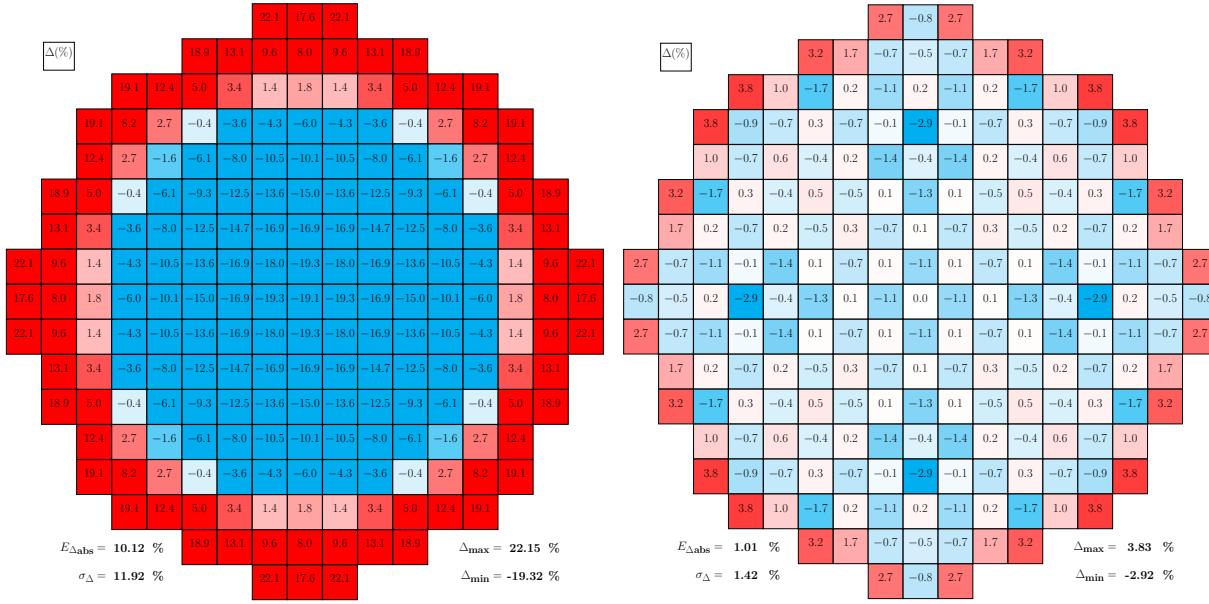


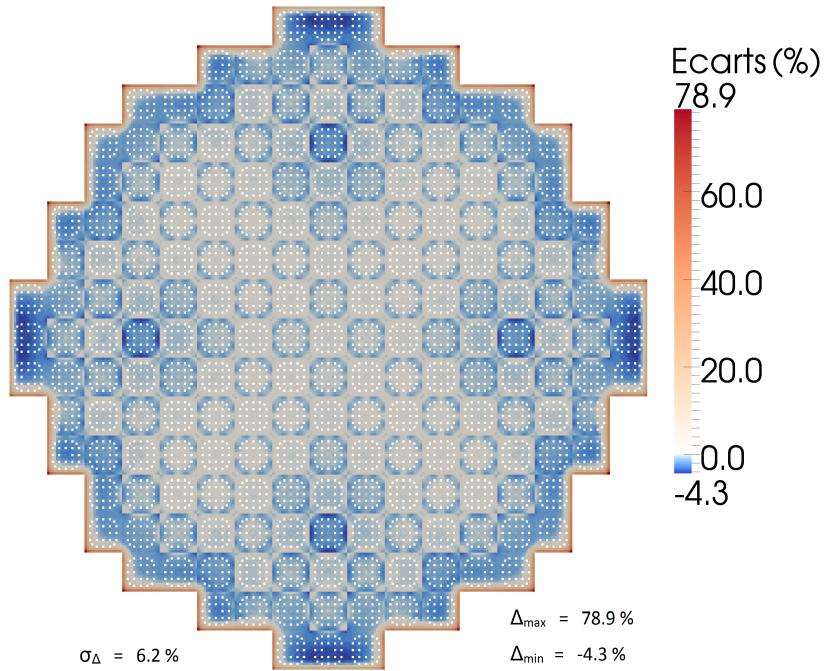
Figure 5.4 Nappes des écarts de puissance avant et après optimisation - 4 groupes d'énergie, 6 zones réflecteur

On note que dans ce cas également, l'optimisation effectuée par nos schémas de calcul a pour effet de diminuer considérablement les écarts de puissance à la référence sur l'ensemble du cœur (l'écart maximal diminue de 22.15 % à 3.83 %, tandis que l'écart moyen diminue de 10.12 % à 1.01 %). Cependant, le réflecteur obtenu par nos flots de données n'est pas aussi bien évalué que celui que l'on obtient à deux groupes d'énergie, en prenant comme réflecteur initial le réflecteur de Lefebvre-Lebigot (voir Figure 5.1).

Cependant, lorsque l'on se penche sur le centre du cœur (assemblages 1, 2, 3, 4, 10, 11, 12 de la Figure 4.12), on remarque que les écarts à la référence dans cette zone ne sont pas significativement différents de ceux obtenus à deux groupes d'énergie, en prenant comme réflecteur initial le réflecteur de Lefebvre-Lebigot. L'optimisation effectuée par nos schémas de calcul est donc efficace dans cette zone. Étant donné que le réflecteur initial dans la configuration à 4 groupes d'énergie est beaucoup moins bien évalué qu'à 2 groupes d'énergie, les écarts les plus importants sont situés à l'interface cœur/réflecteur.

Reconstruction fine de puissance

Nous allons maintenant examiner la nappe des écarts de puissance à la référence à l'échelle du crayon de combustible (nappe crayon par crayon). On présente cette nappe pour le réflecteur obtenu par nos schémas de calcul en Figure 5.5



Sur cette figure, on constate que les erreurs importantes se situent essentiellement au niveau des deux dernières rangées de crayons de la partie active du cœur. Ces erreurs au niveau des crayons sont très importantes (erreur maximale de 78.9 %) et entraînent des erreurs importantes également à l'échelle de l'assemblage par effet d'homogénéisation (voir Figure 5.4, sur la figure de droite). On précise qu'il s'agit là d'erreurs inacceptables dans le cadre de calculs de fluence cuve pas exemple. Il s'agit donc de la limite principale de cette étude, et on tentera d'imaginer des solutions à cette limite par la suite. Dans l'assemblage 33 par exemple (voir Figure 4.12), les écarts de puissance sont relativement faibles dans la majorité des crayons de l'assemblage, cependant, les dernières rangées de crayons présentent des écarts de puissance considérables qui entraînent par homogénéisation un écart moyen de -3.8 % sur l'assemblage.

Par ailleurs, on note que conformément à ce que l'on avait déjà remarqué sur la Figure 5.4, les écarts au centre de la partie active du cœur sont similaires à ceux obtenus à 2 groupes d'énergie en prenant comme réflecteur initial le réflecteur de Lefebvre-Lebigot (voir la Figure 5.2 sur la figure de droite et la Figure 5.5).

5.2.2 Recherche de concentration en bore critique

Nous allons maintenant comparer réflecteur initial obtenu par condensation/homogénéisation du calcul de référence APOLLO2 avec le réflecteur obtenu par nos schémas de calcul en calculant les concentrations en bore critique pour les insertions des groupes de barres de contrôle selon la procédure décrite dans la section précédente.

Dans le cadre de nos calculs à 4 groupes d'énergie, nous ne disposons pas de réflecteurs inférieurs et supérieurs comme c'est le cas dans le cadre de calculs à 2 groupes. On choisit donc comme réflecteur axial le réflecteur radial entièrement homogénéisé (voir Figure 3.1).

Dans le tableau 5.4, on a reporté les écarts entre la concentration en bore critique théorique et expérimentale pour chaque configuration d'insertion des groupes de barres de contrôle, calculés avec le réflecteur initial ($\Delta C_b^{(0)}$) et avec le réflecteur obtenu par nos schémas de calcul ($\Delta C_b^{(f)}$).

Tableau 5.4 Concentration en bore critique avant et après optimisation

Configuration	$\Delta C_b^{(0)}$ (ppm)	$\Delta C_b^{(f)}$ (ppm)
TBH	22.0	-0.3
X1	28.7	2.7
X1 + X2	28.3	0.8
D = X1 + X2 + X3	28.4	-2.7
D + X4	40.7	0.6
D + X4 + X5	28.4	-8.8
D + X4 + X5 + SB	17.5	-9.2
D + X4 + X5 + SB + SC	60.4	-2.8
D + X4 + X5 + SB + SC + SD	-13.0	-25.6

Dans ce cas, on note une amélioration significative des écarts entre les concentrations en bore critique théoriques et expérimentales, suivant que l'on utilise comme réflecteur radial le réflecteur initial ou le réflecteur obtenu par nos schémas de calcul. De plus, les résultats obtenus avec nos flots de données (colonne de droite) sont très proches des résultats obtenus dans le cadre de calculs à 2 groupes d'énergie (voir le tableau 5.1). On remarque en particulier que l'on a considérablement dégradé le résultat lors de l'insertion du groupe de barres SD (l'écart à la valeur expérimentale vaut -13.0 ppm avant optimisation et -25.6 ppm après optimisation). Cependant, l'écart après optimisation correspond à l'ordre de l'écart que l'on obtient avec le réflecteur Lefebvre-Lebigot (-28.1 ppm). Même au prix de cette dégradation,

on a un amélioration globale sur l'ensemble des groupes de barres importants. Ceci est un résultat très intéressant. En effet, même si la nappe des écarts de puissance à la référence présente des valeurs plus importantes lors de calcul à 4 groupes d'énergie, on constate que dans le cas d'un indicateur 3D plus macroscopique, on atteint la même qualité de résultats que dans le cas du réflecteur de Lefebvre-Lebigot.

