



Titre: Analyse des barres de compensation au cobalt du réacteur CANDU-6 en géométrie exacte en utilisant le code DRAGON
Title:

Auteur: Mudimbi Musongela
Author:

Date: 2011

Type: Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

Référence: Musongela, M. (2011). Analyse des barres de compensation au cobalt du réacteur CANDU-6 en géométrie exacte en utilisant le code DRAGON [Mémoire de maîtrise, École Polytechnique de Montréal]. PolyPublie. <https://publications.polymtl.ca/713/>
Citation:

 **Document en libre accès dans PolyPublie**
Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: <https://publications.polymtl.ca/713/>
PolyPublie URL:

Directeurs de recherche: Guy Marleau
Advisors:

Programme: Génie énergétique
Program:

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ANALYSE DES BARRES DE COMPENSATION AU COBALT DU
RÉACTEUR CANDU-6 EN GÉOMÉTRIE EXACTE EN UTILISANT LE CODE
DRAGON

MUDIMBI MUSONGELA

DÉPARTEMENT DE GÉNIE PHYSIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

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

DÉCEMBRE 2011

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé:

ANALYSE DES BARRES DE COMPENSATION AU COBALT DU RÉACTEUR CANDU-6
EN GÉOMÉTRIE EXACTE EN UTILISANT LE CODE DRAGON

présenté par : MUSONGELA Mudimbi

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

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

M. KOCLAS Jean, Ph.D, président

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

Mme VARIN Elisabeth, Ph.D., membre

DÉDICACE

À ma fille Jade-Marie et à ma défunte mère Marie-France.

REMERCIEMENTS

J'aimerais remercier mon directeur de recherche Guy Marleau pour ses précieux conseils, sa bonté ainsi que sa disponibilité tout au long de ma maîtrise. Je remercie également Siamak Kaveh d'Hydro-Québec pour toutes les informations qui m'ont été fournies et qui ont permis le démarrage de ce projet.

Un merci spécial à Richard Chambon, associé de recherche à l'IGN, pour son aide avec le code DONJON ainsi que les nombreuses discussions intéressantes que nous avons eues sur les résultats de ce projet.

Finalement, un grand merci à mon mari, Guy-Serge Luminuku pour son soutien sur lequel je pouvais compter en tout temps.

RÉSUMÉ

Le réacteur CANDU-6 de la centrale Gentilly-2 comporte parmi ses mécanismes de réactivité des barres de compensation situées en tout temps dans le cœur. Ces barres sont composées de cobalt, un matériel absorbant les neutrons thermiques et servent deux buts distincts. Tout d'abord, de par leur positionnement dans le cœur, elles permettent d'aplanir le flux neutronique dans les régions centrales où ce dernier est plus élevé ce qui a pour effet d'optimiser la distribution de puissance. Ceci permet d'augmenter la puissance globale du réacteur tout en conservant des marges sécuritaires par rapport à la puissance maximale de canal. Deuxièmement, les barres de compensation procurent une réserve de réactivité positive en cas de redémarrage du réacteur. Dans ce cas, elles peuvent être rapidement extraites du cœur.

Les barres de compensation au cobalt présentent une géométrie en « clusters » qu'il n'était anciennement pas possible de modéliser avec les codes de calcul. Aussi, la méthodologie employée dans l'industrie (méthodologie de référence) consistait à « cylindriser » les barres en des régions annulaires équivalentes. De plus, lors du calcul de super cellule, les grappes de combustible entourant le mécanisme ne pouvaient pas non plus être représentées dans leur géométrie exacte. On procédait alors à une pré-homogénéisation de la cellule de combustible en 3 régions afin de les représenter dans le calcul 3D.

L'objectif de cette maîtrise est d'effectuer l'analyse des barres de compensation au cobalt en introduisant une nouvelle méthodologie qui tient compte des progrès effectués dans le code de réseau DRAGON. Ces analyses permettront tout d'abord d'effectuer une comparaison des sections efficaces incrémentales ($\Delta\Sigma$) à 2 groupes générées en utilisant les nouveaux modèles avec les anciennes sections efficaces. Par la suite, il s'agira d'évaluer l'effet de ces nouvelles sections efficaces sur le calcul de réacteur et le suivi du cœur.

Les résultats ont démontré que la représentation des barres de compensation au cobalt et des deux cellules environnantes dans la géométrie exacte donne des écarts élevés entre les $\Delta\Sigma$ mais a un effet global peu élevé sur la réactivité du cœur. Le modèle exact entraîne une diminution de 1,8 mk par rapport au modèle annulaire. Les calculs de transport effectués dans DRAGON ont donné sensiblement les mêmes résultats pour les bibliothèques WINFRITH (69 groupes) et ENDF-B/V (89 groupes).

ABSTRACT

Adjuster rods are part of the CANDU-6 reactor's reactivity mechanisms. In the Gentilly-2 reactor, as in a few other CANDU reactors, these rods are made of Cobalt pencils, a material that absorbs thermal neutrons to help flatten the power distribution in order to achieve optimal power delivery while maintaining safe margins to maximum channel power. They also act as a reserve of positive reactivity in case a reactor trip occurs. The Cobalt adjuster rods exhibit a cluster geometry that was difficult to model accurately. As a result of the limitations in the lattice codes available in the past, the geometry of the various types of rods was cylinderized in order to compute the incremental cross sections. Moreover, the fuel bundles surrounding the reactivity device in the super cell couldn't be modeled in their exact geometry. Therefore, a pre-homogenization of the cell in 2D was required for the supercell calculations. These approximations were used in the reference methodology used in the Canadian nuclear industry for the past years.

The aim of this study is to introduce a new methodology that takes into account the progress achieved in the DRAGON lattice code. The new simulations will allow the comparisons of the two-groups incremental cross sections ($\Delta\Sigma$) generated with the exact models and the annular models. Moreover, we will be able to evaluate the effect of these two models in the reactor core using the DONJON reactor code. The new data are expected to better represent the neutron flux and power distribution in the reactor.

The results of the study showed high relative variations in the incremental cross sections for the two models. However, the global effect in the reactivity of the core was very small. We found that the exact model lowered the reactivity by 1,8 mk compared to the annular model. The transport calculations performed in DRAGON were pretty much similar in both WINFRITH (69 groups) and ENDF-B/V libraries (89 groups).

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE	III
REMERCIEMENTS	IV
RÉSUMÉ	V
ABSTRACT.....	VII
TABLE DES MATIÈRES	VIII
LISTE DES TABLEAUX	XI
LISTE DES FIGURES	XIII
LISTE DES ANNEXES	XV
INTRODUCTION.....	1
CHAPITRE 1	4
DESCRIPTION DU RÉACTEUR CANDU-6	4
1.1 Description générale.....	4
Figure 1.1: Le reacteur candu-6	4
Figure 1.2: Vue de face d'un canal de combustible	5
1.2 Les mécanismes de réactivité du réacteur CANDU-6	6
1.2.1 Description générale.....	6
Figure 1.3: Positionnement des tubes guides des mécanismes de réactivité	7
1.2.2 Les contrôleurs liquides (LZC).....	8
1.2.3 Les barres de compensation au cobalt.....	10
1.3 Chaîne de calculs pour le réacteur	13
1.3.1 Le calcul de cellule (2D)	13
1.3.2 Le calcul de supercellule (3D)	14
1.3.3 Le calcul de cœur	15

CHAPITRE 2	18
THÉORIE PERTINENTE AU CALCUL NEUTRONIQUE.....	18
2.1 Sections efficaces microscopiques et macroscopiques	18
2.2 Champs de neutrons et de noyaux	20
2.3 Flux neutronique et équation de transport.....	20
2.3.1 Présentation de l'équation de transport	22
2.3.2 La forme intégrale de l'équation de transport.....	23
2.3.3 Les conditions aux interfaces et aux frontières.....	24
2.3.4 Le formalisme multigroupe	26
2.3.5 Le calcul des probabilités de collision	27
2.3.6 La modélisation des fuites	31
2.3.7 Le « Tracking »	32
2.3.8 Le « Tracking » en 2D.....	33
2.3.9 Le « Tracking » en 3D.....	35
2.4 Évolution isotopique	37
2.5 L'homogénéisation et la condensation.....	39
2.5.1 Les taux de réaction.....	39
2.5.2 L'homogénéisation.....	39
2.5.3 La condensation	40
2.5.4 Détermination des sections efficaces moyennes.....	41
CHAPITRE 3	42
DESCRIPTION DU SCHÉMA DE CALCUL DANS DRAGON	42
3.1 Principaux modules utilisés.....	42
3.1.1 Le module GEO:	43

3.1.2	Les modules de « tracking »	43
3.1.3	Le module LIB:	45
3.1.4	Le module INFO:	46
3.1.5	Le module ASM:	46
3.1.6	Le module FLU:	46
3.2	Méthodologie standard	47
3.2.1	Les calculs dans DRAGON	47
3.2.2	La modélisation des mécanismes de réactivité	55
3.3	Nouvelle méthodologie	61
3.3.1	Les calculs dans DRAGON	61
3.3.2	La modélisation des mécanismes de réactivité	63
CHAPITRE 4		66
ÉTUDE DES MÉCANISMES DE RÉACTIVITÉ		66
4.1	Comparaison entre les modules EXCELT : et NXT :	66
4.2	Étude de la convergence spatiale du flux neutronique	70
4.2.1	La convergence du flux pour le combustible	71
4.2.2	La convergence du flux pour la barre au cobalt de type 4	79
4.3	Comparaison des résultats du modèle annulaire et du modèle exact	85
4.3.1	Comparaison des modèles dans DRAGON 3.06	85
4.3.2	Comparaison des modèles dans DONJON	93
CONCLUSION		100
BIBLIOGRAPHIE		103
ANNEXES		105

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 0.1 : Valeurs en réactivité des mécanismes de réactivité du réacteur CANDU-6	7
Tableau 3.1: Dimensions et composition des mélanges de la cellule CANDU-6.....	48
Tableau 3.2: Composition des alliages de zirconium pour la cellule CANDU-6	49
Tableau 3.3: Paramètres locaux de la cellule CANDU-6.....	49
Tableau 3.4: Description des mélanges dans la méthodologie standard	54
Tableau 3.5: Valeurs de r_{eqv} pour chaque type de LZC et matériaux associés	57
Tableau 3.6: Valeurs de r_{eqv} (cm) pour les barres au cobalt (méthodologie standard)	60
Tableau 4.1: Comparaison des $\Delta\Sigma$ (cm ⁻¹) avec NXT: et EXCELT: des barres au cobalt avec la méthodologie de référence sans « burnup» (ENDF/B-V).....	67
Tableau 4.2: Comparaison des $\Delta\Sigma$ (cm ⁻¹) avec NXT: et EXCELT: des barres au cobalt avec la méthodologie de référence sans « burnup» (WINFRITH).....	67
Tableau 4.3: Écarts des $\Delta\Sigma$ pour NXT: et EXCELT: des barres au cobalt (ENDF/B-V)	68
Tableau 4.4: Écarts des $\Delta\Sigma$ pour NXT: et EXCELT: des barres au cobalt (WINFRITH)	68
Tableau 4.5: Comparaison du temps de calcul des modules NXT: et EXCELT:	69
Tableau 4.6 : Comparaison des temps de calcul (« CPU time ») pour les 3 modèles.....	73
Tableau 4.7: Valeurs des sections efficaces Σ_{IN} (cm ⁻¹) et de k_{∞} pour les 3 modèles	74
Tableau 4.8: Valeurs des sections efficaces incrémentales $\Delta\Sigma$ (cm ⁻¹) et de Δk_{∞} (mk)	75
Tableau 4.9: Écarts relatifs (%) des sections efficaces incrémentales et Δk_{∞} (mk).....	78
Tableau 4.10 : Comparaison des temps de calcul (« CPU time ») pour les 3 modèles.....	81
Tableau 4.11: Valeurs des sections efficaces Σ_{IN} (cm ⁻¹) et de k_{∞} pour les 3 modèles	82
Tableau 4.12 : Valeurs des sections efficaces incrémentales $\Delta\Sigma$ (cm ⁻¹) et de Δk_{∞} (mk)	83

Tableau 4.13 : Écarts relatifs (%) des sections efficaces incrémentales et Δk_{∞} (mk).....	84
Tableau 4.14 : Comparaison des Σ_{NO} des modèles annulaire et exact (cm^{-1}) ainsi que de k_{∞} ,.....	86
Tableau 4.15 : Comparaison des Σ_{IN} des modèles annulaire et exact (cm^{-1}) ainsi que de k_{∞} ,.....	87
Tableau 4.16 : Comparaison des Σ_{IN} des modèles annulaire et exact (cm^{-1}) ainsi que de k_{∞} , WINFRITH	88
Tableau 4.17 : Écarts relatifs (%) des sections efficaces incrémentales et Δk_{∞} (mk), ENDF-B/V	91
Tableau 4.18 : Écarts relatifs (%) des sections efficaces incrémentales et Δk_{∞} (mk), WINFRITH	92
Tableau 4.19 : Comparaison de k_{eff} pour le modèle annulaire et le modèle exact.....	94

LISTE DES FIGURES

Figure 1.1: Le reacteur candu-6	4
Figure 1.2: Vue de face d'un canal de combustible	5
Figure 1.3: Positionnement des tubes guides des mécanismes de réactivité	7
Figure 1.4: Positionnement des barres de contrôles liquides et des détecteurs de flux verticaux ...	9
Figure 1.5 : Les 3 types de contrôleurs liquides.....	10
Figure 1.6 : Grappe de cobalt.....	11
Figure 1.7 : Vue de dessus des 4 types de grappe de cobalt	12
Figure 1.8 : Coupe axiale du réseau de cellules du réacteur CANDU-6	15
Figure 2.1 : Parcours du neutron	24
Figure 2.2 : Effet des conditions de réflexion spéculaire (gauche) et isotrope.....	26
Figure 2.3: Le « tracking » en 2D	35
Figure 3.1: Séquence des modules dans DRAGON 3.06.....	43
Figure 3.2: Comparaison du type de maillage possible avec EXCELT: et NXT:	45
Figure 3.3: Géométrie de « clusters » pour la cellule CANDU-6.....	47
Figure 3.4: Géométrie grossière pour les calculs d'auto-protection des résonances.....	50
Figure 3.5: Géométrie fine pour les calculs de transport.....	51
Figure 3.6: Supercellule selon le modèle simplifié de la méthodologie standard.....	53
Figure 3.7: Cylindrisation du LZC de type « 32 »	56
Figure 3.8: Modèles simplifiés des LZC (méthodologie standard).....	60
Figure 3.9: Modèles simplifiés des barres au cobalt (méthodologie standard).....	62
Figure 3.10: Supercellule selon le modèle exact avec la nouvelle méthodologie.....	62
Figure 3.11: Modèle exact du LZC de type « 32 »	63

Figure 3.12: Modèles exacts des LZC de type « 21 » et « 10 »	64
Figure 3.13: Modèles exacts des 4 types de barres au cobalt	65
Figure 4.1: Vue de face du premier modèle (420 régions)	71
Figure 4.2: Vue de face du second modèle (580 régions)	72
Figure 4.3: Vue de face du troisième modèle (676 régions)	72
Figure 4.4: Vue de dessus du premier modèle (420 régions)	79
Figure 4.5: Vue de dessus du second modèle (536 régions)	80
Figure 4.6: Vue de dessus du troisième modèle (616 régions)	81
Figure 4.7: Effet des barres de compensation sur la forme de flux dans le réacteur	95
Figure 4.8: Comparaison des puissances de grappe pour les deux modèles dans le plan 5.	95
Figure 4.9: Comparaison des puissances de grappe pour les deux modèles dans le plan 6.	96
Figure 4.10: Écarts relatifs (%) des puissances de grappe entre les deux modèles dans le plan 5	97
Figure 4.11: Écarts relatifs (%) des puissances de grappe entre les deux modèles dans le plan 6	98

LISTE DES ANNEXES

ANNEXE A	SCHÉMA DE CALCUL DRAGON.....	105
1.	Fichiers du calcul de cellule (2D) pour la nouvelle méthodologie	105
1.1	Fichier d'entrée cell5.x2m	105
1.2	Procédure GeoC6C.c2m	106
1.3	Procédure LibC6.c2m.....	107
1.4	Procédure FluC6.c2m.....	110
2.	Exemple de fichiers du calcul 3D pour la nouvelle méthodologie (cobalt)	111
2.1	Fichier d'entrée resco1E5.x2m (contient le calcul 3D).....	111
2.2	Procédure GeoCo1.c2m (géométrie 3D)	113
2.3	Procédure LibCo.c2m (librairie 3D)	121
2.4	Procédure Flu3D.c2m (transport 3D).....	124

INTRODUCTION

Dans les réacteurs de type CANDU-6, on retrouve des mécanismes de contrôle de la réactivité qui sont placés verticalement à mi-chemin entre les canaux de combustible horizontaux. Ces mécanismes permettent d'effectuer un réglage à court terme de la réactivité de manière à maintenir la criticité du réacteur en cours d'opération. Pour la centrale Gentilly-2 d'Hydro-Québec ces mécanismes sont : les contrôleurs liquides (« LZC »), les barres de compensation (« adjuster rods »), les barres de contrôles solides (« mechanical absorbers »), les barres d'arrêts du Système d'Arrêt d'Urgence 1 (« shut-off rods »), les injecteurs de poison dans le modérateur et ceux du Système d'Arrêt d'Urgence 2, les tubes guides des mécanismes ainsi que les matériaux de structure qui leur sont associés. Dans cette liste, seuls les contrôleurs liquides, les barres de compensation, les tubes guides ainsi que les matériaux de structure sont situés en permanence dans le réacteur et auront donc un impact sur la réactivité au quotidien.

Afin d'évaluer cet impact, on a recours à des simulations qui sont effectuées grâce à des codes de calcul neutronique. Parmi les codes utilisés dans l'industrie nucléaire canadienne, le code DRAGON [1] développé à l'Institut de Génie Nucléaire (IGN), permet de simuler à la fois le comportement de la cellule unitaire en absence de mécanisme (calcul 2D) et en présence de ce dernier (calcul 3D). Ce code est composé de modules qui appelés individuellement permettent d'effectuer une tâche bien spécifique dans le schéma de calcul qui mènera à la résolution de l'équation du transport des neutrons. Les schémas de calcul DRAGON permettent donc de compiler les propriétés nucléaires pour le combustible, les mécanismes de contrôle ainsi que les matériaux de structure. Ces propriétés seront par la suite utilisées dans les calculs de cœur réalisés par le code DONJON [2] également développé à l'IGN.

Il y a plus d'une dizaine d'années, les mécanismes de réactivité du réacteur CANDU-6 ont été analysés [3] et ce, en utilisant une version de DRAGON ayant des capacités limitées. Ces limitations engendraient plusieurs problèmes. Tout d'abord, le traitement de la supercellule (cellules 3D en présence du mécanisme) nécessitait une pré-homogénéisation des grappes de

combustible et ne permettait qu'une représentation approximative des géométries des mécanismes tels les LZC et les barres de compensation au cobalt. Deuxièmement, les capacités mémoire et disque des ordinateurs de l'époque étant très limitées, la discrétisation permettant d'obtenir la convergence spatiale du flux dans les régions contenant le combustible et les mécanismes ne pouvait être effectuée. De ce fait, la convergence spatiale ne pouvait être atteinte. Troisièmement, l'énergie produite par l'absorption des neutrons dans les mécanismes de réactivité ne pouvait être comptabilisée dans les calculs car le module d'évolution de DRAGON ne pouvait prendre cet effet en compte. Quatrièmement, l'évolution des matériaux, en occurrence le cobalt, n'était pas rigoureusement pris en compte dans les calculs en raison des limitations présentes dans les chaînes de désintégration des bibliothèques de sections efficaces. Finalement, le processus d'homogénéisation ne permettait pas d'effectuer un calcul d'évolution du combustible qui prendrait en compte l'effet du mécanisme de réactivité.

Aujourd'hui, dans la version 3.06 de DRAGON, la majorité de ces limitations n'existent plus de sorte qu'il est possible de réévaluer les propriétés nucléaires des mécanismes de réactivité en utilisant des outils plus modernes. Ceci est essentiel dans la mesure où plusieurs projets de réfection de réacteurs, incluant celui de Gentilly-2, nécessiteront de nouvelles analyses de sûreté utilisant ces résultats.

L'objectif de ce projet est d'effectuer l'analyse des barres de compensation au cobalt en tenant compte des progrès effectués dans DRAGON. Ces analyses permettront tout d'abord d'effectuer une comparaison des sections efficaces à 2 groupes générées en utilisant les nouveaux modèles avec les anciennes sections efficaces. Par la suite, il s'agira d'évaluer l'effet de ces nouvelles sections efficaces sur le calcul de réacteur et le suivi du cœur. Mentionnons que ce projet s'appuie sur les travaux réalisés par Roy et Al. et présentés dans le rapport IGE-227 [3].

Dans le premier chapitre, nous effectuerons une description des principaux composants du réacteur CANDU-6 de la centrale Gentilly-2. Par la suite, il s'agira dans le second chapitre de présenter les notions théoriques tels que l'équation de transport neutronique et sa résolution numérique. Dans le troisième chapitre, nous introduirons les deux méthodologies qui sont traitées

dans ce projet. La première dite « de référence » (méthodologie standard) est celle qui était utilisée jusqu'ici en raison des limitations énumérées plus haut présentes dans la version 3.04 de DRAGON. La seconde méthodologie dite « actuelle » (nouvelle méthodologie) est celle que nous introduisons et qui tient compte des progrès effectués dans DRAGON 3.06. Ces deux méthodologies diffèrent principalement au niveau du traitement de la géométrie du combustible et des mécanismes de réactivité en 3 dimensions. Désormais, un calcul complet en géométrie exacte peut être effectué pour la super cellule. Finalement, le quatrième chapitre présente les résultats des comparaisons effectuées entre les deux méthodologies suite aux calculs de transport et de diffusion.

CHAPITRE 1

DESCRIPTION DU RÉACTEUR CANDU-6

Dans ce chapitre nous effectuons un survol des principaux composants du réacteur CANDU-6 comme celui de la centrale Gentilly-2. Pour une description plus détaillée du réacteur le lecteur peut se référer à des ouvrages plus complets [4,5].

1.1 Description générale

Le réacteur CANDU-6 est un réacteur à neutrons thermiques composé d'un réservoir cylindrique horizontal en acier inoxydable que l'on nomme la calandre, de 380 canaux de combustible alignés dans l'axe de la calandre ainsi que de mécanismes de réactivité (horizontaux et verticaux) disposés perpendiculairement aux canaux (figure 1.1). Le tout est contenu dans un bouclier thermique en béton.

