

**Titre:** Simulation de mécanismes de contrôle de la réactivité inclinés du réacteur SCWR-canadien en utilisant les codes DRAGON-5 et DONJON-3  
Title: DONJON-3

**Auteur:** Haykel Raouafi  
Author:

**Date:** 2017

**Type:** Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

**Référence:** Raouafi, H. (2017). Simulation de mécanismes de contrôle de la réactivité inclinés du réacteur SCWR-canadien en utilisant les codes DRAGON-5 et DONJON-3 [Thèse de doctorat, École Polytechnique de Montréal]. PolyPublie.  
Citation: <https://publications.polymtl.ca/2495/>

## Document en libre accès dans PolyPublie

Open Access document in PolyPublie

**URL de PolyPublie:** <https://publications.polymtl.ca/2495/>  
PolyPublie URL:

**Directeurs de recherche:** Guy Marleau  
Advisors:

**Programme:** Génie nucléaire  
Program:

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

SIMULATION DE MÉCANISMES DE CONTRÔLE DE LA RÉACTIVITÉ INCLINÉS  
DU RÉACTEUR SCWR-CANADIEN EN UTILISANT LES CODES DRAGON-5 ET  
DONJON-3

HAYKEL RAOUAFI  
DÉPARTEMENT DE GÉNIE PHYSIQUE  
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

THÈSE PRÉSENTÉE EN VUE DE L'OBTENTION  
DU DIPLÔME DE PHILOSOPHIÆ DOCTOR  
(GÉNIE NUCLÉAIRE)  
MARS 2017

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Cette thèse intitulée:

SIMULATION DE MÉCANISMES DE CONTRÔLE DE LA RÉACTIVITÉ INCLINÉS  
DU RÉACTEUR SCWR-CANADIEN EN UTILISANT LES CODES DRAGON-5 ET  
DONJON-3

présentée par: RAOUAFI Haykel

en vue de l'obtention du diplôme de: Philosophiæ Doctor

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

M. HÉBERT Alain, Doctorat, président

M. MARLEAU Guy, Ph. D., membre et directeur de recherche

M. TEYSSEDOU Alberto, Ph. D., membre

M. TROTTIER Alexandre, Ph. D., membre externe

## DÉDICACE

*À mes parents,*

*Le bonheur, c'est avoir une mère qui nous aime, un père pour nous conduire, avoir encore ses parents à l'âge d'homme pour les voir sourire à nos efforts, et voir nos parents applaudir à nos succès.*

*Henri-Frédéric Amiel, Journal intime.*

*To my parents,*

*The happiness, is to have a mother who likes us, a father to lead us, still having his parents at man's age to see them smiling to our efforts, and seeing our parents applauding to our successes.*

*Henri-Frédéric Amiel, Personal diary.*

## REMERCIEMENTS

J'ai l'impression que c'était hier que j'arrivais à Polytechnique de Montréal, pourtant aujourd'hui six années se sont écoulées entre ma maitrise et ce doctorat. Si le temps est passé si vite, c'est grâce à toutes les personnes qui ont fait mon quotidien et que je souhaite ici remercier.

Je tiens à exprimer toute ma reconnaissance à mon directeur de thèse professeur Guy Marleau pour avoir accepté de diriger mes recherches académique en doctorat. Sa grande disponibilité et ses suggestions toujours pertinentes me furent précieuses pour accomplir cette thèse. Son attitude extrêmement rigoureuse sur la recherche et le travail est pour moi un modèle.

Je remercie tous les membres de mon jury : professeur Alain Hébert pour avoir accepté de présider le jury de cette thèse, professeur Alberto Teyssedou et Monsieur Alexandre Trottier, chercheur aux laboratoires nucléaires canadiens (CNL), d'avoir lu consciencieusement ma thèse et de l'avoir rapportée.

Je remercie sincèrement professeur Clara Santato pour sa bonne humeur et son support inconditionnel.

Je remercie mes collègues d'équipe à l'institut de génie nucléaire (IGN) pour leur assistance.

Mes chaleureux remerciements à ma famille et ma fiancée, le trésor et l'énergie éternelle de ma vie, pour leurs encouragements et leur assistance morale qui m'ont permis de faire cette thèse dans de bonnes conditions.

Je remercie le Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique de la Tunisie (MESRST), le programme de technologies énergétiques de quatrième génération CRSNG-RNCan-EACL et la Société nucléaire canadienne (SNC) pour avoir contribué financièrement à ce projet.

## RÉSUMÉ

Le SCWR est un réacteur à tube de force refroidi à l'eau légère à l'état supercritique et modéré par l'eau lourde. Il est alimenté avec des canaux de combustible (62 éléments) de type CANDU-6 (CANada Deuterium Uranium) contenant un mélange d'oxydes de thorium et de plutonium. Du fait que les tubes de force sont verticaux, la face supérieure du réacteur est occupée par les collecteurs d'entrée et de sortie du caloporteur à la pression de 25 MPa, il est alors pratiquement impossible d'insérer des barres de contrôle de la réactivité verticales dans le cœur depuis la face supérieure du réacteur. L'insertion de dispositifs de contrôle de la réactivité solides à partir du fond du réacteur est possible, mais cette option a été initialement rejetée parce qu'elle a été jugée peu pratique à cause de la force de gravitation. L'option qui est proposée ici est d'utiliser des barres de contrôle de la réactivité inclinées qui sont insérées à partir du côté du réacteur et qui bénéficient de la force de gravité exercée sur elles comme dans les réacteurs ATUCHA-I.

L'objectif de cette thèse est d'évaluer la performance neutronique des barres de contrôle inclinées proposées. Pour atteindre cet objectif, nous développons d'abord un modèle de supercellule tridimensionnel pour simuler une des barres de contrôle inclinées situées entre quatre grappes de combustible verticales. Des simulations sont effectuées avec le code Monte Carlo SERPENT et le code déterministe DRAGON-5 à cinq positions axiales dans le réacteur pour évaluer l'effet de la température et de la densité du caloporteur, qui varie sensiblement avec la hauteur du cœur, sur la valeur de réactivité des barres de contrôle.

Comme DRAGON-5 ne peut pas analyser des géométries contenant des cylindres qui ne sont pas parallèles ou perpendiculaires à un axe de la géométrie, une grande partie de ce projet est dédiée à l'implémentation d'un ensemble de routines dans les modules **GEO** et **NXT** du code de calcul de cellule DRAGON-5 permettant l'analyse de géométries cylindriques inclinées. Ces implémentations ont assuré l'identification des géométries annulaires inclinées, le calcul de volumes et surfaces générées par l'intersection des régions annulaires inclinées avec la cellule ainsi que leurs numérotations, le calcul de longueurs des segments d'intégrations dans les régions annulaires inclinées. On analyse ainsi avec la nouvelle version de DRAGON-5 l'effet de la modification de l'inclinaison et de la position spatiale des barres de contrôle à l'intérieur de la supercellule. La validation de ces implémentations est assurée par visualisation 3D des lignes d'intégration en utilisant les informations générées par le module **TLM**. Ensuite, par comparaison des volumes et des surfaces calculées **NXT** et les volumes et les surfaces calculées par le logiciel de conception assistée par ordinateur **AUTOCAD**. Et, par comparaison du calcul

neutronique en présence des régions annulaires concentriques en comparant les résultats de DRAGON-5 pour une supercellule contenant une barre de contrôle inclinée avec ceux générés par le code SERPENT. Ces validations ont montré que le code DRAGON-5 est bien mis à jour pour simuler des géométries contenant des régions annulaires concentriques.

Le deuxième objectif de cette thèse est d'évaluer l'efficacité des barres de contrôle inclinées dans le réacteur en variant la position et le nombre des barres de contrôle dans le réacteur dans différents états de fonctionnement normal en utilisant le code de diffusion DONJON-3.

La stratégie de calculs utilisés dans cette thèse consiste à réaliser des calculs neutroniques en utilisant la version à jour du code DRAGON-5 pour générer des bases de données réacteur en utilisant un modèle de cellule unitaire et un modèle de supercellule en fonctions de cinq positions axiales dont la densité et la température du caloporteur sont différentes. Ces bases de données sont utilisées ensuite pour réaliser des calculs de cœur du réacteur SCWR complet contenant des barres de contrôle inclinées.

Cette stratégie de calcul a montré que l'utilisation de 12 barres de contrôle passant par les régions de haute densité de flux neutronique à  $15^\circ$  et  $30^\circ$  par rapport l'axe des  $z$  donne une efficacité importante pour le contrôle de réactivité du réacteur SCWR.

## ABSTRACT

The Canadian-SCWR is a heavy-water moderated supercritical light-water-cooled pressure tube reactor. It is fueled with CANada Deuterium Uranium CANDU-6 type bundles (62 elements) containing a mixture of thorium and plutonium oxides. Because the pressure tubes are vertical, the upper region of the core is occupied by the inlet and outlet headers making it nearly impossible to insert vertical control rods in the core from the top. Insertion of solid control devices from the bottom of the core is possible, but this option was initially rejected because it was judged impractical. The option that is proposed here is to use inclined control rods that are inserted from the side of the reactor and benefit from the gravitational pull exerted on them like those used in the ATUCHA-I reactors.

The objective of this thesis is to evaluate the neutronic performance of the proposed inclined control rods. To achieve this goal, we first develop a three-dimensional supercell model to simulate an inclined rod located between four vertical fuel cells. Simulations are performed with the SERPENT Monte Carlo code and DRAGON-5 deterministic code at five axial positions in the reactor to evaluate the effect of coolant temperature and density, which varies substantially with core height, on the reactivity worth of the control rods. The current version of DRAGON-5 cannot analyze geometries containing cylinders that are not parallel or perpendicular to an axis of the geometry. Therefore, we upgrade the geometry and tracking modules of DRAGON-5 to make it possible to simulate inclined cylindrical geometries.

These upgrades ensured that geometry and tracking modules can now analyze inclined annular geometries, calculate the volumes and the surfaces generated by the intersection of inclined annular regions with cell, calculate lengths of the tracking lines in the inclined annular regions. The effect of the modification of the inclination and the spatial position of the inclined control rods inside the supercell is analyzed with the upgraded DRAGON-5 version. The validation of these upgrades is ensured by 3D visualization of the tracking lines using the information generated by the TLM module, by comparing calculated volumes and surfaces by NXT and the volumes and surfaces computed by the CAO software AUTOCAD and DRAGON-5 neutron transport calculation of supercell model with results of SERPENT code. These validations have shown that DRAGON-5 code is correctly updated to simulate the geometry containing concentric annular regions.

The second objective of this thesis is to evaluate the effectiveness of the inclined control rods in the reactor by varying the position and the number of control rods in the reactor in different states of normal operations using the DONJON-3 diffusion code.

The calculation strategy used in this thesis consists in performing neutron transport calculations using the updated version of the DRAGON-5 code to generate reactor databases using a unit cell model and a supercell model at five axial positions where density and temperature of the coolant are different. These databases are then used to perform core computations of full SCWR reactor containing inclined control rods.

This calculation strategy has shown that the use of 12 control rods passing through the regions of high neutron flux density at  $15^\circ$  and  $30^\circ$  with respect to the  $z$  axes give an important efficiency for the reactivity control in the SCWR reactor.

## TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE . . . . .	iii
REMERCIEMENTS . . . . .	iv
RÉSUMÉ . . . . .	v
ABSTRACT . . . . .	vii
TABLE DES MATIÈRES . . . . .	ix
LISTE DES TABLEAUX . . . . .	xii
LISTE DES FIGURES . . . . .	xiv
LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS . . . . .	xviii
LISTE DES ANNEXES . . . . .	xix
 CHAPITRE 1 INTRODUCTION . . . . .	1
1.1 Réacteur de 4 <sup>e</sup> génération canadien . . . . .	1
1.2 Nécessité de l'étape de l'évaluation numérique . . . . .	5
1.3 Objectif du projet de recherche . . . . .	5
1.3.1 Les dispositifs de réactivité de réacteurs CANDU-6 . . . . .	6
1.3.2 Les dispositifs de réactivité du réacteur ATUCHA-II . . . . .	11
1.3.3 Proposition de dispositifs de réactivité pour les réacteurs SCWR-canadien	14
1.4 Présentation des problématiques du projet . . . . .	17
1.4.1 Limitation géométrique du code DRAGON-5 . . . . .	17
1.4.2 Contrainte de conception géométrique des mécanismes de contrôle . .	20
1.5 Organisation du document . . . . .	21
 CHAPITRE 2 TECHNOLOGIE DU RÉACTEUR SCWR-CANADIEN . . . . .	22
2.1 Conception préliminaire du réacteur SCWR-canadien . . . . .	22
2.1.1 Vue d'ensemble du réacteur . . . . .	22
2.1.2 Avantage de l'eau supercritique et son écoulement dans le canal . .	25
2.2 Propriétés isotopiques du canal de combustible . . . . .	28
2.2.1 Matériaux du combustible . . . . .	30

2.2.2	Propriétés du caloporeur et du modérateur . . . . .	32
2.2.3	Propriétés du tube de force . . . . .	32
2.2.4	Propriété de l'isolant céramique . . . . .	32
2.3	Gestion du combustible . . . . .	33
<b>CHAPITRE 3 NEUTRONIQUE ET MÉTHODES DE RÉSOLUTION NUMÉRIQUE</b>		<b>34</b>
3.1	Éléments de la physique des réacteurs . . . . .	35
3.1.1	Interaction neutron-noyau . . . . .	35
3.1.2	Sections efficaces neutroniques . . . . .	37
3.2	Modélisation du transport neutronique . . . . .	40
3.2.1	Le flux neutronique . . . . .	40
3.2.2	Équation différentielle de Boltzmann . . . . .	40
3.2.3	Forme intégrale de l'équation de Boltzmann . . . . .	42
3.2.4	Les conditions frontières . . . . .	44
3.3	Modélisation de la diffusion neutronique . . . . .	45
3.3.1	La loi de Fick . . . . .	45
3.3.2	Approximation de la diffusion . . . . .	46
3.3.3	Correction de transport . . . . .	48
3.4	La discrétisation multigroupe en énergie . . . . .	49
3.4.1	Principe de l'approximation multigroupe . . . . .	49
3.4.2	Formalisme de l'approximation multigroupe . . . . .	50
3.5	Méthodes de résolution . . . . .	50
3.5.1	Méthode des probabilités de collisions (CP) . . . . .	51
3.5.2	Méthode des caractéristiques (MoC) . . . . .	54
<b>CHAPITRE 4 IMPLÉMENTATION DE LA GÉOMÉTRIE CYLINDRIQUE INCLINÉE 3D DANS DRAGON-5</b>		<b>57</b>
4.1	Implémentation dans le module <b>GEO</b> . . . . .	57
4.1.1	Description de la géométrie <b>CARCELZ</b> inclinée . . . . .	58
4.1.2	Implémentation dans le code source de DRAGON-5 . . . . .	60
4.2	Évaluation analytique de l'intersection des géométries CAR3D et CARCELZ incliné . . . . .	62
4.2.1	Calcul de volume d'intersection . . . . .	62
4.2.2	Calcul de surfaces d'intersection . . . . .	73
4.2.3	Procédures de numérotation des volumes et surfaces . . . . .	77
4.3	Analyse de la géométrie <b>CARCELZ</b> inclinée . . . . .	81
4.3.1	Transfert des données de <b>GEO</b> à <b>NXT</b> . . . . .	81

4.3.2	Structure de routines de calcul de volumes et de surfaces . . . . .	83
4.4	Processus de calcul des lignes 3D d'intégration de la géométrie CARCELZ inclinée	91
4.4.1	Vérification de l'existence d'une intersection . . . . .	91
4.4.2	Calcul de coordonnées de points d'intersection . . . . .	93
<b>CHAPITRE 5 PRÉSENTATION DES MODÈLES DE SIMULATION . . . . .</b>		<b>95</b>
5.1	Modèles DRAGON . . . . .	96
5.1.1	Modèle de la cellule unitaire en 2D . . . . .	96
5.1.2	Modèle de la supercellule unitaire en 3D . . . . .	100
5.1.3	Génération des bases de données des XS macroscopiques . . . . .	102
5.2	Modèles SERPENT . . . . .	107
5.2.1	Modèle de la cellule unitaire en 2D . . . . .	108
5.2.2	Modèle de la supercellule unitaire en 3D . . . . .	109
5.3	Modèles DONJON . . . . .	114
5.3.1	Définition de la géométrie du cœur . . . . .	115
5.3.2	Définition de la géométrie de la barre de contrôle . . . . .	117
5.3.3	Stratégie de calcul . . . . .	119
<b>CHAPITRE 6 ÉVALUATION DU DÉVELOPPEMENT NUMÉRIQUE ET DE L'EFFICACITÉ DES BARRES INCLINÉES . . . . .</b>		<b>123</b>
6.1	Validation du fonctionnement des routines . . . . .	123
6.1.1	Vérification de calculs de volumes et surfaces . . . . .	124
6.1.2	Validation des intersections des lignes d'intégration . . . . .	127
6.1.3	Validation de l'emplacement des lignes par le module TLM . . . . .	133
6.2	Validation du calcul neutronique par SERPENT . . . . .	136
6.2.1	Modèle de la cellule unitaire . . . . .	137
6.2.2	Modèle de la supercellule . . . . .	138
6.3	Application des implémentations DRAGON-5 dans le calcul du cœur . . . . .	142
6.3.1	Estimation de la réactivité des cycles . . . . .	142
6.3.2	Estimation des positions des barres de contrôle inclinées . . . . .	144
6.3.3	Efficacité des barres de contrôle inclinées . . . . .	145
<b>CHAPITRE 7 CONCLUSION ET RECOMMANDATIONS . . . . .</b>		<b>157</b>
<b>RÉFÉRENCES . . . . .</b>		<b>161</b>
<b>ANNEXES . . . . .</b>		<b>166</b>

## LISTE DES TABLEAUX

Tableau 1.1	Spécifications du réacteur à eau supercritique canadien . . . . .	4
Tableau 1.2	Caractéristiques du réacteur CANDU-6. . . . .	6
Tableau 1.3	Valeur en réactivité totale des mécanismes de réactivité. . . . .	7
Tableau 1.4	Caractéristiques du réacteur ATUCHA-II. . . . .	12
Tableau 1.5	Spécification des barres de contrôle du réacteur ATUCHA-II. . . . .	13
Tableau 2.1	Compositions isotopiques et dimensions géométriques du canal du SCWR-62. . . . .	31
Tableau 3.1	Principales réactions subies par les neutrons dans les réacteurs . . . . .	36
Tableau 3.2	Coefficient de diffusion de quelques réflecteurs thermique. . . . .	46
Tableau 4.1	Structure ( <b>descgtyp</b> ) . . . . .	59
Tableau 4.2	Structure ( <b>descSP</b> ) . . . . .	59
Tableau 4.3	Enregistrement du vecteur <b>OMEGAY</b> dans le répertoire /geometry/ . . . . .	82
Tableau 4.4	Organisation des longueurs de segment d'intégration dans un <b>CARCELZ</b> incliné. . . . .	93
Tableau 5.1	Discrétisation spatiale de la cellule 2D. . . . .	98
Tableau 5.2	Masses volumiques moyennes et températures neutroniques du caloporteur le long d'un canal du réacteur SCWR-62. . . . .	103
Tableau 5.3	Burnup d'entrée en jours. . . . .	105
Tableau 6.1	Évaluation du volume du cylindre imbriqué dans une cellule en fonction de l'inclinaison. . . . .	125
Tableau 6.2	Évaluation du volume en fonction du rayon à une inclinaison $\theta = 40^\circ$ . . . . .	125
Tableau 6.3	Évaluation du volume en fonction de la position spatiale à une inclinaison $\theta = 40^\circ$ . . . . .	126
Tableau 6.4	Évaluation de la surface du cylindre imbriqué dans une cellule en fonction de l'inclinaison sur le plan $z_+$ . . . . .	127
Tableau 6.5	Surfaces calculées analytiquement par <b>NXT</b> pour trois cylindres inclinés de $\theta = 45^\circ$ . . . . .	128
Tableau 6.6	Surfaces calculées analytiquement par <b>NXT</b> pour trois cylindres inclinés de $\theta = 30^\circ$ . . . . .	129
Tableau 6.7	Échantillons de lignes d'intégration d'un cylindre incliné de $\theta = 35^\circ$ dans une cellule cubique de côté $d = 10\text{ cm}$ . . . . .	132
Tableau 6.9	Erreurs sur les volumes calculés numériquement par <b>NXT</b> . . . . .	136
Tableau 6.10	Erreurs sur les surfaces calculées numériquement par <b>NXT</b> . . . . .	136

Tableau 6.11	Évaluation de la réactivité de la cellule unitaire par SERPENT (indice 1) et DRAGON-5 (indice 2) . . . . .	138
Tableau 6.12	Évaluation de la réactivité négative d'une barre de contrôle inclinée ajoutée dans la supercellule. . . . .	139
Tableau 6.13	Évaluation des sections efficaces totales et du flux total condensés à un groupe d'énergie du modèle de la supercellule avec barre de contrôle inclinée. . . . .	140
Tableau 6.14	Positions des axes de révolution des barres de contrôle sur les parties inférieure et supérieure du cœur (zone du combustible). . . . .	148
Tableau 6.15	Compositions atomiques et dimensions de la barre de contrôle. . . . .	150
Tableau 6.16	Variation de la réactivité négative ajoutée par des barres de contrôle en cadmium naturel (densité égale à $8.69 \text{ g/cm}^3$ ). . . . .	152
Tableau 6.17	Variation de la réactivité négative ajoutée par des barres de contrôle en cadmium naturel (densité égale à $8.69 \text{ g/cm}^3$ ) déplacée vers le bas de $z = 49.53 \text{ cm}$ . . . . .	153
Tableau 6.18	Variation de la réactivité négative ajoutée par des barres de contrôle en bore naturel (densité égale à $2.34 \text{ g/cm}^3$ ). . . . .	153
Tableau 6.19	Variation de la réactivité négative ajoutée par des barres de contrôle en bore naturel (densité égale à $2.34 \text{ g/cm}^3$ ) déplacée vers le bas de $z = 49.53 \text{ cm}$ . . . . .	153
Tableau 6.20	Variation de la réactivité négative ajoutée par des barres de contrôle en hafnium naturel (densité égale à $13.28 \text{ g/cm}^3$ ). . . . .	154
Tableau 6.21	Variation de la réactivité négative ajoutée par des barres de contrôle en hafnium naturel (densité égale à $13.28 \text{ g/cm}^3$ ) déplacée vers le bas de $z = 49.53 \text{ cm}$ . . . . .	154
Tableau 6.22	Effet du bore naturel dissous dans le modérateur sur la réactivité négative ajoutée par des barres de contrôle en cadmium naturel. . . . .	155
Tableau 6.23	Effet du bore naturel dissous dans le modérateur sur la réactivité négative ajoutée par des barres de contrôle en bore naturel. . . . .	156
Tableau 6.24	Effet du bore naturel dissous dans le modérateur sur la réactivité négative ajoutée par des barres de contrôle en hafnium naturel. . . . .	156

## LISTE DES FIGURES

Figure 1.1	Aperçu du modèle à cuve sous pression du réacteur SCWR. . . . .	2
Figure 1.2	Aperçu du modèle à tubes de force du réacteur SCWR. . . . .	3
Figure 1.3	Structure du réacteur CANDU-6. . . . .	7
Figure 1.4	Vue de haut de mécanismes de réactivité du réacteur CANDU-6. . . .	8
Figure 1.5	Vue de côté nord de sept compartiments de réglage à eau légère liquide du réacteur CANDU-6. . . . .	10
Figure 1.6	Structure 2D du cœur du réacteur ATUCHA-II. . . . .	12
Figure 1.7	Illustration des barres de contrôle du réacteur ATUCHA-II. . . . .	14
Figure 1.8	Illustration d'un exemple d'insertion de quatre barres de contrôle dans le réacteur SCWR-canadien. . . . .	16
Figure 1.9	Composante angulaire du cylindre dans la base du CAR3D . . . . .	18
Figure 1.10	Illustration d'un CARCELZ incliné emboîté par un CAR3D. . . . .	19
Figure 1.11	Intersection des lignes d'intégration avec les régions annulaires. . . . .	19
Figure 1.12	Schéma d'un assemblage $3 \times 3$ du réacteur SCWR. . . . .	20
Figure 2.1	Arrangement du cœur du réacteur SCWR-Canadien. . . . .	23
Figure 2.2	Schéma de la première proposition du réacteur SCWR-Canadien. . . .	23
Figure 2.3	Tube de force à haute efficacité à écoulement unidirectionnel. . . . .	24
Figure 2.4	Tube de force à haute efficacité à écoulement ré-entrant. . . . .	25
Figure 2.5	Diagramme de phase de l'eau. . . . .	26
Figure 2.6	Diagramme des isobares de la variation de l'enthalpie de l'eau en fonction de la température. . . . .	26
Figure 2.7	Diagramme des isobares de la variation de l'entropie de l'eau en fonction de la température. . . . .	27
Figure 2.8	Diagramme des isobares de la variation de la masse volumique de l'eau en fonction de la température. . . . .	27
Figure 2.9	Diagramme des isobares de la variation de la chaleur massique de l'eau en fonction de la température. . . . .	28
Figure 2.10	Illustration d'un canal de haute efficacité à écoulement ré-entrant de 62 éléments de combustible. . . . .	29
Figure 2.11	Illustration de l'écoulement du caloporteur dans un canal de haute efficacité à écoulement ré-entrant. . . . .	29
Figure 2.12	Canal du réacteur SCWR-canadien à 78 éléments de combustible et à écoulement simple. . . . .	30

Figure 2.13	Cartographie du rechargement d'un quart du cœur SCWR-canadien.	33
Figure 3.1	Illustration de l'interaction d'un flux de neutrons avec un bloc de matière	37
Figure 3.2	Sections efficaces totales, de diffusion et de fission sur le plutonium 241.	39
Figure 3.3	Déplacement de l'élément de volume $d^3r$ dans l'espace. . . . .	43
Figure 3.4	Condition aux frontières de réflexion miroir (gauche), de réflexion isotrope (centre) et périodique (droite). . . . .	45
Figure 3.5	Assemblage $3 \times 2$ avec des conditions frontières de symétrie (en $y$ ) et de périodicité (en $x$ ) . . . . .	51
Figure 3.6	Transport du flux angulaire le long d'une ligne caractéristique traversant une région homogène . . . . .	54
Figure 3.7	Forme du maillage transverse traversant une région homogène . . . .	55
Figure 4.1	Illustration des géométries annulaires 3D disponibles dans DRAGON-5.	58
Figure 4.2	Illustration de la géométrie annulaire inclinée. . . . .	60
Figure 4.3	Séquences de compilation de CLE-2000. . . . .	61
Figure 4.4	Routines du module <b>GEO</b> (version 5 de DRAGON). . . . .	61
Figure 4.5	Géométrie 3D de la supercellule. . . . .	62
Figure 4.6	Projection du parallélépipède et du cylindre incliné sur le plan $y = y_c$ . .	63
Figure 4.7	Différentes formes d'intersection triangle et cylindre incliné. . . . .	65
Figure 4.8	Différentes formes d'intersection parallélépipède et cylindre incliné. .	66
Figure 4.9	Vue 2D dans le plan $y = y_c$ de la figure 4.7b. . . . .	67
Figure 4.10	Illustration 2D de la position des plans $y_-$ et $y_+$ par rapport au centre du cylindre incliné . . . . .	68
Figure 4.11	Illustration 2D de la position des plans $y_-$ et $y_+$ (lignes rouges). Premier cas. . . . .	70
Figure 4.12	Illustration 2D de position des plans $y_-$ et $y_+$ (lignes rouges). Deuxième cas. . . . .	70
Figure 4.13	Illustration 2D de sous-divisions cylindriques pour le calcul de volume d'un rectangle dans un cylindre. . . . .	71
Figure 4.14	Exemple de surfaces obtenues par l'intersection des plans $x_-$ , $x_+$ , $z_-$ et $z_+$ . . . . .	73
Figure 4.15	Angles $\theta_0$ , $\theta_1$ et $\theta_2$ du secteur elliptique tronqué $CDA\widehat{AC}$ . . . . .	74
Figure 4.16	Illustration des surfaces elliptiques partielles si aucun plan n'intersecte l'ellipse selon l'axe $y$ . . . . .	74
Figure 4.17	Surfaces elliptiques partielles si le plan $y_-$ (ligne rouge) intersecte l'ellipse. .	75
Figure 4.18	Illustration des surfaces elliptiques partielles si les plans $y_-$ et $y_+$ (lignes rouges) intersectent l'ellipse (cas 1). . . . .	76

Figure 4.19	Illustration des surfaces elliptiques partielles si les plans $y_-$ et $y_+$ (lignes rouges) intersectent l'ellipse (cas 2). . . . .	77
Figure 4.20	Numérotation des surfaces et volumes. Les flèches bleu, vert et rouge indiquent respectivement les axes $z$ , $y$ et $x$ . . . . .	80
Figure 4.21	Identification des arêtes sur le plan ( $xz$ ). . . . .	84
Figure 4.22	Exemple de rotation de l'univers 1. . . . .	85
Figure 4.23	Exemple de points d'intersection entre univers 0 et 1. . . . .	86
Figure 4.24	Grille des nœuds 2D illustrant les points d'intersection (rouge), points intermédiaires (verte) et points nuls (noir). . . . .	88
Figure 4.25	Matrice des identifiants XZMAT de la géométrie 4.23. . . . .	88
Figure 4.26	Organisation de six points entre deux niveaux qui forment deux triangles et un rectangle. . . . .	89
Figure 4.27	Illustration d'une ligne d'intégration (en bleu) et démonstration graphique du référentiel ( $O_C, x_2, y_2, z_2$ ). . . . .	92
Figure 4.28	Illustration de cylindres concentriques dans le plan ( $x_2 - y_2$ ). La ligne d'intégration n'intersecte que le cylindre vert. . . . .	93
Figure 5.1	Géométrie 2D de la cellule unitaire du réacteur SCWR-62. . . . .	97
Figure 5.2	Cartographie de flux pour deux groupes d'énergie dans la cellule 2D. . . . .	99
Figure 5.3	Illustration du modèle 3D de la supercellule SCWR-62. . . . .	101
Figure 5.4	Projection 2D de l'environnement CAR3D de la supercellule. . . . .	101
Figure 5.5	Illustration du modèle 3D de la stratégie de simulation proposée pour tenir compte de la distribution de températures non uniformes le long d'un canal. . . . .	103
Figure 5.6	Illustration de la variation du facteur de multiplication infini en fonction du cycle (200 cycles inactifs/2000 cycles actifs). . . . .	110
Figure 5.7	Illustration de l'univers 100 <sup>1</sup> . . . . .	111
Figure 5.8	Illustration de l'univers 14 (assemblage). . . . .	112
Figure 5.9	Effet de la variation de la population neutronique sur la précision de $k_\infty$ . . . . .	113
Figure 5.10	Discrétisation spatiale du modèle DONJON 3D du réacteur SCWR. . . . .	115
Figure 5.11	Illustration 2D de réflecteurs radial et axial du modèle DONJON du réacteur SCWR. . . . .	116
Figure 5.12	Modélisation géométrique de la position des supercellules homogènes d'une barre de contrôle inclinée passant entre les assemblages numéro K et L. . . . .	118
Figure 5.13	Modèle de rechargement du réacteur SCWR. . . . .	120
Figure 6.1	Illustration de cellule cartésienne contenant trois cylindres concentriques <sup>2</sup> . . . . .	130

Figure 6.2	Illustration de trois échantillons de lignes d'intégration dans le plan $y = y_c$ . . . . .	131
Figure 6.3	Illustration de trois échantillons de lignes d'intégration pour un cylindre incliné de $\theta = 35^\circ$ et de rayon $r = 5$ cm. . . . .	133
Figure 6.4	Visualisation des lignes d'intégration à l'aide du module TLM. . . . .	134
Figure 6.5	Distributions de puissance (tons de brun) et du flux thermique (tons de bleu) dans la supercellule en 3D produites par SERPENT. . . . .	141
Figure 6.6	Évaluation de la période de rechargement du cœur du réacteur SCWR. . . . .	143
Figure 6.7	Estimation de l'excès de réactivité de la période de rechargement du cœur. . . . .	143
Figure 6.8	Distributions radiales de flux rapide dans les cinq plans de combustible en fin du troisième cycle (les températures indiquées sont la température neutronique). . . . .	146
Figure 6.9	Distributions radiales de flux thermique dans les cinq plans de combustible en fin du troisième cycle (les températures indiquées sont la température neutronique). . . . .	147
Figure 6.10	Vue en coupe longitudinale du réacteur contenant une barre de contrôle (le réflecteur inférieur n'est pas illustré). . . . .	148
Figure 6.11	Sens d'insertion des barres de contrôle dans le cœur. . . . .	149
Figure 6.12	Illustration de la géométrie d'une barre de contrôle (les régions annulaires sont spécifiées dans le tableau 6.15). . . . .	150
Figure 6.13	Sections efficaces totales du cadmium naturel, du bore naturel et du hafnium naturel. . . . .	155
Figure 7.1	Illustration de la conception du réacteur canadien refroidi à l'eau supercritique avec barres de contrôle inclinées. . . . .	160
Figure A.1	Composantes du vecteur $\vec{\Omega}$ . . . . .	167
Figure C.1	Intersection de trois plans avec un cylindre. . . . .	170
Figure C.2	Positions du plan $y$ par rapport à l'axe $y = y_c$ . . . . .	171
Figure C.3	Projection sur le plan $x - z$ . . . . .	172
Figure D.1	Illustration du secteur elliptique tronqué $CDA - \widehat{AC}$ sur le plan $x - y$	174
Figure F.1	Illustration de la rotation du rectangle ( $ABCD$ ) dans le plan $(x - z)$	178

## LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

SCWR	Super Critical Water Reactor
GIF	Generation 4 International Forum
CANDU	CANada Deuterium Uranium
ENDF	Evaluated Nuclear Data File
IAEA	International Atomic Energy Agency
REP	Réacteur à Eau sous Pression
REB	Réacteur à Eau Bouillante
ÉACL	Énergie Atomique du Canada Limitée
HWR	Heavy Water Reactor
PHWR	Pressurized Heavy-Water Reactor

**LISTE DES ANNEXES**

Annexe A	Approximation $P_1$ . . . . .	166
Annexe B	Développement des sections efficaces de diffusion en polynômes de Legendre . . . . .	168
Annexe C	Calcul intégral du volume formé par l'intersection cylindre et trois plans	170
Annexe D	Calcul de la surface tronqué d'un secteur elliptique . . . . .	174
Annexe E	Histogramme des routines de calcul de volumes et surfaces ajoutées à NXT: . . . . .	176
Annexe F	Calcul de coordonnées de coins d'un rectangle tourné . . . . .	178

## CHAPITRE 1 INTRODUCTION

Des études démographiques estiment que la population mondiale augmentera de 6,7 milliards à environ 10 milliards d'individus à l'horizon de 2030. Cette augmentation progressive cause une croissance de la demande en énergie (Generation IV International Forum, 2016). Pour faire face à cette demande, à l'épuisement progressif des ressources fossiles et aux contraintes reliées à une réduction des émissions de gaz à effet de serre, plusieurs pays souhaitent développer l'énergie nucléaire. Il y a actuellement près de 438 réacteurs nucléaires électrogènes en service dans le monde qui assurent 11 % (376 GWe) de la production mondiale d'électricité (Samuel, 2011). Ainsi, l'Agence Internationale de l'Énergie Atomique (AIEA) prévoit dans les 50 prochaines années une augmentation de 20 à 80 % de la puissance nucléaire installée dans le monde (Commissariat à l'Énergie Atomique, 2010).

De ce fait, pour augmenter la production mondiale en énergie nucléaire, dix pays<sup>1</sup> ont mis sur pied un forum de coopération internationale de Recherche et de Développement (R&D) qui travaille à développer une nouvelle génération de réacteurs nucléaires connue sous le nom de réacteurs de 4<sup>e</sup> génération (U.S. Nuclear Energy Research Advisory Committee (NERAC) and the Generation IV International Forum (GIF), 2002). Les objectifs de ces réacteurs sont essentiellement de : (1) réduire la quantité de déchets radioactifs (2) assurer une sûreté accrue (3) mieux résister à la prolifération militaire (4) assurer une meilleure gestion des ressources et (5) être moins onéreux en coûts de construction et d'opération que les réacteurs actuels.

### 1.1 Réacteur de 4<sup>e</sup> génération canadien

Le réacteur SCWR, acronyme de «Super Critical Water Reactor», est un des six types de réacteurs choisis par le Forum International de la Génération IV (GIF) dans le cadre coopératif de la 4<sup>e</sup> génération (Pencer *et al.*, 2013). En se basant sur la conception mécanique des composants de maintien de la pression dans un réacteur, deux concepts de réacteurs SCWR sont proposés : réacteurs à cuve sous pression (voir figure 1.1) ou réacteurs à tubes de force (voir figure 1.2). Les modèles les plus courants de réacteurs à cuve sous pression sont les réacteurs à eau sous pression (REP) et le réacteur à eau bouillante (BWR). Dans ces modèles de réacteurs, le combustible est contenu dans un grand récipient sous pression où l'eau sert à la fois de modérateur et de caloporteur (Yetisir *et al.*, 2011). Dans la conception du réacteur à tubes de force, le combustible est emboîté dans des canaux très résistants aux

---

1. L'Argentine, le Brésil, le Canada, la France, le Japon, la République de Corée, la République d'Afrique du Sud, la Suisse, le Royaume-Uni et les États-Unis.

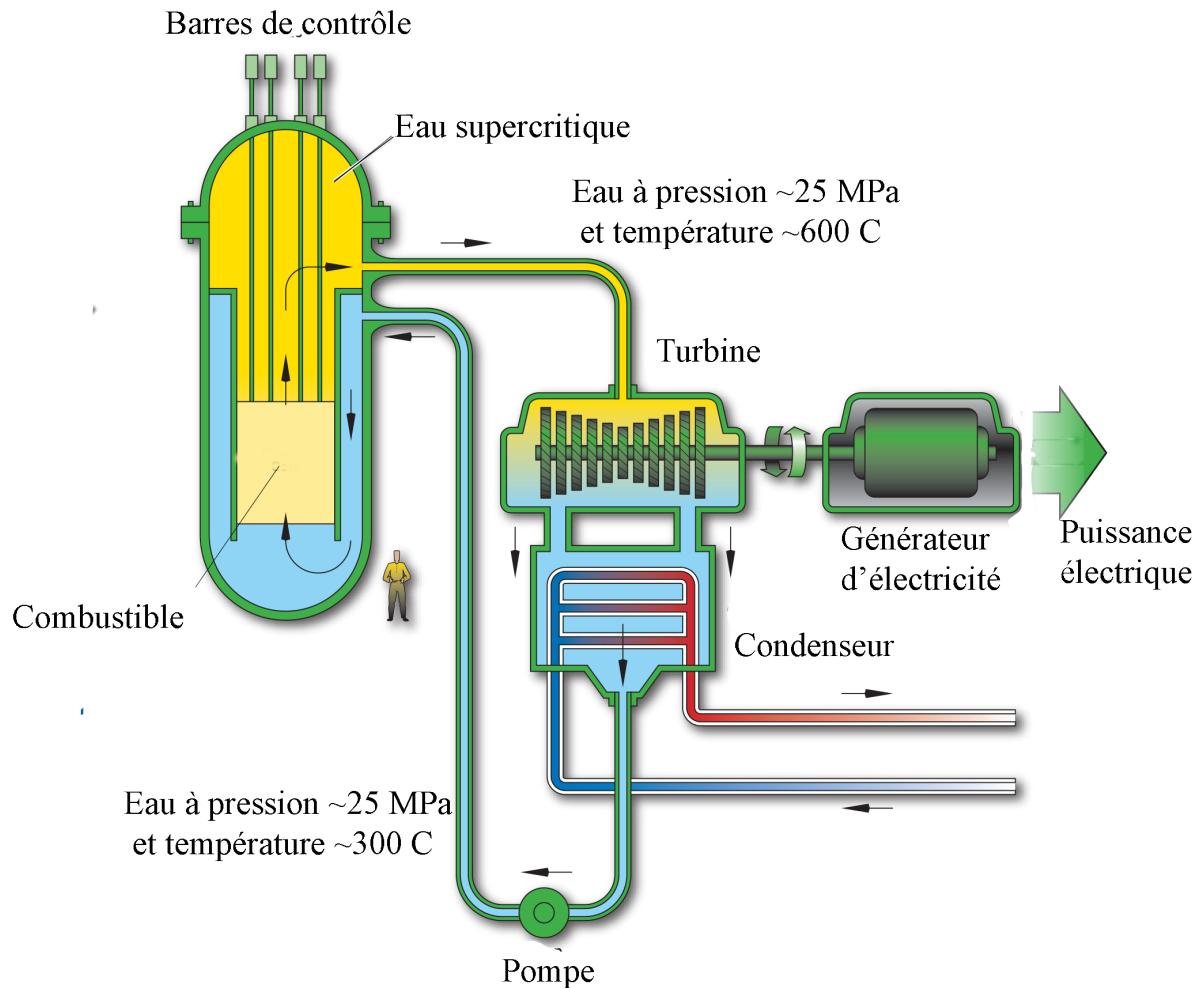


Figure 1.1 Aperçu du modèle à cuve sous pression du réacteur SCWR.

Source : Generation IV International Forum (2016).

hautes pressions. Le réacteur à tube de force le plus couramment utilisé dans les centrales électriques commerciales est le CANDU, dont les caractéristiques sont : le canal de combustible, un modérateur à l'eau lourde à basse pression, une calandre contenant le modérateur et les canaux de combustible et les tuyaux d'alimentation qui transportent le caloporteur dans et hors des canaux de combustible.

La version canadienne du réacteur à eau supercritique, est un réacteur vertical à tubes de forces, rechargé à l'arrêt (le chargement du combustible se fait à l'arrêt du réacteur) et à spectre thermique (voir tableau 1.1). Le caloporteur sous forme d'eau légère supercritique

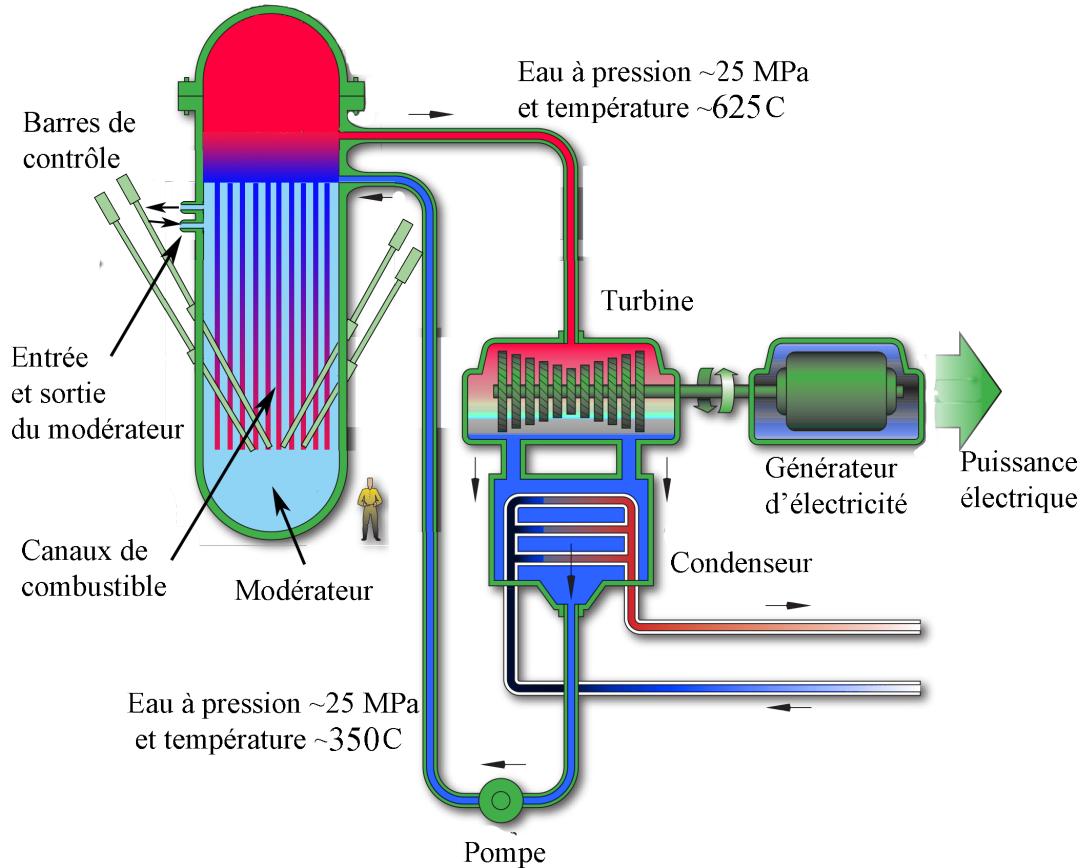


Figure 1.2 Aperçu du modèle à tubes de force du réacteur SCWR.

fait un aller-retour dans les tubes de forces, dans lesquels se trouve le combustible d'oxyde de thorium et de plutonium, avec une température d'entrée de 350 °C et une pression de 25 MPa et en sortie une température de 625 °C. L'ensemble des tubes de force baigne dans un modérateur composé d'eau lourde qui joue à la fois le rôle d'une barrière de protection contre le rayonnement et de modérateur des neutrons. Il est estimé qu'avec un caloporteur porté à une température supercritique le rendement du réacteur sera autour de 48 % comparativement à 33 % pour les réacteurs conventionnels (Leung *et al.*, 2011).

Actuellement, plusieurs détails de conception du réacteur SCWR sont en cours d'étude, incluant :

- le réglage spatial de la distribution de puissance ;
- le contrôle de la réactivité ;
- le démarrage et l'arrêt du réacteur d'une façon rapide et sécuritaire.

L'ajustement de l'absorption des neutrons dans le cœur devra être assuré par différents mécanismes de contrôle de la réactivité incluant :

Tableau 1.1 Spécifications du réacteur à eau supercritique canadien.

Paramètre	Spécifications
Spectre	Thermique
Type de réacteur	À tubes de force
Orientation du cœur	Verticale
Écoulement du caloporteur	Ré-entrant
Caloporteur	Eau légère
Modérateur	Eau lourde
Pression du caloporteur	25 MPa
Température d'entrée du caloporteur	350 °C
Température de sortie du caloporteur	625 °C
Puissance thermique	2540 MW
Efficacité thermique	48 %
Hauteur du cœur	5 m
Pas du réseau	25 cm
Nombre de crayons par grappe	62
Nombre de canaux	336
Composition du combustible	ThO <sub>2</sub> et PuO <sub>2</sub>
Taux de combustion moyen de sortie envisagée	47 GWJ/T
Rechargement	À l'arrêt

- des barres d'arrêt ou un système d'injection de poison liquide permettant d'effectuer une mise à l'arrêt rapide du réacteur en cas d'urgence ;
- des barres de commande servant à la conduite du réacteur.

Les mécanismes de réactivité des CANDU-6 sont normalement insérés verticalement par le haut dans le cœur (pour profiter de l'effet de la gravité), mais dans le cas du réacteur SCWR il sera difficile de les placer verticalement, car le système de tuyauterie occupe complètement la face supérieure du réacteur. Une autre option consiste à insérer les mécanismes de contrôle de réactivité par les côtés avec une inclinaison et une hauteur convenables leur permettant d'atteindre le combustible tout en profitant, au moins en partie, de la force gravitationnelle. Ce type de mécanismes de réactivité est déjà utilisé dans les réacteurs ATUCHA (I et II) en Argentine. Avec des angles d'insertion variant entre 17 et 25 degrés par rapport à la verticale, l'absorption des neutrons dans le réacteur ATUCHA est totalement contrôlée (Fait *et al.*, 2007).

## 1.2 Nécessité de l'étape de l'évaluation numérique

Pour obtenir l'autorisation de construire le réacteur SCWR, il doit être, entre autres choses, bien contrôlé et sécuritaire. Le processus habituel qui permet de valider le contrôle et la sûreté d'un réacteur est la simulation numérique couplée à des expériences en laboratoire. Deux différentes options de simulation des réacteurs peuvent être adoptées :

1. La méthode déterministe : elle consiste à résoudre l'équation de transport neutronique dans le réacteur pour estimer la variation de facteurs locaux ou globaux (taux de combustion massique, flux, réactivité, etc.) en fonction du changement des paramètres physique. Le code DRAGON-5 (Marleau *et al.*, 2013b) est un code déterministe qui permet cette résolution. Cependant, pour des simulations de grandes tailles, par exemple un réacteur complet, les méthodes utilisées dans DRAGON-5 demandent beaucoup de temps de calcul (ce temps dépend de l'utilisation des CPU disponible), donc on simplifie souvent l'équation de transport neutronique sous la forme d'une équation de diffusion neutronique. On utilise alors le code DONJON-3 (Varin *et al.*, 2005) pour résoudre cette dernière équation dans un temps raisonnable.
2. La méthode de simulation Monte Carlo : c'est une méthode stochastique qui consiste à déterminer les propriétés neutroniques du réacteur par le suivi de l'historique de déplacement des neutrons. Le problème majeur de cette méthode est qu'elle peut demander des temps de calcul considérables. Ces temps pouvant atteindre plusieurs jours si on simule un réacteur complet contenant un grand nombre de grappe de combustible. Le code SERPENT (Leppanen, 2013) est le code de simulation Monte Carlo, qui sera utilisé dans notre travail.

L'analyse des mécanismes de réactivité pour le contrôle du réacteur SCWR n'a pas encore été entreprise, et on se propose ici de simuler l'effet de mécanismes de contrôles inclinés dans ce type de réacteur. Pour ce faire, on utilise les codes DRAGON-5 (Marleau *et al.*, 2013c) et DONJON-3 pour les calculs déterministe et de diffusion, et le code SERPENT pour la vérification des résultats.

## 1.3 Objectif du projet de recherche

Les mécanismes de réactivité ont pour rôle de gérer la réaction en chaîne de fission se déroulant dans les réacteurs nucléaires afin d'éviter des dommages au combustible et à l'environnement. Étant donné que les technologies des mécanismes de contrôle de la réactivité de réacteurs CANDU et de réacteurs ATUCHA vont être combinées afin de proposer une façon fiable et sécuritaire de pilotage du réacteur SCWR canadien, la suite de cette section sera consacrée

à présenter les mécanismes de réactivité utilisés dans ces deux types de réacteurs.

### 1.3.1 Les dispositifs de réactivité de réacteurs CANDU-6

Le CANDU-6 est un réacteur de type HWR à tube de force, alimenté avec de l'uranium naturel. La cuve qui entoure le réacteur est un cylindre horizontal en acier inoxydable, contenant le modérateur-réflecteur de neutron. Sa cuve a 7,6 m de diamètre et 6 m de longueur (voir figure 1.3). Elle est traversée par 380 tubes de forces (appelé aussi canaux de combustible) parallèles à l'axe cylindrique et disposés selon un réseau cartésien (Rouben, 1984).

L'eau lourde servant de modérateur et de réflecteur pour les neutrons occupe l'espace entre les tubes de force. Elle est entièrement séparée mécaniquement et thermiquement du circuit du caloporteur. Cette séparation permet à la cuve elle même de ne pas être une enceinte sous pression. D'autres caractéristiques du CANDU-6 sont données dans le tableau 2.1.

Tableau 1.2 Caractéristiques du réacteur CANDU-6.

Paramètre	Spécifications
Type de réacteur	À tubes de force
Orientation du cœur	Horizontale
Écoulement du caloporteur	Bidirectionnel
Caloporteur/Modérateur	Eau lourde/Eau lourde
Pression du caloporteur entrée/sortie	11.3 MPa/10.0 MPa
Température du caloporteur entrée/sortie	266 °C/310 °C
Puissance thermique/rendement	2064 MW/29 %
Pas du réseau	28.575 cm
Nombre de crayons par grappe	37
Nombre de canaux	380
Longueur du cœur	5.94 m
Composition du combustible	UO <sub>2</sub> naturel
Longueur grappe	49.5 cm
Rechargement	En opération
Masse de combustible par grappe	21.3 kg

Dans ce réacteur il y a six types distincts de mécanismes de contrôle de la réactivité (voir tableau 1.3) : quatre servants à la régulation et deux servants à la sûreté. Les systèmes d'arrêt d'urgence (barres d'arrêt et les injecteurs) sont complètement indépendants l'un de l'autre, ainsi que du système de régulation. Une vue de la face supérieure du réacteur, montrée dans la figure 1.4, illustre quatre types de mécanismes de réactivité parmi les six disponibles.

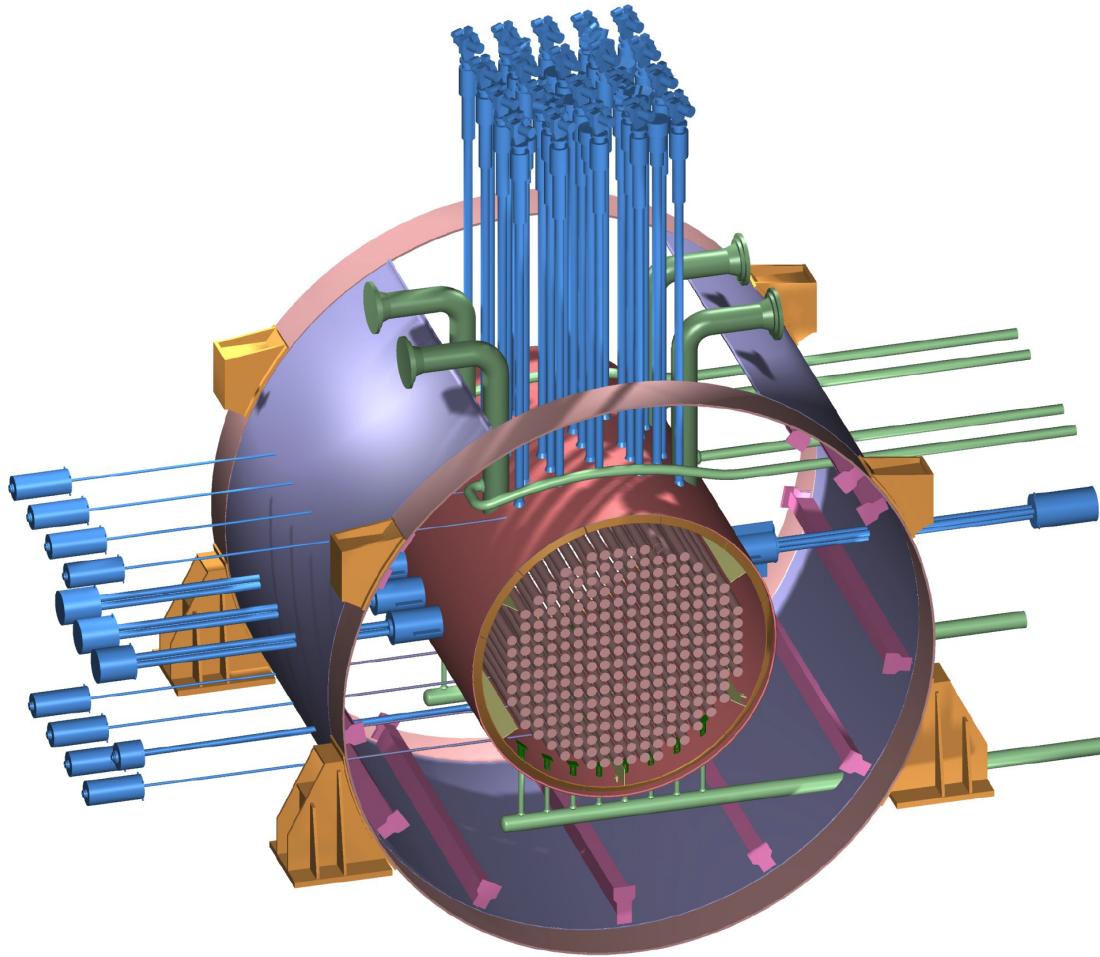


Figure 1.3 Structure du réacteur CANDU-6.

Source : Rouben (1984).

Tableau 1.3 Valeur en réactivité totale des mécanismes de réactivité.

Fonction	Mécanisme	Réactivité total (mk)	Composition
Contrôle	14 barres liquides	7	Eau légère et hélium
Contrôle	21 barres de compensation	15	Acier inoxydable
Contrôle	4 barres solides	10	Cadmium
Contrôle	Poison dans le modérateur	Selon l'injection	Nitrate de gadolinium
Sûreté	28 barres d'arrêt	-80	Cadmium
Sûreté	6 injecteurs de poison	-300	Nitrate de gadolinium

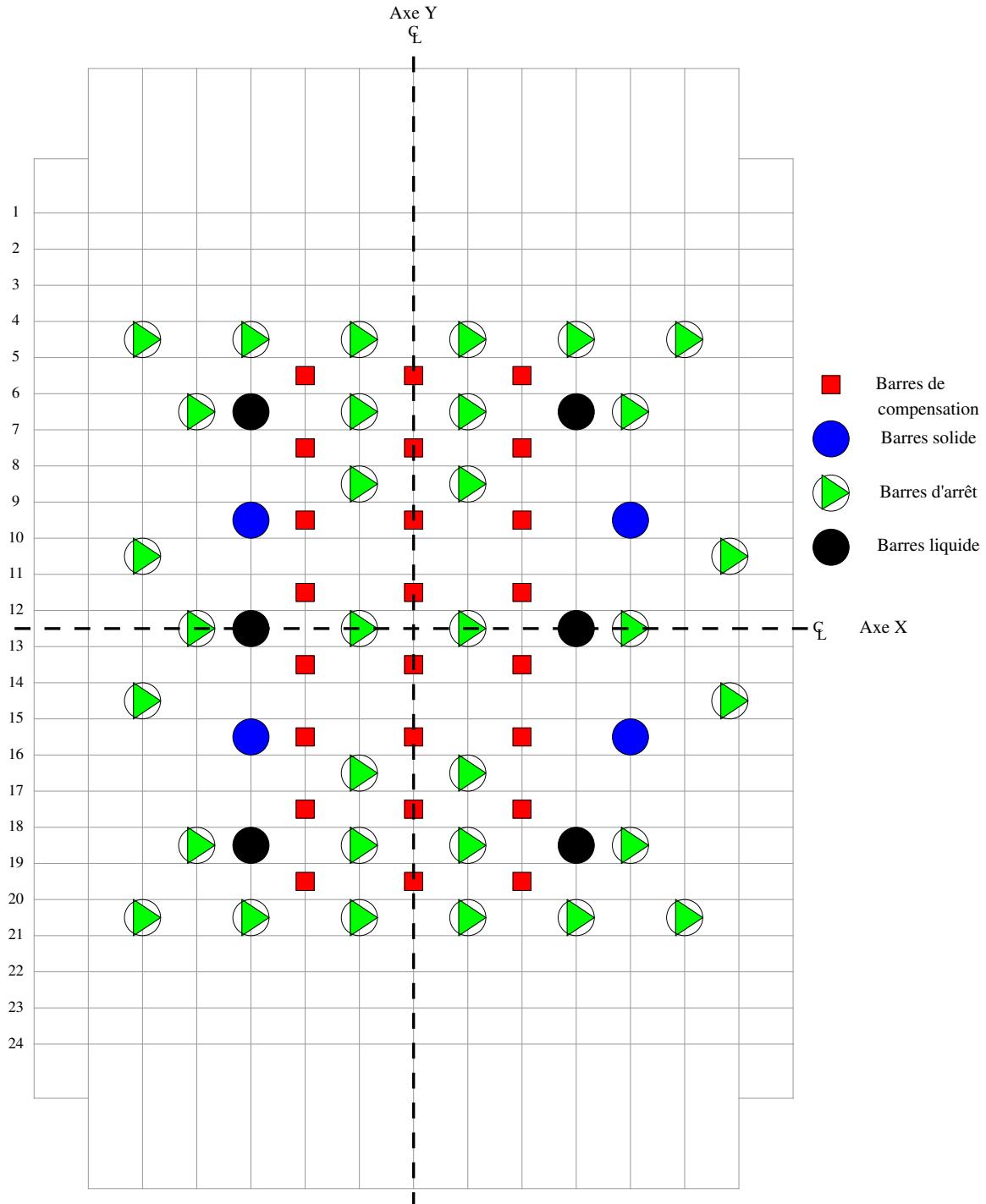


Figure 1.4 Vue de haut de mécanismes de réactivité du réacteur CANDU-6.

Pour le système de régulation, les quatre types de dispositifs de contrôle de la réactivité sont :

1. *14 compartiments de réglage à eau légère* : ils sont disposés en 6 barres liquides, chaque barre étant divisée en 2 compartiments sauf pour les deux à la mi-longueur du cœur qui sont divisés en 3 compartiments (voir les figures 1.4 et 1.5). Chaque compartiment contient un niveau d'eau légère ajustable au besoin et le reste est rempli d'hélium. Ces compartiments ont deux tâches principales : le réglage global continu de la réactivité et le réglage spatial de la distribution de puissance (Varin, 1995). Les 14 compartiments ont une valeur en réactivité totale d'environ -7 mk s'ils sont remplis à 100 % d'eau légère (Rouben, 1984).
2. *4 barres solides de réglage* : ce sont des barres verticales faites d'acier recouvert de cadmium de 5.4 m de longueur. Leurs insertions peuvent se faire à vitesse contrôlée ou elles peuvent être insérées sous l'effet de la gravité. Leur rôle consiste à réduire rapidement la puissance du cœur en cas de besoin. Leurs valeurs totales en réactivité, lorsqu'elles sont insérées 100% dans le cœur, est environ -10 mk.
3. *21 barres de compensation* : ce sont des barres verticales faites en acier. Elles sont disposées en trois rangées de sept barres chacune (voir la figure 1.4). Ces barres sont insérées dans le cœur en marche et retirées quand les circonstances demandent une insertion positive de réactivité plus grande que celle qui devient disponible en vidant les compartiments d'eau légère. Elles interviennent pour neutraliser la croissance de la réactivité négative due à l'augmentation du xénon-135 dans le cas d'arrêt du réacteur et dans le cas où la machine de recharge de combustible tombe en panne. La réserve en réactivité positive totale que peuvent assurer les 21 barres de compensations est d'environ 15 mk.
4. *Système d'addition lente de poison au modérateur* : ce sont des tubulures horizontales d'injection d'acide borique ou/et de nitrate de gadolinium dans le modérateur. Ces poisons sont injectés dans le modérateur pour compenser l'excès de la réactivité du combustible neuf et ils sont retirés au besoin à l'aide de colonnes d'échanges d'ions (Rouben, 1984). Au démarrage, le cœur du réacteur CANDU-6 doit être empoisonné par environ 1.6 ppm de bore naturel.