5.2.3 Efficacité intégrale des barres

Nous allons à présent tenter de confirmer l'observation précédente en calculant les efficacités intégrales des groupes de barres calculées selon la procédure exposée dans la section précédente. Dans le tableau 5.5, on a reporté les efficacités intégrales des groupes de barres calculées avec le réflecteur initial ($\Delta\text{Eff}_b^{(0)}$) et avec le réflecteur obtenu par nos schémas de calcul ($\Delta\text{Eff}_b^{(f)}$).

Tableau 5.5 Efficacité intégrale des groupes de barres avant et après optimisation

Configuration	$\Delta\text{Eff}_b^{(0)}$ (ppm)	$\Delta\text{Eff}_b^{(f)}$ (ppm)
X1	-4.0	-6.0
X2	12.0	10.0
X3	56.0	56.0
X4	-6.0	-15.0
X5	-44.0	-35.0
SB	-16.0	-1.0
SC	99.0	46.0
SD	-78.0	0.0

Ici, on constate une nette amélioration des résultats avec le réflecteur obtenu par nos schémas de calcul. Les écarts entre les efficacités intégrales des groupes de barres théoriques et expérimentales sont là encore très proches de ceux obtenus dans le cadre de calculs à 2 groupes présentés dans le tableau 5.2. De même que pour les calculs de concentrations en bore critiques, on note une dégradation du résultat avec l'optimisation, pour le groupe de barres X4 cette fois-ci (écart à la valeur expérimentale de -6.0 ppm avant optimisation contre -15.0 ppm après). Là encore, cette dégradation permet de retrouver un résultat de l'ordre de celui obtenu avec le réflecteur Lefebvre-Lebigot (-16.0 ppm). Également, on constate qu'au prix de cette dégradation sur un seul groupe de barres, on a une amélioration globale nette des résultats. Ceci confirme l'observation faite au paragraphe précédent : lorsque l'on calcule des indicateurs 3D macroscopiques tels que la concentration en bore critique lors de l'insertion

de groupes de barres de contrôle ou les efficacités intégrales de ces groupes de barres, on obtient avec notre modèle de réflecteur, des résultats très similaires à ceux obtenus à 2 groupes d'énergie avec le réflecteur de Lefebvre-Lebigot.

5.2.4 Cartes d'activité

Ici, on compare les activités calculées par COCAGNE aux activités expérimentales, en utilisant le réflecteur initial obtenu par condensation/homogénéisation du calcul de référence, puis le réflecteur issu de notre schéma de calcul. Le Tableau 5.6 rassemble les indicateurs statistiques sur ces nappes d'écart d'activité à l'expérience. $\sigma_{\Delta}^{(0)}$ et $\sigma_{\Delta}^{(f)}$ représentent respectivement la valeur RMS initiale et après optimisation de la distribution des écarts. $\max_{\Delta}^{(0)}$ et $\max_{\Delta}^{(f)}$ représentent respectivement l'écart maximal initial et après optimisation de la distribution des écarts. $\min_{\Delta}^{(0)}$ et $\min_{\Delta}^{(f)}$ représentent respectivement l'écart minimal initial et après optimisation de la distribution des écarts.

Tableau 5.6 écarts aux réactivités expérimentales avant et après optimisation

Configuration	$\sigma_{\Delta}^{(0)} (%)$	$\min_{\Delta}^{(0)} (%)$	$\max_{\Delta}^{(0)} (%)$	$\sigma_{\Delta}^{(f)} (%)$	$\min_{\Delta}^{(f)} (%)$	$\max_{\Delta}^{(f)} (%)$
TBH	8.2	-16.4	14.3	2.4	-6.3	6.3
X1	8.4	-18.5	13.2	2.8	-6.0	6.3
X2	9.6	-20.4	15.1	3.2	-6.5	7.5
X3	10.5	-22.2	15.7	2.8	-5.4	7.5
X4	14.1	-30.3	18.1	4.2	-8.6	9.6
X5	18.4	-32.7	33.7	5.0	-9.2	15.3
SB	35.8	-38.4	66.8	4.8	-7.0	12.2
SD	12.6	-15.6	27.5	4.8	-15.0	6.7

Ici, on note une amélioration significative des résultats lorsque l'on utilise le réflecteur optimisé. De plus, comme pour les résultats de concentration en bore critique et de l'efficacité intégrale des groupes de barres, on retrouve des résultats comparables à ceux obtenus à 2 groupes d'énergie avec le réflecteur de Lefebvre-Lebigot optimisé. On a toujours des résultats légèrement moins bons que ceux obtenus avec le réflecteur de Lefebvre-Lebigot. Là encore, on peut penser que cela est dû à notre représentation symétrique par huitième du cœur.

5.3 Conclusions sur les calculs en diffusion

Dans cette section, nous avons exposé les résultats de notre étude sur les réflecteurs, pour des calculs de diffusion. Tout d'abord, nous avons exposé nos choix de modélisation en matière

de pondération de la fonctionnelle, de maillage du réflecteur et de choix des variables de contrôle. Nous avons comparé les résultats obtenus par les réflecteurs initiaux, et les réflecteurs obtenus par nos schémas, pour des calculs à 2 groupes et 4 groupes d'énergie.

Dans le cadre des calculs à 2 groupes d'énergie, on utilise comme réflecteur initial le réflecteur de Lefebvre-Lebigot. Celui-ci est caractérisé par des coefficients de diffusion bien calculés et on remarque une légère diminution des écarts de puissance à la référence (voir Figure 5.2) lorsque l'on utilise le réflecteur optimisé. Cependant, cette diminution ne se traduit pas par une amélioration significative des résultats macroscopiques, lorsque l'on effectue des calculs de concentration en bore critique ou de l'efficacité des groupes de barres de contrôle (voir les tableaux 5.1 et 5.2). Ceci est logique puisque l'optimisation du réflecteur effectuée par nos schémas de calcul modifie peu le réflecteur initial. Les résultats macroscopiques sont donc peu touchés par la modification du réflecteur conséquente à l'optimisation.

Lorsque l'on effectue des calculs à 4 groupes, on sort du cadre d'application du modèle de réflecteur de Lefebvre-Lebigot, et on initialise alors le réflecteur par condensation/homogénéisation du calcul de référence. On observe cette fois-ci une réduction significative de la nappe des écarts de puissance à la référence lorsque l'on utilise le réflecteur optimisé (voir Figure 5.4). De la même manière, lorsque l'on effectue des calculs d'indicateurs macroscopiques (concentration en bore critique et efficacité des groupes de barres de contrôle), on observe une amélioration importante des résultats avec le réflecteur optimisé (voir les tableaux 5.4 et 5.5). De plus, les résultats sur ces indicateurs macroscopiques sont très proches des résultats obtenus à 2 groupes d'énergie. Cependant, on n'arrive pas à obtenir de meilleurs résultats que ceux atteints en utilisant le réflecteur de Lefebvre-Lebigot à 2 groupes d'énergie.

Le problème principal de ce modèle de réflecteur est la présence d'écarts de puissance à la référence très importants sur les dernières rangées de crayons de la partie active du réflecteur (voir Figure 5.5). De plus, dans une perspective industrielle, il est préférable de privilégier le réflecteur Lefebvre-Lebigot, puisque les calculs 4 groupes sont plus lourds que les calculs 2 groupes et n'apportent pas d'amélioration notable. Notre modèle de réflecteur serait intéressant dans le cas où des calculs multi-groupes en diffusion seraient préconisés pour d'autres raisons que celle de la modélisation du réflecteur seule. Nous tenterons d'exposer les causes de ces écarts importants et les solutions envisagées afin de les supprimer dans la discussion au chapitre 7.

CHAPITRE 6

RÉSULTATS EN SP₃

Dans ce chapitre, nous allons exposer les résultats lorsque l'on effectue des calculs dans le cadre de l'approximation SP_N multi-groupe homogène par crayon (voir le chapitre 2). Ici, nous travaillerons avec N=3. Les choix de modélisation relatifs au cas de l'approximation SP₃ exposés au chapitre 4 sont les suivants :

- Les assemblages de la partie active sont décrits à l'échelle du crayon et calculés en milieu infini.
- Le réflecteur comporte 6 zones distinctes.
- La fonctionnelle n'est pas pondérée : il n'existe qu'une seule classe d'assemblages dans la partie active du cœur, et tous les assemblages sont donc caractérisés par la même erreur (voir paragraphe 4.4.2).

Nous exposons ici nos résultats pour des calculs à 4 et 8 groupes d'énergie. Ici, nous comparerons uniquement les réflecteurs en termes de nappes des écarts de puissance à la référence APOLLO2.