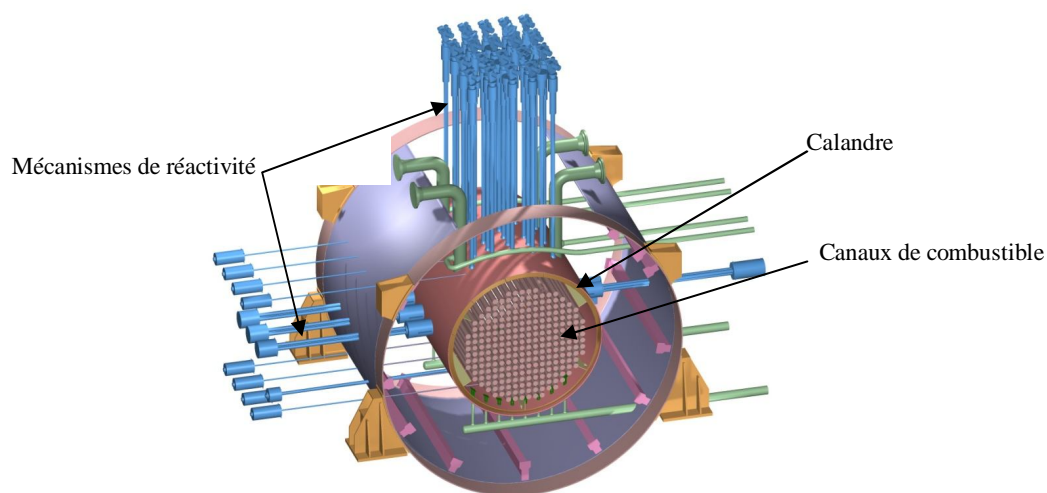


Figure 1.1: Le reacteur candu-6

La calandre est remplie d'eau lourde (D_2O) qui sert de modérateur à basse pression et à basse température. Un liquide caloporteur à eau lourde sous pression circule dans les canaux de combustible pour permettre d'évacuer la chaleur produite par fission vers les générateurs de vapeur. Il est important de noter que le modérateur et le caloporteur circulent dans des circuits

bien distincts séparés par deux tubes soit le tube de force et le tube de calandre. Ces derniers sont séparés par un espace annulaire (gap) contenant un gaz de telle sorte que le modérateur froid est isolé thermiquement du caloporteur chaud. Les tubes de calandre et les tubes de force sont faits d'un alliage de zirconium, un métal qui absorbe peu les neutrons qui le traversent. Chaque canal de combustible contient 12 grappes de combustible. Chacune de ces grappes est composée de 37 crayons d'uranium naturel inséré dans des gaines de zirconium (figure 1.2).

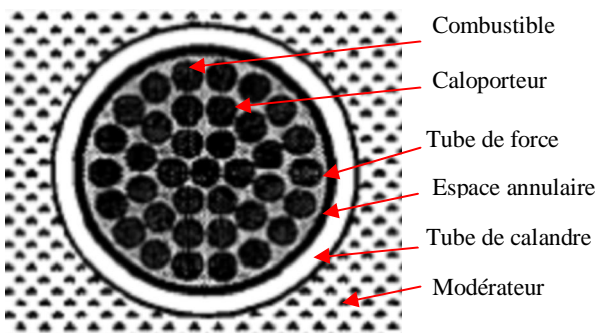


Figure 1.2: Vue de face d'un canal de combustible

Le CANDU-6 est muni d'un système de régulation du réacteur (SRR) qui s'assure de maintenir la criticité du réacteur pour des conditions normales d'opération. Ainsi, lorsque le réacteur devient légèrement surcritique, le SRR intervient en déplaçant des mécanismes absorbants afin de diminuer cet excès en réactivité. Dans le cas contraire (réacteur sous-critique) le système compense par une augmentation de la réactivité. Afin d'effectuer ces tâches, le SRR commande des mécanismes de contrôle qui assurent un réglage global et spatial à court terme de la réactivité, le réglage à long-terme se faisant au moyen du rechargement du combustible. La section suivante présente ces différents mécanismes.

1.2 Les mécanismes de réactivité du réacteur CANDU-6

1.2.1 Description générale

Le système de régulation du réacteur CANDU-6 est muni de 4 types de mécanismes de contrôle de la réactivité à savoir :

- 14 contrôleurs liquides (« liquid zone controllers») : voir section 1.2.2.
- 21 barres de compensation (« adjuster rods ») : voir section 1.2.3.
- 4 barres d'absorption solides (« mechanical absorbers »): ces barres sont faites d'acier et de cadmium, un très fort absorbeur de neutrons thermiques. Elles sont situées en dehors du cœur et servent à la régulation dans des conditions spéciales. Par exemple, en cas de grandes erreurs de puissance c'est-à-dire lorsque la puissance du réacteur est supérieure à la valeur fixée par l'exploitant, les barres solides permettront de réduire la puissance grâce à un apport en réactivité négative.
- les injecteurs de poison soluble (« moderator poison »): Les injecteurs permettent d'ajouter du poison soluble (bore ou gadolinium) en petite quantité dans le modérateur. Notons que le poison est une substance qui absorbe fortement les neutrons.

Outre ces mécanismes, le CANDU-6 est doté de deux systèmes qui assurent la protection du réacteur en situation d'urgence. Il s'agit des systèmes d'arrêt d'urgence 1 et 2 (SAU1 et SAU2). Ces deux systèmes complètement indépendants du SRR (physiquement et fonctionnellement) sont constitués respectivement de 28 barres d'arrêt (« shut-off rods ») en cadmium (SAU1) ainsi que de 6 réservoirs à haute pression libérant du nitrate de gadolinium (SAU2), un matériel absorbant fortement les neutrons. Le système SAU1 est inséré verticalement dans le cœur tandis que le SAU2 est inséré horizontalement directement dans le modérateur grâce à des injecteurs. Le tableau 1.1 présente les valeurs moyennes en réactivité de chacun des mécanismes ainsi que les taux de variation de la réactivité qui leur sont associés.

Tableau 0.1 : Valeurs en réactivité des mécanismes de réactivité du réacteur CANDU-6

Mécanisme	Valeur totale en réactivité (mk)	Taux de réactivité maximal (mk/s)
14 contrôleurs liquides	7	$\pm 0,14$
21 barres de compensation	15	$\pm 0,10$
4 barres d'absorption solides	10	$\pm 0,075$ (conduit) - 3,5 (relâché)
les injecteurs de poison soluble	-	- 0,01 (extrait)
28 barres d'arrêt (SAU1)	- 80	-50
6 réservoirs d'injection de poison (SAU2)	> - 300	-50

Les mécanismes de réactivité sont situés ou insérés dans le cœur du réacteur à l'intérieur de tubes guides faits en zirconium et situés en tout temps dans le modérateur. Ces tubes guides sont situés à mi-chemin et sont perpendiculaires aux canaux de combustible (figure 1.3).

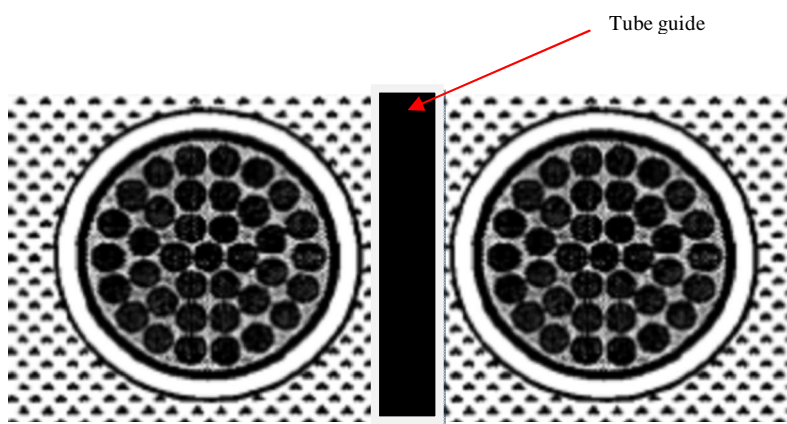


Figure 1.3: Positionnement des tubes guides des mécanismes de réactivité

Les tubes guides des barres d'arrêt, des barres d'absorption solides et des barres de compensation sont perforés ce qui permet le passage du liquide modérateur. Ceci a pour effet de refroidir le

mécanisme ainsi que de diminuer la quantité de matériau absorbant des neutrons dans le tube guide.

En plus des tubes guides, les mécanismes de réactivité possèdent des matériaux de structure qui permettent de les manoeuvrer adéquatement. Ces matériaux sont :

- Les câbles et les tiges de support (« supporting bars and cables ») : ils permettent le déplacement des mécanismes dans le cœur à l'aide d'un moteur actionnant une poulie. Pour les CANDU-6, seuls les câbles et les tiges de support des barres de compensation sont situés à l'intérieur du réacteur aux conditions normales d'opération. Ce sont donc ces derniers que l'on prend en compte pour les simulations.
- Les crochets et les localisateurs (« bracket and locators ») : situés au bas des tubes guides, ils permettent d'assurer la position fixe de chaque tube guide.
- Les ressorts de tension et les écrous (« tensioning spring and coupling nuts ») : tous les mécanismes en possèdent sauf les injecteurs de poison. Ils sont situés en bas des mécanismes et leurs dimensions sont équivalentes au rayon interne du tube guide associé.

Pour les simulations dans DRAGON, les matériaux de structure sont représentés par des barres cylindriques pleines de zirconium.

1.2.2 Les contrôleurs liquides (LZC)

Le cœur du réacteur CANDU-6 est divisé en 14 zones de contrôle. Les contrôleurs liquides forment un système de 6 tubes orientés verticalement entre les canaux de combustible. Les deux tubes du centre sont divisés en 3 compartiments et les 4 autres tubes sont divisés en 2 compartiments pour un total de 14 compartiments soit un par zone de contrôle (figure 1.4).

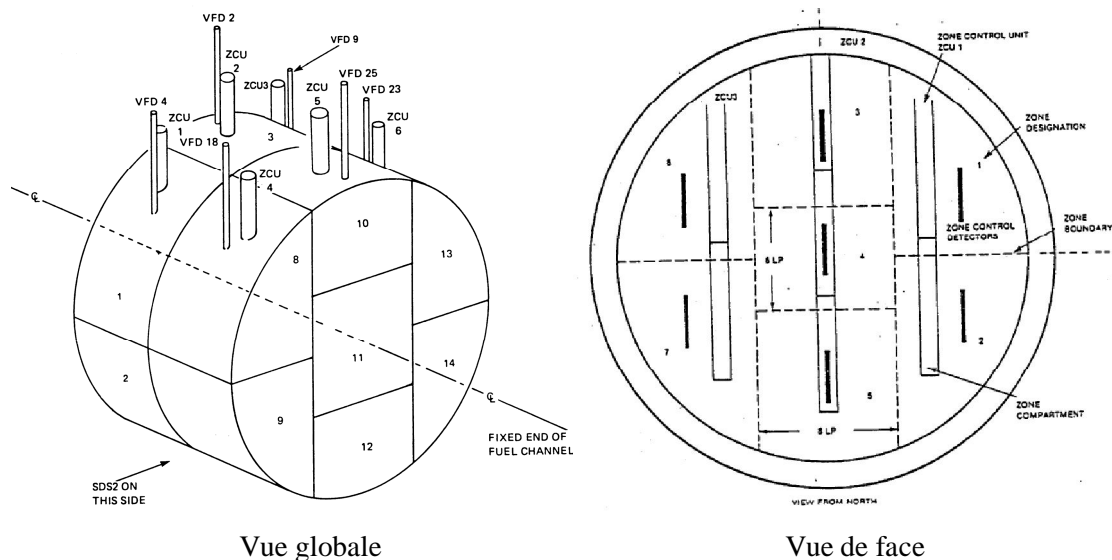


Figure 1.4: Positionnement des barres de contrôles liquides et des détecteurs de flux verticaux

Les compartiments sont des réservoirs qui peuvent être remplis avec de l'eau légère (H_2O) et vidés avec de l'hélium. On utilise l'eau légère car elle absorbe davantage les neutrons que l'eau lourde. L'hélium est utilisé en remplacement de l'air ce qui permet d'éviter les problèmes liés aux réactions avec l'oxygène ainsi que la corrosion rapide des structures en zirconium. Le système de régulation du réacteur varie continuellement le niveau de remplissage de 0% à 100% en se basant sur l'intensité du signal émis par les détecteurs de flux (VFD) situés dans chaque zone de contrôle.

On distingue 3 types de contrôleurs liquides dépendamment du nombre de tubes d'alimentation en eau légère (« feeder tubes ») et de tubes d'évacuation en eau légère (« scavenger tubes » ou « scavengers ») qu'ils contiennent :

- Les LZC de type 32 contiennent 3 petits « scavengers » et 2 larges « feeders ». Les « scavengers » contiennent chacun un tube d'alimentation en hélium (« bubbler ») et les « feeders » contiennent un tube d'équilibrage de l'hélium (« balance »).
- Les LZC de type 21 contiennent 2 petits « scavengers » contenant 2 « bubblers » et 1 large « feeder » contenant 1 « balance ».
- Les LZC de type 10 contiennent 1 petit « scavenger » avec 1 « bubbler » et aucun « feeder » ni « balance ».

La figure 1.5 présente les configurations de chaque type de contrôleur liquide.

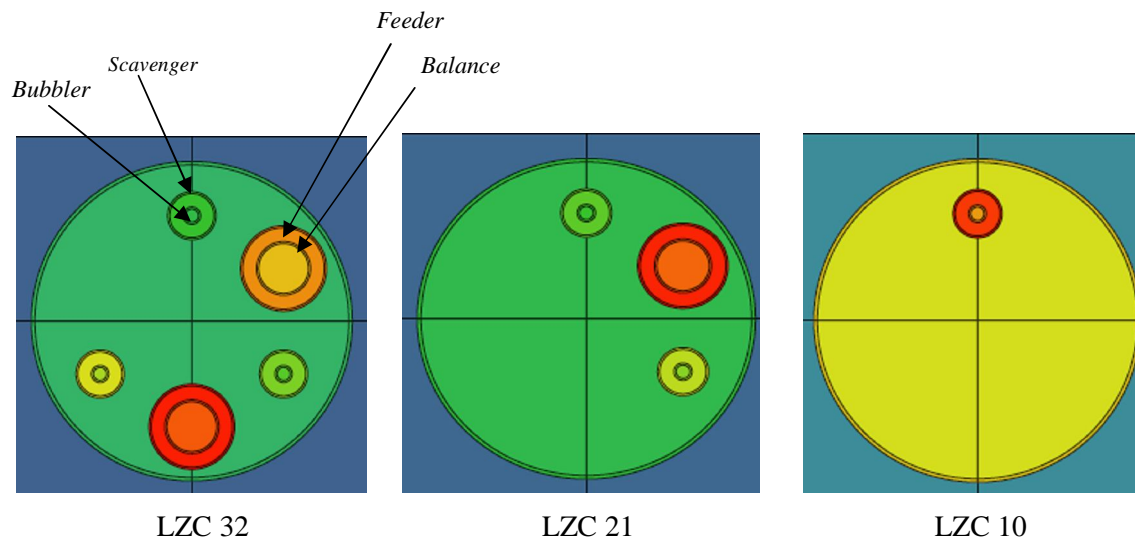


Figure 1.5 : Les 3 types de contrôleurs liquides

Les contrôleurs liquides sont situés en permanence dans le coeur. Leur fonction est d'effectuer un réglage fin et continu de la réactivité. Pour ce faire, le niveau de remplissage des compartiments peut varier de deux manières. Premièrement, on varie tous les niveaux à l'unisson de manière à maintenir la puissance du réacteur à une valeur constante choisie par l'exploitant et ce, en réduisant autant que possible l'erreur de puissance (contrôle global). Deuxièmement, les niveaux varient individuellement afin de réduire les écarts de puissance entre chaque zone de contrôle (contrôle différentiel) ce qui permet de modeler la forme de la distribution spatiale de puissance [6].

1.2.3 Les barres de compensation au cobalt

Les barres de compensation au nombre de 21 sont manœuvrées en groupes appelés « bancs ». Il y a en tout 7 ou 8 bancs qui contiennent chacun des barres de différentes longueurs selon leur position dans le coeur. À l'origine, les 21 barres de compensation étaient faites en acier inoxydable. Aujourd'hui, elles ont toutes été remplacées dans le réacteur Gentilly-2 par des barres au cobalt-59 et ce dans le but de produire du cobalt-60, un isotope radioactif grandement utilisé dans l'industrie et en médecine nucléaire. Afin d'effectuer ces remplacements, il a fallu s'assurer que les barres en acier et au cobalt seraient neutroniquement équivalentes c'est-à-dire

que les deux types de barres présentent des valeurs identiques en réactivité et produisent les mêmes effets sur la distribution spatiale du flux neutronique [7].

Les barres de compensation au cobalt sont formées de plusieurs grappes assemblées le long d'une tige de support centrale. Chaque grappe est constituée de crayons contenant 8 pastilles de cobalts entourés d'une gaine de zirconium ainsi que de deux tubes de support (figure 1.6). La structure est faite en zirconium et est contenue dans un tube guide perforé à 35,66% et ce dans le but de laisser passer du modérateur pour refroidir le mécanisme.

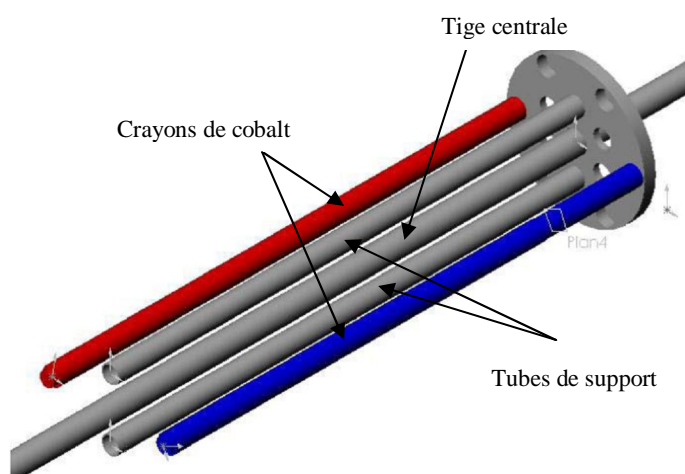


Figure 1.6 : Grappe de cobalt

On distingue 4 types de grappes de cobalt dépendamment du nombre de crayons qu'ils contiennent. Le premier type de grappe (cobalt 1) contient 1 crayon de cobalt et 1 crayon en zirconium nommé « dummy pencil » placé de manière symétrique afin d'assurer l'équilibre de la structure. Le second type (cobalt 2) contient 2 crayons de cobalt, le troisième type (cobalt 3) contient 3 crayons de cobalt et le quatrième type (cobalt 4) contient 4 crayons de cobalt. La figure 1.7 présente les 4 types de grappes.

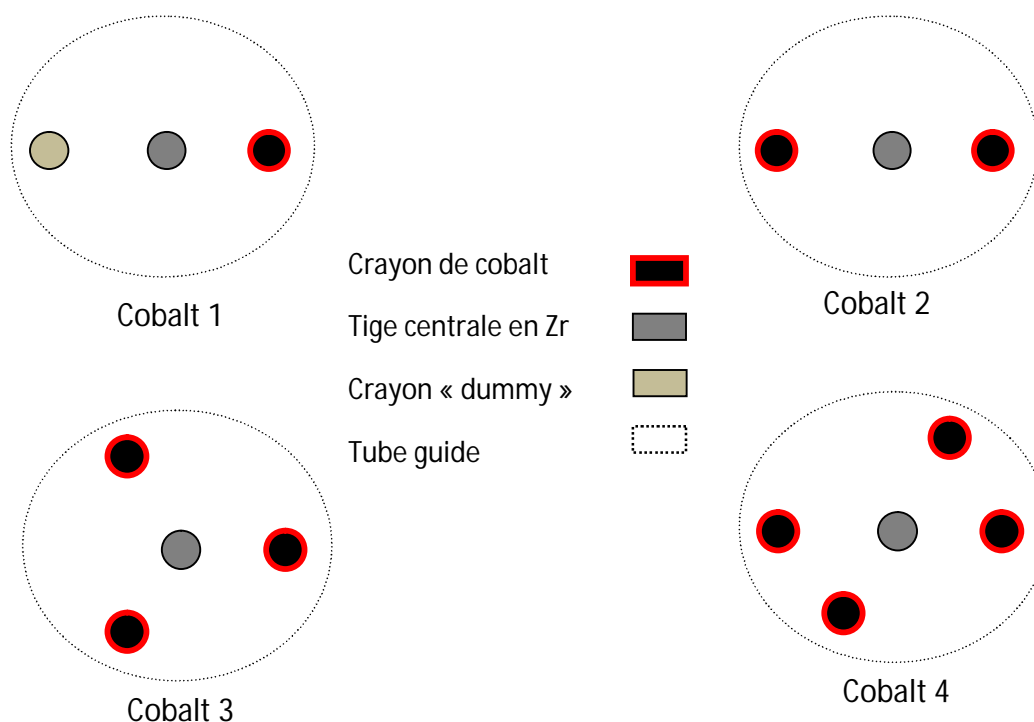


Figure 1.7 : Vue de dessus des 4 types de grappe de cobalt

Les barres de compensation sont normalement complètement insérées dans le cœur. Elles ont pour fonction d'aplatir la forme du flux neutronique ce qui permet une meilleure utilisation du combustible. Il est à noter que pour accomplir cette tâche, la quantité de matériau absorbant des neutrons varie le long d'une même barre. Ainsi, on peut retrouver des grappes de cobalt de différents types (cobalt 1, 2, 3 ou 4) dans un même assemblage. Le retrait des barres permet d'avoir un excès de réactivité positive dans le cœur et ce, afin de compenser la présence du xénon lors des baisses de puissance ou encore dans le cas où le système de rechargement du combustible est temporairement hors d'usage [6].

Lorsqu'on effectue des simulations du réacteur entier, on se doit de tenir compte de l'effet des mécanismes de contrôle sur la réactivité. Pour cela, on s'intéresse aux mécanismes qui sont situés en permanence dans le réacteur et qui servent au contrôle quotidien de la réactivité dans le cœur. Ces mécanismes sont les contrôleurs liquides (LZC) et les barres de compensation au cobalt qui ont remplacé celles en acier inoxydable. On modélise également tous les tubes guides ainsi que

les matériaux de structure car eux aussi sont situés en permanence dans le cœur. On est alors en mesure d'évaluer leur influence sur la réactivité et ce, à l'aide d'une chaîne de calculs.

1.3 Chaîne de calculs pour le réacteur

Il a été vu dans la section précédente que le réacteur CANDU-6 est composé de canaux de combustible horizontaux avec les mécanismes de contrôle de la réactivité verticaux. Afin de modéliser correctement cet environnement, une méthodologie en 3 étapes est généralement utilisée à savoir un calcul de cellule (2D), un calcul de supercellule (3D) ainsi qu'un calcul de cœur [3].

1.3.1 Le calcul de cellule (2D)

La première étape du schéma de calcul consiste à générer les propriétés nucléaires dépendantes du taux de combustion (« burnup ») pour la cellule unitaire CANDU [7]. Ces propriétés sont les sections efficaces macroscopiques (Σ_{2D}) ainsi que les coefficients de diffusion qui serviront aux calculs de cœur. Pour cela, on représente tout d'abord la cellule dans un milieu considéré infini et on impose des conditions de réflexion à ses frontières. La géométrie considérée inclut la grappe de combustible, le caloporteur, le tube de force, le gaz annulaire, le tube de calandre ainsi qu'une partie du modérateur (voir figure 1.2). Le volume de modérateur considéré est équivalent à celui dans la cellule du réseau. On définit, par la suite, les mélanges associés à chacune des régions en tenant compte des densités des isotopes. Les sections efficaces microscopiques sont extraites à partir de bibliothèques de différents formats disponibles dans le code DRAGON. Dans le présent travail, les calculs ont été réalisés en utilisant deux bibliothèques de format WIMS-AECL soit les bibliothèques Winfrith (ENDF/B-IV) à 69 groupes d'énergie et ENDF/B-V à 89 groupes. Les sections efficaces sont corrigées par un calcul d'autoprotection des résonances. Un maillage (« tracking ») est effectué sur les volumes de la géométrie ce qui permet de générer les lignes d'intégrations nécessaires au calcul des probabilités de collision. Les matrices de probabilités de collision (matrices P_{ij}) sont intégrées et le système linéaire résultant est ensuite résolu de manière à obtenir le flux ainsi que les valeurs propres du système (facteur de multiplication k ou Laplacien critique B). Ces étapes sont répétées dans une boucle de calcul en tenant compte du « burnup » dans le combustible. En effet, à mesure que les grappes sont irradiées dans le cœur,

des calculs d'évolution isotopique doivent être effectués afin de générer les sections efficaces dépendantes du « burnup ». La méthode employée [3] consiste à fixer la densité de puissance de la grappe à 32 KW/Kg durant plusieurs intervalles de temps successifs et ce jusqu'à 130 jours. Un calcul de « burnup » est effectué à la fin de chaque pas de temps. Il est à noter que les intervalles sont modifiés de manière à suivre la production et la saturation des actinides. La puissance moyenne de fission est fixée à 615 kW et les paramètres locaux de la cellule (température de combustible et de caloporteur, température et densité du caloporteur) sont fonction de cette puissance. Les calculs de « burnup » se font avec les paramètres locaux et globaux dans leurs états de référence.