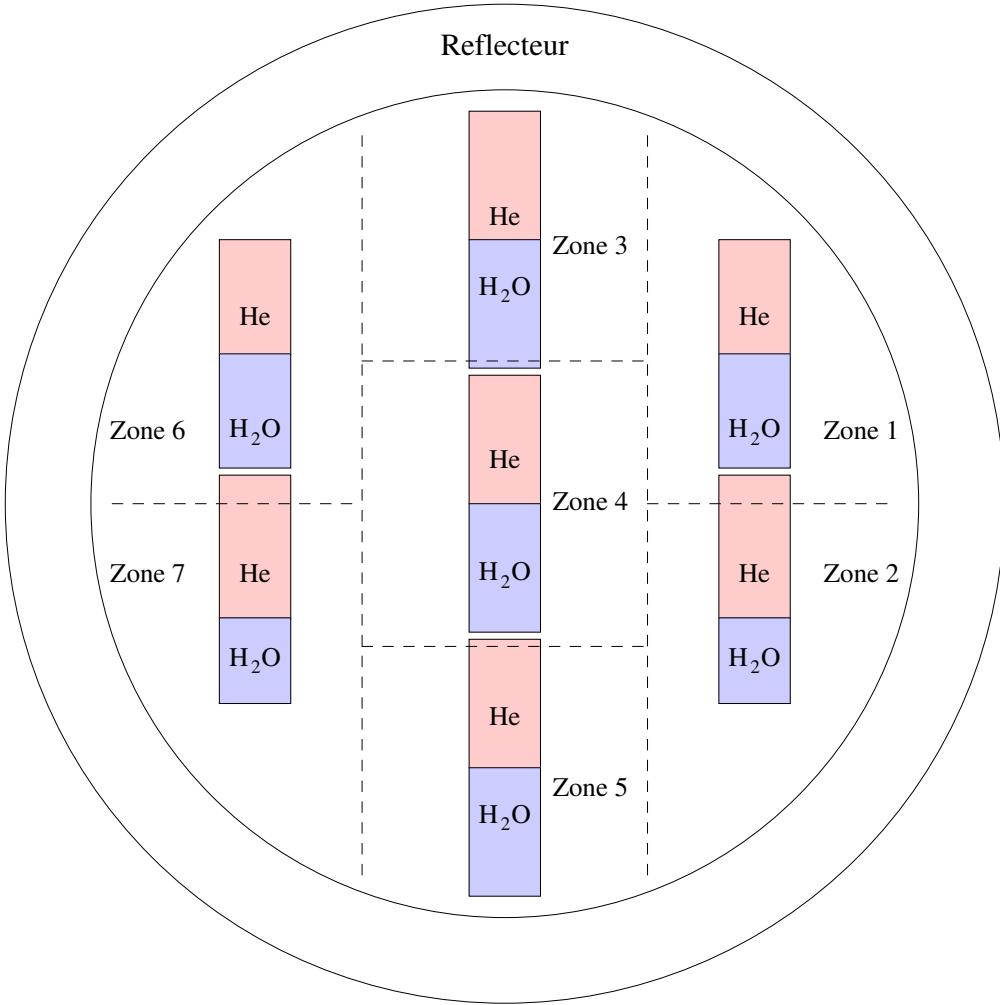


Figure 1.5 Vue de côté nord de sept compartiments de réglage à eau lourde liquide du réacteur CANDU-6.

Pour la sûreté, il existe deux systèmes d'arrêt d'urgence consistant respectivement de :

1. *28 barres d'arrêt au cadmium* : ce sont des barres verticales faites d'acier recouvert de cadmium semblables aux barres solides, mais indépendantes d'elles (voir les figure 1.4) nommées SAU#1. Lorsque le système d'urgence est actionné, ces barres tombent verticalement dans le réacteur sous l'effet de leur poids et par la poussée initiale des ressorts. Ces barres atteignent leur position finale dans le cœur en moins de 2 secondes pour mettre une fin rapide à toute excursion de puissance due à un accident quelconque. Leur valeur en réactivité est d'environ -80 mk.
2. *6 tubulures d'injection rapide de poison dans le modérateur* : c'est le système d'urgence numéro 2 (SAU#2), qui sera activé dans le cas où le système d'urgence 1 (SAU#1)

n'a pas assuré l'arrêt rapide du réacteur dans des cas d'accident. Chaque tubulure est reliée à un réservoir individuel contenant de nitrate de gadolinium à une concentration de 8000 ppm et à une pression de 7,6 MPa. Ce système à lui seul peut engendrer une réactivité négative de plus de -300 mk dans environ 6 secondes.

### 1.3.2 Les dispositifs de réactivité du réacteur ATUCHA-II

ATUCHA-II est un réacteur de type PHWR à cuve sous pression installé en Argentine, alimenté à l'uranium naturel. La cuve qui entoure le réacteur est un cylindre vertical contenant le modérateur-réflecteur de neutron sous forme d'eau lourde. Le caloporteur est séparé du modérateur par le canal de combustible et il circule à travers l'assemblage de combustible depuis la base jusqu'au sommet. Le cœur du réacteur est constitué de 451 assemblages de combustible situés dans des canaux de combustible. Les canaux sont disposés en un réseau hexagonal vertical avec un pas de 27,24 cm à l'intérieur de la cuve à eau lourde sous pression, qui a un rayon interne de 3,47 m (voir figure 1.6). La même cuve contient 18 tubes obliques de guidage de barres de contrôle, 4 déversoirs de modérateur et 4 tubulures d'injection rapide de poison dans le modérateur. Le cœur du réacteur a une hauteur de 5,307 m et il est entouré dans la partie supérieure par le réflecteur supérieur (0,344 m d'épaisseur) et dans le fond par le réflecteur inférieur (0,482 m d'épaisseur). Les principales caractéristiques du réacteur sont résumées dans le tableau 1.4 (Pecchia, 2012).

Le contrôle de la réactivité et la régulation de la distribution de puissance sont réalisés par neuf barres en hafnium (absorbeurs noirs) et neuf barres d'acier inoxydable (absorbeurs gris) disposées en cinq groupes :

- Trois groupes gris (G10, G20, G30) contenant chacun trois barres grises nommées respectivement G11, G12, G13, G21, G22, G23, G31, G32 et G33, qui sont utilisées pour le contrôle du réacteur.
- Un groupe noir (S10), dont les barres sont nommées S11, S12 et S13, contenant trois barres noires utilisées aussi pour contrôle du réacteur.
- Les six autres barres noires sont utilisées pour arrêter rapidement le réacteur en cas d'urgence.

Toutes les barres sont obliques avec une inclinaison comprise entre 17 et 25 degrés par rapport à la verticale (voir tableau 1.5), comme représenté sur la figure 1.7. Les barres de contrôle sont utilisées pour gérer la réactivité et la distribution de puissance, afin de compenser l'accumulation de l'empoisonnement xénon-135 à la suite d'une réduction de puissance du réacteur. En outre, la puissance peut également être contrôlée en faisant varier la température du modérateur par un circuit externe.

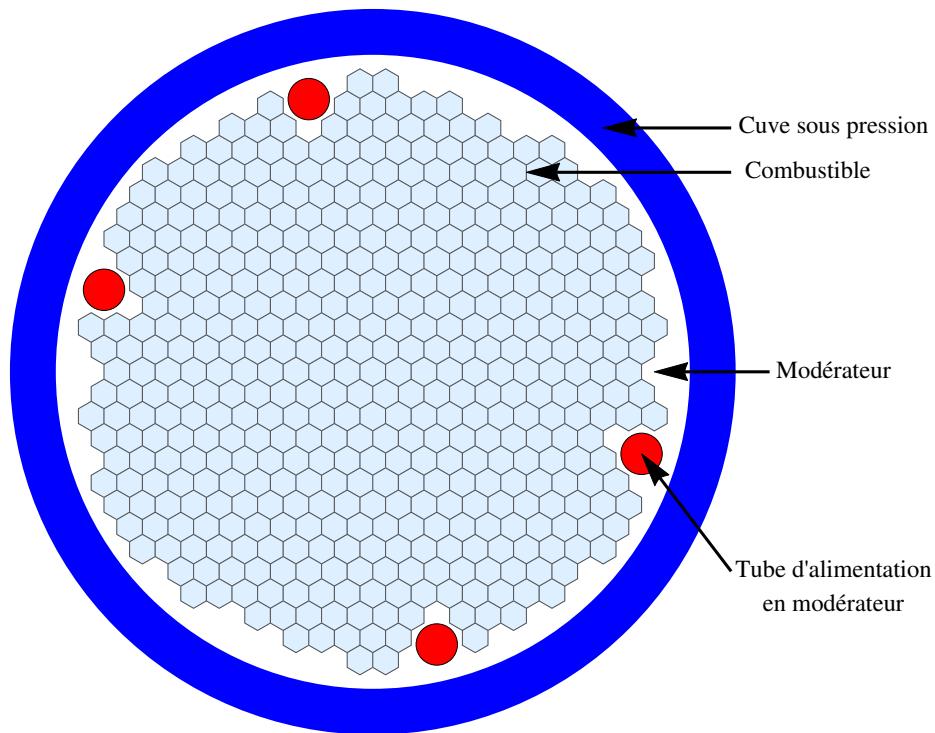


Figure 1.6 Structure 2D du cœur du réacteur ATUCHA-II.

Source : Mazzantini *et al.* (2011).

Tableau 1.4 Caractéristiques du réacteur ATUCHA-II.

Paramètre	Spécifications
Type de réacteur	À cuve sous pression
Orientation du cœur	Verticale
Écoulement du caloporteur	Unidirectionnel
Caloporteur/Modérateur	Eau lourde/Eau lourde
Puissance thermique/rendement	2160 MW/34.5 %
Type du réseau	Hexagonal
Pression du modérateur	11.5 MPa
Température du caloporteur entrée/sortie	34.4 °C/312.3 °C
Température du modérateur entrée/sortie	140 °C/194 °C
Pas du réseau	27.24 cm
Nombre de canaux	451
Hauteur du cœur	5.307 m
Composition du combustible	UO <sub>2</sub> naturel
Masse de combustible par grappe	189.11 kg

En plus des barres solides de contrôle de la réactivité un système d'addition lent de poison est utilisé pour injecter de l'acide borique dans le modérateur. L'injection ou l'extraction de l'acide borique sert à compenser les lentes changements de la réactivité en raison de la combustion au cours de la première période de fonctionnement et à maintenir le réacteur dans un état sous-critique à puissance nulle. Un deuxième système d'arrêt indépendant sous la forme de tubulures d'injection rapide de poison dans le modérateur est utilisé comme système d'urgence d'arrêt rapide du réacteur (Pecchia, 2012).

Tableau 1.5 Spécification des barres de contrôle du réacteur ATUCHA-II.

BC	Groupe de BC	X-	Y-	X+	Y+	Composition	Angle
1	Arrêt	-40.62	35.38	-223.34	35.38	Hf	19
2	G10	-126.65	-87.23	-223.22	80.03	Acier	20
3	G30	-15.44	-91.17	-139.16	123.12	Acier	25
4	Arrêt	-5.92	81.01	-87.04	221.51	Hf	17
5	G20	-173.09	6.79	-54.97	211.39	Acier	24
6	S10	-35.11	57.11	56.25	215.35	Hf	19
7	Arrêt	34.31	-11.33	136.15	165.07	Hf	21
8	G10	-12.22	153.30	180.92	153.3	Acier	20
9	G30	-71.23	58.96	176.21	58.96	Acier	25
10	Arrêt	73.12	-35.38	235.35	-35.38	Hf	17
11	G20	92.43	146.51	210.55	-58.09	Acier	24
12	S10	67.02	1.85	158.37	-156.39	Hf	19
13	Arrêt	-18.59	-38.55	77.97	-205.81	Hf	20
14	G10	147.25	-51.55	45.40	-227.96	Acier	21
15	G30	86.68	32.21	-37.04	-182.08	Acier	25
16	Arrêt	-42.68	-3.17	-139.25	-170.43	Hf	20
17	G20	12.22	-153.30	-180.92	-153.3	Acier	20
18	S10	67.02	1.85	158.37	-156.39	Hf	19

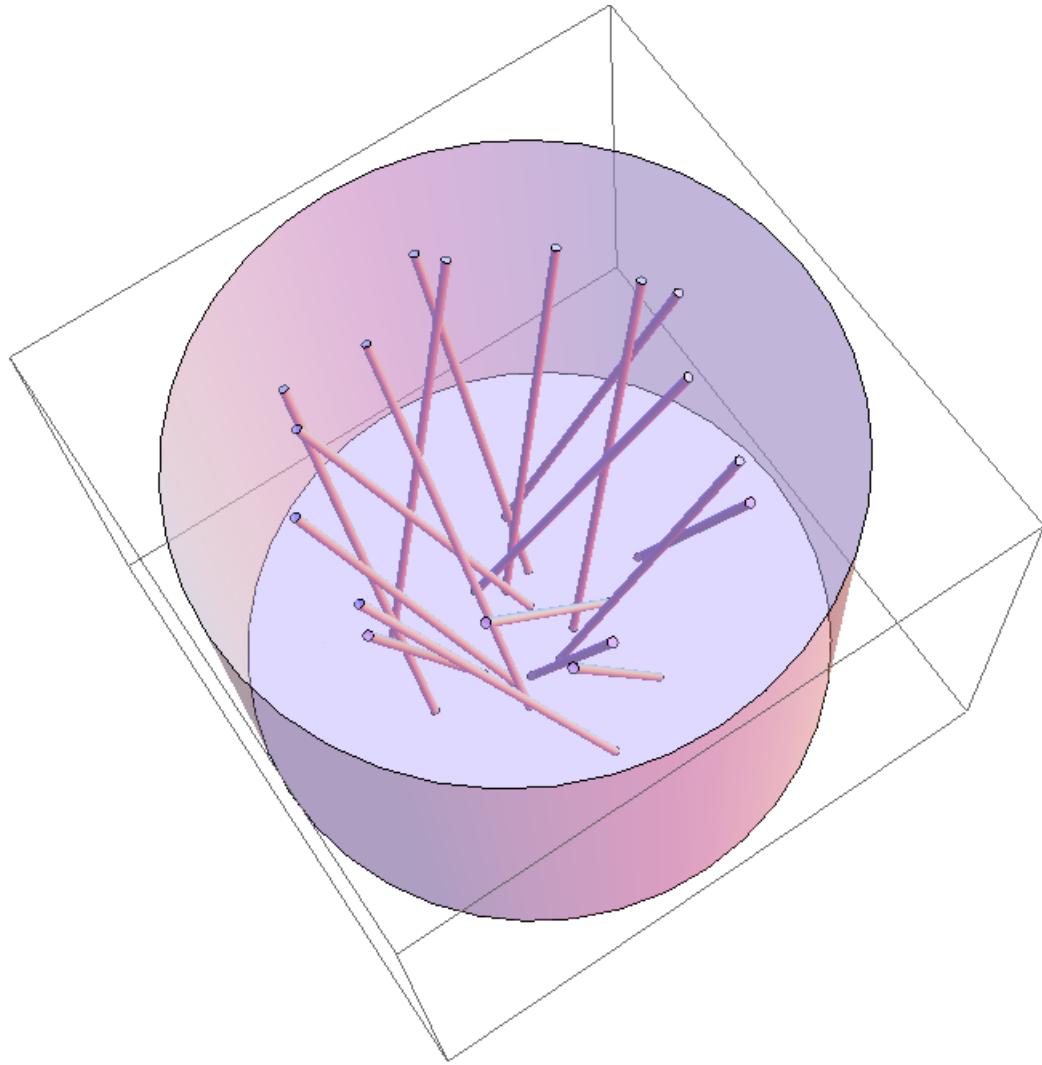


Figure 1.7 Illustration des barres de contrôle du réacteur ATUCHA-II.

Source : Mazzantini *et al.* (2011).

### 1.3.3 Proposition de dispositifs de réactivité pour les réacteurs SCWR-canadien

Le SCWR-canadien est similaire de par sa conception aux réacteurs CANDU-6, car il est modéré en utilisant l'eau lourde et ses grappes de combustible résident à l'intérieur d'un tube de force. Il partage également certaines caractéristiques des réacteurs à eau bouillante (BWR) ; par exemple, l'arrangement du cœur est vertical et la masse volumique du fluide de refroidissement présente une forte dépendance axiale. Le fluide de refroidissement (caloporateur) est de l'eau légère pressurisée à 25 MPa, avec une température d'entrée de 350 °C et une température de sortie allant jusqu'à 625 °C. Le plus récent concept proposé par Énergie Atomique du Canada Limitée (EACL) est la version avec canaux rentrants de combustible à

haut rendement (HERC), où le caloporteur à haute température circule d'abord vers le bas à travers un tube central dans le canal de combustible avant de le retraverser vers le haut pour refroidir le combustible disposé dans deux anneaux de 31 crayons (plus de détails sont présentés dans le chapitre 2).

Le réacteur SCWR-canadien est conçu pour opérer en cycles de combustion. Au début de chaque cycle (BOC) la réactivité excédentaire initiale estimée à plus de 110 mk, permet un fonctionnement à pleine puissance d'environ 400 jours cycle. Pour compenser cet excès de réactivité lors de l'opération, du bore soluble est injecté dans le modérateur et permet de contrôler précisément et de maintenir la criticité. Plus le temps passe, plus le combustible est irradié et en fin du cycle (EOC) la densité de bore dans la modérateur doit être réduite.

Un système de contrôle de la réactivité plus pratique combine l'empoisonnement lent du modérateur et l'insertion-extraction des barres de contrôle solides. Les barres de contrôle peuvent être utilisées pour compenser en partie l'excédent de réactivité au début de chaque cycle, pour ajuster la distribution de puissance du réacteur en fonctionnement normal, et aussi arrêter de façon sécuritaire le réacteur pendant les périodes de recharge du réacteur et les situations d'urgence.

Dans les systèmes CANDU-6, ces barres de contrôle sont verticales et peuvent se déplacer dans le cœur par gravité. Par contre dans le réacteur SCWR-canadien les tubes de pression sont verticaux, la partie supérieure du cœur est occupée par des collecteurs d'entrée et de sortie, et il serait pratiquement impossible d'insérer des barres de contrôle verticales dans le cœur à partir de la face supérieure. En outre, l'insertion de dispositifs de contrôle solides à partir de la face inférieure du réacteur, semblable à celles utilisées pour les BWR a été prise en considération, mais l'option a été rejetée parce qu'elle a été jugée peu pratique car elle augmente la taille du réacteur et on perd l'avantage d'insérer les barres par la force de gravitation.

L'alternative proposée dans cette thèse pour résoudre ce problème est un système analogue à celui utilisé pour le réacteur ATUCHA-II décrit dans le paragraphe précédent, où on peut bénéficier de la force gravitationnelle exercée sur les barres solides. Elle consiste à insérer des barres solides de contrôle de la réactivité en diagonale à partir de la face latérale du réacteur. Dans le réacteur ATUCHA-II les canaux sont disposés en un réseau hexagonal vertical avec un pas de 27,24 cm à l'intérieur de la cuve, tandis que dans le réacteur SCWR-canadien les canaux de combustible seront disposés sur un réseau cartésien vertical avec un pas de 25 cm. L'insertion des barres de contrôle diagonales à un grand avantage pour garder l'effet de la force gravitationnelle, mais la disposition en un réseau cartésien limite les degrés de liberté spatiaux d'insertion des barres solide dans le réacteur. Notre proposition d'insertion

des barres de contrôle est illustrée dans la figure 1.8. L'insertion sera permise seulement suivant les plan  $x$  et les plans  $y$ , et les angles d'insertions doivent éviter entre autres choses la collision de deux barres quelconques dans le cœur du réacteur.

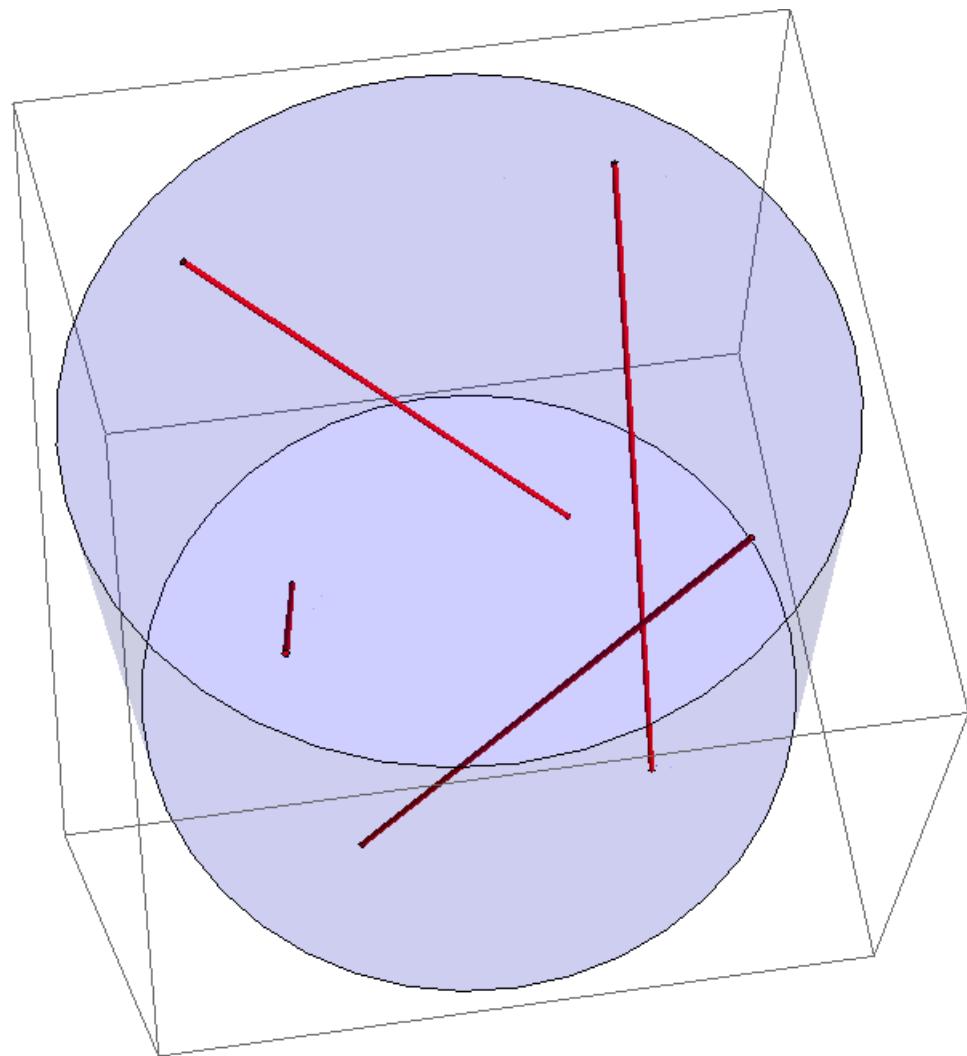


Figure 1.8 Illustration d'un exemple d'insertion de quatre barres de contrôle dans le réacteur SCWR-canadien.

## 1.4 Présentation des problématiques du projet

Dans ce projet on désire tester l'efficacité des barres de contrôle inclinées dans le réacteur canadien refroidi à l'eau légère à l'état supercritique. En pratique pour ce test, on génère les propriétés physiques homogènes des supercellules contenant des barres de contrôle inclinées par DRAGON-5 et ensuite on utilise DONJON-3 pour faire un calcul de diffusion du réacteur complet avec ses propriétés générées par DRAGON-5.

La méthode qu'on a choisie pour résoudre l'équation de transport neutronique, en utilisant DRAGON-5, est la méthode des probabilités des collisions (CP) (Hébert, 2009). Avant de calculer les matrices de probabilités des collisions, il est nécessaire de définir la géométrie du problème à traiter et de procéder au calcul des lignes d'intégration (Tracking), qui consiste à tracer des lignes droites (modélisant le parcours d'un neutron dans le réacteur) et chercher leurs points d'intersection avec toutes les surfaces de la géométrie. C'est en utilisant l'information générée par ce Tracking que nous pouvons ensuite intégrer les CP. Actuellement, le code DRAGON-5 n'est pas capable de modéliser des géométries inclinées. On propose ici de le modifier à cette fin.

### 1.4.1 Limitation géométrique du code DRAGON-5

Parmi les frontières possibles pour limiter une géométrie 3D dans DRAGON-5, la principale est l'environnement parallélépipédique CAR3D dont les côtés planaires sont perpendiculaires au vecteur unitaire  $(\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z)$  du repère  $(x, y, z)$ .

La nouvelle géométrie que l'on désire ajouter au code DRAGON-5 consiste à placer un cylindre incliné dans un CAR3D. Les composantes angulaires de l'axe de révolution du cylindre, comme la montre la figure 1.9, sont  $\theta$  et  $\varphi$ . Actuellement le code est programmé uniquement pour analyser des géométries ayant des cylindres dont l'axe est parallèle à  $\vec{e}_x$ ,  $\vec{e}_y$  ou  $\vec{e}_z$ .

1. Axe parallèle à  $\vec{e}_x$  :  $\theta = \frac{\pi}{2}$ ,  $\varphi = 0$  ;
2. Axe parallèle à  $\vec{e}_y$  :  $\theta = \frac{\pi}{2}$ ,  $\varphi = \frac{\pi}{2}$  ;
3. Axe parallèle à  $\vec{e}_z$  :  $\theta = 0$ .

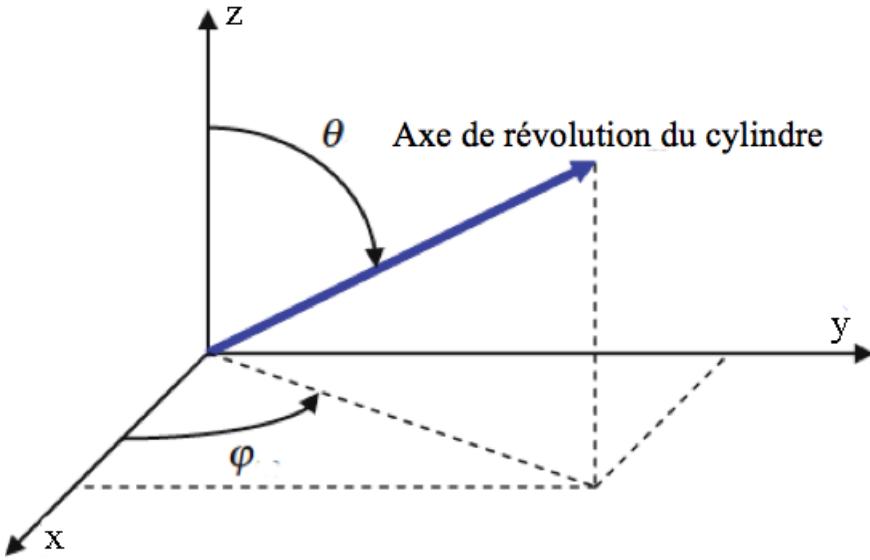


Figure 1.9 Composante angulaire du cylindre dans la base du CAR3D

La problématique à résoudre dans le code DRAGON-5 se résume donc dans les points suivants :

1. Le module **GEO** traite les données d'entrées en utilisant les mots clés définis dans le guide d'utilisation de DRAGON-5 (Marleau *et al.*, 2013b) pour générer une base de données qui définit la géométrie. Ces données seront ensuite utilisées par le module **NXT**. En revanche, la géométrie cylindrique inclinée ne correspond à aucun mot clé dans DRAGON-5.
2. Pour intégrer les probabilités des collisions, des structures de données générées par le module **NXT** doivent être transférées au module **ASM**. L'ensemble de données de l'analyse de la géométrie requise par le module **ASM** contient : la numérotation de régions et surfaces de la géométrie et leurs volumes et leurs aires. Une deuxième structure de données requise par le module **ASM** contient la localisation et les longueurs de segments d'intégration passant par chaque région. Mais le problème est que DRAGON-5 n'est pas capable de générer ces structures de données pour des géométries contenant des régions annulaires inclinées.

Le module **NXT** commence par analyser la géométrie fournie par le module **GEO**. Dans cette étape il doit générer une structure de données (de la géométrie) plus descriptive, dont la forme est définie dans le guide IGE232 de DRAGON-5 (Marleau *et al.*, 2013a). Pour assurer le bon fonctionnement du module **NXT** lorsque la géométrie contient des régions annulaires inclinées on doit ajouter modifications suivantes au module **NXT**.

1. Lire les données géométriques qui correspondent à une région annulaire inclinée.
2. Identifier et numérotter les régions et les surfaces externes. À ce point, le module NXT doit s'assurer de bien identifier les régions annulaires inclinées emboîtées par la géométrie parallélépipédique CAR3D et en omettant les régions externes (région rouge dans la figure 1.10).
3. Calculer les volumes de toutes les régions et les aires des surfaces externes.
4. Tracer les lignes d'intégration et calculer la longueur de chaque segment de droite dans chaque région. L'algorithme de traçage des lignes d'intégration doit être capable d'exclure les lignes se retrouvant à l'extérieur de la géométrie emboîtant la région annulaire inclinée (voir la figure 1.11).

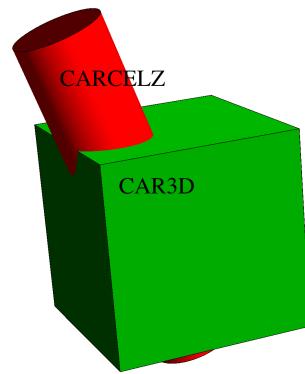


Figure 1.10 Illustration d'un CARCELZ incliné emboîté par un CAR3D.

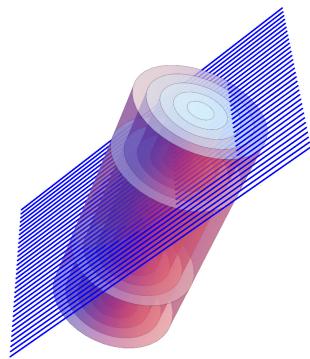


Figure 1.11 Intersection des lignes d'intégration avec les régions annulaires.

### 1.4.2 Contrainte de conception géométrique des mécanismes de contrôle

La conception géométrique du réacteur SCWR est inspirée de la technologie du réacteur CANDU-6. Cependant, contrairement au réacteur CANDU-6 ce réacteur possède une géométrie verticale avec des tubes de force. Les dimensions du tube de force et de la cellule sont différentes de celles du réacteur CANDU-6. En effet, comme le montre la figure 1.12 la cellule SCWR a un pas de réseau cartésien de 25 cm et le diamètre extérieur du tube de force est de 18.1 cm. Le diamètre externe des mécanismes dans le réacteur CANDU est de l'ordre de 11.3 cm, alors que l'espacement disponible entre les tubes de force du réacteur SCWR n'est que de 6.9 cm.

La conception des barres de contrôle de la réactivité doit répondre aux exigences suivantes :

- La composition isotopique des barres de contrôle de la réactivité doit être définie en prenant en compte l'effet d'autoprotection spatiale des matériaux composant ces barres solides avec les dimensions appropriées en tenant compte de la dimension du réseau des canaux de combustible.
- Déterminer les inclinaisons de barres de contrôle qui permettent d'assurer une grande efficacité d'absorption de neutrons.

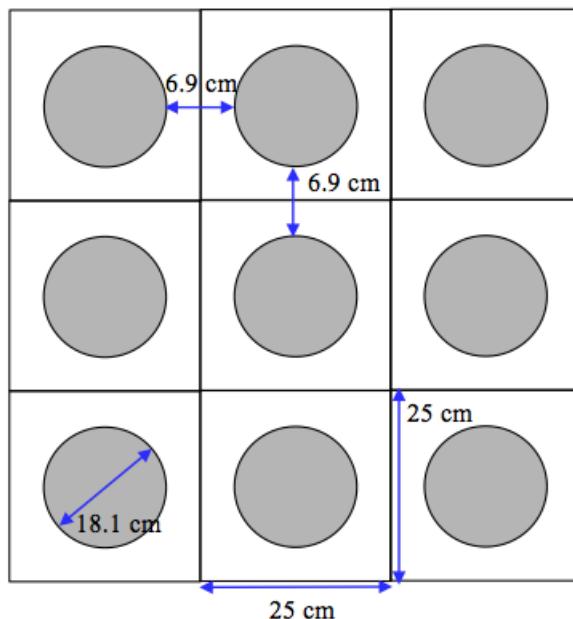


Figure 1.12 Schéma d'un assemblage 3×3 du réacteur SCWR.

## 1.5 Organisation du document

Ce document débute (chapitre 2) par la présentation du concept du réacteur canadien refroidi à l'eau à l'état supercritique et les notions théoriques de base de neutronique (chapitre 3) qui permettent de réaliser les simulations nécessaires pour résoudre les problématiques de cette thèse. Ensuite, il présente la partie développement du code DRAGON-5 (chapitre 4) et la partie application (chapitres 5 et 6). En effet la partie de développement consiste à implémenter la géométrie des cylindres inclinés dans le code DRAGON-5 à fin d'extraire, avec le moins possible d'erreurs, les sections efficaces perturbées par la présence d'une barre de contrôle dans une supercellule et l'utiliser dans un code de calcul de cœur pour évaluer l'effet global des barres de contrôle inclinées sur la distribution de la puissance et la réactivité du réacteur SCWR-canadien.

La partie application consiste à utiliser la nouvelle version du code DRAGON-5 pour extraire les bases de données de sections efficaces requises pour faire un calcul de diffusion en utilisant DONJON-3. Le déroulement de ces simulations est organisé de la façon suivante :

1. Générer la base de données de propriétés physiques homogènes de la cellule unitaire afin de l'utiliser dans le calcul de la supercellule et le calcul de diffusion sans barres de contrôle de la réactivité.
2. Simuler le réacteur au complet par DONJON-3 et tracer les cartes de flux radial dans plusieurs niveaux axiaux pour identifier les positions spatiales où le flux neutronique est maximal.
3. Estimer les angles d'insertion des barres de contrôle dans le cœur selon les positions de flux maximal identifiées dans l'étape précédente.
4. Simuler des supercellules avec des barres de contrôle inclinées selon les angles identifiées dans l'étape précédente et extraire les bases de données des sections efficaces homogénéisées sur la supercellule.
5. Simuler le réacteur complet en utilisant les basses de données de barres de contrôle générées par le modèle de la supercellule.

## CHAPITRE 2 TECHNOLOGIE DU RÉACTEUR SCWR-CANADIEN

Au cours des dernières années, plusieurs aspects de recherche et développement ont été étudiés pour assurer un fonctionnement sécuritaire du réacteur refroidi à l'eau supercritique (SCWR). Deux concepts majeurs sont généralement proposés. Le premier est un réacteur à cœur avec spectre neutronique thermique (Yamaji *et al.*, 2005) et le second à cœur avec spectre neutronique rapide (Yoo *et al.*, 2006).

Le réacteur refroidi à l'eau supercritique proposé par ÉACL est un réacteur à tube de force où le modérateur et le caloporteur sont séparés l'un de l'autre ce qui permet de bénéficier de la différence entre leurs propriétés neutronique (composition isotopique) et thermodynamique (pression et température) (Leung *et al.*, 2011). Ainsi, bien que la géométrie de ce réacteur soit inspirée du réacteur CANDU, le SCWR a aussi des caractéristiques qui s'approchent des REP et REB. En effet, ce réacteur fonctionnera avec un cycle direct comme pour le réacteur REB (on n'a pas besoin de boucle secondaire). Comme les réacteurs REP on n'a pas de problème de changement de phase car le caloporteur utilisé est monphasique (Tulkki, 2006).

### 2.1 Conception préliminaire du réacteur SCWR-canadien

L'évaluation d'un réacteur avec des canaux de type CANDU-6 (le caloporteur entre par le haut et sort par le bas) avec un couplage neutronique et thermohydraulique a montré que ce type de canal pose un problème majeur si la couche en céramique isolant le caloporteur du tube de force se brise (Chow et Khartabil, 2008). Afin de résoudre ce problème ÉACL est passé à un deuxième concept qui consiste à utiliser des canaux de combustible à haute efficacité où l'écoulement est ré-entrant (High Efficiency Reentrant Channel) (Chow et Khartabil, 2008).

#### 2.1.1 Vue d'ensemble du réacteur

La première proposition de l'ÉACL correspondait à un réacteur vertical composé de 336 canaux (figure 2.1). Ce réacteur utilise des tubes de force où l'eau supercritique entre par le sommet du canal de combustible à une pression égale à 25 MPa et à une température égale à 350°C et sort par le bas à une température égale à 625°C (figure 2.2). Cette eau supercritique passe ensuite directement dans la turbine (comme dans le cas du réacteur REB). Enfin, elle passe par le système de pompage qui la retourne dans le canal de combustible (voir la figure 1.1).

La température du caloporteur et la pression d'opération nominale du réacteur refroidi à

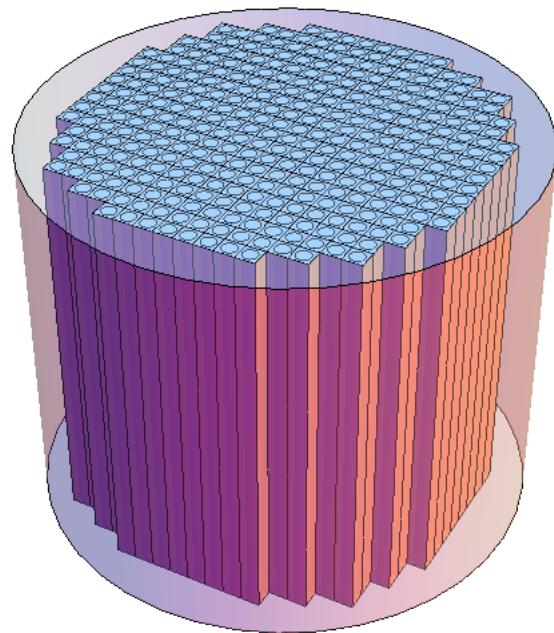


Figure 2.1 Arrangement du cœur du réacteur SCWR-Canadien.

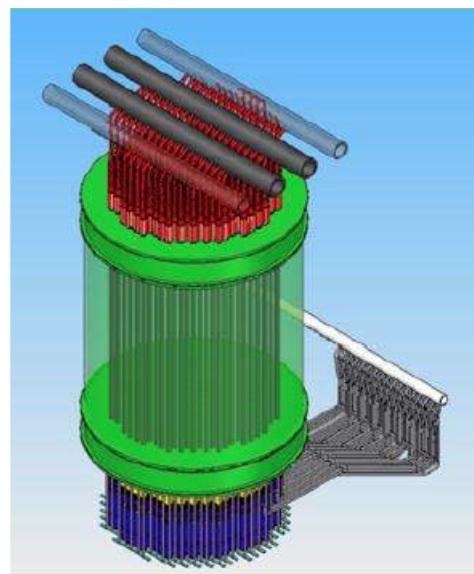


Figure 2.2 Schéma de la première proposition du réacteur SCWR-Canadien.

Source : Yetisir (2012).

l'eau supercritique, sont des paramètres très importants. Les études thermiques du tube de force montrent qu'il est indispensable de choisir entre deux nouveaux concepts différents de celui utilisé dans le réacteur CANDU. Le premier consiste à utiliser des tubes de force à haute efficacité thermique, et le second d'utiliser des tubes de force à écoulement ré-entrant.

Le tube de force à haute efficacité thermique à écoulement unidirectionnel (figure 2.3) est en contact direct avec le modérateur. La température du modérateur est de l'ordre de 80 °C alors que la température du caloporeur atteint 625 °C. C'est pour cette raison qu'un isolant en céramique est nécessaire pour assurer un faible transfert thermique du caloporeur vers le tube de force et le modérateur. Une chemise métallique perforée sépare le caloporeur et l'isolant pour protéger ce dernier lors de l'insertion des grappes de combustibles (Chow et Khartabil, 2008). Pourtant, ce concept n'est pas acceptable à cause des problèmes que pourrait causer la couche isolante de céramique si elle se brisait (Samuel, 2011). Par conséquent, une deuxième alternative pour résoudre ce problème consiste à utiliser le concept de tube de force à écoulement ré-entrant (figure 2.4) avec un isolant en céramique protégé par deux chemises métalliques perforées.

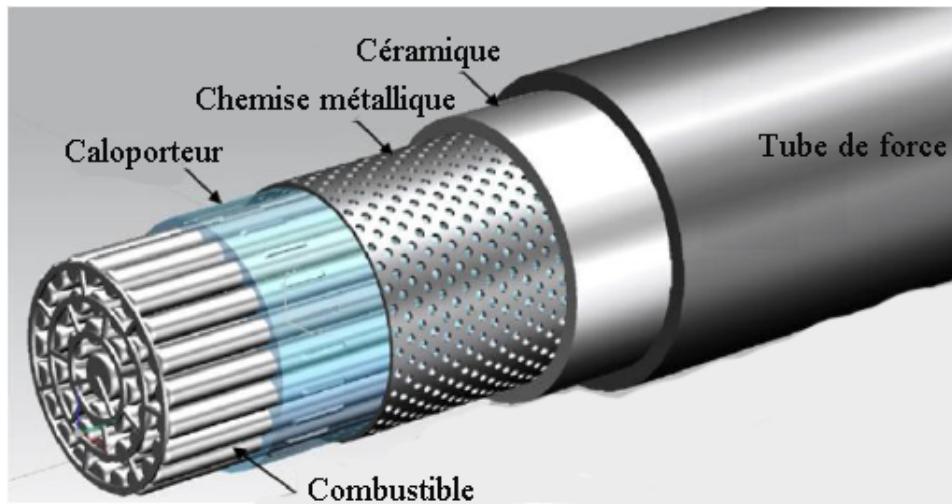


Figure 2.3 Tube de force à haute efficacité à écoulement unidirectionnel.

Source : Samuel (2011).

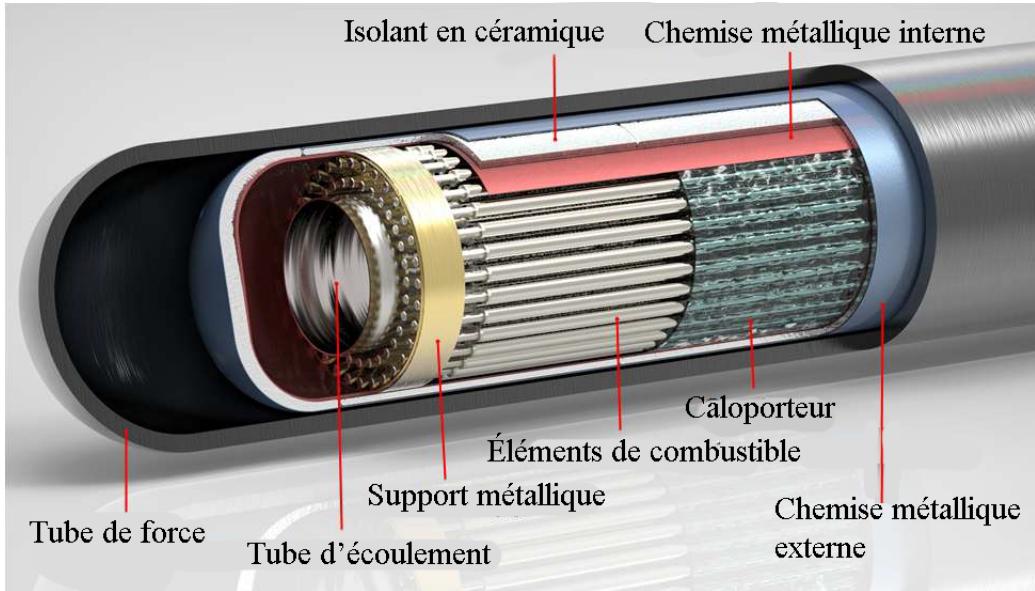


Figure 2.4 Tube de force à haute efficacité à écoulement ré-entrant.

Source : Thambiyah (2015).

### 2.1.2 Avantage de l'eau supercritique et son écoulement dans le canal

#### Propriétés thermophysique de l'eau supercritique

Le diagramme de phase de l'eau illustré dans la figure 2.5 montre que lorsque la pression de l'eau augmente la température d'ébullition s'élève. Ainsi, le long de la ligne de saturation la densité de l'eau diminue à la suite de l'augmentation de la température (voir la figure 2.8), ce qui cause l'augmentation de la densité du vapeur. Au-delà du point critique ( $T_{cr}=373.95^{\circ}\text{C}$ ,  $P_{cr}=22.064 \text{ MPa}$ ), la distinction entre les deux phases devient impossible et l'eau prend l'état supercritique.

Les figures 2.6, 2.7 et 2.8 illustrent respectivement les diagrammes isobares de variation d'enthalpie, de l'entropie et de la masse volumique en fonction de la température. Pour des points supercritiques (pression plus grande que la pression critique  $P_{cr}=22.064 \text{ MPa}$ ) le palier d'équilibre de phases disparaît. Dans cette condition, on n'a plus de changement de phase, mais l'eau prend un nouveau état caractérisée par une viscosité semblable à la viscosité de la vapeur et une densité similaire à celle de l'eau liquide (Samuel, 2011).

La figure 2.9 présente la variation de la chaleur massique à pression constante en fonction de la température pour la pression critique et des pressions supercritiques. La chaleur massique à pression constante présente au point critique un pic infini, alors que pour une pression au voisinage de la pression critique il présente un maximum local. L'eau à ces maximums locaux

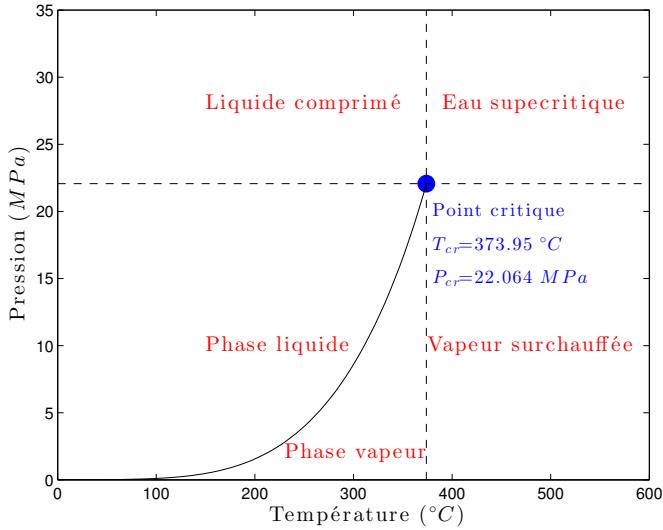


Figure 2.5 Diagramme de phase de l'eau.

est à un état appelé pseudocritique.

Pour des pressions supercritiques, les phases liquide et vapeur ne coexistent pas. Par conséquent, l'augmentation de la température à pression constante provoque simplement une variation continue de la masse volumique de l'eau supercritique. Donc, on n'aura pas de phénomène d'ébullition dans le canal de combustible, ce qui élimine les risques dus au flux de chaleur critique.

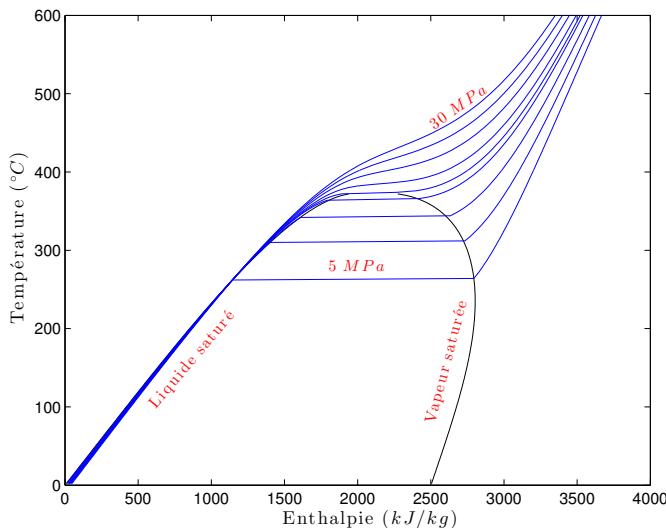


Figure 2.6 Diagramme des isobares de la variation de l'enthalpie de l'eau en fonction de la température.

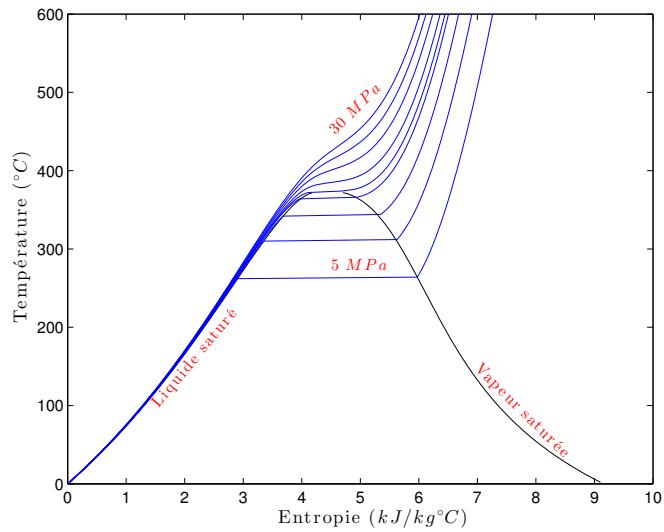


Figure 2.7 Diagramme des isobares de la variation de l'entropie de l'eau en fonction de la température.

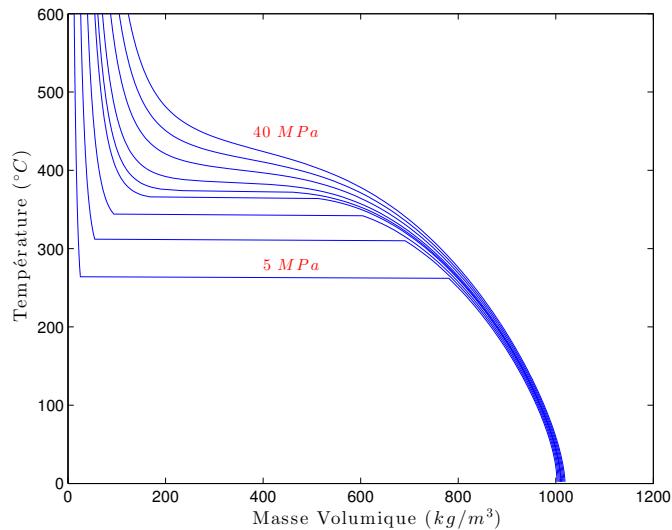


Figure 2.8 Diagramme des isobares de la variation de la masse volumique de l'eau en fonction de la température.

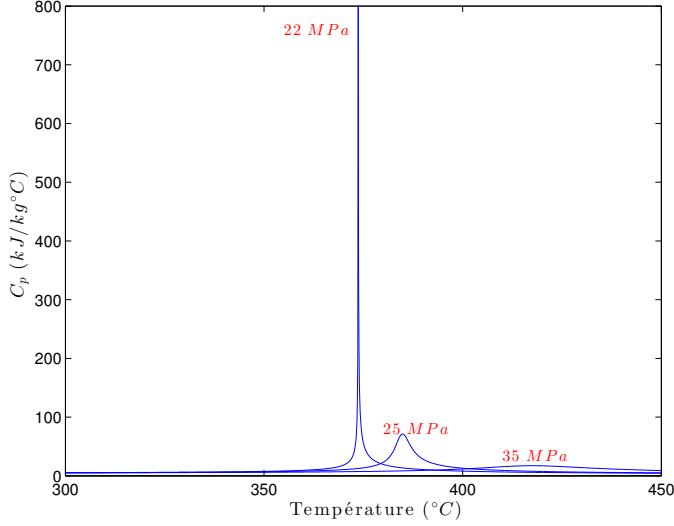


Figure 2.9 Diagramme des isobares de la variation de la chaleur massique de l'eau en fonction de la température.

### Écoulement le long du canal

La figure 2.10 illustre la géométrie d'un canal de haute efficacité à écoulement ré-entrant dont les détails géométriques sont présentés dans le tableau 2.1. Ce canal correspond à la proposition de l'ÉACL (Pencer *et al.*, 2013) qui est utilisée dans ce projet. Ce canal assure mieux la modération des neutrons à cause du caloporteur plus dense qui passe au centre de la grappe et fournit une distribution de puissance radiale équilibrée grâce au deux anneaux concentriques de combustible.

Le caloporteur circule dans un circuit ré-entrant. Il entre par la sommet du canal par deux orifices dirigés vers le centre du canal (figure 2.11) et il descend vers le bas du canal où il est redirigé vers la partie contenant les crayons de combustible où il est chauffé en remontant. Enfin, il sort à une température égale à 625°C par deux autres orifices en sommet du canal qui le dirigent vers la turbine.

## 2.2 Propriétés isotopiques du canal de combustible

Le choix des matériaux pour chaque élément du canal de combustible dépend de sa fonction. Le tube de force est le revêtement qui limite tous les autres composants du canal, par conséquent son matériau doit avoir une résistance élevée pour contenir l'eau supercritique à haute pression et température (voir figure 2.12). La couche isolante en céramique doit avoir une résistance thermique élevée et une excellente résistance à la corrosion. De plus, la che-

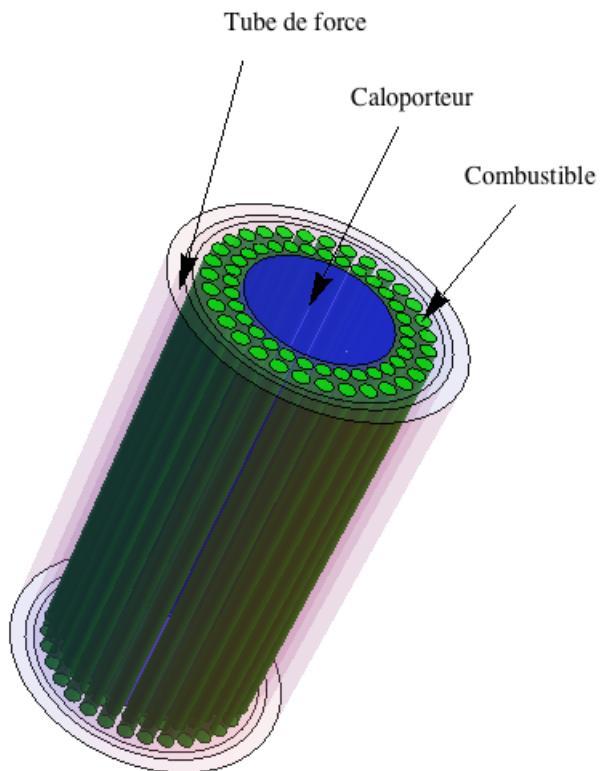


Figure 2.10 Illustration d'un canal de haute efficacité à écoulement ré-entrant de 62 éléments de combustible.

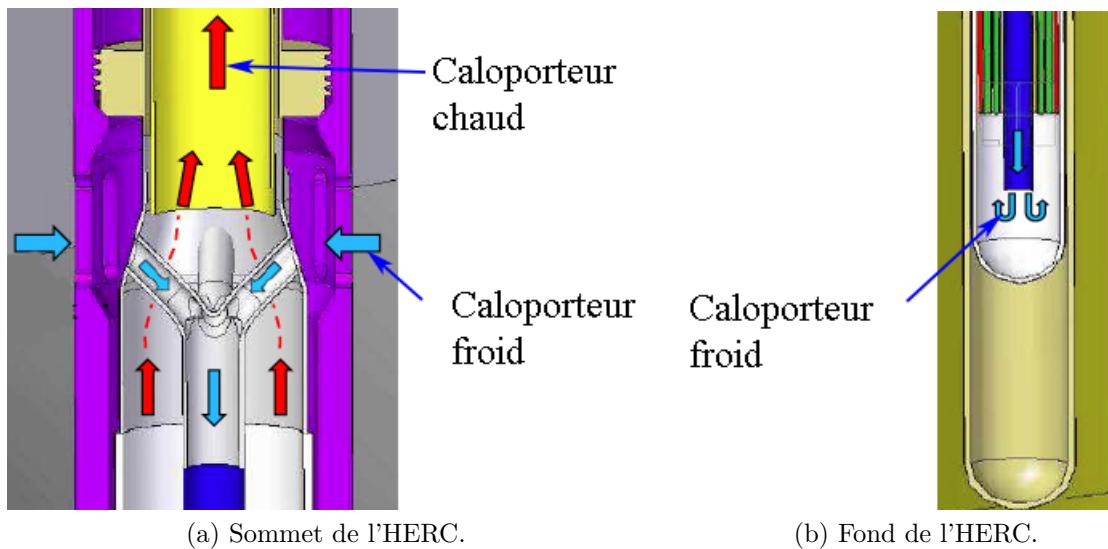


Figure 2.11 Illustration de l'écoulement du calopoteur dans un canal de haute efficacité à écoulement ré-entrant.

mise métallique perforée et les gaines de combustible doivent offrir une résistance élevée à la corrosion et à la température très élevée du caloporteur qui peut atteindre 625°C.

Une exigence commune à tous les composants du canal de haute efficacité (sauf le combustible) est qu'ils doivent être aussi transparents aux neutrons que possible. De plus, la déformation due à l'irradiation de l'ensemble de ses composants doit également être prise en compte lors de la conception (Chow et Khartabil, 2008).

### 2.2.1 Matériaux du combustible

L'ancien modèle d'un canal à écoulement simple, qui est décrit dans (Pencer *et al.*, 2013), utilise une grappe ayant 78 crayons de combustible organisés en trois anneaux autour d'un tube de zirconium (figure 2.12). Les 78 éléments sont composés de 13 wt% d'oxyde de plutonium ( $\text{PuO}_2$ ) et 87 wt% d'oxyde de thorium ( $\text{ThO}_2$ ). Cependant le modèle actuel adapté pour

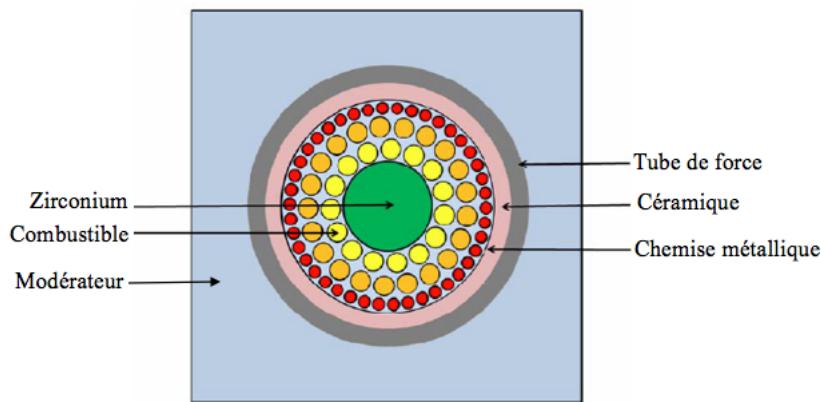


Figure 2.12 Canal du réacteur SCWR-canadien à 78 éléments de combustible et à écoulement simple.

le canal haut efficacité à écoulement ré-entrant est composé de deux anneaux de combustible entourant le tube d'écoulement du caloporteur (figure 2.10). Les 31 crayons intérieurs de rayon 0.415 cm sont composés de 15 wt% d'oxyde de plutonium ( $\text{PuO}_2$ ) et de 85 wt% d'oxyde de thorium ( $\text{ThO}_2$ ), tandis que les 31 crayons extérieurs ont un rayon de 0.465 cm et sont composés de 12 wt% d'oxyde de plutonium (voir tableau 2.1). Tous les éléments de combustible sont enveloppés dans une gaine d'acier inoxydable modifié au Zirconium 310 d'une épaisseur de 0.06 cm.

Tableau 2.1 Compositions isotopiques et dimensions géométriques du canal du SCWR-62.

Constituant	Dimension	Matériaux	Composition (wt%)	$\rho$ (g/cm <sup>3</sup> )
Caloporeur entrant	4.45 cm (rayon)	Eau légère	H <sub>2</sub> O : 100	variable
Tube d'écoulement	4.45 cm rayon intérieur (IR) 0.1 cm épaisseur	Acier inoxydable modifié au Zr 310 (ZR mod SS)	C : 0.034; Si : 0.51; Mn : 0.74; P : 0.016; S : 0.002; Ni : 20.82; Cr : 25.04; Fe : 51.738; Mo : 0.51; Zr : 0.59	7.90
Crayons intérieurs (31)	0.415 cm rayon 5.30 cm radial	15% PuO <sub>2</sub> et 85% ThO <sub>2</sub>	Pu : 13.23; Th : 74.70; O : 12.07	9.91
Crayons extérieurs (31)	0.465 cm rayon 6.55 cm radial	12% PuO <sub>2</sub> et 88% ThO <sub>2</sub>	Pu : 10.59; Th : 77.34; O : 12.08	9.87
Gaine	0.06 cm épaisseur	ZR mod SS	comme ci-dessus	7.90
Caloporeur sortant	n/a	Eau légère	H <sub>2</sub> O : 100	variable
Chemise métallique	7.20 cm 0.05 épaisseur	ZR mod SS	comme ci-dessus	7.90
Isolant céramique	7.25 cm 0.55 épaisseur	Oxyde de zirconium ZrO <sub>2</sub>	Zr : 66.63; Y : 7.87; O : 25.5	5.83
chemise métallique extérieure	7.80 cm 0.05 cm épaisseur	Excel (alliage de zirconium)	Sn : 3.5; Mo : 0.8; Nb : 0.8; Zr : 94.9	6.52
Tube de force	7.85 cm 1.2 cm épaisseur	Excel (alliage de zirconium)	Sn : 3.5; Mo : 0.8; Nb : 0.8; Zr : 94.9	6.52
Modérateur	25 cm côté du cellule carré	Eau lourde	D <sub>2</sub> O : 99.833; H <sub>2</sub> O : 0.167	1.0851

### **2.2.2 Propriétés du caloporteur et du modérateur**

L'utilité de choisir l'eau légère supercritique comme caloporteur dans le réacteur SCWR vient de la variation significative de ses propriétés thermophysiques surtout aux points critiques et pseudocritiques, ce qui influence d'une façon remarquable sa capacité de transfert de chaleur. De plus, ce choix fait en sorte d'éviter les phénomènes d'ébullition dans le canal de combustible, ce qui élimine les risques dus au flux de chaleur critique (Zoghlami, 2013). Le caloporteur parcourt le canal d'une longueur de 5 mètres à deux reprises. Durant ce parcours sa température augmente continuellement, ce qui cause une diminution continue de sa masse volumique. Cette variation est approximativement entre  $0.62547 \text{ g.cm}^{-3}$  à l'entrée ( $350^\circ\text{C}$ ) à une valeur inférieure à  $0.06758 \text{ g.cm}^{-3}$  à la sortie ( $625^\circ\text{C}$ ). Cette variation de la masse volumique engendre, à son tour, une variation importante dans les propriétés neutroniques et thermohydrauliques le long du canal.

Le modérateur est composé essentiellement d'eau lourde (99.833%) d'une masse volumique de  $1.0851 \text{ g.cm}^{-3}$ . En plus de son rôle de modération des neutrons entre les canaux, il est aussi utilisé comme réflecteur (50 cm d'épaisseur) en bas et en haut de l'assemblage (Pencer *et al.*, 2013; Ahmad *et al.*, 2014) et comme puits thermique pour absorber l'énergie résiduelle émise par le combustible lors d'accidents.

### **2.2.3 Propriétés du tube de force**

Le tube de force est le composant qui enveloppe le canal de combustible et qui assure une résistance à la grande pression du caloporteur due à son épaisseur de 1.2 cm. Il est en contact direct avec le modérateur ayant une température d'environ  $80^\circ\text{C}$ . Sa composition en alliage de zirconium, tel que donné dans le tableau 2.1, assure les caractéristiques primordiales suivantes (Chow et Khartabil, 2008) :

- Une grande résistance aux fortes pressions de caloporteur
- Un faible taux de corrosion
- Une très faible absorption de neutrons

### **2.2.4 Propriété de l'isolant céramique**

Le problème majeur rencontré avec le canal de haute efficacité à simple écoulement (HEC) est que lorsque la céramique se brise, il est difficile de la réparer ou de la remplacer. Si cela se produit, la barrière thermique entre le caloporteur et le modérateur est détruite résultant un gradient de température dans le tube de force qui peut entraîner l'hydratation (Samuel, 2011).