6.1 Résultats à 4 groupes d'énergie

Dans cette section, tous les calculs seront effectués à 4 groupes d'énergie. On va suivre la même démarche que dans le chapitre précédent :

- On va comparer les nappes des écarts de puissance à la référence avec le réflecteur initial et avec le réflecteur obtenu par nos schémas de calcul afin d'observer les effets de l'optimisation à l'échelle de l'assemblage.
- On va ensuite observer les nappes crayon par crayon afin d'en déduire une information supplémentaire à l'échelle du crayon.

6.1.1 Comparaisons assemblage

Nous présentons à la Figure 6.1 les nappes des écarts de puissance à la référence calculés avec le réflecteur initial (à gauche) et avec le réflecteur obtenu par nos schémas de calcul (à droite). Cependant, à la différence du cas à 2 groupes d'énergie, on a d'abord calculé la nappe crayon par crayon que l'on a ensuite homogénéisé sur chaque assemblage.

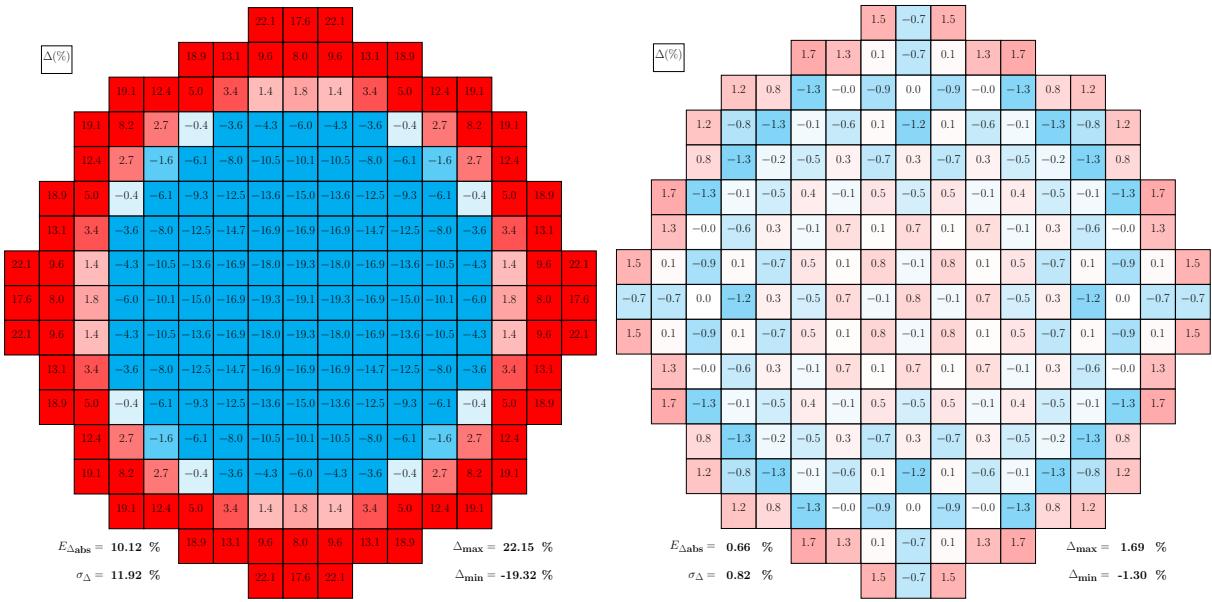


Figure 6.1 Nappes des écarts de puissance après optimisation - 4 groupes d'énergie, calcul en SP₃, 6 zones réflecteur

Sur cette figure, on remarque que l'optimisation a pour effet une très nette diminution des écarts de puissance. En effet, la nappe initiale admet un maximum de 22.15 % avec une moyenne de 10.12 % et un écart-type de 11.92 %, tandis que la nappe calculée en utilisant le réflecteur obtenu avec nos schémas de calcul présente un maximum de 1.69 %, une moyenne de 0.66 % et un écart-type de 0.82 %.

Par ailleurs, les performances de notre réflecteur 4 groupes d'énergie s'approchent de celles obtenues avec le réflecteur de Lefebvre-Lebigot dans le cadre de calculs de diffusion à 2 groupes d'énergie. Ce résultat est donc très intéressant, car il permet de retrouver à peu de choses près les performances du réflecteur de Lefebvre-Lebigot, alors même que les écarts de puissance initiaux sont très importants. En partant d'une ébauche erronée, nos schémas de calcul donnent un réflecteur approchant de manière satisfaisante la nappe de puissance de référence.

Enfin, on remarque plusieurs effets dus à la modélisation crayon par crayon de la partie active du cœur, et à l'utilisation de l'opérateur SP_3 :

- L'écart minimal ne se situe plus au niveau de l'assemblage 6, comme c'était le cas pour les calculs de diffusion. En effet, les choix de modélisation effectués ici, notamment la représentation crayon par crayon, permettent d'atténuer les effets de l'hétérogénéité du milieu dans lequel se trouve cet assemblage.
- Les écarts à l'interface cœur/réflecteur sont nettement moins importants que dans le cadre des calculs de diffusion à 4 groupes d'énergie au chapitre précédent. Encore une fois, les choix de modélisation effectués dans ce chapitre permettent de mieux gérer les zones hétérogènes du cœur.

6.1.2 Comparaisons crayon par crayon

Nous nous penchons à présent sur la nappe des écarts de puissance à la référence en modélisation crayon par crayon. En effet, nous avons constaté dans le chapitre précédent que cette visualisation apporte une information supplémentaire importante sur les nappes d'écarts, en permettant de relever les écarts de puissance dans chaque rangée de crayons, en particulier à l'interface cœur/réflecteur : on s'affranchit ici des effets d'homogénéisation des résultats.

Nous reportons en Figure 6.2 la nappe des écarts de puissance à la référence crayon par crayon, calculée avec le réflecteur 4 groupes obtenu par nos schémas de calcul.

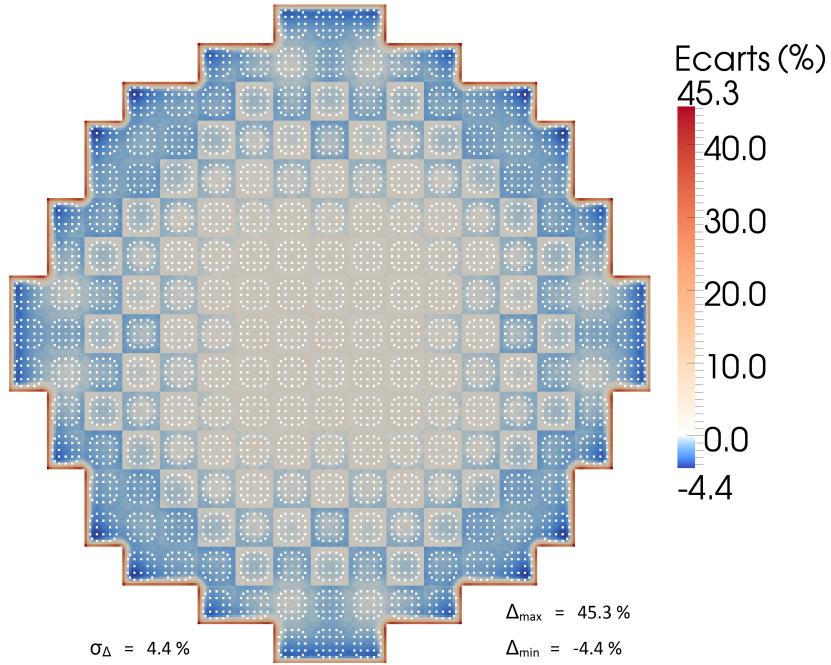


Figure 6.2 Nappe des écarts de puissance crayon par crayon après optimisation - 4 groupes d'énergie, calcul SP₃, 6 zones réflecteur

Sur cette figure, on fait le même constat que dans le cas de calculs de diffusion : les écarts de puissance sont très importants dans les deux dernières rangées de crayons à l'interface cœur/réflecteur. On note néanmoins une diminution de ces écarts par rapport au cas de la figure 5.5 : on passe d'un écart maximal de 78.9 % à 45.3 % dans le cas présent. On remarque également que l'assemblage 6 n'apparaît pas aussi nettement au sein de la nappe des écarts comme à la figure 5.5, ce qui confirme l'effet des choix de modélisation effectués ici.

Par ailleurs, on remarque qu'une large zone à l'intérieur du cœur est très homogène et présente des écarts de puissance très faibles (assemblages 1, 2, 3, 4, 5, 10, 11, 12, 18, 19, 20, 24 de la figure 3.1), ce qui n'était pas le cas dans le cas des calculs en diffusion.

On obtient donc de meilleurs résultats qu'avec des calculs de diffusion. Cependant, il subsiste des erreurs importantes à l'interface cœur/réflecteur. Étant donné que la partie active du cœur est modélisée ici à l'échelle du crayon, on peut penser que ces erreurs importantes sont dues au fait que le réflecteur quant à lui, est toujours modélisé à l'échelle de l'assemblage. Étant donné que les assemblages du réflecteur situés à l'interface cœur/réflecteur sont très hétérogènes dans leur structure physique (voir Figure 4.11), la modélisation à l'échelle de l'assemblage dans cette zone entraîne une perte d'information importante. Il faudrait imaginer un maillage du

réflecteur plus physique, par exemple un maillage découpant le réflecteur en macro-groupes de crayons correspondant aux différents matériaux qui composent le réflecteur.