Suite au calcul d'évolution isotopique, les propriétés dépendantes du « burnup » sont homogénéisées sur toute la cellule et condensées à deux groupes d'énergie pour ensuite être stockées dans des bases de données qui serviront aux calculs de réacteur fini en 3D.

Dans un deuxième temps, en raison des limitations liées aux codes de calcul, les sections efficaces sont homogénéisées sur quelques régions mais sans condensation et ce, afin de servir au calcul de super-cellule. Cette seconde étape n'est désormais plus nécessaire comme on le verra au chapitre 3.

1.3.2 Le calcul de supercellule (3D)

Suite aux calculs de cellule, la seconde étape consiste à effectuer un calcul de supercellule et ce, afin de tenir compte de l'effet des mécanismes de réactivité présents dans le réacteur CANDU-6. Les calculs de supercellule permettent d'obtenir les sections efficaces incrémentales ($\Delta\Sigma$) qui seront additionnées aux sections efficaces de la cellule unitaire pour un volume donné autour du mécanisme. Le modèle de supercellule consiste en un mécanisme de réactivité (cylindre vertical) entouré de deux grappes de combustible (cylindres horizontaux). Les propriétés dépendantes du « burnup » (propriétés à mi-burnup) obtenues dans le calcul 2D sont récupérées pour les grappes de combustible dans le calcul 3D. Les étapes du calcul de supercellule sont les mêmes que pour le calcul 2D sauf qu'en général on n'effectue pas de calcul d'évolution isotopique. Deux calculs de transport sont réalisés, un avec le mécanisme complètement inséré dans la supercellule et un calcul avec le mécanisme absent remplacé par du modérateur seulement. Ce dernier état constitue

la référence pour le calcul des $\Delta\Sigma$. Les sections efficaces macroscopiques obtenues sont homogénéisées sur toute la supercellule puis condensées en 2 groupes d'énergie.

1.3.3 Le calcul de cœur

La dernière étape du schéma de calcul consiste à effectuer le calcul de cœur à l'aide du code DONJON [2,8]. Pour ce faire, on effectue une modélisation cartésienne en 3D du cœur du réacteur CANDU-6 afin de simuler la présence des canaux de combustible ainsi que des mécanismes de réactivité. La figure 1.8 présente une coupe axiale de cette géométrie. Une condition aux frontières circulaire est appliquée aux cellules qui croisent la frontière externe de la calandre afin de représenter cette limitation réelle (voir figure 1.1).

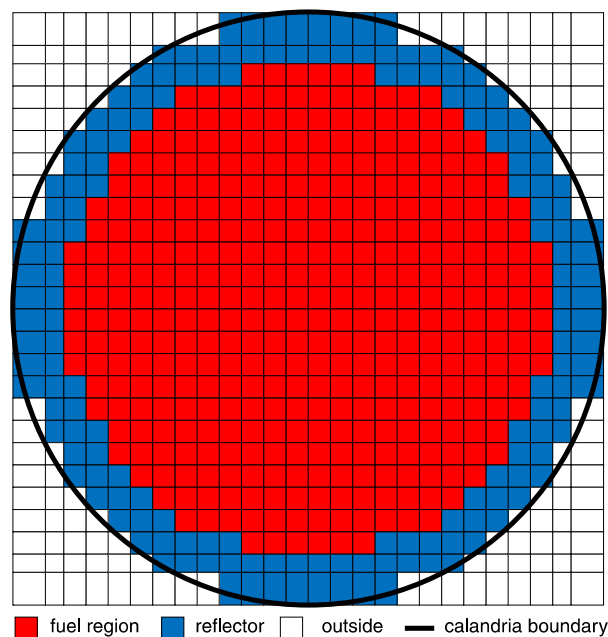


Figure 1.8 : Coupe axiale du réseau de cellules du réacteur CANDU-6

Dans la géométrie définie avec DONJON, chaque volume est associé à des sections efficaces macroscopiques. Dans le cas présent, les volumes à considérer sont ceux des 380 canaux ainsi que ceux des réflecteurs qui sont situés tout autour de la région du combustible. Étant donné que le rechargement du combustible s'effectue lorsque le réacteur est en cours d'opération, il est nécessaire de connaître explicitement la position de chaque grappe dans le cœur. Une structure

de données est utilisée afin d'associer chaque mélange (type de combustible et « burnup » donnés) avec une région spatiale dans le cœur.

La base de données générée lors du calcul de cellule 2D (voir section 1.3.1) est utilisée pour interpoler les propriétés nucléaires associées à chaque grappe de combustible à un « burnup » donné et pour des paramètres locaux et globaux bien spécifiques. Cette étape résulte en la création d'une première bibliothèque macroscopique. Les propriétés des réflecteurs indépendants du « burnup » sont reconstruites à partir de la même base de données ce qui génère une seconde bibliothèque macroscopique. Cette bibliothèque, comme nous le verrons plus loin contient également les propriétés des mécanismes de réactivité qui sont eux aussi indépendants du « burnup ». Les deux bibliothèques sont ensuite combinées et mises à jour en tenant compte du niveau d'insertion des mécanismes.

Les mécanismes de réactivité ainsi que les matériaux de structure sont définis indépendamment du domaine de solution et de la géométrie du combustible. La modélisation des mécanismes s'effectue en spécifiant les paramètres tels que la position, le niveau d'insertion des barres, le niveau de remplissage, la direction du mouvement, etc. Dans ce travail, on considère que les barres de compensation sont complètement insérées et les contrôleurs liquides sont remplis à 50 %. Les deux séries de sections efficaces macroscopiques générées lors du calcul de super cellule (voir section 1.3.2) sont récupérées puis combinées aux conditions géométriques propres à chaque mécanisme : une série concerne la supercellule avec le mécanisme inséré (Σ_{3D-IN}) et l'autre concerne la supercellule avec le mécanisme absent (Σ_{3D-OUT}).

Les effets du mécanisme ou du matériau de structure sont pris en compte en effectuant une pondération par volume des propriétés incrémentales dans la maille affectée de la cellule. En additionnant les sections efficaces incrémentales pondérées aux sections efficaces de la cellule on est en mesure d'obtenir des sections efficaces Σ qui tiennent compte de la perturbation reliée aux mécanismes de réactivité tel que:

$$\Sigma = \Sigma_{2D} + f_v(\Sigma_{3D-IN} - \Sigma_{3D-OUT}) \quad (1.1)$$

où f_v est la fraction volumétrique du mécanisme qui affecte la maille de la cellule [8] et Σ_{2D} est la section efficace provenant du calcul de cellule. Il est à noter que la fraction f_v permet de déplacer les mécanismes sans modifier les calculs de maillage.

Lorsque la définition du cœur est complétée, le flux multigroupe ainsi que le facteur de multiplication effectif peuvent être calculés par la théorie de la diffusion. On obtient alors les distributions de flux et de puissance pour tout le réacteur.

CHAPITRE 2

THÉORIE PERTINENTE AU CALCUL NEUTRONIQUE

Dans ce chapitre, nous présenterons quelques notions théoriques pertinentes permettant au lecteur de mieux comprendre les différents calculs réalisés dans ce rapport. Il est à noter que les notions présentées ne sont qu'une explication sommaire de la physique du réacteur. Pour des explications plus approfondies, des ouvrages de référence tels que [9,10] peuvent être consultés.

2.1 Sections efficaces microscopiques et macroscopiques

Lorsqu'un neutron entre en collision avec un noyau de type i présent dans la matière, il peut se produire différents types de réactions nucléaires. La probabilité que se produise une réaction x est donnée par la section efficace microscopique notée $\sigma_{i,x}(E,T)$ [$barn = 10^{-24} cm^2$] qui dépend de l'énergie E du neutron et de la température T du milieu. Considérons un faisceau de neutrons frappant une cible telle une feuille très mince composée d'un matériau très pur (un seul type de noyau) et ayant une concentration de noyaux $N(\mathbf{r},t)$ [$10^{24} cm^{-3}$] pour un temps t et un volume d^3r autour du point \mathbf{r} . La probabilité que se produise une interaction entre les neutrons et les noyaux de la cible est représentée par la section efficace macroscopique telle que :

$$\Sigma_x(\mathbf{r}, E, t) = N(\mathbf{r}, t) \sigma_x(E, T) \quad [cm^{-1}] \quad (2.1)$$

Si le matériau dont est constituée la cible est un mélange homogène de différents types i de noyaux on aura :

$$\Sigma_x(\mathbf{r}, E, t) = \sum_i N_i(\mathbf{r}, t) \sigma_{i,x}(E, T) \quad (2.2)$$

On considère que les sections efficaces sont indépendantes du temps (régime stationnaire). En effet, comme nous le verrons à la section suivante, les calculs réalisés se font sur des petits intervalles de temps durant lesquels on suppose que les sections efficaces varient très peu.

On distingue les sections efficaces suivantes :

- La section efficace d'absorption est notée $\sigma_{i,a}(E,T)$ ou $\Sigma_a(\mathbf{r},E)$. Elle englobe la section efficace de fission ainsi que la section efficace associée aux autres captures neutroniques. Notons que l'absorption est la réaction par laquelle le neutron ne chemine plus à l'état libre mais est absorbé par le noyau après la collision.
- La section efficace de diffusion (*scattering*) notée $\sigma_{i,s}(E,T)$ ou $\Sigma_s(\mathbf{r},E)$ s'écrit :

$$\sigma_{i,s}(E,T) = \int dE' \int d^2\Omega' \sigma_{i,s}(\mathbf{\Omega} \bullet \mathbf{\Omega}', E \rightarrow E', T)$$

$$\Sigma_s(\mathbf{r}, E) = \int dE' \int d^2\Omega' \Sigma_s(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega} \bullet \mathbf{\Omega}', E \rightarrow E') \quad (2.3)$$

La diffusion est une « réaction » semblable au choc élastique entre deux boules de billards. Le neutron est alors réémis dans une autre direction, raison pour laquelle la section efficace dépend du produit $\mathbf{\Omega} \bullet \mathbf{\Omega}'$ qui correspond au cosinus de l'angle de diffusion entre les directions du mouvement du neutron avant et après la collision. Il est à noter que dans la majorité des cas, en calcul de réacteur, la diffusion est isotrope, les sections efficaces sont donc considérées indépendantes de $\mathbf{\Omega}$.

- Le taux de production de neutrons par fission est représenté par le produit du nombre moyen de neutrons ν produits par fission, du rendement de fission $\chi(\mathbf{r},E)$ et de la section efficace de fission notée $\sigma_{i,f}(E,T)$ ou $\Sigma_f(\mathbf{r},E)$. La fission se produit lorsque l'absorption du neutron conduit à la division du noyau composé libérant ainsi des neutrons.
- La section efficace totale (section efficace de collision) notée $\sigma_i(E,T)$ ou $\Sigma(\mathbf{r},E)$ est donnée par :

$$\sigma_i(E,T) = \sigma_{i,a}(E,T) + \sigma_{i,s}(E,T)$$

$$\Sigma(\mathbf{r}, E) = \Sigma_a(\mathbf{r}, E) + \Sigma_s(\mathbf{r}, E) \quad (2.4)$$

2.2 Champs de neutrons et de noyaux

La population de neutrons dans le réacteur notée $N(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E, t)$ est déterminée en résolvant l'équation du champ des neutrons que l'on nomme **l'équation de transport** (voir section 2.3). On se sert de la physique statistique pour traiter ce problème car on considère que la densité neutronique est suffisamment faible pour que les interactions neutrons-neutron puissent être négligées. Cette considération est valable dans la mesure où l'on trouve plus de 10^{22} noyaux atomiques par cm^3 dans la matière usuelle et seulement 10^8 neutrons par cm^3 dans un réacteur de grande puissance [11]. La population de neutrons dépend des interactions neutrons-noyaux qui sont décrites par les sections efficaces macroscopiques qui elles dépendent de la concentration des isotopes (voir section 2.1). On constate avec l'équation 2.1 que cette concentration varie dans le temps en raison principalement de la fission des noyaux et de la désintégration radioactive. L'équation décrivant le champ des noyaux est appelée **équation de Bateman**. Elle permet de calculer la concentration des isotopes présents dans le réacteur en fonction du temps. Puisque les deux équations sont couplées la stratégie de résolution numérique consiste à choisir un petit intervalle de temps sur lequel on considère que le flux, la densité de sources ainsi que les sections efficaces sont constants. L'équation de transport peut alors durant ce bref intervalle de temps être traitée de façon stationnaire. Après ce laps de temps, on effectue un calcul d'évolution pour obtenir les nouvelles concentrations isotopiques. Avec ces nouvelles concentrations on calcule les nouvelles sections efficaces et les nouveaux flux et on résout à nouveau l'équation de transport. On effectue à nouveau ces étapes de calculs pour un nouvel intervalle de temps et ainsi de suite. La section 2.4 présente en détail la théorie reliée aux calculs d'évolution isotopique.

2.3 Flux neutronique et équation de transport

Comme il a été mentionné précédemment, on se sert d'une approche dite de mécanique statistique pour décrire la population des neutrons dans un réacteur de puissance en régime permanent. Selon cette approche, le mouvement des neutrons s'effectue dans un espace de phase à 6 dimensions soit 3 dimensions pour la position et 3 dimensions pour la vitesse. Ainsi, pour identifier la position d'un neutron on tiendra compte de :

- 3 coordonnées pour la position décrits par $\mathbf{r} = x\mathbf{i} + y\mathbf{j} + z\mathbf{k}$;
- 3 coordonnées de vitesse. On utilise le module de la vitesse $v = |\mathbf{v}|$ où $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z)$ et

$\mathbf{v} \equiv \frac{d\mathbf{r}}{dt}$ ainsi que 2 composantes pour la direction Ω .

L'énergie cinétique E des neutrons peut être convertie en leur vitesse v selon l'équation suivante :

$$E = \frac{1}{2}mv^2 \quad (2.5)$$

où m est la masse des neutrons.

Typiquement, la population de neutrons est décrite par la densité neutronique angulaire dénotée $N(\mathbf{r}, \Omega, E)$ de telle sorte que $N(\mathbf{r}, \Omega, E) d^3r d^2\Omega dE$ est le nombre de neutrons présents dans un élément de volume d^3r autour de \mathbf{r} , dans un élément d'angle solide $d^2\Omega$ autour de Ω et une énergie dE autour de E . Afin d'obtenir une représentation plus globale de la population de neutrons, on intègre la densité angulaire sur toutes les directions :

$$n(\mathbf{r}, E) = \int_{4\pi} N(\mathbf{r}, \Omega, E) d^2\Omega \quad (2.6)$$

On obtient ainsi la densité neutronique n .

En effectuant le produit entre la densité neutronique et la vitesse des neutrons, on obtient le **flux neutronique scalaire**¹ tel que:

$$\phi(\mathbf{r}, E) = v n(\mathbf{r}, E) \quad (2.7)$$

¹ Il est à noter qu'on obtient le flux neutronique angulaire à partir de la densité neutronique angulaire.

Le flux neutronique est une des notions sur laquelle repose la physique du réacteur. Aussi, on se sert de la théorie du transport neutronique car elle établit les équations qui auront pour solution le flux scalaire. Ce sujet fera l'objet des prochaines sections.

2.3.1 Présentation de l'équation de transport

Soit une population de neutrons situés dans un volume de contrôle infinitésimal V . L'équation de transport est obtenue en effectuant un bilan sur cette population dans un intervalle de temps. On obtient alors

$$\nabla \cdot \Omega \phi(\mathbf{r}, \Omega, E) + \Sigma(\mathbf{r}, E) \cdot \phi(\mathbf{r}, \Omega, E) = Q(\mathbf{r}, \Omega, E) \quad (2.8)$$

où:

- $Q(\mathbf{r}, \Omega, E)$ est la densité de source. Cette quantité comprend les sources de fission et de diffusion des neutrons (voir équation 2.10).
- $\nabla \cdot \Omega \phi(\mathbf{r}, \Omega, E)$ représente les neutrons sortant du volume V .
- $\Sigma(\mathbf{r}, E) \cdot \phi(\mathbf{r}, \Omega, E)$ représente les neutrons perdus par collisions dans le milieu et $\Sigma(\mathbf{r}, E)$ est la section efficace macroscopique totale.

En vertu de l'identité $\nabla \cdot \omega F(r) = \omega \cdot \nabla F(r)$ on peut réécrire l'équation (2.4) de manière à obtenir **l'équation de transport** sous sa forme différentielle:

$$\Omega \cdot \nabla \phi(\mathbf{r}, \Omega, E) + \Sigma(\mathbf{r}, E) \cdot \phi(\mathbf{r}, \Omega, E) = Q(\mathbf{r}, \Omega, E) \quad (2.9)$$

La densité de source en régime permanent sans source externe s'écrit :

$$Q(\mathbf{r}, \Omega, E) = \int_{4\pi} d\Omega' \int_0^\infty dE' \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, \Omega' \rightarrow \Omega) \phi(\mathbf{r}, E', \Omega') + \frac{1}{4\pi K_{\text{eff}}} Q^{\text{fiss}}(\mathbf{r}, E) \quad (2.10)$$

où

- $\Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, \mathbf{\Omega}' \rightarrow \mathbf{\Omega})$ correspond à la section efficace différentielle de diffusion d'un neutron d'énergie initiale E et de direction initiale $\mathbf{\Omega}$ vers une énergie E' et une direction $\mathbf{\Omega}'$.
- $Q^{fiss}(\mathbf{r}, E)$ correspond aux sources de fission considérées isotropes c'est-à-dire que leurs propriétés demeurent constantes quel que soit l'angle d'émission des neutrons.
- K_{eff} est appelé le facteur de multiplication effectif. Si la somme des taux d'absorption et de fuite de neutrons (voir section 2.3.6) n'égale pas le taux de production par fission, la condition de régime permanent n'est plus valide. K_{eff} est le facteur par lequel on doit diviser le terme de fission pour maintenir le régime permanent.

2.3.2 La forme intégrale de l'équation de transport

L'équation de transport est une équation intégral-différentielle du flux neutronique. À l'aide de la technique des facteurs intégrants [12], il est possible de transformer l'équation sous sa forme intégrale :

$$\phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E) = e^{-\tau(b, E)} \phi(\mathbf{r} - b\mathbf{\Omega}, \mathbf{\Omega}, E) + \int_0^b ds \cdot e^{-\tau(s, E)} Q(\mathbf{r} - s\mathbf{\Omega}, E, \mathbf{\Omega}) \quad (2.11)$$

où

$$\tau(s, E) = \int_0^s ds' \Sigma(\mathbf{r} - s'\mathbf{\Omega}, E) \quad (2.12)$$

est le parcours optique du neutron et $\phi(\mathbf{r} - b\mathbf{\Omega}, \mathbf{\Omega}, E)$ est le flux à la frontière du domaine considéré.

Le parcours optique représente l'intégrale le long d'un segment de droite \overline{AB} (dans la direction $\mathbf{\Omega}$) de la section efficace macroscopique totale et ce, pour des neutrons d'énergie E . Le point A représente l'endroit où le neutron est émis (source) et le point B , le lieu où on évalue le flux.

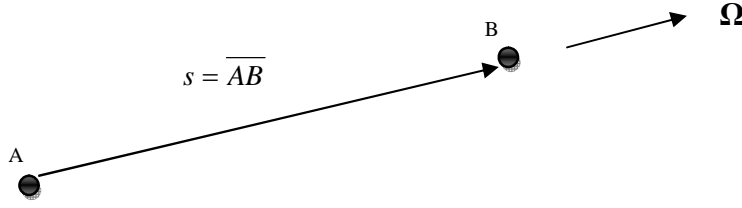


Figure 2.1 : Parcours du neutron

L'équation (2.11) prend en compte tous les neutrons qui parcourent le segment \overline{AB} sans subir de collisions. Elle est valide dans le cas où le domaine est considéré fini.

2.3.3 Les conditions aux interfaces et aux frontières

Les solutions de l'équation de transport sont souvent recherchées dans des régions incluant des interfaces entre deux milieux. À ces interfaces, les sections efficaces sont discontinues et il s'avère alors nécessaire d'imposer une condition de continuité. En effet, le nombre de neutrons dans une population ne varie pas lors de la traversée d'une interface physique. Le flux neutronique angulaire $\phi(\mathbf{r}, \Omega, E)$ doit être continu aux interfaces à l'intérieur d'une région et ce, dans la direction Ω du mouvement des neutrons. La condition de continuité ne s'applique pas pour des directions non parallèles au parcours considéré.

Le modèle mathématique présenté jusqu'à présent pour le flux neutronique demeure incomplet si l'on n'introduit pas des conditions aux frontières. En effet, le domaine V dans lequel évoluent les neutrons peut être entouré d'une frontière ∂V où l'on impose des conditions bien spécifiques. On introduit le vecteur $\mathbf{N}(\mathbf{r}_s)$ qui est normal à la surface externe au point $\mathbf{r}_s \in \partial V$. Dans le présent travail, on est intéressé par les conditions aux frontières de réflexion. Afin de présenter ces conditions, définissons tout d'abord la condition d'albedo qui relie le flux entrant et le flux sortant du domaine :

$$\phi(\mathbf{r}_s, \Omega, E) = \beta \phi(\mathbf{r}_s, \Omega', E) \text{ avec } \Omega \cdot \mathbf{N}(\mathbf{r}_s) < 0 \quad (2.13)$$

où β est le coefficient de réflexion à la surface S et $\mathbf{\Omega}'$ est la direction du neutron sortant.

Lorsque $\beta = 1$, on est en présence d'une réflexion des neutrons. On distingue 2 conditions aux frontières de réflexion :

- La condition de réflexion spéculaire (ou miroir) implique que tous les neutrons arrivant à la frontière de V sont réfléchis comme sur un miroir, la frontière servant de plan de symétrie. On a donc que le flux entrant est égal au flux sortant (figure 2.2) :

$$\phi(\mathbf{r}_s, \mathbf{\Omega}, E) = \phi(\mathbf{r}_s, \mathbf{\Omega}', E) \quad (2.14)$$

avec

$$\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{N}(\mathbf{r}_s) = -\mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{N}(\mathbf{r}_s) \quad \text{et} \quad (\mathbf{\Omega} \times \mathbf{\Omega}') \cdot \mathbf{N}(\mathbf{r}_s) = 0 \quad (2.15)$$

- La condition de réflexion isotrope ou blanche implique que tous les neutrons arrivant à la frontière de V sont réfléchis avec une distribution angulaire isotrope (figure 2.2). Dans ce cas on a que:

$$\phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E) = 4 \int_{\mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{N}(\mathbf{r}_s) > 0} d^2\Omega' [\mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{N}(\mathbf{r}_s)] \phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}', E) \quad \text{avec} \quad \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{N}(\mathbf{r}_s) < 0 \quad (2.16)$$

La différence entre ces deux cas est illustrée à la figure 2.2. En effet, on constate par exemple que pour une population de neutrons nés au milieu d'une région carrée, après la réflexion, ils auront de fortes chances de passer par la région centrale pour les deux conditions aux frontières. Par contre, pour des neutrons nés au milieu de la région à frontière circulaire, ils ont de fortes chances de repasser au centre pour la condition isotrope et très peu de chances pour la condition spéculaire.