La proposition pour résoudre ce problème consiste à séparer l'isolant en céramique (oxyde de zirconium) du caloporeur avec une chemise métallique intérieure faite d'un mélange d'acier inoxydable modifié au Zr 310 (voir tableau 2.1). Ce concept élimine la possibilité d'avoir des particules de céramique dégradées dans le caloporeur et il est plus facile de l'entretenir en cas de besoin.

Cette chemise métallique intérieure nécessite une haute résistance à la corrosion vu la haute température de l'eau légère. Le matériau de cette chemise est donc identique au matériau du tube d'écoulement du fait qu'ils se retrouvent tous deux dans le même environnement. De plus, comme elle n'a pas à supporter de différence de pression importante, elle sera aussi mince que possible pour améliorer sa transparence aux neutrons (Chow et Khartabil, 2008).

### 2.3 Gestion du combustible

Le cœur du réacteur est alimenté par lots à l'aide de trois différents lots de combustibles (combustible neuf, combustible irradié une fois, combustible irradié deux fois). La figure 2.13 illustre les positions des trois lots dans un quart de cœur SCWR. Il est conçu pour générer 2540 MW de puissance thermique correspondant à une puissance électrique prévu d'environ 1200 MW (Pencer *et al.*, 2013). Le réacteur SCWR a un excédent de réactivité initiale, sans

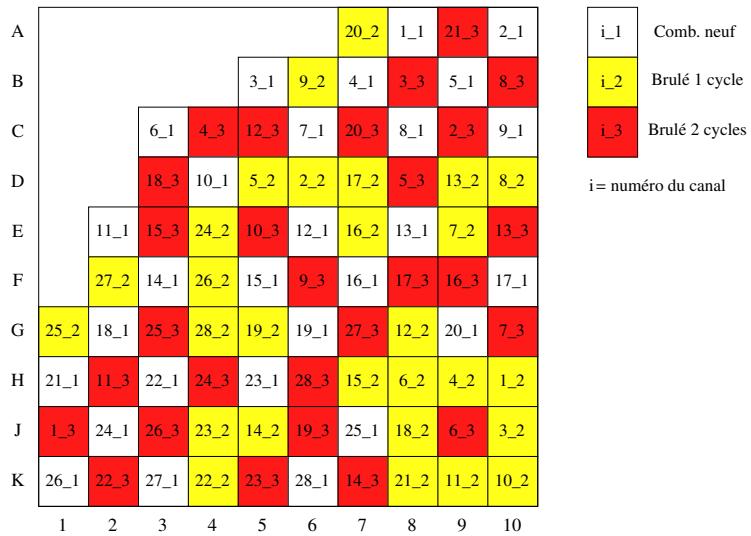


Figure 2.13 Cartographie du rechargement d'un quart du cœur SCWR-canadien.

ajustement de la réactivité, de l'ordre de 110 mk, ce qui permet un fonctionnement à pleine puissance pour des périodes d'environ 400 jours par cycle (Wang *et al.*, 2013).

## CHAPITRE 3 NEUTRONIQUE ET MÉTHODES DE RÉSOLUTION NUMÉRIQUE

La résolution analytique directe de l'équation du transport n'est en général pas possible. Même si les géométries sont très simples (ce qui n'est généralement pas le cas pour les réacteurs actuels), les variations des sections efficaces avec l'énergie rendent la solution analytique du problème impossible. Deux grandes approches sont généralement utilisées pour résoudre numériquement l'équation de Boltzmann : l'approche probabiliste et l'approche déterministe.

- Les méthodes probabilistes, dites de Monte-Carlo, présentent l'avantage de ne pas nécessiter de discréétisation de l'espace des phases. Elles permettent de traiter simplement le problème du transport sans introduire d'approximations. En revanche, ces méthodes sont fondées sur la simulation statistique des neutrons. L'obtention d'une grande précision dans les résultats est donc conditionnée par la simulation de très nombreuses trajectoires de neutrons, et donc un temps de calcul très élevé. Les résultats des calculs Monte Carlo sont généralement validés par comparaison avec des mesures expérimentales (Glassstone et Sesonske, 2004).
- Les méthodes déterministes sont en général plus rapides, ce qui justifie leur emploi fréquent par l'industrie du nucléaire. En revanche, elles nécessitent une discréétisation des variables énergétique, angulaire et spatiale, ce qui introduit des approximations dans la solution. Les méthodes déterministes sont donc validées par comparaison à des méthodes probabilistes ou des mesures physiques (Hébert, 2009).

Malgré les développements récents de ces deux approches, la simulation d'un réacteur en 3D est encore inabordable en théorie du transport. On est amené naturellement à considérer des méthodes de simulation simplifiées, ce qui consiste à remplacer dans la majorité des cas le transport par la diffusion neutronique. Dans ce contexte, on simule le réacteur en deux étapes suivantes (Marguet, 2011) :

- Tout d'abord un calcul de transport est réalisé sur un motif de référence qui représente la périodicité du réacteur, avec une discréétisation géométrique suffisamment fine pour bien représenter la physique locale ; on parle alors de calculs de cellules. Ces calculs sont aussi souvent appelés calcul hétérogène ou calcul d'assemblage, puisque l'assemblage est la plupart du temps le motif élémentaire d'un cœur. Il est généralement réalisé avec des conditions limites de réflexion pour simuler un milieu infini.
- On effectue ensuite un calcul à échelle plus grossière qui utilisera des constantes neutroniques homogénéisées générées dans l'étape précédente. C'est le calcul de cœur à proprement parler où chaque cellule (assemblage) du cœur est vue contenant un

matériaux homogènes.

### 3.1 Éléments de la physique des réacteurs

L'étude des réacteurs fait intervenir de nombreuses notions de physique nucléaire qui sont indispensables à une compréhension raisonnée des phénomènes. Nous allons décrire dans cette section les connaissances de base nécessaires au physicien des réacteurs (Marguet, 2011).

#### 3.1.1 Interaction neutron-noyau

C'est en 1932 que James Chadwick a interprété correctement l'expérience de bombardement des noyaux de beryllium par des particules  $\alpha$  (voir réaction 3.1) d'Irène et Frédéric Joliot-Curie et prouve l'existence du neutron après la démonstration théorique de son existence par Ernest Rutherford en 1920.



Le neutron est un nucléon qui ne possède aucune charge électrique, ce qui en fait une particule de choix comme projectile sur les noyaux. Il est stable lorsqu'il est lié à un noyau et radioactif  $\beta^-$  à l'état libre, il se désintègre en proton avec une période de 10.37 minutes selon l'équation :



Dans un réacteur nucléaire, les neutrons libres sont absorbés dans la matière en moins de  $10^{-3}$  secondes, de ce fait on ne parle pas d'instabilité du neutron lors de l'étude des réactions neutroniques dans un réacteur (Marguet, 2011; Reuss, 2012).

L'interaction du neutron avec le noyau se manifeste sous deux formes possibles ; une collision nucléaire ou une diffusion potentielle. Dans la diffusion potentielle, il n'y a pas mise en contact du neutron avec le noyau-cible, mais seulement diffusion par le champ nucléaire de l'onde associée au neutron. Par contre pour une collision nucléaire il y a pénétration du neutron dans le noyau. Le processus de cette collision se généralise en trois étapes :

- *Étape d'excitation* : Collision du neutron incident avec le noyau cible  ${}_Z^AX$ , ce qui produit un isotope de nombre de masse augmenté d'une unité et excité  ${}_Z^{A+1}X^*$ .



L'énergie d'excitation  $E_e$  du noyau composé est la somme de l'énergie de liaison du

neutron dans le noyau composé  $E_l$  et l'énergie cinétique du neutron incident  $E_c$  (Rozon, 1992).

$$E_e = E_c + E_l \quad (3.4)$$

- *Période de vie* : L'isotope ainsi composé, reste dans son état excité un laps de temps de l'ordre de  $10^{-13}$  à  $10^{-15}$  secondes après sa formation.
- *Étape de désexcitation* : Le noyau composé peut se désexciter selon l'une des voies résumées dans le tableau 3.1 pour migrer vers un état fondamental. Par exemple, pour un noyau fortement excité, un ou plusieurs nucléons peuvent être éjectés (un proton, un deuteron, une particule  $\alpha$ , etc.)

Le tableau 3.1 donne un résumé des principales interactions nucléaires possibles susceptibles de se produire sous l'effet d'un neutron.

Tableau 3.1 Principales réactions subies par les neutrons dans les réacteurs

Réaction	Détail de la réaction	Seuil de la réaction
<i>Interaction sans formation d'un noyau composé</i>		
Diffusion potentielle ( $n, n$ )	${}_0^1n + {}_Z^AX \rightarrow {}_0^1n + {}_Z^AX$	Toujours possible
<i>Interactions passant par la formation d'un noyau composé</i>		
Diffusion résonnante élastique ( $n, n$ )	${}_0^1n + {}_Z^AX \rightarrow {}_0^1n + {}_Z^AX$	Toujours possible
Diffusion résonnante inélastique ( $n, n'$ )	${}_0^1n + {}_Z^AX \rightarrow {}_0^1n + {}_Z^AX^*$ ${}_Z^AX^* \rightarrow {}_Z^AX + \gamma$	Seuil : premier niveau d'excitation
Réaction ( $n, 2n$ )	${}_0^1n + {}_Z^AX \rightarrow 2{}_0^1n + {}_Z^{A-1}X$	Seuil : énergie de séparation d'un neutron de ${}_Z^AX$
Capture radiative ( $n, \gamma$ )	${}_0^1n + {}_Z^AX \rightarrow \gamma + {}_Z^{A+1}X$	Toujours possible
Transmutation ( $n, p$ ) ( $n, \alpha$ )	${}_0^1n + {}_Z^AX \rightarrow p + {}_Z^AY$ ${}_0^1n + {}_Z^AX \rightarrow \alpha + {}_Z^AY$	Le plus souvent avec seuil
Fission ( $n, f$ )	${}_0^1n + {}_Z^AX \rightarrow {}_{Z_1}^{A_1}Y_1 + {}_{Z_2}^{A_2}Y_2$ $+ (\nu_p + \nu_d) {}_0^1n + \gamma_p + \gamma_d$ $+ y(\beta^- + \bar{\nu}_e)$	Noyaux lourds : sans seuil si $N$ impair, avec seuil si $N$ pair ; effet Tunnel. ( $N$ est le nombre de nucléons du noyau cible).

Dans le contexte de la fission on parle souvent pour les noyaux lourds d'un classement isotopique selon le seuil d'énergie de cette réaction, on trouve ainsi (Raouafi, 2012) :

- *Noyer fissile* : On dit qu'un noyau est fissile s'il peut subir une fission nucléaire avec des neutrons lents, dont l'énergie cinétique est très faible ; comme exemple les isotopes d'uranium  ${}^{233}U$  et  ${}^{235}U$ , et les isotopes de plutonium  ${}^{239}Pu$  et  ${}^{241}Pu$ .

- *Noyau fissible* : Un noyau est dit fissible s'il ne peut être fissionné que par des neutrons rapides :  $^{238}U$  et  $^{240}Pu$ .
- *Noyau fertile* : Ce type noyau est capable de produire un noyau fissile à la suite d'une capture neutronique d'énergie quelconque :  $^{238}U$  et  $^{232}Th$ .

### 3.1.2 Sections efficaces neutroniques

#### Notion de la section efficace

On définit la probabilité d'interaction des neutrons avec la matière sur le parcours  $dx$  par la grandeur sans dimension  $\Sigma dx$ , où le terme  $\Sigma$  est appelé section efficace macroscopique d'unité 1/cm.

Des études expérimentales ont montré que le taux de réactions nucléaire,  $\Gamma$ , (autrement dit le nombre de réactions par seconde) généré par le bombardement d'un bloc de matière par un faisceau de neutrons monoénergétique de vitesse  $\vec{v}$  (voir figure 3.1) est proportionnel au flux de neutrons  $\phi$ .

$$\Gamma = \sigma(E, \text{isotope})\phi N v \quad (3.5)$$

où  $v$  est le volume de la cible et  $N$  est son nombre d'isotopes par  $cm^3$ . Le terme  $\sigma(E, \text{isotope})$  est fonction de l'énergie cinétique du neutron incident et des propriétés nucléaires d'un unique noyau cible (Rozon, 1992), et appelé section efficace microscopique.

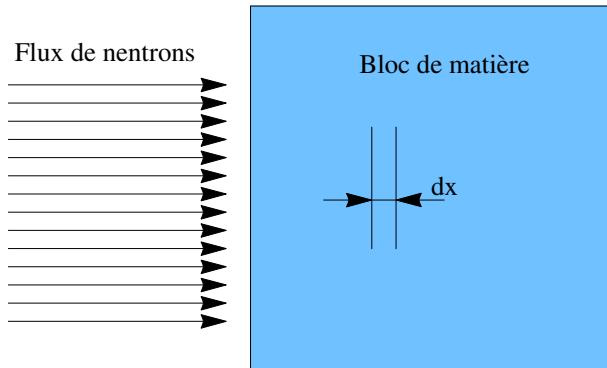


Figure 3.1 Illustration de l'interaction d'un flux de neutrons avec un bloc de matière

Dans le réacteur nucléaire, il se produit une grande variété d'interactions avec la matière, dont les principales sont données dans le tableau 3.1. On est ainsi amené à décrire chaque type d'interaction par une section efficace microscopique fonction du type d'interaction, de l'isotope et de l'énergie du neutron incident.

- La section efficace microscopique totale,  $\sigma_t$ , est la somme des sections efficaces microscopiques de diffusion,  $\sigma_s$  (“s” pour scattering en anglais), et d’absorption,  $\sigma_a$  :

$$\sigma_t = \sigma_s + \sigma_a \quad (3.6)$$

- La section efficace microscopique de diffusion comprend le terme de la diffusion élastique,  $\sigma_e$ , et la diffusion inélastique,  $\sigma_i$ .

$$\sigma_s = \sigma_e + \sigma_i \quad (3.7)$$

- La section efficace microscopique d’absorption comprend la fission,  $\sigma_f$ , et toutes les autres absorptions qualifiées de captures :

$$\sigma_a = \sigma_f + \sigma_c \quad (3.8)$$

En neutronique, on a pris l’habitude pour les milieux homogènes de travailler avec des sections efficaces macroscopiques au lieu de microscopiques. Ainsi, pour un milieu physique homogène contenant différents isotopes la section efficace macroscopique est donnée par :

$$\Sigma_r = \sum_i N_i \sigma_{r,i} \quad (3.9)$$

$$\Sigma_t = \sum_r \Sigma_r \quad (3.10)$$

où  $N_i$  est la densité de l’isotope  $i$  dans le milieu physique,  $\Sigma_r$  est la section efficace macroscopique de la réaction  $r$ ,  $\Sigma_t$  sont la section efficace macroscopique totale et  $r$  le type de réaction.

### Dépendance des sections efficaces en énergie

La dépendance des sections efficaces sur l’énergie du neutron incident diffère selon qu’il s’agit de diffusion ou d’absorption et selon les isotopes. La section efficace diminue quand la vitesse du neutron incident augmente (la matière serait plus transparente aux neutrons les plus rapides). Pourtant, à basse énergie, on constate des variations brusques de la section efficace en fonction de l’énergie, comme si des neutrons à une certaine énergie étaient capturés pratiquement systématiquement. On pourra observer un comportement général que l’on retrouve de façon plus ou moins systématique pour toutes les courbes de sections efficaces d’absorption (Hébert, 2009; Marguet, 2011; Reuss, 2012) :

- Dans le domaine à basse énergie, dit aussi domaine des neutrons thermiques (c’est-

à-dire en dessous de  $0.625 \text{ eV}$ ), les sections efficaces d'absorption (réactions  $(n, f)$ ,  $(n, \gamma)$ ,  $(n, p)$ , etc.) suivent une forme inversement proportionnelle à la vitesse (loi en  $1/v$ ) des neutrons incidents (voir figure 3.2).

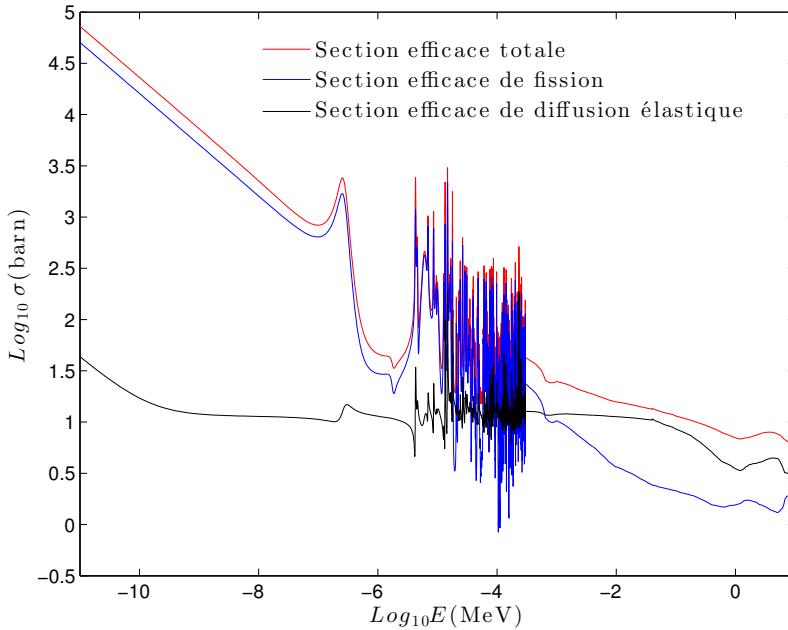


Figure 3.2 Sections efficaces totales, de diffusion et de fission sur le plutonium 241.

Source : Korea Atomic Energy Research Institute (2016).

- Dans le domaine à énergies moyennes, correspondant aux neutrons épithermiques (c'est-à-dire entre  $0.625 \text{ eV}$  et quelques  $\text{keV}$ ), les sections efficaces d'absorption présentent un comportement complexe avec une courbe possédant de nombreux pics ; ces pics sont appelés résonances de la section efficace (voir figure 3.2).
- Dans le domaine des hautes énergies, correspondant aux neutrons rapides (c'est-à-dire en dessus de  $1 \text{ keV}$ ), les sections efficaces sont généralement faibles. Elles décroissent en dessous de 10 barn avec l'augmentation d'énergies.

Contrairement au sections efficaces d'absorptions, les sections efficaces de diffusion ne respectent pas la loi en  $1/v$  dans le domaine thermique (voir figure 3.2), mais elles présentent en général une courbe constante de quelques barns. Ce comportement est expliqué tout simplement par l'effet de la diffusion potentielle. Dans le domaine épithermique ces sections efficaces peuvent aussi présenter des résonances, surtout pour les isotopes intermédiaires et lourds (Reuss, 2012).

## 3.2 Modélisation du transport neutronique

Afin de déterminer, entre autre, la distribution de puissance dans le cœur d'un réacteur nucléaire, la distribution des neutrons dans celui-ci doit être déterminée. Cette distribution peut théoriquement être obtenue en résolvant l'équation de transport neutronique pour le réacteur (Harrisson, 2015). Dans cette section on présente l'équation de Boltzmann qui décrit le transport des neutrons dans un réacteur nucléaire ainsi que les approximations utilisées dans les procédures de calcul numérique.

### 3.2.1 Le flux neutronique

Pour représenter de façon statistique la population de neutrons au temps  $t$  dans un réacteur, un espace à 6 dimensions, dans lequel les neutrons évoluent, doit être utilisé. Chaque neutron sera ainsi identifié par :

- sa position, décrite par le vecteur  $\vec{r}$ .
- sa vitesse, décrite par le vecteur  $\vec{v}_n$ . En général, on utilise sa direction de propagation dans l'espace  $\vec{\Omega} = \vec{v}_n/|v_n|$  et son énergie cinétique  $E = \frac{1}{2}m|v_n|^2$ .

La population de neutrons est représentée par une distribution, la densité  $n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$ , telle que  $n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)d^3rdEd^2\Omega$  est le nombre de neutrons au temps  $t$  dans un volume élémentaire  $d^3r$  autour du point  $\vec{r}$ , ayant une énergie  $E$  à  $dE$  près et ayant la direction  $\vec{\Omega}$  à l'angle solide  $d^2\Omega$  près. Cependant en physique du réacteur, la variable scalaire couramment utilisée est le flux neutronique angulaire  $\phi$  défini comme suit :

$$\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)v_n \quad (3.11)$$

Le courant de neutrons représente le vecteur flux neutronique selon la direction  $\vec{\Omega}$ . Ce vecteur est défini comme suit :

$$\vec{J}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = \vec{\Omega}\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) \quad (3.12)$$

### 3.2.2 Équation différentielle de Boltzmann

Pour simuler la population neutronique au sein du cœur, on doit définir l'équation de Boltzmann qui décrit le transport des neutrons dans le réacteur. Pour ce faire, des approximations doivent premièrement être considérées (Lewis et Miller, 1984; Hébert, 2009)

1. L'effet relativiste est négligé. En effet, selon la théorie de la relativité restreinte, l'énergie de masse ( $E$ ) d'une particule de masse au repos  $m_0$  animée d'une vitesse  $v$  et

d'énergie cinétique  $E_c$  s'écrit sous la forme :

$$E = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} + E_c \quad (3.13)$$

Pour une énergie de masse égale l'énergie de masse au repos du neutron ( $E = m_0 c^2 = 939.55 \text{ MeV}$ ), l'expression de la vitesse du neutron selon l'équation 3.13 s'écrit sous la forme :

$$v = c \sqrt{1 - \left( \frac{m_0 c^2}{m_0 c^2 + E_c} \right)^2} \quad (3.14)$$

L'énergie cinétique d'un neutron dans le réacteur est inférieure à 10 MeV, cette énergie cinétique correspond, selon l'équation 3.14 à une vitesse d'environ 0.1 c. Les effets relativistes se font sentir lorsque la vitesse d'un particule devient supérieure à 0.1 c.

2. L'interaction neutron-neutron est négligeable.
3. La trajectoire d'un neutron entre deux collisions est linéaire.
4. Le milieu est isotrope.
5. La distribution de vitesse des noyaux est donnée par la loi de Maxwell-Boltzmann.
6. L'interaction neutron-noyau est isotrope dans le référentiel du centre de masse. Cette approximation n'est pas valable pour des neutrons d'énergie supérieure à 1 MeV.

L'équation de transport qui résulte du bilan de la population neutronique dans l'hypervolume  $d^3r dE d^2\Omega$  autour de  $(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$  (espace de dimension 6) durant l'intervalle de temps  $\Delta t$  est :

$$\text{Variation du nombre de neutrons} = \text{neutrons créés} \quad (3.15)$$

- neutrons perdus par collisions
- neutrons sortants du volume de référence

- la variation de neutrons pendant  $\Delta t$  dans l'hypervolume  $d^3r dE d^2\Omega$  s'écrit :  $n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t + \Delta t) - n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$ .
- les neutrons créés (par fission, collision, ou autre) dans l'hypervolume  $d^3r dE d^2\Omega$  pendant  $\Delta t$  sont notés  $Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)\Delta t$ , où  $Q$  est la densité de source.
- les pertes de neutrons par collisions avec les noyaux pendant  $\Delta t$  prennent la forme :  $\Sigma(\vec{r}, E)\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)\Delta t$  avec  $\Sigma(\vec{r}, E)$  la section efficace macroscopique totale au point  $\vec{r}$ .
- les fuites de neutrons hors du volume  $d^3r$  sont données par la divergence du flux :  $\vec{\Omega}\vec{\nabla}\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$ .

En divisant l'équation résultante par  $\Delta t$  et en faisant tendre ce terme vers 0, nous obtenons la forme différentielle (locale) de l'équation de transport :

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)}{v_n} = Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) - \Sigma(\vec{r}, E)\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) - \vec{\Omega}\vec{\nabla}\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) \quad (3.16)$$

Si on considère un réacteur statique, l'équation 3.16 s'écrit sous la forme :

$$Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \Sigma(\vec{r}, E)\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \vec{\Omega}\vec{\nabla}\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \quad (3.17)$$

où la densité de sources stationnaire  $Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$  s'exprime en fonction du flux neutronique et des sections efficaces de diffusion et de fission sous la forme :

$$\begin{aligned} Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) &= \int_{4\pi} d^2\Omega' \int_0^\infty dE' \Sigma_s(\vec{r}, E \leftarrow E', \vec{\Omega} \leftarrow \vec{\Omega}') \phi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') \\ &+ \frac{1}{4\pi k_{eff}} \sum_{j=1}^J \chi_j(E) \int_0^\infty dE' \nu \Sigma_{f,j}(\vec{r}, E') \phi(\vec{r}, E') \end{aligned} \quad (3.18)$$

et  $\phi(\vec{r}, E')$  est le flux scalaire obtenu par l'expression :

$$\phi(\vec{r}, E') = \int_{4\pi} d^2\Omega \phi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}) \quad (3.19)$$

- le premier terme de l'équation 3.18 représente la source de diffusion. En effet il correspond aux collisions menant à la production de neutrons dans l'hyper-volume autour du point  $\vec{r}$ , à l'énergie  $E$  et dans la direction  $\vec{\Omega}$ ;
- le deuxième terme correspond à la somme des taux production de neutrons par fission des isotopes d'indices  $j = 1$  à  $j = J$  dont le spectre de fission est  $\chi_j$  (avec  $j \in [1, \dots, J]$ );
- $k_{eff}$  est le facteur de multiplication effectif. On utilise ce facteur pour conserver l'état d'équilibre stationnaire lorsque la somme des taux d'absorption et de fuite n'est pas égale au taux de production de neutrons par fission.

### 3.2.3 Forme intégrale de l'équation de Boltzmann

La forme intégrale de l'équation de transport consiste à intégrer le flux selon sa caractéristique de vecteur directeur  $\vec{\Omega}$ . La figure 3.3 illustre la caractéristique du flux entre deux positions de  $\vec{r}$  à  $\vec{r} + s\vec{\Omega}$ .

Le dérivé par rapport à la variable  $s$  s'écrit (Hébert, 2009) :

$$\frac{d}{ds} = \vec{\Omega}\vec{\nabla} \quad (3.20)$$

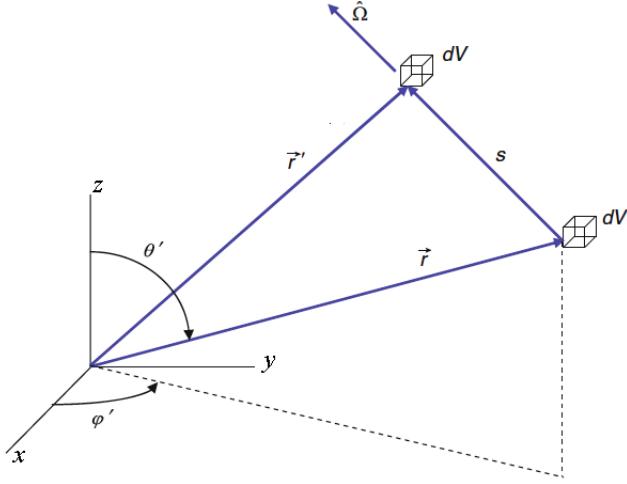


Figure 3.3 Déplacement de l'élément de volume  $d^3r$  dans l'espace.

Si on remplace l'équation 3.20 dans l'équation 3.17 on obtient la forme caractéristique de l'équation de transport :

$$\frac{d}{ds}\phi(\vec{r} + s\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}) + \Sigma(\vec{r} + s\vec{\Omega}, E)\phi(\vec{r} + s\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}) = Q(\vec{r} + s\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}) \quad (3.21)$$

On définit le chemin optique par :

$$\tau(s, E) = \int_0^s ds' \Sigma(\vec{r} + s'\vec{\Omega}, E) \quad (3.22)$$

Ensuite, on définit l'équation suivante :

$$g(s, E, \vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{d}{ds} \left[ e^{\tau(s, E)} \phi(\vec{r} + s\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}) \right] \quad (3.23)$$

Le développement de l'équation 3.23 donne :

$$g(s, E, \vec{r}, \vec{\Omega}) = e^{\tau(s, E)} \left[ \Sigma(\vec{r} + s\vec{\Omega}, E)\phi(\vec{r} + s\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}) + \frac{d}{ds}\phi(\vec{r} + s\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}) \right] \quad (3.24)$$

L'insertion de l'équation 3.24 dans l'équation 3.21 donne :

$$\frac{d}{ds} \left[ e^{\tau(s, E)} \phi(\vec{r} + s\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}) \right] = e^{\tau(s, E)} Q(\vec{r} + s\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}) \quad (3.25)$$

L'intégration de l'équation 3.25 le long de la caractéristique de 0 à  $-\infty$  donne la forme

intégrale de l'équation de transport de :

$$\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \int_{-\infty}^0 ds e^{\tau(s, E)} Q(\vec{r} + s\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}) \quad (3.26)$$

### 3.2.4 Les conditions frontières

Pour calculer le flux neutronique, il est nécessaire d'avoir, en plus de l'équation de transport, des conditions aux frontières. On introduit  $\vec{N}(\vec{r}_s)$  la normale unitaire sortante à la surface de contrôle  $\partial V$  au point  $\vec{r}_s \in \partial V$ . Suivant la nature du problème modélisé, les conditions aux limites peuvent être de deux types (Marleau, 2001; Hébert, 2009).

1. Condition frontière d'*albédo* : c'est une condition utilisée pour relier le flux de neutrons sortant au flux de neutrons entrant par un coefficient dit d'*albédo* (voir figure 3.4). Cette condition s'exprime sous la forme :

$$\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \beta_s \phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}') \quad \text{avec} \quad \vec{\Omega} \cdot \vec{N}(\vec{r}_s) < 0 \quad (3.27)$$

selon la valeur du  $\beta_s$  on distingue :

- $\beta_s = 0$  : représente une condition de vide, où aucun neutron ne revient vers le volume  $V$  ;
- $\beta_s = 1$  : représente une condition de réflexion totale ;
- des valeurs intermédiaires de  $\beta_s$  sont aussi utilisées pour une réflexion partielle sur les surfaces ;
- condition frontière blanche (isotrope) : cette condition correspond au cas où les neutrons sortant du volume  $V$  y retournent avec une distribution angulaire isotrope (voir figure 3.4). On a alors :

$$\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \frac{\beta}{\pi} \int_{\vec{\Omega}' \cdot \vec{N}(\vec{r}_s) > 0} d^2\Omega' [\vec{\Omega}' \cdot \vec{N}(\vec{r}_s)] \phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}') \quad (3.28)$$

2. Condition frontière périodique : cette condition correspond au cas où les neutrons sortant de la surface  $S_+$  entrent par la surface parallèle  $S_-$  (voir figure 3.4). Le flux entrant s'exprime comme suit :

$$\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \phi(\vec{r} + \Delta\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \quad (3.29)$$

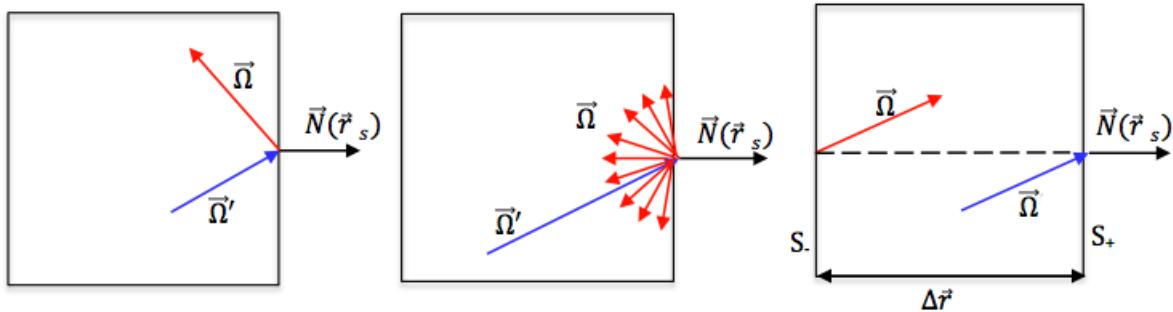


Figure 3.4 Condition aux frontières de réflexion miroir (gauche), de réflexion isotrope (centre) et périodique (droite).

### 3.3 Modélisation de la diffusion neutronique

L'équation de Boltzmann est une équation qui représente le comportement du flux neutronique dans un réacteur nucléaire. Dans la plupart des cas, la simulation des géométries complexes ou de grandes tailles cause des problèmes au niveau temps de calcul d'une part (plusieurs mois de temps de calcul) et au niveau de la nécessité d'une machine d'énorme mémoire vive et grande capacité de stockage. C'est pourquoi on s'est très rapidement intéressé à une approximation de l'équation de Boltzmann : l'équation de diffusion, dont le comportement numérique a été étudié depuis longtemps dans les domaines de la thermique ou de la diffusion chimique. L'équation de diffusion repose sur la loi de Fick, qui stipule que les neutrons diffusent des régions de haute densité vers les régions de basse densité, tout comme les molécules d'un gaz vont diffuser pour réduire les variations spatiales de la concentration (Rozon, 1992; Marguet, 2011).

#### 3.3.1 La loi de Fick

C'est en 1851 que Adolph Eugen Fick a postulé intuitivement pour la première fois que les molécules dans une solution aqueuse diffusent des régions de haute densité vers des régions de basse densité pour réduire la variation spatiale de la concentration. Cette loi postule alors une relation entre le flux de concentration chimique et son gradient spatial dans une solution aqueuse. Ce n'est que 50 ans plus tard qu'Albert Einstein la démontrera correctement par ses travaux sur le mouvement Brownien (Marguet, 2011).

Analytiquement cette loi relie de façon linéaire une grandeur physique vectorielle et la dérivé d'une autre scalaire. Appliquée à la neutronique, cette relation entre le courant (équation 3.12) et le flux neutronique (équation 3.11) est identique à celle que l'on connaît dans l'équation de diffusion de gaz d'un milieu de haute densité à un autre de faible densité. Cette relation

s'écrit avec un coefficient de proportionnalité appelé coefficient de diffusion  $D$  :

$$\vec{J}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = -D(\vec{r}, E) \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) \quad (3.30)$$

Le signe négatif dans cette expression exprime le fait que le courant de neutrons se déplace dans le sens opposé au gradient du flux neutronique (Rozon, 1992; Glasstone et Sesonske, 2004). Le tableau 3.2 donne un ordre de grandeur du coefficient de diffusion dans quelques matériaux utilisés comme réflecteur thermique dans les réacteurs.

Tableau 3.2 Coefficient de diffusion de quelques réflecteurs thermique.

Matériaux	$\rho[g/cm^3]$	$D[cm]$
D <sub>2</sub> O	1.1	0.81
H <sub>2</sub> O	1.0	0.20
BeO	1.1	2.96
Graphite	1.6	0.86
Paraffine	0.87	0.11

### 3.3.2 Approximation de la diffusion

En reportant la loi de Fick (équation 3.30) et l'équation 3.12 dans l'équation différentielle de Boltzmann (équation 3.16), nous obtenons l'équation dite de la diffusion :

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)}{v_n} = Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) - \Sigma(\vec{r}, E)\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) + \vec{\nabla} \cdot (D(\vec{r}, E) \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)) \quad (3.31)$$

Si on considère un réacteur statique, l'équation 3.31 s'écrit sous la forme :

$$\Sigma(\vec{r}, E)\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) - \vec{\nabla} \cdot (D(\vec{r}, E) \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})) \quad (3.32)$$

L'équation 3.32 peut être simplifiée si on suppose un certain nombre d'hypothèses physique :

1. On se place dans un milieu infini, homogène et isotrope : le coefficient de diffusion  $D$  est alors indépendant de  $\vec{r}$  (Glasstone et Sesonske, 2004). Par la suite on peut simplifier le terme de fuite de l'équation 3.32 :

$$\Sigma(\vec{r}, E)\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) - D(E)\Delta\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \quad (3.33)$$

2. Afin de calculer les taux de réaction à l'aide des sections efficaces, le comportement

angulaire de la densité doit être approximé en flux scalaire (voir équation 3.19). Le terme de pertes de neutrons par collisions de l'équation 3.33 s'écrit :

$$\int_0^{4\pi} \Sigma(\vec{r}, E) \phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) d^2\Omega = \Sigma(\vec{r}, E) \phi(\vec{r}, E) \quad (3.34)$$

Ainsi le terme fuite des neutrons hors le volume de contrôle  $d^3r$  s'écrit :

$$\int_0^{4\pi} D(E) \Delta\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) d^2\Omega = D(E) \Delta\phi(\vec{r}, E) \quad (3.35)$$

Le terme source contient deux composantes :

— Source de fission qui s'écrit :

$$\begin{aligned} I_F &= \int_0^{4\pi} d^2\Omega \left[ \frac{1}{4\pi k_{eff}} \sum_{j=1}^J \chi_j(E) \int_0^\infty dE' \nu \Sigma_{f,j}(\vec{r}, E') \phi(\vec{r}, E') \right] \\ &= \frac{1}{k_{eff}} \sum_{j=1}^J \chi_j(E) \int_0^\infty dE' \nu \Sigma_{f,j}(\vec{r}, E') \phi(\vec{r}, E') \end{aligned} \quad (3.36)$$

— Source de diffusion s'écrit :

$$\begin{aligned} I_S &= \int_0^{4\pi} d^2\Omega \left[ \int_0^{4\pi} d^2\Omega' \int_0^\infty dE' \Sigma_s(\vec{r}, E \leftarrow E', \vec{\Omega} \leftarrow \vec{\Omega}') \phi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') \right] \\ &= \int_0^\infty dE' \Sigma_s(\vec{r}, E \leftarrow E') \phi(\vec{r}, E') \end{aligned} \quad (3.37)$$

où :

$$\Sigma_s(\vec{r}, E \leftarrow E') \phi(\vec{r}, E') = \int_0^{4\pi} d^2\Omega \left[ \int_0^{4\pi} d^2\Omega' \Sigma_s(\vec{r}, E \leftarrow E', \vec{\Omega} \leftarrow \vec{\Omega}') \phi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') \right] \quad (3.38)$$

Si on pose l'opérateur **F** qui mesure la production des neutrons tels que :

$$\mathbf{F}\phi(\vec{r}, E') = \sum_{j=1}^J \chi_j(E) \int_0^\infty dE' \nu \Sigma_{f,j}(\vec{r}, E') \phi(\vec{r}, E') \quad (3.39)$$

et l'opérateur **M** qui mesure les pertes des neutrons tels que :

$$\begin{aligned} \mathbf{M}\phi(\vec{r}, E') &= - D(E) \Delta\phi(\vec{r}, E) + \Sigma(\vec{r}, E) \phi(\vec{r}, E) \\ &\quad - \int_0^\infty dE' \Sigma_s(\vec{r}, E \leftarrow E') \phi(\vec{r}, E') \end{aligned} \quad (3.40)$$

On obtient l'équation de la diffusion statique :

$$(\mathbf{M} - \frac{1}{k_{eff}} \mathbf{F})\phi(\vec{r}, E') = 0 \quad (3.41)$$

### 3.3.3 Correction de transport

L'approximation de la diffusion isotrope sera valable pour des neutrons de faible énergie cinétique, mais pour le domaine de haute énergie cette approximation causera des erreurs de calcul élevées car elle ne prend pas en compte l'anisotropie de la source de diffusion. Ces erreurs touchent essentiellement l'évaluation des taux de réaction. Pour garder cette approximation qui est une hypothèse nécessaire pour aboutir à la forme simple de l'équation intégrale du transport (équation de la diffusion), il suffit de corriger la section efficace totale dans l'équation de la diffusion pour évaluer plus adéquatement les taux de réactions.

Une façon pour trouver une correction à la section efficace totale est d'utiliser une approximation dite approximation  $P_N$  qui consiste à factoriser la distribution angulaire  $\phi$  en harmonique sphérique et à limiter son expansion à seulement quelques termes (Rozon, 1992). En limitant le flux angulaire à l'ordre 1 d'harmonique sphérique, on obtient l'expression suivante (voir annexe A) :

$$\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} [\phi(\vec{r}, E) + 3\vec{\Omega} \cdot \vec{J}(\vec{r}, E)] \quad (3.42)$$

En substituant l'équation 3.42 dans l'équation de transport 3.17, en multipliant l'équation par  $\vec{\Omega}$  et en intégrant sur tous les angles, on trouve les deux équations suivantes (Rozon, 1992; Glasstone et Sesonske, 2004) :

$$\frac{1}{3}\vec{\nabla}\phi(\vec{r}, E) + \Sigma(\vec{r}, E)\vec{J}(\vec{r}, E) = \int_0^\infty dE' \Sigma_{s1}(\vec{r}, E \leftarrow E')\vec{J}(\vec{r}, E') \quad (3.43)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J}(\vec{r}, E) + \Sigma(\vec{r}, E)\phi(\vec{r}, E) = \int_0^\infty dE' \Sigma_{s0}(\vec{r}, E \leftarrow E')\phi(\vec{r}, E') \quad (3.44)$$

où  $\Sigma_{s0}$  et  $\Sigma_{s1}$  sont respectivement les sections efficaces de diffusion isotrope et anisotrope calculées par le développement de la section efficace de diffusion en polynôme de Legendre à l'ordre 0 et 1 respectivement (voir annexe B).

Le terme de perte par diffusion anisotrope peut être simplifié de la façon suivante :

$$\int_0^\infty dE' \Sigma_{s1}(\vec{r}, E \leftarrow E') \vec{J}(\vec{r}, E') = \bar{\mu}_0 \Sigma_s(\vec{r}, E) \vec{J}(\vec{r}, E) \quad (3.45)$$

où  $\bar{\mu}_0$  est le cosinus moyen de l'angle de diffusion et  $\Sigma_s$  la section efficace de diffusion élastique.

Par la suite, en utilisant les équations 3.30 et 3.43, on peut écrire le coefficient de diffusion  $D$  sous la forme :

$$D(\vec{r}, E) = \frac{1}{3(\Sigma(\vec{r}, E) - \bar{\mu}_0 \Sigma_s(\vec{r}, E))} = \frac{1}{3\Sigma_{tr}(\vec{r}, E)} \quad (3.46)$$

où  $\Sigma_{tr}$  est la section efficace de transport qui remplace la section efficace totale pour corriger les taux de réactions.

### 3.4 La discréétisation multigroupe en énergie

Pour résoudre numériquement l'équation de transport par des méthodes déterministes, on utilise généralement une discréétisation multigroupe en énergie. Dans cette section on présente le principe et le formalisme de l'approximation mutigroupe.

#### 3.4.1 Principe de l'approximation multigroupe

L'approximation multigroupe consiste à diviser le domaine d'énergie en  $G$  groupes  $[E_g, E_{g-1}]$  (avec  $g = 0, 1, \dots, G$ ) sur lesquels on considère que les neutrons ont tous la même énergie, et que les données nucléaires (sections efficaces) sont constantes. Par convention,  $E_0$  représente l'énergie la plus haute que peut avoir un neutron dans le réacteur. Celle-ci correspond à l'énergie maximale des neutrons émis par fission (environ 10 MeV) et  $E_G$  représente l'énergie la plus faible (environ  $10^{-4}$  eV). Il faut donc calculer les valeurs moyennes des grandeurs utiles (sections efficaces) sur chaque groupe d'énergie à partir des grandeurs continues. Ce processus de condensation est effectué par un logiciel tel NJOY (Kahler *et al.*, 2012) qui produit les bibliothèques de sections efficaces multigroupes. Ce logiciel utilise les sections efficaces expérimentales et un flux neutronique de pondération continu en énergie déterminé expérimentalement (par exemple flux du réacteur CANDU-6) pour faire la pondération permettant d'obtenir les sections efficaces multigroupes. Les équations de pondération des sections efficaces seront évoquées dans la section suivante.

### 3.4.2 Formalisme de l'approximation multigroupe

À la suite de la discrétisation en énergie, le flux angulaire, le flux intégré, les taux de réaction et la densité de la source s'écrivent (Hébert, 2009) :

$$\phi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) \equiv \langle \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) \rangle_g = \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \quad (3.47)$$

$$\phi_g(\vec{r}) \equiv \langle \phi(\vec{r}) \rangle_g = \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE \phi(\vec{r}, E) \quad (3.48)$$

$$\Sigma_g(\vec{r})\phi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) \equiv \langle \Sigma(\vec{r})\phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) \rangle_g = \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE \Sigma(\vec{r}, E)\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \quad (3.49)$$

$$Q_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) \equiv \langle Q(\vec{r}, \vec{\Omega}) \rangle_g = \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE Q(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \quad (3.50)$$

Le taux de réaction du  $\ell^{\text{ème}}$  terme de la section de diffusion  $\Sigma_{s,\ell}(\vec{r}, E \leftarrow E')$  (voir annexe B) s'écrit :

$$\begin{aligned} \Sigma_{s,\ell,g \leftarrow h}(\vec{r})\phi_h(\vec{r}) &= \langle \Sigma_{s,\ell}(\vec{r})\phi(\vec{r}) \rangle_{g \leftarrow h} \\ &= \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE \int_{E_h}^{E_{h-1}} dE' \Sigma_{s,\ell}(\vec{r}, E \leftarrow E')\phi(\vec{r}, E') \end{aligned} \quad (3.51)$$

Le principe de la conservation des taux de réactions conduit à définir les sections efficaces multigroupes comme les valeurs moyennes, en chaque point, des sections efficaces réelles pondérées par le flux :

$$\Sigma_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} dE \Sigma(\vec{r}, E)\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})}{\int_{E_g}^{E_{g-1}} dE \phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})} \quad (3.52)$$

d'où l'équation de transport stationnaire sous sa forme différentielle dans le groupe d'énergie  $g$  :

$$\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \Sigma_g(\vec{r})\phi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = Q_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) \quad (3.53)$$

et sous sa forme intégrale :

$$\phi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \int_0^\infty ds e^{-\tau_g(s)} Q_g(\vec{r} - s\vec{\Omega}, \vec{\Omega}) \quad (3.54)$$

## 3.5 Méthodes de résolution

L'approche déterministe est utilisée pour résoudre l'équation de transport stationnaire (équation 3.53). Toutes les méthodes que nous allons décrire dans cette section s'inscrivent dans un formalisme multigroupe pour la discrétisation en énergie, ce qui constitue une des approximations fondamentales de la méthode.

mations majeures de ces méthodes. De nombreux schémas numériques ont été étudiés dans la littérature pour résoudre cette équation, nous en mentionnerons ici deux : la méthode des caractéristiques (MoC) et la méthode des probabilités de collisions (CP) (Hébert, 2009).

### 3.5.1 Méthode des probabilités de collisions (CP)

La méthode des probabilités de collision (Carlvik, 1964) résulte de la discréétisation spatiale de la forme intégrale multigroupe de l'équation de transport (équation 3.54). L'intégration de l'équation 3.54 dans l'angle solide  $d^2\Omega$  donne l'expression du flux intégral :

$$\phi_g(\vec{r}) = \int_{4\pi} d^2\Omega \phi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} d^2\Omega \int_0^\infty ds e^{-\tau_g(s)} Q_g(\vec{r} - s\vec{\Omega}) \quad (3.55)$$

Si on pose  $\vec{r}' = \vec{r} - s\vec{\Omega}$ , avec  $d^3r' = s^2 d^2\Omega$ , on obtient l'expression du flux intégré suivante :

$$\phi_g(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi} \int_\infty d^3r' \frac{e^{-\tau_g(s)}}{s^2} Q_g(\vec{r}') \quad (3.56)$$

On utilise généralement cette méthode pour un espace pavé à l'infini de cellules unitaires où d'assemblages qui se répètent par symétrie ou périodicité (figure 3.5). Chacune de ces cellules est découpée en région  $V_i$ . La notation  $V_i^\infty$  représente l'ensemble des régions  $V_i$  sur le pavage infini. En multipliant l'équation 3.56 par la section efficace macroscopique totale  $\Sigma_g(\vec{r})$  et en

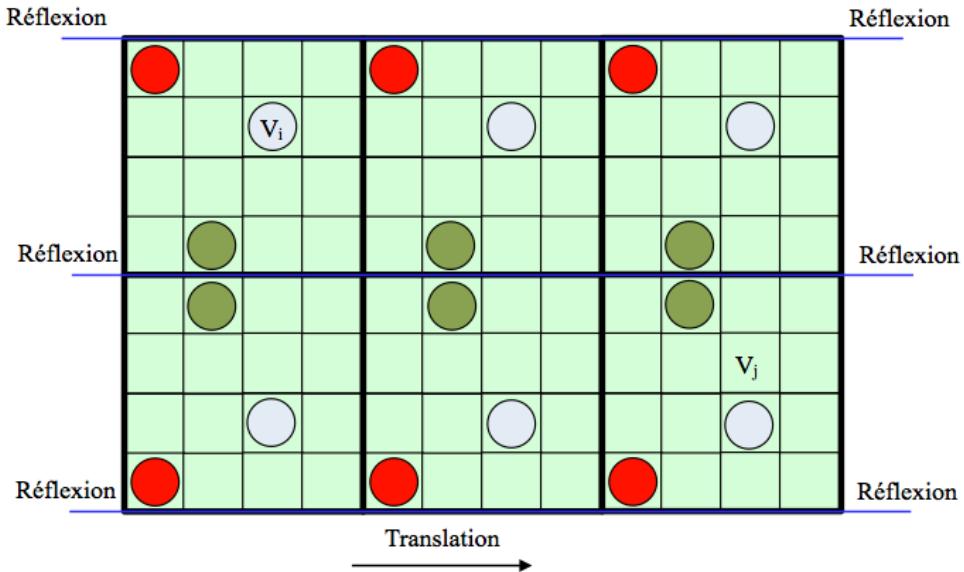


Figure 3.5 Assemblage  $3 \times 2$  avec des conditions frontières de symétrie (en  $y$ ) et de périodicité (en  $x$ )

intégrant sur chaque région  $V_i$ , on obtient :

$$\int_{V_i} d^3r \Sigma_g(\vec{r})\phi_g(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi} \int_{V_i} d^3r \Sigma_g(\vec{r}) \sum_j \int_{V_j^\infty} d^3r' Q_{j,g}(\vec{r}') \frac{e^{-\tau_g(s)}}{s^2} \quad (3.57)$$

avec :

$$Q_{j,g} = Q_{j,g}(\vec{r}') = \sum_{h=1}^G \Sigma_{s,0,g \leftarrow h,j}(\vec{r}') \phi_{h,j}(\vec{r}') + \frac{1}{k_{eff}} \sum_{n=1}^{N_{fission}} \chi_{n,g,j} \sum_{h=1}^G \nu \Sigma_{f,n,h,j}(\vec{r}') \phi_{j,h}(\vec{r}') \quad (3.58)$$

et  $\Sigma_{s0,i,g \leftarrow h}(\vec{r})$  est le premier ordre de développement de la section efficace de diffusion en polynôme de Legendre. Ici, on a supposé que la densité de sources de neutrons  $Q_{i,g}$  est isotrope sur chacune des régions  $V_i$  (cette hypothèse impose une discréétisation fine de la géométrie). L'équation du flux peut ainsi être simplifiée à la forme suivante :

$$\phi_{i,g} = \frac{1}{V_i \Sigma_{i,g}} \sum_j Q_{j,g} V_j P_{ji,g} \quad (3.59)$$

avec :

$$\phi_{i,g} = \frac{1}{V_i} \int_{V_i} d^3r \phi_g(\vec{r}) \quad (3.60)$$

$$\Sigma_{i,g} = \frac{1}{V_i \phi_{i,g}} \int_{V_i} d^3r \Sigma_g(\vec{r}) \phi_g(\vec{r}) \quad (3.61)$$

$$P_{ji,g} = \frac{1}{4\pi V_j} \int_{V_j^\infty} d^3r' \int_{V_i} d^3r \Sigma_g(\vec{r}) \frac{e^{-\tau_g(s)}}{s^2} \quad (3.62)$$

$P_{ji,g}$  correspond à la probabilité pour un neutron né dans la région  $V_j$  du réseau de subir sa première collision dans la région  $V_i$ . En général, on considère que les sections efficaces macroscopiques sont constantes dans les régions  $V_j$ . On peut alors utiliser les probabilités de collision réduites  $p_{ji,g}$  définies comme :

$$p_{ji,g} = \frac{P_{ji,g}}{\Sigma_{i,g}} = \frac{1}{4\pi V_j} \int_{V_j^\infty} d^3r' \int_{V_i} d^3r \frac{e^{-\tau_g(s)}}{s^2} \quad (3.63)$$

On peut remarquer que l'intégrale double apparaissant dans la formule 3.63 définissant  $p_{ji,g}$  est symétrique ; on en déduit une relation évidente dite de réciprocité (Reuss, 2012) :

$$V_j p_{ji,g} = V_i p_{ij,g} \quad (3.64)$$

De plus, s'il n'y a pas de fuites la somme des probabilités sur les toutes les régions ( $M$  régions) pour tout volume d'émission est égale à 1 :

$$\sum_{i=1}^M p_{ji,g} = 1 \quad (3.65)$$

En utilisant l'équation 3.63 et la propriété 3.64, le flux s'écrit alors sous la forme suivante :

$$\phi_{i,g} = \sum_j Q_{j,g} p_{ij,g} \quad (3.66)$$

Une méthode numérique d'intégration (quadrature) est considérée dans le code de calcul DRAGON, pour calculer les probabilités de collision  $p_{ji}$  en utilisant les données de «tracking» et les sections efficaces dans chaque région (Marleau, 2001). Ainsi selon la dimension de la géométrie on distingue les formules de quadrature suivantes :

— pour une géométrie 1D :

$$p_{i,j} = \frac{1}{2V_i^{1D}\Sigma_i\Sigma_j} [E_3(\tau_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}) - E_3(\tau_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}) - E_3(\tau_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}) + E_3(\tau_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}})] \quad (3.67)$$

avec

$$E_n(x) = \int_0^1 e^{\left(\frac{-x}{u}\right)} u^{n-2} du \quad (3.68)$$

— pour une géométrie 2D :

$$\begin{aligned} p_{i,j} &= \frac{1}{2\pi V_i^{2D}\Sigma_i\Sigma_j} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{h \in V_i} dh \\ &\quad [Ki_3(\tau_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}) - Ki_3(\tau_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}) - Ki_3(\tau_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}) + Ki_3(\tau_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}})] \end{aligned} \quad (3.69)$$

avec  $Ki_n$  la fonction de Bickley-Nayler (Blair *et al.*, 1978)

$$Ki_n(x) = \int_0^1 e^{\left(\frac{-x}{\sqrt{1-u^2}}\right)} (1-u^2)^{\frac{n-2}{2}} du \quad (3.70)$$

— pour une géométrie 3D :

$$\begin{aligned} p_{i,j} &= \frac{1}{4\pi V_i^{3D}\Sigma_i\Sigma_j} \int_0^{4\pi} d^2\Omega \int_{x \in V_i} dx \int_{y \in V_i} dy \\ &\quad \left[1 - e^{\left(-\tau_{i-\frac{1}{2},i+\frac{1}{2}}\right)}\right] e^{\left(-\tau_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}\right)} \left[1 - e^{\left(-\tau_{j-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}\right)}\right] \end{aligned} \quad (3.71)$$

où les  $\tau_{i\pm\frac{1}{2},j\pm\frac{1}{2}}$  et  $\tau_{i\pm\frac{1}{2},i\pm\frac{1}{2}}$  correspondent aux chemins optiques et les indices  $i \pm \frac{1}{2}$  correspondent respectivement à l'indice de la surface d'entrée (−) et la surface de sortie (+) de la région  $i$ .

### 3.5.2 Méthode des caractéristiques (MoC)

La méthode des caractéristiques MoC (Method of Characteristics) (Askew, 1972) est une technique numérique adaptée à la résolution de l'équation de transport aux dérivées partielles (forme caractéristique de l'équation de transport (équation 3.21)). Considérons une région dans laquelle la section efficace  $\Sigma$  et le terme source  $Q$  sont moyennés sur chaque direction, l'équation de transport stationnaire sous sa forme caractéristique dans un groupe d'énergie et la direction  $\vec{\Omega}$  s'écrit sous la forme suivante :

$$\frac{d}{ds}\phi(\vec{r} + s\vec{\Omega}, \vec{\Omega}) + \Sigma(\vec{\Omega})\phi(\vec{r} + s\vec{\Omega}, \vec{\Omega}) = Q(\vec{\Omega}) \quad (3.72)$$

Dans le cas où  $\vec{r}$  est le point d'entrée de la caractéristique dans la région, et  $\vec{r} + s\vec{\Omega}$  est le point de sortie, on obtient la solution suivante pour l'équation différentielle précédente :

$$\phi^+(T) = e^{-\Sigma(T)l(T)}\phi^-(T) + \frac{1 - e^{-\Sigma(T)l(T)}}{\Sigma(T)}Q(T) \quad (3.73)$$

avec les notations explicitées sur la figure 3.6 :  $\phi^\pm$  sont les flux angulaires entrant (-) et sortant (+) de la région le long de la trajectoire  $T$  et  $l(T)$  est la longueur d'intersection entre la région et la trajectoire.

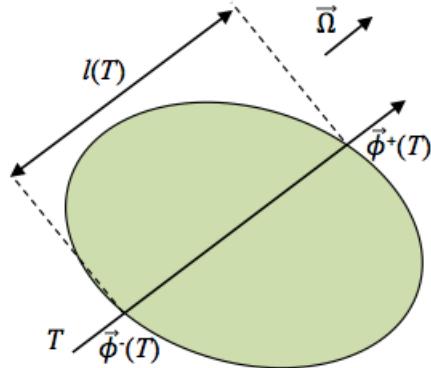


Figure 3.6 Transport du flux angulaire le long d'une ligne caractéristique traversant une région homogène

Cependant, la grandeur qui nous intéresse est le flux angulaire moyen à l'intérieur de toute la région. Donc on définit la variable transverse  $s_\perp$  (composante du vecteur sortant de la région,  $\vec{r}^+$ , sur l'axe perpendiculaire à la direction  $\vec{\Omega}$ , et de vecteur unitaire  $\vec{\Omega}_\perp$ ). L'expression du

flux angulaire moyen sur une région  $R_i$  s'écrit alors :

$$\begin{aligned}\bar{\phi}_i &= \frac{1}{V_i} \int_{s_\perp} ds_\perp \int_s ds \phi(s\vec{\Omega} + s_\perp \vec{\Omega}_\perp) \\ &= \frac{1}{V_i} \int_{s_\perp} ds_\perp l_i(T_{s_\perp}) \bar{\phi}_i(T_{s_\perp})\end{aligned}\quad (3.74)$$

avec  $T_{s_\perp}$  la droite caractéristique associée à la coordonnée transverse  $s_\perp$ ,  $V_i$  le volume de la région  $R_i$  et  $l_i(T_{r_\perp})$  et  $\phi(T_{r_\perp})$  respectivement la longueur de corde et le flux moyen associés à la trajectoire  $T_{r_\perp}$  (voir figure 3.7).

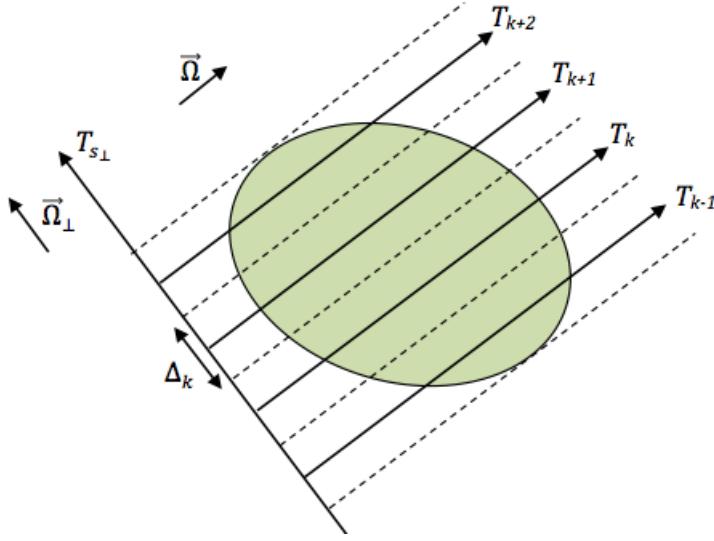


Figure 3.7 Forme du maillage transverse traversant une région homogène

L'approximation de cette intégrale se fait à l'aide d'une formule de quadrature obtenue en considérant un ensemble de trajectoires parallèles recouvrant la région considérée. Si nous imaginons que chaque ligne  $T_k$  est associée à un “tube” qui l'entoure et la sépare des lignes voisines (figure 3.7), nous pouvons associer la section  $\Delta_k$  de ce tuyau au poids dans la formule de quadrature :

$$\int_{s_\perp} ds_\perp l_i(T_{s_\perp}) \bar{\phi}_i(T_{s_\perp}) = \sum_k \Delta_k l_k^i \overline{\phi(T_k)}^i \quad (3.75)$$

ce qui donne l'approximation du flux moyen dans la région :

$$\bar{\phi}_i = \frac{\sum_k \Delta_k l_k^i \overline{\phi(T_k)}^i}{\sum_k \Delta_k l_k^i} \quad (3.76)$$

Les expressions 3.67, 3.69 3.71 et 3.76 montrent qu'il est indispensable de calculer les volumes de toutes les régions dans la géométrie, les aires des surfaces de géométrie globale et

les longueurs des chemins optiques qui les traversent. Dans le chapitre suivant, on montre comment on procède pour calculer ces informations dans le cas d'un cylindre incliné.

La méthode des caractéristiques est basée sur un calcul itératif du flux angulaire de neutrons en résolvant l'équation de transport sur des trajectoires droites traversant toute la géométrie. Si les trajectoires interceptent des conditions aux limites de symétrie ou de translation, le flux angulaire sortant au point d'intersection trajectoire/frontière est réutilisée pour calculer le flux angulaire entrant. Donc le processus itératif peut prendre un énorme temps de simulation pour qu'il converge, ce qui n'est pas le cas pour la méthode des probabilités des collisions car elle n'utilise pas un calcul itératif.

Par contre cette méthode est favorable pour gagner de l'espace mémoire car la méthode des probabilités des collisions produit des matrices carrées pleines d'ordre égal au nombre de sous-régions dans la géométrie avec un couplage entre ces sous-régions. Donc il faut un énorme espace mémoire pour faire le traitement algébrique de ces matrices. Par contre, la méthode des caractéristiques utilise des vecteurs pour faire les itérations, ce qui ne demande pas beaucoup de mémoire machine.

## CHAPITRE 4 IMPLÉMENTATION DE LA GÉOMÉTRIE CYLINDRIQUE INCLINÉE 3D DANS DRAGON-5

La résolution numérique de l'équation de transport dans un réacteur nucléaire ne sera possible que lorsque sa géométrie ainsi que sa composition atomique seront définies. Dans la version 3 du code de calcul DRAGON plusieurs géométries usuelles 2D et 3D sont programmées (Marleau *et al.*, 2013b), dont des géométries cartésiennes et hexagonales 2D et 3D orientées selon une direction ( $\vec{x}$ ,  $\vec{y}$  ou  $\vec{z}$ ) du repère cartésien.