6.1.3 Conclusion sur les calculs à 4 groupes d'énergie

Lors des calculs à 4 groupes d'énergie, on constate une nette amélioration des résultats par rapport aux calculs de diffusion (voir les figures 5.4 et 6.1). À titre d'exemple, l'écart maximal sur la nappe des écarts de puissance homogène par assemblage diminue de 3.83 % à 1.69 % lorsque l'on effectue des calculs dans le cadre de l'approximation SP_3 , pour un écart moyen diminuant de 1.01 % à 0.66 %.

De même, on remarque une nette amélioration sur la nappe des écarts crayon par crayon (voir les figures 5.5 et 6.2). En effet, l'erreur maximale est fortement diminuée (de 78.9 % à 45.3 %). L'opérateur se comporte mieux à l'interface cœur/réflecteur, et dans les zones hétérogènes de manière générale. De plus, on constate que la nappe des écarts de puissance à la référence est beaucoup plus homogène que dans le cadre de calculs de diffusion, en particulier au centre du cœur.

Par ailleurs, on retrouve des résultats comparables à ceux obtenus dans le cadre des nos calculs de diffusion, en utilisant le réflecteur de Lefebvre-Lebigot comme réflecteur initial pour l'optimisation. Et contrairement au schéma de calcul en diffusion, le schéma de calcul SP_N permet des améliorations des calculs au niveau de la partie active du cœur. Ceci est un résultat très intéressant puisque l'on a montré que nos schémas de calcul sont capables de calculer un réflecteur multi-groupe, hétérogène, présentant des performances comparables au réflecteur de Lefebvre-Lebigot.

On n'a pas effectué ici de calculs de concentration en bore critique, avec notre réflecteur initial et avec le réflecteur obtenu par nos schémas de calcul. En effet, les calculs à 4 groupes d'énergie, en 3 dimensions et avec la partie active modélisée crayon par crayon demandent un espace mémoire important et nous n'avons pas pu accéder aux ressources nécessaires à ces calculs.

6.2 Résultats à 8 groupes d'énergie

Dans cette section, nous allons nous pencher sur les résultats à 8 groupes d'énergie. Tous les choix de modélisation que nous avons faits dans la section précédente seront conservés. Nous allons comparer les résultats à 8 groupes d'énergie avec ceux obtenus à 4 groupes d'énergie, afin de déterminer l'influence de l'augmentation en nombre de groupes d'énergie

sur la résolution du problème.

6.2.1 Comparaisons à la nappe de puissance de référence

Comparaisons homogènes par assemblage

Tout d'abord, nous avons calculé la nappe des écarts de puissance à la référence APOLLO2, de la même manière que dans la section précédente. Nous avons obtenu une nappe crayon par crayon qui a été homogénéisée à l'échelle de l'assemblage afin de garder la structure du chapitre précédent. A la Figure 6.3, on a présenté les nappes des écarts de puissance à la référence avant (à gauche sur la figure) et après (à droite sur la figure) la procédure d'optimisation de nos schémas de calcul.

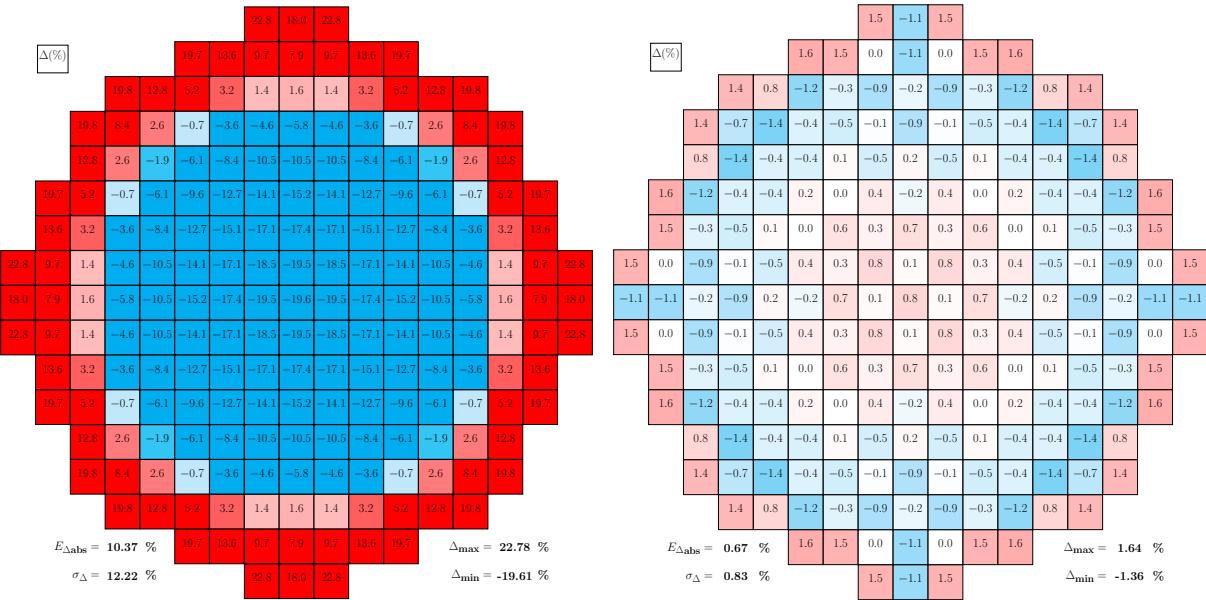


Figure 6.3 Nappes des écarts de puissance après optimisation - 8 groupes d'énergie, calcul SP₃, 6 zones réflecteur

Sur cette figure, on remarque que là encore, l'optimisation réalisée par nos schémas de calcul a pour effet de diminuer considérablement les écarts de puissance à la référence par rapport au cas où l'on utilise le réflecteur obtenu par condensation/homogénéisation du calcul de référence.

Par ailleurs, on note une légère amélioration lorsque l'on compare la nappe des écarts de puissance à 8 groupes d'énergie obtenue par nos schémas de calcul. à 8 groupes d'énergie, on augmente à nouveau l'homogénéité de la nappe des écarts de puissance à la référence au

niveau du centre du cœur. À titre d'exemple, si l'on se penche sur l'écart qu'il existe entre les assemblages 1 et 2 (voir Figure 3.1), on remarque qu'il est de 0.9 % dans le cas d'un calcul à 4 groupes (voir Figure 6.1) alors qu'il est de 0.7 % dans le cas d'un calcul à 8 groupes (voir Figure 6.3). Les écarts entre les assemblages adjacents sont plus faibles de manière générale lorsque l'on augmente le nombre de groupes d'énergie, ce qui constitue une amélioration.

Comparaisons crayon par crayon

Comme dans la section précédente, on va maintenant examiner la nappe des écarts de puissance crayon par crayon. En effet, cette nappe nous apporte une information supplémentaire sur les écarts au niveau des dernières rangées de crayons de la partie active, situées à l'interface cœur/réflecteur. On présente la nappe des écarts de puissance à la référence, visualisée crayon par crayon, calculée avec le réflecteur obtenu par nos schémas de calcul en Figure 6.4.

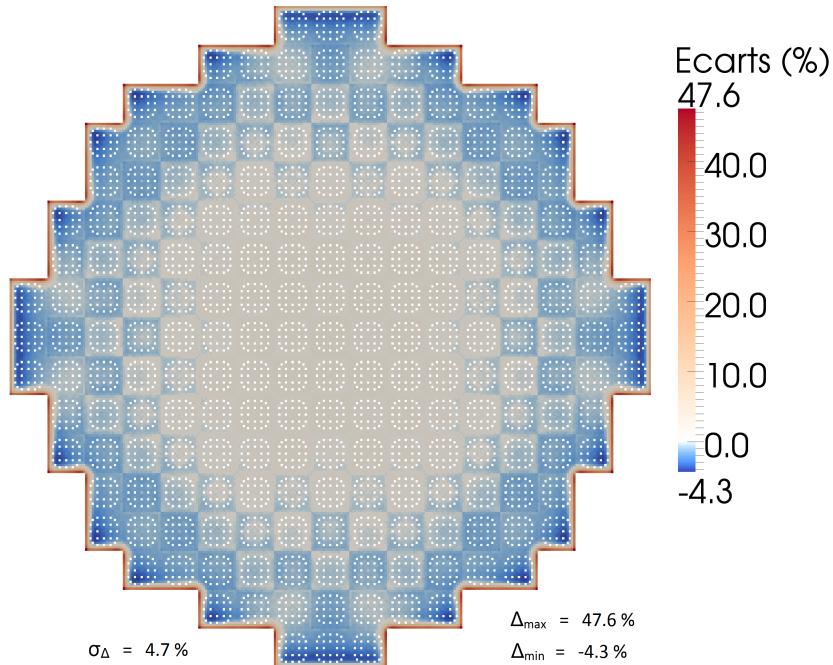


Figure 6.4 Nappe des écarts de puissance crayon par crayon après optimisation - 8 groupes d'énergie, calcul SP₃, 6 zones réflecteur

On note que la nappe des écarts de puissance à la référence est très similaire à celle calculée à 4 groupes d'énergie (voir Figure 6.2). On retrouve des résultats comparables en termes d'écart maximal (45.3 % pour le calcul à 4 groupes et 47.6 % pour le calcul à 8 groupes) et en terme de forme générale de la distribution des écarts.