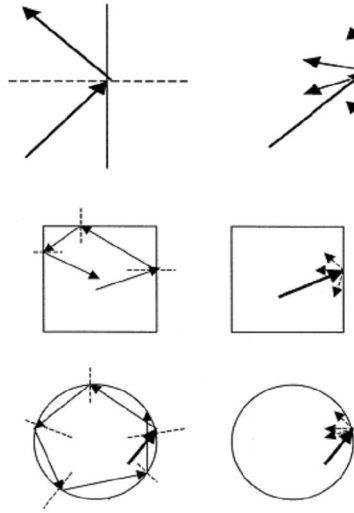


Figure 2.2 : Effet des conditions de réflexion spéculaire (gauche) et isotrope (droite) pour des frontières plane, carrée et circulaire.

Il est important de noter que la seconde condition est en réalité une approximation mais qui n'en est pas moins valable lorsqu'on considère les neutrons thermiques. En effet, ces neutrons ayant un libre parcours moyen très faible dans le modérateur à eau lourde, ils « oublient » en quelque sorte leur provenance avant la collision. Il est donc raisonnable de penser que les neutrons qui quittent le domaine V y reviennent avec une distribution angulaire isotrope. De manière générale, y compris dans ce travail, la condition aux frontières de réflexion isotrope est celle qui est utilisée pour un domaine V fini.

2.3.4 Le formalisme multigroupe

Dans les problèmes de réacteur, il n'est actuellement pas possible d'obtenir des solutions exactes à l'équation de transport dépendante de l'énergie. Il est donc nécessaire d'adopter des méthodes approximatives pour faciliter la résolution numérique de l'équation de transport. La principale méthode est la résolution par une approche multigroupe dans laquelle l'énergie des neutrons est subdivisée en un nombre fini d'intervalles ΔE_g que l'on nomme groupes d'énergie. On suppose que les neutrons dans chaque groupe se comportent comme ayant la même vitesse. Ainsi, à partir

des grandeurs continues, on calcule les grandeurs moyennes sur chaque groupe d'énergie grâce à la formule suivante :

$$X_g = \langle X \rangle_g = \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE X(E) \quad (2.17)$$

où $X(E)$ est une distribution.

Lorsqu'on effectue une condensation à un nombre G de groupes d'énergie, les grandeurs calculées à savoir les taux de réaction $\Sigma(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})$ ainsi que les flux $\phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})$ le sont à partir de l'équation (2.17). Ce sujet sera davantage traité à la section 2.4.

En vertu de l'approche multigroupe, l'équation de transport intégrale, en régime permanent et pour un domaine fini, s'écrit :

$$\phi_g(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = e^{-\tau_g(b)} \phi_g(\mathbf{r} - b\mathbf{\Omega}, \mathbf{\Omega}) + \int_0^b ds \cdot e^{-\tau_g(s)} Q_g(\mathbf{r} - s\mathbf{\Omega}, \mathbf{\Omega}) \quad (2.18)$$

où le parcours optique dans le groupe g est :

$$\tau_g(s) = \int_0^s ds' \Sigma_g(\mathbf{r} - s'\mathbf{\Omega}) \quad (2.19)$$

2.3.5 Le calcul des probabilités de collision

La méthode des probabilités de collision (CP) est une technique grandement utilisée pour résoudre numériquement la forme intégrale de l'équation de transport multigroupe pour le flux scalaire. Cette méthode résulte de la discrétisation spatiale de l'équation (2.18) et ce, pour des sources de neutrons isotropes.

On introduit les changements de variables suivants :

$$d^3r = s^2 d^2\Omega ds \quad (2.20)$$

$$(\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{N}) d^2 r = b^2 d^2 \Omega \quad (2.21)$$

$$\tau_g(x) = \int_0^x ds \Sigma_g(s) \quad (2.22)$$

On intègre l'équation (2.18) sur l'angle solide $\mathbf{\Omega}$ ce qui donne :

$$\phi_g(\mathbf{r}) = \int_S \frac{e^{-\tau_g(b)}}{b^2} (\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{N}_-) \phi_{g-}(\mathbf{r} - b\mathbf{\Omega}, \mathbf{\Omega}) d^2 r' + \int_V \frac{e^{-\tau_g(s)}}{4\pi s^2} Q_g(\mathbf{r}') d^3 r' \quad (2.23)$$

avec $s = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$, $b = |b\mathbf{\Omega}|$, $\mathbf{r}' = \mathbf{r} - s\mathbf{\Omega}$. Il est à noter que $\phi_{g-}(\mathbf{r} - b\mathbf{\Omega}, \mathbf{\Omega}')$ est le flux angulaire entrant à la surface S .

À présent, on effectue un découpage du domaine en N régions de volume V_i . On suppose que les sources de neutrons $Q_{i,g}$ sont constantes sur chaque région V_i . Ceci implique qu'il faudra discrétiser finement la géométrie considérée afin de respecter l'hypothèse des sources constantes.

À présent, on multiplie l'équation (2.23) par $\Sigma_g(\mathbf{r})$ et on intègre sur chaque région V_i , ce qui donne :

$$\int_{V_j} d^3 r \Sigma_g(\mathbf{r}) \phi_g(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \int_{V_j} d^3 r' \Sigma_g(\mathbf{r}) \sum Q_{i,g} \int_{V_i} d^3 r' \frac{e^{-\tau_g(s)}}{s^2} \quad (2.24)$$

où

$$Q_{i,g} = \sum_h \Sigma_{s0,i,g \leftarrow h} \phi_{i,h} + \frac{1}{K_{\text{eff}}} \sum_{j=1}^{J^{\text{fiss}}} \chi_{j,g} \sum_h \nu \Sigma_{f,j,h} \phi_{i,h} \quad (2.25)$$

Par simplicité, on a supposé que le flux angulaire $\phi_{g-}(\mathbf{r} - b\mathbf{\Omega}, \mathbf{\Omega}')$ disparaît à la surface S .

Finalement, l'équation (2.24) peut se simplifier sous la forme suivante :

$$V_j \Sigma_{j,g} \phi_{j,g} = \sum_i Q_{i,g} V_i P_{ij,g} \quad (2.26)$$

où

$$\phi_{j,g} = \frac{1}{V_j} \int_{V_j} d^3 r \phi_g(\mathbf{r}) \quad , \quad (2.27)$$

$$\Sigma_{j,g} = \frac{1}{V_j \phi_{j,g}} \int_{V_j} d^3 r \Sigma_g(\mathbf{r}) \phi_g(\mathbf{r}) \quad (2.28)$$

et

$$P_{ij,g} = \frac{1}{4\pi V_i} \int_{V_i} d^3 r' \int_{V_j} d^3 r \Sigma_g(\mathbf{r}) \frac{e^{-\tau_g(s)}}{s^2} \quad . \quad (2.29)$$

La probabilité de collisions $P_{ij,g}$ représente la probabilité qu'un neutron né dans n'importe laquelle des régions V_i de subir sa première collision dans une région V_j de la cellule unitaire.

On considère de manière générale que la section efficace totale $\Sigma_g(\mathbf{r})$ est constante et égale à $\Sigma_{j,g}$ dans la région V_j , de telle sorte qu'on peut se servir des probabilités de collision réduites $p_{ij,g}$:

$$p_{ij,g} = \frac{P_{ij,g}}{\Sigma_{j,g}} = \frac{1}{4\pi V_i} \int_{V_i} d^3 r' \int_{V_j} d^3 r \frac{e^{-\tau_g(s)}}{s^2} \quad (2.30)$$

Les probabilités de collisions possèdent quelques propriétés intéressantes à savoir la propriété de réciprocité et la propriété de conservation. Elles s'écrivent respectivement :

$$p_{ij,g} V_i = p_{ji,g} V_j \quad (2.31)$$

et

$$\sum_j p_{ij,g} \Sigma_{j,g} = 1 \quad ; \quad \forall i \quad (2.32)$$

En utilisant la propriété de réciprocity, l'équation (2.26) devient :

$$\phi_{i,g} = \sum_j Q_{j,g} p_{ij,g} \quad (2.33)$$

Pour chaque groupe d'énergie, l'équation (2.25) peut être ramenée sous la forme matricielle suivante :

$$\varphi = \mathbf{W} \left[\Sigma_{d,s} \varphi + \Sigma_{u,s} \varphi + \frac{1}{K_{\text{eff}}} \mathbf{Q}^{\text{fiss}}(\varphi) \right] \quad (2.34)$$

où

- $\mathbf{W} = (\mathbf{I} - \mathbf{P} \Sigma_{\omega,s})^{-1} \mathbf{P}$, avec \mathbf{P} la matrice des probabilités de collisions ;
- φ est un vecteur de dimensions $N \times G$ soit le nombre de régions multiplié par le nombre de groupes;
- $\Sigma_{d,s}$ est la section efficace de diffusion des hautes énergies vers les énergies plus faibles (« down-scattering ») ;
- $\Sigma_{u,s}$ est la section efficace de diffusion des faibles énergies vers les énergies plus élevées (« up-scattering ») ;
- $\Sigma_{\omega,s}$ est la section efficace de diffusion à l'intérieur d'un même groupe.

L'intégration numérique des probabilités de collisions se fait à l'aide d'un procédé de « Tracking » qui sera présenté à la section 2.3.7. Une fois que les matrices p_{ij} sont connues, on calcule le flux intégré sur chaque volume par des calculs itératifs réalisés sur l'équation (2.34). En général on distingue deux processus d'itérations qui se superposent à savoir les itérations internes (ou multigroupes) et les itérations externes (ou de puissance):

- L'algorithme d'itération externe est basé sur le calcul de la source de fission. Au départ, cette dernière est fixée à une valeur constante ($\frac{1}{k_{\text{eff}}} \mathbf{Q}^{\text{fiss}} = \text{cte}$). Cette constante est utilisée dans les itérations internes afin de calculer le flux multigroupe. Ce flux est ensuite utilisé pour calculer une nouvelle valeur pour la source de fission et ainsi de suite jusqu'à ce que le critère de convergence soit satisfait. L'objectif de ce processus d'itérations est d'obtenir la convergence sur le facteur multiplicatif (k_{eff}) ou encore sur les fuites ainsi que la convergence sur le flux. Ce sujet sera davantage approfondi à la section 2.3.6.
- L'algorithme de l'itération interne se sert de la source de fission donnée par l'itération externe pour calculer les sources de diffusions et ensuite le flux multigroupe et ce, pour chaque groupe d'énergie. On débute avec le groupe d'énergie plus élevée vers les groupes d'énergies plus faibles. Ainsi, les itérations s'effectuent jusqu'à l'obtention du flux multigroupe convergé dans le domaine thermique.

La méthode des probabilités de collisions bien que très utilisée s'avère limitée lorsqu'on a un nombre élevé de régions à traiter. En effet, rappelons que pour un nombre de régions N cette méthode génère une matrice carrée $N \times N$. On peut donc imaginer le coût en espace de stockage que ces matrices peuvent avoir lorsqu'il y a plusieurs milliers de régions et ce, en plus du nombre de groupe d'énergies du problème. Le temps de calcul CPU est également un facteur non négligeable à considérer. De manière générale, au-delà de 3000 régions, il est conseillé d'avoir recours à la méthode des caractéristiques (MoC) [13].

2.3.6 La modélisation des fuites

Lorsqu'on effectue un calcul de réseau, il est essentiel de tenir compte des fuites de neutrons à l'extérieur de la cellule. Aussi, ces fuites sont modélisées de manière à avoir un système critique ($k_{\text{eff}} = 1$) et ce à l'image du réacteur qui est conçu de manière à être critique en présence des fuites. Les modèles de fuite ont également pour objectif d'obtenir des valeurs cohérentes des coefficients de diffusion utilisés dans les calculs de cœur. On peut donc choisir entre deux options de calcul :

- Résoudre l'équation de transport multigroupe pour un modèle sans fuites. On cherche alors à déterminer k_{eff} qui correspond à la valeur propre d'un réseau infini.
- Résoudre l'équation de transport multigroupe pour un modèle avec fuites. À priori, lorsqu'on effectue les calculs, on ne connaît pas l'état du domaine étudié. On impose alors $k_{\text{eff}} = 1$ et on utilise le modèle de fuites de manière à respecter cette condition. Dans ce cas, la valeur propre recherchée est le Laplacien (« buckling ») B^2 du système. Les calculs peuvent être effectués avec différentes hypothèses. Dans le cadre de ce travail, on effectue les calculs avec une hypothèse de fuites homogènes B_1 [3], on suppose alors que la section efficace de diffusion est anisotrope et que le coefficient de fuites est indépendant de la région dans laquelle on se trouve. En tenant compte des fuites, l'équation (2.34) peut entre autres s'écrire de la manière suivante :

$$\phi = \mathbf{W} \left[\Sigma_{\mathbf{d},\mathbf{s}} \phi + \Sigma_{\mathbf{u},\mathbf{s}} \phi + \frac{1}{k_{\text{eff}}} \mathbf{Q}^{\text{fiss}}(\phi) - d(B) B^2 \phi \right] \quad (2.35)$$

où

$$d(B) = \frac{1}{B} \frac{iJ}{\phi} \quad (2.36)$$

est le coefficient de fuite et J est le courant du mode fondamental.

On définit la constante k_{∞} comme étant la valeur de k_{eff} en absence de fuites.

2.3.7 Le « Tracking »

Afin d'évaluer les matrices de probabilités de collisions, on se sert d'une méthode de quadratures qui consiste à intégrer numériquement le domaine angulaire et le domaine spatial [14].

On décompose le domaine angulaire en un certain nombre de directions Ω_m auxquelles on associe un poids ω_m^{Ω} de telle sorte que :

$$\frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} d^2\Omega = \sum_m \omega_m^\Omega \Omega_m = 1 \quad (2.37)$$

Par la suite, on choisit un plan P_{Ω_m} perpendiculaire à chaque direction et on subdivise ce plan en une grille uniforme. On génère ainsi une série de points d'intégrations $p_{m,n}$ ayant un poids unique $\omega_{m,n}^P$ pour chaque direction Ω_m .

La discrétisation de l'espace en lignes et en points d'intégrations est un procédé que l'on nomme « tracking ». L'étape suivante consiste à identifier l'intersection entre les lignes d'intégration générées par le « tracking » et les régions du problème de telle sorte que les chemins optiques $\Sigma_k L_k$ peuvent être évalués.

2.3.8 Le « Tracking » en 2D

Afin d'effectuer le « tracking » pour une géométrie en 2D, en l'occurrence la cellule unitaire CANDU, on utilise deux méthodes de quadrature, une angulaire et l'autre spatiale. L'intégration angulaire dans le cas présent s'effectue grâce à une quadrature trapézoïdale à N^ψ points pour l'angle azimutal ψ_m . Les poids ω_m^ψ et les points u_m^ψ sont déterminés par les équations suivantes :

$$\omega_m^\psi = \frac{\pi}{N^\psi} \quad (2.38)$$

$$u_m^\psi = \frac{(2m-1)}{2} \omega_m^\psi \quad (2.39)$$

Pour un cas isotrope, n'importe quelle valeur de N^ψ peut être spécifiée.

L'intégration spatiale s'effectue avec une quadrature trapézoïdale à N^h points pour h qui dépend de la densité de lignes d'intégration ρ . Soit une cellule rectangulaire de côtés x et y centrée en (x_c, y_c) . On calcule le rayon r du plus petit cercle centré en (x_c, y_c) entourant la cellule. Le fait de sélectionner une densité de lignes d'intégrations ρ revient à sélectionner N^h points tels que :

$$N^h = 2\rho r + 1 \quad (2.40)$$

L'espacement entre les lignes est alors donné par :

$$h = \frac{2r}{N^h} \quad (2.41)$$

Les poids et les points associés à la quadrature sont donc :

$$\omega_m^h = h \quad (2.42)$$

et

$$u_m^h = \frac{(2m-1)}{2} \omega_m^h \quad (2.43)$$

Une ligne d'intégration est associée à chaque point de quadrature (u_m^{ψ}, u_m^h) . Cette ligne est en fait la trajectoire du neutron que l'on suit dans la cellule. On identifie les surfaces externes et les régions successives rencontrées par la ligne de manière à évaluer la distance parcourue par le neutron dans chaque région.

Après avoir rassemblé les informations reliées au « tracking », il est alors possible d'obtenir les probabilités de collisions. Pour cela, on peut réécrire l'équation (2.30) sous la forme suivante en 2D pour des conditions isotropes:

$$p_{ij} = \frac{1}{2\pi \Sigma_i \Sigma_j V_i} \sum_m^{N^{\psi}} \sum_n^{N^h} \delta_{i,j}^{m,n} \left[Ki_3(\tau_{i-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}}^{m,n}) - Ki_3(\tau_{i-\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}}^{m,n}) - Ki_3(\tau_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}}^{m,n}) + Ki_3(\tau_{i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}}^{m,n}) \right] \quad (2.44)$$

Les fonctions de Bickley-Nayler sont données par :

$$Ki_l(x) = \int_0^1 \exp\left(\frac{-x}{\sqrt{1-u^2}}\right) \left(\sqrt{1-u^2}\right)^{l-2} du \quad (2.45)$$

Il est à noter que $\delta_{i,j}^{m,n} = 0$ sauf si la ligne définie par (m,n) traverse les régions i et j .

La figure 2.3 présente les lignes d'intégrations équidistantes générées par le « tracking ». Comme il a été mentionné précédemment, les longueurs des lignes d'intégration sont multipliées aux sections efficaces macroscopiques de manière à obtenir les chemins optiques qui seront remplacés dans l'équation (2.44).

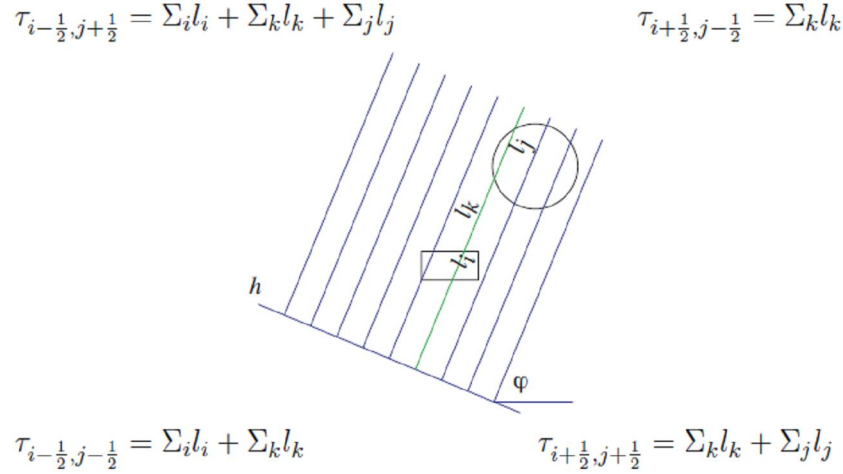


Figure 2.3: Le « tracking » en 2D

2.3.9 Le « Tracking » en 3D

Comme il a été mentionné dans la première section, on est intéressé par les mécanismes de réactivités qui sont situés perpendiculairement aux canaux de combustible du réacteur CANDU-6. Aussi, pour simuler correctement ces mécanismes, il faut construire une géométrie en 3D pour laquelle un « tracking » sera effectué.

La méthodologie utilisée dans ce cas est similaire à celle employée pour la géométrie 2D. L'intégrale sur l'angle solide Ω est discrétisée à partir de la quadrature dite des poids équivalents (« equal weight ») EQ_N . Cette méthode requiert que chaque angle Ω_m s'écrive en termes de ses cosinus directeurs :

$$\Omega_i = (\cos(\Omega_{x,i}), \cos(\Omega_{y,i}), \cos(\Omega_{z,i})) = (u_{xi}, u_{yi}, u_{zi}) \quad (2.46)$$

avec $u_{xi}^2 + u_{yi}^2 + u_{zi}^2 = 1$.

Pour une quadrature N^Ω on sélectionne $\frac{N^\Omega(N^\Omega + 2)}{2}$ poids et points dans la moitié supérieure de la sphère. Les valeurs permises pour N^Ω sont $N^\Omega = 2, 4, 8, 10, 12, 14$ et 16 [8] .

La discrétisation de l'intégrale du domaine spatial s'effectue de manière similaire à la géométrie 2D. Soit une cellule centrée en (u_c, v_c, w_c) , on calcule r le rayon de la plus petite sphère centrée en (u_c, v_c, w_c) entourant la cellule. Les limites d'intégration sont alors données par :

$$\begin{aligned} -r &\leq u \leq +r \\ -r &\leq v \leq +r \end{aligned} \quad (2.47)$$

avec le plan uv perpendiculaire à la direction $\Omega(w)$.

La densité de lignes d'intégration est reliée à N^2 points tel que :

$$N = (2\sqrt{\rho}r) + 1 \quad (2.48)$$

L'espacement entre les lignes est donné par :

$$h = \frac{2r}{N} \quad (2.49)$$

Les poids et les points associés à la quadrature sont donc :

$$\omega_{m,n} = h^2 \quad (2.50)$$

$$p_m^u = \frac{(2m-1)}{2} h \quad (2.51)$$

$$p_n^v = \frac{(2n-1)}{2} h \quad (2.52)$$

Pour les problèmes en 3-D l'équation (2.30) s'écrit :

$$p_{ij} = \frac{1}{\sum_i \sum_j V_i} \sum_m \omega_m \sum_n \omega_{m,n} \sum_k \delta_{i,V_k} \sum_h \delta_{j,V_h} \left[1 - e^{-\Sigma_i L_k} \right] e^{-\tau_{k,h}} \left[1 - e^{-\Sigma_j L_h} \right] \quad (2.53)$$

où L_k est la distance que traverse un neutron généré au point $p_{m,n}$ se déplaçant dans la direction Ω à l'intérieur de la région V_k .

À la section 2.3.5 nous avons présenté différentes approximations pour résoudre l'équation de transport avec la méthode des probabilités de collisions. Parmi ces approximations, on assume que les sources de neutrons sont constantes sur les régions spatiales. Puisque ces sources dépendent du flux, ceci implique que le flux demeure constant d'une région à l'autre. L'atténuation du flux étant donnée par :

$$\phi(x + \Delta x) = \phi(x) e^{-\Sigma \Delta x} \quad (2.54)$$

La constance du flux est respectée seulement si $\Sigma \Delta x \rightarrow 0$ ce qui signifie que pour un Σ donné, la dimension Δx des régions doit être assez petite. Pour cela il faut s'assurer d'avoir une discrétisation suffisamment fine des régions dans lesquelles le flux est susceptible de varier. Le fait de discrétiser davantage la géométrie requiert une augmentation de la densité de lignes d'intégration ainsi que du nombre d'angle pour chaque quadrature. Ceci a pour effets d'augmenter la précision mais également la durée des calculs. Il s'agit donc ici de faire les bons choix pour le « tracking » ce qui sera discuté plus en détail au chapitre 3.

2.4 Évolution isotopique

Le calcul d'évolution consiste à calculer en fonction du temps les concentrations isotopiques des différents noyaux composant les mélanges présents dans le réacteur. Cette étape est essentielle dans le calcul neutronique car elle permet de dresser le bilan de matière en fonction du « burnup » du combustible. Comme il a été mentionné à la section 2.2, une des approximations permettant de résoudre l'équation de transport est de négliger la dépendance temporelle pour le flux neutronique, la densité de source ainsi que les sections efficaces totales. On considère que ces derniers demeurent constants sur un petit intervalle de temps durant lequel seule la

concentration isotopique varie. Afin de connaître les concentrations isotopiques en fonction du temps, il faut résoudre les équations de Bateman. Ces équations se présentent sous la forme suivante [11]:

$$\frac{dN_I(\mathbf{r},t)}{dt} = \sum_J N_J(\mathbf{r},t)\Lambda_{JI}(\mathbf{r},t) - N_I(\mathbf{r},t)\Lambda_I(\mathbf{r},t) \quad (2.55)$$

où:

- $N_I(\mathbf{r},t)$ est la concentration de l'isotope I au point r et au temps t ;
- $N_J(\mathbf{r},t)$ est la concentration de l'isotope J au point r et au temps t ;
- $\Lambda_{JI}(\mathbf{r},t)$ est la constante de désintégration effective de l'isotope J menant à la création de l'isotope I ;
- $\Lambda_I(\mathbf{r},t)$ est la constante de désintégration effective de l'isotope I en présence d'un flux neutronique.