L'étude analytique de la géométrie cylindrique inclinée et les modifications apportées dans le code source seront implémentés dans la dernière version de DRAGON, nommément DRAGON-5 (Marleau *et al.*, 2013c). Le processus d'implémentation de cette géométrie ne consiste pas uniquement à définir les paramètres géométriques (dimensions et inclinaison), mais aussi à analyser les symétries, position par rapport aux autres géométries, évaluer et numérotter les surfaces et volumes d'intersection, évaluer les symétries locale et globale et tracer les lignes d'intégration<sup>1</sup>.

La définition et l'analyse de la géométrie sont assurées par le module **GEO** et le module **NXT** (Marleau *et al.*, 2013b,a). On se limite dans cette thèse à définir des géométries annulaires cartésiennes (**CARCELZ**) inclinées qui ne peuvent intersecter que des parallélépipèdes (**CAR3D**).

Dans ce chapitre nous nous concentrerons sur l'évaluation des volumes et surfaces associés à l'intersection d'un cylindre incliné et d'un parallélépipède. Ainsi on présente la structure des routines écrites en FORTRAN 90 (Hahn, 1994), l'algorithme de calcul des données et les procédures de transfert des données entre le module **GEO** et le module **NXT**.

### 4.1 Implémentation dans le module **GEO**

Le module **GEO** est utilisé pour créer ou modifier une géométrie. Ce module permet de spécifier toutes les caractéristiques ( coordonnées, mélange de régions et les conditions aux frontières) d'une géométrie simple, ou complexe. Chaque géométrie est stockée sous la forme d'un ensemble de données dans une structure géométrique sous le nom spécifié dans le fichier d'entrée. Il est aussi possible de modifier une géométrie existante ou de la copier sous un nouveau nom.

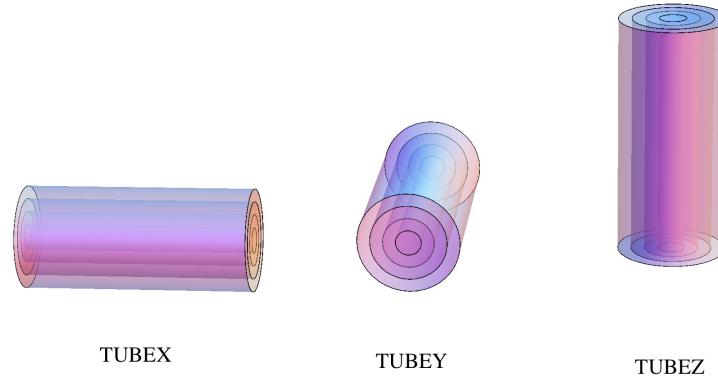
---

1. la méthode de traçage et l'implémentation dans le code seront expliquées dans le chapitre suivant

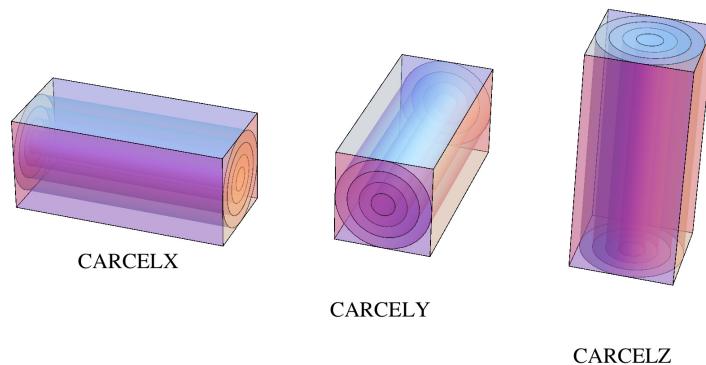
#### 4.1.1 Description de la géométrie CARCELZ inclinée

Une géométrie cylindrique 3D dans DRAGON-5 peut être spécifiée par deux familles de mot-clé (Marleau *et al.*, 2013c) chacune contenant 3 mots-clé qui définissent trois géométries cylindriques orientées selon les trois axes du repère cartésien ( $\vec{x}$ ,  $\vec{y}$ ,  $\vec{z}$ ) :

1. un tube 3D (voir figure 4.1a) modélisé par l'un des mots-clé suivants : TUBEX, TUBEY ou TUBEZ
2. une cellule cartésienne 3D (voir figure 4.1b) contenant des tubes modélisés par l'une des mots-clés suivants : CARCELX, CARCELY ou CARCELZ



(a) Géométries de type tube 3D.



(b) Géométries de type cellule cartésiennes 3D.

Figure 4.1 Illustration des géométries annulaires 3D disponibles dans DRAGON-5.

Les mots-clés de la famille de tube 3D sont utilisés essentiellement pour la modélisation des crayons de combustible dans une grappe annulaire. Par contre les cellules cartésiennes 3D sont utilisées pour la modélisation d'autres géométries annulaires dans le réacteur, dont les barres de contrôle. Le modèle des barres de contrôle qu'on prévoit concevoir consiste à incliner d'un angle  $\omega_y$  des longues tiges insérées dans le cœur de réacteur autour de l'axe  $y$  (voir la figure 4.2). Ceci correspond à transformer l'axe  $z$  du réacteur en un axe  $z'$  de la géométrie annulaire inclinée. La définition de cette géométrie annulaire consiste à généraliser la définition du **CARCELZ**, en lui ajoutant un nouveau paramètre qui correspond à l'angle  $\omega_y$ .

Le nouveau descriptif de **CARCELZ** généralisé est défini de la façon suivante :

Tableau 4.1 Structure (**descgtyp**)

**CARCELZ** *lr* { *lz* | *lx* *ly* *lz* } |

Tableau 4.2 Structure (**descSP**)

[ **OMEGAY** (*omg*) ]  
[ **OFFCENTER** (*disxyz*(*i*), *i*=1,3) ]

où :

**CARCELZ** mot-clé pour indiquer une cellule mixte cartésienne à trois dimensions avec des tubes orientés selon de l'axe  $z$ . Les régions annulaires de la cellule cartésienne en trois dimensions peut maintenant être inclinée à un angle  $omg$  par rapport à l'axe  $z$  autour de l'axe  $y$ .

*lx* nombre de sous-divisions le long de l'axe  $x$  (avant la sous-division locale).

*ly* nombre de sous-divisions le long de l'axe  $y$  (avant la sous-division locale).

*lz* nombre de sous-divisions le long de l'axe  $z$  (avant la sous-division locale).

*lr* nombre de cylindres (avant la sous-division locale).

**OMEGAY** mot-clé pour indiquer l'angle de rotation du **CARCELZ** autour de l'axe  $y$ .

*omg* angle de rotation par rapport l'axe *z* autour de l'axe *y*. Si *omg*= $k\pi$  l'angle est omis. Si *omg*= $\pi/2+k\pi$  avec *k* entier, CARCELZ se traite comme CARCELX.

**OFFCENTER** mot-clé pour spécifier que les régions annulaires concentriques inclinées peuvent être déplacées par rapport au centre de la cellule cartésienne.

*disxyz* vecteur donnant le déplacement (cm) des régions annulaires concentriques par rapport au centre de la cellule cartésienne selon les directions *x*, *y* et *z*.

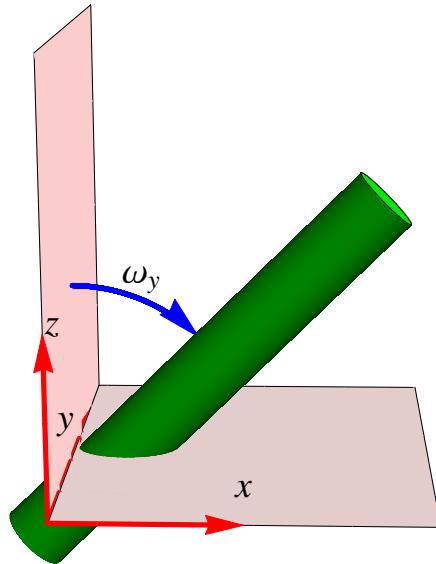


Figure 4.2 Illustration de la géométrie annulaire inclinée.

#### 4.1.2 Implémentation dans le code source de DRAGON-5

Le code DRAGON-5 utilise un format d'écriture du fichier d'entrée simplifiée en utilisant une syntaxe de saisie basée sur des mots-clés et des modules. La boîte à outils pour la vérification de la cohérence de saisie d'un fichier source est appelée CLE-2000 (Roy, 1999). Comme tout autre programme, la première étape de traitement dans CLE-2000 comprend un compilateur du fichier source. L'étape de compilation est nécessaire afin détecter des erreurs syntaxiques dans le fichier. En effet, des instructions sont interprétées pour déterminer si la logique des instructions demandées est adéquate et si la syntaxe est respectée (voir figure 4.3).

Pour définir une géométrie, le module **GEO** est appelé dans le fichier source (.x2m ou .c2m), et la géométrie désirée est modélisée selon les mots-clés disponibles. Dans le cas d'un **CARCELZ**

la syntaxe est définie selon le descriptif 4.1. Le module **GEO** comporte trois routines écrites en FORTRAN : **GEO.f**, **GEOMIX.f** et **GEOIN1.f**, et leur architecture d'appel sont décrites dans la figure 4.4. La routine **GEOIN1.f** est une routine récursive, elle peut appeler elle-même plusieurs fois.

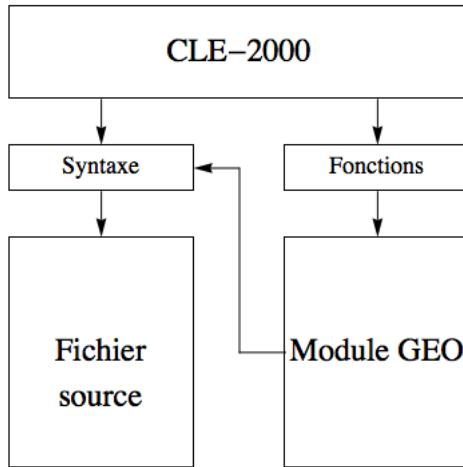


Figure 4.3 Séquences de compilation de CLE-2000.

```

GEO
|----- GEOIN1
|----- GEOMIX
|----- GEOIN1
|----- GEOIN1
|----- GEOMIX
...
  
```

Figure 4.4 Routines du module **GEO** (version 5 de DRAGON).

La mise à niveau de la géométrie **CARCELZ** consiste à ajouter certains droits d'écriture et les restrictions suivantes dans la routine **GEOIN1.f** :

1. **CARCELZ** incliné ne peut contenir de sous-géométries.
2. **CARCELZ** incliné doit être emboîté dans un assemblage **CAR3D**.
3. l'angle de rotation *omg* ne s'applique que sur **CARCELZ**.
4. l'ajout de l'angle de rotation à **CARCELZ** est optionnel

## 4.2 Évaluation analytique de l'intersection des géométries CAR3D et CAR-CELZ incliné

La figure 4.5 illustre la supercellule élémentaire des mécanismes de réactivité du réacteur SCWR. La barre de contrôle de la réactivité est entourée de quatre canaux de combustible et du modérateur. Le premier niveau géométrique est un CAR3D divisé en 6 cellules (figure 4.5) avec un mécanisme de réactivité inclinée traversant les cellules C3 et C4.

Nous nous intéressons dans ce paragraphe à analyser la partie géométrique contenant le mécanisme de réactivité (cellules C3 et C4), et plus précisément l'intersection entre un parallélépipède (cellule C3 ou C4) et un cylindre incliné.

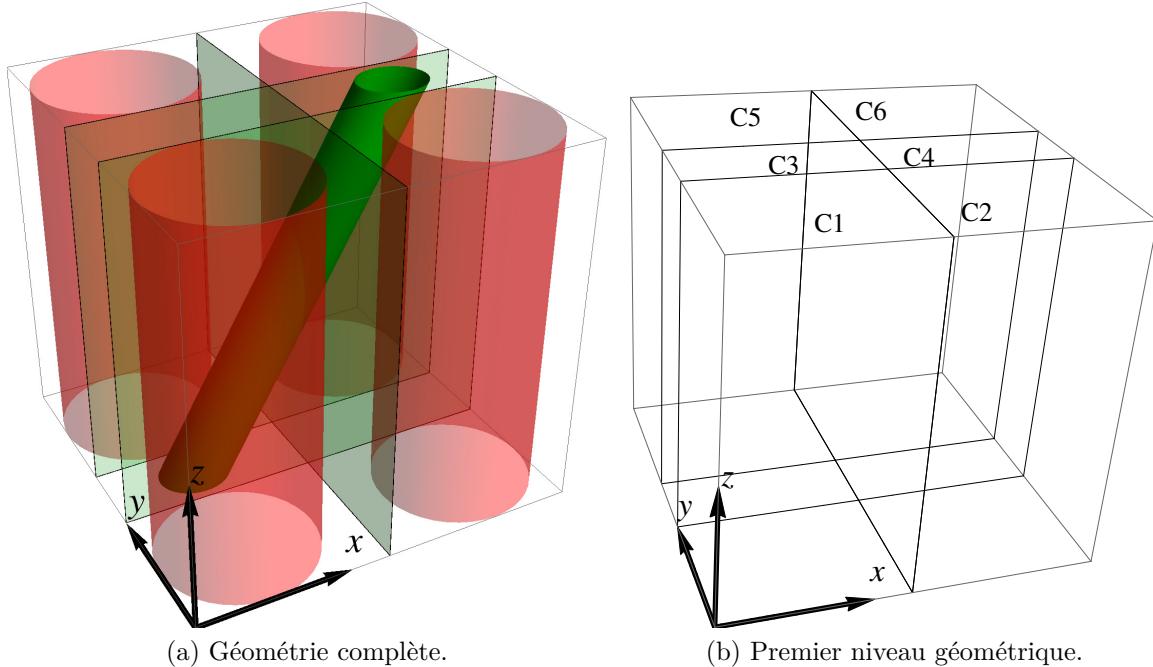


Figure 4.5 Géométrie 3D de la supercellule.

### 4.2.1 Calcul de volume d'intersection

La projection d'un cylindre ayant subi une rotation de  $\omega_y$  autour de l'axe  $y$  sur le plan  $y = y_c$  donne ( $y_c$  est la position du centre du cylindre selon l'axe  $y$ ) une intersection 2D de deux rectangles (voir figure 4.6a). De ce fait, on s'intéresse à évaluer l'intersection entre les deux géométries 2D (cylindre 2D et rectangle) pour trouver le volume réel de l'intersection 3D du cylindre avec la maille parallélépipédique.

On considère un cylindre centré en  $(x_c, y_c, z_c)$ , de rayon  $R$  et de longueur  $L$  traversé par des

plans  $x_+$ ,  $x_-$ ,  $y_+$ ,  $y_-$ ,  $z_+$  et  $z_-$ , où les indices “ $+$ ” et “ $-$ ” représentent respectivement les plans situés dans la direction croissante de l'axe par rapport au centre du parallélépipède, et ceux dans la direction décroissante.

Selon la position du centre du cylindre, sa longueur et son inclinaison (voir figure 4.6a), on distingue plusieurs cas d'intersection 2D des rectangles correspondant à la projection du parallélépipède et du cylindre sur le plan  $y = y_c$ . Nous considérons dans cette thèse que le cylindre incliné est de longueur suffisante pour que les deux surfaces de base du cylindre se situent en dehors de la région cartésienne associée au CARCELZ.

Pour toute intersection 2D entre les deux rectangles, la région commune (voir figure 4.6b) peut être divisée en sous-régions rectangulaires (régions  $R_1$  et  $R_2$ ) et triangulaires (régions  $T_1$ ,  $T_2$ ,  $T_3$  et  $T_4$ ).

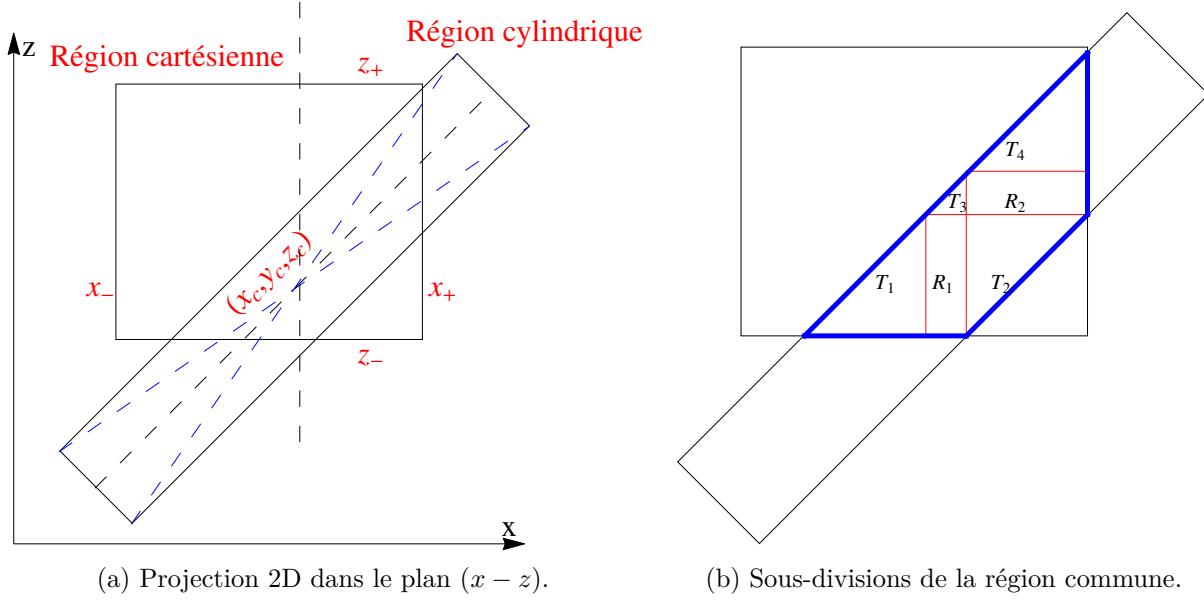


Figure 4.6 Projection du parallélépipède et du cylindre incliné sur le plan  $y = y_c$ .

Donc le volume  $V_c$  de l'intersection des régions cylindrique inclinée et cartésienne s'écrit sous la forme :

$$V_c = V_T + V_R \quad (4.1)$$

$$= \sum_{i=1}^N V_{Ti} + \sum_{j=1}^M V_{Rj} \quad (4.2)$$

où  $V_{Ti}$  et  $V_{Rj}$  sont respectivement les volumes 3D du triangle d'indice  $i$  et du rectangle d'indice  $j$ .

Toutes les régions triangulaires ont deux sommets successifs placés sur la même surface latérale du cylindre 2D, l'autre étant placé à l'intérieur du cylindre ou sur la face opposée du cylindre. Les régions rectangulaires ont deux sommets opposés placés sur la surface latérale du cylindre 2D et les deux autres sont placées à l'intérieur. En 3D les formes rectangulaires et triangulaires peuvent avoir, chacune, trois formes géométriques selon la position des plans  $y_-$  et  $y_+$  par rapport au cylindre :

1. Forme 1 : si aucun plan coupe le cylindre
2. Forme 2 : si un plan coupe le cylindre
3. Forme 3 : si les deux plans  $y_-$  et  $y_+$  coupent le cylindre

L'équation 4.2 s'écrit alors sous la forme :

$$V_c = V_{T,1} + V_{T,2} + V_{T,3} + V_{R,1} + V_{R,2} + V_{R,3} \quad (4.3)$$

$$= \sum_{i=1}^{N_1} V_{Ti,1} + \sum_{i=1}^{N_2} V_{Ti,2} + \sum_{i=1}^{N_3} V_{Ti,3} + \sum_{i=1}^{M_1} V_{Ri,1} + \sum_{i=1}^{M_2} V_{Ri,2} + \sum_{i=1}^{M_3} V_{Ri,3} \quad (4.4)$$

où :

$$\begin{cases} N = N_1 + N_2 + N_3 & \text{somme du nombre de triangles pour chaque forme} \\ M = M_1 + M_2 + M_3 & \text{somme du nombre de rectangles pour chaque forme} \end{cases} \quad (4.5)$$

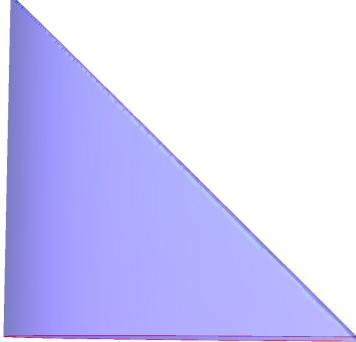
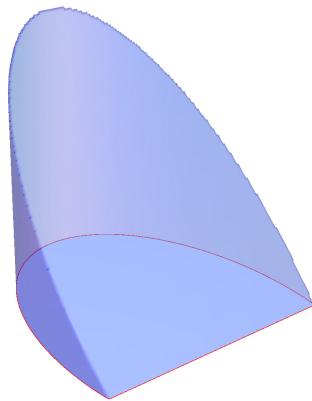
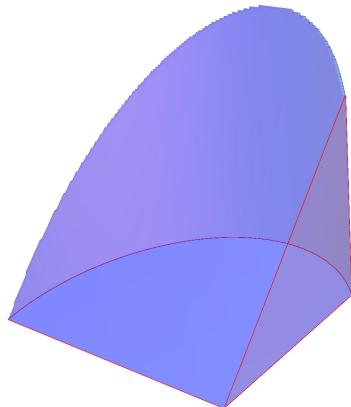
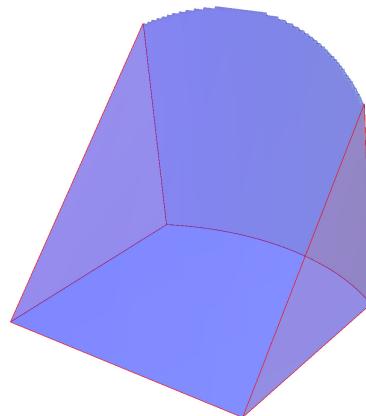
(a) Vue 2D dans le plan  $y = y_c$ .(b) aucun plan en  $y$  intersecte le cylindre.(c) un plan  $y = c$  intersecte le cylindre.(d) deux plans  $y = c$  et  $y = d$  intersectent le cylindre.

Figure 4.7 Différentes formes d'intersection triangle et cylindre incliné.

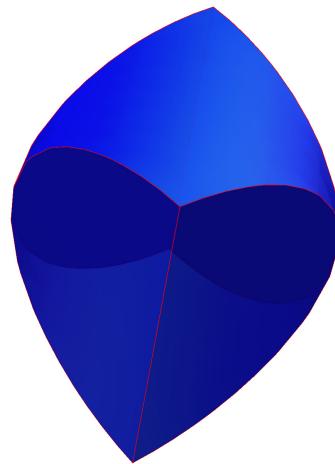
(a) Vue 2D dans le plan  $y = y_c$ .(b) aucun plan en  $y$  intersecte le cylindre.(c) un plan  $y = c$  intersecte le cylindre.(d) deux plans  $y = c$  et  $y = d$  intersectent le cylindre.

Figure 4.8 Différentes formes d'intersection parallélépipède et cylindre incliné.

Pour trouver le volume de la région commune entre les deux géométries on a cherché les six expressions de volume propre à chaque cas de sous-division.

### 1. Triangle de forme numéro 1

Le volume  $V_{T,1}$  de la région triangulaire ( $ABD$ ) (voir figure 4.9) est égal à la somme du volume  $V_{T1,1}$  de la sous-région triangulaire ( $ABC$ ) et du volume  $V_{T2,1}$  de la sous-région triangulaire ( $ACD$ ) :

$$V_{T,1} = V_{T1,1} + V_{T2,1} \quad (4.6)$$

L'expression de volume de sous-régions triangulaires est :

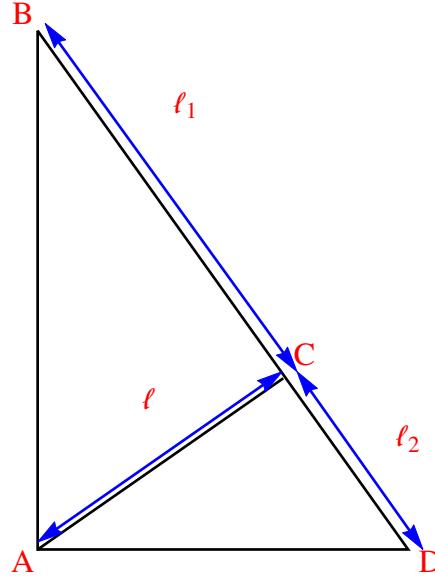


Figure 4.9 Vue 2D dans le plan  $y = y_c$  de la figure 4.7b.

$$V_{Ti,1} = \begin{cases} \frac{\pi}{2} R^2 \ell_i & \text{si } \ell = 2R \\ R^3 \frac{\ell_i}{\ell} \left[ -K \cos(K) + \frac{1}{3}(2+K^2)\sqrt{1-K^2} \right] & \text{si } \ell < 2R \end{cases} \quad (4.7)$$

où  $K = 1 - \ell/R$ .

Le volume  $V_{T,1}$  est alors égal :

$$V_{T,1} = \begin{cases} \frac{\pi}{2} R^2 (\ell_1 + \ell_2) & \text{si } \ell_2 = 2R \\ R^3 \frac{(\ell_1 + \ell_2)}{\ell} \left[ -K \cos(K) + \frac{1}{3}(2+K^2)\sqrt{1-K^2} \right] & \text{si } \ell_2 < 2R \end{cases} \quad (4.8)$$

### 2. Triangle de forme numéro 2

Selon la position des plans  $y_-$  ou  $y_+$  illustrée dans la figure 4.10, on distingue deux

expressions de volume (voir figure 4.7c). Le calcul de volume dans ces cas est basé essentiellement sur les expressions sous-volume élémentaire  $I_1, I_2, I_3, I_4, I_5, I_6, I_7$  et  $I_8$  définis dans l'annexe C. Ces huit sous volumes dépendent des distances  $H, A, B_0$  et le rayon du cylindre incliné  $R$ . La seule distance qui dépend des plans  $y_-$  ou  $y_+$  est la distance  $A$  (voir annexe C). Les cas définies dans cette section présentent les volumes obtenus par la variation de la distance  $A$  en supposant que les autre variables sont fixes. Donc les sous-volumes ( $I_1, I_2, \dots, I_8$ ) ne dépendent que de la position des plan  $y_-$  ou  $y_+$ .

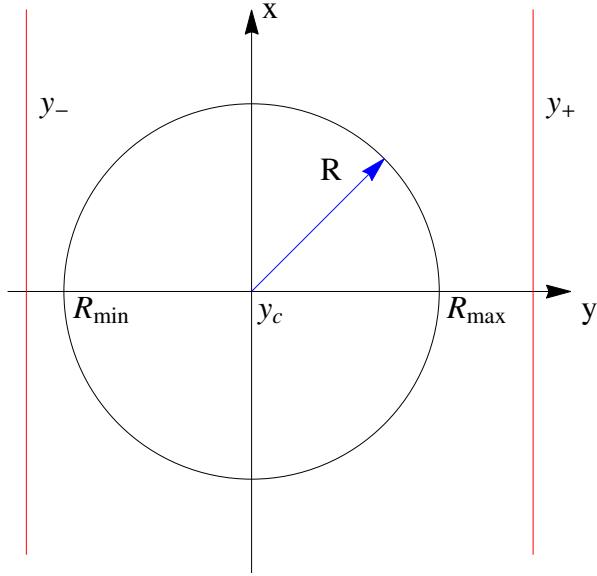


Figure 4.10 Illustration 2D de la position des plans  $y_-$  et  $y_+$  par rapport au centre du cylindre incliné

(a) Si  $R_{max} < y_+$  et  $y_c < y_- < R_{max}$

$$V_{T,2} = I_1(y_-) - I_2(y_-) - I_3(y_-) + I_4(y_-) - I_5(y_-) + I_6(y_-) + I_7(y_-) - I_8(y_-) \quad (4.9)$$

(b) Si  $R_{max} < y_+$  et  $R_{min} < y_- < y_c$

$$V_{T,2} = V_{T,1} \quad (4.10)$$

$$- (I_1(y_-) - I_2(y_-) - I_3(y_-) + I_4(y_-) - I_5(y_-) + I_6(y_-) + I_7(y_-) - I_8(y_-))$$

où  $V_{T,1}$  est le volume de la région triangulaire si aucun plan ne coupe le cylindre selon l'axe  $y$  (expression 4.8)

### 3. Triangle de forme numéro 3

Selon la position des plans  $y_-$  ou  $y_+$  dans l'intervalle  $[R_{min}, R_{max}]$  on distingue deux expressions possibles de la région illustrée dans la figure 4.7d.

- (a) Si  $R_{min} < y_- < y_c$  et  $y_c < y_+ < R_{max}$

Les deux lignes rouges dans la figure 4.11 illustrent les positions des deux plans  $y_-$  et  $y_+$  qui forment la région illustrée dans la figure 4.7d. Le volume de la région  $T_2$  est obtenu par la différence entre le volume de l'ensemble des régions ( $T_1$ ,  $T_2$  et  $T_3$ ) et les volumes individuels des régions  $T_1$  et  $T_3$  selon l'expression :

$$V_{T,3} = V(\cup_{i=1}^3 T_i) - V(T_1) - V(T_3) \quad (4.11)$$

Le volume  $V(\cup_{i=1}^3 T_i)$  représente un triangle de la forme triangulaire numéro 1, donc le volume est obtenu par l'expression 4.8 et les volumes  $V(T_1)$  et  $V(T_3)$  sont obtenus par l'expression 4.10.

$$\begin{aligned} V_{T,3} &= V_{T,1} \\ &- \left( I_1(y_+) - I_2(y_+) - I_3(y_+) + I_4(y_+) - I_5(y_+) + I_6(y_+) + I_7(y_+) - I_8(y_+) \right) \\ &- \left( I_1(y_-) - I_2(y_-) - I_3(y_-) + I_4(y_-) - I_5(y_-) + I_6(y_-) + I_7(y_-) - I_8(y_-) \right) \end{aligned} \quad (4.12)$$

- (b) Si  $(y_c < y_- < R_{max}$  et  $y_c < y_+ < R_{max})$  ou  $(R_{min} < y_- < y_c$  et  $R_{min} < y_+ < y_c)$

Les deux lignes rouges dans la figure 4.12 illustrent les positions des deux plans  $y_-$  et  $y_+$ . Le volume de la région  $T_1$  est obtenu par l'expression :

$$V_{T,3} = V(\cup_{i=1}^2 T_i) - V(T_2) \quad (4.13)$$

Les volumes  $V(\cup_{i=1}^2 T_i)$  et  $V(T_3)$  sont obtenus par l'expression 4.10.

$$\begin{aligned} V_{T,3} &= \left| I_1(y_+) - I_2(y_+) - I_3(y_+) + I_4(y_+) - I_5(y_+) + I_6(y_+) \right. \\ &\quad \left. + I_7(y_+) - I_8(y_+) - I_1(y_-) + I_2(y_-) + I_3(y_-) - I_4(y_-) \right. \\ &\quad \left. + I_5(y_-) - I_6(y_-) - I_7(y_-) + I_8(y_-) \right| \end{aligned} \quad (4.14)$$

### 4. Rectangle de forme numéro 1

Le volume de la région rectangulaire  $R_1$  illustrée dans les figures 4.13 et 4.8d est calculé

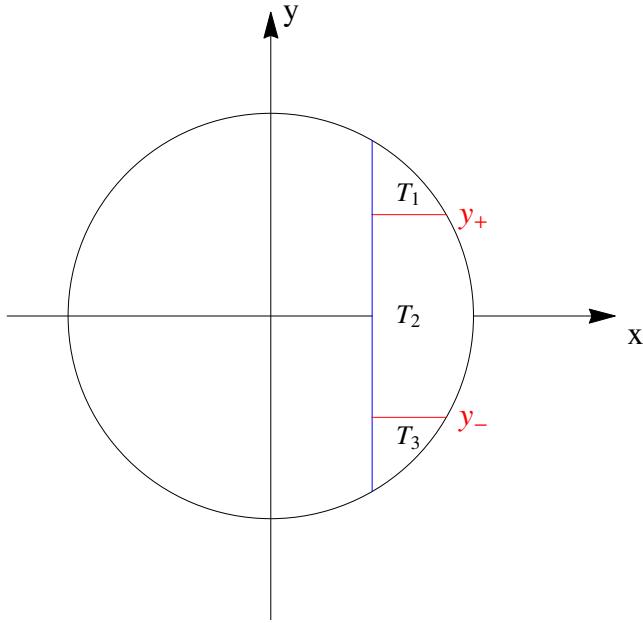


Figure 4.11 Illustration 2D de la position des plans  $y_-$  et  $y_+$  (lignes rouges). Premier cas.

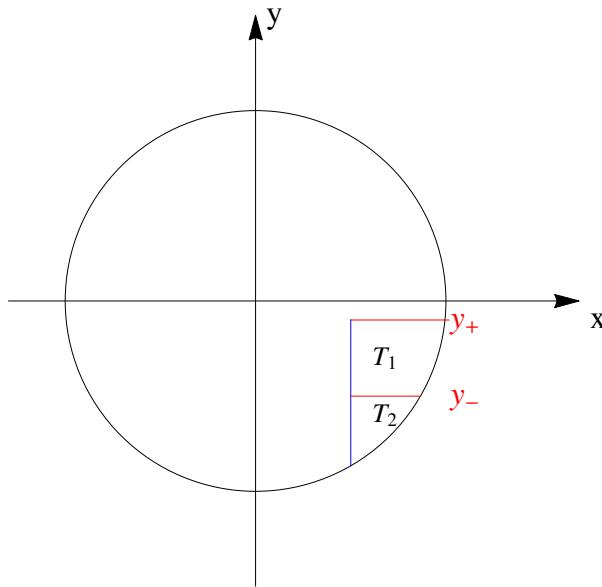


Figure 4.12 Illustration 2D de position des plans  $y_-$  et  $y_+$  (lignes rouges). Deuxième cas.

par l'expression généralisée suivante :

$$V_{R,1} = V((\cup_{i=1}^4 T_i) \cup R_1) - \sum_{i=1}^4 V(T_i) \quad (4.15)$$

d'où l'expression du volume  $V_{R,1}$  (ici on utilise l'expression 4.8 pour le calcul de volume d'une région triangulaire) :

$$V_{R,1} = \ell_1 \pi R^2 - \sum_{i=1}^4 V_{T,1}(T_i) \quad (4.16)$$

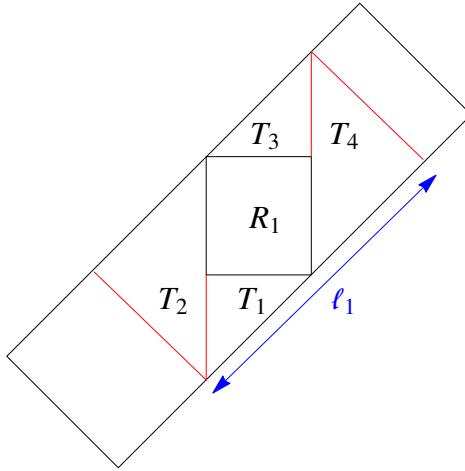


Figure 4.13 Illustration 2D de sous-divisions cylindriques pour le calcul de volume d'un rectangle dans un cylindre.

##### 5. Rectangle de forme numéro 2

Selon la position des plans  $y_-$  ou  $y_+$  dans l'intervalle  $[R_{min}, R_{max}]$  on distingue deux expressions possibles de la région illustrée dans la figure 4.8c.

Si le plan  $y_-$  coupe le cylindre on pose  $\ell_1$  la hauteur de la région cylindrique illustrée dans la figure 4.13 et la distance  $\ell_2$  égale à :

$$\ell_2 = |R_{max} - y_-| \quad (4.17)$$

On déduit alors les deux cas possibles pour calculer le volume  $V_{R,2}$  de la région illustrée dans la figure 4.8c en utilisant les expressions 4.9 et 4.10 pour le calcul de volume d'une région triangulaire.

(a) Si  $y_c < y_- < R_{max}$  et  $R_{max} < y_+$

$$V_{R,2} = \left[ \arccos\left(1 - \frac{\ell_2}{R}\right) + \left(\frac{\ell_2}{R} - 1\right) \sqrt{\frac{\ell_2}{R} \left(2 - \frac{\ell_2}{R}\right)} \right] \ell_1 R^2 - \sum_{i=1}^4 V_{T,2}(T_i) \quad (4.18)$$

(b) Si  $R_{min} < y_- < y_c$  et  $R_{max} < y_+$

$$V_{R,2} = \left[ \pi - \arccos \left( 1 - \frac{\ell_2}{R} \right) + \left( \frac{\ell_2}{R} - 1 \right) \sqrt{\frac{\ell_2}{R} \left( 2 - \frac{\ell_2}{R} \right)} \right] \ell_1 R^2 - \sum_{i=1}^4 V_{T,2}(T_i) \quad (4.19)$$

## 6. Rectangle de forme numéro 3

Selon la position des plans  $y_-$  et  $y_+$  dans l'intervalle  $[R_{min}, R_{max}]$  on distingue deux expressions possibles de la région illustrée dans la figure 4.8d.

Pour trouver les expressions possibles du volume  $V_{R,3}$  on pose  $\ell_1$  la hauteur de la région cylindrique illustrée dans la figure 4.13 et deux distances  $\ell_2$  et  $\ell_3$  variables selon la position des plans  $y_-$  et  $y_+$  dans l'intervalle  $[R_{min}, R_{max}]$ . On utilise de plus les expressions 4.12 et 4.14 pour calculer les volumes des régions triangulaires identifiées dans la figure 4.13.

(a) Si  $\left( y_c < y_- < R_{max} \text{ et } y_c < y_+ < R_{max} \right)$  ou  $\left( R_{min} < y_- < y_c \text{ et } R_{min} < y_+ < y_c \right)$

$$\begin{aligned} V_{R,3} = & \left[ \arccos \left( 1 - \frac{\ell_3}{R} \right) + \left( \frac{\ell_3}{R} - 1 \right) \sqrt{\frac{\ell_3}{R} \left( 2 - \frac{\ell_3}{R} \right)} \right. \\ & \left. - \arccos \left( 1 - \frac{\ell_2}{R} \right) - \left( \frac{\ell_2}{R} - 1 \right) \sqrt{\frac{\ell_2}{R} \left( 2 - \frac{\ell_2}{R} \right)} \right] \ell_1 R^2 \\ & - \sum_{i=1}^4 V_{T,3}(T_i) \end{aligned} \quad (4.20)$$

où :

$$\ell_2 = \begin{cases} |R_{min} - y_-| & \text{si } (y_c < y_- < R_{max} \text{ et } y_c < y_+ < R_{max}) \\ |R_{max} - y_-| & \text{si } (R_{min} < y_- < y_c \text{ et } R_{min} < y_+ < y_c) \end{cases} \quad (4.21)$$

$$\ell_3 = \begin{cases} |R_{min} - y_+| & \text{si } (y_c < y_- < R_{max} \text{ et } y_c < y_+ < R_{max}) \\ |R_{max} - y_+| & \text{si } (R_{min} < y_- < y_c \text{ et } R_{min} < y_+ < y_c) \end{cases} \quad (4.22)$$

(b) Si  $\left( R_{min} < y_- < y_c \text{ et } y_c < y_+ < R_{max} \right)$

$$\begin{aligned} V_{R,3} = & - \left[ \arccos\left(1 - \frac{\ell_3}{R}\right) + \left(\frac{\ell_3}{R} - 1\right) \sqrt{\frac{\ell_3}{R} \left(2 - \frac{\ell_3}{R}\right)} \right] \\ & + \left[ \arccos\left(1 - \frac{\ell_2}{R}\right) + \left(\frac{\ell_2}{R} - 1\right) \sqrt{\frac{\ell_2}{R} \left(2 - \frac{\ell_2}{R}\right)} \right] \ell_1 R^2 \\ & + \ell_1 \pi R^2 - \sum_{i=1}^4 V_{T,3}(T_i) \end{aligned} \quad (4.23)$$

où :

$$\ell_2 = |R_{min} - y_-| \quad (4.24)$$

et

$$\ell_3 = |R_{max} - y_+| \quad (4.25)$$

#### 4.2.2 Calcul de surfaces d'intersection

Les surfaces obtenues sur les plans  $x_-$ ,  $x_+$ ,  $z_-$  et  $z_+$  du CAR3D peuvent être des tranches elliptiques ou circulaires. Ainsi, si les deux plans  $y_-$  et  $y_+$  coupent le cylindre le problème se complique et on obtient des surfaces (sur les plans  $x_-$ ,  $x_+$ ,  $z_-$  et  $z_+$ ) elliptiques ou circulaires partielles et des surfaces non régulières (sur les plans  $y_-$  et  $y_+$ ) triangulaires, carrées, pentagonales ou hexagonales (voir figure 4.14).

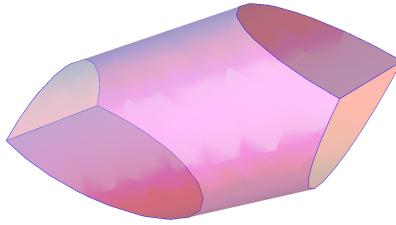


Figure 4.14 Exemple de surfaces obtenues par l'intersection des plans  $x_-$ ,  $x_+$ ,  $z_-$  et  $z_+$ .

Pour obtenir la surface d'une région elliptique partielle, on utilise l'expression d'une surface elliptique tronquée  $S_T(\theta_0, \theta_1, \theta_2)$  (voir figure 4.15) démontrée dans l'annexe D et on procède de la façon suivante selon la position des plans  $y_-$  et  $y_+$  par rapport le cylindre incliné. Les

angles  $\theta_0$ ,  $\theta_1$  et  $\theta_2$  utilisées pour calculer les surfaces dans tous les cas sont illustrées dans la figure 4.15.

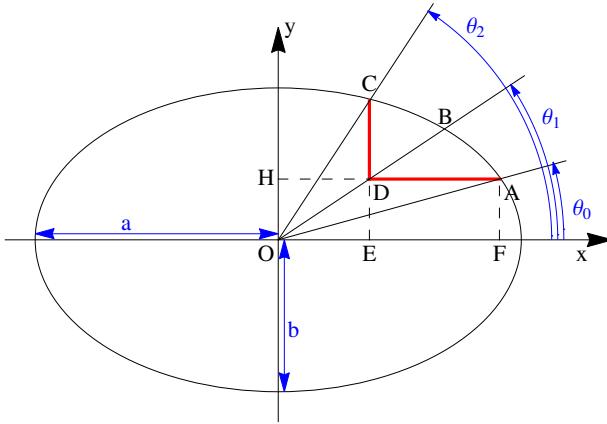


Figure 4.15 Angles  $\theta_0$ ,  $\theta_1$  et  $\theta_2$  du secteur elliptique tronqué  $CDA\widehat{AC}$ .

1. Si  $y_- < R_{min}$  et  $R_{max} < y_+$

Cas où il n'y a pas d'intersection avec le cylindre selon l'axe  $y$  (voir figure 4.16).

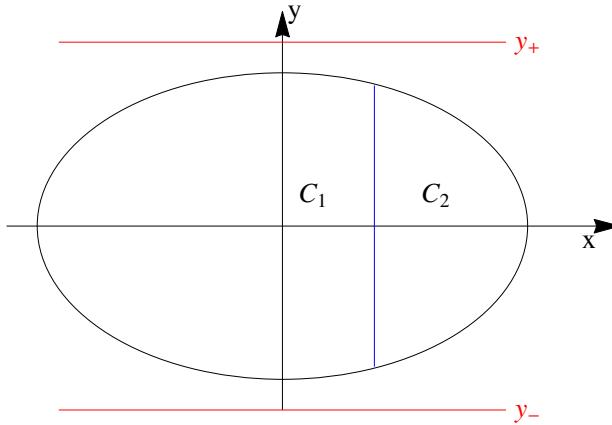


Figure 4.16 Illustration des surfaces elliptiques partielles si aucun plan n'intersecte l'ellipse selon l'axe  $y$ .

Les expressions des surfaces elliptiques  $C_1$  et  $C_2$  en fonction du grand axe  $a$  et du petit axe  $b$  de l'ellipse sont :

$$S(C_1) = \pi ab - 2 \times S_T(0, 0, \theta_2) \quad (4.26)$$

$$S(C_2) = 2 \times S_T(0, 0, \theta_2) \quad (4.27)$$

2. Si  $R_{min} < y_- < y_c$  et  $R_{max} < y_+$

La figure 4.17 illustre les secteurs elliptiques tronqués obtenus par intersection de deux droites perpendiculaires.

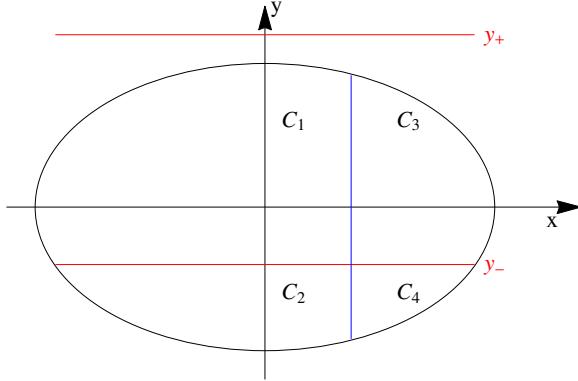


Figure 4.17 Surfaces elliptiques partielles si le plan  $y_-$  (ligne rouge) intersecte l'ellipse.

Les expressions des surfaces elliptiques  $C_1$  et  $C_3$  en fonction du grand axe  $a$  et du petit axe  $b$  de l'ellipse sont :

$$S(C_1) = S(\bigcup_{i=1}^4 C_i) - S(C_3 \cup C_4) - S(C_2 \cup C_4) + S(C_4) \quad (4.28)$$

$$S(C_3) = S(C_3 \cup C_4) - S(C_4) \quad (4.29)$$

Les angles  $\theta_0$ ,  $\theta_1$  et  $\theta_2$  utilisées pour établir les expressions de surfaces sont associées au secteur elliptique  $C_4$  de la figure 4.17. Donc on obtient :

$$S(C_1) = \pi ab - 2S_T(0, 0, \theta_2) - 2S_T(0, \pi/2, \pi/2) + S_T(\theta_0, \theta_1, \theta_2) \quad (4.30)$$

$$S(C_3) = 2S_T(0, 0, \theta_2) - S_T(\theta_0, \theta_1, \theta_2) \quad (4.31)$$

3. Si  $R_{min} < y_- < y_c$  et  $y_c < y_+ < R_{max}$

La figure 4.18 illustre les secteurs elliptiques tronqués obtenus par intersection de trois droites.

Les expressions des surfaces elliptiques  $C_2$  et  $C_5$  sont alors :

$$S(C_2) = S(\bigcup_{i=1}^6 C_i) - S(\bigcup_{i=4}^6 C_i) - S(C_1 \cup C_4) \quad (4.32)$$

$$+ S(C_4) - S(C_3 \cup C_6) + S(C_6)$$

$$S(C_5) = S(\bigcup_{i=4}^6 C_i) - S(C_4) - S(C_6) \quad (4.33)$$

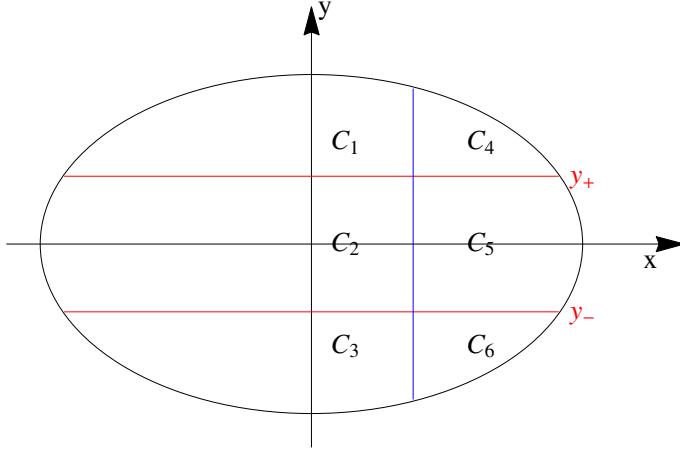


Figure 4.18 Illustration des surfaces elliptiques partielles si les plans  $y_-$  et  $y_+$  (lignes rouges) intersectent l'ellipse (cas 1).

Pour donner les expressions de surfaces, on utilise les notations suivantes pour les angles :

- $\theta_0^+, \theta_1^+$  et  $\theta_2$  pour le secteur elliptique  $C_4$
- $\theta_0^-, \theta_1^-$  et  $\theta_2$  pour le secteur elliptique  $C_6$

On utilise les signes “+” et “-” pour identifier respectivement une surface en dessus de la ligne  $y_+$  et une surface en dessous de la ligne  $y_-$  illustrée dans la figure 4.18. Donc on obtient :

$$\begin{aligned} S(C_2) &= \pi ab - 2S_T(0, 0, \theta_2) - 2S_T^+(0, \pi/2, \pi/2) + S_T(\theta_0^+, \theta_1^+, \theta_2) \\ &\quad - 2S_T^-(0, \pi/2, \pi/2) + S_T(\theta_0^-, \theta_1^-, \theta_2) \end{aligned} \quad (4.34)$$

$$S(C_5) = 2S_T(0, 0, \theta_2) - S_T(\theta_0^+, \theta_1^+, \theta_2) - S_T(\theta_0^-, \theta_1^-, \theta_2) \quad (4.35)$$

4. Si  $R_{min} < y_- < y_c$  et  $R_{min} < y_+ < y_c$  La figure 4.19 illustre les secteurs elliptiques tranqués obtenus par intersection de trois droites.

Les expressions des surfaces elliptiques  $C_2$  et  $C_5$  sont :

$$S(C_2) = S(\bigcup_{i=2}^6 C_i) - S(C_3 \cup C_6) - S(C_5 \cup C_6) + S(C_5) \quad (4.36)$$

$$S(C_5) = S(C_5 \cup C_6) - S(C_5) \quad (4.37)$$

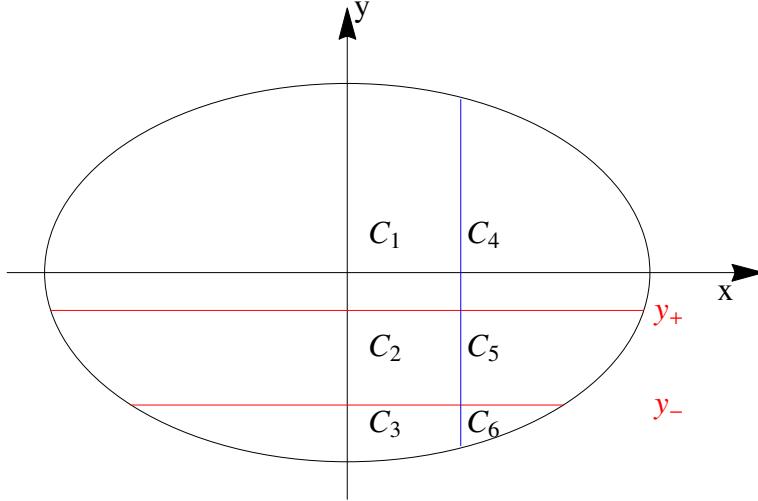


Figure 4.19 Illustration des surfaces elliptiques partielles si les plans  $y_-$  et  $y_+$  (lignes rouges) intersectent l'ellipse (cas 2).

Pour donner les expressions de surfaces, on utilise les notations suivantes pour les angles :

- $\theta_0^+, \theta_1^+$  et  $\theta_2$  pour le secteur elliptique  $C_4$
- $\theta_0^-, \theta_1^-$  et  $\theta_2$  pour le secteur elliptique  $C_6$

On utilise les signes “+” et “-” pour identifier respectivement une surface en dessus de la ligne  $y_+$  et une surface au dessous de la ligne  $y_-$  illustrée dans la figure 4.19. Donc on obtient :

$$\begin{aligned} S(C_2) &= 2S_T^+(0, \pi/2, \pi/2) - 2S_T^-(0, \pi/2, \pi/2) \\ &\quad - S_T(\theta_0^+, \theta_1^+, \theta_2) + S_T(\theta_0^-, \theta_1^-, \theta_2) \end{aligned} \quad (4.38)$$

$$S(C_5) = S_T(\theta_0^+, \theta_1^+, \theta_2) - S_T(\theta_0^-, \theta_1^-, \theta_2) \quad (4.39)$$

#### 4.2.3 Procédures de numérotation des volumes et surfaces

Le processus de numérotation des volumes suivra l'algorithme de numérotation suivant, avec des index entiers strictement positifs et successifs  $I_V$  :

1. Selon l'axe  $z$  la numérotation se fait de  $z^-$  à  $z^+$ . Les niveaux sont indexés par des entiers strictement positifs et successifs  $kv$ .
2. Selon l'axe  $y$  la numérotation ce fait de  $y^-$  à  $y^+$ . Les niveaux sont indexés par des entiers strictement positifs et successifs  $ju$ .
3. Selon l'axe  $x$  la numérotation ce fait de  $x^-$  à  $x^+$ . Les niveaux sont indexés par des

entiers strictement positifs et successifs  $iv$ .

4. S'il y a une géométrie de type **CARCEL** (incluant la géométrie cylindrique inclinée) la numérotation se fait de la région de plus faible rayon vers la région extérieure des cylindres. Les niveaux sont indexés par des entiers strictement positifs et successifs  $rv$ .

Le processus de numérotation des surfaces suivra l'algorithme de numérotation suivant, avec des index entiers strictement négatifs et successifs  $I_S$  :

1. Selon l'axe  $z$  la numérotation se fait de  $z^-$  à  $z^+$ . Les niveaux sont indexés par des entiers strictement positifs et successifs  $ks$ .
2. Selon l'axe  $y$  la numérotation se fait de  $y^-$  à  $y^+$ . Les niveaux sont indexés par des entiers strictement positifs et successifs  $js$ .
3. Selon l'axe  $x$  la numérotation se fait de  $x^-$  à  $x^+$ . Les niveaux sont indexés par des entiers strictement positifs et successifs  $is$ .
4. S'il y a une géométrie de type **CARCEL** (incluant la géométrie cylindrique inclinée), la numérotation se fait de la région de plus faible rayon vers la région extérieure des cylindres. Les niveaux sont indexés par des entiers strictement positifs et successifs  $rs$ .

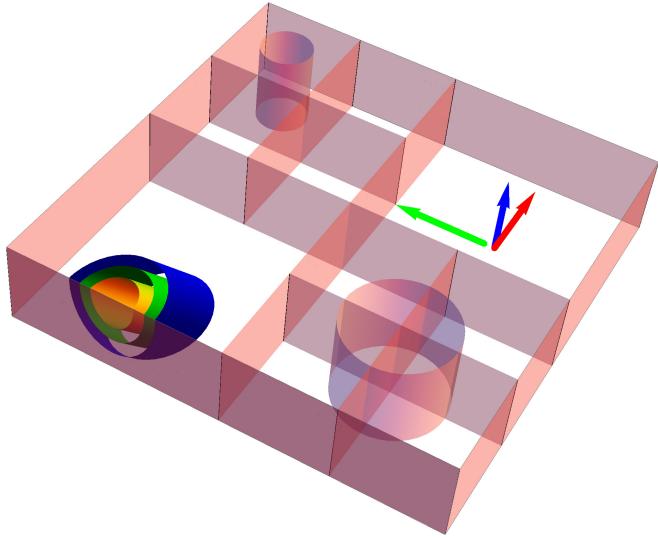
La figure 4.20a illustre un exemple d'un assemblage de CAR3D contenant un TUBEZ, un CARCELZ et un ensemble de régions annulaires concentriques de type CARCELZ inclinée, ainsi cette géométrie est décrite par le code DRAGON ci-dessous. La numérotation est présentée dans les figures 4.20b, 4.20c et 4.20d où les entiers négatifs indiquent les surfaces et les entiers positifs indiquent les volumes.

```

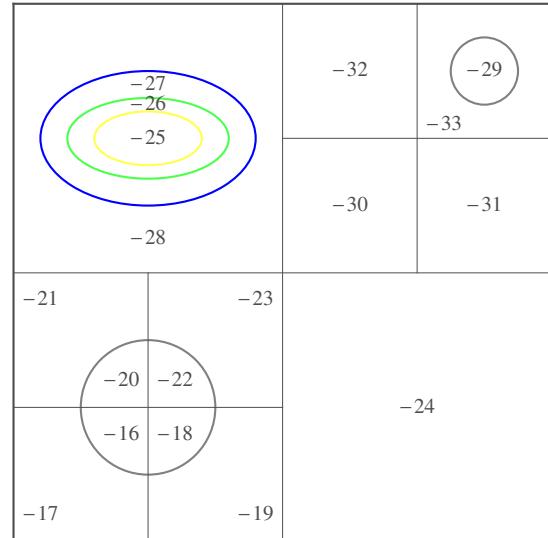
Geomtry := GEO: :: CAR3D    2 2 1
X- REFL  X+ REFL Y- REFL  Y+ REFL Z- REFL  Z+ REFL
CELL C1 C2 C3 C4
::: C1 := GEO: CARCELZ 1 1 1 1
MESHX  0.0 25.0 MESHY  0.0 25.0 MESHZ  0.0 25.0
RADIUS 0.0 10.0
MIX      1    2
SPLITX 2 SPLITY 2 ;
::: C2 := GEO: CAR3D 1 1 1
MESHX  0.0 25.0 MESHY  0.0 25.0 MESHZ  0.0 25.0
MIX      3 ;
::: C3 := GEO: CARCELZ 6 1 1 1
MESHX  0.0 25.0 MESHY  0.0 25.0 MESHZ  0.0 25.0

```

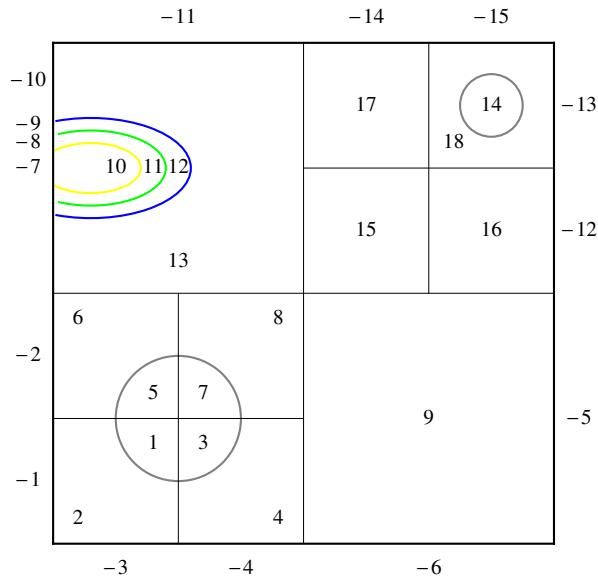
```
RADIUS 0.0    8.0    10.0   12.0
MIX        4       5       6       7
OFFCENTER -12.5 0.0 0.0
OMEGAY     0.2617 ;
::: C4 := GEO: CAR3D 1 1 1
MESHX  0.0 25.0 MESHY  0.0 25.0 MESHZ  0.0 25.0
SPLITX 2 SPLITY 2
CLUSTER P1
::: P1 := GEO: TUBEZ 1 1 1 1
MESHX  0.0 25.0 MESHY  0.0 25.0 MESHZ  0.0 25.0
RADIUS 0.0    4.0
MIX        8
NPIN 1 RPIN 8.84 APIN 0.785 ;
; ;
```



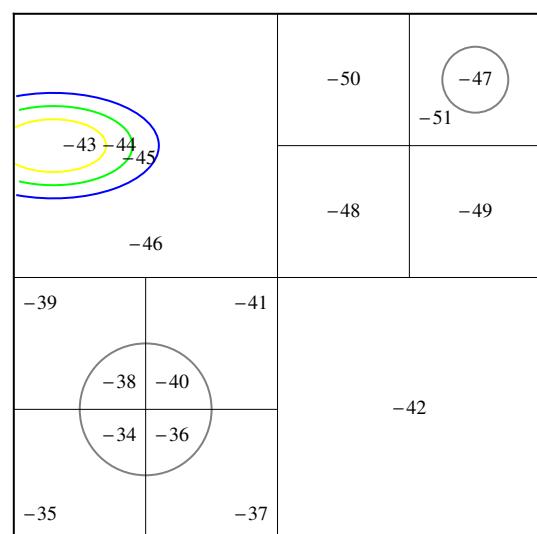
(a) Modèle d'un CAR3D contenant des cylindres inclinés concentriques.



(b) Numérotation des surfaces inférieures ( $z^-$ ).



(c) Numérotation des surfaces (entiers négatifs) et des régions (entiers positifs) du plan ( $xy$ ).



(d) Numérotation des surfaces supérieures ( $z^+$ ).

Figure 4.20 Numérotation des surfaces et volumes. Les flèches bleu, vert et rouge indiquent respectivement les axes  $z$ ,  $y$  et  $x$ .

### 4.3 Analyse de la géométrie CARCELZ inclinée

Dans cette section nous allons décrire comment DRAGON-5 identifie les régions et les surfaces associées à l'intersection des régions cylindrique inclinée et cartésienne. Ainsi, on décrit l'algorithme de calcul des surfaces et volumes identifiés.

#### 4.3.1 Transfert des données de **GEO** à **NXT**

Le transfert d'informations entre les différents modules de DRAGON-5 est assuré par des structures de données bien définies. Ces structures de données sont l'équivalent DRAGON-5 des répertoires UNIX qui peuvent contenir soit des enregistrements (fichiers UNIX) ou des sous-répertoires (des dossiers UNIX). Ils peuvent être stockés directement dans la mémoire (LINKED\_LIST) ou dans des fichiers binaires à accès direct (XSM\_FILE) via les utilitaires LCM disponibles dans la bibliothèque de GANLIB (Roy, 1999; Marleau *et al.*, 2013a; Hébert et Roy, 2016).

Chaque enregistrement dans une structure de données contient un nombre déterminé d'éléments d'un type fixe. Ainsi dans le module **GEO** les valeurs des angles de rotation du **CARCELZ** sont extraites par la fonction **REDGET** dans le vecteur de valeurs réelles (**ITYPLU=2**) nommé **ARPIN** de longueur **NPIN**. Ce vecteur est sauvegardé par la fonction **LCMPUT** dans le dossier nommé **OMEGAY** d'une structure de données identifiée par **IPLIST** en utilisant les instructions FORTRAN suivantes :

```

TYPE(C_PTR)                      IPLIST
INTEGER                         IPIN,NPIN,INTLIR
REAL, ALLOCATABLE, DIMENSION(:) :: OMEGAY
REAL                            REALIR
CHARACTER                       CARLIR*12
DOUBLE PRECISION                 DBLLIR
...
CALL REDGET(ITYPLU,INTLIR,REALIR,CARLIR,DBLLIR)
OMEGAY=REALIR
CALL LCMPUT(IPLIST,'OMEGAY',1,2,OMEGAY)

```

La description de l'enregistrement du vecteur **OMEGAY** dans le répertoire de la structure de données de la géométrie est décrite dans le tableau 4.3.