Cependant, on note quelques améliorations par rapport au cas à 4 groupes d'énergie. En effet, la zone centrale du cœur, très homogène et présentant des écarts de puissance à la référence très faibles, est plus étendue lorsque l'on augmente le nombre de groupes d'énergie à 8 groupes. Cette zone s'étend ici sur la majeure partie de la partie active (assemblages 1 à 7, 10 à 14, 18 à 22, 24 à 26 et 29 de la figure 3.1). On observe à présent des écarts de puissance importants uniquement dans la zone proche de l'interface cœur/réflecteur, en particulier dans les deux dernières rangées d'assemblages de la partie active du cœur. On observe toujours des écarts importants au niveau des dernières rangées de crayons situées à l'interface cœur/réflecteur.

De manière générale, le passage de 4 à 8 groupes d'énergie permet une légère amélioration de la distribution des écarts de puissance à la référence. L'augmentation du nombre de groupes d'énergie permet d'obtenir une nappe des écarts de puissance à la référence plus homogène au centre du cœur, avec des écarts plus faibles. Néanmoins, les erreurs importantes observées dans les dernières rangées de crayons de la partie active sont toujours présentes dans le cas de calculs à 8 groupes.

6.3 Conclusions sur les calculs SP₃

Dans cette section, on a effectué des calculs dans le cadre de l'approximation SP₃ à 4 groupes d'énergie, et on a comparé les nappes des écarts de puissance à la référence APOLLO2 avec les résultats des calculs de diffusion exposés au chapitre 5. On a ensuite effectué des calculs à 8 groupes d'énergie afin d'étudier l'effet de l'augmentation du nombre de groupes d'énergie sur les résultats de nos schémas de calcul.

On a modifié les choix de modélisation faits au chapitre précédent afin de refléter au mieux les spécificités de notre système, et en particulier le comportement de l'opérateur SP₃. Ainsi, on a accordé dans la fonctionnelle un poids équivalent à chaque assemblage de la partie active (voir l'équation 4.11). On n'accorde toujours pas de confiance à l'ébauche, et on l'a donc entâchée d'une erreur très importante dans la fonctionnelle (voir l'équation 4.12). Les autres choix de modélisation sont restés inchangés par rapport à ceux effectués au chapitre précédent.

Tout d'abord, les résultats à 4 groupes d'énergie montrent une amélioration significative lorsque l'on se place dans le cadre de l'approximation SP₃, par rapport aux calculs de diffusion. En effet, on observe une forte diminution des écarts de puissance à la référence, à la fois sur la nappe homogène par assemblage (voir les figures 5.4 et 6.1) et sur la nappe visualisée crayon par crayon (voir les figures 5.5 et 6.2). Dans le tableau 6.1, on a rassemblé les résultats à 4

groupes, pour des calculs de diffusion et des calculs SP₃.

Tableau 6.1 Comparaison des résultats à 4 groupes d'énergie en diffusion et en SP₃

	Nappe homogène par assemblage		Nappe crayon-par crayon	
	Diffusion	SP ₃	Diffusion	SP ₃
max _Δ	3.83	1.69	78.94	45.3
min _Δ	-2.92	-1.30	-4.3	-4.4
E _{Δ_{abs}}	1.01	0.66	X ¹	X ¹
σ _Δ	1.42	0.82	6.2	4.4

L'intérêt de mener des calculs dans le cadre de l'approximation SP₃ par rapport aux calculs de diffusion est net. Cela apporte une meilleure modélisation du réflecteur, c'est-à-dire que nos schémas de calcul sont capables de calculer un réflecteur qui reproduit le calcul de référence de façon plus précise à l'intérieur de la partie active.

On a par la suite étudié l'impact de l'augmentation du nombre de groupes d'énergie sur le réflecteur calculé par nos schémas de calcul. On a noté que les améliorations sont légères, aussi bien sur les nappes des écarts de puissance homogènes par assemblage (voir les figures 5.4 et 6.3) que crayon par crayon (voir les figures 5.5 et 6.4). On a rassemblé dans le tableau 6.2 les principaux indicateurs statistiques sur les distributions de puissance calculées dans le cadre de l'approximation SP₃, pour des calculs à 4 et 8 groupes d'énergie.

Tableau 6.2 Comparaison des résultats à 4 groupes et à 8 groupes d'énergie (calculs SP₃)

	Nappe homogène par assemblage		Nappe crayon-par crayon	
	4 groupes	8 groupes	4 groupes	8 groupes
max _Δ	1.69	1.64	45.3	47.6
min _Δ	-1.30	-1.36	-4.4	-4.3
E _{Δ_{abs}}	0.66	0.67	X ¹	X ¹
σ _Δ	0.82	0.83	4.4	4.7

On constate que l'augmentation du nombre de groupes n'a pas un impact significatif sur les indicateurs statistiques sur les distributions de puissance à l'intérieur de la partie active.

1. Non disponible.

On a même dégradé le résultat sur les écarts maximaux crayon par crayon (45.3 % à 4 groupes contre 47.6 % à 8 groupes). La différence entre ces deux écarts est néanmoins faible devant la valeur des écarts (cela revient à un écart relatif de 4.8 % entre les deux écarts). Cependant, lorsque l'on observe les figures 5.5 et 6.4, on note que la nappe obtenue à 8 groupes d'énergie présente une zone très homogène au centre du cœur, avec des écarts de puissance faibles. Cette zone est plus étendue que dans le cas des calculs à 4 groupes d'énergie. De plus, on remarque que l'assemblage 6 ne présente plus d'écarts importants par rapport à ses voisins. Ceci confirme l'intérêt du raffinement du maillage énergétique pour la modélisation du réflecteur.

CHAPITRE 7

DISCUSSION ET CONCLUSION

Au cours de cette étude, nous avons mis en place deux flots de données permettant de calculer des réflecteurs hétérogènes, multi-groupes, pouvant être utilisés avec un opérateur de diffusion ou un opérateur de transport approché de type SP_N . La stratégie employée a été de minimiser les écarts entre la distribution de puissance calculée par un code de cœur et une distribution de puissance de référence obtenue par un calcul APOLLO2 basé sur la méthode MOC. Le premier schéma de calcul est le modèle de réflecteur OPTEX, développé à l'EPM. Il repose sur les modules d'OPTEX dans le code de cœur DONJON. La stratégie employée consiste à minimiser une fonctionnelle grâce à la méthode GPT combinée à l'algorithme d'optimisation PLCP. Le deuxième schéma de calcul est basé sur COCAGNE, le nouveau code de cœur développé par EDF, associé au module d'assimilation de données ADAO de la plateforme SALOME, également développée par EDF.

La première étape de cette étude a été la validation des deux schémas de calcul. Pour cela, nous avons choisi des cas test simples afin d'effectuer un calcul de réflecteur avec chacun de nos deux schémas de calcul, à deux groupes d'énergie. Cette étape nous a permis de vérifier la cohérence de nos schémas de calcul, et de dégager deux constatations importantes :

- D'une part, les coefficients de diffusion des différents groupes sont des variables de contrôle dépendantes pour les algorithmes d'optimisation. Ce résultat a été confirmé pour des calculs à 4 groupes d'énergie et montre que réaliser l'optimisation sur l'ensemble des groupes d'énergie mène au calcul d'une infinité de réflecteurs équivalents, ce qui n'est pas souhaitable dans le cadre de cette étude.
- Les coefficients de diffusion du groupe le plus rapide dans chaque zone du réflecteur sont des variables de contrôle indépendantes pour les algorithmes d'optimisation. On obtient avec cette stratégie un réflecteur unique pour lequel le minimum de la fonctionnelle est approché de façon précise par les deux schémas de calcul. Ceci constitue donc une stratégie d'optimisation acceptable dans le cadre de cette étude.

Cette étape de validation a donc permis de dégager une stratégie d'optimisation pour garantir l'indépendance des variables de contrôle dans la suite de l'étude : on a décidé de

toujours optimiser les paramètres associés au groupe le plus rapide dans chaque zone du réflecteur (les coefficients de diffusion dans le cas de calculs de diffusion et les sections macroscopiques efficaces totales pondérées P-1 dans le cas de calculs SP_N).

Une fois les schémas de calcul validés, nous avons effectué plusieurs calculs de réflecteur, tout d'abord pour des calculs de diffusion à 2 puis 4 groupes, puis pour des calculs SP₃ à 4 puis 8 groupes d'énergie. Pour les calculs de diffusion à 2 groupes d'énergie, le réflecteur initial a été calculé avec la méthode de Lefebvre-Lebigot, et dans tous les autres cas, il a été obtenu par condensation/homogénéisation du calcul de référence. Dans chaque cas, nous avons comparé le réflecteur initial au réflecteur calculé par nos schémas de calcul en observant les nappes des écarts de puissance à la référence homogènes par assemblage crayon par crayon. De plus, nous avons effectué des comparaisons aux mesures faites sur des indicateurs 3D (calculs de concentration en bore critique lors de l'insertion successive de groupes de barres de contrôle et de l'efficacité intégrale de ces barres pour les simulations en diffusion). Les résultats obtenus nous permettent d'affirmer que de manière générale, l'optimisation réalisée par nos schémas de calcul permet de diminuer les écarts de puissance à la référence. Dans le cas des calculs de diffusion à 2 groupes d'énergie, le réflecteur initial de Lefebvre-Lebigot est très bien évalué et l'optimisation a un effet assez faible sur la qualité des nappes d'écarts, et aucun effet sur les indicateurs 3D. Lorsque l'on raffine le maillage spatial à 4 groupes d'énergie, et que l'on initialise le réflecteur par condensation/homogénéisation du calcul de référence, on observe un effet important de l'optimisation effectuée par nos schémas de calcul. Cependant, on constate que les écarts de puissance à la référence sont plus importants qu'à 2 groupes d'énergie. En effet, le réflecteur initial est beaucoup moins bien évalué et l'optimisation ne permet pas de pallier ce problème. En particulier, sur les nappes d'écarts crayon par crayon, on observe des écarts très importants dans les dernières rangées de crayons de la partie active, situées à l'interface cœur/réflecteur. Sur les indicateurs 3D, on note que l'optimisation permet de retrouver les résultats du réflecteur de Lefebvre-Lebigot, ce qui est un résultat intéressant. Cependant, dans une perspective industrielle, il est préférable de privilégier le réflecteur Lefebvre-Lebigot, puisque les calculs 4 groupes sont plus lourds que les calculs 2 groupes et n'apportent pas d'amélioration notable. Notre modèle de réflecteur serait intéressant dans le cas où des calculs multi-groupes en diffusion seraient préconisés pour d'autres raisons que celle de la modélisation du réflecteur seule.