Plusieurs options de calcul permettent de résoudre les équations de Bateman. Dans le présent travail, on effectue des calculs dits « in-core » à puissance constante. Cela laisse supposer que le combustible produit une puissance qui ne varie pas en fonction du temps. Pour que cette hypothèse soit vérifiée, on effectue un découpage du temps en petits intervalles appelés pas de « burnup ». Au début de l'évolution, toutes les variables sont connues ce qui permet de calculer les premières concentrations isotopiques. Avec ces concentrations on peut alors calculer les nouvelles sections efficaces et ensuite obtenir le nouveau flux neutronique. On utilise ensuite ce nouveau flux pour recalculer les concentrations isotopiques et ainsi de suite. L'équation 2.55 est donc résolue pour différents intervalles de temps ce qui permet de construire une bibliothèque de sections efficaces macroscopiques tabulée en fonction du « burnup ». On pourra par la suite interpoler les valeurs pour un « burnup » donné ce qui servira aux calculs de cœur.

2.5 L'homogénéisation et la condensation

2.5.1 Les taux de réaction

Lorsqu'on effectue un calcul de flux, on obtient en plus des sections efficaces macroscopiques et du flux, les taux de réactions. Le taux de réaction se définit comme étant le nombre de réactions se produisant dans un volume V_i par unité de temps. Pour une région i et un groupe d'énergie g , le taux pour la réaction de type x s'écrit :

$$R_{x,i}^g = \int_{V_i} \phi^g(\mathbf{r}) \Sigma_x^g(\mathbf{r}) d^3r \quad (2.56)$$

où

- $\phi^g(\mathbf{r})$ est le flux neutronique en $cm^{-2}s^{-1}$;
- $\Sigma_x^g(\mathbf{r})$ est la section efficace macroscopique de la réaction x , cm^{-1} ;
- V_i est le volume de la région considérée en cm^3 .

Contrairement au flux, le taux de réaction est une grandeur physique (grandeur mesurable) d'où son importance. Aussi, lors des processus d'homogénéisation et de condensation, on cherche à préserver les taux de réaction.

2.5.2 L'homogénéisation

L'homogénéisation est un procédé qui permet de générer des propriétés qui pourront être utilisées pour traiter des problèmes avec une géométrie plus grossière. Pour cela, on applique aux propriétés le procédé d'homogénéisation flux/volume sur les volumes V_i qui préserve les taux de réaction ce qui donne :

$$\text{Flux :} \quad \phi_i^g = \frac{1}{V_i} \int_{V_i} \phi^g(\mathbf{r}) d^3r \quad (2.57)$$

$$\text{Section efficace totale :} \quad \Sigma_{x,i}^g = \frac{1}{V_i \phi_i^g} \int_{V_i} \phi^g(\mathbf{r}) \Sigma_x^g(\mathbf{r}) d^3r \quad (2.58)$$

$$\text{Section efficace de diffusion :} \quad \Sigma_{s,i}^{h \rightarrow g} = \frac{1}{V_i \phi_i^h} \int_{V_i} \phi^h(\mathbf{r}) \Sigma_s^{h \rightarrow g}(\mathbf{r}) d^3r \quad (2.59)$$

$$\text{Section efficace de fission :} \quad \nu \Sigma_{f,i}^h = \frac{1}{V_i \phi_i^h} \int_{V_i} \phi^h(\mathbf{r}) \nu \Sigma_f^h(\mathbf{r}) d^3r \quad (2.60)$$

$$\text{Spectre de fission :} \quad \chi_i^g = \frac{1}{V_i \sum_h \nu \Sigma_{f,i}^h \phi_i^h} \int_{V_i} d^3r \chi^g(\mathbf{r}) \sum_h \nu \Sigma_f^h(\mathbf{r}) \phi^h(\mathbf{r}) \quad (2.61)$$

Dans ce travail, nous n'effectuons qu'un seul type d'homogénéisation à savoir l'homogénéisation sur toute la cellule.

2.5.3 La condensation

La condensation est un procédé qui permet de générer des propriétés qui pourront être utilisées pour traiter des problèmes avec un découpage en groupe d'énergie plus grossier. On applique aux propriétés une procédure de condensation pondérée par le flux et qui préserve les taux de réactions. Ainsi, pour un groupe d'énergie ayant G sous groupes on aura :

$$\text{Flux :} \quad \phi^G(\mathbf{r}) = \sum_{g \in G} \phi^g(\mathbf{r}) \quad (2.62)$$

$$\text{Section efficace totale :} \quad \Sigma_x^G(\mathbf{r}) = \frac{1}{\phi^G(\mathbf{r})} \sum_{g \in G} \Sigma_x^g(\mathbf{r}) \phi^g(\mathbf{r}) \quad (2.63)$$

$$\text{Section efficace de diffusion : } \Sigma_s^{H \rightarrow G}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\phi^H(\mathbf{r})} \sum_{h \in H} \sum_{g \in G} \Sigma_s^{h \rightarrow g}(\mathbf{r}) \phi^h(\mathbf{r}) \quad (2.64)$$

$$\text{Section efficace de fission : } \nu \Sigma_f^H(\mathbf{r}) = \frac{1}{\phi^H(\mathbf{r})} \sum_{h \in H} \nu \Sigma_f^h(\mathbf{r}) \phi^h(\mathbf{r}) \quad (2.65)$$

$$\text{Spectre de fission : } \chi^G(\mathbf{r}) = \sum_{g \in G} \chi^g(\mathbf{r}) \quad (2.66)$$

Dans nos simulations, on effectue une condensation en 2 groupes d'énergie soit le groupe 1 dit groupe rapide avec $E \in [4eV; 10MeV]$ et le groupe 2 dit thermique avec $E \in [2 \times 10^{-4} eV; 4eV]$.

2.5.4 Détermination des sections efficaces moyennes

De manière générale, l'homogénéisation et la condensation s'effectuent en même temps. Ainsi, pour une section efficace de type x homogénéisée sur toute la cellule et condensée sur tout le spectre thermique on obtient la section efficace moyenne telle que :

$$\bar{\Sigma}_x = \frac{\sum_{i=1}^N \sum_{g=1}^G \Sigma_{x,i}^g \phi_i^g V_i}{\sum_{i=1}^N \sum_{g=1}^G \phi_i^g V_i} \quad (2.67)$$

où V_i est une partie du volume total contenant N volumes (ou régions) et g est une partition du spectre thermique contenant G groupes d'énergie.

Lorsqu'on effectue des calculs subséquents avec les sections efficaces moyennes, il faut tenir compte du fait que deux moyennes sont effectuées, l'une spatiale (homogénéisation) et l'autre spectrale (condensation).

CHAPITRE 3

DESCRIPTION DU SCHÉMA DE CALCUL DANS DRAGON

Dans ce chapitre nous décrivons en détail les schémas de calcul permettant de modéliser la cellule du réacteur CANDU-6 en présence des mécanismes de réactivité. Nous présentons ici deux méthodologies à savoir la méthodologie standard (méthodologie de référence) employée dans le rapport IGE227 [3] ainsi qu'une nouvelle méthodologie proposée dans ce travail qui tient compte des progrès effectués dans le code DRAGON.

3.1 Principaux modules utilisés

Le code de réseau DRAGON [1] a été développé à l'Institut de Génie Nucléaire (IGN) dans un souci de réunir plusieurs méthodes de calcul numériques et algorithmes permettant de résoudre l'équation de transport. Il est divisé en modules qui sont reliés entre eux par le programme de contrôle généralisé du groupe d'analyse nucléaire. Ce programme sert de structure et permet de gérer l'ensemble des transferts d'information entre les étapes de calcul. Il est à noter que DRAGON est utilisé pour simuler à la fois le comportement des neutrons dans une cellule unitaire qu'un assemblage de combustible simple dans un réacteur nucléaire. Dans ce travail, la version 3.06 est utilisée pour tous les calculs.

Comme il a été mentionné précédemment, le code DRAGON est composé de modules qui permettent d'accomplir une tâche bien spécifique dans le schéma de calcul. Nous n'allons pas présenter ici l'ensemble de ces modules mais bien les principaux qui ont été utilisés pour effectuer les calculs 2D et 3D. La séquence de modules généralement employée dans DRAGON ainsi que le transfert d'informations sont présentés à la figure 3.1. Il est à noter qu'un ou plusieurs appels de modules peuvent être effectués dans les calculs.

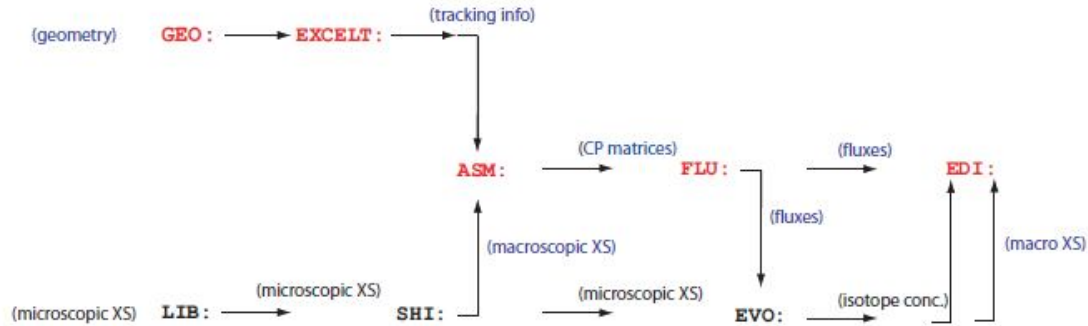


Figure 3.1: Séquence des modules dans DRAGON 3.06

La figure 3.1 présente le schéma général associé aux appels de module dans DRAGON. Certains modules peuvent être remplacés, par exemple dans le cadre de ce travail le module EXCELT: est remplacé par le module NXT:.

3.1.1 Le module GEO:

La première étape du calcul de réseau 2D ou 3D est de définir la géométrie complète du modèle que l'on désire analyser. Pour cela, on se sert du module GEO: de DRAGON. Dans ce module on indique en détail les dimensions de la cellule, les conditions aux frontières ainsi que les mélanges associés à chaque région. Le fichier résultant contient la géométrie et sera analysé subséquentment par le module de « tracking ».

3.1.2 Les modules de « tracking »

Le module de « tracking » est requis afin d'analyser un domaine spatial et ce, dans le but de générer les lignes d'intégration qui serviront au calcul des probabilités de collision. L'analyse de la géométrie définie précédemment grâce au module GEO: permet la numérotation des zones et surfaces du modèle ainsi que le calcul des volumes et des aires associés. Plusieurs modules de « tracking » sont disponibles dans DRAGON cependant, dans le cadre de ce travail, nous cherchons en particulier à comparer les résultats du module EXCELT: ainsi que ceux du module NXT: [1]. Afin de procéder au « tracking » il faut spécifier le nombre d'angles (quadrature angulaire) qui seront utilisés ainsi que la densité des lignes d'intégration (quadrature spatiale). Pour un calcul en géométrie exacte, la discrétisation fine de la géométrie fait en sorte qu'il faut

avoir une densité suffisamment élevée de façon à ce que les lignes atteignent les régions de petits volumes. En général, on sélectionne le nombre d'angles et la densité de manière à avoir une erreur maximale sur les volumes inférieure à 1%.

3.1.2.1 Le module EXCELt:

Le module EXCELt: est le module standard de « tracking » utilisé dans le rapport IGE227. Il présente des limitations importantes qui font en sorte qu'il est impossible d'analyser la supercellule CANDU contenant les deux canaux de combustible et le mécanisme de réactivité en géométrie exacte. En effet, EXCELt: ne permet pas de traiter une géométrie de « clusters » en 3D. En 2D, on ne peut traiter qu'une seule cellule de « clusters » à condition qu'ils soient contenus dans une région annulaire. De ce fait, seule la cellule unitaire peut être analysée en 2D dans sa géométrie exacte. Pour contourner ces deux problèmes, deux solutions sont introduites par Roy et al. [14] et utilisées subséquentement dans le rapport IGE227. Tout d'abord, on effectue un calcul 2D avec la cellule dans la géométrie exacte et on procède à une pré-homogénéisation de la cellule en quelques régions en vue du calcul 3D. Ainsi, les 2 canaux de combustible en 3D seront représentés par des régions annulaires à la place des « clusters ». Dans un deuxième temps, on procède à une cylindrisation de la géométrie des mécanismes de réactivité contenant des « clusters » de manière à obtenir des régions annulaires équivalentes. Ces deux procédés seront présentés en détail à la section 3.2.

3.1.2.2 Le module NXT:

Le module NXT: est un module relativement récent qui permet de lever certaines limitations rencontrées avec EXCELt:. En effet, il permet de traiter des assemblages 2D et 3D de cellules contenant des « clusters ». Ainsi, dans la nouvelle méthodologie, les étapes de cylindrisation et de pré-homogénéisation ne sont plus requises. Il est alors possible d'obtenir les propriétés en effectuant un calcul complet 3D en géométrie exacte autant pour les deux canaux de combustible que pour le mécanisme de réactivité. Il est à noter qu'il est possible avec NXT: de discrétiser la géométrie de manière non uniforme ce qui n'était pas possible auparavant. La figure 3.2 illustre les différentes options de maillage développées dans NXT: et qui n'étaient pas traitées par EXCELt:. On remarque entre autres que la discrétisation des « clusters » avec EXCELt: ne peut être qu'annulaire alors que NXT: permet de discrétiser la géométrie de manière annulaire et cartésienne.

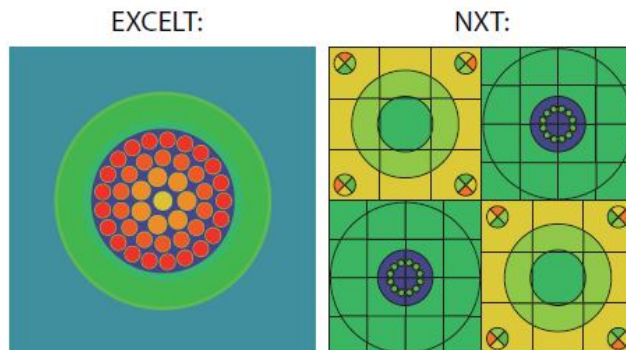


Figure 3.2: Comparaison du type de maillage possible avec EXCELT: et NXT:

3.1.3 Le module LIB:

Lorsqu'on définit la géométrie, il est essentiel de spécifier les mélanges (ou matériaux) qui lui sont associés. Le module LIB: permet d'accéder aux données contenues dans les bibliothèques de sections efficaces microscopiques en spécifiant le contenu isotopique, la température et la dilution pour chaque mélange. Il est à noter que la MICROLIB doit être auto-protégée en raison des résonances présentes à certaines énergies. Cette tâche est effectuée par le module SHI: qui procède à l'auto-protection des résonances en utilisant la méthode de Stamm'ler modifiée [15]. Ceci a pour but de calculer le paramètre de dilution dépendant de l'énergie associé à chaque isotope correspondant à un modèle de cellule donnée.

Dans ce travail nous utilisons deux bibliothèques de sections efficaces microscopiques de format WIMS-AECL conformément au rapport IGE-227 soit :

- La bibliothèque ENDF/B-IV ou Winfrith (structure à 69 groupes d'énergie);
- La bibliothèque ENDF/B-V (structure à 89 groupes d'énergie).

Il est à noter que le nom ainsi que le nombre d'isotopes varie pour chaque bibliothèque. On cherchera à comparer les résultats obtenus pour chacune des deux bibliothèques.

Après interpolation des sections efficaces microscopiques, en fonction de la température et de la dilution puis multiplication par les concentrations isotopiques, on obtient les sections efficaces macroscopiques par mélange qui seront stockées dans une MACROLIB.

3.1.4 Le module INFO:

Le module INFO:, utilisé de pair avec LIB: permet de calculer les concentrations isotopiques (en % massique) pour des conditions locales bien spécifiques. Dans le cas présent, on calcule les concentrations des isotopes dans le combustible, dans le caloporteur ainsi que le modérateur. On se sert également du module INFO: pour calculer la densité de l'eau $\rho(T,P)$ pour une température et une pureté données. Ainsi les densités du caloporteur et du modérateur sont calculées à l'aide des densités tabulées dans les bibliothèques de sections efficaces microscopiques.

3.1.5 Le module ASM:

Une fois que la géométrie a été définie et analysée, il faut calculer la matrice de probabilités de collision. Pour cela, DRAGON se sert du fichier contenant les lignes d'intégration générées avec EXCELT: ou NXT: ainsi que de la bibliothèque de sections efficaces macroscopiques obtenue avec LIB: dans le module ASM :. Ce module permet alors d'obtenir la matrice P_{ij}^g contenant les probabilités de collision et ce pour tous les groupes d'énergie g .

3.1.6 Le module FLU:

La résolution de l'équation de transport multigroupe s'effectue grâce au module FLU: qui utilise des matrices P_{ij}^g obtenues avec ASM:. Ce module effectue les itérations internes et externes nécessaires à l'obtention de la valeur critique (le Laplacien dit « buckling » dans le cas présent) ainsi que du flux multigroupe convergé.

Comme il a été mentionné au chapitre 1, les modèles de transport utilisés dans DRAGON permettent de produire un ensemble de sections efficaces pour la cellule unitaire et la super cellule. Les sections 3.2 et 3.3 présentent deux méthodologies pour réaliser ces calculs dans la version 3.06 de DRAGON. La première méthodologie dite « de référence » est utilisée dans l'industrie nucléaire canadienne depuis de nombreuses années mais présente des limitations entres autres au niveau de la géométrie des mécanismes de réactivité. La seconde méthodologie est celle qui est nouvellement introduite dans le cadre de ce projet. Il s'agira donc de comparer les deux méthodes et de présenter les modèles retenus pour les simulations dans DRAGON.

3.2 Méthodologie standard

3.2.1 Les calculs dans DRAGON

3.2.1.1 Le calcul de cellule (2D)

L'objectif du calcul 2D est de générer les propriétés de cellule dépendantes du « burnup » (sections efficaces macroscopiques et coefficients de diffusion) qui serviront aux calculs de cœur et qui seront réutilisées dans les calculs de super cellule (3D).

La procédure standard pour effectuer le calcul de réseau en 2D [3] consiste à représenter explicitement une cellule unitaire qui apparaît de façon répétitive dans le réacteur en lui appliquant des conditions aux frontières de réflexion. Cette cellule comprend la grappe de combustible entourée du tube de force et du tube de calandre ainsi que d'une partie du modérateur. On suppose que la cellule est infinie en z et que le combustible se situe dans une région cartésienne de dimensions 28,575 cm par 28,575 cm (pas du réseau).

À partir du module GEO: on définit la géométrie (figure 3.3) qui servira de base pour tout calcul de super cellule ultérieur. La grappe de combustible contenant 37 crayons d' UO_2 naturel (0,7114%) massique est représentée par des « clusters ».

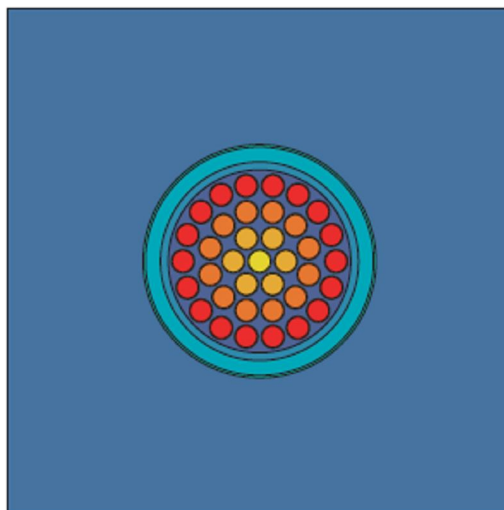


Figure 3.3: Géométrie de « clusters » pour la cellule CANDU-6

Les dimensions ainsi que les mélanges associés à cette géométrie sont présentés au tableau 3.1. Comme on peut le constater, il y a en tout 10 mélanges dont les compositions sont définies à

partir du module LIB: (voir procédure LibC6.c2m à l'annexe A). La gaine qui entoure chaque crayon de combustible est faite en Zr-II et le tube de force est fait de Zr-Nb. La composition de ces alliages est présentée au tableau 3.2. Les paramètres locaux de la cellule CANDU-6 qui sont également spécifiés dans LIB: sont présentés dans le tableau 3.3. Les données apparaissant dans les tableaux 3.1, 3.2 et 3.3 sont tirées du rapport IGE-227.

Tableau 3.1: Dimensions et composition des mélanges de la cellule CANDU-6

No. du mélange	Description	Composition	Rayon interne (cm)	Rayon externe (cm)
1	Caloporteur	Eau lourde	-	5,1689
2	Tube de force	Alliage de ZR-Nb	5,1689	5,6032
3	Espace annulaire (gap)	Hélium (He)	5,6032	6,4478
4	Tube de calandre	Zirconium (ZR-II)	6,4478	6,5875
5	Modérateur	Eau lourde	6,5875	14,000
6	Crayon central de combustible	UO ₂ (0,7114 % massique)	-	0,6122
7	6 crayons de combustible placés à 1,4885cm du centre	UO ₂ (0,7114 % massique)	-	-
8	12 crayons de combustible placés à 2,8755 cm du centre	UO ₂ (0,7114 % massique)	-	-
9	18 crayons de combustible 4,3305	UO ₂ (0,7114 % massique)	-	-

	cm du centre			
10	gaine du combustible	Zirconium (ZR-II)	0,6122	0,6540

Tableau 3.2: Composition des alliages de zirconium pour la cellule CANDU-6

Isotope	Zr-II (%) massique	Zr-NB (%) massique
Zr	99,71	97,5
Nb	-	2,5
Fe	0,16	-
Cr	0,11	-
Ni	0,06	-
B	0,00031	0,00021
Total	100,04031	100,00021
Densité (g/cm ³)	6,44	6,57

Tableau 3.3: Paramètres locaux de la cellule CANDU-6

Masse totale de l'uranium	19,2360
Densité de l'UO ₂ (g/cm ³)	10,4371
Température du combustible (K)	941,3000
Puissance spécifique (kW/kgU)	31,9700

Densité du caloporteur (g/cm^3)	0,8121
Température du caloporteur (K)	560,7000
Pureté du caloporteur (%)	99,3000
Densité du modérateur (g/cm^3)	1,0829
Température du modérateur (K)	345,7000
Pureté du modérateur (%)	99,9200

À partir de la géométrie de base, on procède à deux niveaux de maillage. Le premier niveau consiste à définir la cellule avec une discrétisation grossière qui servira aux calculs d'autoprotection des résonances (figure 3.4). L'analyse de cette géométrie s'effectue avec le module NXT:² et donne 15 régions et 4 surfaces. On effectue alors un « tracking » isotrope avec $N^\psi = 49$ pour la quadrature angulaire et $\rho = 10$ lignes/cm pour la quadrature spatiale (voir section 2.3.8 du chapitre précédent). Ces choix ont été effectués de façon plus ou moins arbitraire.