Tableau 4.3 Enregistrement du vecteur OMEGAY dans le répertoire /geometry/

Nom	Type	Condition	Unité	Commentaire
SIGNATURE	C*12			Signature de la structure de données (SIGNA =L_GEO)
OMEGAY	R(1)		rad	L'angle de rotation des régions cylindriques inclinées de la géométrie CARCELZ. La valeur <code>omg</code> de ce vecteur doit vérifier la condition : $0.0 \leq \text{omg} \leq 2\pi$

Le module **GEO** écrit au fur et à mesure, lors de la lecture des informations géométrique, dans des fichiers de type **LINKED\_LIST** les informations géométriques. Ces fichiers sont organisés dans des sous-répertoires indiquant chacun un niveau de géométrie. Le répertoire principal regroupant tous les sous-répertoires est identifié par une signature indiquant le type d'informations stockées (voir tableau 4.3). L'adresse mémoire de ce répertoire est transférée au module **NXT** par un pointeur stocké dans un vecteur nommé **KENTRY**. La vérification de l'existence du répertoire `/geometry/` s'effectue par les utilitaires **LCM** en utilisant les instructions FORTRAN suivant :

```

TYPE(C_PTR)          KENTRY(NENTRY)
...
DO IEN=1,NENTRY
  IF(IENTRY(IEN) .EQ. 1 .OR. IENTRY(IEN) .EQ. 2) THEN
    IF(JENTRY(IEN) .EQ. 0) THEN
      ...
    ELSE
      CALL LCMGTC(KENTRY(IEN), 'SIGNATURE', 12, 1, HSIGN)
      IF(HSIGN .EQ. 'L_GEO') THEN
        IPGEO=KENTRY(IEN)
      ...
    ENDIF
  ENDIF
ENDDO

```

La fonction **LCMGTC** retourne la signature du répertoire d'adresse mémoire liée au pointeur **KENTRY(IEN)**. Si le répertoire existe, le pointeur **IPGEO** est initialisé à **KENTRY(IEN)** qui indique l'adresse mémoire des structures de données géométrique.

L'identification du pointeur **IPGEO** donne accès à **NXT** pour extraire les données stockées dans la mémoire allouée pour la géométrie à l'aide des utilitaires **LCM**. Par exemple en utilisant les

instructions FORTRAN suivantes on peut extraire la valeur de l'angle **OMEGAY** du CARCELZ s'il existe :

```

    ...
    CALL LCMLEN(IPGEO,'OMEGAY      ',ILCMLN,ILCMTY)
    IF(ILCMLN .GT. 0)
    > CALL LCMGET(IPGEO,'OMEGAY      ',ANGLE)
    DAMESH(-1,4)=DBLE(ANGLE)
    ...

```

La fonction **LCMLEN** recherche dans l'adresse mémoire du répertoire identifié par le pointeur **IPGEO** l'existence de l'enregistrement '**OMEGAY<sub>LLLLLLL</sub>**', s'il existe elle retourne un entier (**ILCMLN**) supérieur à zéro qui indique la longueur du vecteur trouvé stocké sous le nom '**OMEGAY<sub>LLLLLLL</sub>**' (**ILCMLN**=-1 si le nom indique un sous-répertoire et **ILCMLN**=0 si le nom n'existe pas). Ensuite si l'existence de l'angle est prouvée, la fonction **LCMGET** extrait la valeur stockée dans cet enregistrement dans la variable **ANGLE**. Cette valeur est transformée en double précession et stockée dans l'élément de la matrice **DAMESH(-1,4)**.

#### 4.3.2 Structure de routines de calcul de volumes et de surfaces

Dans les sections précédentes, on a établi la méthodologie de calcul de surfaces et de volumes pour un cylindre incliné. Ainsi on a présenté les équations analytiques de calcul surfacique et volumique. Nous allons nous concentrer dans cette section sur l'algorithme numérique qui permet l'analyse des cas d'intersections pour identifier les surfaces et les volumes à calculer avec les formules analytiques adéquates présentées précédemment.

La projection des deux géométries sur le plan *xz* qui passe par le centre du cylindre (position  $y_c$ ) donne une intersection entre deux rectangles dont les arêtes et les coins sont identifiés par des indices identifiants numériques (voir figure 4.21). Ces identifiants proviennent des règles de notations ci-dessous utilisées pour identifier les régions, les coins et les arêtes :

- Le rectangle associé à la projection de la région cartésienne de CAR3D sur le plan *xz* passant par le centre du cylindre  $y_c$  selon l'axe *y* est appelé univers 0.
- Le rectangle associé à la projection du cylindre incliné de CARCELZ sur le plan *xz* passant par le centre du cylindre  $y_c$  selon l'axe *y* est appelé univers 1.
- Les arêtes sont identifiées par trois chiffres dont le premier fixe égal à 1, le deuxième désigne le numéro de l'univers (0 ou 1) et le troisième égal à : 1 si c'est une arête  $x_-$ , 2 si c'est une arête  $z_+$ , 3 si c'est une arête  $x_+$  et 4 si c'est une arête  $z_-$  (voir figure 4.21).

- Un coin de l'univers 0 est indexé par le nombre 100.
- Un coin de l'univers 1 est indexé par le nombre 200.

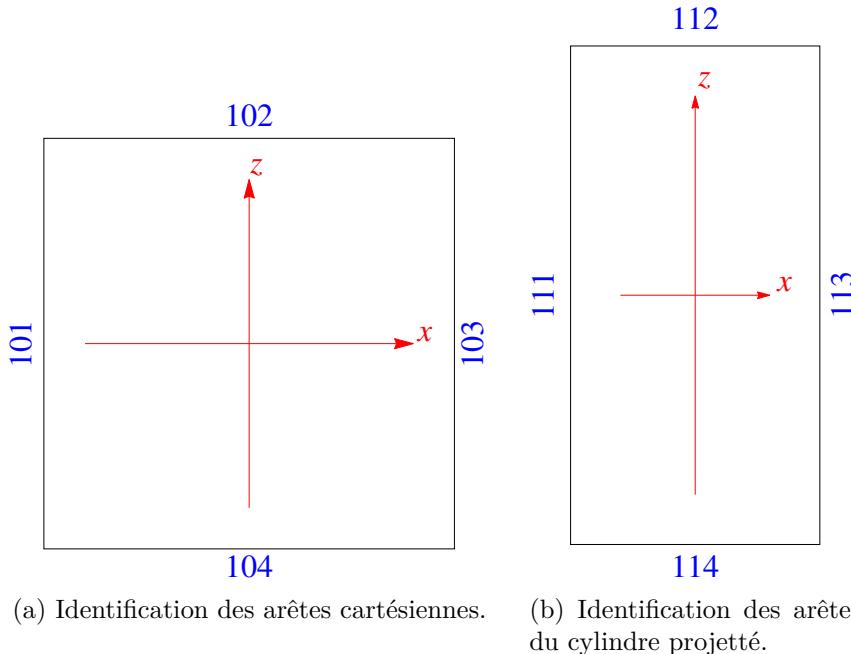


Figure 4.21 Identification des arêtes sur le plan ( $xz$ ).

Dans l'annexe E on présente l'histogramme des routines FORTRAN utilisées pour analyser l'intersection de la région cartésienne et cylindrique inclinée. Le fonctionnement de ces routines peut être décrit par l'algorithme ci-dessous.

1. Initialiser la variable **SORV** à 1. Cette variable permet d'exécuter les routines de calcul de volume et d'ignorer les routines de calcul de surfaces si sa valeur est égale à 1. Si sa valeur est égale à 0 les routines de calcul de surfaces s'exécutent et les routines de calcul de volumes seront arrêtées.
2. Trouver les coordonnées  $(x, z)$  de chaque coin des deux univers. Les arêtes de l'univers 1 gardent les mêmes notations même si elles tournent autour de l'axe  $y$ . Les droites  $AB$ ,  $BC$ ,  $CD$  et  $DA$  sont nommées respectivement 111, 112, 113 et 114 (voir figures 4.21 et 4.22). Le calcul des coordonnées des coins de l'univers 1 est montré dans l'annexe F et ces données sont sauvegardées dans les vecteurs **XCORNER1(i)** et **ZCORNER1(i)**.
3. Trouver les premiers points d'intersection entre les deux univers (voir figure 4.23a).
4. Pour chaque point d'intersection, on trace deux lignes, une parallèle à la droite 101 et l'autre parallèle à la droite 102 (lignes rouges sur la figure 4.23a).

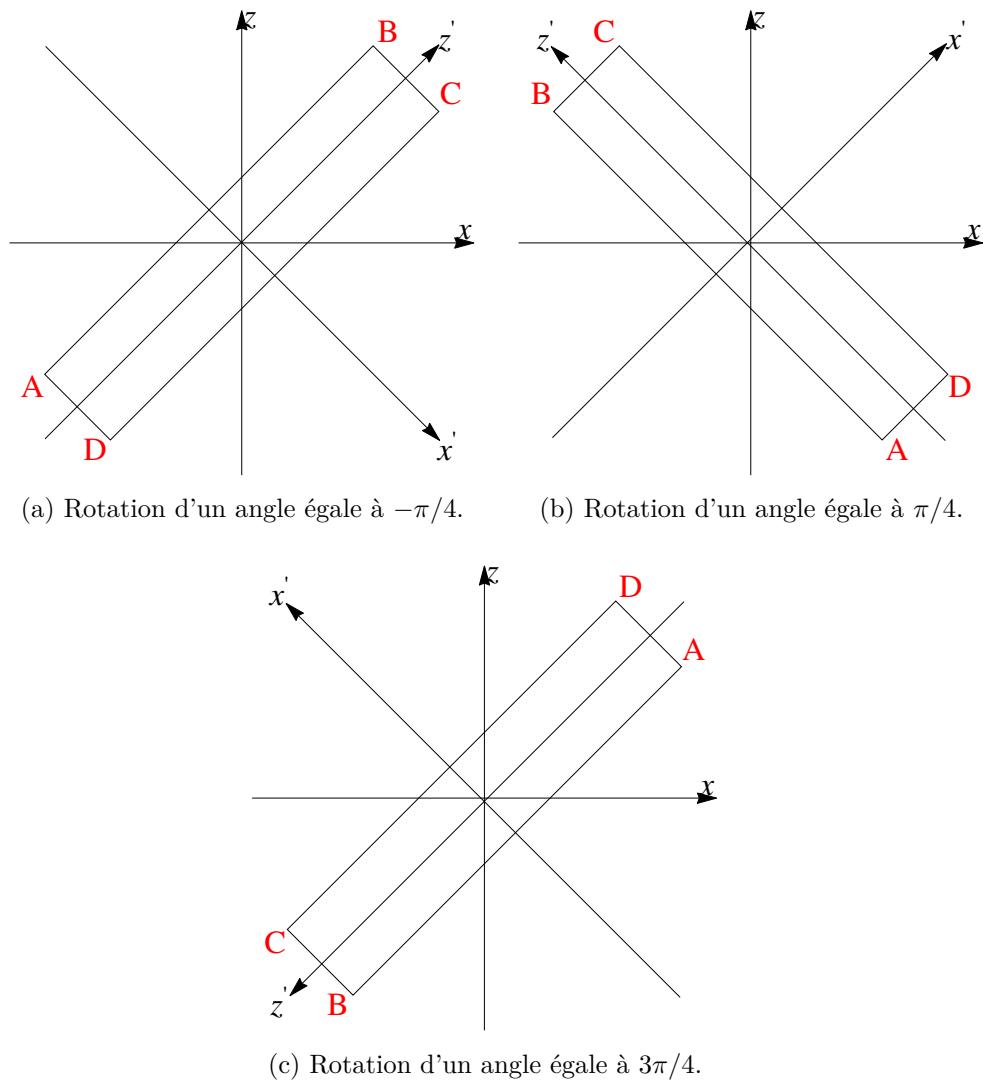


Figure 4.22 Exemple de rotation de l'univers 1.

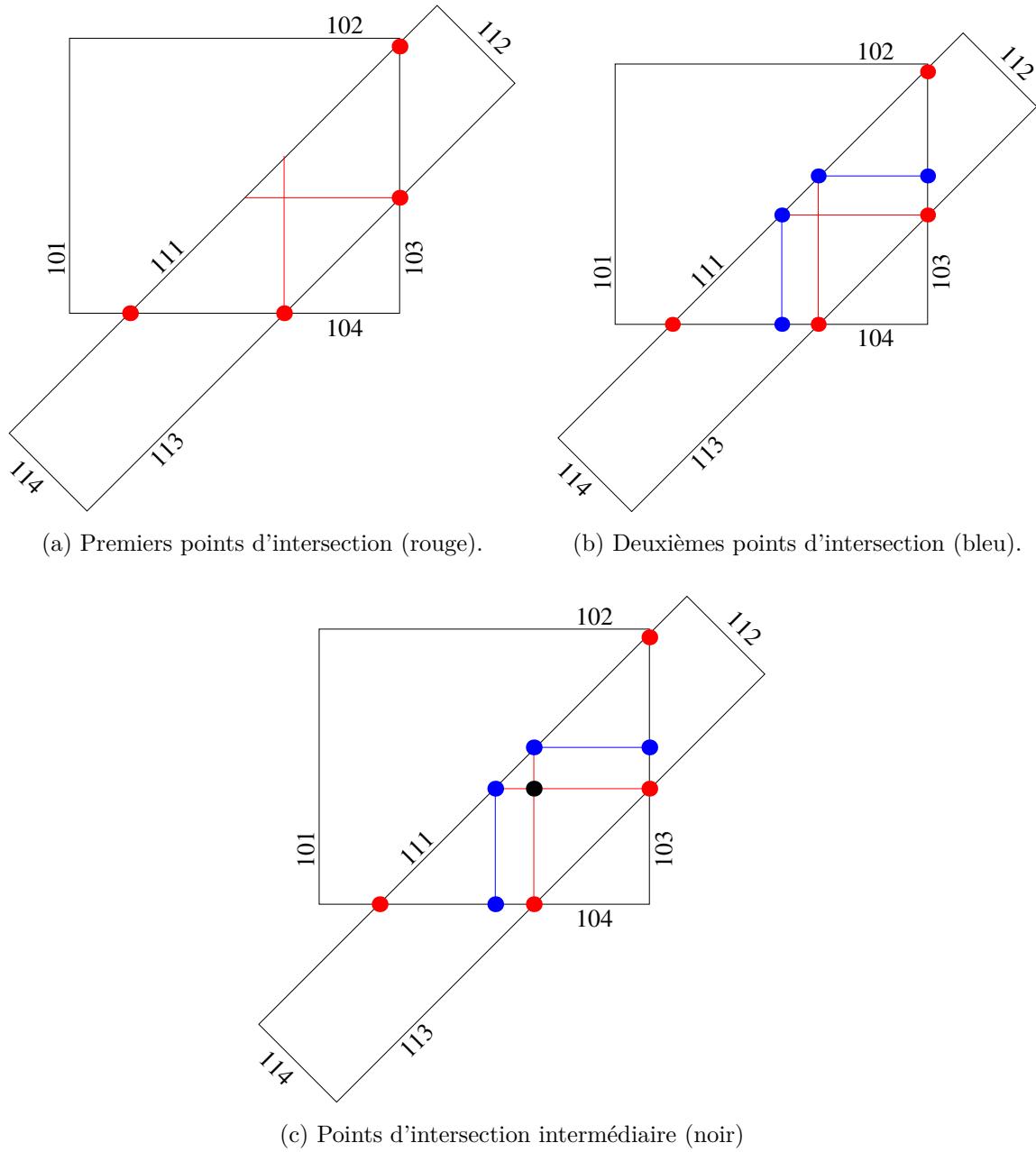


Figure 4.23 Exemple de points d'intersection entre univers 0 et 1.

5. Trouver les points d'intersection entre toutes les droites tracées dans l'étape 4 et l'univers 1 (deuxièmes points d'intersection) et ne conserver que les lignes et les points d'intersection appartenant à la région d'intersection entre les deux univers.
6. Pour chaque deuxième point d'intersection, on trace deux lignes, une parallèle à la droite 101 et l'autre parallèle à la droite 102 (lignes bleues sur la figure 4.23b).
7. Trouver les points d'intersection entre toutes les droites tracées dans l'étape 6 et l'univers 0 et ne conserver que les lignes et les points d'intersection appartenant à la région d'intersection entre les deux univers. Ces points sont ajoutés à la liste des deuxièmes points d'intersection (points bleus sur la figure 4.23b).
8. Trouver les points intermédiaires : l'intersection entre les lignes rouges et lignes bleues donne les coordonnées des points intermédiaires (points noirs sur la figure 4.23c).
9. Trier les coordonnées  $x$  de tous les points trouvés dans les étapes précédentes en leur ajoutant les coordonnées de plans 101 et 102, ensuite les sauvegarder dans le vecteur XMAT.
10. Trier les coordonnées  $z$  de tous les points trouvés dans les étapes précédentes en leur ajoutant les coordonnées de plans 101 et 102, ensuite on les sauvegarde dans le vecteur ZMAT.
11. Transformer l'intersection entre les deux univers en base de données matricielle sous la forme d'une grille de noeuds 2D contenant l'identification de chaque point d'intersection et sa position géométrique (voir figure 4.24). Numériquement la transformation se fait par l'algorithme imbriqué suivant :
  - (a) Définir une matrice XZMAT de dimension ( $\dim(ZMAT)$ ,  $\dim(XMAT)$ ).
  - (b) Remplir tous les éléments de la matrice XZMAT selon les instructions successives suivantes (voir exemple sur la figure 4.25) :
    - i.  $XZMAT(i, j)=300$  si le point  $(XMAT(i), ZMAT(j))$  existe, sinon  $XZMAT(i, j)=0$ . L'identifiant 300 indique que le point de position  $(i, j)$  correspond à un point d'intersection intermédiaire (point vert).
    - ii. Si le point  $(XMAT(i), ZMAT(j))$  appartient à la droite dont l'identifiant est ID ( $ID= 101$  ou  $102$  ou  $103$  ou  $104$ ) alors  $XZMAT(i, j)=ID$ .
    - iii. Si le point  $(XMAT(i), ZMAT(j))$  appartient à la droite dont l'identifiant est ID ( $ID= 111$  ou  $112$  ou  $113$  ou  $114$ ) alors  $XZMAT(i, j)=ID$ .
    - iv. Si le point  $(XMAT(i), ZMAT(j))$  correspond à un coin de l'univers 0 dont l'identifiant est 100 alors  $XZMAT(i, j)=100$ .

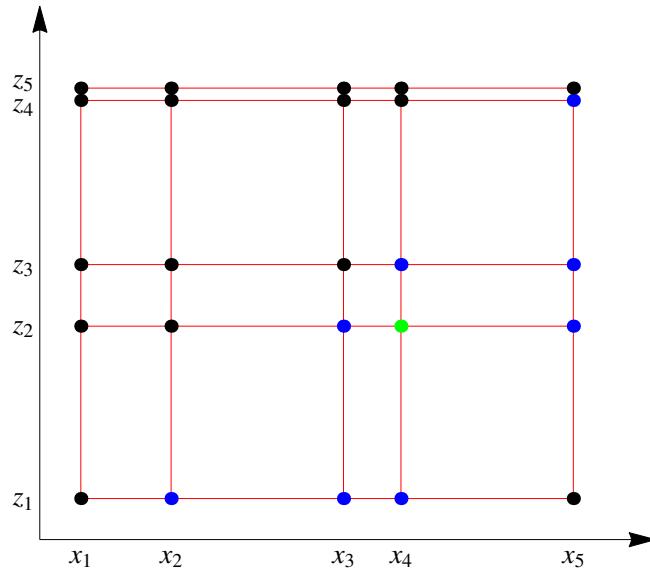


Figure 4.24 Grille des nœuds 2D illustrant les points d’intersection (rouge), points intermédiaires (verte) et points nuls (noir).

000 - 000 - 000 - 000 - 000
000 - 000 - 000 - 000 - 111
000 - 000 - 000 - 111 - 103
000 - 000 - 111 - 300 - 113
000 - 111 - 104 - 113 - 000

Figure 4.25 Matrice des identifiants XZMAT de la géométrie 4.23.

- v. Si le point ( $XMAT(i)$ ,  $ZMAT(j)$ ) correspond à un coin de l’univers 1 dont l’identifiant est 200 alors  $XZMAT(i, j)=200$ .
12. Exécuter le calcul de surface et ignorer le calcul des volumes si  $SORV = 0$ .
  13. Si la variable  $SORV = 1$  on calcule le volume de la région d’intersection par une boucle

limitée par  $\dim(\text{ZMAT})$ . L'algorithme de calcul de volume est le suivant :

```

niveau  $k_1=1$ ;
while Le niveau  $k_2$  est inférieur où égal à  $\dim(\text{ZMAT})$  do
    if Les extrémités  $XMAT(i)$  gauches et  $XMAT(j)$  droites diffèrent de 000 et 300 then
        Sauvegarder ces deux points avec leurs identités;
        Ordonner les points du niveau  $k_1$  et du niveau  $k_2$  de  $x_-$  à  $x_+$  ensuite de  $z_-$  à  $z_+$ ;
        Calculer le volume entre niveaux  $k_1$  et le niveau  $k_2$  et ajouter au volume précédent;
        niveau  $k_1=\text{niveau } k_2$ ;
        niveau  $k_2=\text{niveau } k_2+1$ ;
    else
        niveau  $k_2=\text{niveau } k_2+1$ ;
    end
end

```

### **Algorithm 1:** Algorithme de calcul de volume.

L'organisation des points entre les deux niveaux est de grande importance pour calculer le volume correctement. En effet, l'algorithme 1 exige que l'organisation se fasse de  $x_-$  à  $x_+$  ensuite de  $z_-$  à  $z_+$  comme illustré dans l'exemple 4.26.

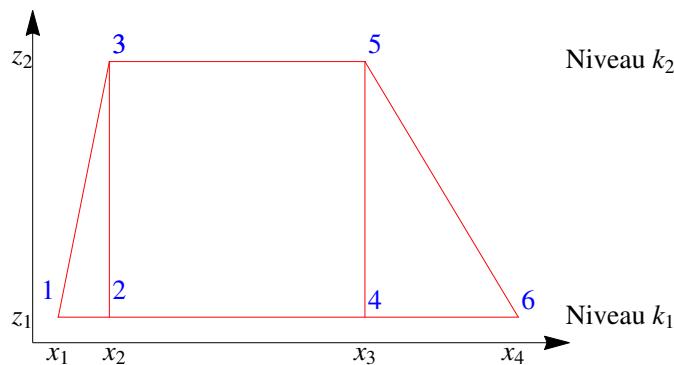


Figure 4.26 Organisation de six points entre deux niveaux qui forment deux triangles et un rectangle.

14. Retourner à l'étape 2 et déplacer le plan de la projection ( $x-z$ ) sur la position  $y_+$  de la région cartésienne et refaire toutes les étapes. Si une intersection existe, l'algorithme

2 de calcul de la première surface s'exécute.

niveau  $k_1=1$ ;

**while** *Le niveau  $k_2$  est inférieur où égal à  $\dim(ZMAT)$*  **do**

read current;

**if** *Les extrémités  $XMAT(i)$  gauches et  $XMAT(j)$  droites diffèrent de 000 et 300* **then**

Sauvegarder ces deux points avec leurs identités;

Ordonner les points du niveau  $k_1$  et du niveau  $k_2$  de  $x_-$  à  $x_+$  ensuite de  $z_-$  à  $z_+$ ;

Calculer la surface entre niveaux  $k_1$  et le niveau  $k_2$  et ajouter à la surface précédente;

niveau  $k_1=\text{niveau } k_2$ ;

niveau  $k_2=\text{niveau } k_2+1$ ;

**else**

| niveau  $k_2=\text{niveau } k_2+1$ ;

**end**

**end**

Changer la valeur de la variable **SORV** à 0;

**Algorithm 2:** Algorithme de calcul de surface.

15. Retourner à l'étape 2 et déplacer le plan de la projection  $(x - z)$  sur la position  $y_-$  de la région cartésienne et refaire toutes les étapes. Si une intersection existe, l'algorithme 2 de calcul de surface s'exécute.
16. Retourner à l'étape 2 et déplacer le plan de la projection  $(y - z)$  sur la position  $x_+$  de la région cartésienne et refaire toutes les étapes avec mise à jour des axes. Si une intersection existe, l'algorithme 2 de calcul de surface s'exécute.
17. Retourner à l'étape 2 et déplacer le plan de la projection  $(y - z)$  sur la position  $x_-$  de la région cartésienne et refaire toutes les étapes avec mise à jour des axes. Si une intersection existe, l'algorithme 2 de calcul de surface s'exécute.
18. Retourner à l'étape 2 et déplacer le plan de la projection  $(y - x)$  sur la position  $z_+$  de la région cartésienne et refaire toutes les étapes avec mise à jour des axes. Si une intersection existe, l'algorithme 2 de calcul de surface s'exécute.
19. Retourner à l'étape 2 et déplacer le plan de la projection  $(y - x)$  sur la position  $z_-$  de la région cartésienne et refaire toutes les étapes avec mise à jour des axes. Si une intersection existe, l'algorithme 2 de calcul de surface s'exécute.

## 4.4 Processus de calcul des lignes 3D d'intégration de la géométrie CARCELZ inclinée

Dans les sections précédentes, on a présenté les modifications apportées à la partie d'analyse de la géométrie où l'on peut trouver les enregistrements qui sont essentiels pour tous les autres calculs dans DRAGON-5 impliquant la géométrie, y compris les volumes, les surfaces, le mélange associé à chaque région, les indices surfacique et volumique et les conditions aux limites. La deuxième tâche du module NXT consiste à calculer la longueur des lignes d'intégration et à créer les enregistrements contenant toutes les informations nécessaires pour traiter la quadrature numérique spécifiée dans ce module.

On présente dans cette section le développement numérique ajouté à NXT pour qu'il puisse calculer les lignes d'intégration pour des régions cylindriques inclinées.

### 4.4.1 Vérification de l'existence d'une intersection

Soit un cylindre de centre  $O_C$  et incliné d'un angle  $\theta$  autour de l'axe  $y_0$  de la base orthonormée  $B_0 = (x_0, y_0, z_0)$  et un demi-segment (ligne d'intégration) d'origine  $O_T$  dont la direction est définie par les cosinus directeurs  $(\eta, \xi, \mu)$  (voir figure 4.27). Afin de vérifier l'intersection entre le demi-segment et le cylindre incliné, on tourne la base  $B_0$  d'un angle égal à  $\theta$  autour de l'axe  $y_0$  et on exprime les coordonnées des points  $O_C$  et  $O_T$  ainsi que la direction du demi-segment dans le référentiel  $(O, x_1, y_1, z_1)$ . Cette transformation ramène la géométrie à l'équivalence d'une intersection d'un demi-segment avec un cylindre orienté selon l'axe  $z_1$ .

La matrice de passage de la base  $B_0$  à la base  $B_1$  est donnée par :

$$P_{B_1}^{B_0} = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & 0 & \sin(\theta) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin(\theta) & 0 & \cos(\theta) \end{pmatrix} \quad (4.40)$$

Tout vecteur  $\vec{X}_0$  du référentiel  $(O, x_0, y_0, z_0)$  s'écrit dans le référentiel  $(O, x_1, y_1, z_1)$  sous la forme :

$$\vec{X}_1 = P_{B_1}^{B_0} \vec{X}_0 \quad (4.41)$$

La direction du demi-segment est donc :

$$\begin{pmatrix} \eta' \\ \xi' \\ \mu' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & 0 & \sin(\theta) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin(\theta) & 0 & \cos(\theta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta \\ \xi \\ \mu \end{pmatrix} \quad (4.42)$$

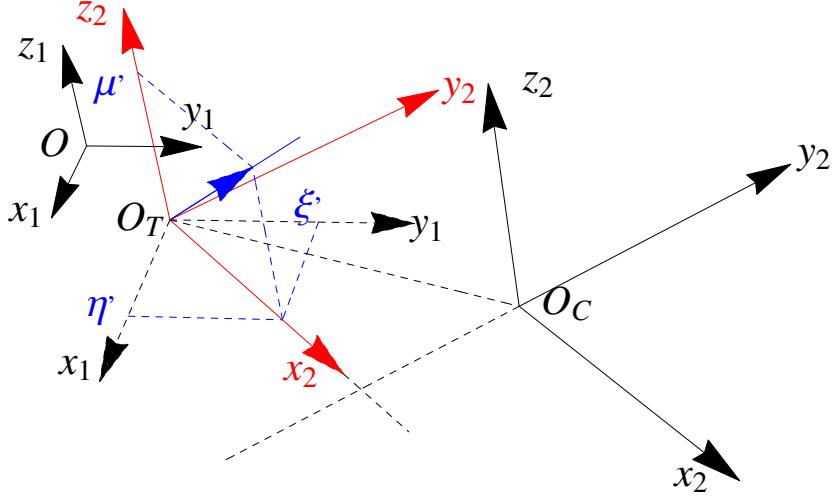


Figure 4.27 Illustration d'une ligne d'intégration (en bleu) et démonstration graphique du référentiel  $(O_C, x_2, y_2, z_2)$ .

Le processus utilisé dans DRAGON-5 pour vérifier l'intersection entre le cylindre d'axe  $z_1$  et le demi-segment consiste à projeter les deux géométries sur le plan  $(x_1 - y_1)$  et effectuer les opérations suivantes :

1. La projection du segment de droite sur le plan  $(x_1 - y_1)$  donne l'axe  $x_2$  d'une nouvelle base  $B_2$  obtenue par rotation autour l'axe  $z_1$  par la matrice de passage  $P_{B_2}^{B_1}$  suivante :

$$P_{B_2}^{B_1} = \begin{pmatrix} \frac{\eta'}{\sqrt{1-\mu'^2}} & \frac{\xi'}{\sqrt{1-\mu'^2}} & 0 \\ -\frac{\xi'}{\sqrt{1-\mu'^2}} & \frac{\eta'}{\sqrt{1-\mu'^2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.43)$$

2. Les coordonnées du vecteur  $\overrightarrow{O_C O_T}$ , le vecteur qui lie l'origine du cylindre et l'origine de la ligne d'intégration, dans le référentiel  $(O_C, x_2, y_2, z_2)$  sont données par :

$$\begin{pmatrix} x_p \\ y_p \\ z_p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\eta'}{\sqrt{1-\mu'^2}} & \frac{\xi'}{\sqrt{1-\mu'^2}} & 0 \\ -\frac{\xi'}{\sqrt{1-\mu'^2}} & \frac{\eta'}{\sqrt{1-\mu'^2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_T - x_C \\ y_T - y_C \\ z_T - z_C \end{pmatrix} \quad (4.44)$$

3. Si la valeur absolue de la distance  $y_M$  est inférieure ou égale au rayon du cylindre,

l'intersection existe (voir figure 4.28).

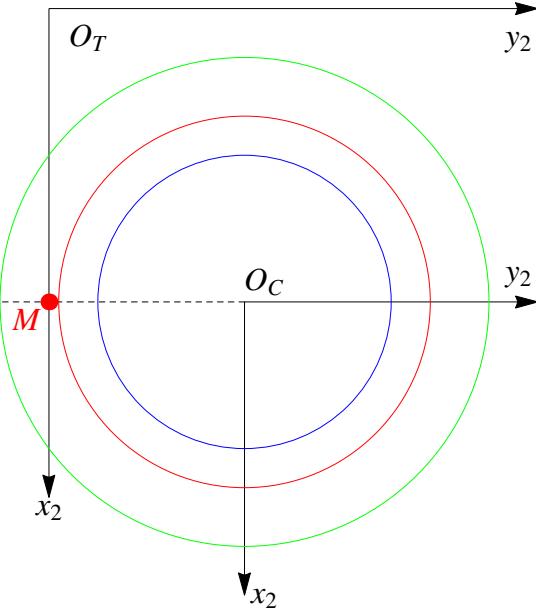


Figure 4.28 Illustration de cylindres concentriques dans le plan ( $x_2 - y_2$ ). La ligne d'intégration n'intersecte que le cylindre vert.

#### 4.4.2 Calcul de coordonnées de points d'intersection

Si une intersection est confirmée par le module **NXTLCY**, le processus se poursuit pour trouver les coordonnées de toutes les intersections avec les  $NP$  cylindres concentriques. Les intersections sont évaluées du rayon du cylindre le grand  $R_{NP}$  vers le cylindre de rayon le plus petit  $R_1$  et pour chaque cylindre le nombre d'intersections évalué doit être 0 ou 2 (la ligne ne touche pas le cylindre ou il l'intersecte en deux positions). Pour chaque cylindre l'information d'intersection enregistrée est deux distances ( $L_N^-$  et  $L_N^+$ ) indiquant la longueur du parcours, sur la ligne d'intégration, entre l'origine du demi-segment et les points d'intersection. Après le test de tous les cylindres, l'information sur les intersections est organisée de la façon suivante.

Tableau 4.4 Organisation des longueurs de segment d'intégration dans un **CARCELZ** incliné.

Rayon	$R_{NP}^-$	...	$R_N^-$	...	$R_1^-$	$R_1^+$	...	$R_N^+$	...	$R_{NP}^+$
Longueur	$L_{NP}^-$	...	$L_N^-$	...	$L_1^-$	$L_1^+$	...	$L_N^+$	...	$L_{NP}^+$

Puisque la géométrie cylindrique inclinée qu'on a ajoutée dans DRAGON-5 peut être touchée par toutes les surfaces de l'environnement cartésien emboîtant le cylindre incliné, des instructions FORTRAN doivent être ajoutées pour éliminer tous les points qui se trouvent à l'extérieur de la région cartésienne. Ces instructions consistent à tester si chaque point d'intersection est inclus dans la région cartésienne, c'est-à-dire limitée par les intervalles  $[x_-, x_+]$ ,  $[y_-, y_+]$  et  $[z_-, z_+]$  et à éliminer tout point qui ne respecte pas ces conditions.

Au tableau des points d'intersection de la ligne d'intégration et du cylindre incliné, on ajoute les points d'intersection de la même ligne avec les subdivisions de la géométrie cartésien (il peut y avoir des subdivisions générées à partir des options **MESHX**, **MESHY** et **MESHZ**). Donc une instruction FORTRAN est utilisée pour organiser le vecteur de tous les points d'intersection sur cette ligne d'intégration.

Le processus de calcul de longueurs des segments d'intégration se termine par l'évaluation de la longueur de chaque segment joignant deux points d'intersection successifs auquel est associé le numéro de la région correspondant selon la numérotation générée dans la partie d'analyse de la géométrie. L'enregistrement final pour cette intersection doit contenir la longueur du segment et le numéro de la région, cela permet le calcul de l'intégrale de la section efficace sur ce segment utilisé dans le calcul de flux. Ainsi, l'instruction identifie les deux numéros de surfaces contenant les deux points d'intersection initial et final.

## CHAPITRE 5 PRÉSENTATION DES MODÈLES DE SIMULATION

Durant les phases de recherche, de développement, de conception et d'exploitation, la simulation numérique des réacteurs nucléaires est essentielle. La détermination des paramètres d'entrée (type et masse de combustible, compositions atomiques, enrichissement...) et de sortie (Burnup, énergie, réactivité, température...) repose essentiellement sur la résolution de l'équation de transport neutronique ainsi que sur la résolution de l'équation de transfert de chaleur. La résolution de l'équation de transport dans une géométrie fortement hétérogène et complexe, comme un réacteur nucléaire, est impossible si on ne fait pas intervenir des approximations sur les intégrales et les dérivés qui le gouvernent. Deux types de codes sont employés dans les phases de recherche, de développement, de conception et d'exploitation dont les paramètres d'entrée/sortie sont échangés pour se rapprocher le plus possible de la situation réelle :

- Codes de transfert thermique : élaborés par des ingénieurs pour résoudre numériquement les équations de thermodynamiques dans un réacteur nucléaire. Ces codes reposent sur les paramètres thermodynamiques des fluides dans le réacteur tels que la pression, le débit d'écoulement, la source de chaleur, etc. Plusieurs codes de thermique des réacteurs existent dans le monde, dont par exemple le code CATHENA (Hanna, 1998) qui est utilisé pour l'analyse des réacteurs CANDU.
- Code de neutroniques : élaborés pour résoudre l'équation de transport neutronique. Trois types de codes sont principalement disponibles : 1) les codes Monte-Carlo où l'approche consiste à résoudre l'équation de transport en utilisant un processus stochastique en utilisant les lois de la probabilité, des exemples de tels codes étant MCNP et le code SERPENT. 2) Les codes déterministes qui utilisent la discrétisation de l'équation de transport neutronique et la résout dans un assemblage de cellule, comme le fait le code DRAGON. 3) La dernière catégorie utilise l'approximation de la diffusion pour résoudre le problème sur le cœur en entier comme DONJON.

La plupart des réacteurs nucléaires possèdent un système de contrôle de la réactivité basé sur l'insertion de barres d'absorbants solides. La simulation de ces réacteurs en présence de barres de contrôle est un enjeu considérable de sûreté qui soulève beaucoup d'attention. Dans le cas du réacteur SCWR, ces barres sont localisées au-dessus du cœur et sont insérées avec une inclinaison par rapport à la verticale. Pour estimer l'efficacité de telles barres, le DRAGON-5 doit traiter une supercellule 3D. Si on désire évaluer l'efficacité de l'ensemble de barres de contrôle on doit par contre effectuer un calcul de cœur, en utilisant l'approximation de la diffusion.

Afin que la simulation de la supercellule soit valide, la stratégie de simulation avec DRAGON-5 doit être comparée à la simulation du code Monte-Carlo SERPENT, en utilisant les mêmes conditions que celles de la supercellule définie dans stratégie de DRAGON, c'est-à-dire la même description géométrique et les mêmes mélanges. Pour l'ensemble des simulations proposées dans cette thèse les simulations SERPENT servent de calcul de référence pour les modèles DRAGON. Cependant, les simulations DONJON ne peuvent pas être comparées à des modèles Monte-Carlo, car SERPENT ne permet pas à ce jour la définition de mélanges à partir de sections efficaces macroscopiques.

Ce chapitre présente la deuxième partie de cette thèse qui consiste à tester le bon fonctionnement des modifications apportées à la version 5.0.1a de DRAGON-5 et à évaluer l'efficacité de barres de contrôle inclinées. On décrit en premier lieu, les modèles de la supercellule SCWR-62 contenant une barre de contrôle inclinée en trois dimensions à l'aide du code DRAGON-5 version 5.0.1a, et les modèles des cellules unitaires en deux dimensions utilisés pour générer les bases de données de sections efficaces macroscopiques requises dans les calculs de cœur par DONJON version 3.02d. En deuxième lieu, on présente les modèles Monte-Carlo de la supercellule SCWR-62, équivalant aux modèles DRAGON, à l'aide du code SERPENT version 1.19. Enfin, on présente les modèles DONJON qui permettent l'évaluation de l'efficacité des barres de contrôles de réactivité.

## 5.1 Modèles DRAGON

Dans cette section on présente les modèles de supercellule 2D et 3D utilisés pour évaluer l'efficacité d'une barre de contrôle et pour générer la base de données de sections efficaces utilisée dans les calculs de diffusion.

### 5.1.1 Modèle de la cellule unitaire en 2D

En pratique pour réduire l'hétérogénéité et la complexité d'un assemblage de cellules 3D, on a l'habitude de générer des propriétés physiques homogènes d'une cellule 2D et de les utiliser ensuite dans le calcul 3D DRAGON-5 ou dans le calcul de cœur DONJON. Pour générer ces propriétés, on utilise généralement l'approximation d'un milieu infini qui consiste à entourer la cellule par un environnement de cellules équivalentes en appliquant des symétries axiales (en général périodicité ou translation). Ceci est équivalent à négliger les fuites de neutrons par les frontières.

La cellule SCWR qu'on a défini dans les calculs DRAGON-5 est le modèle de la grappe à haute efficacité à 62 crayons de combustible présentés dans chapitre 2. Les régions annulaires

de la cellule sont définies par le mot-clé **CARCEL** du module **GEO** et ils sont imbriqués dans une région carrée de 25 cm de côté. Les 62 crayons de combustible sont posés sur deux couronnes par la géométrie annulaire **TUBE** et l'ensemble de ces crayons est inséré dans la géométrie principale en utilisant le mot-clé **CLUSTER**. Des conditions aux frontières de réflexion isotrope ont été posées sur les surfaces extérieures de la géométrie (**X- REFL**, **X+ REFL**, **Y- REFL** et **Y+ REFL**).

La simulation de la cellule nécessite la définition de deux géométries : une géométrie pour le calcul d'autoprotection des résonances et une géométrie pour le calcul de flux (voir figure 5.1). Un calcul d'autoprotection des résonances est essentiel au début de chaque simulation si les sections efficaces microscopiques sont extraites directement d'une bibliothèque de sections efficaces multigroupe générée par NJOY (ENDF, JEFF,...). Ce calcul d'autoprotection est effectué sur une géométrie dont les régions ne sont pas discrétisées spatialement (voir figure 5.1b). Par contre pour le calcul de flux, la géométrie est discrétisée pour réduire l'incertitude sur la valeur numérique du coefficient de multiplication des neutrons infini  $k_\infty$  (voir figure 5.1a).

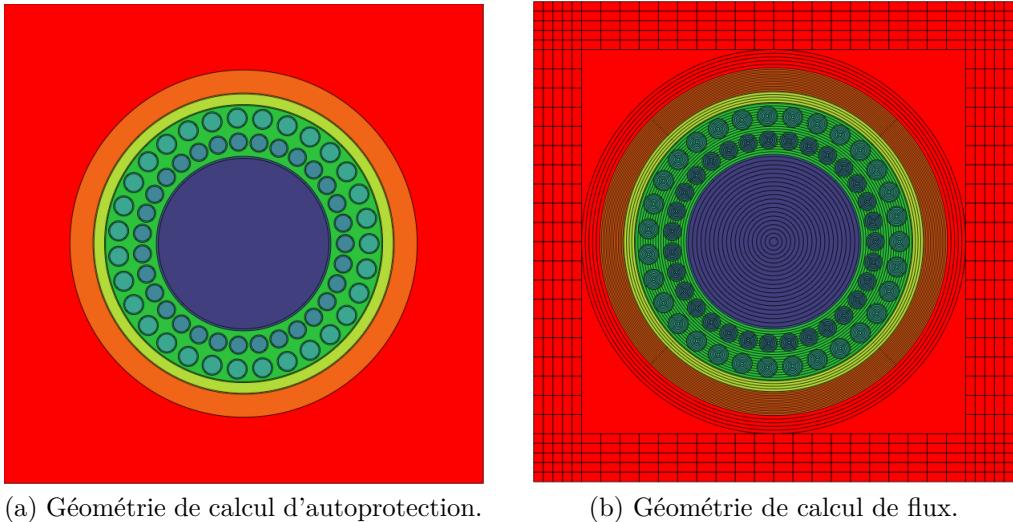


Figure 5.1 Géométrie 2D de la cellule unitaire du réacteur SCWR-62.

Toutes les régions de la cellule unitaire sont discrétisées radialement par le mot-clé **SPLITR** sauf la région modératrice qu'il est discrétisé que partiellement. En effet, la discréttisation radiale du modérateur (région rouge dans la figure 5.1) est limitée par les frontières de la géométrie carrée, donc on ajoute à la discréttisation radiale une discréttisation cartésienne en utilisant les mots-clés **SPLITX** et **SPLITY** afin de pouvoir couvrir les coins du modérateur. L'ensemble de cette discréttisation spatiale est résumé dans le tableau 5.1. La figure 5.2 pré-

sente le résultat de la discréétisation spatiale dont le code de la couleur indique la variation spatiale de l'amplitude de flux (amplitude très importante dans les régions rouges). La distribution de flux (thermique ou rapide) varie significativement dans les différentes régions de la cellule. Ainsi, pour la région du caloporteur central les neutrons ont tendance à se thermaliser fortement à mesure que le rayon diminue. Ceci justifie l'importance de la discréétisation spatiale pour évaluer la distribution de flux dans la cellule.

Tableau 5.1 Discréétisation spatiale de la cellule 2D.

	<b>Autoprotection</b>	<b>Flux</b>
<b>Région</b>	<b>Discréétisation radiale</b>	
Caloporteur central	1	20
Tube d'écoulement	1	1
Caloporteur	1	20
Chemise métallique	1	1
Isolant céramique	1	4
Chemise métallique	1	1
Tube de Force	1	15
Modérateur	1	5
Crayon de combustible	1	6
Gaine de combustible	1	1
<b>Nombre de carrés par coins</b>		
	0	25
<b>Nombre de régions totales</b>		
	12	582

L'analyse et le traçage des lignes d'intégration des deux géométries s'effectuent par le module NXT avec des paramètres d'intégration numérique imposés. La densité de lignes d'intégration  $d_{2D}$  (lignes/cm) et le nombre de directions  $N$  distribuées uniformément sont définis par le mot-clé TISO. Ces deux paramètres sont utilisés dans le calcul de la quadrature d'intégration qui servira à calculer numériquement les probabilités réduites de collision  $p_{ij}^g$  et à évaluer le flux intégral  $\phi_i^g$  par groupe d'énergie et dans la région  $i$  définie par l'équation suivante (Hébert, 2009) :

$$\phi_i^g = \sum_j p_{ij}^g Q_j^g \quad (5.1)$$

avec  $Q_j^g$  la source de neutrons dans la région  $j$  et  $p_{ij}^g$  est la probabilité de collision définie par

l'expression suivante :

$$p_{ij}^g = \frac{1}{4\pi V_i} \int_{V_i^\infty} d^3r' \int_{V_j} d^3r \frac{e^{-r_g(|\vec{r}-\vec{r}'|)}}{|\vec{r}-\vec{r}'|^2} \quad (5.2)$$

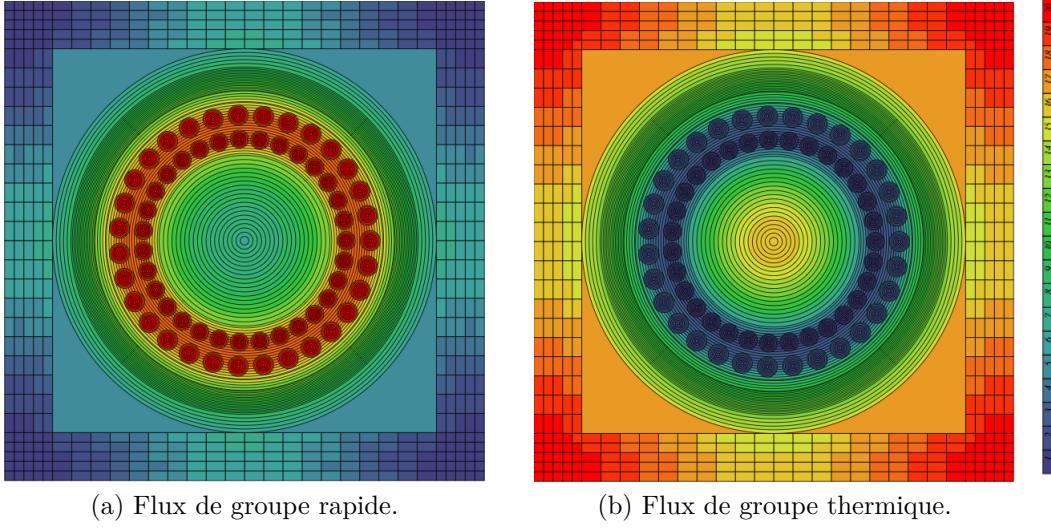


Figure 5.2 Cartographie de flux pour deux groupes d'énergie dans la cellule 2D.

Une fois les géométries définies, on remplit les régions géométriques par des mélanges. Le remplissage consiste à associer à chaque région un ensemble de sections efficaces représentant les isotopes du mélange. L'évaluation IAEA des sections efficaces ENDF/B.VII est utilisée dans le modèle de la cellule unitaire. On y retrouve 14 groupes rapides de frontière à  $1.503 \times 10^4$  eV, 13 groupes résonants de frontière à 4 eV et 42 groupes thermiques. Le calcul d'autoprotection de résonances des isotopes lourds s'effectue dans DRAGON-5 selon la méthode de Stamm'ler (Hébert et Marleau, 1991). Ce calcul s'effectue par le module **SHI** qui génère une bibliothèque isotopique autoprotégée multigroupe sauvegardée dans la structure de données **MICROLIB** qui est ensuite transférée au module **ASM**. Le module **ASM** intègre la matrice de probabilité de collision  $p_{ij}^g$  en utilisant la structure de données **MICROLIB** et les enregistrements du module **NXT**. Les structures de données enregistrées par le module **ASM** sont transférées au module **FLU** pour résoudre le problème de transport pour le flux multigroupe et multirégion et le facteur de multiplication. Pour le cas sans fuite modélisé par des conditions aux frontières de réflexion (**REFL**), l'option **TYPE K** est utilisé pour indiquer que les inconnues  $\phi_i^g$  de l'équation de transport et la constante de multiplication  $k_\infty$  doivent être évaluées par un processus itératif qui permet de converger les solutions vers des valeurs stables. Les sections efficaces macroscopiques ont été homogénéisées sur l'ensemble de la cel-

lule et condensées à deux groupes d'énergie en utilisant le module **EDI** (énergie de coupure fixée à 0.625 eV). L'approche pour homogénéiser et condenser les sections efficaces consiste à moyenner les sections efficaces (totale, absorption, fission, etc.) dans la région  $C_m$  et dans le groupe d'énergie  $M_k$  pour respecter les taux de réaction en utilisant les expressions suivantes (Hébert, 2009)

$$\Sigma_r^{m,k} = \frac{\sum_{g \in M_k} \sum_{i \in C_m} V_i \Sigma_{r,i}^g \phi_i^g}{\sum_{g \in M_k} \sum_{i \in C_m} V_i \phi_i^g} \quad (5.3)$$

$$\chi^k \Sigma_f^{m,k} = \frac{\sum_{g \in M_k} \sum_{i \in C_m} V_i \chi^g \Sigma_{f,i}^g \phi_i^g}{\sum_{g \in M_k} \sum_{i \in C_m} V_i \phi_i^g} \quad (5.4)$$

$$\Sigma_s^{m,k \rightarrow \ell} = \frac{\sum_{h \in M_k} \sum_{g \in M_\ell} \sum_{i \in C_m} V_i \Sigma_{s,i}^{h \rightarrow g} \phi_i^h}{\sum_{h \in M_k} \sum_{i \in C_m} V_i \phi_i^h} \quad (5.5)$$

où  $\Sigma_r^{m,k}$ ,  $\Sigma_s^{m,k \rightarrow \ell}$ ,  $\Sigma_f^{m,k}$  et  $\chi^k$  sont respectivement les sections efficaces totale (ou d'absorption), de diffusion, de fission et le spectre de fission dans la région  $C_m$  et dans le groupe d'énergie  $M_k$ .

### 5.1.2 Modèle de la supercellule unitaire en 3D

Le modèle de la supercellule unitaire est utilisé dans les simulations des réacteurs CANDU pour évaluer l'incrément de sections efficaces d'un mécanisme de réactivité vertical ou horizontal (selon la direction des grappes de combustible). Un modèle équivalent est développé dans cette thèse pour évaluer l'incrément de sections efficaces macroscopiques d'une barre de contrôle inclinée dans le réacteur SCWR. La figure 5.3 représente le modèle de la supercellule unitaire avec une barre de contrôle inclinée. Elle est modélisée par un assemblage de tubes de force de pas de réseau  $l = 25$  cm et de longueur  $H = 49.53$  cm (longueur de la partie active d'une grappe de combustible unitaire) et une barre de contrôle de longueur supérieure à  $H$  (dépend de l'inclinaison).

L'environnement géométrique de la supercellule est défini par le mot-clé **CAR3D** du module **GEO**. Cet environnement est divisé selon l'axe  $x$  en deux régions et selon l'axe  $y$  en trois régions (voir figure 5.4). Dans les cellules C1, C2, C5 et C6 des géométries annulaires sont insérées par le mot-clé **CELL**. Dans les deux cellules centrales (C3 et C4) les cylindres inclinés sont définis par le mot-clé **CARCELZ** et inclinés par le mot-clé **OMEGAY**. Chaque cellule est insérée dans l'assemblage en utilisant le mot-clé **CELL** et centrée par le mot-clé **OFFCENTER**. Des conditions aux frontières de réflexion isotrope ont été posées sur les surfaces extérieures

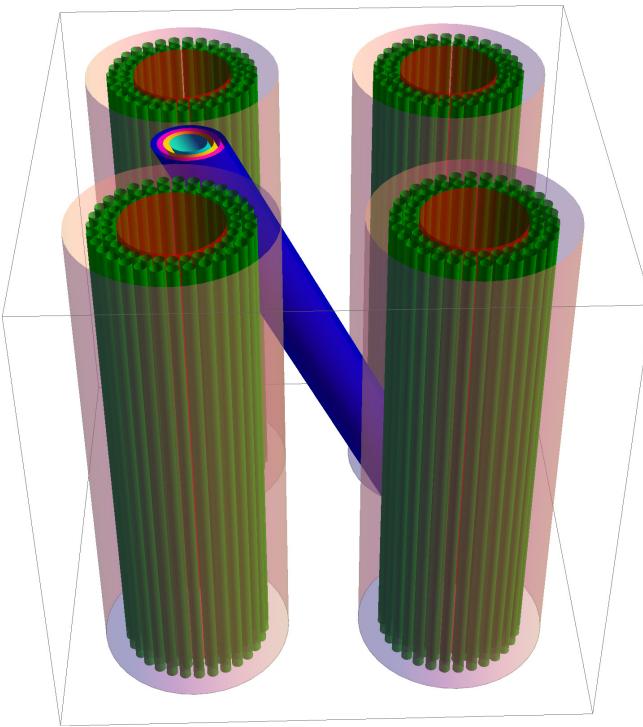


Figure 5.3 Illustration du modèle 3D de la supercellule SCWR-62.

de la géométrie CAR3D (X- REFL, X+ REFL, Y- REFL, Y+ REFL, Z- REFL et Z+ REFL).

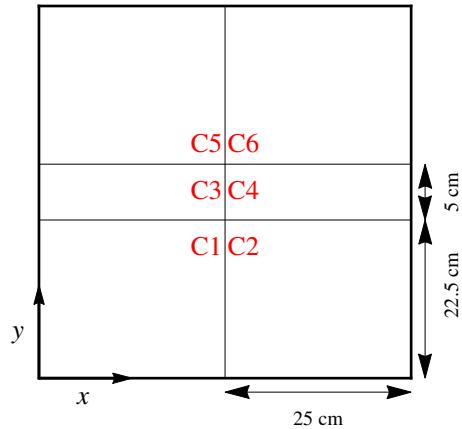


Figure 5.4 Projection 2D de l'environnement CAR3D de la supercellule.

Contrairement à la simulation de la cellule unitaire, on définit pour le modèle de la supercellule unitaire une seule géométrie discrétisée pour le calcul de flux et on ignore la géométrie de calcul d'autoprotection des résonances. En effet, les quatre régions annulaires insérées dans les quatre coins du CAR3D sont remplies par les sections efficaces macroscopiques homogé-

néisées sur le tube de force de la cellule unitaire et non condensées en énergie (69 groupes d'énergie) présentée dans la section 5.1.1.

L'analyse et le traçage des lignes d'intégration des deux géométries s'effectuent par le module NXT avec des paramètres d'intégration numérique imposés. Les modifications et les mises à jour apportées dans le module de traçage NXT sont utilisées pour calculer numériquement les probabilités réduites de collision  $p_{ij}^g$  dans les régions cylindriques inclinées qui par la suite servent à calculer le flux intégral  $\phi_i^g$  par groupe d'énergie dans les régions  $i$ . La densité de lignes d'intégration  $d_{3D}$  (lignes/cm<sup>2</sup>) et le nombre de directions  $N$  sont définis par le mot-clé TISO.

Les étapes de calculs suivies pour évaluer les bases de données de la supercellule unitaire sont :

1. Transformer le format du fichier de sections efficaces macroscopiques homogénéisées autoprotégées de SEQ\_ASCII à LINKED\_LIST ;
2. Définir les géométries utilisées pour le calcul de flux ;
3. Analyser la géométrie et tracer les lignes d'intégration par le module NXT ;
4. Calculer la distribution de flux avec le modèle sans fuite TYPE K par les modules ASM et FLU ;
5. Éditer les propriétés par le module EDI. Homogénéiser sur l'ensemble de la supercellule unitaire 3D et condenser à deux groupes d'énergie de (frontière à 0.265 eV) ;
6. Créer les bases de données réacteur par le module CPO ;

### 5.1.3 Génération des bases de données des XS macroscopiques

La température axiale du caloporteur varie significativement à cause du transfert de chaleur important du combustible à l'eau supercritique traversant les crayons de combustible. Cette variation influence la distribution axiale de puissance thermique (Nava Domínguez *et al.*, 2016) ainsi que la température de la chemise métallique interne qui est en contact direct avec le caloporteur ré-entrant. Dans leur article Nava Domínguez *et al.* (2016) ont montré que le profil de la puissance axiale relative (c'est-à-dire puissance locale axiale normalisée par la moyenne sur la longueur) d'un canal de 62 éléments de combustible a la forme de cosinus en début du cycle (BOF) et un profil presque uniforme à la fin du cycle (EOC). La distribution axiale de puissance relative est évaluée en cinq plans axiaux dont leurs épaisseurs sont équivalentes et égales à 1 m (voir figure 5.5) et les propriétés thermodynamiques des matériaux sont moyennées sur le volume de chaque région (voir tableau 5.2). Dans la bibliothèque des sections efficaces ENDF/B-VII du code SERPENT, les propriétés nucléaires de 436 isotopes

sont définies à six températures (Leppanen, 2016) : 300 K, 600 K, 900 K, 1200 K, 1500 K et 1800 K. Pour tenir compte de cette limite potentielle dans cette bibliothèque de données nucléaires on a simplifié la répartition de la température en utilisant la température disponible dans la bibliothèque la plus proche pour chaque niveau axial au lieu d'utiliser la température moyenne.

Tableau 5.2 Masses volumiques moyennes et températures neutroniques du caloporeur le long d'un canal du réacteur SCWR-62.

Distance moyenne par rapport le bas du canal (m)	Masses volumiques moyennes ( $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ )	Température neutronique (K)
0.5	592.54	600
1.5	382.46	600
2.5	160.92	600
3.5	89.49	900
4.5	69.63	900

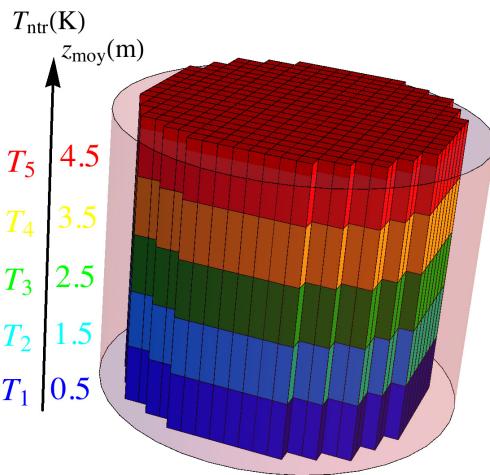


Figure 5.5 Illustration du modèle 3D de la stratégie de simulation proposée pour tenir compte de la distribution de températures non uniformes le long d'un canal.

La stratégie de simulation proposée pour tenir compte de la variation axiale de la température consiste à générer une base de données réacteur pour chaque position axiale moyenne. Ces bases de données contiennent les informations requises pour un code de calcul de cœur ; les sections efficaces macroscopiques par groupes, les coefficients de diffusion moyens, le taux de

combustion  $B$  du combustible par intervalle de temps, l'énergie produite par fission. Ils sont générées en trois fichiers correspondant à chaque position axiale moyenne.

- Bases de données combustible ;
- Bases de données réflecteur ;
- Bases de données mécanisme de contrôle de la réactivité ;

## Propriétés de réflecteurs

Pour assurer la criticité du réacteur il est indispensable de réduire le plus possible les pertes de neutrons vers l'extérieur du cœur. On utilise pour ce faire un réflecteur (eau légère ou lourde, graphite, beryllium, etc.) dont les propriétés neutroniques sont : une absorption faible de neutrons, faible transmission et une forte réflexion vers le cœur (Glasstone et Sesonske, 2004).

La base de données du réflecteur consiste à générer un fichier de sections efficaces macroscopique pour chaque plan de température  $T_j$  et deux autres fichiers pour modéliser les réflecteurs axiaux supérieur et inférieur. Ces mélanges homogènes sont générés à partir du modèle de la cellule unitaire en deux dimensions dont l'homogénéisation est effectuée sur toutes les sous-régions du modérateur.

## Propriétés du combustible

La génération des bases de données du combustible est effectuée par l'homogénéisation totale de la cellule unitaire à différents jours d'évolution sur le plan axial de température  $T_j$ . Initialement, la cellule unitaire contient du combustible neuf ce qui est équivalent à un Burnup d'entrée (taux de combustion)  $B_e = 0 \text{ GWJ/T}$ . L'évolution en fonction du temps consiste à brûler le combustible et mettre à jour les concentrations isotopiques du combustible et évaluer le taux de combustion de sortie  $B_e(i)$  à chaque fin de période  $i$  qui sert comme Burnup d'entrée ( $B_e(i+1)$ ) pour la période suivante ( $i+1$ ) (voir tableau 5.3). Les simulations de l'évolution du combustible sont faites en absence de mécanismes de réactivité (barre de contrôle et son tube guide ou poison) pour qu'ils ne perturbent pas la distribution de flux et influencent l'évaluation des sections efficaces macroscopiques homogènes. L'évolution du combustible s'effectue dans DRAGON-5 par le module **EVO** à puissance massique constante  $P = 45.99 \text{ MW/T}$ . Les calculs se répètent jusqu'à la fin de la période de combustion désirée. Une fois les calculs terminés, le module **CPO** de DRAGON-5 est utilisé pour générer les bases de données du combustible à température  $T_j$  dans un format lisible par DONJON-3.

Tableau 5.3 Burnup d'entrée en jours.