On a ensuite effectué des calculs SP₃, à 4 et 8 groupes d'énergie. Pour ces simulations, nous n'avons pas calculé les indicateurs 3D car ceux-ci sont effectués avec des bibliothèques de sections efficaces décrites crayon par crayon qui demandent un espace mémoire important, et nous n'avons pas pu accéder aux ressources nécessaires à ces calculs. Dans le cadre des calculs

à 4 groupes d'énergie, on constate un effet important de l'optimisation effectuée par nos schémas de calcul, et également une nette amélioration par rapport aux calculs de diffusion à 4 groupes d'énergie. Le réflecteur optimisé à 4 groupes d'énergie permet d'obtenir des nappes d'écart de puissance à la référence comparables à celles obtenues avec le réflecteur de Lefebvre-Lebigot. Cependant, on note sur les nappes d'écart crayon par crayon que les dernières rangées de crayons de la partie active présentent toujours des écarts de puissance très importants. Ceci est dû à des erreurs de modélisation que nous exposerons plus loin. Lorsque l'on raffine le maillage énergétique à 8 groupes, on observe une légère amélioration sur la nappe des écarts de puissance à la référence, qui est plus homogène au centre du cœur, et présentent des écarts légèrement plus faibles dans cette région. Cependant, on observe toujours des écarts importants au niveau des dernières rangées de crayons de la partie active.

Les résultats montrent donc que l'objectif de cette étude a été atteint. En effet, on a mis en place deux schémas de calcul capables de générer des réflecteurs hétérogènes, multi-groupes, en utilisant un opérateur de diffusion ou SP_N . Dans tous les cas envisagés, nous avons constaté que le réflecteur calculé par nos jeux de données permet toujours d'obtenir des écarts de puissance à la référence plus faibles que le réflecteur initial. Cependant, on a également constaté plusieurs limites majeures à cette étude. En effet, nos jeux de données ne parviennent pas à obtenir des résultats meilleurs que ceux obtenus en diffusion et à 2 groupes d'énergie à partir du réflecteur de Lefebvre-Lebigot. Trois raisons principales à cette observation peuvent être dégagées, qui constituent les trois axes principaux de travaux ultérieurs à cette étude :

- Lorsque l'on sort du cadre d'application de la méthode de Lefebvre-Lebigot, on initialise le réflecteur par condensation/homogénéisation du calcul de référence APOLLO2. Or, le calcul initial des sections efficaces est primordial. En effet, si certains paramètres du réflecteur vont être modifiés lors de l'optimisation (coefficients de diffusion dans le cadre de calculs de diffusion, et sections macroscopiques efficaces totales pondérées P-1 dans le cas de calculs SP_N/S_N), les autres paramètres du réflecteur resteront inchangés (sections de diffusion...). Il est donc très important de dimensionner correctement le réflecteur initial, ce qui n'est pas le cas lorsque l'on sort du cadre d'application de la méthode de Lefebvre-Lebigot. Les schémas de calcul mis en place ici ne suffisent donc pas, et il faut effectuer un travail de dimensionnement préalable pour des réflecteurs multi-groupes comme c'est le cas à 2 groupes avec le réflecteur de Lefebvre-Lebigot. Nous recommandons de remplacer l'homogénéisation flux-volume, utilisée en sortie par APOLLO2 pour calculer les paramètres de réflecteur à 26 groupes, par une technique

d'homogénéisation plus évoluée. On pourrait tenter de calculer un coefficient de diffusion par une formule de type mode fondamental et/ou d'utiliser une équivalence SPH.

- Dans la mise en place du problème, il est précisé que les assemblages de la partie active sont calculés en milieu infini, dans le cadre de l'approximation du mode fondamental. Cette méthode de calcul est valide au centre du cœur. En effet, les assemblages voisins présentent des caractéristiques physiques similaires. L'approximation du milieu infini est donc acceptable dans ce cas. Cependant, lorsque l'on s'approche de l'interface cœur/réflecteur, et particulièrement pour les assemblages dont les voisins sont des assemblages du réflecteur, l'approximation atteint ses limites. En effet, le réflecteur admet des caractéristiques physiques radicalement différentes de celles de la partie active. L'approximation du milieu infini est donc ici peu adaptée. Un des axes principaux de travail futur sera celui-ci : on peut observer les résultats de nos schémas de calcul lorsque l'on modélise la partie active autrement, par condensation/homogénéisation du calcul de référence APOLLO2 par exemple.
- Durant toute cette étude, le réflecteur a été modélisé avec des sections efficaces homogènes par assemblages. En effet, modéliser le réflecteur avec des sections efficaces homogènes par crayon nécessite des bibliothèques de sections efficaces très volumineuses et beaucoup d'espace mémoire. Cependant, la modélisation homogène par assemblage du réflecteur ne permet pas de représenter correctement les hétérogénéités de sa structure physique. Ainsi, certains assemblages sont traversés à la fois par de l'eau et par de l'acier, et il paraît assez grossier de moyennner les sections efficaces des deux matériaux sur l'ensemble du réflecteur. Il serait alors intéressant d'imaginer une modélisation hybride du réflecteur. Les assemblages situés à l'interface cœur/réflecteur seraient modélisés avec des sections efficaces homogènes par crayon, car ces assemblages sont traversés à la fois par le baffle (eau) et par le bouclier thermique et nécessitent donc une description plus fine, à l'échelle du crayon. Les assemblages situés plus loin de la partie active pourraient être, quant à eux, modélisés avec des sections efficaces homogènes par assemblage afin de réduire le volume des bibliothèques de sections efficaces. On pourrait imaginer un maillage du réflecteur plus physique, par exemple un maillage découpant le réflecteur en macro-groupes de crayons correspondant aux différents matériaux qui composent le réflecteur. Ce point constitue également un axe de travaux postérieurs à cette étude. Notamment, il sera intéressant de comparer les performances de nos deux schémas de calcul dans ce cas, en terme de temps de convergence. En effet, le vecteur de contrôle sera

alors de taille importante (de l'ordre de la centaine de variables), ce qui constitue un cadre plus significatif de comparaison des performances des algorithmes d'optimisation.

Enfin, on a montré la dépendance en énergie des variables de contrôle (coefficients de diffusions ou sections macroscopiques totales corrigées P-1). On a alors choisi d'optimiser sur le paramètre du groupe rapide. Il serait intéressant de réaliser la même étude en optimisant cette fois-ci sur le groupe thermique pour des calculs à deux groupes d'énergie, ou sur un autre groupe dans le cadre de calculs multi-groupes.

Finalement, il est possible grâce aux flots de données mis en place au cours de cette étude, de calculer des réflecteurs hétérogènes, multi-groupes, pour des opérateurs de diffusion ou des opérateurs de transport approché de type SP_N/S_N . Ces schémas de calcul peuvent être améliorés en termes de choix de modélisation, mais constituent une base de travail intéressante pour un modèle de réflecteur 2D multi-groupe.

RÉFÉRENCES

- (2013). Site de téléchargement de la plateforme SALOME. <http://www.salome-platform.org/>.
- BOTH, J.-P. et PENELIAU, Y. (1996). The Monte Carlo Code TRIPOLI-4 and its First Benchmark Interpretations. *Proc. Int. Conf. on the Physics of Reactor, PHYSOR'96 Mito, Ibaraki, Japan.*
- BOURIQUET, B., ARGAUD, J.-P. et CUGNART, R. (2012). Optimal Design of Measurement Network for Neutronic Activity Field Reconstruction by Data Assimilation. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, vol. 664, pp. 117–126.
- BOURIQUET, B., ARGAUD, J.-P., ERHARD, P., MASSART, S., PONÇOT, A., RICCI, S. et THUAL, O. (2011). Robustness of Nuclear Core Activity Reconstruction by Data Assimilation. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, vol. 629, pp. 282–287.
- BOUTTIER, F. et COURTIER, P. (1999). *Data Assimilation Concepts and Methods*. Meteorological Training Course Lecture Series.
- CHAMBON, R. (2012). *A User Guide for OPTEX Version 4*. Institut de Génie Nucléaire, École Polytechnique de Montréal. Technical Report IGN-314.
- COURAU, T. (2004). *Éléments de transport neutronique, Schéma industriel appliqué aux calcul de réacteurs*. ENSPG. Notes de cours.
- COURAU, T., COMETTO, M., GIRARDI, E., COUYRAS, D. et SCHWARTZ, N. (2008). Elements of Validation of the Pin-by-Pin Calculation with the Future Calculation Scheme Based on APOLLO2 and COCAGNE Codes. *Proc. Int. Conf. ICAPP'08, Anaheim, CA, USA, june 2008.*
- FERLAND, J. (1984). *A Linear Programming Problem with an Additional Quadratic Constraint Solved by Parametric Linear Complementarity*. Département d'informatique et de recherche opérationnelle, Université de Montréal. Publication numéro 497.
- GELBARD, E.-M. (1960). Application of Spherical Harmonics Method to Reactor Problems. *Bettis Atomic Power Laboratory*.
- HÉBERT, A. (1986). Preconditioning the Power Method for Reactor Calculations. *Nuclear Science Engineering*, vol. 94.
- HÉBERT, A. (2006). The Search for Superconvergence in Spherical Harmonics Approximations. *Nuclear Science Engineering*, vol. 154.