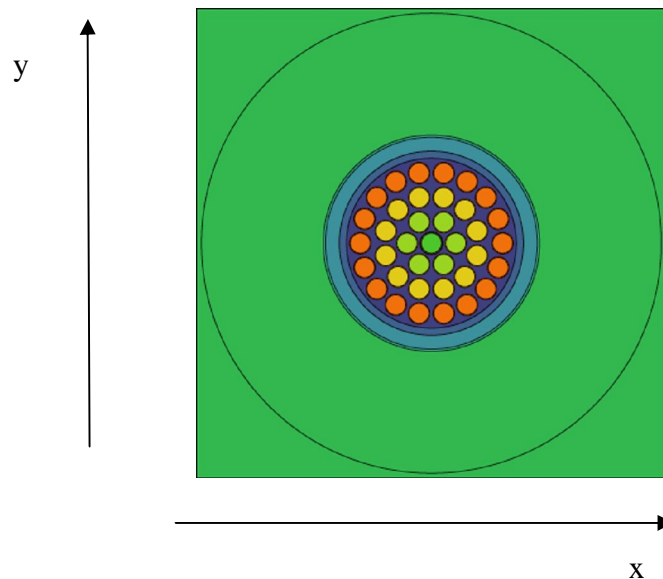


Figure 3.4: Géométrie grossière pour les calculs d'auto-protection des résonances

² Il est à noter que le module EXCELT : permet également d'analyser cette géométrie.

Le second niveau de maillage consiste à augmenter le nombre de régions (discrétisation fine) dans la géométrie qui servira aux calculs de transport (figure 3.5). On s'assure de discrétiser suffisamment dans les régions où le flux présente des gradients (variation spatiale importante du flux) soit dans les crayons de combustible, dans le caloporteur et dans le modérateur.

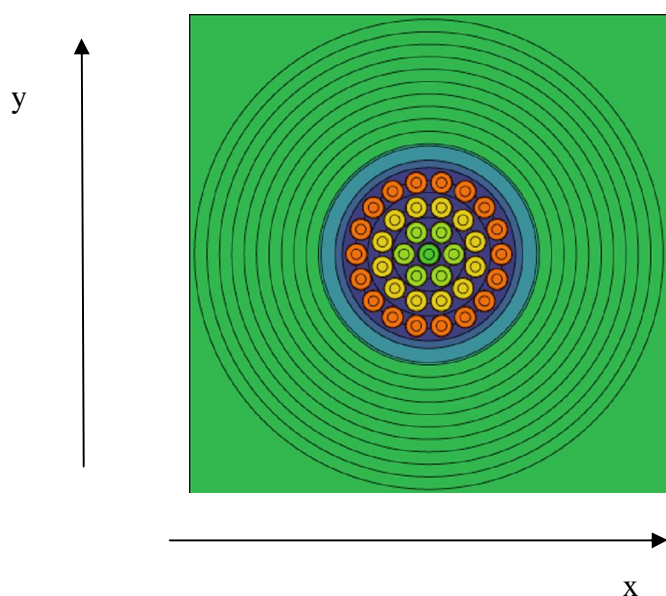


Figure 3.5: Géométrie fine pour les calculs de transport

En effectuant l'analyse de la géométrie on obtient 33 régions et 4 surfaces. Les paramètres de « tracking » choisis sont 49 angles avec cette fois une densité de 30 lignes/cm. En augmentant ainsi la densité, on s'assure de réduire l'erreur sur les surfaces et les volumes de manière à obtenir des résultats plus précis lors des calculs de transport. La définition des deux géométries ainsi que le « tracking » sont effectués dans la procédure GeoC6C.c2m présentée à l'annexe A.

Avant de procéder au calcul de transport, on effectue l'autoprotection de la librairie avec le module SHI:. Par la suite, afin de tenir compte des effets de fuite à l'extérieur de la cellule, on utilise un modèle de fuites homogène B_1 dans le calcul de transport (voir section 2.3.6). Une fois la recherche de la valeur critique effectuée, les coefficients de diffusion sont obtenus.

Étant donné que les grappes de combustible sont irradiées dans le cœur, des calculs d'évolution isotopique doivent être exécutés dans DRAGON et ce, dans le but d'obtenir des propriétés de cellule et de super cellules dépendantes du « burnup ». La méthode employée dans le rapport

IGE227 consiste à évoluer le combustible en 2D pendant 130 jours à une puissance constante de 32 kW/kg soit 4160 MWj/T ce qui correspond à l'état de « mid-burnup ». On assume donc, pour le calcul 3D que les canaux de combustible sont tous les deux à « mid-burnup ». Selon l'étude menée par Dahmani et al. [16], ce choix est justifié dans la mesure où l'utilisation des sections efficaces incrémentales à « mid-burnup » permet d'obtenir une estimation adéquate de la valeur en réactivité des LZC dans les calculs de cœur. Les calculs d'évolution sont effectués à l'aide du module EVO:. On crée alors une boucle d'évolution qui se répète jusqu'à l'obtention des conditions de cellule désirées.

Suite aux calculs de transport, les propriétés dépendantes du « burnup » sont homogénéisées sur toute la cellule puis condensées en deux groupes d'énergie à l'aide du module EDI:. La condensation en énergie s'effectue avec une coupure à 4 eV entre le groupe thermique et le groupe rapide au-lieu de la valeur standard de 0.625 eV utilisée généralement. Ce choix s'explique par le fait que l'on cherche à éliminer complètement les effets de la diffusion du groupe 2 vers le groupe 1 (« up-scattering effect ») dans les propriétés nucléaires [3]. Finalement, les propriétés sont stockées en fonction du « burnup » dans des bases de données qui serviront aux calculs de cœur. La procédure FLUC6.c2m de l'annexe A présente les calculs d'autoprotection, de transport et d'évolution pour la cellule unitaire.

Afin de récupérer les propriétés de cellule à « mid-burnup » pour les calculs 3D, on procède à une pré-homogénéisation de la cellule en 3 régions c'est-à-dire une région pour les grappes de combustible et le caloporteur, une région pour le tube de calandre, le gap et le tube de force et une région pour le modérateur. Aucune condensation en énergie n'est effectuée à ce niveau et ce afin de garder le maximum d'informations pour le calcul de super cellule. Ainsi, le calcul 3D reprend la même structure de groupe que le calcul 2D.

3.2.1.2 Le calcul de supercellule (3D)

Le schéma du calcul de super cellule est similaire à celui du calcul 2D présenté précédemment. En effet, dans le fichier principal on fait appel à 3 procédures. La première procédure permet de définir la géométrie 3D. On suppose que les mécanismes de réactivité n'ont d'impact que sur les grappes de combustibles les plus proches. De ce fait, le modèle 3D que l'on utilise correspond à un mécanisme de réactivité placé à mi-chemin entre deux grappes de combustible. Le modèle de

super cellule défini dans la méthodologie standard correspond aux combustibles homogénéisés en régions annulaires et à un mécanisme de réactivité ayant aussi une géométrie annulaire tel qu'illustré à la figure 3.6. Il est à noter que la géométrie est simplifiée pour les LZC et les barres de cobalt mais exacte pour les tubes guides et les matériaux de structure. La région d'intérêt lors de l'analyse correspond au volume entre le mécanisme et le combustible.

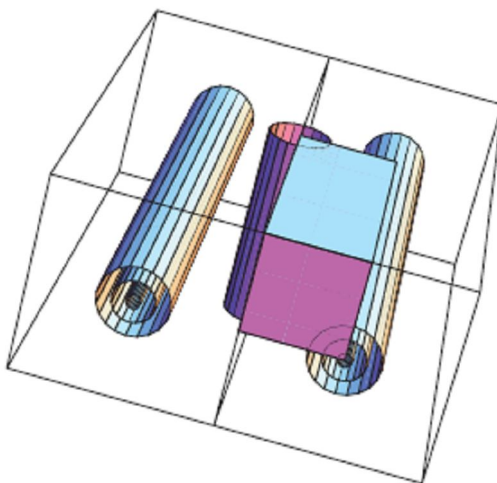


Figure 3.6: Supercellule selon le modèle simplifié de la méthodologie standard

Dans la seconde procédure, les propriétés des grappes de combustible à « mid-burnup » sont récupérées à partir du calcul de cellule. Comme il a été vu précédemment, la librairie du calcul 2D ne contient que 3 mélanges en raison de l'étape de pré-homogénéisation. On procède alors à l'ajout des mélanges associés aux mécanismes de réactivité grâce au module LIB :. Il y a donc en tout 6 mélanges définis dans la super cellule pour les LZC et 5 pour les barres au cobalt. Le tableau 3.4 présente la description de chacun de ces mélanges pour les deux mécanismes.

Tableau 3.4: Description des mélanges dans la méthodologie standard

No. du mélange	Matériaux pour les LZC	Matériaux pour les barres au cobalt
1	Grappes de combustible + caloporteur	Grappes de combustible + caloporteur
2	Tube de force + tube de calandre	Tube de force + tube de calandre
3	Modérateur à eau lourde	Modérateur à eau lourde
4	Hélium	Cobalt
5	Eau légère	Tube guide en Zr-II
6	Tube guide en Zr-II	-

La troisième procédure permet d'effectuer les calculs de transport 3D. On procède à trois calculs de transport pour chaque mécanisme de réactivité avec la même géométrie et les mêmes options :

- Un premier calcul 3D où le mécanisme de réactivité et son tube guide sont complètement absents de la super cellule ce qui donne Σ_{NO} . Ce calcul où seul le modérateur est présent sert de référence pour analyser l'impact du mécanisme.
- Un second calcul 3D où le mécanisme de réactivité et son tube guide sont présents ce qui donne Σ_{IN} .
- Un troisième calcul 3D avec seulement le tube guide présent ce qui donne Σ_{OUT} .

Les sections efficaces incrémentales qui seront utilisées pour corriger les propriétés de cellules sont définies comme :

$$\Delta\Sigma_{IN} = \Sigma_{IN} - \Sigma_{NO} \quad (3.1)$$

et

$$\Delta\Sigma_{OUT} = \Sigma_{OUT} - \Sigma_{NO} \quad (3.2)$$

L'équation 3.1 correspond au cas où la cellule est affectée par une barre de cobalt pleinement insérée dans le tube guide ou encore un LZC complètement rempli. L'équation 3.2 correspond au cas où la cellule est uniquement affectée par le tube guide de la barre au cobalt ou encore un LZC complètement vide.

Lors des calculs de transport 3D, on utilise un modèle de fuites homogène B_1 . Ce choix est cohérent avec celui du calcul de cellule 2D d'où proviennent les propriétés du combustible. Les sections efficaces macroscopiques sont homogénéisées sur toute la super cellule et condensées en deux groupes d'énergie pour chaque calcul de transport.

Dans ce travail, on s'intéresse aux sections efficaces incrémentales suivantes :

- $\Delta\Sigma_t^1$: l'incrément pour la section efficace totale du groupe rapide ;
- $\Delta\Sigma_t^2$: l'incrément pour la section efficace totale du groupe thermique ;
- $\Delta\nu\Sigma_f^1$: l'incrément pour la section efficace de fission du groupe rapide ;
- $\Delta\nu\Sigma_f^2$: l'incrément pour la section efficace de fission du groupe thermique ;
- $\Delta\nu\Sigma_s^{g \leftarrow g'}$: l'incrément pour la section efficace de diffusion du groupe g' vers le groupe g .

Les fichiers présentant les calculs 3D réalisés dans la méthodologie de référence peuvent être obtenus en consultant le rapport IGE227.

3.2.2 La modélisation des mécanismes de réactivité

Un des objectifs de ce travail est de comparer deux modèles de représentation des mécanismes de réactivité à savoir le modèle simplifié et le modèle exact. Comme il a été mentionné précédemment, il n'était auparavant pas possible de représenter les géométries contenant des

« clusters » en 3D. De ce fait, les LZC et les barres au cobalt n'étaient pas représentés dans leur géométrie exacte contrairement aux tubes guides et aux matériaux de structure. On se servait alors d'un modèle simplifié dans lequel on procédait à une cylindrification des mécanismes c'est-à-dire qu'au-lieu de simuler des « clusters », on simulait des régions annulaires équivalentes. Dans les deux prochaines sections il s'agira de présenter les modèles simplifiés des LZC et des barres de cobalt.

3.2.2.1 Les contrôleurs liquides (LZC)

Le modèle simplifié des LZC est obtenu grâce à un processus de cylindrification qui permet de représenter les tubes à l'intérieur du mécanisme. Ainsi, les tubes en « clusters » sont remplacés par 6 anneaux concentriques. Les mélanges ainsi que les dimensions de chacune des régions annulaires sont choisis de manière à préserver le volume total ainsi que les isotopes contenus dans la géométrie exacte des LZC. La figure 3.7 présente à titre d'exemple la cylindrification du LZC de type « 32 ».

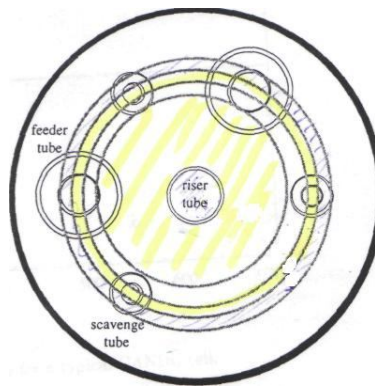


Figure 3.7: Cylindrification du LZC de type « 32 »

Le rayon des anneaux concentriques appelé « rayon équivalent » est obtenu en effectuant un calcul qui tient compte du type de LZC ainsi que des dimensions des tubes.

On a donc que :

$$r_{eqv} = \sqrt{n_{sc} R_{sc}^2 + n_{fe} R_{fe}^2} \quad (3.3)$$

$$r_{eqv} = \sqrt{n_{bu} R_{bu}^2 + n_{ba} R_{ba}^2} \quad (3.4)$$

avec n_{sc} le nombre de tubes « scavengers », R_{sc} le rayon (interne ou externe) des tubes « scavengers », n_{fe} le nombre de tubes « feeders », R_{fe} le rayon (interne ou externe) des tubes « feeders », n_{bu} le nombre de tubes « bubbler », R_{bu} le rayon (interne ou externe) des tubes « bubbler », n_{ba} le nombre de tubes « balance » et R_{ba} le rayon (interne ou externe) des tubes « balance ».

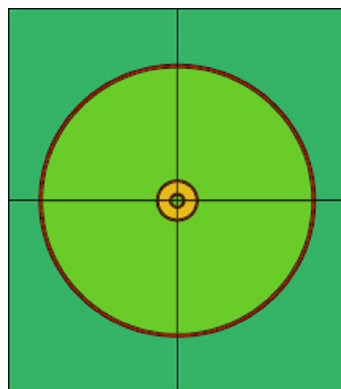
On calcule en tout 4 rayons équivalents soit 2 (interne et externe) pour les tubes « scavengers » et les « feeders » ainsi que 2 (interne et externe) pour les tubes « bubbler » et « balance ». La cylindrisation s'effectue de la manière suivante : la région 1 ($r_{eqv,int\,erne}$) contient de l'hélium, la région 2 contient du zirconium pour le $r_{eqv,externe}$ des tubes « bubbler » et « balance », la région 3 contient de l'eau légère pour le $r_{eqv,int\,erne}$ des tubes « scavengers » et « feeders », la région 4 contient du zirconium pour le $r_{eqv,externe}$ des tubes « scavengers » et « feeders », la région 5 ($r_{int\,erne}$ du tube guide) contient de l'hélium ou de l'eau légère selon que le LZC est vide ou rempli, la région 6 ($r_{externe}$ du tube guide) contient du zirconium. Le tableau 3.5 présente les dimensions calculées pour les 3 types de LZC cylindrisés.

Tableau 3.5: Valeurs de r_{eqv} pour chaque type de LZC et matériaux associés

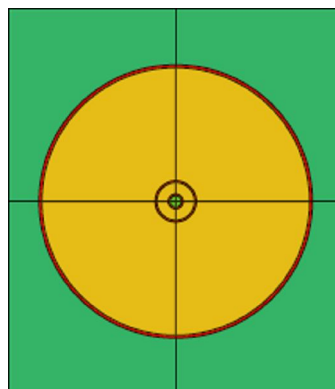
No. de la région annulaire	LZC « 10 » r_{eqv} (cm)	LZC « 21 » r_{eqv} (cm)	LZC « 32 » r_{eqv} (cm)	Matériau
1	0,2415	0,9692	1,3492	Hélium
2	0,3175	1,0807	1,4949	Zirconium
3	0,8040	1,8711	2,5210	Eau légère
4	0,8800	1,9972	2,6838	Zirconium

5	5,7150	5,7150	5,7150	Eau légère ou hélium
6	5,8420	5,8420	5,8420	Zirconium

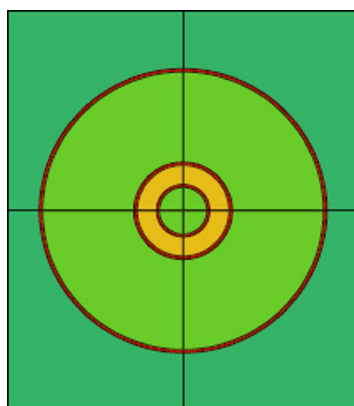
La figure 3.8 présente les modèles simplifiés des LZC que nous avons obtenus par cylindrisation. Ces modèles ont tous été analysés en utilisant pour le « tracking » 4 angles solides et 100 lignes/cm². Le choix de ces paramètres donne une erreur maximale assez faible sur les volumes. On obtient en tout 48 régions et 36 surfaces.



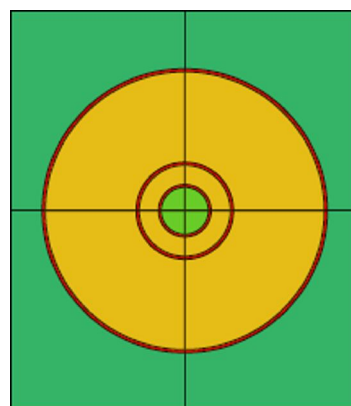
LZC « 10 » vide



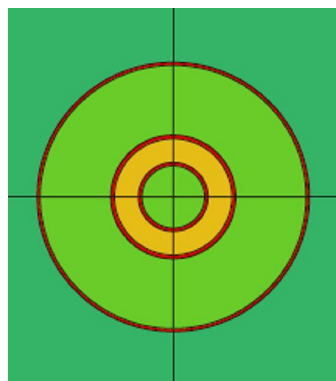
LZC « 10 » rempli



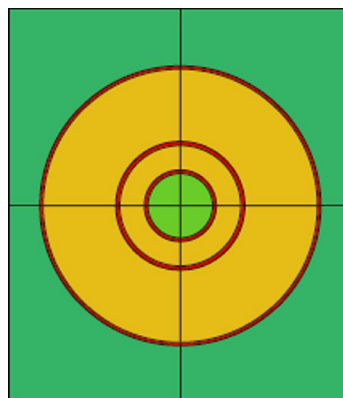
LZC « 21 » vide



LZC « 21 » rempli



LZC « 32 » vide



LZC « 32 » rempli

Légende (pour les régions circulaires) : vert (hélium), jaune (eau légère), rouge (zirconium)

Figure 3.8: Modèles simplifiés des LZC (méthodologie standard)

Les matériaux associés à chacune des régions annulaires sont présentés dans le tableau 3.5. Il est à noter que les mécanismes sont entourés du modérateur (matériau en vert foncé).

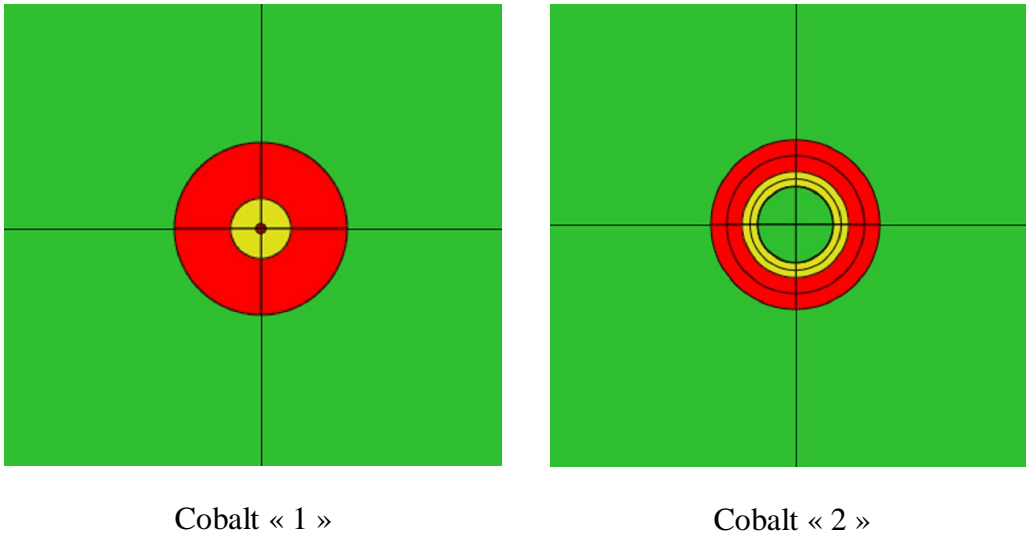
3.2.2.2 Les barres de compensation au cobalt

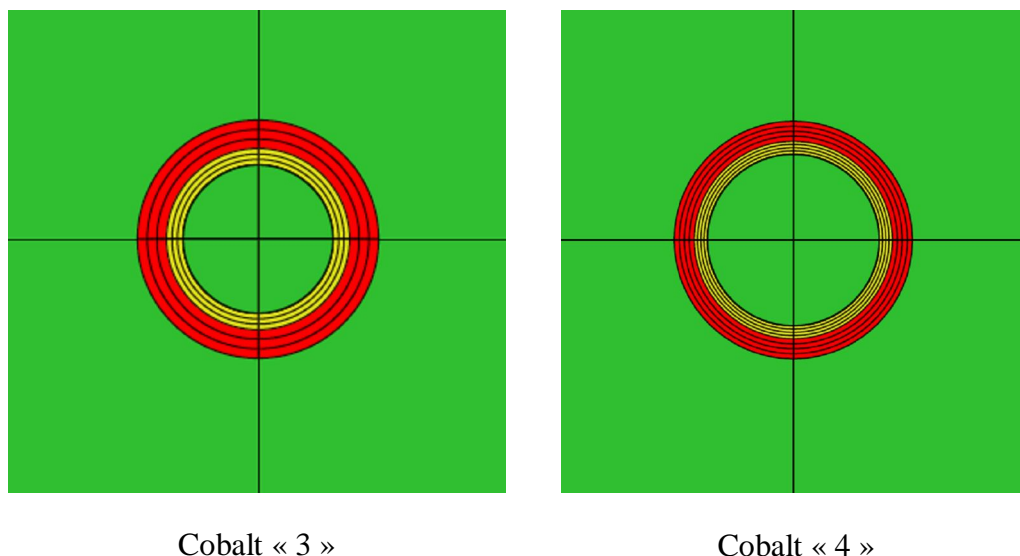
Le modèle simplifié des barres de compensation au cobalt est obtenu encore une fois par l'approximation de cylindrification des « clusters ». L'approche utilisée est similaire à celle des LZC, on calcule ici des rayons équivalents pour 4 anneaux concentriques qui dépendent du nombre de crayons de cobalt dans le mécanisme. Les dimensions de la cylindrification sont présentées au tableau 3.6.

Tableau 3.6: Valeurs de r_{eqv} (cm) pour les barres au cobalt (méthodologie standard)

Matériau	1 crayon	2 crayons	3 crayons	4 crayons
Région 1-D ₂ O	0,00000	0,44003	0,76216	1,07786
Région 2-ZrII	0,05095	0,44589	0,76725	1,08266
Région 3-Co	0,31115	0,62230	0,93345	1,24460
Région 4-ZrII	0,89571	0,99008	1,23014	1,47661

La figure 3.9 présente les modèles simplifiés des barres au cobalt. On constate aisément qu'elles sont de dimensions plus petites que les LZC. Aussi, si on reprend les mêmes paramètres de « tracking » que pour les LZC tel que suggéré dans le rapport IGE227, plusieurs régions ne sont pas traversées par les lignes d'intégration et DRAGON ne peut générer la matrice des probabilités de collisions pour calculer le flux. Afin de remédier ce problème, on utilise 4 angles solides mais avec une densité de 1000 lignes/cm². On obtient en tout 42 régions et 33 surfaces.