Temps (jours)	Burnup (GWJ/T)	Temps (jours)	Burnup (GWJ/T)
0	0.000	300	13.797
1	0.046	400	18.396
5	0.230	500	22.995
10	0.460	600	27.594
20	0.920	800	36.792
30	1.379	1000	45.991
40	1.839	1200	55.190
50	2.299	1400	64.389
100	4.599	1600	73.588
150	6.898	1800	82.788
200	9.189		

Les étapes de calcul requises pour évaluer les bases de données du combustible et de réflecteur radial à température  $T_j$  ( $j = 1, \dots, 5$ ) sont :

1. Définir la bibliothèque des sections efficaces ( $\text{LIBXS}(T_j)(0)$ ) par le module LIB à la température  $T_j$  ;
2. Définir les géométries utilisées pour les calculs d'autoprotection et de flux ;
3. Analyser toutes les géométries et tracer les lignes d'intégration par le module NXT ;
4. Calculer les sections efficaces microscopiques autoprotégées du combustible neuf par le module SHI (Burnup d'entrée  $B_e = 0 \text{ GWJ/T}$ ) et mettre à jour la bibliothèque  $\text{LIBXS}(T_j)(0)$  ;
5. Calculer la distribution de flux ( $\text{FLUX}(T_j)(0)$ ) dans la cellule unitaire avec le modèle sans fuite TYPE K par les modules ASM et FLU ;
6. Éditer les propriétés par le module EDI. À cette étape deux types de bases de données sont générées :
  - (a) Base de données de combustible ( $\text{XSCB}(T_j)(0)$ ) : homogénéisé sur l'ensemble de la cellule unitaire 2D et condensé à deux groupes d'énergie (groupe thermique et groupe rapide) ;
  - (b) Base de données de réflecteur radial ( $\text{XSRR}(T_j)(0)$ ) : homogénéisé sur le modérateur et condensé au même groupe d'énergie du combustible ;
7. Initialiser le numéro d'itération à  $i = 1$  ;

8. Initialiser le Burnup d'entrée à  $B_e(i) = 0 \text{ GWJ/T}$ ;
9. Fixer le temps initial d'évolution  $T_{IN}$  à  $\text{TIME}(i)$  et le temps final d'évolution  $T_{FN}$  à  $\text{TIME}(i + 1)$ ;
10. Évoluer le combustible entre les temps  $T_{IN}$  et  $T_{FN}$ , évaluer le Burnup de sortie  $B_s(i)$  et mettre à jour la bibliothèque des sections efficaces  $\text{LIBXS}(T_j)(i)$  par le module **EVO**;
11. Mettre à jour la bibliothèque  $\text{LIBXS}(T_j)(i)$  en utilisant le module **SHI**;
12. Mettre à jour la distribution de flux ( $\text{FLUX}(T_j)(i)$ ) dans la cellule unitaire avec le modèle sans fuite **TYPE K** par les modules **ASM** et **FLU**;
13. Mettre à jour les bases de données  $\text{XSCB}(T_j)(i)$  et  $\text{XSRR}(T_j)(i)$  par le module **EDI**;
14. Avancer le numéro d'itération :  $i=i + 1$ ;
15. Mettre à jour le Burnup d'entrée :  $B_e(i)=B_s(i - 1)$ ;
16. Si le temps de combustion final est atteint, passer à l'étape suivante. Sinon, recommencer avec l'étape 9 ;
17. Créer les bases de données réacteur par le module **CPO**;

### Propriétés de la barre de contrôle

À cause de l'inclinaison de la barre de contrôle, l'utilisation d'un modèle 2D n'est plus valide pour modéliser l'environnement de la barre de contrôle et évaluer les incrément de sections efficaces. Il devient alors nécessaire de considérer une géométrie tridimensionnelle dans laquelle la barre de contrôle et son tube guide incliné autour de l'axe  $y$  sont entourés de grappes de combustible alignées dans les tubes de force s'étendant selon l'axe  $z$ .

L'effet de la barre de contrôle dans le modèle de calcul de réacteur est pris en compte par l'entremise des incrément de sections efficaces macroscopiques multigroupe de la réaction  $x$  ( $\Delta\Sigma_x^g$ ) et de coefficients de diffusion multigroupe ( $\Delta D^g$ ) calculée par l'intermédiaire du modèle DRAGON-5 de la supercellule. Ces incrément sont évalués par les modules de DON-JON par l'intermédiaire de trois bases de données générées par des calculs de supercellule DRAGON-5 ou pour lesquelles la supercellule est dans un état différent :

1. Les grappes de combustibles sont présentes tandis que la barre de contrôle et le tube guide sont absents et remplacés par du modérateur (MD).
2. Les grappes de combustibles et le tube guide sont présents tandis que la barre de contrôle est absente (GD).
3. Les grappes de combustibles, le tube guide et la barre de contrôle sont présents (CR).

Les incrément  $\Delta\Sigma_x^g$  et  $\Delta D^g$  de la barre de contrôle (*barre*), du tube guide (*tube*) et de l'ensemble barre de contrôle et tube guide (*total*) sont évalués respectivement par la différence entre les différents états de  $\Sigma_{x,\text{état}}^g$  et les différents états de  $D_{\text{état}}^g$ .

$$\Delta\Sigma_{x,\text{total}}^g = \Sigma_{x,CR}^g - \Sigma_{x,MD}^g \quad (5.6)$$

$$\Delta\Sigma_{x,\text{barre}}^g = \Sigma_{x,CR}^g - \Sigma_{x,GD}^g \quad (5.7)$$

$$\Delta\Sigma_{x,\text{tube}}^g = \Sigma_{x,GD}^g - \Sigma_{x,MD}^g \quad (5.8)$$

$$\Delta D_{\text{total}}^g = D_{CR}^g - D_{MD}^g \quad (5.9)$$

$$\Delta D_{\text{barre}}^g = D_{CR}^g - D_{GD}^g \quad (5.10)$$

$$\Delta D_{\text{tube}}^g = D_{GD}^g - D_{MD}^g \quad (5.11)$$

En pratique, le calcul de la supercellule 3D avec la géométrie exacte des grappes de combustible demande une mémoire machine de stockage énorme et un temps de simulation très long. L'alternative est donc d'utiliser des propriétés homogènes pour les matériaux à l'intérieur du tube de force à partir d'un calcul de cellule unitaire. Ce modèle permet de simplifier significativement le calcul de la supercellule 3D et d'avoir les résultats de simulation dans un délai raisonnable. De plus, les calculs doivent être répétés pour chaque inclinaison de la barre de contrôle désiré cinq fois en tenant compte de la variation de la température axiale selon le schéma de calcul proposé dans la section 5.1.2.

## 5.2 Modèles SERPENT

Pour valider les modèles présentés dans la section précédente, il faut des modèles de référence capable de fournir les mêmes informations qu'on prévoit obtenir par les modèles DRAGON-5, mais avec une stratégie de calcul différente. Ceux-ci peuvent être obtenus à partir de calculs Monte-Carlo SERPENT. L'intérêt de cette méthode réside dans le fait que la connaissance de l'équation qui régit le transport des neutrons (l'équation de Boltzmann) n'est pas nécessaire pour envisager une simulation. En effet, seule la connaissance des phénomènes physiques de base mis en jeu (fission, diffusion, absorption, etc.) est nécessaire, de sorte qu'à chaque collision avec la matière le neutron recommence une nouvelle "vie" (appelé aussi historique) durant laquelle il parcourt un nouveau chemin avec une énergie cinétique différente ou égale à l'énergie cinétique avant la collision (Marguet, 2011).

Afin que la comparaison mentionnée plus haut soit cohérente, la stratégie de simulation proposée pour SERPENT doit être appliquée en utilisant les mêmes conditions que celles de la cellule unitaire 2D et du modèle de la supercellule 3D, c'est-à-dire on utilise la même

description géométrique, les mêmes mélanges, la même évaluation de sections efficaces microscopiques, les mêmes conditions aux frontières. Cette comparaison permet de valider d'une part les modèles 2D et 3D proposés pour DRAGON, et d'autre part de vérifier la performance des routines de définition de la géométrie 3D annulaire inclinée, d'analyse géométrique et de traçage des lignes d'intégration ajoutées dans DRAGON-5.

### 5.2.1 Modèle de la cellule unitaire en 2D

La façon utilisée dans SERPENT pour définir le modèle de la cellule unitaire 2D diffère de celle utilisée par DRAGON. En effet, la structure du fichier d'entrée du code DRAGON-5 est basée sur l'utilisation d'un ensemble de modules qui communiquent entre eux par un transfert d'enregistrements. Cependant, la définition de la cellule unitaire SERPENT nécessite uniquement : la définition des données du modèle (géométrie et mélanges), le choix de la bibliothèque des sections efficaces et le choix de la population de neutrons.

Initialement on définit la géométrie de la cellule unitaire sous la forme de plusieurs univers (sous-géométries) indépendants et après on les emboîte les uns dans les autres par les deux mots-clés `lat` et `cell` selon la forme de la géométrie qu'on désire imbriquer. L'environnement qui entoure la cellule doit être, obligatoirement, appelé univers 0 en utilisant la structure suivante :

```
surf <ns> sqc   <xc> <yc> <d>
cell <nc>    0 fill <u>      -<ns>
cell <nc+1>  0 outside      <ns>
```

où `ns`, `nc`, `xc`, `yc`, `d` et `u` sont respectivement l'identifiant de la surface, l'identifiant de l'univers, abscisse de l'origine de l'univers, ordonnée de l'origine de l'univers, la moitié du pas de réseau de l'univers et l'identifiant de l'univers à emboîter par l'univers 0.

Équivalent au modèle DRAGON-5 l'univers 0 est un carré (`sqc`) de pas égal à 25 cm et correspond au double du paramètre `d`. Des conditions aux frontières de réflexion isotrope ont été posées sur les surfaces extérieures de cette géométrie en utilisant le mot-clé `set bc` fixé à 2.

Le formalisme multi-groupe utilisé par DRAGON-5 est incompatible avec la méthode de calcul Monte-Carlo. En effet, la simulation Monte Carlo nécessite l'utilisation d'une bibliothèque de sections efficaces microscopiques continues en énergie (de format ACE) pour suivre d'une façon continue la variation de l'énergie cinétique d'un neutron de sa naissance à sa disparition. Par contre dans ces bibliothèques, les propriétés nucléaires de 436 isotopes sont

discrétisées en température. Elles sont définies uniquement à six températures (300 K, 600 K, 900 K, 1200 K, 1500 K et 1800 K).

Le modèle de la cellule 2D est défini pour les cinq températures axiales de la section 5.1.3. Pour chaque modèle on modifie la température et la densité du caloporteur traversant les crayons de combustible.

Dans ce contexte, il faut aussi noter que des sections efficaces de diffusion à faibles énergies ont été attribuées séparément à l'hydrogène et au deutérium du caloporteur et du modérateur à partir de l'option `moder` de la commande `mat`. En fait, l'utilisation de sections efficaces de diffusion dérivées de la théorie du gaz libre pour les isotopes d'hydrogène entraîne des erreurs significatives dans les résultats (Glasstone et Sesonske, 2004) car l'atome d'oxygène exerce un fort pouvoir d'attraction sur les isotopes d'hydrogène ce qui a un impact sur la dynamique de la réaction de diffusion à faible énergie. L'effet de la liaison hydrogène à faible énergie sur la section efficace de diffusion est exprimé en fonction du nombre de masse atomique  $A$  par la relation suivante :

$$\sigma_{s,liée} = \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \sigma_{s,libre} \quad (5.12)$$

Pour le noyau d'hydrogène il est montré expérimentalement que la section efficace de diffusion passe de 20.4 barn à 80 barn en diminuant l'énergie du neutron en dessous de 1 eV, ce qui équivaut à quatre fois la section efficace de diffusion à haute énergie. Cette observation est confirmée par la relation entre  $\sigma_{s,liée}$  et  $\sigma_{s,libre}$  (Glasstone et Sesonske, 2004).

L'évaluation ENDF/B.VII a été utilisée pour effectuer les simulations SERPENT de la cellule unitaire 2D à cinq températures. Ainsi, ces simulations ont été effectuées avec 10000 neutrons par cycle et 2000 cycles actifs avec 200 cycles inactifs. Les neutrons initiaux (sources) sont pris au hasard à l'intérieur des crayons de combustible pour amorcer la réaction de fission. La valeur du coefficient de multiplication infini  $k_\infty$  initial est fixé par défaut à l'unité. Les cycles inactifs sont des cycles qui sont exécutés afin de permettre à la distribution initiale de la source de fission de converger avant de commencer à collecter les résultats (voir figure 5.6) (Leppanen, 2013).

### 5.2.2 Modèle de la supercellule unitaire en 3D

Le modèle de la supercellule 3D est construit en utilisant le modèle de la cellule unitaire. En fait, comme on a expliqué dans la section précédente la définition de la géométrie est effectuée par la définition de plusieurs univers (sous géométries) indépendants emboîtés les uns dans les autres par les deux mots-clés `lat` et `cell` et entouré par l'univers 0. L'environnement géométrique qui entoure la supercellule est un parallélépipède défini dans SERPENT par le

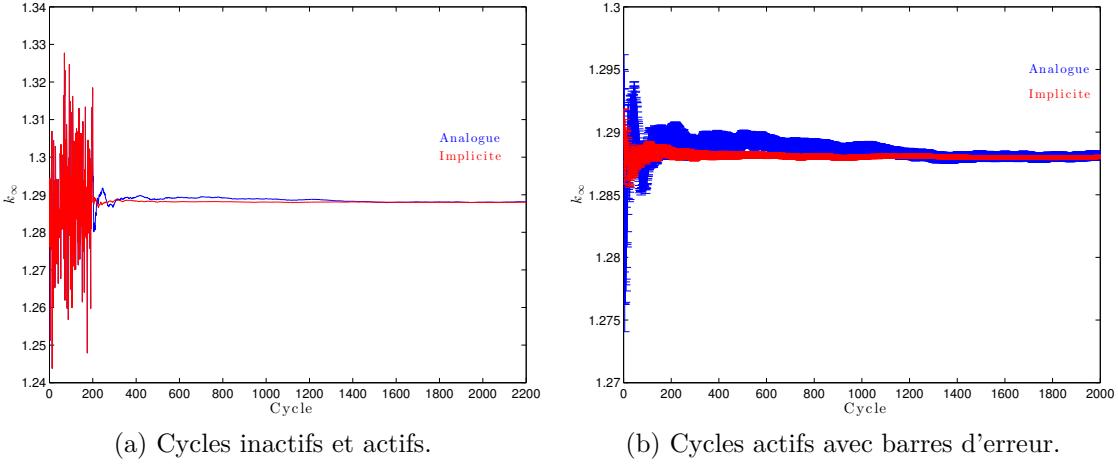


Figure 5.6 Illustration de la variation du facteur de multiplication infini en fonction du cycle (200 cycles inactifs/2000 cycles actifs).

mot-clé **cuboid** dont des conditions aux frontières de réflexion sont appliquées sur les six surfaces externes en utilisant la commande **set bc**.

Contrairement à DRAGON-5 la géométrie cylindrique inclinée est programmée dans SER-PENT et peut-être modélisé en utilisant le mot-clé **quadratic** de paramètres :  $A, B, C, D, E, F, G, H, J$  et  $K$ . Ces paramètres définissent l'équation générale d'une surface quadratique :

$$Ax^2 + By^2 + Cz^2 + Dxy + Eyz + Fzx + Gx + Hy + Jz + K = 0 \quad (5.13)$$

Une géométrie cylindrique inclinée de rayon  $R$ , avec son axe de révolution orienté selon le vecteur  $\vec{n} = [a, b, c]$  est modélisée par les paramètres suivants de l'équation quadratique :

$$A = b^2 + c^2 \quad (5.14)$$

$$B = a^2 + c^2 \quad (5.15)$$

$$C = a^2 + b^2 \quad (5.16)$$

$$D = -2ab \quad (5.17)$$

$$E = -2cb \quad (5.18)$$

$$F = -2ca \quad (5.19)$$

$$G = H = J = 0 \quad (5.20)$$

$$K = -R^2 \quad (5.21)$$

La barre de contrôle insérée dans la supercellule est inclinée autour l'axe  $y$  d'un angle  $\theta$ , ce

qui correspond à un vecteur unitaire  $\vec{n} = [\sin(\theta), 0, \cos(\theta)]$ . Cela permet de modéliser la barre de contrôle par les paramètres non nuls de l'équation quadratique suivante :

$$A = \cos(\theta)^2 \quad (5.22)$$

$$B = 1 \quad (5.23)$$

$$C = \sin(\theta)^2 \quad (5.24)$$

$$D = E = 0 \quad (5.25)$$

$$F = -2 \cos(\theta) \sin(\theta) \quad (5.26)$$

$$G = H = J = 0 \quad (5.27)$$

$$K = -R^2 \quad (5.28)$$

La stratégie de l'utilisation des sections efficaces macroscopiques homogénéisées dans le modèle de la supercellule unitaire dans SERPENT n'est pas possible car SERPENT ne permet pas la définition de mélanges à partir de sections efficaces macroscopiques. La géométrie de la supercellule contenant une barre de contrôle inclinée est définie alors sans aucune simplification géométrique comme celle du modèle DRAGON. Pour définir cette géométrie, on utilise donc le processus suivant :

- La cellule unitaire est définie de la même façon que pour le modèle 2D, mais dans une structure libre, c'est-à-dire sans la mettre dans l'environnement carré **sqc**. On appelle cette géométrie univers 100 et on l'entoure par l'eau modérateur comme illustré dans la figure 5.7. On note que la hauteur selon l'axe de révolution de cet univers est infini et son milieu extérieur est infini radialement.

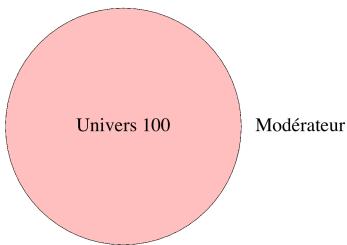


Figure 5.7 Illustration de l'univers 100<sup>1</sup>.

---

1. Les détails de la cellule ne sont pas montrés

- Quatre copies de l'univers 100 sont rangées dans un assemblage carré ( $2 \times 2$ ) de pas égal à 25 cm et centré à l'origine du plan  $xy$  (voir figure 5.8). On appelle cet assemblage univers 14 et on le construit en utilisant la structure suivante :

```
lat 14 1 0.0 0.0 2 2 25
```

```
100 100
```

```
100 100
```

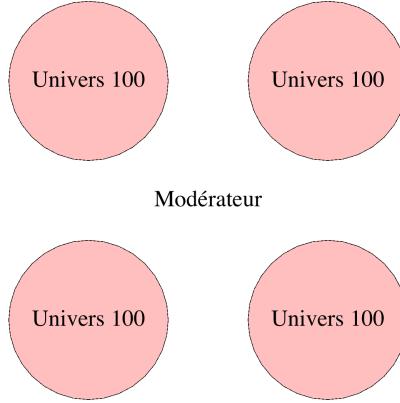


Figure 5.8 Illustration de l'univers 14 (assemblage).

On note encore une autrefois que la hauteur selon l'axe de révolution de cet univers est infinie et le modérateur à l'extérieur des quatre univers 100 est infini.

- On définit la barre de contrôle inclinée localisée dans l'origine de l'espace par le mot-clé **quadratic** et on l'appelle univers 300. On remplit le milieu extérieur de cet univers par l'univers 14 (l'assemblage de cellule), c'est-à-dire on emboîte dans l'univers 300 l'univers 14 en utilisant l'option **fill** de la commande **cell** sur la surface extérieure de la barre de contrôle (univers 300). Puisque l'univers 14 est emboîté dans la barre de contrôle donc les dimensions spatiales 300 sont la même que l'univers 14.
- Afin de pouvoir limiter spatialement la géométrie et imposer les conditions aux frontières de réflexion sur les surfaces, on définit un parallélépipède de dimensions finies en utilisant le mot-clé **cuboid** et on l'appelle univers 0. Ensuite, on emboîte l'univers 300 (contenant toute la géométrie, mais de dimension infinie comme expliquée ci-dessus) dans l'univers 0 qui lui est fini.

L'augmentation de la taille de géométrie doit engendrer l'augmentation de la population neutronique à utiliser pour la simulation. En général, plus le nombre de neutrons source est élevé, meilleures sont les statistiques obtenues. En outre, le nombre de neutrons doit être suffisamment important pour que toutes les régions de la géométrie de la supercellule

soient correctement échantillonnées. Si une région de la géométrie est mal échantillonnée, les estimations du taux de réaction et leurs erreurs statistiques seront incorrectes (K., 2014).

La figure 5.9 présente l'impact du nombre de neutrons sources par cycle sur le facteur de multiplication avec son erreur absolue pour la supercellule en trois dimensions. On conclut que plus le nombre de neutrons source est élevé plus l'erreur statistique absolue sur le facteur de multiplication diminue.

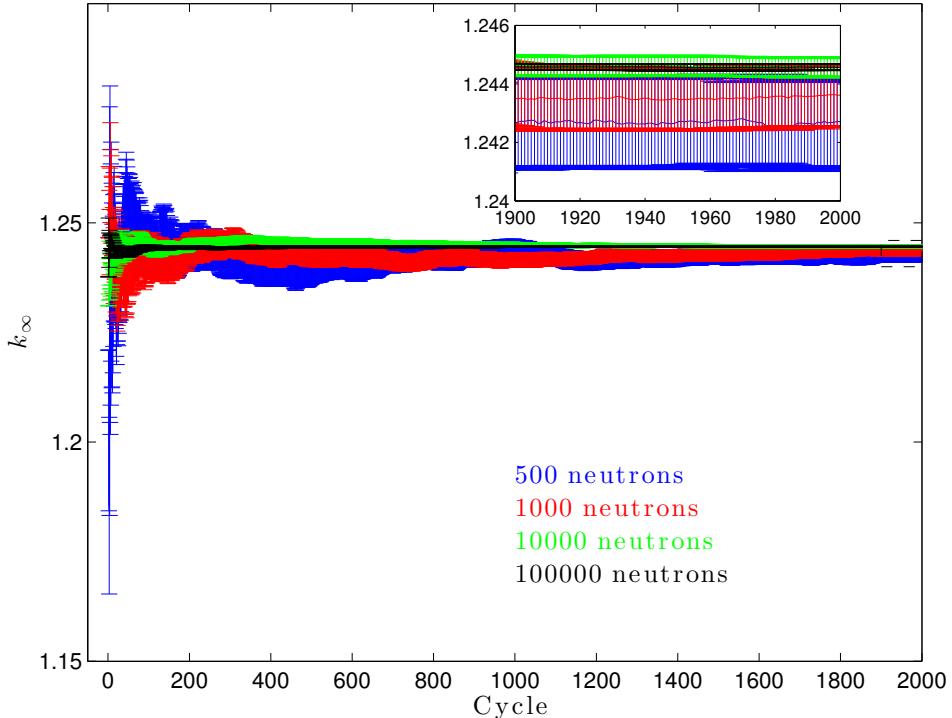


Figure 5.9 Effet de la variation de la population neutronique sur la précision de  $k_\infty$ .

Cette figure présente deux types de facteurs de multiplication infinis :

1. L'estimation analogue pour le facteur de multiplication infini (également appelée estimation de la production) est définie comme étant le rapport entre le rapport des nombres de sources (neutrons) de deux cycles subséquents.

$$k_{\infty,\text{ana}} = \frac{\text{nombre de neutrons du cycle } (i+1)}{\text{nombre de neutrons du cycle } (i)} \quad (5.29)$$

2. L'estimation implicite pour le facteur de multiplication effectif est l'estimation d'absorption qui est calculée comme le rapport entre le taux de production et le taux de

perte de neutrons :

$$k_{\infty,\text{imp}} = \frac{\bar{\nu}R_f}{R_f + R_c - R_{(\text{n,xn})} + R_L} \quad (5.30)$$

où  $\bar{\nu}$  est le nombre moyen de neutrons émis par une fission,  $R_f$  est le taux total de fission,  $R_c$  est le taux de capture totale,  $R_{(\text{n,xn})}$  est le taux de production totale par diffusion inélastique des neutrons et  $R_L$  est le taux de fuite neutronique totale.

La bibliothèque des sections efficaces basée sur l'évaluation ENDF/B.VII, 100000 neutrons sources par cycle, 2000 cycles actifs et 200 cycles inactifs ont été utilisés pour réaliser les calculs en trois dimensions de la supercellule par SERPENT en utilisant la commande **set pop**. Le temps de calcul effectué sur une machine de processeur «Intel(R) Xeon(R) Processor X5650» est environ une heure et demi.

### 5.3 Modèles DONJON

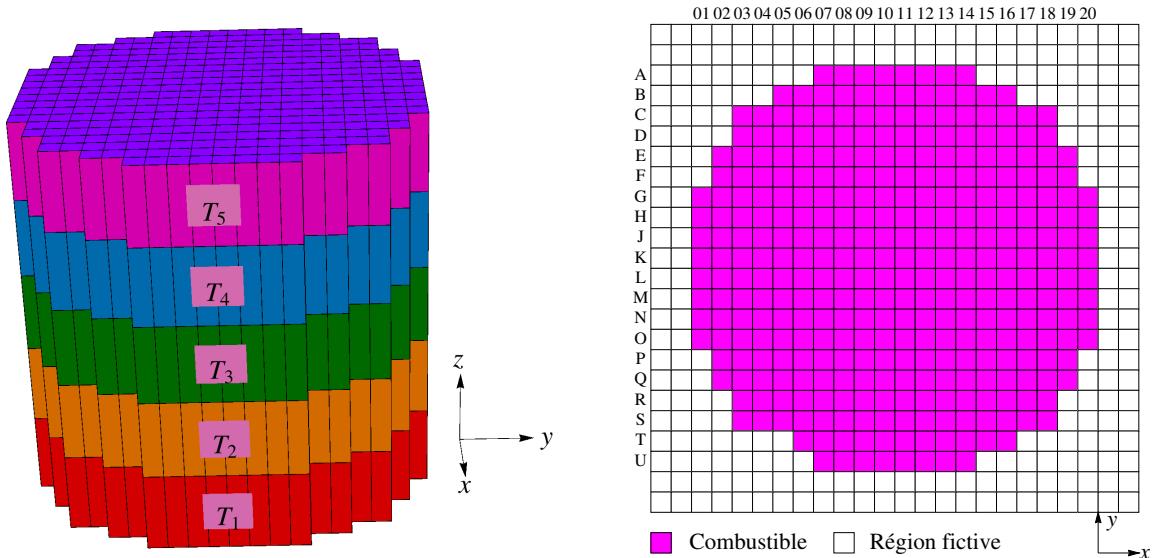
À chaque rechargement du cœur du réacteur SCWR des études numériques et une série de mesures expérimentales doivent être réalisées à puissance nulle avant le démarrage du réacteur. En fait, les études numériques doivent permettre la détermination de l'excès de réactivité ajouté par les nouvelles grappes insérées dans le cœur les mécanismes de contrôle de la réactivité à déplacer dans le réacteur. L'estimation numérique ne doit pas dépasser environ 10 % en valeur absolue les valeurs expérimentales car le modèle numérique du cœur est utilisé pour suivre le fonctionnement du réacteur après le démarrage du réacteur, estimer le temps d'arrêt d'urgence, etc (Marguet, 2011).

La criticité du réacteur est maintenue par l'utilisation du bore naturel dilué dans le modérateur. En fait, les barres de contrôle doivent être retirées du cœur après le redémarrage du réacteur après le rechargement d'un lot du cœur et l'excès de réactivité dans le cœur est compensé par le poison absorbant (bore naturel) dans le cœur.

On présente dans cette section les calculs de cœur réalisés dans ce projet de recherche pour évaluer l'efficacité des barres de contrôle inclinée dans le cœur du réacteur SCWR en présence ou en absence du bore naturel dans le modérateur. L'évaluation est réalisée avec un cœur initial de combustible neuf et les inclinaisons et les positions d'un ensemble de barres de contrôle sont déterminées par l'intermédiaire de la carte de flux neutronique dans le réacteur en absence de tous les mécanismes d'absorption.

### 5.3.1 Définition de la géométrie du cœur

La figure 5.10a présente le cœur du réacteur SCWR orienté selon l'axe  $z$ . Comme expliqué dans la section 5.1.3 le cœur à une dépendance en température selon l'axe  $z$ . Selon le modèle de température moyenne, on divise le cœur selon l'axe  $z$  en cinq régions. Chacune contient un combustible homogénéisé à une température  $T_i$  ( $i=[1,..,5]$ ). Le cœur complet sans réflecteur mesure environ 495.3 cm de hauteur et chaque canal contient 10 grappes de combustibles. La discréétisation axiale proposée pour définir le modèle DONJON consiste à diviser le cœur axialement en 10 régions de longueur unitaire égale à la longueur d'une grappe de combustible  $L = 49.53$  cm. Ceci est équivalent à diviser chaque région axiale de température  $T_i$  en deux régions égales. Dans le plan  $xy$  la discréétisation typique minimale consiste à utiliser des régions  $(ij)$  qui équivalent à une cellule unitaire homogénéisée de dimension 25 cm  $\times$  25 cm (voir figure 5.10b).



(a) Discréétisation axiale du cœur du réacteur SCWR selon les valeurs moyennes de la température axiale.

(b) Exemple de discréétisation planaire du cœur du réacteur SCWR dans le plan  $xy$  de température  $T_5$ .

Figure 5.10 Discréétisation spatiale du modèle DONJON 3D du réacteur SCWR.

Les deux réflecteurs axiaux (supérieur et inférieur) sont modélisés par deux régions contenant l'eau de modérateur d'une hauteur équivalente à la hauteur d'une grappe de combustible chacune. Les deux réflecteurs sont discréétisés dans le plan  $xy$  de la même façon que les plans de combustible en des carrés de dimension 25 cm  $\times$  25 cm (voir figure 5.11b). Les plans de combustible sont entourés par un réflecteur radial dont l'épaisseur moyenne est équivalente à deux fois le pas du réseau carré de la discréétisation du combustible.

La géométrie du cœur 3D avec les réflecteurs est définie dans DONJON par le module **GEO3D** en utilisant un environnement parallélépipède (**CAR3D**) divisé en 24, 24 et 12 régions respectivement selon les directions  $x$ ,  $y$  et  $z$ . Chaque plan axial contient les index des mélanges associés à chaque cellule. Quatre mélanges sont associés à chaque plan de combustible : réflecteur radial, combustible neuf (lot 1), combustible irradié un cycle (lot 2) et combustible irradié deux cycles. Tenant compte de la discréétisation de la température selon l'axe  $z$  on définit cinq types de plans de combustible. Ceci nécessite donc la définition de 22 mélanges avec les deux mélanges de réflecteurs axiaux. En outre, la discréétisation spatiale de l'environnement **CAR3D** fait apparaître dans la géométrie des cellules normalement inexistantes dans le cœur. Pour les ignorer on leur associe l'indice 0 qui est équivalant à une cellule fictive pour DONJON5 (voir figure 5.11). Des conditions aux frontières de vide (**VOID**) ont été appliquées sur

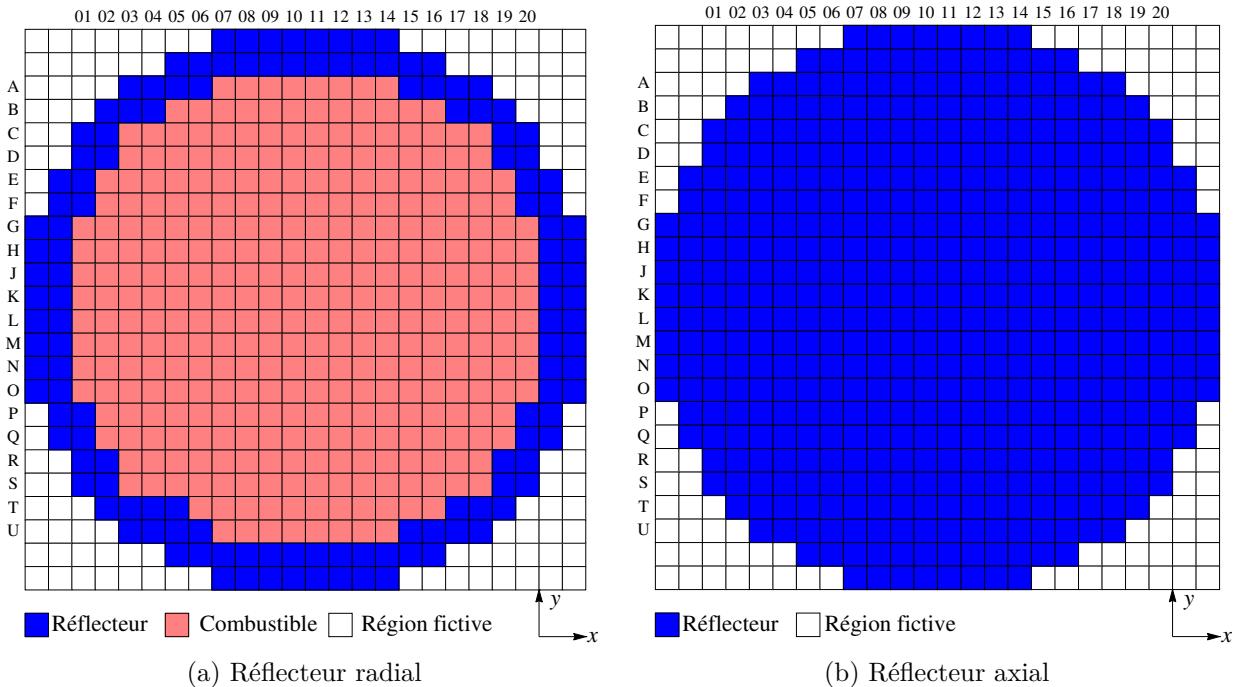


Figure 5.11 Illustration 2D de réflecteurs radial et axial du modèle DONJON du réacteur SCWR.

toutes les surfaces extérieures de l'environnement **CAR3D**. La géométrie est enregistrée dans une structure de données qu'on a appelé **GEOM** et ensuite passée au module **USPLIT** utilisé pour mettre au niveau la structure de données de la géométrie en ajoutant l'analyse de la géométrie (équivalent à la première tâche effectuée par **NXT** dans **DRAGON**). Ainsi, ce module génère une nouvelle structure de données appelé **INDEX** contenant les numéros identifiant les volumes et les mélanges de chaque sous-région.

### 5.3.2 Définition de la géométrie de la barre de contrôle

La modélisation d'une barre de contrôle inclinée dans DONJON n'est pas possible. Dans cette thèse on propose de modéliser la géométrie cylindrique de la barre de contrôle inclinée par des boîtes parallélépipédiques de dimensions équivalentes aux dimensions d'une supercellule ( $50\text{ cm} \times 50\text{ cm} \times 25\text{ cm}$ ). Dans la figure 5.12 on présente le modèle dit d'escalier de la géométrie équivalente d'une barre de contrôle inclinée insérée entre selon la direction  $z$  entre les deux assemblages numéro K et L.

La disposition spatiale des boîtes dans le cœur nécessite plusieurs tâches de programmation dans DONJON pour fournir les bonnes informations aux modules **INIDEV** et **INPROC**. Le processus utilisé pour mettre les boîtes aux bons endroits spatiaux est divisé entre plusieurs procédures où chacune fournit des informations communiquées aux modules **INIDEV** et **INPROC**. Le fonctionnement de ces procédures est résumé dans les séquences suivantes :

1. Initialiser dans le programme principal les paramètres suivants :
  - Positions  $x_-$  et  $x_+$  de la boîte dans le plan numéro Z10 (voir figure 5.12a).
  - Positions  $y_-$  et  $y_+$  de la boîte dans le plan numéro Z10.
  - Positions  $z_-$  et  $z_+$  de la boîte dans le plan numéro Z10.
  - Inclinaison de la barre de contrôle.
2. Le programme principal appelle la procédure **SETDEV**. Cette procédure indexe et analyse les régions équivalentes à la barre de contrôle et met à niveau la structure de données des indices de la géométrie du cœur.
3. La procédure **SETDEV** appelle la fonction **INCPOST** qui calcule les positions  $x_-$ ,  $x_+$ ,  $y_-$ ,  $y_+$ ,  $z_-$  et  $z_+$  pour chaque boîte par plan axial.
4. La procédure **SETDEV** appelle la procédure **DEVL0C** pour indexer les mélanges des boîtes et numérotter les mécanismes de contrôle (c'est-à-dire les boîtes). Dans cette étape le module **INIDEV** est utilisé pour générer vingt mécanismes de réactivité dont dix représentent une portion de la barre de contrôle avec son tube guide et les autres représentent le tube guide sans la barre de contrôle. Pour chaque mécanisme de réactivité les positions spatiales  $x_-$ ,  $x_+$ ,  $y_-$ ,  $y_+$ ,  $z_-$  et  $z_+$  et deux numéros de mélange sont fournis au module **INIDEV** (les sections sections efficaces macroscopiques condensées et homogénéisées présentées dans la section 5.1.3). Ceux-ci serviront à calculer les incrémentations de sections efficaces macroscopiques condensées et homogénéisées pour chaque mécanisme de réactivité.
5. Le programme principal appelle la procédure **DEVCNT**. Cette procédure consiste à créer la structure **PROCESS** contenant plusieurs paramètres utiles comme le nom de chacun

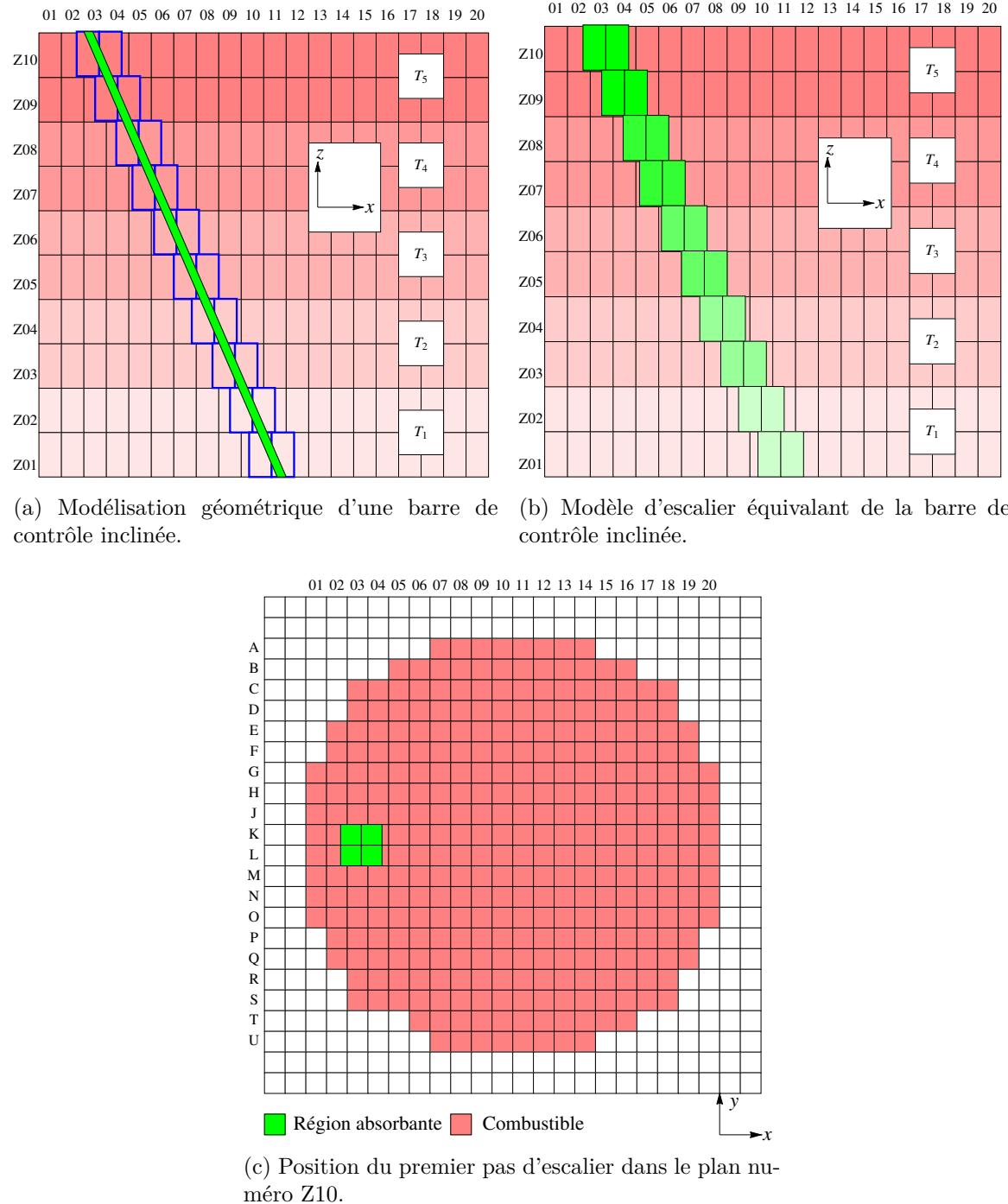


Figure 5.12 Modélisation géométrique de la position des supercellules homogènes d'une barre de contrôle inclinée passant entre les assemblages numéro K et L.

des vingt mécanismes de réactivité, leur appartenance à un banc et leur vitesse pour les simulations cinétiques (Varin, 1995).

### 5.3.3 Stratégie de calcul

#### Modèle d'évolution du combustible

Le modèle d'évolution du combustible sans la présence de mécanismes de réactivité est utilisé pour tracer les cartes de flux neutronique dans le cœur pour plusieurs cycles d'opération et identifier les endroits de hautes densités de flux qui nécessite l'insertion d'une barre de contrôle. Les séquences de calculs suivies dans ce modèle DONJON sont énumérées ci-dessous.

1. Définir et analyser la géométrie du cœur par les modules **GEOD**, **USPLIT** et **TRIVAT**. Les trois structures de données **INDEX**, **GEOM** et **TRACK** sont générées.
2. Définir la géométrie du combustible par le module **INIRES** avec les options **IMOD 4**, **NBUND 10**, **NCHAN 336** et **NGRP 2**. Cela génère la structure de données **RESEAU**.
3. Initialiser les Burnup initiaux des trois zones de combustibles à  $B_e = 0 \text{ GWJ/T}$  en utilisant **INIRES**.
4. Mettre à jour les structures de données **INDEX** et **RESEAU** par le module **REFRES**. En fait, ceci consiste à faire lien entre le réseau original et les numéros identifiants de mélanges.
5. Importer les bases de données réacteur.
6. Convertir les bases de données réacteur en des structures de données utilisables par DONJON en utilisant les modules **XSCONS** et **CRE**. Cela génère les structures de données **TAB** et **MACRES** pour le combustible et **MACRO1** pour les réflecteurs.
7. Initialiser le temps  $t$  à 0 jour et le cycle  $i$  à 1.
8. Créer la bibliothèque de sections efficaces **MACRO2** du combustible au temps  $t$  à partir de structures de données **MACRES**, **INDEX** et **MACRO1** en utilisant le module **INIMAC**.
9. Calculer les matrices du système de différences finies centrées au temps  $t$  en utilisant le module **TRIVAA**.
10. Calculer la distribution de flux **FLUX** dans le cœur au temps  $t$  en utilisant le module **FLUD**. Si un enregistrement **FLUX** existe le module doit mettre à niveau cet enregistrement au lieu de créer un nouvel enregistrement.
11. Calculer le flux moyen dans les régions de combustible au temps  $t$  en utilisant le module **FLXAXC**.
12. Extraire la valeur de  $k_{eff}$  au temps  $t$  en utilisant le module **GREP**
13. Calculer la distribution de puissance dans le cœur au temps  $t$  en utilisant le module **POWER**.

14. Brûler le combustible à une demi-journée en utilisant le module **REFUEL**.
15. Évaluer la réactivité du cœur  $\rho$  au temps  $t$  en utilisant la formule suivante :

$$\rho(\text{mk}) = 1000 \times \frac{k_{eff} - 1}{k_{eff}} \quad (5.31)$$

16. Si  $\rho < 10 \text{ mk}$  :
  - Récupérer les données en fin de cycle pour le cycle  $i$  en sauvegardant les structures de données **RESEAU** et **FLUX** courantes.
  - Procéder au rechargement du cœur à partir des structures **RESEAU** et **TAB** courantes en utilisant le module **REFUEL** et le modèle de rechargement présenté dans la figure 5.13 (Pencer *et al.*, 2013).

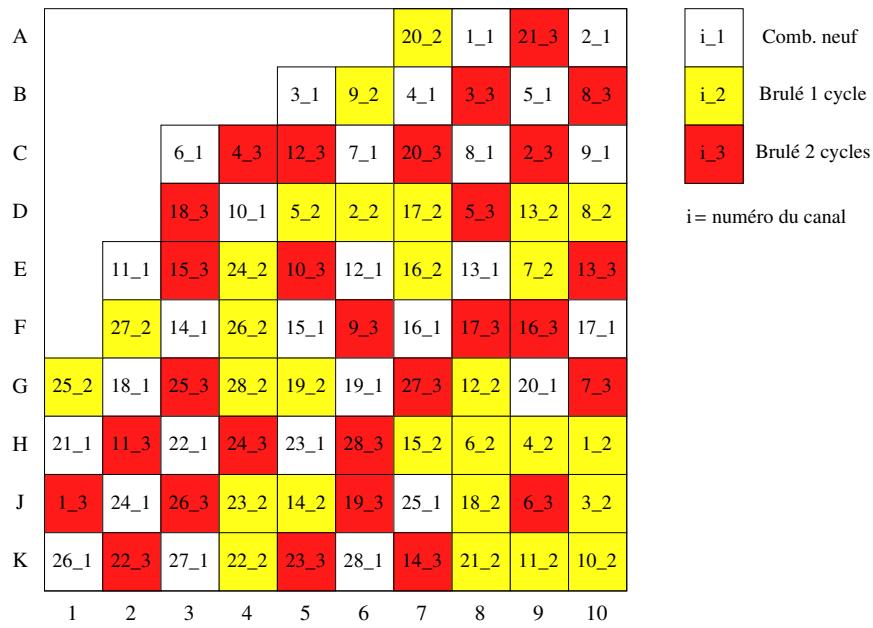


Figure 5.13 Modèle de rechargement du réacteur SCWR.

- Mettre à jour le cycle  $i = i + 1$ .
- 17. Si le cycle est inférieur ou égal au nombre de cycles désiré, reprendre les calculs à partir de l'étape 8. Sinon, mettre fin à la simulation.

### Modèle instantané avec barres de contrôles inclinées

Le modèle instantané consiste à insérer un nombre  $N$  (que l'on fixe par étude de la cartographie de flux du réacteur) des barres de contrôle dans le réacteur à un temps  $t$  fixé et avec

3 zones de Burnup différentes par plan de combustible. Ensuite d'évaluer l'efficacité de ces barres dans le cœur. Ainsi en étudie par ce modèle l'influence de l'ajout d'une concentration donnée de bore naturel dans le modulateur sur l'efficacité des barres de contrôles. Les séquences de calculs suivies dans ce modèle DONJON sont énumérées ci-dessous.

1. Définir et analyser la géométrie du cœur par les modules **GEOD**, **USPLIT** et **TRIVAT**. Les trois structures de données **INDEX**, **GEOM** et **TRACK** sont générés.
2. Définir la géométrie du combustible par le module **INIRES** avec les options **IMOD 4**, **NBUND 10**, **NCHAN 336** et **NGRP 2**. Cela génère la structure de données **RESEAU**.
3. Initialiser les Burnup initiaux des trois zones de combustibles en utilisant **INIRES**.
4. Mettre à jour les structures de données **INDEX** et **RESEAU** par le module **REFRES**.
5. Importer les bases de données réacteur.
6. Convertir les bases de données réacteur en des structures de données utilisables par **DONJON** en utilisant les modules **XSCONS** et **CRE**. Cela génère les structures de données **TAB** et **MACRES** pour le combustible et **MACRO1** pour les réflecteurs.
7. Initialiser les limites spatiales ( $x_-$ ,  $x_+$ ,  $y_-$ ,  $y_+$ ,  $z_-$  et  $z_+$ ) de la première boîte (dans le plan numéro Z10) équivalente à la barre de contrôle inclinée numéro  $n$  et son inclinaison. L'initialisation doit se faire pour les  $N$  barres.
8. Appeler la procédure **SETDEV** pour définir  $10 \times N$  boîtes (voir section 5.3.2). Ceci génère la structure de données **DEVICE**.
9. Appeler la procédure **DEVCNT** pour définir les paramètres de  $10 \times N$  boîtes.
10. Appeler la procédure **DVCMOV** qui utilise le module **LINKDS** pour définir la fraction d'insertion de la barre de contrôle numéro  $n$  dans le cœur. L'ensemble de 10 boîtes représentant le tube guide numéro  $n$  inséré dans le réacteur en permanence. Cependant les dix boîtes correspondent à la barre de contrôle numéro  $n$  dont les fractions d'insertion  $F_{n,k}$  ( $k$  indique le numéro de plan combustible présenté dans la figure 5.12a) dans le cœur respectent la relation suivante :

$$F_{n,k} \text{ varie entre } 0 \text{ et } 1 \quad \begin{cases} F_{n,m} = 0 \text{ pour } m = 1, \dots, k-1 \\ F_{n,m} = 1 \text{ pour } m = k, \dots, N \end{cases} \quad (5.32)$$

11. Créer la bibliothèque de sections efficaces **MACRO2** du combustible à partir de structures de données **MACRES**, **INDEX** et **MACRO1** en utilisant le module **INIMAC**.
12. Créer la bibliothèque de sections efficaces **MACRO3** du combustible et des barres de contrôle à partir de structures de données **DEVICE**, **GEOM** et **MACRO2** en utilisant le module **NEWMAC**.

13. Calculer les matrices du système de différences finies centrées en utilisant le module **TRIVAA**.
14. Calculer la distribution de flux **FLUX** dans le cœur en utilisant le module **FLUD**.
15. Calculer le flux moyen dans les régions de combustible en utilisant le module **FLXAXC**.
16. Extraire la valeur de  $k_{eff}$  en utilisant le module **GREP**.
17. Calculer la distribution de puissance dans le cœur en utilisant le module **POWER**.
18. Récupérer les structures de données **RESEAU** et **FLUX**.

## CHAPITRE 6 ÉVALUATION DU DÉVELOPPEMENT NUMÉRIQUE ET DE L'EFFICACITÉ DES BARRES INCLINÉES

Afin de tester l'implémentation de la nouvelle géométrie dans les modules **GEO** et **NXT** de DRAGON-5, on présente dans ce chapitre une série de tests effectués sur plusieurs modèles géométriques. Les tests sont validés par plusieurs méthodes. En effet, on présente des comparaisons de calcul de volumes et surfaces de plusieurs cas de positions spatiales des géométries annulaires concentriques inclinées en utilisant le logiciel de conception assistée par ordinateur **AUTOCAD**. Ensuite, on effectue des évaluations visuelles des lignes d'intégration par le module **TLM** de DRAGON-5 et le logiciel **Matlab**. De plus, on fait des visualisations des échantillons de points d'intersection des lignes d'intégration avec les surfaces géométriques en utilisant le logiciel **MATHEMATICA**. Enfin, on présente une validation du calcul neutronique du code DRAGON-5 avec le calcul neutronique des mêmes modèles en utilisant le code Monte-Carlo **SERPENT**.

Dans une deuxième étape, on se concentre sur la modélisation des barres de contrôle dans le réacteur refroidi à eau supercritique canadien (SCWR) et on teste leur efficacité pour la réduction de la réactivité du cœur en mode d'opération normale en utilisant le code de diffusion DONJON-3. Les calculs effectués dans cette partie sont :

- Calcul de cellule par DRAGON-5 et SERPENT.
- Calcul de supercellule avec DRAGON-5 et SERPENT.
- Génération des **COMP0s** en fonction de la température et l'inclinaison de la barre de contrôle dans la supercellule.
- Calcul d'évolution et extraction des **COMP0s** en fonction de la température de la cellule unitaire en utilisant DRAGON-5.
- Calcul d'évolution du cœur sur plusieurs cycles en utilisant DONJON-3.
- Calcul instantané du cœur en présence et en absence des barres de contrôle en utilisant DONJON-3

### 6.1 Validation du fonctionnement des routines

Le module **NXT** permet d'arrêter l'enchaînement des routines à l'étape d'analyse de la géométrie sans passer à la partie de traçage et de calcul des lignes d'intégration en utilisant l'option **NOTR**. Cette option avait une grande importance dans ce projet car elle a permis de vérifier si la géométrie est adéquate (les évaluations de surfaces et de volumes sont précises) et que la numérotation respecte l'ordre prévu avant que le processus de calcul des lignes

d'intégrations soit entrepris. Une fois l'analyse de la géométrie complétée on procède au traçage des lignes d'intégration. Ce traçage est vérifié à partir de module TLM et les valeurs de volumes et de surfaces calculés par **NXT**. Les résultats de ce traçage sont aussi comparés à ceux obtenus en utilisant le logiciel **AUTOCAD**. Dans cette section on présente les résultats de l'implémentation de la géométrie cylindrique inclinée 3D dans DRAGON-5.

### 6.1.1 Vérification de calculs de volumes et surfaces

Les résultats du calcul analytique de volumes par les nouvelles routines ajoutés au module **NXT**, sont présentés dans les tableaux 6.1, 6.2 et 6.3, et ils sont comparés aux volumes calculés par le logiciel **AUTOCAD**. Le modèle géométrique qu'on a utilisé consiste à imbriquer un cylindre incliné de rayon  $r$ , de centre  $(x_c, y_c, z_c)$  et d'inclinaison  $\theta$  autour l'axe des  $y$  dans une cellule cartésienne unitaire de dimension ( $2\text{ cm} \times 2\text{ cm} \times 2\text{ cm}$ ). Les résultats ont été testés avec différentes positions du cylindre dans la cellule, et avec diverses combinaisons de rayons et angles.

**AUTOCAD** utilise la méthode de décomposition de la région dont on désire calculer le volume, en un ensemble de lignes 3D très fine et de densité très importante. La précision maximale que **AUTOCAD** peut donner sur cette estimation de volume est de huit chiffres après la virgule en revanche les routines ajoutées au module **NXT** utilise des valeurs en double précision (16 chiffres après la virgule). Cette limitation de précision **AUTOCAD** nous a obligé de présenter dans les tableaux 6.1, 6.2 et 6.3 que des résultats en 8 chiffres après la virgule. Mais cette précision est largement suffisante pour évaluer le calcul de volumes. Un maximum de différence entre le calcul analytique et le calcul d'**AUTOCAD** est de  $10^{-7}$ , donc on peut conclure que notre méthode de calcul analytique est bien réussie. De plus on observe que la différence entre les deux méthodes de calcul augmente légèrement pour les angles permettant au cylindre de toucher les coins de la cellule (voir tableau 6.1) et augmente aussi légèrement lorsque le rayon du cylindre diminue. Cette légère augmentation de la différence est due aux erreurs de calcul de l'approche utilisée par **AUTOCAD** car la méthode utilisée par les routines de **NXT** utilise des expressions analytiques de grande précision.

En deuxième lieu, des tests ont été effectués sur le calcul des surfaces engendrées par intersection de plusieurs cylindres concentriques avec la cellule cartésienne. L'intersection peut se faire uniquement avec le couple de plans  $(x_-, x_+)$  ou  $(z_-, z_+)$  et engendre des surfaces elliptiques concentriques si l'angle d'inclinaison est faible, ou avec tous les plans  $(x_-, x_+, z_-$  et  $z_+)$  si l'angle permet de mettre les cylindres sur les coins de la cellule cartésienne. Le tableau 6.4 présente l'évaluation des surfaces elliptiques dans le plan  $z_+$  obtenues par l'intersection d'un cylindre incliné de divers angles. Pour la même raison que le calcul de volume on observe

Tableau 6.1 Évaluation du volume du cylindre imbriqué dans une cellule en fonction de l'inclinaison.

$\theta$ (°)	$r$ (cm)	$x_c$ (cm)	$y_c$ (cm)	$z_c$ (cm)	Volume NXT (cm <sup>3</sup> )	Volume AUTOCAD (cm <sup>3</sup> )	Différence (cm <sup>3</sup> )
1	0.5	0.0	0.0	0.0	1.57103566	1.57103560	6.0E-08
2	0.5	0.0	0.0	0.0	1.57175379	1.57175380	1.0E-08
3	0.5	0.0	0.0	0.0	1.57295200	1.57295200	0.0E-00
4	0.5	0.0	0.0	0.0	1.57463205	1.57463205	0.0E-00
5	0.5	0.0	0.0	0.0	1.57679651	1.57679651	0.0E-00
10	0.5	0.0	0.0	0.0	1.59502839	1.59502839	0.0E-00
15	0.5	0.0	0.0	0.0	1.62620802	1.62620802	0.0E-00
20	0.5	0.0	0.0	0.0	1.67160653	1.67160654	1.0E-08
25	0.5	0.0	0.0	0.0	1.73308769	1.73308770	1.0E-08
30	0.5	0.0	0.0	0.0	1.79808908	1.79809676	7.7E-06
40	0.5	0.0	0.0	0.0	1.87795557	1.87795613	5.6E-07
50	0.5	0.0	0.0	0.0	1.87795557	1.87795481	7.6E-07
60	0.5	0.0	0.0	0.0	1.79808908	1.79808611	2.9E-06
70	0.5	0.0	0.0	0.0	1.67160653	1.67160654	1.0E-08
80	0.5	0.0	0.0	0.0	1.59502839	1.59502839	0.0E-00

Tableau 6.2 Évaluation du volume en fonction du rayon à une inclinaison  $\theta = 40^\circ$ .

$\theta$ (°)	$r$ (cm)	$x_c$ (cm)	$y_c$ (cm)	$z_c$ (cm)	Volume NXT (cm <sup>3</sup> )	Volume AUTOCAD (cm <sup>3</sup> )	Différence (cm <sup>3</sup> )
40	0.1	0.0	0.0	0.0	0.08202115	0.08202116	1.2E-07
40	0.2	0.0	0.0	0.0	0.32594384	0.32594388	1.2E-07
40	0.3	0.0	0.0	0.0	0.71760812	0.71760831	2.6E-07
40	0.4	0.0	0.0	0.0	1.24037651	1.24037687	2.9E-07
40	0.5	0.0	0.0	0.0	1.87795557	1.87795613	2.9E-07
40	0.6	0.0	0.0	0.0	2.61408421	2.61408427	2.3E-08
40	0.7	0.0	0.0	0.0	3.43250972	3.43250979	2.0E-08
40	0.8	0.0	0.0	0.0	4.31698236	4.31698244	1.8E-08

Tableau 6.3 Évaluation du volume en fonction de la position spatiale à une inclinaison  $\theta = 40^\circ$ .

$\theta$ (°)	$r$ (cm)	$x_c$ (cm)	$y_c$ (cm)	$z_c$ (cm)	Volume NXT (cm <sup>3</sup> )	Volume AutoCAD (cm <sup>3</sup> )	Déférence (cm <sup>3</sup> )
40	0.7	0.0	0.0	0.1	3.41610334	3.41610444	3.2E-07
40	0.7	0.0	0.0	0.2	3.36709520	3.36709628	3.2E-07
40	0.7	0.0	0.0	0.3	3.28612791	3.28612856	1.9E-07
40	0.7	0.0	0.0	0.4	3.17430701	3.17430699	2.0E-08
40	0.7	0.1	0.0	0.0	3.42095453	3.42095559	3.1E-07
40	0.7	0.2	0.0	0.0	3.38639335	3.38639449	3.3E-07
40	0.7	0.3	0.0	0.0	3.32914260	3.32914349	2.6E-07
40	0.7	0.4	0.0	0.0	3.24974116	3.24974160	1.3E-07

une légère différence entre le calcul de surface d'AutoCAD et le calcul analytique de NXT. En effet AutoCAD utilise la méthode de décomposition de la surface en un ensemble de lignes 2D très fines et de densité très importante. Cette estimation de surface comparée au calcul analytique de NXT donne une différence maximale de l'ordre de  $10^{-8}$ . Cette différence de précision entre le calcul de surface et de volume d'AutoCAD est expliquée par le fait qu'il est possible que les lignes 3D utilisées pour l'estimation du volume ne couvrent pas certains coins de la région cylindrique tronquée.

Afin d'évaluer l'efficacité des implémentations pour des cas complexes, on a choisi des cas plus finement discréétisés ayant des intersections avec les arêtes de la cellule. En effet, on a augmenté le nombre des cylindres concentriques dans la cellule d'une part et on se met dans la condition où les bouts de cylindres touchent les coins de la cellule (voir figure 6.1a).

D'abord on a évalué les surfaces générées par l'intersection des cylindres avec la cellule pour un angle qui permet d'avoir la symétrie des résultats selon le plan médian de la cellule (plan noir sur la figure 6.1a). Le modèle géométrique qu'on a utilisé consiste à imbriquer trois cylindres inclinés de rayons respectivement  $r_1 = 0.3\text{ cm}$ ,  $r_2 = 0.4\text{ cm}$  et  $r_3 = 0.5\text{ cm}$  et de centre  $(0, 0, 0)$  dans une cellule cartésienne unitaire de dimension  $(2\text{ cm} \times 2\text{ cm} \times 2\text{ cm})$ . L'angle de symétrie pour cette cellule est  $\theta = 45^\circ$  autour de l'axe des  $y$ .

Le tableau 6.5 présente les résultats de calculs de surfaces par NXT comparés à AutoCAD. Ce tableau permet encore une fois de vérifier l'exactitude de la numérotation des surfaces implémentées dans NXT et la précision du calcul des surfaces. Le triplet des surfaces élémentaires

Tableau 6.4 Évaluation de la surface du cylindre imbriqué dans une cellule en fonction de l'inclinaison sur le plan  $z_+$ .

$\theta$ ( $^{\circ}$ )	$r$ (cm)	Surface NXT ( $\text{cm}^2$ )	Surface AUTOCAD ( $\text{cm}^2$ )	Différence ( $\text{cm}^2$ )
1	0.5	0.78551780	0.78551780	0.0E-00
2	0.5	0.78587690	0.78587690	0.0E-00
3	0.5	0.78647600	0.78647600	0.0E-00
4	0.5	0.78731602	0.78731603	1.0E-08
5	0.5	0.78839825	0.78839826	1.0E-08
10	0.5	0.79751419	0.79751420	1.0E-08
15	0.5	0.81310401	0.81310401	0.0E-00
20	0.5	0.83580326	0.83580327	1.0E-08
25	0.5	0.86354150	0.86354151	1.0E-08

des ellipses d'indices (-1, -2, -3) et (-5, -6, -7) localisées respectivement sur les surfaces  $x_-$  et  $x_+$  sont égaux respectivement aux surfaces symétriques d'indices (-15, -16, -17) et (-11, -12, -13) localisées sur les surfaces  $z_+$  et  $z_-$ , respectivement (voir figure 6.1), avec une différence relative de l'ordre de  $10^{-8} \text{ cm}^2$ . La nature cubique régulière de la cellule permet aussi de montrer la symétrie des résultats par rapport à son centre géométrique.

En second lieu, on a modifié l'angle d'inclinaison pour briser la symétrie des résultats par rapport au plan médian de la cellule. Dans le tableau 6.6 on présente les résultats de calcul de surfaces obtenus pour un angle  $\theta = 30^{\circ}$  pour le modèle géométrique présenté dans le paragraphe précédent. Une symétrie par rapport au centre de la cellule est montrée par les résultats, et la précision est vérifiée par des calculs AUTOCAD.

### 6.1.2 Validation des intersections des lignes d'intégration

Dans cette section on présente des échantillons de résultats obtenus par le script MATHEMATICA qu'on a utilisé pour vérifier les intersections d'une ligne d'intégration avec un cylindre incliné. Ce script est utilisé aussi pour résoudre les problèmes rencontrés avec la nouvelle géométrie annulaire inclinée lors de la période du test de l'implémentation dans NXT.