- HÉBERT, A. (2009). *Applied Reactor Physics*. Presses Internationales Polytechnique.
- HÉBERT, A. (2012). *A User Guide for TRIVAC Version 4*. Institut de Génie Nucléaire, École Polytechnique de Montréal. Technical Report IGN-293.
- HÉBERT, A. (2013). Application of the OPTEX Method for Computing Reflector Parameters. *Proc. Int. Conf. on Mathematics and Computation, Supercomputing, Reactor Physics and Nuclear and biological Applications, M&C 2013, Sun Valley, ID, USA*.
- HÉBERT, A., MARLEAU, G. et ROY, R. (2012a). *A Description of the DRAGON and TRIVAC Version 4 Data Structures*. Institut de Génie Nucléaire, École Polytechnique de Montréal. Technical Report IGN-295.
- HÉBERT, A., SEKKI, D. et CHAMBON, R. (2012b). *A User Guide for DONJON Version 4*. Institut de Génie Nucléaire, École Polytechnique de Montréal. Technical Report IGN-300.
- MARGUET, S. (2011). *La Physique des Réacteurs Nucléaires*. Éditions Lavoisier, Collection EDF R&D.
- MARLEAU, G., HÉBERT, A. et ROY, R. (2013). *A User Guide for DRAGON Version 4*. Institut de Génie Nucléaire, École Polytechnique de Montréal. Technical Report IGN-294.
- NOCEDAL, J. (1980). Updating Quasi-Newton Matrices with Limited Storage. *Mathematics of Computation*, vol. 151, pp. 773–782.
- PERRY, A. (1978). A Modified Conjugate Gradient Algorithm. *Mathematics of Operations Research*, vol. 6.
- PLAGNE, L. et PONÇOT, A. (2005). Generic Programming for Deterministic Neutron Transport Codes. *Proc. Int. Conf. on Mathematics and Computation, Supercomputing, Reactor Physics and Nuclear and Biological Applications, M&C 2005, Avignon, France*.
- POMRANING, G.-C. (1967). A Derivation of Variational Principles for Inhomogeneous Equations. *Nuclear Science Engineering*, vol. 29.
- RAVIART, P. et THOMAS, J. (1977). *Mathematical Aspects of the Finite Element Method (in Lecture Notes in Mathematics)*, vol. 606. Springer.
- RIBES, A. (2007). SALOME Platform Component Model for Numerical Simulation. *Computer Software and Applications Conference, COMPSAC 2007, 31st annual international*.
- ROY, R. (1999). *The CLE-2000 Tool Box*. Institut de Génie Nucléaire, École Polytechnique de Montréal. Technical Report IGN-163.
- SANCHEZ, R., ZMIJAREVIC, I., COSTE-DELCLAUX, M., MASIELLO, E., SANTANDREA, S., MARTINOLLI, E., VILLATE, L., SCHWARTZ, N. et GULER, N. (2010). APOLLO2 Year 2010. *Nuclear Engineering and Technology*, vol. 42, pp. 474–499.

SANDRIN, C. (2010). *Modélisation neutronique du réflecteur pour le calcul des cœurs des réacteurs nucléaires à eau pressurisée. Application à l'EPR*. Thèse de doctorat, Université Paris-Sud 11.

SHANNO, D. (1978). Conjugate Gradient Methods with Inexact Searches. *Mathematics of Operations Research*, vol. 3.

ANNEXE A

Méthode d'optimisation PLCP

La méthode d'optimisation *Parametric Linear Complementarity Pivoting* a été introduite par J. Ferland(Ferland, 1984) afin de résoudre des problèmes d'optimisation non linéaire avec contrainte quadratique et contraintes linéaires. La mise en place de la méthode est également expliquée dans par A.Hébert(Hébert, 2013). Pour mieux comprendre la méthode, nous allons détailler ici le problème d'optimisation résolu dans le cadre du modèle de réflecteur OPTEX.

Notre problème consiste à minimiser la fonctionnelle décrite au chapitre 3 (voir 3.3). Le problème de minimisation se traduit par :

$$\begin{cases} \min_X F(\mathbf{X}) \\ X_{\min} \leq X_k \leq X_{\max} \quad \forall k \in [1, N] \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

En effet, on veut minimiser la fonctionnelle F , tout en restreignant les variables de contrôle dans un certain intervalle, afin que les résultats aient un sens physique. Ici, les $(X_k^{(n)}, \quad k \in [1, N])$ sont des coefficients multiplicatifs sur les grandeurs que l'on fait varier au cours de l'optimisation (les coefficients de diffusion dans le cas de calculs de diffusion, et les sections efficaces macroscopiques totales pondérées $P-1$ dans le cas de calculs SP_N). On a alors par exemple, dans le cas de calculs de diffusion : $D^{(n+1)} = X^{(n)}D^{(0)}$, où $D^{(0)}$ est le coefficient de diffusion initial.

La non-linéarité de la fonctionnelle peut engendrer des problèmes d'optimisation lorsque l'on utilise une méthode du gradient simple telle que la méthode de plus profonde descente. On ajoute alors une contrainte linéaire au problème. A chaque itération, on constraint les variables de contrôle dans un certain rayon, noté $S^{(n)}$, et défini par :

$$\sqrt{\sum_{k=1}^N \omega_k (\Delta X_k^{(n)})^2} \leq S^{(n)} \quad (\text{A.2})$$

où :

- $(\Delta X_k^{(n)}, \quad k \in [1, N])$ sont les variations des variables de contrôle à l'itération n , définies par : $\Delta X_k^{(n)} = X_k^{(n+1)} - X_k^{(n)}$

- ω_k sont des poids, que l'on prend égaux aux racines carrées des coefficients de diffusion dans le cas de calculs de diffusion, ou des sections efficaces macroscopiques totales pondérées P-1 dans le cas de calculs SP_N.

De plus, en effectuant un développement de Taylor d'ordre 1 sur la fonctionnelle F , on peut écrire :

$$F(\mathbf{X}^{(n+1)}) = F(\mathbf{X}^{(n)}) + \Delta\mathbf{X}^{(n)} \cdot \nabla F(\mathbf{X}^{(n)}) \quad (\text{A.3})$$

où $\nabla F(\mathbf{X}^{(n)})$ est le gradient de la fonctionnelle F . Le problème d'optimisation s'écrit alors comme suit.

$$\begin{cases} \min_X \Delta\mathbf{X}^{(n)} \cdot \nabla F(\mathbf{X}^{(n)}) \\ X_{\min} - X_k^{(n)} \leq \Delta X_k^{(n)} \leq X_{\max} - X_k^{(n)} \quad \forall k \in [1, N] \\ \sum_{k=1}^N \omega_k (\Delta X_k^{(n)})^2 \leq (S^{(n)})^2 \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

Cependant, ce problème ne peut plus être résolu à l'aide de la méthode de plus profonde descente. C'est pourquoi nous utiliserons la méthode PLCP. Dans le cas particulier où l'on s'affranchit des contraintes linéaires, les deux méthodes sont les mêmes : la méthode de plus profonde descente est un cas particulier de la méthode PLCP.

Nous allons maintenant expliquer les étapes de l'optimisation par la méthode PLCP :

1. On initialise les coefficients multiplicatifs tels que :

$$\forall k \in [1, N], X_k^{(0)} = 1 \quad (\text{A.5})$$

2. On perturbe ces coefficients en respectant les contraintes linéaires et quadratique, on obtient alors un nouveau point $\mathbf{X}^{(n+1)}$.

3. On calcule la fonctionnelle au nouveau point $\mathbf{X}^{(n+1)}$.

4. On compare la valeur de la fonctionnelle au nouveau point avec la valeur de la fonctionnelle au point précédent :

- Si la fonctionnelle a augmenté : on réduit la valeur du rayon de la contrainte quadratique ($S^{(n+1)} \leq S^{(n)}$) et on n'accepte pas le nouveau point : $\mathbf{X}^{(n+1)} = \mathbf{X}^{(n)}$.

- Sinon, on accepte le nouveau point $\mathbf{X}^{(n+1)}$.

5. On réitère le processus à partir de l'étape 2.

Pour chaque itération, il existe deux situations possibles :

- La zone délimitée par le rayon de la contrainte quadratique n'est pas coupée par une contrainte linéaire, comme c'est le cas sur la figure de gauche de la figure A.1.
- La zone délimitée par le rayon de la contrainte quadratique est coupée par une contrainte linéaire, comme c'est le cas sur la figure de droite de la figure A.1.