Légende (pour les régions circulaires) : rouge (zirconium), jaune (cobalt), vert (modérateur)

Figure 3.9: Modèles simplifiés des barres au cobalt (méthodologie standard)

Ici encore une fois, les mécanismes sont entourés de modérateur.

Dans la prochaine section, nous allons introduire la nouvelle méthodologie pour modéliser la super cellule du réacteur CANDU-6. Comme le lecteur pourra le constater, les principaux changements apportés se situent au niveau de la modélisation de la géométrie du combustible et des mécanismes de réactivité en 3D.

3.3 Nouvelle méthodologie

3.3.1 Les calculs dans DRAGON

3.3.1.1 Le calcul de cellule (2D)

Lorsqu'on prend en compte les progrès effectués dans le code DRAGON plus précisément avec la version 3.06, on est en mesure d'effectuer des calculs qui se veulent plus précis et plus fidèles à la réalité. Pour le calcul 2D, on reprend les mêmes étapes et les mêmes appels de modules que pour la méthodologie de référence mais à une différence près. Dans un premier temps, on génère les propriétés à « mid-burnup » homogénéisées sur toute la cellule et condensées à deux groupes

d'énergie qui serviront aux calculs de réacteur fini en 3D. Cependant, contrairement à la méthodologie standard, l'étape suivante de pré-homogénéisation de la cellule en 3 régions n'est plus nécessaire. En effet, l'introduction du module de tracking NXT: fait en sorte qu'on peut se servir directement de la cellule de « clusters » dans le calcul 3D. On ne fait donc que stocker les propriétés sans condensation en énergie pour le calcul de supercellule.

3.3.1.2 Le calcul de supercellule (3D)

En plus de pouvoir représenter les canaux de combustible dans leur géométrie réelle (« clusters »), on est également en mesure avec NXT: de représenter les mécanismes de réactivité contenant des « clusters ». La figure 3.10 présente la super cellule du modèle exact soit deux cellules contenant les grappes de combustible en 2D ainsi qu'une cellule contenant le mécanisme en géométrie exacte.

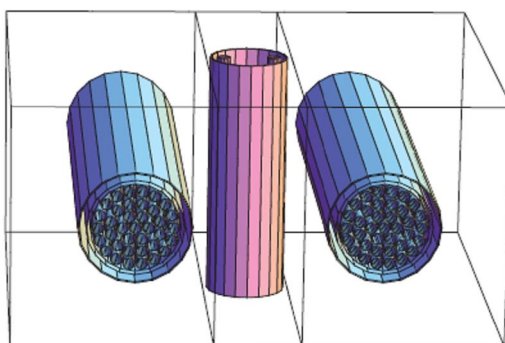


Figure 3.10: Supercellule selon le modèle exact avec la nouvelle méthodologie

Suite à la définition de la géométrie 3D, l'étape de pré-homogénéisation n'étant plus nécessaire, on ajoute aux 10 mélanges du calcul 2D (voir tableau 3.1), les mélanges associés aux mécanismes en géométrie exacte. On ajoute ainsi les mélanges 11 à 32 pour les LZC et les mélanges 11 à 15 pour les barres au cobalt. Le tableau 3.7 présente la description de ces différents mélanges. Suite à l'ajout des mélanges, on procède à l'autoprotection de la librairie puis aux calculs de transports. On obtient ainsi les sections efficaces incrémentales.

Dans la méthodologie de référence, les tubes guides et les matériaux de structure sont déjà représentés dans leur géométrie exacte. Désormais, on est en mesure de les simuler avec un combustible exact ce qui devrait donner des résultats plus précis.

3.3.2 La modélisation des mécanismes de réactivité

Les modèles exact que nous considérerons ici, bien qu'étant plus précis seront aussi beaucoup plus coûteux en temps de calcul et requièrent une discrétisation très fine du caloporteur, du combustible, du modérateur et du mécanisme de réactivité comme nous le verrons au chapitre 4.

3.3.2.1 Les contrôleurs liquides

La description de la géométrie exacte des LZC a été présentée à la figure 1.5 et les dimensions au tableau 1.2 du chapitre 1. Les figures 3.11 et 3.12 présentent les types de LZC avec les matériaux qui leur sont associés. Les « feeders » et les « scavengers » contiennent de l'eau légère tandis que les « bubblers » et les « balance » contiennent de l'hélium. Lorsque le LZC est complètement vide, la région centrale contient de l'hélium et lorsqu'il est complètement rempli c'est plutôt de l'eau légère.³

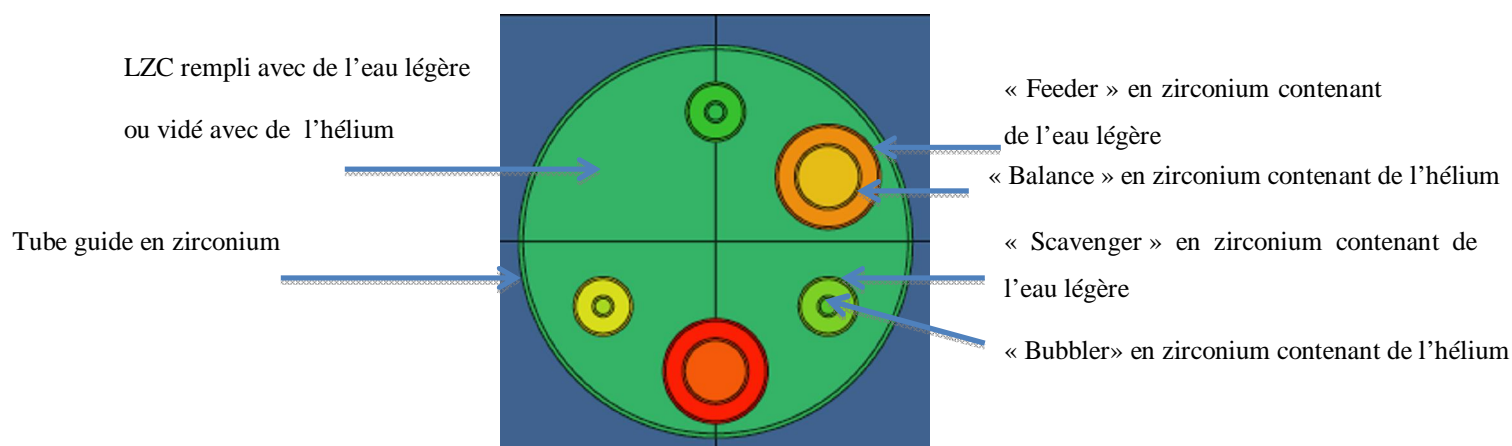


Figure 3.11: Modèle exact du LZC de type « 32 »

³ Il est à noter que pour les figures 3.11 et 3.12 les couleurs ne sont pas représentatives des matériaux.

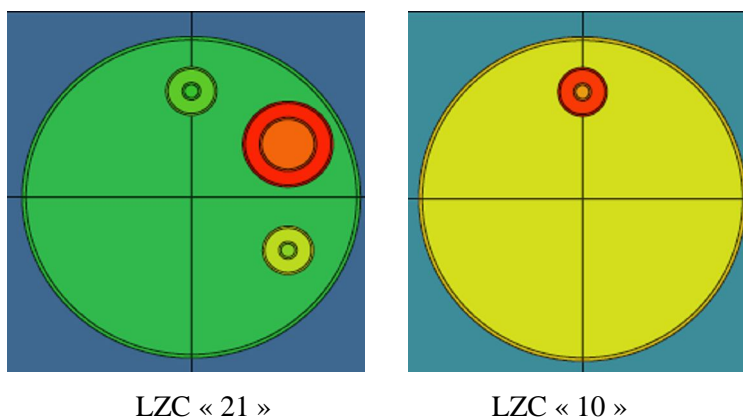


Figure 3.12: Modèles exacts des LZC de type « 21 » et « 10 »

Avec le module NXT, il est possible de traiter le modèle exact pour chaque type de LZC. Étant donné la complexité de ces géométries, il faut procéder à une discrétisation plus fine des LZC dans les régions où le flux est susceptible de varier. L'objectif est d'obtenir la convergence spatiale du flux.

3.3.2.2 Les barres de compensation au cobalt

Les modèles exacts que nous avons simulés sont présentés à la figure 3.13. Comme on peut le constater, la barre au cobalt de type « 1 » contient un crayon de cobalt (en jaune) ainsi qu'un crayon « dummy » en zirconium (orange). Les 3 autres types de barres n'ont que des crayons faits en cobalt. Tous les mécanismes possèdent en leur centre une tige en zirconium et sont entourés d'un tube guide également en zirconium. Le tube guide est perforé de telle sorte que la région centrale contient du modérateur.

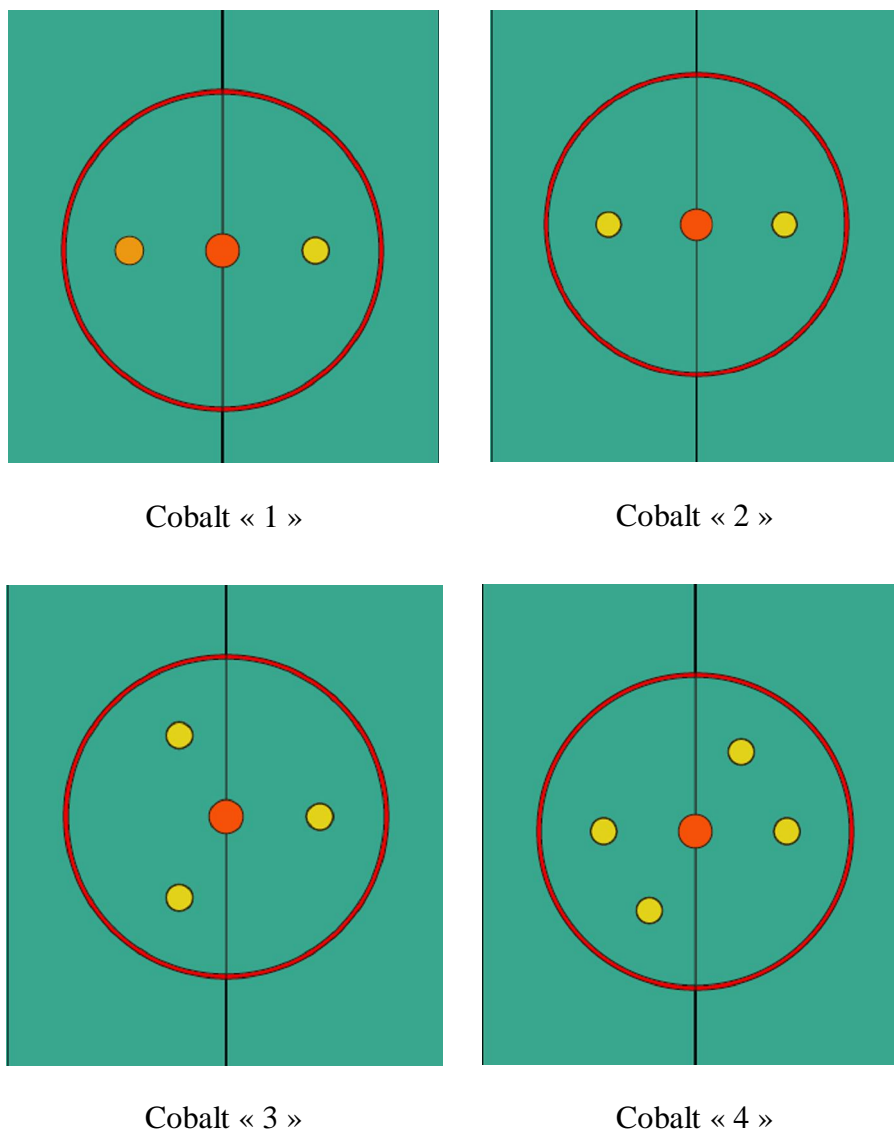


Figure 3.13: Modèles exacts des 4 types de barres au cobalt

L'analyse de ces géométries a également été effectuée avec le module NXT:. À partir de ces modèles, nous traiterons le problème de convergence spatiale du flux en discrétisant davantage dans les crayons de cobalt et dans le modérateur (voir section 4.2). Une fois la convergence atteinte, nous pourrons comparer les résultats obtenus entre le modèle simplifié et le modèle exact.

CHAPITRE 4

ÉTUDE DES MÉCANISMES DE RÉACTIVITÉ

L'objectif de ce chapitre est de comparer les résultats obtenus entre le modèle annulaire (méthodologie de référence) et le modèle exact (nouvelle méthodologie) de la super cellule contenant les barres de compensation au cobalt. Ces mêmes comparaisons pourraient être effectuées sur les LZC qui présentent également une géométrie en « clusters ».

4.1 Comparaison entre les modules EXCELT : et NXT :

Comme il a été mentionné à la section 3.1, le module EXCELT: est le module de « tracking » utilisé dans le rapport IGE227 afin d'analyser les géométries du combustible et des mécanismes de réactivité. Dans la nouvelle version de DRAGON, nous avons accès au module NXT: qui présente des caractéristiques beaucoup plus intéressantes entre autres dans le traitement de géométries plus complexes. Le premier objectif de notre travail a été de vérifier la cohérence entre les deux modules. Bien que des vérifications de NXT: aient déjà été effectuées entre autres par Zkiek et al. [17], nous avons tout de même voulu simuler les mécanismes en utilisant NXT: et EXCELT: dans la version 3.06 de DRAGON, puis comparer les sections efficaces incrémentales ($\Delta\Sigma$) obtenues avec chaque module.

Afin d'effectuer ces comparaisons, nous avons repris la méthodologie du rapport IGE227 pour les calculs 2D et 3D (voir section 3.2) en négligeant l'évolution isotopique dans le combustible (on suppose que le combustible est neuf). La raison de ce choix est que cela permettrait une diminution du temps de calcul. Les simulations en 2D ont été réalisées avec les mêmes options de « tracking » que celles présentées à la section 3.2. Pour les calculs de supercellule, nous avons choisi 4 angles et une densité de 1000 lignes/cm². Ces valeurs ont donné des erreurs maximales de moins de 1% sur les volumes. Rappelons que les mécanismes sont traités ici dans leur géométrie annulaire. Les tableaux 4.1 à 4.4 présentent les résultats des 4 types de barres au cobalt dans les bibliothèques ENDF/B-V (89 groupes d'énergie) et WINFRITH (69 groupes d'énergie).

Tableau 4.1: Comparaison des $\Delta\Sigma$ (cm⁻¹) avec NXT: et EXCELT: des barres au cobalt avec la méthodologie de référence sans « burnup » (ENDF/B-V)

Sections efficaces incrémentales	Cobalt 1 (EXCELT)	Cobalt 1 (NXT)	Cobalt 2 (EXCELT)	Cobalt 2 (NXT)	Cobalt 3 (EXCELT)	Cobalt 3 (NXT)	Cobalt 4 (EXCELT)	Cobalt 4 (NXT)
$\Delta\Sigma_t^1$	1,776E-04	1,776E-04	3,684E-04	3,684E-04	5,544E-04	5,544E-04	7,389E-04	7,389E-04
$\Delta\nu\Sigma_f^1$	-2,039E-06	-2,039E-06	-3,461E-06	-3,461E-06	-4,885E-06	-4,885E-06	-6,238E-06	-6,238E-06
$\Delta\Sigma_s^{1\leftarrow 1}$	1,357E-04	1,357E-04	2,814E-04	2,814E-04	4,255E-04	4,256E-04	5,700E-04	5,700E-04
$\Delta\Sigma_s^{1\leftarrow 2}$	5,856E-08	5,856E-08	1,038E-07	1,038E-07	1,495E-07	1,495E-07	1,939E-07	1,939E-07
$\Delta\Sigma_t^2$	-2,606E-04	-2,606E-04	-2,935E-04	-2,935E-04	-3,730E-04	-3,730E-04	-4,540E-04	-4,540E-04
$\Delta\nu\Sigma_f^2$	2,200E-06	2,200E-06	4,478E-06	4,478E-06	7,013E-06	7,013E-06	9,744E-06	9,744E-06
$\Delta\Sigma_s^{2\leftarrow 1}$	2,676E-05	2,676E-05	5,927E-05	5,927E-05	8,785E-05	8,785E-05	1,148E-04	1,148E-04
$\Delta\Sigma_s^{2\leftarrow 2}$	-3,866E-04	-3,866E-04	-5,351E-04	-5,352E-04	-7,250E-04	-7,250E-04	-9,121E-04	-9,121E-04

Tableau 4.2: Comparaison des $\Delta\Sigma$ (cm⁻¹) avec NXT: et EXCELT: des barres au cobalt avec la méthodologie de référence sans « burnup » (WINFRITH)

Sections efficaces incrémentales	Cobalt 1 (EXCELT)	Cobalt 1 (NXT)	Cobalt 2 (EXCELT)	Cobalt 2 (NXT)	Cobalt 3 (EXCELT)	Cobalt 3 (NXT)	Cobalt 4 (EXCELT)	Cobalt 4 (NXT)
$\Delta\Sigma_t^1$	2,216E-04	2,216E-04	4,472E-04	4,472E-04	6,707E-04	6,707E-04	8,951E-04	8,952E-04
$\Delta\nu\Sigma_f^1$	-1,992E-06	-1,992E-06	-3,356E-06	-3,356E-06	-4,731E-06	-4,731E-06	-6,039E-06	-6,039E-06
$\Delta\Sigma_s^{1\leftarrow 1}$	1,797E-04	1,797E-04	3,598E-04	3,599E-04	5,411E-04	5,411E-04	7,247E-04	7,247E-04
$\Delta\Sigma_s^{1\leftarrow 2}$	3,078E-08	3,078E-08	5,132E-08	5,132E-08	7,281E-08	7,281E-08	9,371E-08	9,371E-08
$\Delta\Sigma_t^2$	-1,400E-04	-1,400E-04	-1,411E-04	-1,411E-04	-1,730E-04	-1,730E-04	-2,073E-04	-2,073E-04
$\Delta\nu\Sigma_f^2$	2,863E-06	2,863E-06	5,753E-06	5,753E-06	8,884E-06	8,884E-06	1,220E-05	1,220E-05
$\Delta\Sigma_s^{2\leftarrow 1}$	2,322E-05	2,323E-05	5,207E-05	5,207E-05	7,723E-05	7,723E-05	1,008E-04	1,008E-04
$\Delta\Sigma_s^{2\leftarrow 2}$	-2,649E-04	-2,649E-04	-3,807E-04	-3,807E-04	-5,224E-04	-5,224E-04	-6,626E-04	-6,626E-04

Tableau 4.3: Écart des $\Delta\Sigma$ pour NXT: et EXCELT: des barres au cobalt (ENDF/B-V)

Sections efficaces incrémentales	Cobalt 1	Cobalt 2	Cobalt 3	Cobalt 4
$\Delta\Sigma_t^1$	0,00%	0,00%	0,00%	0,00%
$\Delta\nu\Sigma_f^1$	0,00%	0,00%	0,00%	0,00%
$\Delta\Sigma_s^{1\leftarrow 1}$	0,00%	0,00%	0,02%	0,00%
$\Delta\Sigma_s^{1\leftarrow 2}$	0,00%	0,00%	0,00%	0,00%
$\Delta\Sigma_t^2$	0,00%	0,00%	0,00%	0,00%
$\Delta\nu\Sigma_f^2$	0,00%	0,00%	0,00%	0,00%
$\Delta\Sigma_s^{2\leftarrow 1}$	0,00%	0,00%	0,00%	0,00%
$\Delta\Sigma_s^{2\leftarrow 2}$	0,00%	0,02%	0,00%	0,00%

Tableau 4.4: Écart des $\Delta\Sigma$ pour NXT: et EXCELT: des barres au cobalt (WINFRITH)

Sections efficaces incrémentales	Cobalt 1	Cobalt 2	Cobalt 3	Cobalt 4
$\Delta\Sigma_t^1$	0,00%	0,00%	0,00%	0,01%
$\Delta\nu\Sigma_f^1$	0,00%	0,00%	0,00%	0,00%
$\Delta\Sigma_s^{1\leftarrow 1}$	0,00%	0,03%	0,00%	0,00%
$\Delta\Sigma_s^{1\leftarrow 2}$	0,00%	0,00%	0,00%	0,00%
$\Delta\Sigma_t^2$	0,00%	0,00%	0,00%	0,00%
$\Delta\nu\Sigma_f^2$	0,00%	0,00%	0,00%	0,00%
$\Delta\Sigma_s^{2\leftarrow 1}$	0,04%	0,00%	0,00%	0,00%
$\Delta\Sigma_s^{2\leftarrow 2}$	0,00%	0,00%	0,00%	0,00%

Les écarts relatifs entre les sections efficaces sont calculés à l'aide de la formule suivante :

$$\text{Écart}(\%) = \frac{(\Delta\Sigma_{NXT} - \Delta\Sigma_{EXCELT})}{\Delta\Sigma_{EXCELT}} \times 100 \quad (4.1)$$

On constate que les écarts présentés aux tableaux 4.3 et 4.4 sont presque nuls, la valeur maximale observée est de 0,04% ce qui est négligeable. On peut donc affirmer que les résultats obtenus avec le module NXT: sont cohérents avec ceux du module EXCELt:.

Nous avons également cherché à comparer les temps de calcul (« CPU time ») associés à chacun des deux modules. Pour ce faire, nous avons analysé les géométries de trois mécanismes ayant des paramètres de « tracking » distincts dans la méthodologie de référence. Les résultats obtenus sont présentés au tableau 4.5. Il est à noter que les temps de calculs ont été obtenus dans les mêmes conditions et avec le même ordinateur pour les trois cas.

Tableau 4.5: Comparaison du temps de calcul des modules NXT: et EXCELt:

Type de mécanisme	Paramètres de « tracking »	Temps de calcul EXCELt: (min)	Temps de calcul NXT: (min)
Barre en acier inoxydable (BCAINT)	4 angles 2,5 lignes/cm ²	1,847	0,914
LZC de type « 10 » 100% rempli	4 angles 100 lignes/cm ²	60,894	57,977
Barre au cobalt de type 1	4 angles 1000 lignes/cm ²	753,913	653,369

On remarque que le module NXT: se montre plus performant au niveau du temps de calcul dans les trois cas. Pour les faibles densités, la différence entre les deux modules n'est pas très grande mais plus la densité augmente plus on observe une différence importante soit près d'une heure trente de moins pour la barre au cobalt de type 1 avec une densité de 1000 lignes/cm².

4.2 Étude de la convergence spatiale du flux neutronique

La seconde étape de ce projet consiste à représenter les barres au cobalt dans leur géométrie exacte et d'effectuer la discrétisation spatiale nécessaire pour que l'approximation des sources constantes soit vérifiée. En effet, comme il a été mentionné à la section 2.3.5, la méthode des probabilités de collision employée pour résoudre l'équation de transport dans DRAGON s'appuie sur l'hypothèse selon laquelle les sources de neutrons sont constantes sur chaque région du domaine considéré. Il faut donc s'assurer de discrétiser assez finement dans les régions où le flux est susceptible de varier puis de vérifier la convergence du flux à mesure qu'on augmente la discrétisation. De manière usuelle, le critère de convergence est de 0,1% pour l'écart relatif des $\Delta\Sigma$ et de 0,1 mk pour le k_∞ . À la section 2.5 il a été vu que les sections efficaces obtenues suite au calcul de transport sont pondérées par le flux durant les étapes d'homogénéisation et de condensation en énergie. Ainsi, une variation du flux affecte les sections efficaces de telle sorte que nous sommes en mesure d'analyser la convergence du flux à partir des écarts obtenus entre les différents modèles de discrétisation.

Nous avons choisi d'étudier la convergence sur la barre de compensation comportant 4 crayons de cobalt (type 4) car c'est celle qui fait davantage varier le flux. Nous appliquerons ensuite la même discrétisation aux autres types de barres.