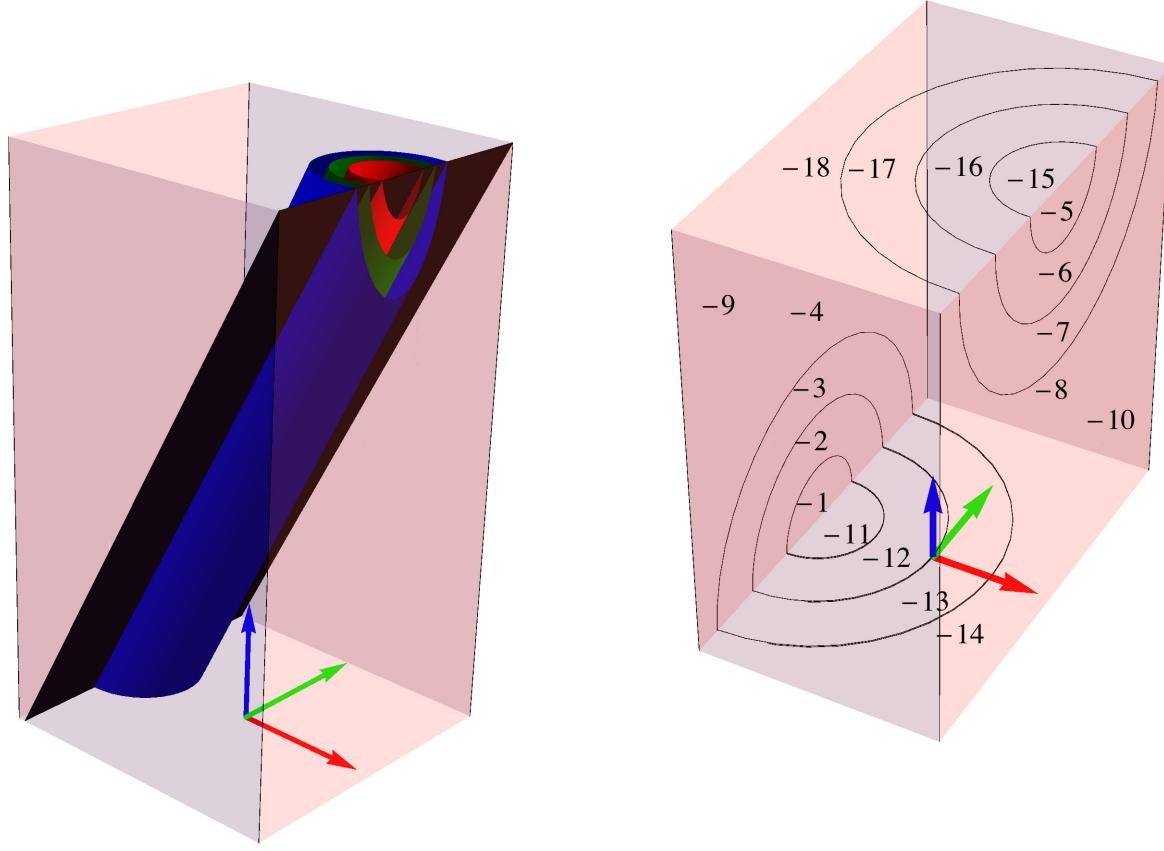
La routine NXTLCY permet le calcul des points d'intersection entre une géométrie annulaire et les lignes d'intégrations. La façon simple de tester le bon fonctionnement de cette routine

Tableau 6.5 Surfaces calculées analytiquement par NXT pour trois cylindres inclinés de  $\theta = 45^\circ$ .

Indices dans DRAGON-5	$r$ (cm)	Surface NXT (cm <sup>2</sup> )	Surface AUTOCAD (cm <sup>2</sup> )	Différence (cm <sup>2</sup> )
-1	0,3	0,19992977	0,19992973	4,0E-08
-2	0,4	0,15550090	0,15550091	7,1E-09
-3	0,5	0,19992973	0,19992973	4,0E-09
-4	-	3,44463960	3,44463963	2,9E-08
-5	0,3	0,19992977	0,19992973	4,0E-08
-6	0,4	0,15550090	0,15550091	7,1E-09
-7	0,5	0,19992973	0,19992973	4,0E-09
-8	-	3,44463960	3,44463963	2,9E-08
-9	-	4,00000000	4,00000000	0,0E-00
-10	-	4,00000000	4,00000000	0,0E-00
-11	0,3	0,19992973	0,19992973	3,8E-09
-12	0,4	0,15550089	0,15550091	1,8E-08
-13	0,5	0,19992972	0,19992973	1,3E-08
-14	-	3,44463966	3,44463963	3,4E-08
-15	0,3	0,19992973	0,19992973	3,8E-09
-16	0,4	0,15550089	0,15550091	1,8E-08
-17	0,5	0,19992972	0,19992973	1,3E-08
-18	-	3,44463966	3,44463963	3,4E-08

Tableau 6.6 Surfaces calculées analytiquement par NXT pour trois cylindres inclinés de  $\theta = 30^\circ$ .

Indices dans DRAGON-5	$r$ (cm)	Surface NXT (cm <sup>2</sup> )	Surface AUTOCAD (cm <sup>2</sup> )	Différence (cm <sup>2</sup> )
-1	0,5	0,12537964	0,12537961	2,6E-08
-2	0,6	0,18515916	0,18515909	7,4E-08
-3	0,8	0,57105459	0,57105462	2,6E-08
-4	-	3,11840661	3,11840668	7,4E-08
-5	0,5	0,12537964	0,12537961	2,6E-08
-6	0,6	0,18515916	0,18515909	7,4E-08
-7	0,8	0,57105459	0,57105462	2,6E-08
-8	-	3,11840661	3,11840668	7,4E-08
-9	-	4,00000000	4,00000000	0,0E-00
-10	-	4,00000000	4,00000000	0,0E-00
-11	0,5	0,83451172	0,83451173	9,4E-09
-12	0,6	0,29213427	0,29213420	7,0E-08
-13	0,8	0,68602908	0,68602912	3,7E-08
-14	-	2,18732493	2,18732495	2,4E-08
-15	0,5	0,83451172	0,83451173	9,4E-09
-16	0,6	0,29213427	0,29213420	7,0E-08
-17	0,8	0,68602908	0,68602912	3,7E-08
-18	-	2,18732493	2,18732495	2,4E-08



(a) Illustration du plan médian de la cellule.

(b) Numérotation des surfaces de la cellule.

Figure 6.1 Illustration de cellule cartésienne contenant trois cylindres concentriques<sup>1</sup>.

est d'ajouter des lignes de codes permettant d'afficher des informations additionnelles dans le fichier de sortie de DRAGON-5. On affiche donc les résultats suivants pour une ligne d'intégration :

- Son identifiant ;
- Son origine spatiale ;
- Sa direction ;
- Ses deux points d'intersection avec la géométrie annulaire ;

On note que les deux points d'intersection peuvent être localisés sur la surface latérale du cylindre ou une surface commune entre la cellule cartésienne et la région annulaire. En effet on montre dans la figure 6.2 trois échantillons de lignes d'intégration : la ligne bleue intersecte le cylindre en un point sur la surface latérale et un autre point sur la surface commune  $z_-$ , la ligne verte intersecte le cylindre en un point appelé double (point commun entre la

surface latérale du cylindre et la surface de l'intersection entre la région annulaire et la cellule Catesienne) et en un point sur la surface commune  $z_-$  et la troisième ligne (rouge) intersecte le cylindre en un point sur la surface latérale et une autre point sur la surface commune  $x_+$ .

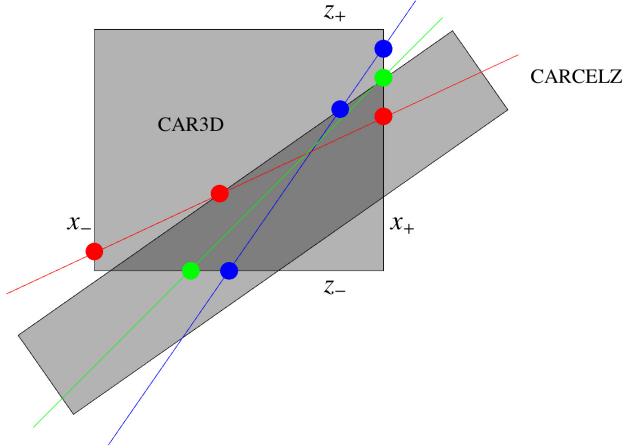
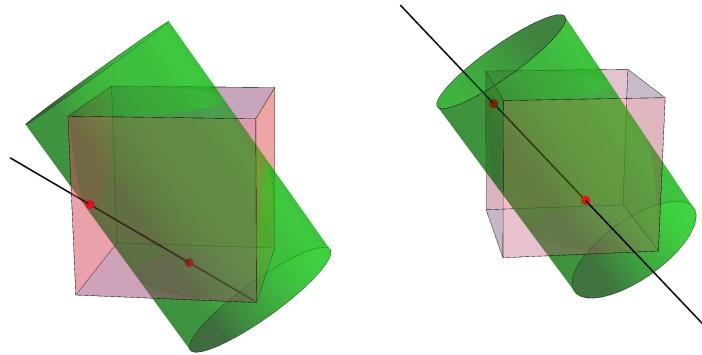
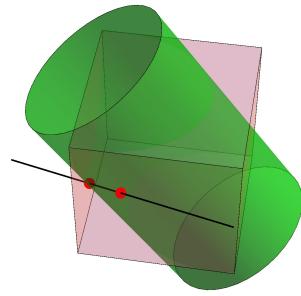


Figure 6.2 Illustration de trois échantillons de lignes d'intégration dans le plan  $y = y_c$ .

On présente dans la figure 6.3 et le tableau 6.7 des échantillons de lignes d'intégration et de points d'intersection extraits de **NXT**. Les trois lignes qu'on a choisies ici pour illustrer la validation de l'intersection des lignes d'intégration avec la région annulaire inclinée montrent les différentes intersections avec la surface latérale du cylindre et les surfaces planes ( $x_-$ ,  $x_+$ ,  $y_-$ ,  $y_+$ ,  $z_-$  et  $z_+$ ) communes entre le cylindre et la cellule.

Tableau 6.7 Échantillons de lignes d'intégration d'un cylindre incliné de  $\theta = 35^\circ$  dans une cellule cubique de côté  $d = 10$  cm.

Ligne	Origine (cm)	Direction	Points d'intersection	Localisation
1	$X = 2.02030510$ $Y = -0.73948298$ $Z = 2.75978798$	$\eta = -0.57735027$ $\xi = 0.57735027$ $\mu = 0.57735025$	$X = 4.48058578$ $Y = -3.19976366$ $Z = 0.29950737$	Surface latérale
			$X = -0.21990697$ $Y = 1.50072909$ $Z = -5.00000000$	Surface $z_-$
2	$X = -2.02030510$ $Y = -2.75978798$ $Z = 0.73948298$	$\eta = -0.57735027$ $\xi = 0.57735027$ $\mu = 0.57735025$	$X = 0.17172207$ $Y = -4.95181516$ $Z = -1.45254413$	Surface latérale
			$X = -5.00000000$ $Y = 0.21990699$ $Z = 3.71917787$	Surface $x_-$
3	$X = -3.49927096$ $Y = -3.49927096$ $Z = 0.00000000$	$\eta = 0.57735027$ $\xi = -0.57735027$ $\mu = 0.57735025$	$X = -4.58540998$ $Y = -2.41313198$ $Z = -1.08613895$	Surface latérale
			$X = -2.07779446$ $Y = -4.92074747$ $Z = 1.42147646$	Surface latérale

(a) Intersections sur la surface latérale et la surface  $z_-$ .(b) Intersections sur la surface latérale et la surface  $x_-$ .

(c) Les deux d'intersections localisées sur la surface latérale.

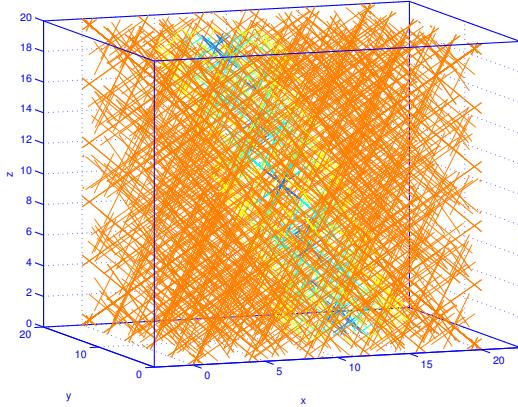
Figure 6.3 Illustration de trois échantillons de lignes d'intégration pour un cylindre incliné de  $\theta = 35^\circ$  et de rayon  $r = 5\text{ cm}$ .

### 6.1.3 Validation de l'emplacement des lignes par le module TLM

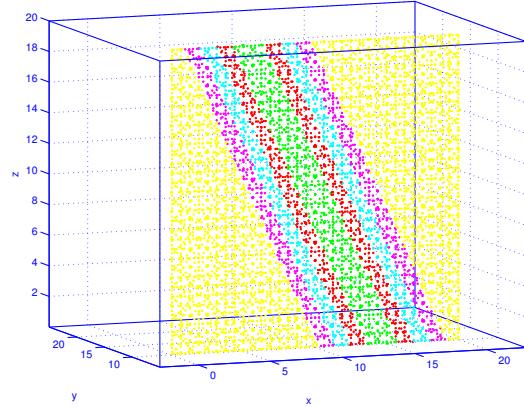
Le module TLM de DRAGON-5 est un outil indispensable pour vérifier la position des points d'intersection des lignes d'intégration avec toutes les surfaces internes et externes de la géométrie. Ce module est programmé pour générer un fichier MATLAB contenant tous les points d'intersection (ou une partie selon le mot-clé spécifié par l'utilisateur) de chaque ligne avec toutes les surfaces. L'exécution de ce fichier MATLAB permet d'illustrer graphiquement toutes les lignes d'intégration avec un code de couleurs qui permet d'identifier les segments associés

à chaque région. En spécifiant une densité de lignes assez faible, et en traçant les lignes dans toutes les directions, on peut représenter explicitement la géométrie, ce qui est utile afin de déterminer la validité des nouvelles routines ajoutées à NXT (Lajoie, 2010).

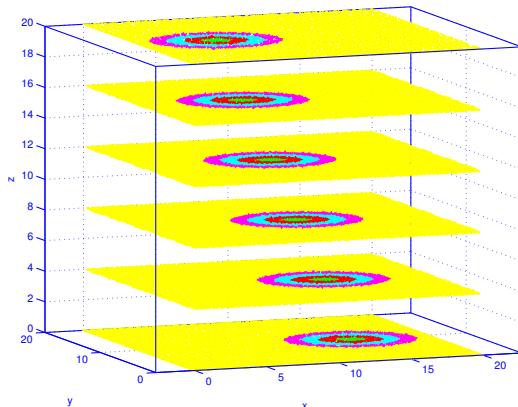
Dans la figure 6.4 on présente des exemples de visualisation des lignes d'intégration d'une cellule carrée de cotées  $d = 10\text{ cm}$  contenant quatre cylindres concentriques de rayons respectivement  $r_1 = 1\text{ cm}$ ,  $r_2 = 2\text{ cm}$ ,  $r_3 = 3\text{ cm}$  et  $r_4 = 4\text{ cm}$  inclinés d'un angle  $\theta = 25^\circ$ . On a utilisé dans cet exemple deux mots-clés permettant de générer deux types d'information dans deux fichiers MATLAB. Le premier mot-clé DIRECTIONS (voir figure 6.4a) permet de générer un fichier contenant toutes les lignes d'intégrations calculé dans des directions qu'on a spécifiées au module NXT.



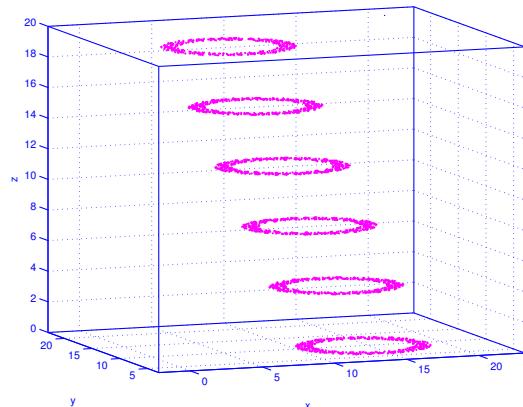
(a) Illustration de toutes les lignes d'intégration traversant toute la géométrie par l'option DIRECTIONS.



(b) Illustration de l'intersection des lignes d'intégration avec le plan  $y = y_c$  à l'aide de l'option PLANA.



(c) Illustration de l'intersection des lignes d'intégration avec des plans équidistants selon l'axe  $z$  à l'aide de l'option PLANA.



(d) Illustration de l'intersection des lignes d'intégration de la quatrième région annulaire avec des plans équidistants selon l'axe  $z$  à l'aide de l'option PLANA.

Figure 6.4 Visualisation des lignes d'intégration à l'aide du module TLM.

Une deuxième option qui permet de mieux visualiser les lignes d'intégration dans les régions est d'utiliser l'option **PLANA**. Cette option permet d'afficher que les points d'intersection des lignes d'intégrations avec un ou plusieurs plans qu'on spécifie avec les paramètres de cette option. Dans les figures 6.4b, 6.4c et 6.4d on peut visualiser clairement les géométries annulaires inclinées en utilisant respectivement un plan perpendiculaire à l'axe des  $y$  et localisé au centre des régions annulaires, des plans équidistants perpendiculaires à l'axe de  $z$  et dans la dernière sous figure on a illustré les lignes d'intégration de la quatrième région annulaire dans des plans équidistants perpendiculaires à l'axe de  $z$ .

On a pu donc observer les régions annulaires inclinées, et ainsi déterminer si les lignes d'intégration qui sont générées sont localisées exactement dans la région appropriée de la géométrie, et donc si les implémentations dans le module **NXT** sont bien réussies.

En outre, le module **NXT** permet de calculer numériquement les volumes et les surfaces de la géométrie en fonction des longueurs respectives des segments qui traversent chaque région, et d'en effectuer la comparaison avec les volumes et les surfaces analytiques calculés préalablement par les routines ajoutées pour les régions annulaires inclinées. Évidemment, ces volumes seront fortement dépendants de la densité de lignes générées, car il faudra qu'une quantité suffisante de lignes traverse chaque région dont on veut calculer le volume et les surfaces d'intersections. Dans les tableaux 6.9 et 6.10 on montre la convergence des volumes et surfaces calculés numériquement par les segments d'intégration vers les volumes et les surfaces analytiques en fonction des paramètres **nangl** et **dens** de la commande **TISO** du module **NXT** qui indiquent respectivement l'ordre de la quadrature angulaire et la densité des lignes d'intégration par  $\text{cm}^2$ . Ce test est fait sur une supercellule 3D contenant trois cylindres inclinés d'un angle  $\theta = 20^\circ$ . Dans les deux tableaux, on présente l'erreur quadratique moyenne définie par l'expression 6.1, l'erreur maximale et l'erreur moyenne sur les volumes et les surfaces calculés par les segments d'intégration.

$$\begin{aligned} EQM_V &= \sqrt{\frac{1}{N_R} \sum_{i=1}^{N_R} (V_{analytique}(i) - V_{numérique}(i))^2} \\ EQM_S &= \sqrt{\frac{1}{N_S} \sum_{i=1}^{N_S} (S_{analytique}(i) - S_{numérique}(i))^2} \end{aligned} \quad (6.1)$$

où  $N_R$ ,  $N_S$ ,  $V$  et  $S$  indiquent respectivement le nombre des régions, le nombre des surfaces, le volume et la surface.

Selon les résultats montrés dans les tableaux 6.9 et 6.10 on observe que les erreurs diminuent avec l'augmentation de la densité des lignes d'intégration et avec l'augmentation de l'ordre de quadrature angulaire. En effet l'augmentation de la valeur des paramètres **nangl** et **dens**

assure la couverture fine des régions et des surfaces par les segments d'intégration. Cet effet est observé qualitativement dans le tableau 6.9 où l'erreur quadratique moyenne sur les volumes passe de 2.41 % à une valeur minimale de 0.72 % pour une densité  $30 \text{ cm}^{-2}$  à l'ordre angulaire 4 et dans le tableau 6.10 où l'erreur quadratique moyenne sur les surfaces passe de 11.70 % à une valeur minimale de 1.78 % pour une densité  $30 \text{ cm}^{-2}$  et à l'ordre angulaire 8.

Tableau 6.9 Erreurs sur les volumes calculés numériquement par NXT.

Ordre	Densité ( $\text{cm}^{-2}$ )	Erreur EQM (%)	Erreur Max. (%)	Erreur Moy. (%)
4	1	2,41	5,91	-0,95
	10	0,78	1,46	-0,51
	20	0,77	1,40	-0,50
	30	0,72	1,27	-0,47
8	1	1,43	3,20	-0,82
	10	1,14	2,58	-0,69
	20	1,11	2,56	-0,69
	30	1,09	2,55	-0,66

Tableau 6.10 Erreurs sur les surfaces calculées numériquement par NXT.

Ordre	Densité ( $\text{cm}^{-2}$ )	Erreur EQM (%)	Erreur Max. (%)	Erreur Moy. (%)
4	1	11,70	37,43	2,74
	10	5,45	14,58	3,34
	20	4,33	4,98	4,06
	30	4,01	5,57	3,62
8	1	7,74	17,80	1,45
	10	2,39	6,97	0,87
	20	1,89	4,96	0,06
	30	1,78	4,04	0,54

## 6.2 Validation du calcul neutronique par SERPENT

Finalement, une dernière vérification doit être effectuée pour s'assurer que le calcul neutronique d'une géométrie contenant des absorbeurs de neutrons annulaires et inclinés est capable de déterminer la réponse approximative des propriétés du modèle envers la réactivité négative ajoutée par les absorbeurs de neutrons.

Dans cette section on présente le modèle de la cellule unitaire et le modèle de la supercellule en deux sous-sections. Les simulations présentées dans ces sous-sections ont été réalisées pour du combustible neuf et pour les cinq niveaux axiaux du couple température-densité du caloporteur (sauf pour la supercellule où on présente des résultats pour un seul niveau).

### 6.2.1 Modèle de la cellule unitaire

Le tableau 6.11 présente les résultats de la simulation de la cellule unitaire par DRAGON-5 et SERPENT pour les cinq niveaux axiaux du couple température-densité du caloporteur. Les indices 1 et 2 dans le tableau indiquent respectivement les résultats obtenus par SERPENT et les résultats obtenus par DRAGON-5. Ainsi la réactivité de la cellule est évaluée à partir de l'équation suivante :

$$\rho = 1000 \times \frac{k_\infty - 1}{k_\infty} \quad (6.2)$$

La bibliothèque des sections efficaces basée sur l'évaluation ENDF/B.VII, 10000 neutrons sources par cycle, 2000 cycles actifs et 200 cycles inactifs ont été utilisés pour réaliser les calculs en deux dimensions de la cellule unitaire. Les résultats obtenus par le calcul SERPENT ont une erreur relative maximale égale à 0.03 %. Ce qui correspond à une erreur relative maximale égale à 0.1 % sur les valeurs de la réactivité.

Rappelons que les cinq niveaux axiaux du couple température-densité du caloporteur sont respectivement selon l'axe  $z$  positif : ( $T = 600\text{ K}$ ,  $D = 592.54\text{ kg/m}^3$ ), ( $T = 600\text{ K}$ ,  $D = 382.46\text{ kg/m}^3$ ), ( $T = 600\text{ K}$ ,  $D = 160.92\text{ kg/m}^3$ ), ( $T = 900\text{ K}$ ,  $D = 89.49\text{ kg/m}^3$ ) et ( $T = 900\text{ K}$ ,  $D = 69.63\text{ kg/m}^3$ ). La bibliothèque des sections efficaces basée sur l'évaluation ENDF/B.VII, la discréétisation spatiale de la cellule unitaire présentée dans le tableau 5.1 et une densité de ligne d'intégration de  $20\text{ cm}^{-1}$  et un ordre quadratique angulaire égale à 20 sont utilisés pour réaliser les calculs en deux dimensions de la cellule unitaire par DRAGON-5.

Selon le tableau 6.11 on observe que la réactivité augmente avec l'augmentation de la température ce qui est observé lorsque la température augmente de 600 K à 900 K entre le troisième niveau et le quatrième niveau. Ainsi, on observe que la réactivité augmente avec la diminution de la densité du caloporteur ce qui est observé dans les trois premiers niveaux qui ont une température fixe de (600 K) et aussi dans les deux derniers niveaux qui ont une température fixe de 900 K et une densité de caloporteur variable. Ces deux observations sont confirmées par les deux codes avec une différence maximale de (5.4 mk) entre les deux méthodes de simulation. La différence de réactivité observée entre les deux codes de calcul (DRAGON-5 et SERPENT) est expliquée d'une part par la différence de bibliothèque de sections efficaces

car SERPENT utilise des sections efficaces continues en énergie mais DRAGON-5 utilise une bibliothèque condensée en 69 groupes d'énergie et d'autre part par la différence de résolution de l'équation de transport entre les deux codes.

Tableau 6.11 Évaluation de la réactivité de la cellule unitaire par SERPENT (indice 1) et DRAGON-5 (indice 2).

Niveau moyen (m)	$k_{\infty}^1$	$\rho^1$ (mk)	$k_{\infty}^2$	$\rho^2$ (mk)	$\rho^1 - \rho^2$ (mk)
0,5	1,28813	223,7	1,28298	220,6	3,1
1,5	1,29067	225,2	1,28421	221,3	3,9
2,5	1,29722	229,1	1,28912	224,3	4,8
3,5	1,30090	231,3	1,29186	225,9	5,4
4,5	1,30187	231,9	1,29292	226,6	5,3

### 6.2.2 Modèle de la supercellule

L'idée pratique pour valider le calcul neutronique en utilisant la nouvelle géométrie implémentée dans DRAGON-5 consiste à comparer l'effet de différentes inclinaisons d'une barre de contrôle insérée dans une super cellule en utilisant DRAGON-5 et SERPENT. La géométrie de la supercellule utilisée pour ce calcul est décrite dans le paragraphe 5.2.2. Par contre, afin de réduire du temps de simulation (à cause du nombre de régions) on a utilisé une hauteur égale à 25 cm (contrairement à la hauteur du modèle de génération des COMPOS égale à 49.53 cm). Ainsi, toutes les simulations sont faites pour le premier niveau selon  $z$  du couple température-densité de caloporteur égale à ( $T = 600$  K,  $D = 592.54$  kg /m<sup>3</sup>) décrit dans le tableau 5.2.

Dans le Tableau 6.12 on présente les résultats obtenus pour cinq inclinaisons de la barre de contrôle dans la supercellule, ainsi qu'un calcul de supercellule sans barre de contrôle utilisé pour évaluer la réactivité négative ajouté par la barre de contrôle dans la supercellule. La réactivité  $\rho^i$  et la réactivité négative  $\Delta\rho^i$  ajoutée par la barre de contrôle inclinée sont définies par les expressions suivantes :

$$\rho^i = \frac{1 - k_{\infty}^i}{k_{\infty}^i} \quad (6.3)$$

$$\Delta\rho^i = \rho^{i,\text{REF}} - \rho^{i,\text{inclinée}} \quad (6.4)$$

où  $\rho^{i,\text{REF}}$  et  $\rho^{i,\text{inclinée}}$  sont respectivement la réactivité de référence calculée sans barre de

contrôle et la réactivité calculée en présence d'une barre de contrôle inclinée. L'indice i est égal 1 ou 2 qui indiquent respectivement les résultats associés à SERPENT et DRAGON-5.

Tableau 6.12 Évaluation de la réactivité négative d'une barre de contrôle inclinée ajoutée dans la supercellule.

$\theta$ (°)	$k_\infty^2$	$\rho^2$ (mk)	$\Delta\rho^2$ (mk)	$k_\infty^1$	$\rho^1$ (mk)	$\Delta\rho^1$ (mk)	$\Delta\rho^1-\Delta\rho^2$ (mk)
Ref.	1,26255	208,0		1,28823	223,7		
0	1,21626	177,8	30,1	1,24055	193,9	29,6	-0,6
20	1,21152	174,6	33,4	1,23885	192,8	30,7	-2,7
45	1,1937	162,3	45,7	1,22964	186,8	36,7	-9,0
70	1,15843	136,8	71,2	1,20393	169,4	54,1	-17,1
90	1,16433	141,1	66,8	1,20417	169,6	53,9	-12,9

La bibliothèque des sections efficaces basée sur l'évaluation ENDF/B.VII, 100000 neutrons sources par cycle, 2000 cycles actifs et 200 cycles inactifs ont été utilisés pour réaliser les calculs en trois dimensions de la supercellule par SERPENT. Les résultats obtenus par ces paramètres ont une erreur relative maximale égale à 0,03 %. L'augmentation progressive de l'inclinaison de la barre de contrôle dans la supercellule augmente le volume de la barre dans la supercellule (de 25 cm pour  $\theta = 0^\circ$  à 50 cm pour  $\theta = 90^\circ$ ). Cette augmentation de volume est équivalente à une augmentation de la matière absorbante dans la supercellule. À son tour cette augmentation de matière absorbante est confirmée par la variation des sections efficaces d'absorption ( $\Sigma_a^i$ ) et de capture ( $\Sigma_c^i$ ) présentées dans le tableau 6.13. Cette augmentation de sections efficaces cause une chute du facteur de multiplication infini ( $k_\infty^i$ ), d'où l'augmentation de la valeur de la réactivité négative ajoutée à la supercellule (voir tableau 6.12).

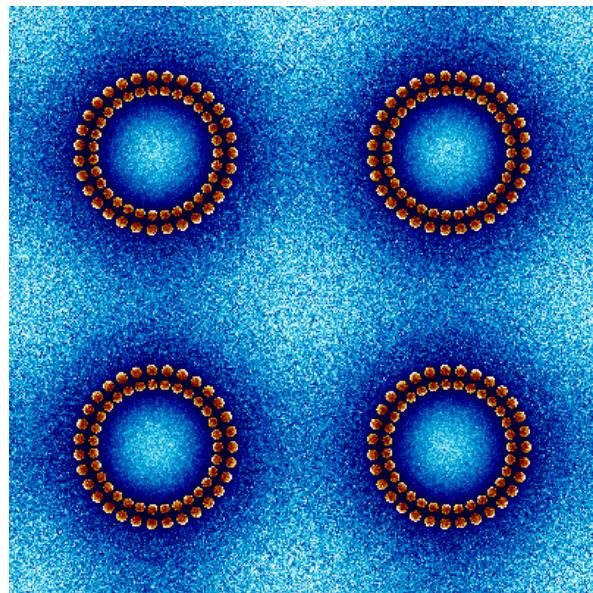
Les figures 6.5a, 6.5b, 6.5c et 6.5d ont été produite avec le traceur de taux de réactions `mesh` de SERPENT. Les différents tons de bleu représentent la distribution du flux thermique (en dessous de 0,625 eV) dans la cellule unitaire et les différents tons de brun représentent la distribution de puissance dans la grappe de combustible. De plus, les tons clairs et foncés indiquent respectivement des valeurs élevées et faibles. Une description plus détaillée des couleurs n'est pas disponible (Harrisson, 2015).

Les deux situations dont lesquelles les figures sont générées montrent que le flux thermique augmente dans l'environnement de la barre de contrôle inclinée à cause de l'absorption des neutrons rapides. Cette différence entre, par exemple, la figure 6.5a et la figure 6.5b est

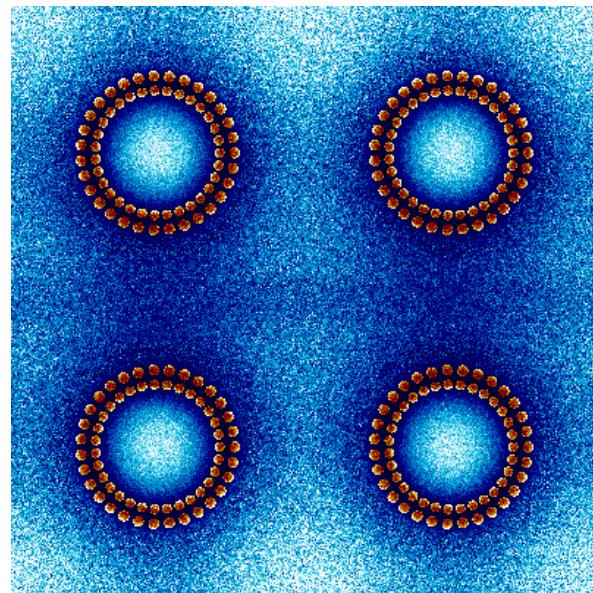
Tableau 6.13 Évaluation des sections efficaces totales et du flux total condensés à un groupe d'énergie du modèle de la supercellule avec barre de contrôle inclinée.

	$\theta = 0^\circ$	$\theta = 20^\circ$	$\theta = 45^\circ$	$\theta = 70^\circ$	$\theta = 90^\circ$
$\Phi^1$	97,1	97,0	96,8	95,5	95,4
$\Phi^2$	98,2	97,9	97,0	95,2	95,5
$\Phi^1 - \Phi^2$	-1,2	-0,9	-0,2	0,3	0,0
$\Sigma_f^1$	0,00440	0,00440	0,00438	0,00435	0,00435
$\Sigma_f^2$	0,00429	0,00429	0,00426	0,00429	0,00426
$\Sigma_f^1 - \Sigma_f^2$	0,00011	0,00011	0,00012	0,00005	0,00009
$\Sigma_c^1$	0,00592	0,00591	0,00595	0,00613	0,00613
$\Sigma_c^2$	0,00588	0,00592	0,00604	0,00621	0,00625
$\Sigma_c^1 - \Sigma_c^2$	0,00004	-0,00001	-0,00009	-0,00007	-0,00012
$\Sigma_a^1$	0,01030	0,01031	0,01033	0,01043	0,01048
$\Sigma_a^2$	0,01018	0,01022	0,01031	0,01051	0,01047
$\Sigma_a^1 - \Sigma_a^2$	0,00012	0,00009	0,00002	-0,00008	0,00001
$\Sigma_s^1$	0,44583	0,45888	0,44577	0,44530	0,44540
$\Sigma_s^2$	0,44304	0,44284	0,44242	0,44154	0,44168
$\Sigma_s^1 - \Sigma_s^2$	0,00279	0,01604	0,00335	0,00376	0,00372
$\nu_1 \Sigma_f^1$	0,01274	0,01273	0,01267	0,01258	0,01258
$\nu_2 \Sigma_f^2$	0,01238	0,01240	0,01230	0,01217	0,01219
$\nu_1 \Sigma_f^1 - \nu_2 \Sigma_f^2$	0,00036	0,00033	0,00037	0,00041	0,00039

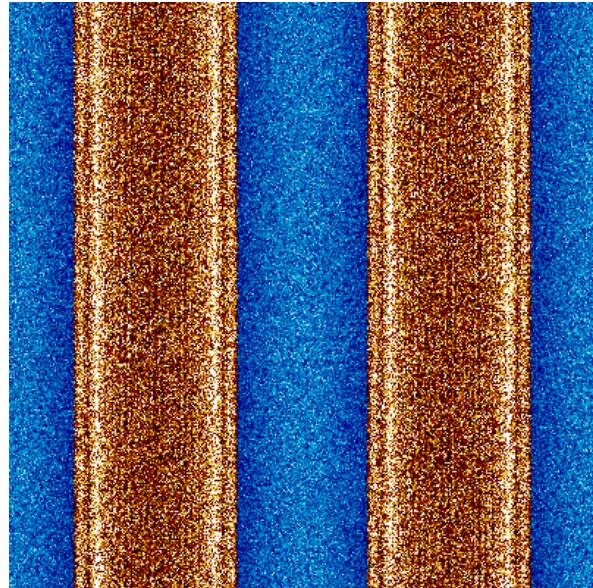
identifiée par l'augmentation du ton foncé de la couleur bleue qui indique la distribution du flux thermique. Dans le tableau 6.13 on peut aussi remarquer que la distribution du flux total diminue avec l'augmentation de l'inclinaison. Les simulations avec les deux inclinaisons  $\theta = 0^\circ$  et  $\theta = 90^\circ$  de la supercellule sont comparées respectivement avec un modèle de supercellule contenant un **CARCELZ** et un modèle de supercellule contenant **CARCELX** (version DRAGON-5 sans modifications). Ces deux façons de modélisation des deux inclinaisons  $\theta = 0^\circ$  et  $\theta = 90^\circ$  donnent les mêmes résultats pour le calcul neutronique et pour l'évaluation des surfaces et des volumes d'intersection des régions annulaires avec la région cartésienne 3D.



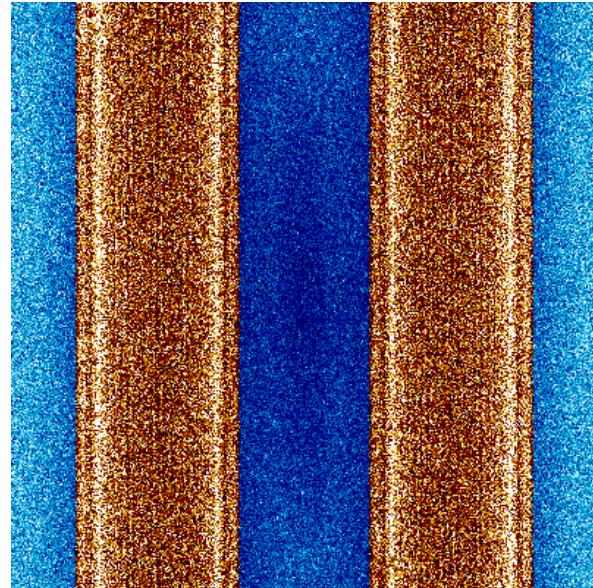
(a) Vue 2D dans le plan  $z = z_c$  pour une supercellule sans barre de contrôle.



(b) Vue 2D dans le plan  $z = z_c$  pour une supercellule contenant une barre de contrôle inclinée de  $\theta = 70^\circ$ .



(c) Vue 2D dans le plan  $y = y_c$  pour une supercellule sans barre de contrôle.



(d) Vue 2D dans le plan  $y = y_c$  pour une supercellule contenant une barre de contrôle inclinée de  $\theta = 70^\circ$ .

Figure 6.5 Distributions de puissance (tons de brun) et du flux thermique (tons de bleu) dans la supercellule en 3D produites par SERPENT.

## 6.3 Application des implémentations DRAGON-5 dans le calcul du cœur

Cette section présente d'abord les résultats de la modélisation du cœur SCWR avec le code DONJON-3 avec une étude d'évolution de combustible sans la présence des mécanismes de réactivité. Ensuite l'accent est mis sur l'identification des zones de hautes densités de flux neutroniques qui seront être utilisés pour l'identification des emplacements adéquats des barres de contrôle dont on désire évaluer l'impact sur la réactivité du cœur.

### 6.3.1 Estimation de la réactivité des cycles

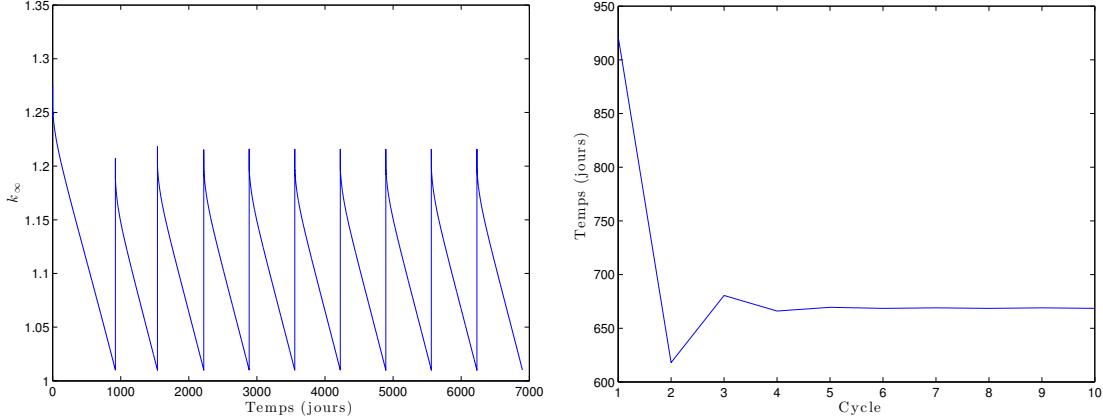
Le modèle d'évolution du cœur par DONJON-3 permet d'estimer plusieurs paramètres et propriétés pour le cœur du réacteur SCWR, comme la longueur de la période d'opération du réacteur, la distribution de flux dans le cœur et l'excès de la réactivité en début de cycle et sa variation en fonction du temps.

On présente dans cette section la variation de la réactivité en fonction du temps d'évolution du combustible. On utilisant le module **REFUEL** on peut brûler le combustible sur un pas de temps égal à une demi-journée et après chaque évolution on recalcule le nouveau flux et on évalue le facteur de multiplication infinie du cœur

Le facteur de multiplication infini du cœur  $k_{\infty}$  est enregistré dans le répertoire **K-EFFECTIVE** de la structure de données **/fluxunk/** générée par le module **FLUD**. On a extrait sa valeur après chaque période d'évolution avec le module **GREP** et elle est imprimée dans le fichier de sortie avec le temps d'évolution et le cycle d'opération à l'aide de la commande **ECHO** de **CLE-2000**. Le rechargement est effectué à l'aide du module **REFUEL** on utilisant le schéma de rechargement présenté dans la figure 5.13, et dont la description est décrite dans une procédure séparée qui peut être utilisée par le fichier principal au besoin. Après chaque étape de combustion on évalue la valeur de la réactivité en utilisant l'expression 6.2. Si cette valeur est inférieure ou égale à 10 mk le rechargement du combustible est effectué et le nombre des cycles est augmenté de 1 (valeur limite de la réactivité imposée dans le rapport technique Wang *et al.* (2013)).

Les figures 6.6a et 6.6b présente respectivement la variation du facteur de la multiplication infini en fonction du temps et la variation de la période d'opération on fonction du temps. On observe que la valeur maximale du facteur de multiplication commence à se stabiliser dès le troisième cycle d'opération. Cette stabilisation est confirmée par les figures 6.7b et 6.7a qui montrent que la réactivité évaluée au début de chaque cycle devient identique à la réactivité du cycle précédent dès le troisième cycle et elle égale approximativement à 176 mk. L'importante variation de la réactivité pour les deux premiers cycles est expliquée par le fait

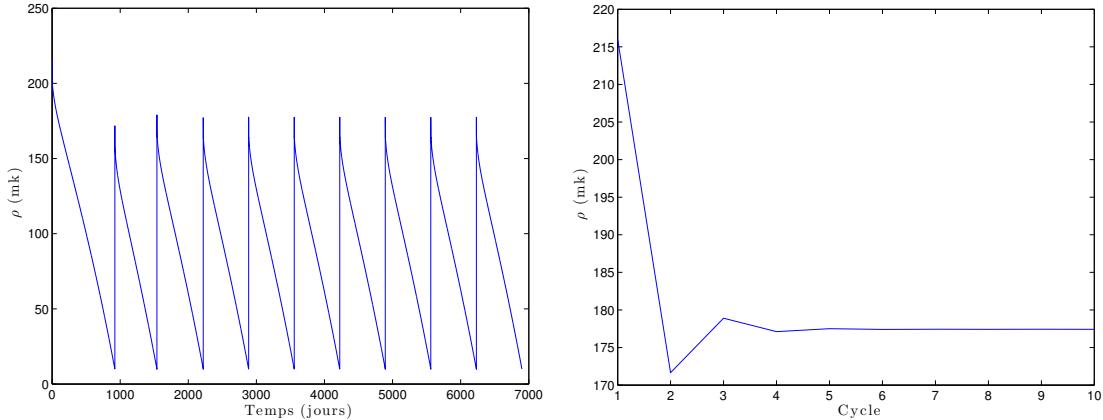
que les lots de rechargement ne sont pas identiques aux lots des autres cycles.



(a) Évolution du facteur de multiplication infinie en fonction du temps.

(b) Évaluation de longueur des cycles.

Figure 6.6 Évaluation de la période de rechargement du cœur du réacteur SCWR.



(a) Évolution de la réactivité en fonction des cycles.

(b) Évolution de la réactivité en fonction du temps.

Figure 6.7 Estimation de l'excès de réactivité de la période de rechargement du cœur.

En effet, dans le premier cycle le cœur ne contient que du combustible neuf, dans le deuxième cycle le cœur contient deux tiers de combustible irradié une seule fois et un tiers de combustible neuf et à partir du troisième cycle le cœur contient 3 lots égaux de combustible neuf, du combustible irradié une seule fois et du combustible irradié deux fois. De plus, on observe dans la figure 6.6b que la période d'opération du réacteur (cycle) se stabilise à approximativement 670 jours après le passage du troisième cycle d'opération. Cette longueur est évaluée

par l'expression suivante :

$$L_{cycle} = t_{EOC(i)} - t_{BOC(i)} \quad (6.5)$$

où  $t_{EOC(i)}$  et  $t_{BOC(i)}$  sont respectivement les coordonnées de temps de la fin et du début du cycle  $i$  imprimé par la commande ECHO du CLE-2000. Le contrôle du réacteur avec une réactivité initiale au début de chaque cycle de 176 mk en utilisant des mécanismes de réactivité est difficile et non sécuritaire. On utilise en pratique pour réduire cette réactivité un poison dissous dans le modérateur (acide borique) au démarrage de chaque cycle. En utilisant une concentration adéquate de bore naturel la réactivité initiale de chaque cycle doit diminuer à 100 mk. Cette diminution cause une réduction importante sur la longueur de cycle. En effet, des études pour un réacteur SCWR dont la cellule unitaire se compose d'une grappe de combustible à 54 crayons de combustible (Harrisson, 2015) montrent que la longueur du cycle est de l'ordre de 300 jours avec une réactivité initiale par cycle de 100 mk. De même, la réduction de la réactivité initiale du réacteur canadien à eau super-critique dont la cellule unitaire se compose d'une grappe de combustible à 62 crayons de combustible réduit la longueur du cycle qu'on a estimé dans cette thèse de 670 jours à 425 jours. De plus, des études récentes du réacteur canadien à eau super-critique dont la cellule unitaire se compose d'une grappe de combustible à 64 crayons de combustible montrent que la longueur du cycle est d'environ 405 jours (Yetisir *et al.*, 2016).

### 6.3.2 Estimation des positions des barres de contrôle inclinées

Le module OUT de DONJON est l'équivalent en quelque sorte au module EDI de DRAGON-5. Ce module permet de traiter les structures de données /fluxunk/ du module FLUD, /macrolib/, /geometry/ du module GEOD et tracking du module TRIVAT pour générer un fichier contenant les volumes et les flux par groupes de chaque région. Le traitement du fichier de flux généré par le logiciel MATLAB permet de faire une cartographie de flux par plan axial.

Les figures 6.8 et 6.9 présentent respectivement le flux rapide et thermique par plan de combustible à la fin du quatrième cycle de combustion. Les plans de combustible sont représentés par couple température-densité de caloporteur. On observe clairement dans les figures du flux rapide (figures 6.8a, 6.8b, 6.8c, 6.8d et 6.8e) que la distribution de flux est importante dans le deuxième plan de combustible de température-densité égale à ( $T = 600$  K,  $D = 382.46$  kg /m<sup>3</sup>). On observe aussi que cette distribution est élevée dans une zone radiale dans laquelle le nombre des canaux à combustible neuf sont importants. Cette zone radiale est approximativement localisée entre un rayon interne égal à  $r_i = 100$  cm et un rayon externe égal à  $r_e = 200$  cm pour les distributions de flux rapide ainsi que thermique (voir figures 6.8

et 6.9). Donc la première évaluation qu'on a tiré de cette analyse c'est que les barres de contrôle doivent être localisées en grand poids dans cette région.

On observe aussi que la distribution de flux rapide présente douze positions dans le deuxième plan où le flux rapide est très important (zone de tons brun sur la figure 6.8b). Donc il est préférable que les barres de contrôle passent par ces zones pour réduire la densité de flux.

La stratégie qu'on a proposée dans cette thèse pour localiser des barres de contrôle dans le cœur repose sur deux conditions : d'une part il faut qu'une barre de contrôle passe par une ou les zone(s) de haute(s) densité de flux et d'autre part il faut que les barres ne touchent pas le système de tuyauterie dans la face supérieure du réacteur. La première condition est déterminée par les douze zones du deuxième plan de combustible qu'on a identifiées dans le paragraphe précédent. Pour ce qui concerne la deuxième condition, les positions et les dimensions exactes du système de tuyauterie n'étaient pas fixées par AECL lorsqu'on a commencé les simulations du cœur, donc on a utilisé l'approche suivante : une barre de contrôle doit passer par un point de haute densité de flux et un point situé sur la face latérale du réflecteur axial supérieur (point vert illustré dans la figure 6.10). Ce point est aussi choisi de façon à ce qu'il soit à mi-hauteur du réflecteur supérieur.

Le tableau 6.14 présente les positions de douze barres de contrôle dans le cœur du réacteur SCWR évaluées par l'intermédiaire des couples de points vérifiant les deux conditions exigées dans le paragraphe précédent. Ainsi leurs sens d'insertion dans le cœur (dans le plan *xy*) sont présentés dans la figure 6.11.

### 6.3.3 Efficacité des barres de contrôle inclinées

Pour évaluer la réponse du cœur en présence des barres de contrôle on a proposé d'étudier l'effet de douze barres de contrôle dont les positions sont données dans la section 6.3.2 durant toute la période d'évolution du premier cycle. Ce choix est justifié par le fait que le premier cycle est le plus actif car il ne contient que du combustible neuf et sa réactivité est la plus importante comparée aux autres cycles d'exploitation du réacteur. De plus la conception des barres de contrôle de la réactivité doit se faire une fois pour tout, c'est-à-dire les positions spatiales des guides de barres de contrôle doivent rester les mêmes dans le réacteur durant tout sa période d'exploitation.

La durée de vie du premier cycle est évaluée selon nos simulations DONJON-3 à 911 jours. Donc on a proposé d'évaluer la réponse du cœur pour un pas de temps de 100 jours. La stratégie qu'on a utilisée consiste à évoluer le réacteur sans barres de contrôle avec un pas de temps égal à 0.5 jour et mettre à jour les structures de */fluxunk/* du module FLUD, */table/*

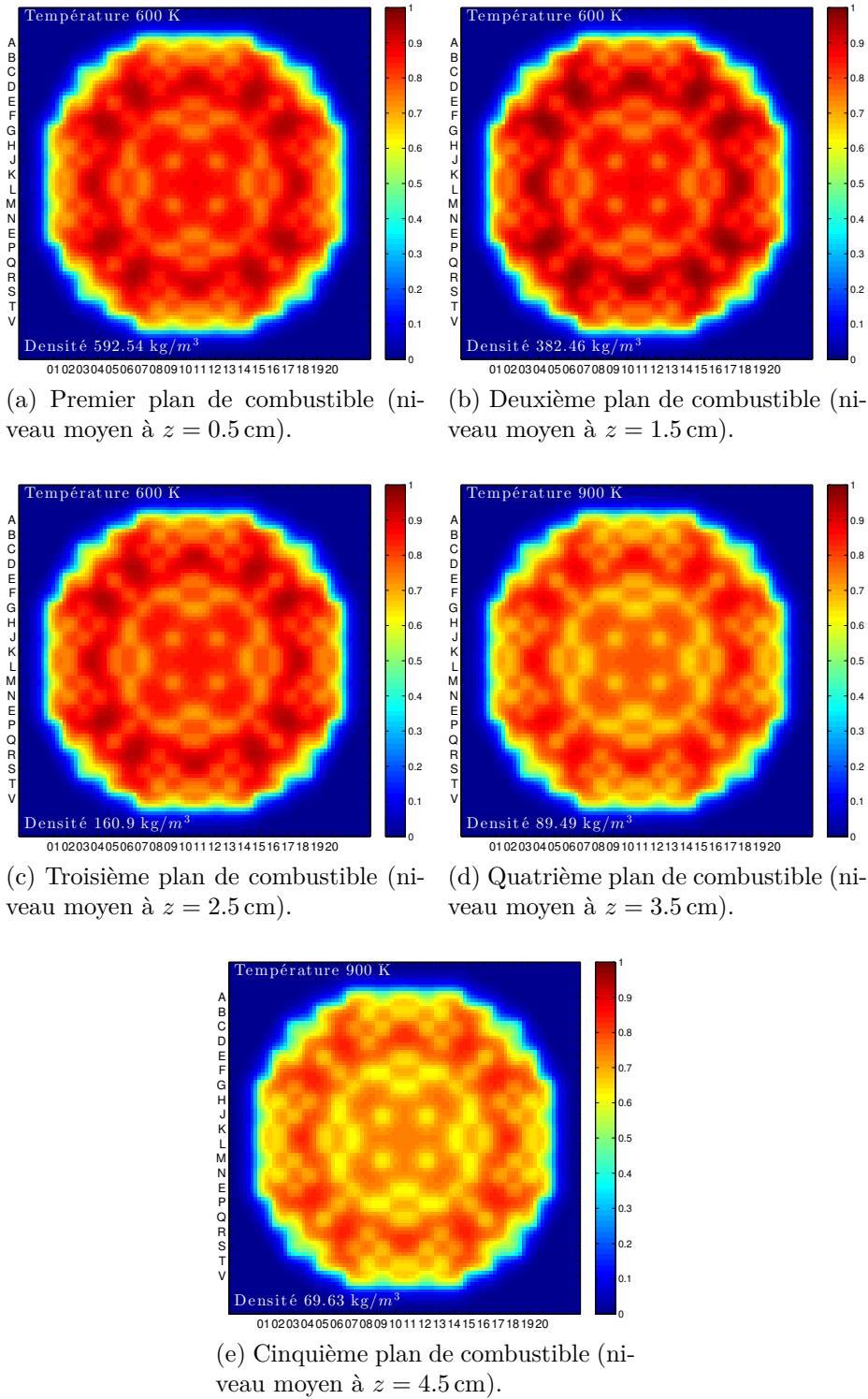


Figure 6.8 Distributions radiales de flux rapide dans les cinq plans de combustible en fin du troisième cycle (les températures indiquées sont le température neutronique).

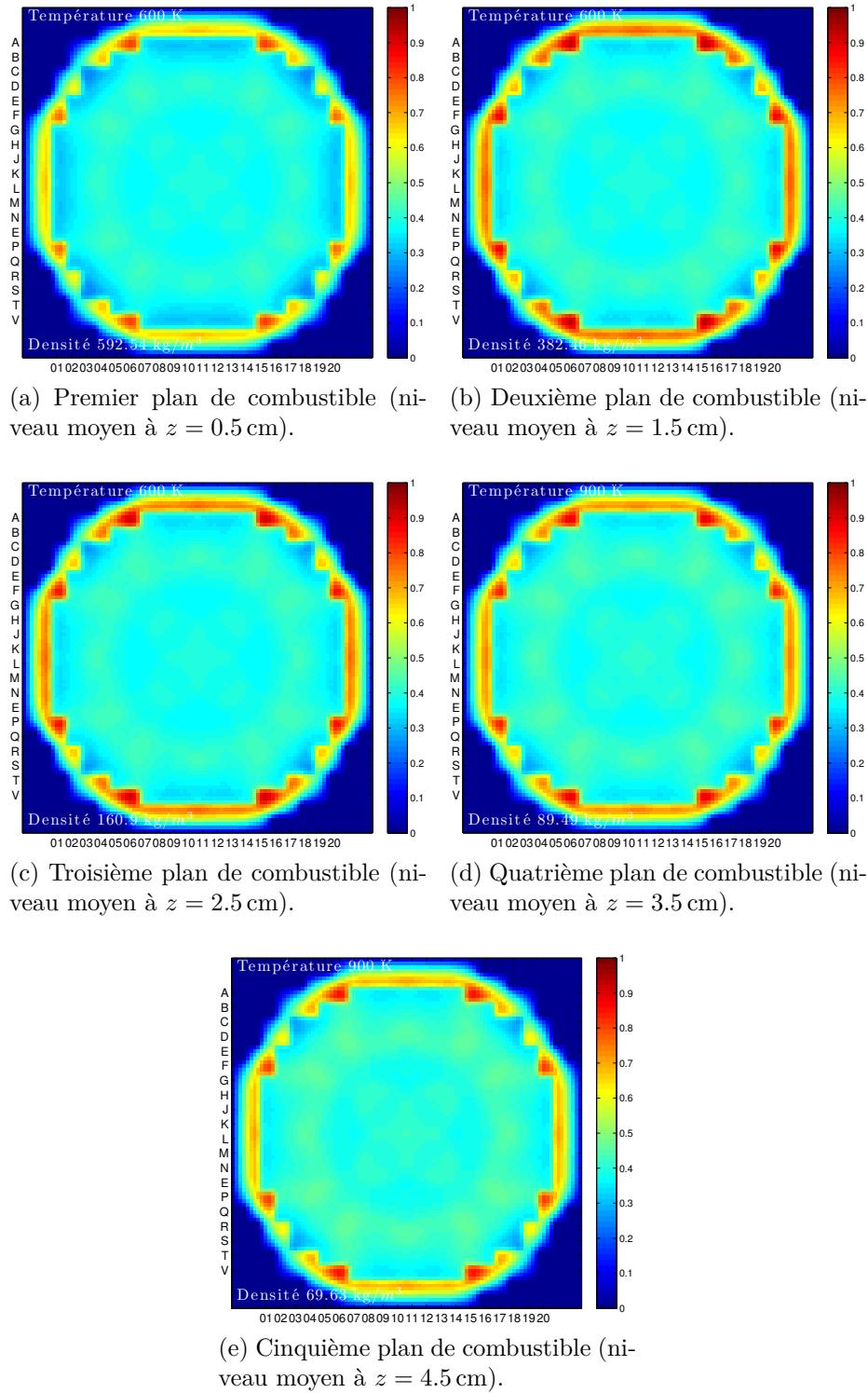


Figure 6.9 Distributions radiales de flux thermique dans les cinq plans de combustible en fin du troisième cycle (les températures indiquées sont le température neutronique).

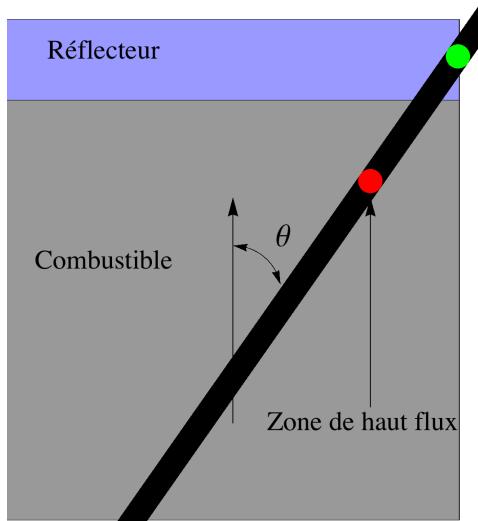


Figure 6.10 Vue en coupe longitudinale du réacteur contenant une barre de contrôle (le réflecteur inférieur n'est pas illustré).

Tableau 6.14 Positions des axes de révolution des barres de contrôle sur les parties inférieure et supérieure du cœur (zone du combustible).

Nom	$\theta$ ( $^{\circ}$ )	$x_1$ (cm)	$y_1$ (cm)	$z_1$ (cm)	$x_2$ (cm)	$y_2$ (cm)	$z_1$ (cm)
A1	15	110,19	0,00	49,53	242,90	0,00	544,83
A2	15	0,00	110,19	49,53	0,00	242,90	544,83
A3	15	-110,19	0,00	49,53	-242,90	0,00	544,83
A4	15	0,00	-110,19	49,53	0,00	-242,90	544,83
B1	15	110,19	-100,00	49,53	242,90	-100,00	544,83
B2	15	100,00	110,19	49,53	100,00	242,90	544,83
B3	15	-110,19	100,00	49,53	-242,90	100,00	544,83
B4	15	-100,00	-110,19	49,53	-100,00	-242,90	544,83
C1	30	14,21	-150,00	49,53	300,17	-150,00	544,83
C2	30	150,00	14,21	49,53	150,00	300,17	544,83
C3	30	-14,21	150,00	49,53	-300,17	150,00	544,83
C4	30	-150,00	-14,21	49,53	-150,00	-300,17	544,83

contenant les sections efficaces des isotopes du combustible et les taux de combustion par région enregistrés dans la structure de données /map/. Une condition d'arrêt est ajoutée à l'itération d'évolution du cœur pour mettre fin à la combustion du cœur au temps demandé par l'utilisateur. Ensuite la réactivité du cœur est évaluée à partir du facteur de multiplication

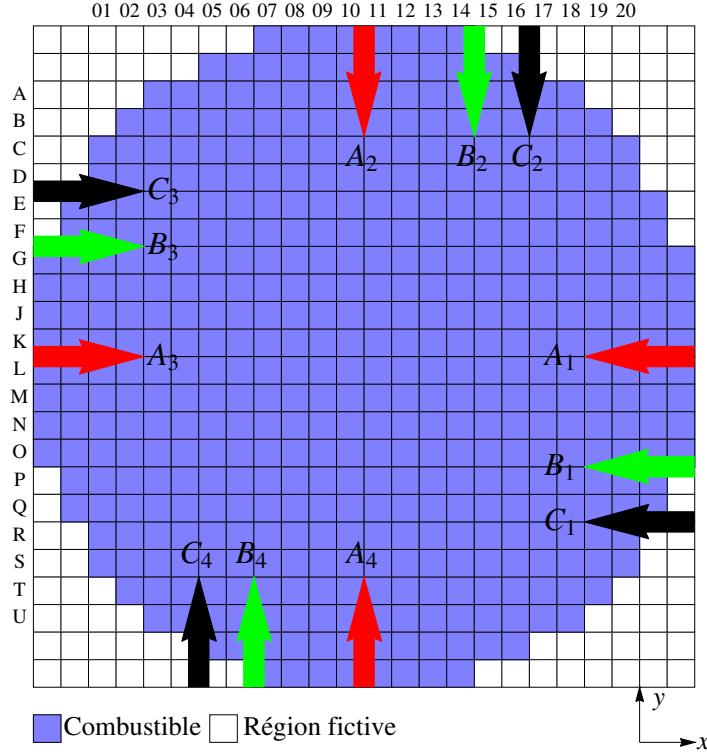


Figure 6.11 Sens d'insertion des barres de contrôle dans le cœur.

infinie  $k_\infty$  sauvegardé dans le répertoire K-EFFECTIVE de la structure de données /fluxunk/ générée par le module FLUD de DONJON-3. Après, on simule le cœur à partir des données extraites de l'itération d'évolution (structures de données /fluxunk/ et /map/) en présence des barres de contrôle. Enfin on évalue la réactivité du cœur à partir du nouveau facteur de multiplication infini calculé en présence des barres de contrôle.

La figure 6.12 et le tableau 6.15 présentent la géométrie, les dimensions et les compositions atomiques de la barre de contrôle qu'on a proposé dans cette thèse. La barre de contrôle est un cylindre permettant le passage du modérateur dans sa région cylindrique centrale et contenant un matériau absorbant d'épaisseur 0.2 cm recouvrant une gaine d'acier inoxydable d'épaisseur 0.1 cm et elle-même couverte par une gaine d'alliage de zirconium d'épaisseur 0.1 cm. Cette barre se déplace dans tube guide composé par deux régions annulaires perforées d'épaisseur respective (intérieur à l'extérieur) de 0.4 cm et 0.1 cm. Le cylindre externe du guide est perforé de 0.5 % pour permettre la pénétration du modérateur dans guide. De plus, le cylindre externe est perforé de 35.66 % afin de permettre le contact entre le modérateur et la barre de contrôle. Techniquelement ce contacte réduit le coefficient de frottement entre la barre de contrôle et son tube guide afin d'augmenter la vitesse d'insertion dans le cœur causée par la gravité.