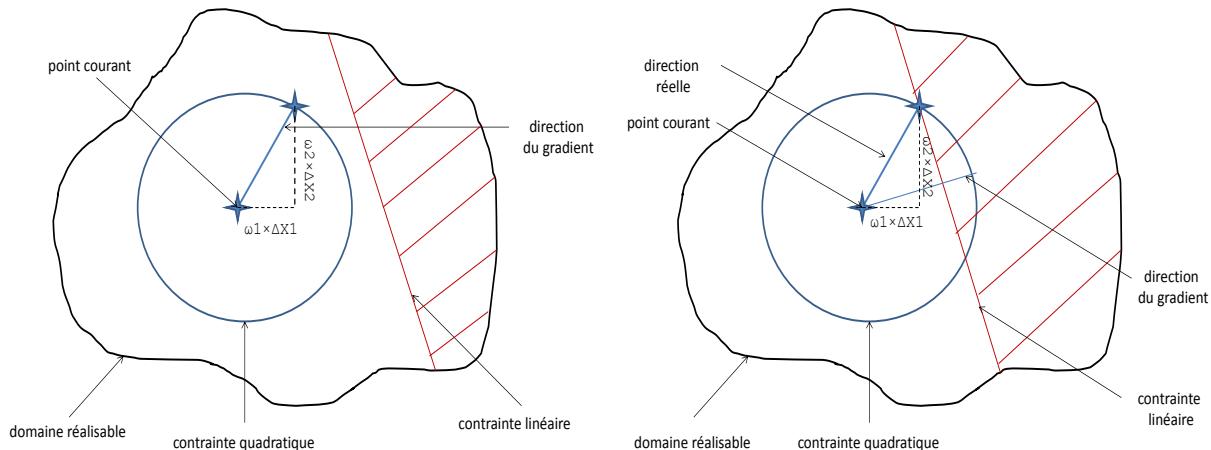


Figure A.1 Les deux situations possibles lors d'une itération de l'algorithme d'optimisation

On a représenté le cas où l'on réalise une optimisation à 2 paramètres pour une meilleure compréhension. Le premier cas est le plus simple. On a tout simplement :

$$\Delta X_k^{(n)} = -\frac{S^{(n)}}{\sqrt{\omega_k \sum_{l=1}^N (\frac{\partial F(\mathbf{X}^{(n)})}{\partial X_k})^2}} \cdot \frac{\partial F(\mathbf{X}^{(n)})}{\partial X_k} \quad (\text{A.6})$$

Le deuxième cas est légèrement plus complexe. À cause de la contrainte linéaire qui coupe la contrainte quadratique, on ne va plus suivre la direction du gradient, comme on l'a montré en Figure A.1. La nouvelle direction, appelée direction réelle en Figure A.1, admet une pente

notée $F'(\mathbf{X}^{(n)})$ et définie comme la projection du gradient de la fonctionnelle sur la droite représentant la nouvelle direction. On a alors :

$$F'(X^{(n)}) = \frac{1}{T^{(n)}} \sum_{k=1}^N \sqrt{\omega_k} \frac{\partial F(\mathbf{X}^{(n)})}{\partial X_k} \Delta X_k^{(n)} \quad (\text{A.7})$$

où :

$$T^{(n)} = \sqrt{\sum_{k=1}^N \omega_k (\Delta X_k^{(n)})^2} \quad (\text{A.8})$$

La clé de la méthode PLCP est la manière avec laquelle le rayon de la contrainte quadratique est réduit lorsque la valeur de la fonctionnelle augmente d'une itération à la suivante. Il s'agit d'une réduction parabolique, expliquée par J.Ferland(Ferland, 1984). Lorsque l'on se trouve dans le deuxième cas de la figure A.1 (à droite sur la figure), le point suivant $\mathbf{X}^{(n+1)}$ n'est pas nécessairement satisfaisant. Il faut alors évaluer la fonctionnelle à ce point. On pose alors :

$$\begin{aligned} g(0) &= F(\mathbf{X}^{(n)}) \\ g(T^{(n)}) &= F(\mathbf{X}^{(n+1)}) \\ g'(0) &= F'(\mathbf{X}^{(n)}) \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Lorsque le point suivant $\mathbf{X}^{(n+1)}$ est satisfaisant, on a $g(T^{(n)}) \leq g(0)$ et $S^{(n+1)} = S^{(n)}$. Sinon, on va réduire le rayon de la contrainte quadratique selon la stratégie suivante : on définit la fonction g comme :

$$g(x) = \left[\frac{g(T^{(n)}) - g(0)}{(T^{(n)})^2} - \frac{g'(0)}{T^{(n)}} \right] x^2 + g'(0)x + g(0) \quad (\text{A.10})$$

La stratégie de la méthode PLCP consiste alors à calculer le minimum de la fonction g sur l'intervalle $[\frac{T^{(n)}}{20}, T^{(n)}]$ (Hébert, 2013). Et le nouveau rayon de la contrainte quadratique est défini comme suit.

$$S^{(n+1)} = \max\left\{\frac{T^{(n)}}{20}, \left|\frac{0.5g'(0)(T^{(n)})^2}{g'(0)T^{(n)} - [g(T^{(n)}) - g(0)]}\right|\right\} \quad (\text{A.11})$$

ANNEXE B

Méthode d'optimisation L-BFGS

La méthode d'optimisation *Limited Memory Broyden Fletcher Godfarbe Shanno* a été introduite dans les travaux de Perry (voir (Perry, 1978)) et de Shanno (voir(Shanno, 1978)) en 1978. Il s'agit d'une amélioration de la méthode *Broyden Fletcher Godfarbe Shanno* (BFGS), dont l'algorithme est très similaire à celle de la méthode BFGS. C'est pourquoi nous allons tout d'abord exposer les principes de la méthode BFGS dans cette annexe. Il s'agit d'une méthode quasi-newtonienne. On va supposer ici que l'on cherche à minimiser une certaine fonction f deux fois différentiable.

La méthode de Newton classique est un algorithme itératif. Supposons que \mathbf{x}_k représente le vecteur de contrôle à l'itération k . Alors on cherche la nouvelle direction \mathbf{p}_k comme suit :

$$\mathbf{G}_k \mathbf{p}_k = -g(\mathbf{x}_k) \quad (\text{B.1})$$

où :

- \mathbf{G}_k est la matrice hessienne associée à la fonction f , définie telle que :

$$\forall (i, j) \in \mathbb{R}^2, \quad G_{k,i,j} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(\mathbf{x}_k) \quad (\text{B.2})$$

- $g(\mathbf{x}_k) = \nabla f(\mathbf{x}_k)$ est le gradient de la fonction f pris au point \mathbf{x}_k .

Une fois la nouvelle direction trouvée, la méthode de plus profonde descente permet de calculer le pas de descente λ_k tel que :

$$f(\mathbf{x}_k + \lambda_k \mathbf{p}_k) \leq f(\mathbf{x}_k) + \alpha \lambda_k g(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{p}_k \quad (\text{B.3})$$

où $\alpha \in [0, 1]$. Cette méthode implique toutefois le calcul de la matrice hessienne de la fonction f , ce qui peut être compliqué. Les méthodes quasi-newtoniennes calculent une approximation de la matrice hessienne, notée \mathbf{B}_k . On fait alors l'approximation :

$$\mathbf{B}_k \mathbf{p}_k = -g(\mathbf{x}_k) \quad (\text{B.4})$$

La méthode BFGS consiste à calculer la matrice \mathbf{B}_k de manière itérative comme suit :

$$B_{k+1} = B_k - \frac{B_k s_k s_k^T B_k}{s_k^T B_k s_k} + \frac{\gamma_k \gamma_k^T}{\gamma_k^T s_k} \quad (B.5)$$

où $s_k = \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k$, et $\gamma_k = g(\mathbf{x}_{k+1}) - g(\mathbf{x}_k)$. Ainsi, l'équation B.5 permet de calculer une approximation de la matrice hessienne de manière récursive. L'algorithme se déroule alors comme suit :

1. On dispose d'un vecteur de contrôle initial, noté \mathbf{x}_0 et on initialise la matrice \mathbf{B} telle que $\mathbf{B}_0 = \mathbf{I}_N$, où \mathbf{I}_N est la matrice identité de taille N , qui est la taille du vecteur de contrôle.
2. On calcule le gradient f au point \mathbf{x}_0 .
3. On en déduit la direction \mathbf{p}_k ($k \geq 0$) avec l'équation B.4, et par conséquent le nouveau point \mathbf{x}_{k+1} .
4. On calcule le gradient de f au nouveau point $g(\mathbf{x}_{k+1})$.
5. On en déduit la valeur approximée de la matrice hessienne au point suivant \mathbf{B}_{k+1} avec l'équation B.5.
6. On réitère le processus à partir de l'étape 3.

Même si les relations de récurrence qui la régissent sont identiques à celles développées ci-dessus, la méthode L-BFGS fonctionne de manière légèrement différente. En effet, dans le cadre de cette variante de la méthode BFGS, on n'actualise la matrice hessienne à chaque itération, mais plutôt toutes les M itérations, où $M \leq N$. Ceci permet d'alléger significativement l'espace mémoire alloué lors de l'exécution de la méthode.