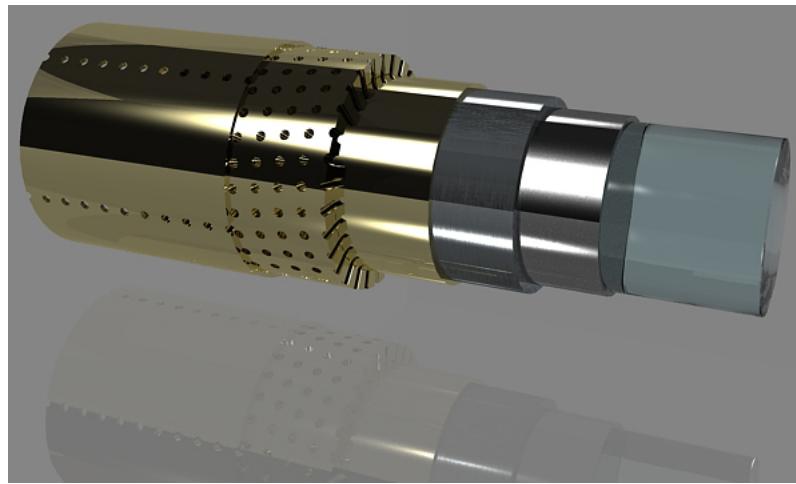


Figure 6.12 Illustration de la géométrie d'une barre de contrôle (les régions annulaires sont spécifiées dans le tableau 6.15).

Tableau 6.15 Compositions atomiques et dimensions de la barre de contrôle.

Mélange	Rayon externe (cm)	Compositions	Densité ( $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ )
Modérateur	1.6	$\text{D}_2\text{O}$ 99.833 %, $\text{H}_2\text{O}$ 0.167 %	1.0851
Acier inoxydable (gaine interne)	1.7	Cn-nat, Cu-nat, Fe-nat, Mo-nat, Si-nat, Conat, Ni-nat, N-nat, Mn-nat, Cr-nat	7.8894
Absorbant	1.9	Variable	Variable
Zr-2 (gaine externe)	2.0	Zr-nat, Fe-nat, Cr-nat, Ni-nat, $^{10}\text{B}$ , $^{11}\text{B}$ (CI-1)	6.4003
Zr-2 perforé de 35.66 %	2.4	CI-1	6.4003
Zr-2 perforé de 0.5 %	2.5	CI-1	6.4003

Dans les tableaux 6.16, 6.18 et 6.20 on présente l'évaluation de la réactivité négative ajoutée au cœur dans des périodes différentes durant l'évolution du premier cycle. Dans le premier tableau les tests sont faits pour douze barres de contrôle de cadmium naturel de densité massique égale à  $8.69 \text{ g/cm}^3$ . On observe que les barres permettent de réduire la réactivité du cœur et leur efficacité diminue avec l'avancement du temps d'exploitation d'une différence

maximale faible estimée à 0.39 mk entre le début et la fin du cycle. Un deuxième test est effectué avec des barres de contrôle de bore naturel de densité massique égale à 2.34 g/cm<sup>3</sup>. On observe dans le tableau 6.18 que l'efficacité du bore naturel est plus élevée comparée à l'efficacité du cadmium, en effet les douze barres de contrôle en bore naturel assurent une réactivité négative moyenne de l'ordre de 13 mk comparée à 10 mk en moyenne pour le cadmium naturel. Un troisième test, présenté dans le tableau 6.20, est effectué avec des barres de contrôle de hafnium naturel de densité massique égale à 13.28 g/cm<sup>3</sup>. Les résultats présenté dans le tableau 6.20 montre que l'efficacité du hafnium est intermédiaire entre le celle du cadmium et du bore, avec la réactivité négative ajoutée est en moyenne de 12 mk.

Dans les tableaux 6.17, 6.19 et 6.21 on présente un test sur la modification de la position axiale des barres de contrôle. En effet on a effectué une translation des barres de contrôle vers le bas d'un pas égal à la hauteur d'une grappe de combustible (49.53 cm). On montre par la comparaison entre les tableaux 6.16, 6.18, 6.20, 6.17, 6.19 et 6.21 que la position axiale qu'on a identifiée pour insérer les barres de contrôle (zone de haute densité de flux) donne un rendement élevé pour absorber les neutrons. En effet l'efficacité du cadmium naturel diminue de 10 mk en moyenne à 6 mk, l'efficacité du bore naturel diminue de 13 mk en moyenne à 10.5 mk et l'efficacité du hafnium naturel diminue de 12 mk en moyenne à 7 mk.

Selon le graphique des sections efficaces totales du cadmium, hafnium et du bore illustré dans la figure 6.13 on observe que dans l'intervalle approximatif des énergies [1 eV, 100 eV] les sections efficaces totales du bore naturel sont plus importantes que les sections efficaces totales du cadmium naturel et du hafnium naturel, ce qui montre qu'une grande portion des neutrons a des énergies comprises dans cet intervalle, ce qui favorise alors l'efficacité du bore sur le cadmium et le hafnium et du hafnium sur le cadmium.

Un dernier test consiste à évaluer l'efficacité des barre de contrôle en présence de bore naturel dans le modérateur. Dans les tableaux 6.22, 6.23 et 6.24 on présente les résultats d'un calcul de diffusion du coeur neuf en utilisant DONJON-3. Les tests sont effectués sur les trois types de barre de contrôle (en cadmium, en hafnium et en bore) en modifiant la concentration du bore naturel dans le modérateur. Les résultats montrent que l'efficacité de tout les types de barres de contrôle de la réactivité diminue avec l'augmentation de la concentration du bore naturel dans le modérateur. En effet, on observe que la réduction de l'efficacité des barres de contrôle est presque identique pour les trois matériaux du barres de contrôle, et est de l'ordre de 4.5 mk si la concentration du bore naturel dans le modérateur passe de 0 ppm à 450 ppm. De plus on observe qu'une concentration de bore de l'ordre de 200 ppm permet de réduire la réactivité initiale du premier cycle ne contenant que de combustible neuf de 215 mk à 106 mk. On estime alors que la concentration maximale de bore naturel ajouté dans le modérateur

pour réduire la réactivité est de l'ordre de 200 ppm. A cette concentration l'efficacité des douze barres de contrôle en cadmium est réduite de 2 mk. Pour les barres en bore et en hafnium la réduction est de 1.63 mk et 1.64 mk respectivement. Les barres de contrôle en bore naturel ont une bonne efficacité pour réduire la réactivité. Cependant, ce matériel il brûle rapidement en présence d'un flux neutronique. La barre de contrôle en cadmium est le plus faible des trois types de barres de contrôle. Les barres de contrôle en hafnium ont une efficacité proche de l'efficacité de celles au bore naturel et sont beaucoup moins affectées que le cadmium par la présence de bore naturel dans le modérateur. Nous recommandons donc l'utilisation des barres de contrôle en hafnium pour contrôler la réactivité du réacteur canadien refroidi à l'eau supercritique.

Tableau 6.16 Variation de la réactivité négative ajoutée par des barres de contrôle en cadmium naturel (densité égale à 8.69 g/cm<sup>3</sup>).

Temps (jours)	$\rho$ sans B.C. (mk)	$\rho$ avec B.C. (mk)	$\Delta\rho$ (mk)
0	215,70	205,47	10,23
100	169,23	159,29	9,94
200	150,67	140,71	9,96
300	132,93	122,97	9,96
400	115,04	105,10	9,94
500	96,58	86,70	9,88
600	77,29	67,45	9,84
700	56,96	47,12	9,84
800	35,42	25,55	9,87
911	9,85	-0,07	9,92

Tableau 6.17 Variation de la réactivité négative ajoutée par des barres de contrôle en cadmium naturel (densité égale à  $8.69 \text{ g/cm}^3$ ) déplacée vers le bas de  $z = 49.53 \text{ cm}$ .

Temps (jours)	$\rho$ sans B.C. (mk)	$\rho$ avec B.C. (mk)	$\Delta\rho$ (mk)
0	215,70	208,65	7,05
100	169,23	163,06	6,17
200	150,67	144,82	5,85
300	132,93	127,20	5,73
400	115,04	109,34	5,70

Tableau 6.18 Variation de la réactivité négative ajoutée par des barres de contrôle en bore naturel (densité égale à  $2.34 \text{ g/cm}^3$ ).

Temps (jours)	$\rho$ sans B.C. (mk)	$\rho$ avec B.C. (mk)	$\Delta\rho$ (mk)
0	215,70	202,90	12,80
100	169,23	156,42	12,81
200	150,67	137,68	12,99
300	132,93	119,79	13,14
400	115,04	101,88	13,16
500	96,58	83,5	13,08
600	77,29	64,3	12,99
700	56,96	44,05	12,91
800	35,42	22,55	12,87
911	9,85	-3,00	12,85

Tableau 6.19 Variation de la réactivité négative ajoutée par des barres de contrôle en bore naturel (densité égale à  $2.34 \text{ g/cm}^3$ ) déplacée vers le bas de  $z = 49.53 \text{ cm}$ .

Temps (jours)	$\rho$ sans B.C. (mk)	$\rho$ avec B.C. (mk)	$\Delta\rho$ (mk)
0	215,70	205,18	10,52
100	169,23	158,81	10,42
200	150,67	140,28	10,39
300	132,93	122,48	10,45
400	115,04	104,53	10,51

Tableau 6.20 Variation de la réactivité négative ajoutée par des barres de contrôle en hafnium naturel (densité égale à 13.28 g/cm<sup>3</sup>).

Temps (jours)	$\rho$ sans B.C. (mk)	$\rho$ avec B.C. (mk)	$\Delta\rho$ (mk)
0	215,70	202,90	12,80
100	169,23	158,08	11,15
200	150,67	139,44	11,23
300	132,93	121,62	11,31
400	115,04	103,74	11,30
500	96,58	85,33	11,25
600	77,29	66,08	11,21
700	56,96	45,76	11,20
800	35,42	24,18	11,24
911	9,85	-1,45	11,30

Tableau 6.21 Variation de la réactivité négative ajoutée par des barres de contrôle en hafnium naturel (densité égale à 13.28 g/cm<sup>3</sup>) déplacée vers le bas de  $z = 49.53$  cm.

Temps (jours)	$\rho$ sans B.C. (mk)	$\rho$ avec B.C. (mk)	$\Delta\rho$ (mk)
0	215,70	207,93	7,77
100	169,23	162,51	6,72
200	150,67	144,31	6,36
300	132,93	126,70	6,23
400	115,04	108,84	6,20

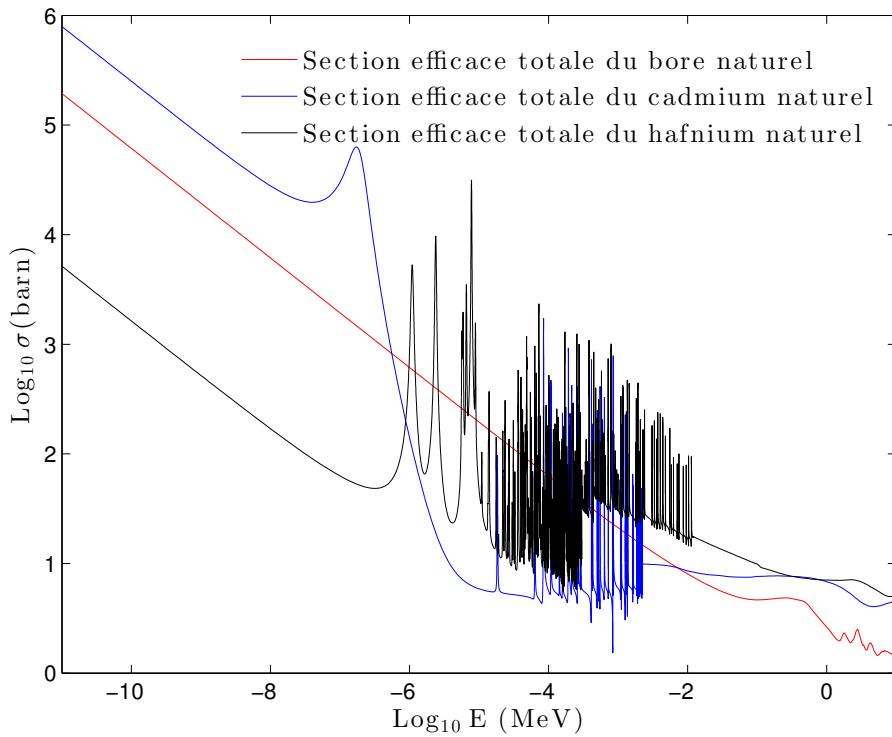


Figure 6.13 Sections efficaces totales du cadmium naturel, du bore naturel et du hafnium naturel.

Tableau 6.22 Effet du bore naturel dissous dans le modérateur sur la réactivité négative ajoutée par des barres de contrôle en cadmium naturel.

Bore (ppm)	$\rho$ sans B.C. (mk)	$\rho$ avec B.C. (mk)	$\Delta\rho$ (mk)
0	215,70	205,47	10,23
50	183,62	173,76	9,86
100	155,04	145,67	9,37
150	129,38	120,56	8,82
200	106,22	98,00	8,22
250	85,18	77,55	7,63
300	65,98	58,94	7,04
350	48,40	41,90	6,50
400	32,27	26,26	6,01
450	17,40	11,80	5,60

Tableau 6.23 Effet du bore naturel dissous dans le modérateur sur la réactivité négative ajoutée par des barres de contrôle en bore naturel.

Bore (ppm)	$\rho$ sans B.C. (mk)	$\rho$ avec B.C. (mk)	$\Delta\rho$ (mk)
0	215,70	202,90	12,80
50	183,62	170,97	12,65
100	155,04	142,76	12,28
150	129,38	117,61	11,77
200	106,22	95,05	11,17
250	85,18	74,64	10,54
300	65,98	56,08	9,90
350	48,40	39,10	9,30
400	32,27	23,49	8,78
450	17,40	9,07	8,33

Tableau 6.24 Effet du bore naturel dissous dans le modérateur sur la réactivité négative ajoutée par des barres de contrôle en hafnium naturel.

Bore (ppm)	$\rho$ sans B.C. (mk)	$\rho$ avec B.C. (mk)	$\Delta\rho$ (mk)
0	215,70	204,25	11,45
50	183,62	172,37	11,25
100	155,04	144,17	10,87
150	129,38	119,00	10,38
200	106,22	96,41	9,81
250	85,18	75,96	9,22
300	65,98	57,35	8,63
350	48,40	40,32	8,08
400	32,27	24,69	7,58
450	17,40	10,24	7,16

## CHAPITRE 7 CONCLUSION ET RECOMMANDATIONS

Ce projet de recherche a permis d'une part d'ajouter une nouvelle géométrie à DRAGON-5 et d'autre part de résoudre le problème de conception des mécanismes de réactivité du futur réacteur refroidi à l'eau supercritique canadien. On présente dans les paragraphes qui suivent un résumé des modifications apportées au code DRAGON-5, des stratégies de simulation élaborées et des recommandations pour la simulation et la conception des barres de contrôles inclinées dans le futur réacteur refroidi à l'eau supercritique canadien.

L'implémentation effectuée dans le code DRAGON-5 se résume comme suit :

- Définir un mot-clé qui permet à l'utilisateur de donner les consignes de constructions d'une géométrie contenant des régions annulaires inclinées.
- Ajouter des instructions dans le module **GEO** de DRAGON-5 pour qu'il puisse préparer proprement la structure de données pour le module de calcul des lignes d'intégration **NXT**.
- Ajouter un ensemble de routines gérées par le module **NXT** pour calculer les volumes et surfaces générées par l'intersection des régions annulaires inclinées avec des cellules cartésiennes.
- Mettre à jour le module **NXT** pour assurer une indexation adéquate des surfaces et régions en présence de régions annulaires inclinées dans la géométrie globale.
- Programmer les routines de calcul des segments d'intégration de **NXT** pour prendre en compte la présence de régions annulaires inclinées.

Les implémentations de la géométrie annulaire inclinée ajoutées dans DRAGON-5 sont validées par plusieurs méthodes numériques. Les calculs des surfaces et volumes obtenus par l'intersection des régions annulaires inclinées avec des cellules cartésiennes sont validés par les commandes **AIRE** et **PROPMeca** du logiciel de conception assistée par ordinateur **AUTOCAD**. Les résultats obtenus par DRAGON-5 sont en doubles précisions (16 chiffres après la virgule) tandis que le logiciel **AUTOCAD** permet de donner une précision maximale de 8 chiffres après la virgule. La comparaison des deux résultats, DRAGON-5 et **AUTOCAD**, donne une différence absolue de l'ordre de  $10^{-8} \text{ cm}^2$  pour les surfaces et  $10^{-8} \text{ cm}^3$  pour les volumes. La validation de traçage des lignes d'intégration ainsi que leurs intersections avec les surfaces de la géométrie est réalisée avec **MATLAB** et **MATHEMATICA** en utilisant les informations fournies par le module **TLM**. Le traçage des vecteurs générés par le module **TLM** permet de visualiser les positions spatiales des lignes d'intégrations par un code de couleurs indiquant l'appartenance aux régions, ainsi il permet de voir la géométrie 3D du modèle qu'on désire simuler. Les volumes et les surfaces peuvent être calculés numériquement par **NXT** en fonc-

tion des longueurs respectives des segments qui traversent chaque région et comparés avec les volumes analytiques calculés par les routines ajoutées à **NXT**. Les résultats ont montré que ces volumes sont fortement dépendants de la densité de lignes d'intégration fixées par la commande **TISO** du module **NXT**. On a pu vérifier la convergence des volumes et des surfaces calculés par les lignes d'intégrations vers les volumes et les surfaces analytiques en fonction du raffinement de la densité des lignes d'intégrations dans la géométrie.

Une dernière validation consiste à évaluer le fonctionnement adéquat du calcul neutronique en présence des régions annulaires concentriques en comparant les résultats de DRAGON-5 pour une supercellule contenant une barre de contrôle inclinée avec ceux générés en utilisant la méthode montre Carlo basée sur le code SERPENT. La comparaison entre les deux méthodes montre que le maximum de la différence de la réactivité pour différents angles d'inclinaison de la barre de contrôle dans la supercellule est de l'ordre de 13 mk. En effet, lors de la génération des bases de données réacteur par DRAGON-5, les propriétés neutroniques homogènes du combustible ont été calculées à partir d'une cellule unitaire en deux dimensions dans laquelle la température et la densité du caloporteur du premier niveau selon l'axe  $z$  sont utilisées. Une homogénéisation complète a été réalisée sur cette cellule à partir de la distribution de flux obtenue à partir de la bibliothèque des sections efficaces basée sur l'évaluation ENDF/B.VII. Les sections efficaces macroscopiques homogénéisées sur la cellule sont probablement en erreur, car la différence maximale de 13 mk entre SERPENT et DRAGON-5 peut être par un mauvais calcul de taux de réactions dans les régions par DRAGON-5. On recommande alors d'utiliser le modèle de la super-homogénéisation dans les futures simulations de la cellule unitaire pour générer les bases de données réacteur par DRAGON-5. Cela pourrait faire l'objet d'une autre étude.

Dans la partie applications de cette thèse, on a présenté une série de calculs permettant d'évaluer l'efficacité des barres de contrôle inclinées dans le futur réacteur canadien refroidi à l'eau supercritique. Plus précisément, les principales étapes de la stratégie de simulations proposées sont les suivantes :

- Évaluer la réactivité du modèle de cellule unitaire du réacteur SCWR dans les cinq positions axiales proposées dans cette thèse par le code DRAGON-5 et comparer les résultats obtenus avec des calculs de modèle similaires avec le code SERPENT.
- Évaluer la réactivité du modèle de la super-cellule contenant une barre de contrôle inclinée du réacteur SCWR dans les cinq positions axiales proposées dans cette thèse par le code DRAGON-5 et comparer les résultats obtenus avec des calculs de modèle similaires avec le code SERPENT.
- Effectuer des calculs d'évolutions de la cellule unitaire dans les cinq positions axiales dont la densité et la température du caloporteur sont différentes et générer les bi-

bibliothèques de sections efficaces macroscopiques **COMPO** de la cellule homogène et du modérateur.

- Effectuer un calcul d'évolution du cœur en utilisant DONJON-3 et l'ensemble des bibliothèques de sections efficaces macroscopiques générées par DRAGON-5.
- En utilisant les données du flux intégral généré par DONJON-3, générer une carte de flux dans les plans axiaux du réacteur pour identifier les positions de forts pics de flux. Ces positions sont utilisées comme points de passage des barres de contrôle dans le réacteur. En utilisant cette information, identifier les angles d'inclinaison des barres de contrôle dans le cœur.
- Effectuer un calcul de supercellule avec les inclinaisons identifiées par les cartes de flux générées par DONJON-3 dans les cinq positions axiales. Pour chaque position axiale on effectue trois calculs neutroniques pour trois conditions de la barre de contrôle : sans barre de contrôle ni tube guide, uniquement avec le tube guide et avec la barre de contrôle et son tube guide. Cette série de calculs permet de générer des bibliothèques de sections efficaces macroscopiques (**COMPO**) de la supercellule homogène en tenant compte de la position axiale et de la structure de la barre de contrôle (les trois conditions ci-dessus).
- Effectuer un calcul de cœur en présence des barres de contrôle inclinées dans le réacteur en utilisant DONJON-3 et les bibliothèques de section efficace générées dans les étapes précédentes.

La stratégie de calcul qu'on a utilisée dans cette thèse montre que l'utilisation de 12 barres de contrôle passant par les régions de hautes densités de flux neutronique à  $15^\circ$  et  $30^\circ$  par rapport l'axe des  $z$  donne une efficacité des barres de contrôle composées en cadmium naturel de l'ordre de 10 mk tandis que pour des barres de contrôle composées de bore naturel elle est de l'ordre de 13 mk et pour des barres de contrôle composées de hafnium naturel elle est de l'ordre de 12 mk.

Les étapes de calcul DRAGON-5 et DONJON-3 réalisées dans cette thèse sont absolument recommandées pour évaluer l'efficacité des barres de contrôle dans le réacteur SCWR. On recommande aussi d'ajouter une discréétisation spatiale dans la barre de contrôle de modèle de la supercellule pour générer les bases de données réacteurs. À cause du grand nombre de bases de données requises par le module DONJON-3 du réacteur complet. Le raffinement des propriétés physiques macroscopiques de la supercellule pourrai faire l'objet d'un nouveau projet de recherche.

L'utilisation de 12 barres de contrôle inclinées de  $15^\circ$  et  $30^\circ$  par rapport l'axe des  $z$  montre une efficacité importante, mais non suffisante pour le contrôle de réactivité du réacteur. On recommande donc l'utilisation des barres de contrôle inclinées en hafnium pour gérer l'excès

de réactivité du réacteur SCWR et bénéficier de la force de gravité pour insérer les barres dans le réacteur en cas d'urgence. Cependant il est primordial d'augmenter le nombre des barres du réacteur afin d'augmenter la quantité de réactivité négative apportée par ces barres dans le cœur du réacteur SCWR.

Finalement, grâce à ce projet de recherche on est maintenant capable de proposer une stratégie de calcul neutronique pour évaluer l'efficacité des barres de contrôle pour assurer un fonctionnement sécuritaire du réacteur SCWR. On propose par le biais de ce travail de :

- Refaire les calculs avec le modèle actuel de la cellule SCWR contentant 64 éléments de combustible.
- Raffiner le modèle du calcul DONJON-3 en augmentant le nombre des positions axiales qui tiennent compte de la température et la densité du caloporeur.
- Augmenter le nombre des barres de contrôle dans le réacteur pour estimer leur efficacité et arriver à la réactivité négative, que doivent fournir ces barres de contrôle, pour assurer un fonctionnement sécuritaire du réacteur.
- Utiliser la conception géométrique du réacteur proposée dans cette thèse et illustrée dans la figure 7.1 afin de bénéficier du maximum de l'effet de la gravité pour insérer les barres de contrôle en cas d'urgence.

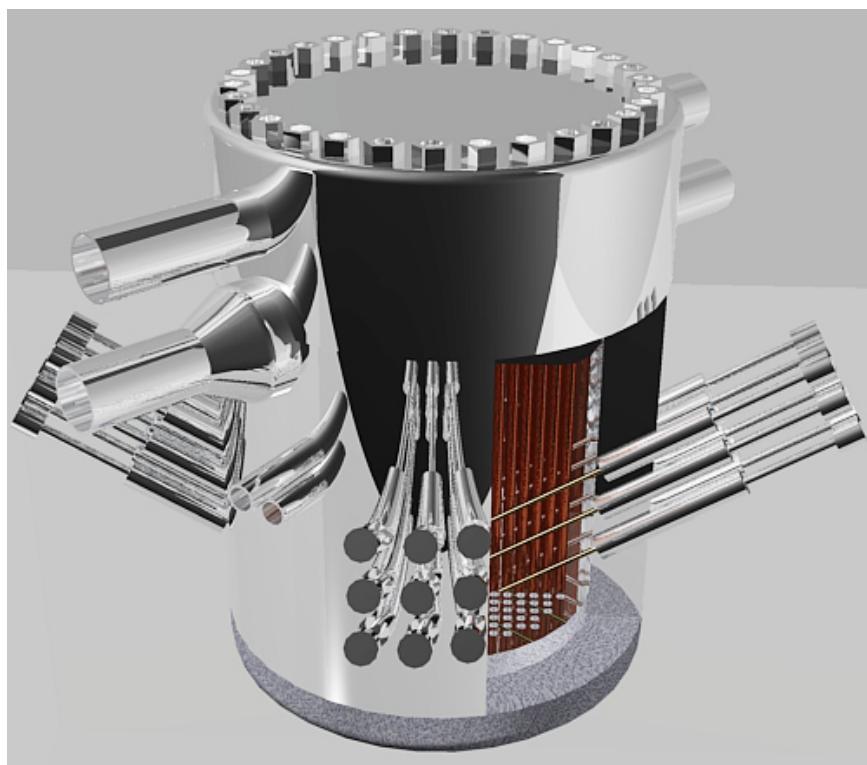


Figure 7.1 Illustration de la conception du réacteur canadien refroidi à l'eau supercritique avec barres de contrôle inclinées.

## RÉFÉRENCES

- Ahmad, A. and Cao, L. and Wu, H. (2014). Coupled analysis and improvements for canadian-SCWR core design. *Nuclear Engineering and Design*, 268, 104–112.
- Askew, J. R. (1972). A characteristics formulation of the neutron transport equation in complicated geometries. Rapport technique AEEW-M 1108, United Kingdom Atomic Energy Establishment, Winfrith.
- Avis, D. and Bhattacharya, B. K. and Imai, H. (1988). Computing the volume of the union of spheres. *The Visual Computer*, 3(6), 323–328.
- Blair, J. M. and Edwards, C. A. and Johnson, J. H. (1978). Rational Chebyshev approximations for the Bickley functions  $ki_n(x)$ . *Mathematics of Computation*, 32(143), 876–886.
- Carlvik, I. (1964). A method for calculating collision probabilities in general cylindrical geometry and applications to flux distributions and Dancoff factors. Rapport technique A/CONF. 28/P/681, Aktiebolaget Atomenergi, Stockholm (Sweden).
- Chow, C. K. and Khatabil, H. F. (2008). Conceptual fuel channel designs for CANDU-SCWR. *Nuclear Engineering and Technology*, 40(2), 139–146.
- Commissariat à l'Énergie Atomique (2010). Quatrième génération : vers un nucléaire durable. <http://sciences.blogs.liberation.fr/files/reacteurs-generation-4-cea.pdf>. [consulté le 01 juin 2016].
- Fait, C. and Grant, C. and Yunes, A. and Tarazaga, A. and Sánchez, F. A. and Torres, L. (2007). Power cycle simulation for the Atucha II reactor. *International nuclear atlantic conference-INAC*. Santas, SP, Brazil.
- Generation IV International Forum (2016). GIF R&D outlook for generation IV nuclear energy systems. [https://www.gen-4.org/gif/jcms/c\\_42188/publications](https://www.gen-4.org/gif/jcms/c_42188/publications). [consulté le 01 juin 2016].
- Glasstone, S. and Sesonske, A. (2004). *Nuclear reactor engineering : reactor design basics*, vol. 1. CBS publishers & distributors PVT. LTD, New Delhi, India, quatrième édition.
- Hahn, B. (1994). *Fortran 90 for scientists and engineers*, vol. 1. Elsevier Ltd., Burlington, US, première édition.
- Hanna, B. N. (1998). CATHENA : A thermalhydraulic code for CANDU analysis. *Nuclear Engineering and Design*, 180(2), 113–131.

- Harrisson, G. (2015). *Prise en compte des conditions des matériaux et du couplage axial le long d'un canal du réacteur refroidi à eau supercritique canadien*. Thèse de doctorat, Institut de Génie Nucléaire, École Polytechnique de Montréal, Montréal, Canada.
- Hébert, A. (2009). *Applied reactor physics*. Presses Internationales Polytechnique.
- Hébert, A. and Marleau, G. (1991). Generalization of the Stamm'ler method for the self-shielding of resonant isotopes in arbitrary geometries. *Nuclear science and engineering*, 108(3), 230–239.
- Hébert, A. and Roy, R. (2016). The ganlib5 kernel guide (64-bit clean version). Rapport technique IGE-332, Institut de Génie Nucléaire, École Polytechnique de Montréal, Montréal, Canada.
- Toni K. (2014). Statistical Tests and the Underestimation of Variance in Serpent 2. Rapport technique VTT-R-00371-14, VTT technical research centre of Finland.
- Kahler, A. C. and MacFarlane, R. E. and Muir, D. W. and Boicourt, R. M. (2012). The njoy nuclear data processing system, version 2012. Rapport technique, Los Alamos Scientific Lab., NM.
- Korea Atomic Energy Research Institute (2016). Online Plotter for MCNP and ENDF cross section data. <http://atom.kaeri.re.kr:8080/cgi-bin/endfplot.pl?j=&d=&f=>. [consulté le 12 juillet 2016].
- Lajoie, M. (2010). *Développement dans DRAGON d'un module pour l'analyse du combustible compact des réacteurs prismatiques*. Mémoire de maîtrise, Institut de Génie Nucléaire, École Polytechnique de Montréal, Montréal, Canada.
- Leppanen, J. (2013). PSG2/Serpent : A Monte Carlo reactor physics burnup calculation code. Rapport technique, VTT technical research centre of Finland.
- Leppanen, J. (2016). Serpent ENDF/B-VII ACE format data library with ures ptables. <http://montecarlo.vtt.fi/links.htm>. [consulté le 20 décembre 2016].
- Leung, L. K. H. and Yetisir, M. and Diamond, W. and Martin, D. and Pencer, J. and Hyland, B. and Hamilton, H. and Guzonas, D. and Duffey, R. (2011). A next generation heavy water nuclear reactor with supercritical water as coolant. *The international conference on the future of heavy water reactors (HWR-Future)*. Canadian nuclear society, Ottawa, Ontario, Canada.
- Lewis, E. E. and Miller, W. F. (1984). *Computational methods of neutron transport*. John Wiley and Sons, Inc., New York, NY.
- Marguet, S. (2011). *La physique des réacteurs nucléaires*. Paris : Editions Tec & Doc : Lavoisier.

- Marleau, G. (2001). DRAGON theory manual part 1 : Collision probability calculations. Rapport technique IGE-236, Rev.1, Institut de Génie Nucléaire, École Polytechnique de Montréal, Montréal, Canada.
- Marleau, G. and Hébert, A. and Roy, R. (2013a). A description of the data structures for DRAGON 3.06L. Rapport technique IGE-232, Rev.12, Institut de Génie Nucléaire, École Polytechnique de Montréal, Montréal, Canada.
- Marleau, G. and Hébert, A. and Roy, R. (2013b). A user guide for DRAGON release 3.06 L. Rapport technique IGE-174, Rev.12, Institut de Génie Nucléaire, École Polytechnique de Montréal, Montréal, Canada.
- Marleau, G. and Hébert, A. and Roy, R. (2013c). A user guide for DRAGON version5. Rapport technique IGE-335, Institut de Génie Nucléaire, École Polytechnique de Montréal, Montréal, Canada.
- Mazzantini, O. and Schivo, M. and Di Césare, J. and Carbero, R. and Rivero, M. and Theler, G. (2011). A coupled calculation suite for atucha ii operational transients analysis. *Science and Technology of Nuclear Installations*, 2011.
- Nava Domínguez, A. and Onder, N. and Rao, Y. and Leung, L. (2016). Evolution of the canadian SCWR fuel-assembly concept and assessment of the 64 element assembly for thermalhydraulic performance. *CNL Nuclear Review*, 5(1), 1–18.
- Pecchia, M. (2012). *Application of MCNP for predicting power excursion during LOCA in Atucha-2 PHWR*. Thèse de doctorat, Universita di Pisa, Scuola di dottorato in ingegneria Leonardo da Vinci.
- Pencer, J. and Watts, D. and Colton, A. and Wang, X. and Blomeley, L. and Antghel, V. and Yue, S. (2013). Core neutronics for the canadian SCWR conceptual design. *The 6th International Symposium on Supercritical Water-Cooled Reactors (ISSCWR-6)*. Shenzhen, Guangdong, China.
- Raouafi, H. (2012). *Étude numérique de l'autoprotection spatiale dans des échantillons fortement absorbants irradiés dans le réacteur SLOWPOKE*. Mémoire de maîtrise, Institut de Génie Nucléaire, École Polytechnique de Montréal, Montréal, Canada.
- Reuss, P. (2012). *Précis de neutronique*. EDP sciences.
- Rouben, B. (1984). Le CANDU : Étude du coeur et gestion du combustible. Rapport technique AECL-8333(F), Énergie Atomique du Canada Limitée, Mississauga, Ontario, Canada.
- Roy, R. (1999). The CLE-2000 tool-box. Rapport technique IGE-163, Institut de Génie Nucléaire, École Polytechnique de Montréal, Montréal, Canada.
- Rozon, D. (1992). *Introduction à la cinétique des réacteurs nucléaires*. Presses Internationales Polytechnique.

Samuel, J. (2011). *Conceptual design for a re-entrant type fuel channel for supercritical water-cooled nuclear reactors*. Mémoire de maîtrise, University of Ontario Institute of Technology, Ontario, Canada.

Thambiayah, N. (2015). Concept review of canadian supercritical water reactor and probabilistic safety assessment. [https://www.iaea.org/NuclearPower/Downloadable/Meetings/2015/2015-03-24-03-26-INPRO/Joint01\\_SCWR\\_Nitheanadan.pdf](https://www.iaea.org/NuclearPower/Downloadable/Meetings/2015/2015-03-24-03-26-INPRO/Joint01_SCWR_Nitheanadan.pdf). [consulté le 10 novembre 2016].

Tulkki, V. (2006). Supercritical water reactors : A survey on international state of research in 2006. *Helsinki University of Technology, Otaniemi, Finland*.

U.S. Nuclear Energy Research Advisory Committee (NERAC) and the Generation IV International Forum (GIF) (2002). A technology roadmap for generation IV nuclear energy systems. <https://www.gen-4.org/gif/upload/docs/application/pdf/2013-09/genivroadmap2002.pdf>. [consulté le 01 juin 2016].

Varin, E. (1995). *Intégration des algorithmes du système de régulation du réacteur dans un code de cinétique espace temps*. Mémoire de maîtrise, Institut de Génie Nucléaire, École Polytechnique de Montréal, Montréal, Canada.

Varin, E. and Hébert, A. and Roy, R. and Koclas, J. (2005). A user guide for DONJON version 3.02d. Rapport technique IGE-208, Rev.4, Institut de Génie Nucléaire, École Polytechnique de Montréal, Montréal, Canada.

Wang, X. and Colton, A. and O’Kane, M. (2013). Investigation of neutron absorbers for reactivity control and shutdown systems for the Canadian super critical water reactor (SCWR). Rapport technique 217-123700-440-008, Énergie Atomique du Canada Limitée, Mississauga, Ontario, Canada.

Yamaji, A. and Kaemi, K. and Oka, Y. (2005). Improved core design of the high temperature supercritical-pressure light water reactor. *Annals of Nuclear Energy*, 32(7), 651–670.

Yetisir, M. (2012). Generation IV supercritical water-cooled reactor. [https://www.iaea.org/NuclearPower/Downloadable/Meetings/2014/2014-03-31-04-02-CM-INPRO/Gen4\\_SCWR.pdf](https://www.iaea.org/NuclearPower/Downloadable/Meetings/2014/2014-03-31-04-02-CM-INPRO/Gen4_SCWR.pdf). [consulté le 01 juin 2016].

Yetisir, M. and Diamond, W. and Leung, L.K.H. and Martin, D. and Duffey, R. (2011). Conceptual mechanical design for a pressure-tube type supercritical water-cooled reactor. *The 5th International Symposium on Supercritical-Water-Cooled Reactors (ISSCWR-5)*. Vancouver, BC, Canada.

Yetisir, M. and Gaudet, M. and Pencer, J. and McDonald, M. and Rhodes, D. and Hamilton, H. and Leung, L. (2016). Canadian supercritical water-cooled reactor core concept and safety features. *CNL Nuclear Review*, 5(2), 189–202.

Yoo, J. and Ishiwatari, Y. and Oka, Y. and Liu, J. (2006). Conceptual design of compact supercritical water-cooled fast reactor with thermal hydraulic coupling. *Annals of Nuclear Energy*, 33(11), 945–956.

Zoghlami, S. (2013). *Analyse du transfert de chaleur et de la perte de pression pour des écoulements supercritiques dans le réacteur CANDU-SCWR*. Mémoire de maîtrise, Institut de Génie Nucléaire, École Polytechnique de Montréal, Montréal, Canada.

## ANNEXE A    Approximation $P_1$

Le développement de la distribution angulaire  $\phi$  en harmonique sphérique de l'ordre  $P_N$  donne (Hébert, 2009)

$$\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \sum_{l=0}^N \frac{2l+1}{4\pi} \sum_{m=-l}^l \phi_l^m(\vec{r}, E) R_l^m(\vec{\Omega}) \quad (\text{A.1})$$

où les  $R_l^m$  sont les harmoniques sphériques réelles :

$$R_l^m(\vec{\Omega}) = \sqrt{(2 - \delta_{m,0}) \frac{(l - |m|)!}{(l + |m|)!}} P_l^{|m|}(\mu) \tau_m(\varphi) \quad (\text{A.2})$$

où  $P_l^m$  dérive des polynômes de Legendre pour des entiers  $m$  positifs :

$$P_l^m(\mu) = (1 - \mu^2)^{m/2} \frac{d^m}{d\mu^m} P_l(\mu) \quad (\text{A.3})$$

et avec (voir figure A.1 pour les composantes de  $\vec{\Omega}$ ) :

$$\tau_m(\varphi) = \begin{cases} \cos(m\varphi) & \text{si } m \geq 0; \\ \sin(|m|\varphi) & \text{si } m < 0. \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

$$\vec{\Omega} = \mu \vec{i} + \eta \vec{j} + \xi \vec{k} \quad (\text{A.5})$$

$$\eta = \sqrt{1 - \mu^2} \cos \varphi \quad (\text{A.6})$$

$$\xi = \sqrt{1 - \mu^2} \sin \varphi \quad (\text{A.7})$$

En limitant le flux donné par l'équation A.1 à l'ordre 1, on obtient (Marguet, 2011) :

$$\begin{aligned} \phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) &= \frac{1}{4\pi} \left[ \phi_0^0(\vec{r}, E) R_0^0(\vec{\Omega}) + 3 \left( \phi_1^{-1}(\vec{r}, E) R_1^{-1}(\vec{\Omega}) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \phi_1^0(\vec{r}, E) R_1^0(\vec{\Omega}) + \phi_1^1(\vec{r}, E) R_1^1(\vec{\Omega}) \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Les  $R_l^m$  s'écrivent à l'ordre 1 :

$$R_0^0 = 1 \quad (\text{A.9})$$

$$R_1^{-1} = \xi \quad (\text{A.10})$$

$$R_1^0 = \mu \quad (\text{A.11})$$

$$R_1^1 = \eta \quad (\text{A.12})$$

$$(\text{A.13})$$

A.14 devient alors :

$$\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} [\phi_0^0(\vec{r}, E) + 3 (\phi_1^{-1}(\vec{r}, E)\xi + \phi_1^0(\vec{r}, E)\mu + \phi_1^1(\vec{r}, E)\eta)] \quad (\text{A.14})$$

D'autre part le courant  $\vec{J}$  est défini comme la somme vectorielle de trois composantes de flux scalaire :

$$\vec{J}(\vec{r}, E) = \phi_1^0(\vec{r}, E)\vec{i} + \phi_1^1(\vec{r}, E)\vec{j} + \phi_1^{-1}(\vec{r}, E)\vec{k} \quad (\text{A.15})$$

En utilisant les équations A.5, A.14 et A.15 on obtient :

$$\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} [\phi(\vec{r}, E) + 3\vec{\Omega} \cdot \vec{J}(\vec{r}, E)] \quad (\text{A.16})$$

Le flux  $\phi_0^0(\vec{r}, E)$  est le flux isotrope il s'écrit simplement  $\phi(\vec{r}, E)$ .

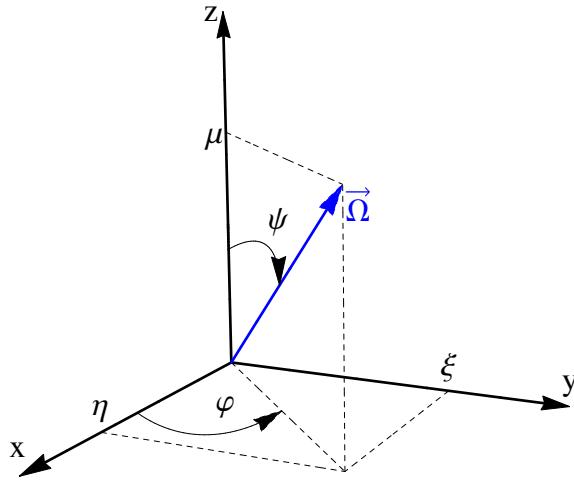


Figure A.1 Composantes du vecteur  $\vec{\Omega}$

## ANNEXE B Développement des sections efficaces de diffusion en polynômes de Legendre

### Polynômes de Legendre

Les polynômes de Legendre sont définis par :

$$P_0(x) = 1 \quad (B.1)$$

$$P_1(x) = x \quad (B.2)$$

$$P_{l+1}(x) = \frac{1}{1+l} [(2l+1)xP_l(x) - lP_{l-1}(x)] \text{ si } l \geq 1 \quad (B.3)$$

Une propriété importante des polynômes de Legendre est leur orthogonalité. Ils sont orthogonaux par rapport au produit scalaire défini sur l'intervalle d'orthogonalité  $[-1, 1]$  et pondéré par la fonction poids  $W(x) = 1$ . L'orthogonalité est définie par :

$$\langle P_n, P_m \rangle = \int_{-1}^1 P_n(x)P_m(x)dx = \frac{2}{2n+1}\delta_{n,m} \quad (B.4)$$

### Ordre $l$ de la section efficace de diffusion

Le développement de la section efficace de diffusion en polynôme de Legendre d'ordre  $l$  s'écrit :

$$\Sigma_s(\vec{r}, E \leftarrow E', \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \Sigma_{s,l}(\vec{r}, E \leftarrow E') P_l(\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \quad (B.5)$$

Si on définit :

$$\mu = \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}' \quad (B.6)$$

L'équation B.5 devient :

$$\Sigma_s(\vec{r}, E \leftarrow E', \mu) = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \Sigma_{s,l}(\vec{r}, E \leftarrow E') P_l(\mu) \quad (B.7)$$

La projection de l'équation B.7 sur la base  $P_0, \dots, P_L$  on obtient :

$$\int_{-1}^1 d\mu \Sigma_s(\vec{r}, E \leftarrow E', \mu) P_{l'}(\mu) = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \int_{-1}^1 d\mu \Sigma_{s,l}(\vec{r}, E \leftarrow E') P_l(\mu) P_{l'}(\mu) \quad (B.8)$$

On applique la propriété d'orthogonalité B.4 dans l'équation précédente on obtient :

$$\Sigma_{s,l}(\vec{r}, E \leftarrow E') = \int_{-1}^1 d\mu \Sigma_s(\vec{r}, E \leftarrow E', \mu) P_l(\mu) \quad (\text{B.9})$$

## ANNEXE C Calcul intégral du volume formé par l'intersection cylindre et trois plans

La méthode développée dans cette annexe est basée sur l'article Avis *et al.* (1988) dans lequel les auteurs présentent la méthode de calcul de l'intersection des sphères. En se basant sur la méthode de calcul 2D de la surface formée par l'intersection de deux droites et un cercle, on développe une méthode intégrale pour calculer le volume formé par l'intersection de trois plans et un cylindre (voir figure C.1).

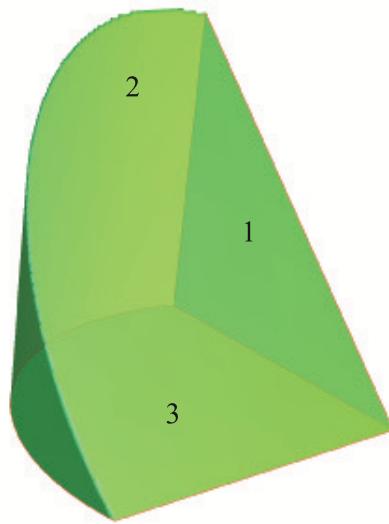


Figure C.1 Intersection de trois plans avec un cylindre.

La projection de la région dont on cherche à trouver le volume sur le troisième plan orthogonal à l'axe du cylindre donne les deux figures C.2a et C.2b. La surface  $(D, C, E, \widehat{ED})$  est calculée à partir des angles  $\theta_A$  et  $\theta_B$  et des distances  $B$  et  $A$  (voir les figures C.2a et C.2b). Selon la position du plan numéro 1 on distingue deux expressions de surface :

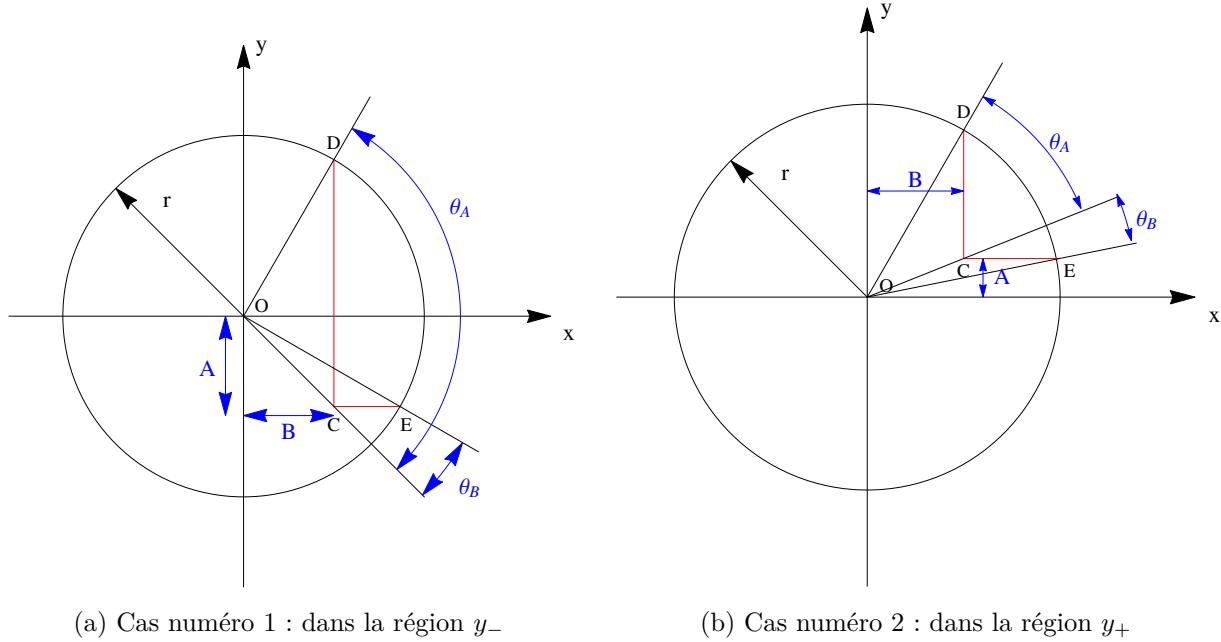
1. Cas numéro 1

$$S_1 = \frac{1}{2} (\theta_A - \theta_B) r^2 - T_A + T_B \quad (C.1)$$

2. Cas numéro 2

$$S_2 = \frac{1}{2} (\theta_A + \theta_B) r^2 - T_A - T_B \quad (C.2)$$

où  $T_A$  et  $T_B$  sont respectivement les surfaces de triangle  $\widehat{ODC}$  et  $\widehat{OCE}$ . Ces deux équations s'écrivent en fonction des distances  $B$ ,  $A$  et  $r$  :

(a) Cas numéro 1 : dans la région  $y_-$ (b) Cas numéro 2 : dans la région  $y_+$ Figure C.2 Positions du plan  $y$  par rapport à l'axe  $y = y_c$ 

## 1. Cas numéro 1

$$\begin{aligned}
 S_1(A, B, r) &= \frac{1}{2} \left( \arccos\left(\frac{A}{r}\right) - \arccos\left(\frac{A}{\sqrt{(A^2 + B^2)}}\right) \right) r^2 \\
 &\quad - \frac{1}{2} \left( \arccos\left(\frac{B}{r}\right) - \arccos\left(\frac{B}{\sqrt{(A^2 + B^2)}}\right) \right) r^2 \\
 &\quad - \frac{A}{2} \left( \sqrt{(r^2 - A^2)} - B \right) \\
 &\quad + \frac{B}{2} \left( \sqrt{(r^2 - B^2)} - A \right)
 \end{aligned} \tag{C.3}$$

## 2. Cas numéro 2

$$\begin{aligned}
 S_2(A, B, r) &= \frac{1}{2} \left( \arccos\left(\frac{A}{r}\right) - \arccos\left(\frac{A}{\sqrt{(A^2 + B^2)}}\right) \right) r^2 \\
 &\quad + \frac{1}{2} \left( \arccos\left(\frac{B}{r}\right) - \arccos\left(\frac{B}{\sqrt{(A^2 + B^2)}}\right) \right) r^2 \\
 &\quad - \frac{A}{2} \left( \sqrt{(r^2 - A^2)} - B \right) \\
 &\quad - \frac{B}{2} \left( \sqrt{(r^2 - B^2)} - A \right)
 \end{aligned} \tag{C.4}$$

La projection de l'intersection sur le plan  $x - z$  donne la figure C.3. En se déplaçant sur l'axe  $z$  la distance  $B$  varie en fonction de  $z$ , ce qui veut de dire qu'à chaque hauteur la surface change. Donc une intégration sur la hauteur donne le volume de la région d'intersection. On pose  $x = B$ , donc on peut écrire la fonction  $x(z)$  sous la forme :

$$x = az + b \quad (\text{C.5})$$

avec

$$a = -\frac{B_0}{H} \quad (\text{C.6})$$

$$b = B_0 \quad (\text{C.7})$$

où  $B_0$  est la distance pour  $z = 0$ .

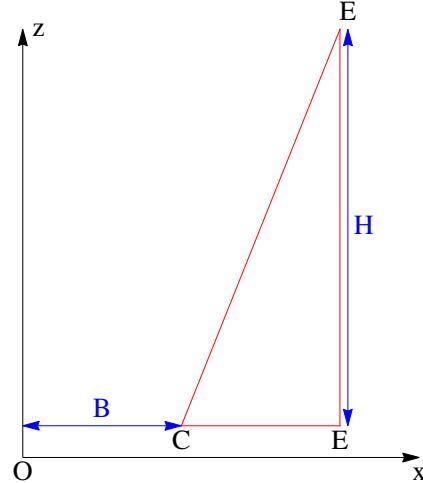


Figure C.3 Projection sur le plan  $x - z$

L'intégration selon l'axe  $z$  des éléments de l'équation C.4 (ou C.5) donne les intégrales  $I_1, I_2, I_3, I_4, I_5, I_6, I_7$  et  $I_8$ .

$$\begin{aligned} I_1(H, A, r) &= \frac{r^2}{2} \int_0^H \arccos\left(\frac{A}{r}\right) dz \\ &= H \frac{r^2}{2} \arccos\left(\frac{A}{r}\right) \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

$$\begin{aligned} I_2(H, A, r, B_0) &= \frac{r^2}{2} \int_0^H \arccos\left(\frac{A}{\sqrt{A^2 + x^2}}\right) dz \\ &= \frac{r^2 A H}{2 B_0} \left[ \frac{B_0}{A} \arctan\left(\frac{B_0}{A}\right) - \frac{1}{2} \ln\left(1 + \left(\frac{B_0}{A}\right)^2\right) \right] \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

$$\begin{aligned} I_3(H, r, B_0) &= \frac{r^2}{2} \int_0^H \arccos\left(\frac{x}{r}\right) dz \\ &= \frac{H r^3}{2 B_0} \left[ \frac{B_0}{r} \arccos\left(\frac{B_0}{r}\right) - \sqrt{1 - \left(\frac{B_0}{r}\right)^2} + 1 \right] \end{aligned} \quad (\text{C.10})$$

$$\begin{aligned} I_4(H, A, B_0) &= \frac{r^2}{2} \int_0^H \arccos\left(\frac{x}{\sqrt{A^2 + x^2}}\right) dz \\ &= \frac{r^2 A H}{2 B_0} \left[ \frac{B_0}{A} \arctan\left(\frac{A}{B_0}\right) + \frac{1}{2} \ln\left(1 + \left(\frac{B_0}{A}\right)^2\right) \right] \end{aligned} \quad (\text{C.11})$$

$$\begin{aligned} I_5(H, A, r) &= \frac{A}{2} \int_0^H \sqrt{r^2 - A^2} dz \\ &= \frac{AH}{2} \sqrt{r^2 - A^2} \end{aligned} \quad (\text{C.12})$$

$$\begin{aligned} I_6(H, A, B_0) &= \frac{A}{2} \int_0^H x dz \\ &= \frac{AH B_0}{4} \end{aligned} \quad (\text{C.13})$$

$$\begin{aligned} I_7(H, r, B_0) &= \frac{1}{2} \int_0^H x \sqrt{r^2 - x^2} dz \\ &= \frac{H r^3}{6 B_0} \left[ 1 - \left(1 - \left(\frac{B_0}{r}\right)^2\right)^{\frac{3}{2}} \right] \end{aligned} \quad (\text{C.14})$$

$$\begin{aligned} I_8(H, A, B_0) &= I_6(H, A, B_0) \\ &= \frac{AH B_0}{4} \end{aligned} \quad (\text{C.15})$$

## ANNEXE D Calcul de la surface tronqué d'un secteur elliptique

On considère une ellipse de grand axe  $a$  et de petit axe  $b$  (voir figure D.1). Les paramètres

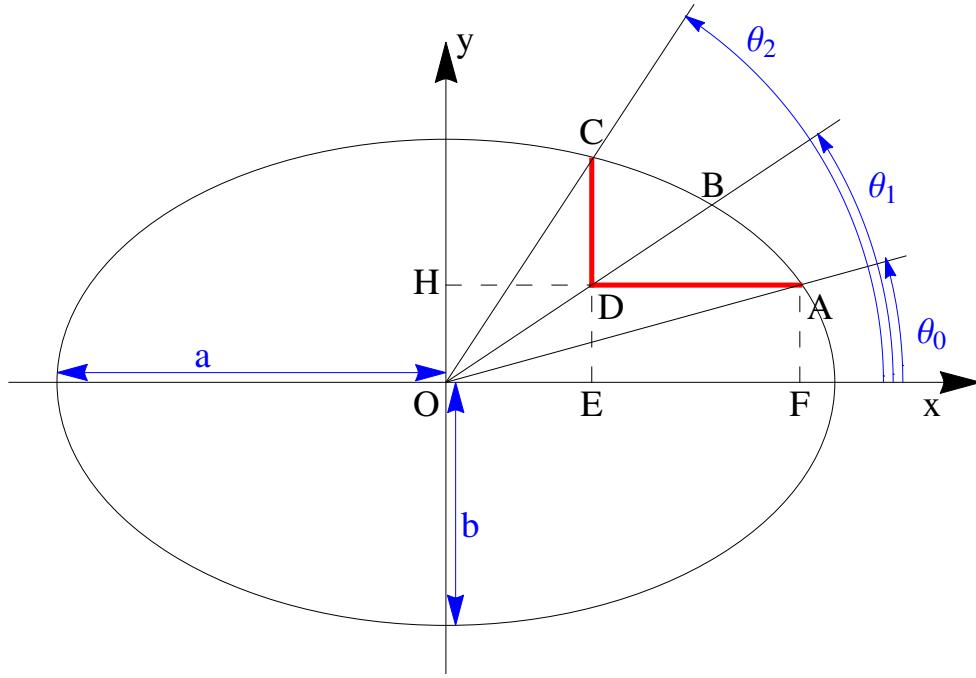


Figure D.1 Illustration du secteur elliptique tronqué  $CDA - \widehat{AC}$  sur le plan  $x - y$

de calcul de la surface utilisée dans les expressions de calcul présentés dans cette annexe et qui sont utilisés dans les nouvelles routines de DRAGON5.

$$l_1 = OE \quad (D.1)$$

$$l_2 = OH \quad (D.2)$$

$$l_3 = OD \quad (D.3)$$

$$l_4 = a - OE \quad (D.4)$$

$$l_5 = b - OH \quad (D.5)$$

$$R_1 = OC \quad (D.6)$$

$$R_1 = OA \quad (D.7)$$

La surface du secteur elliptique ( $CDA - \widehat{AC}$ ) est égale à :

$$S_T = S(\widehat{AOB}) - S(ODA) - S(\widehat{BOC}) - S(ODC) \quad (\text{D.8})$$

Les surfaces de secteurs elliptiques  $S(\widehat{AOB})$  et  $S(\widehat{BOC})$  sont égales à :

$$S(\widehat{AOB}) = F(\theta_1) - F(\theta_0) \quad (\text{D.9})$$

$$S(\widehat{BOC}) = F(\theta_2) - F(\theta_1) \quad (\text{D.10})$$

où :

$$F(\theta) = \frac{ab}{2} \left[ \theta - \arctan \left( \frac{(b-a) \sin(2\theta)}{b+a+(b-a) \cos(2\theta)} \right) \right] \quad (\text{D.11})$$

Les surfaces des triangles  $S(ODA)$  et  $S(ODC)$  sont égales à :

$$S(ODA) = \frac{l_2}{2} \left[ \sqrt{r_A(\theta)^2 - l_2^2} - \sqrt{l_3^2 - l_2^2} \right] \quad (\text{D.12})$$

$$S(ODC) = \frac{l_2}{2} \left[ \sqrt{r_C(\theta)^2 - l_1^2} - \sqrt{l_3^2 - l_1^2} \right] \quad (\text{D.13})$$

où  $r_A$  et  $r_C$  sont respectivement les rayons variables en fonction de l'angle  $\theta$  dans les intervalles  $[OA, OB]$  et  $[OB, OC]$ . La fonction  $r(\theta)$  est égale à :

$$r(\theta) = ab \sqrt{\frac{1}{b^2 \cos(\theta)^2 + a^2 \sin(\theta)^2}} \quad (\text{D.14})$$

## ANNEXE E   Histogramme des routines de calcul de volumes et surfaces ajoutées à NXT:

La structure des routines ajoutées à NXT pour calculer les volumes et les surfaces obtenues par l'intersection d'une région cartésienne et d'un cylindre incliné est :

```

NXT
|
...
NXTVCC
|
...
NXTIAR
|----- NXTIPC
|       |----- NXTCOR
|       |----- HRSINT
|       |----- HRSIDV
|       |       |----- HRFAPP
|       |       |----- HRSIND
|       |       |       |----- HRFAPP
|       |       |----- HRSTRI
|       |       |----- HRSIDF
|       |       |----- HRSORG
|       |       |----- HRFPRV
|       |       |       |----- HRFVT1
|       |       |       |       |----- HRFVTO
|       |       |       |       |       |----- HRFVT4
|       |       |       |----- HRFVT2
|       |       |       |       |----- HRFVT5
|       |       |       |----- HRFVT3
|       |       |       |       |----- HRFVTO
|       |       |       |       |       |----- HRFVT4
|       |       |       |       |----- HRFVT1
|       |       |       |       |       |----- HRFVTO
|       |       |       |       |       |       |----- HRFVT4

```

```
|   |   |----- HRSSEP
|   |   |       |----- HRFELP
|   |   |       |----- HRSSEP1
|   |   |       |----- HRSSEP2
|   |   |       |----- NXTIIPC
|   |   |       |           |----- HRSINT
|   |   |       |           |----- HRSIDV
|   |   |       |           |           |----- HRFAPP
|   |   |       |           |           |----- HRSIND
|   |   |       |           |           |           |----- HRFAPP
|   |   |       |           |           |----- HRSTRI
|   |   |       |           |           |----- HRSIDF
|   |   |       |           |           |----- HRSORG
|   |   |       |           |           |----- HRFPRS
```

## ANNEXE F Calcul de coordonnées de coins d'un rectangle tourné

Soit le rectangle ( $ABCD$ ) dont l'origine est déplacée par rapport au repère fixe  $(x, y, z)$  à la position  $(x_0, y_0, z_0)$ . Le rectangle est tourné par rapport à son repère lié  $(x, y, z)$  d'un angle  $\theta$  autour l'axe  $y$  (voir figure F.1). Les coordonnées des sommets du rectangle dans le plan  $xz$  se calculent en utilisant les expressions analytiques suivantes :

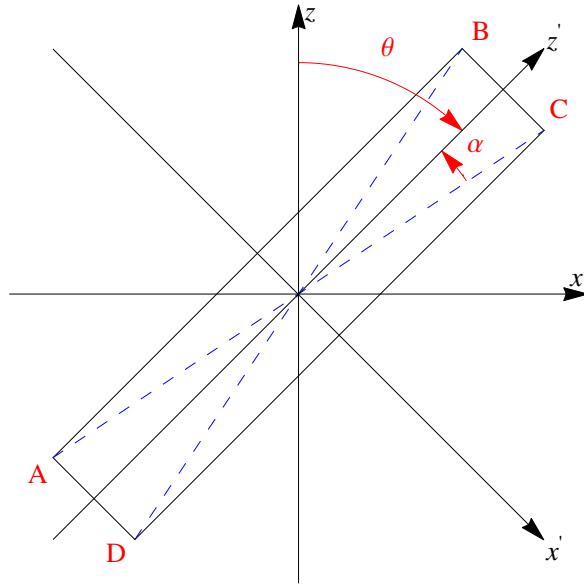


Figure F.1 Illustration de la rotation du rectangle ( $ABCD$ ) dans le plan ( $x - z$ )

$$2L = DC \quad (\text{F.1})$$

$$2l = AC \quad (\text{F.2})$$

$$2R = AD \quad (\text{F.3})$$

$$A\left(l \cos(\theta - \alpha - \pi) + x_0, l \sin(\theta - \alpha - \pi) + z_0\right) \quad (\text{F.4})$$

$$B\left(l \cos(\theta + \alpha) + x_0, l \sin(\theta + \alpha) + z_0\right) \quad (\text{F.5})$$

$$C\left(l \cos(\theta - \alpha) + x_0, l \sin(\theta - \alpha) + z_0\right) \quad (\text{F.6})$$

$$D\left(l \cos(\theta + \alpha - \pi) + x_0, l \sin(\theta + \alpha - \pi) + z_0\right) \quad (\text{F.7})$$