La stratégie que nous avons adoptée est de procéder en deux étapes. Étant donné que le flux varie plus particulièrement dans les régions où se trouvent le combustible et le mécanisme de réactivité, nous allons vérifier la convergence en discrétisant finement dans ces régions. Nous procédons ensuite à un calcul complet en 3D sans le mécanisme puis avec le mécanisme dans la librairie WINFRITH et ce, en employant la nouvelle méthodologie. On obtient ainsi les sections efficaces incrémentales de même que les constantes k_∞ .

4.2.1 La convergence du flux pour le combustible

L'étude de la convergence spatiale du flux pour le combustible s'effectue en appliquant la même discrétisation aux 2 grappes de la géométrie 3D tout en gardant une géométrie grossière pour le mécanisme de réactivité.

Pour le premier modèle, nous avons ajouté une région circulaire dans le modérateur autour du tube de calandre en raison de la variation du flux à cet endroit. En effet, il faut prendre en compte le fait qu'il y a des neutrons rapides provenant du combustible qui passent par cette région ainsi que des neutrons thermiques qui proviennent des autres canaux pour pénétrer dans le combustible. Nous avons également subdivisé la supercellule en 3 sections selon x dans les cellules contenant les grappes de combustible et 2 sections dans la cellule contenant le mécanisme. Selon l'axe des y et l'axe des z, la supercellule a été subdivisée en 4 sections. Il s'agit ici du modèle le plus grossier qui a généré 420 régions (figure 3.1).

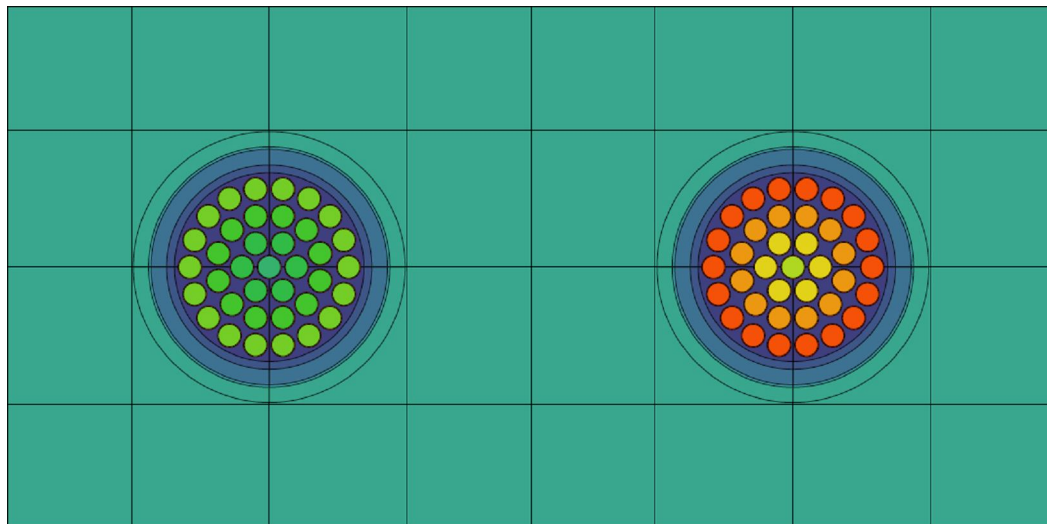


Figure 4.1: Vue de face du premier modèle (420 régions)

Pour le second modèle (figure 4.2), nous avons discrétisé radialement dans les crayons d'uranium soit 3 régions circulaires par crayon. En effet, le flux varie de façon importante dans les crayons car non seulement les neutrons y sont produits mais il y a des fuites vers le caloporteur. Nous supposons qu'en ajoutant 3 régions, la convergence du flux dans les crayons devrait être atteinte. Nous avons également délimité la frontière entre chaque crayon et le caloporteur ce qui a généré 4 régions circulaires supplémentaires dans le caloporteur. Nous avons gardé la même

discrétisation dans le modérateur que pour le premier modèle. Nous avons obtenu au total 580 régions.

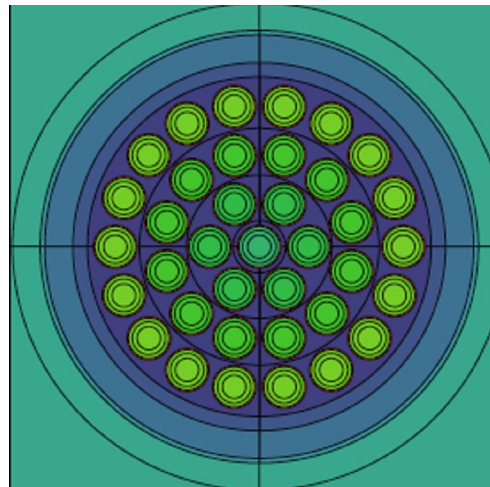


Figure 4.2: Vue de face du second modèle (580 régions)

Pour le troisième modèle, nous avons augmenté la discrétisation radiale dans le caloporteur (7 régions circulaires). La discrétisation dans les crayons et le modérateur n'ont pas été modifiées. Ce modèle a généré 676 régions et est présenté à la figure 4.3.

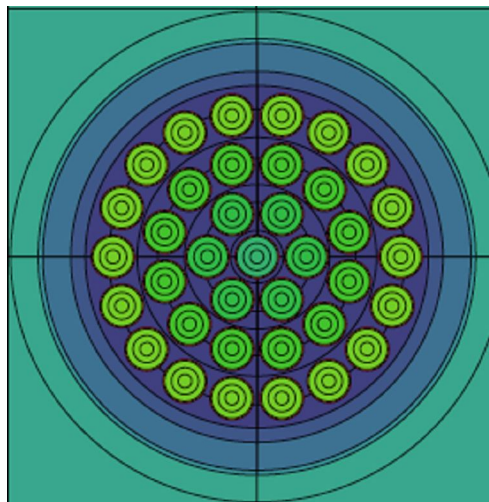


Figure 4.3: Vue de face du troisième modèle (676 régions)

Le « tracking » du premier modèle (figure 4.1) a été effectué en sélectionnant au départ une quadrature angulaire de 4 et une densité de 100 lignes/cm². L'erreur maximale sur les volumes

était alors de 1,54%. Nous avons ensuite gardé la même quadrature angulaire tout en augmentant la densité à 120 lignes/cm² ce qui a donné une erreur maximale de 2,95% sur les volumes. Nous avons recommencé le calcul avec une quadrature angulaire de 8 et une densité de 100 lignes/cm² puis 120 lignes/cm². Ce dernier choix est celui qui a permis d'obtenir une erreur maximale sur les volumes avoisinant les 1%. Nous avons utilisé ces mêmes paramètres pour les 3 modèles générés. Il est important de noter que tout au long de cette étude, il était nécessaire de faire un compromis entre le temps de calcul et la précision.

Le tableau 4.6 permet de comparer les temps de calcul associés à chacun des trois modèles que nous avons analysés avec le module NXT: et pour lesquels l'erreur maximale sur les volumes était acceptable (près de 1%).

Tableau 4.6 : Comparaison des temps de calcul (« CPU time ») pour les 3 modèles

Nombre de régions	Nombre d'angles	Densité (lignes/cm ²)	Temps de calcul (heures)
420	8	120	21
580	8	120	30,5
676	8	120	35

On remarque que le temps de calcul est d'environ 1 jour et demi pour le calcul à 676 régions avec les paramètres de « tracking » choisis.

Soulignons que l'optimisation des paramètres est parfois un exercice délicat car les calculs les plus détaillés ne sont pas toujours les plus précis. A chaque fois, nous nous sommes intéressés à l'écart des sections efficaces incrémentales et du k_{∞} avec la discrétisation précédente. Le tableau 4.7 présente les sections efficaces obtenues pour chacun des trois modèles de discrétisation avec la barre au cobalt complètement insérée (Σ_{IN}).

Tableau 4.7: Valeurs des sections efficaces Σ_{IN} (cm^{-1}) et de k_{∞} pour les 3 modèles

	420 régions	580 régions	676 régions
Σ_t^1	3,128E-01	3,129E-01	3,130E-01
$\nu\Sigma_f^1$	9,210E-04	9,178E-04	9,173E-04
$\Sigma_s^{1 \leftarrow 1}$	3,012E-01	3,013E-01	3,013E-01
$\Sigma_s^{1 \leftarrow 2}$	2,270E-06	2,226E-06	2,207E-06
Σ_t^2	4,195E-01	4,196E-01	4,196E-01
$\nu\Sigma_f^2$	4,868E-03	4,782E-03	4,747E-03
$\Sigma_s^{2 \leftarrow 1}$	9,786E-03	9,788E-03	9,789E-03
$\Sigma_s^{2 \leftarrow 2}$	4,148E-01	4,149E-01	4,150E-01
k_{∞}	0,941	0,938	0,937

On constate de manière générale que la discrétisation a pour effet de préciser les valeurs des sections efficaces. La discrétisation grossière a tendance à surestimer les valeurs dans le groupe rapide sauf pour la diffusion du groupe 1 vers le groupe 2 (ralentissement des neutrons) mais les variations sont tout de même très faibles. En calculant les écarts entre les trois modèles, on constate qu'ils sont de moins de 0.1% dans la majorité des cas sauf pour la section efficace de diffusion du groupe 2 vers le groupe 1 (« up-scattering ») et la fission dans le groupe 2. En effet, pour $\Sigma_s^{1 \leftarrow 2}$, la différence entre les deux premiers modèles est de près de 2% puis de 0,8% entre le deuxième et le troisième modèle. Il ne faut pas perdre de vue le fait que cette section efficace est de l'ordre de 10^{-6} ce qui fait que les écarts ne sont pas si représentatifs. Pour $\nu\Sigma_f^2$, l'écart relatif

entre les deux premiers modèles est d'environ 1,8% puis de 0,7% pour les modèles suivants. Soulignons que puisqu'on a discrétisé dans le combustible et le caloporteur, on s'attend à ce qu'il y ait des variations dans le calcul de la section efficace de fission thermique. Ceci s'explique par le fait que les neutrons thermiques provenant du modérateur reviennent dans le caloporteur pour atteindre les grappes de combustible dans lesquels ils sont absorbés et produisent la fission. Bien que les écarts des sections efficaces semblent faibles, il faut calculer les sections efficaces incrémentales pour juger de la convergence du flux avec nos 3 modèles. En ce qui concerne le k_∞ , l'écart est de 3 mk entre les deux premiers modèles puis d'environ 1 mk par la suite.

Il est à noter que les résultats obtenus pour les simulations en absence de mécanisme (Σ_{NO}) présentent les mêmes écarts entre les modèles ce qui va de soi étant donné que le mécanisme est le même dans les trois cas. Le tableau 4.8 présente les sections efficaces incrémentales calculées à partir de l'équation 3.1 et le tableau 4.9 présente les écarts relatifs.

Tableau 4.8: Valeurs des sections efficaces incrémentales $\Delta\Sigma$ (cm^{-1}) et de Δk_∞ (mk)

	420 régions	580 régions	676 régions
$\Delta\Sigma_t^1$	1,128E-03	1,128E-03	1,128E-03
$\Delta v\Sigma_f^1$	-6,828E-06	-6,798E-06	-6,802E-06
$\Delta\Sigma_s^{1 \leftarrow 1}$	9,209E-04	9,197E-04	9,191E-04
$\Delta\Sigma_s^{1 \leftarrow 2}$	1,120E-07	1,106E-07	1,100E-07
$\Delta\Sigma_t^2$	9,272E-05	9,668E-05	9,838E-05
$\Delta v\Sigma_f^2$	3,352E-05	3,334E-05	3,323E-05
$\Delta\Sigma_s^{2 \leftarrow 1}$	1,208E-04	1,217E-04	1,221E-04

$\Delta \Sigma_s^{2 \leftarrow 2}$	-4,527E-04	-4,487E-04	-4,470E-04
Δk_∞ (mk)	106,066	107,404	107,961

On peut voir que les sections efficaces incrémentales sont très petites par rapport aux sections efficaces correspondantes. En effet, la différence atteint jusqu'à trois ordres de grandeur pour la section efficace totale du groupe thermique! C'est pourquoi on dit que les $\Delta \Sigma$ sont une correction apportée aux sections efficaces pour tenir compte de l'effet du mécanisme de réactivité sur les cellules avoisinantes. Cet effet semble important lorsqu'on regarde la valeur de k_∞ . On remarque un écart de près de 106 mk entre le calcul avec mécanisme et le calcul sans mécanisme. Ceci signifie que la présence de la barre au cobalt diminue la réactivité de 106 mk dans la supercellule. Cette valeur semble très élevée à priori, surtout quand on sait que dans le réacteur les barres de compensation ont une valeur totale en réactivité de 15 mk (voir tableau 1.1). Il est important de ne pas perdre de vue que lorsqu'on effectue un calcul de supercellule, on suppose que le réacteur est infini, qu'il n'y a pas de fuites de neutrons (tous les neutrons sont réfléchis) et qu'il y a une barre de compensation entre chaque paire de grappes de combustible. Dans la réalité, le réacteur est fini, il y a des fuites de neutrons et il n'y a que 21 barres de compensation situées à des endroits bien spécifiques. Ces considérations prises en compte, la valeur de 106 mk n'est donc pas aussi représentative de la réalité mais elle sert d'indicateur lorsqu'il s'agit de comparer les effets de différents types de mécanismes.

Afin d'évaluer la convergence du flux, il nous faut calculer les écarts relatifs entre les sections efficaces incrémentales présentées au tableau 4.8 pour les différents modèles de discrétisation. Pour ce faire, nous devons tenir compte du fait que les $\Delta \Sigma$ sont des corrections qui sont apportées aux sections efficaces de cellule (Σ^{2D}) utilisées dans le calcul de cœur. Nous avons alors utilisé la formule suivante :

$$\text{Écart}(\%) = \left(\frac{\Sigma^{2D} + \Delta \Sigma^{\text{nouveau}} - (\Sigma^{2D} + \Delta \Sigma^{\text{ref}})}{(\Sigma^{2D} + \Delta \Sigma^{\text{ref}})} \right) \times 100 \quad (4.2)$$

Après simplification et en considérant que $\Delta\Sigma$ est petit par rapport à Σ^{2D} (voir tableaux 4.7 et 4.8), la formule devient :

$$\text{Écart}(\%) = \left(\frac{\Delta\Sigma^{\text{nouveau}} - \Delta\Sigma^{\text{ref}}}{\Sigma_{NO}^{\text{ref}}} \right) \times 100 \quad (4.3)$$

où $\Delta\Sigma^{\text{nouveau}}$ est la section efficace incrémentale obtenue pour la nouvelle discrétisation,

$\Delta\Sigma^{\text{ref}}$ est la section efficace incrémentale obtenue pour la discrétisation de référence et

Σ_{NO}^{ref} est la section efficace obtenue pour la discrétisation de référence en absence de mécanisme.

Pour ce qui est de l'écart entre les constantes k_{∞} de la nouvelle discrétisation par rapport à la discrétisation précédente, la formule utilisée est la suivante:

$$\Delta k_{\infty}(mk) = \left(k_{\infty}^{\text{nouveau}} - k_{\infty}^{\text{ref}} \right) \times 10^3 \quad (4.4)$$

Le tableau 4.9 présente les écarts calculés.

Tableau 4.9: Écarts relatifs (%) des sections efficaces incrémentales et Δk_∞ (mk)

	420 rég. et 580 rég.	580 rég. et 676 rég.
$\Delta \Sigma_t^1$	0,000	0,000
$\Delta v \Sigma_f^1$	0,003	0,000
$\Delta \Sigma_s^{1 \leftarrow 1}$	0,000	0,000
$\Delta \Sigma_s^{1 \leftarrow 2}$	-0,066	-0,028
$\Delta \Sigma_t^2$	0,001	0,000
$\Delta v \Sigma_f^2$	-0,004	-0,002
$\Delta \Sigma_s^{2 \leftarrow 1}$	0,010	0,004
$\Delta \Sigma_s^{2 \leftarrow 2}$	0,001	0,000
Δk_∞ (mk)	1,338	0,557

En observant les résultats obtenus, on constate que le critère de convergence est atteint pour les sections efficaces entre les modèles à 420 régions et 580 régions. En effet, l'écart maximal observé entre ces deux modèles est de -0.066% avec la section efficace de diffusion du groupe 2 vers le groupe 1, ce qui est en-dessous de 0.1%. De plus, on constate que les $\Delta \Sigma$ totales pour les deux groupes ne changent pas lorsqu'on augmente la discrétisation. On constate cependant que le critère de convergence pour la constante k_∞ n'a pas été atteint. L'écart obtenu entre les modèles à 580 régions et à 676 régions est de 0,557 mk. Cet écart est en fait la différence entre le Δk_∞ de la nouvelle discrétisation et celui de l'ancienne discrétisation. Il aurait donc fallu augmenter davantage la discrétisation pour atteindre le bon critère ce qui serait devenu coûteux en temps de

calcul. De plus, comme il a été mentionné précédemment, la valeur de k_{∞} est davantage présente à titre de comparaison dans notre cas et elle n'est pas utilisée au niveau du calcul de cœur.

À la lumière des résultats obtenus, nous concluons que la convergence du flux est atteinte pour le modèle à 420 régions. On peut donc conserver la discrétisation du combustible la plus grossière pour procéder à l'étude de la convergence spatiale pour le mécanisme de réactivité.

4.2.2 La convergence du flux pour la barre au cobalt de type 4

Pour la discrétisation de la barre de compensation comportant 4 crayons de cobalt, nous avons procédé de la même manière que pour le combustible. Le premier modèle est identique au modèle à 420 régions retenu à la section précédente. On représente alors le mécanisme dans sa géométrie exacte sans discrétisation. Ce modèle est présenté à la figure 4.4.

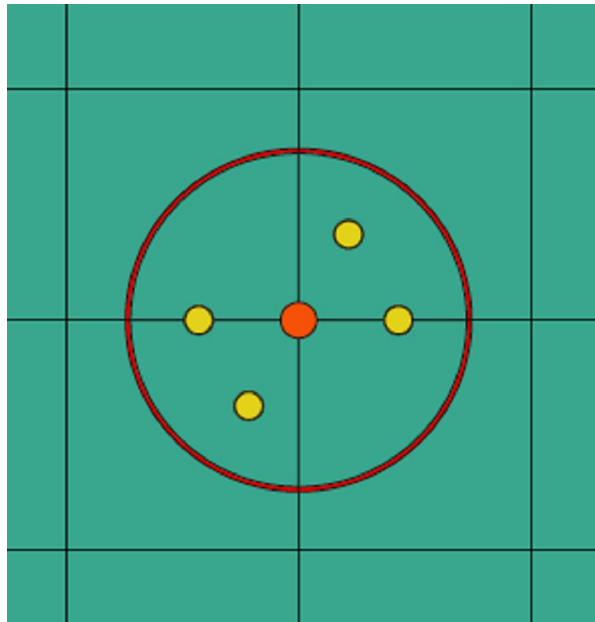


Figure 4.4: Vue de dessus du premier modèle (420 régions)

Pour le second modèle, nous avons subdivisé chaque crayon de cobalt en 2 régions annulaires car c'est là que s'effectue l'absorption des neutrons. Nous avons également ajouté une région annulaire dans la tige de support centrale en zirconium bien qu'elle absorbe peu les neutrons.

Ensuite, nous avons discrétisé radialement (4 régions annulaires) à l'intérieur du tube guide perforé contenant du modérateur et les crayons de cobalt. Finalement, nous avons ajouté 2 régions annulaires autour du mécanisme pour tenir compte des neutrons qui entrent mais aussi ceux qui en ressortent sans avoir été absorbés. Ce modèle, présenté à la figure 4.5, a généré en tout 536 régions.

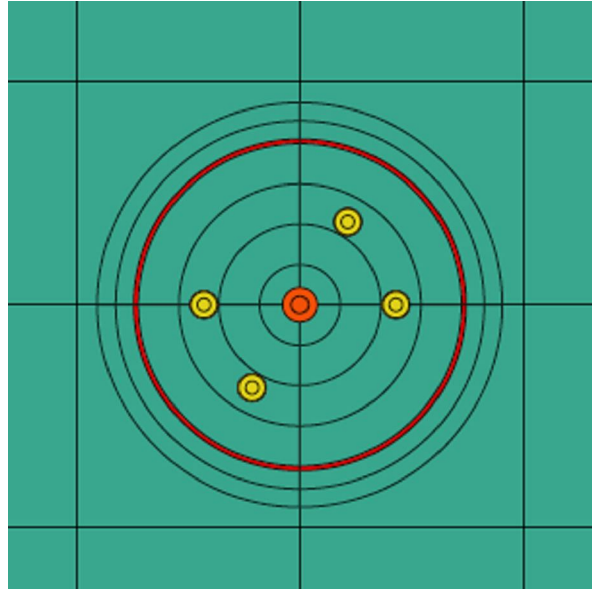


Figure 4.5: Vue de dessus du second modèle (536 régions)

Pour le troisième modèle, nous avons augmenté le nombre de régions dans le tube guide (7 régions annulaires) à proximité des crayons. Nous avons également ajouté une région annulaire autour du mécanisme. Nous n'avons pas discrétisé davantage à l'intérieur des crayons de cobalt car les dimensions radiales de ces crayons étant petites, il aurait fallu augmenter le « tracking » pour avoir une erreur acceptable sur ces petits volumes. Le troisième modèle a généré 616 régions.

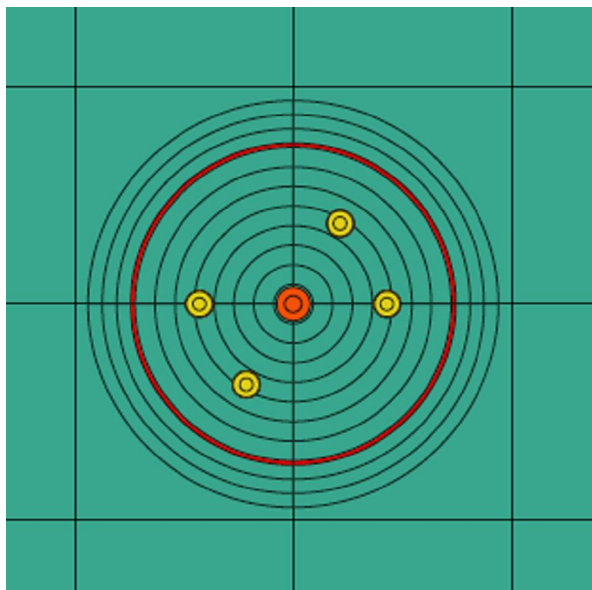


Figure 4.6: Vue de dessus du troisième modèle (616 régions)

Pour le premier modèle (420 régions), nous avons utilisé les mêmes paramètres de « tracking » que pour la discrétisation du combustible c'est-à-dire une quadrature angulaire de 8 et une densité de 100 lignes/cm². Pour les deux autres modèles, nous avons augmenté la densité à 300 lignes/cm² ce qui donne une erreur maximale de près de 1% sur les volumes. Le tableau 4.10 présente les temps de calcul pour chacun des modèles. Le calcul à 616 régions prenait environ 2 jours et 18 heures.

Tableau 4.10 : Comparaison des temps de calcul (« CPU time ») pour les 3 modèles

Nombre de régions	Nombre d'angles	Densité (lignes/cm ²)	Temps de calcul (heures)
420	8	120	21
536	8	300	56,5
616	8	300	66

Nous avons effectué les calculs complets en 3D dans la librairie WINFRITH et avons obtenu les sections efficaces incrémentales ainsi que les constantes k_{∞} pour chacun des trois modèles. Le tableau 4.11 présente les sections efficaces obtenues pour les trois modèles de discrétisation de la barre au cobalt.

Tableau 4.11: Valeurs des sections efficaces Σ_{IN} (cm⁻¹) et de k_{∞} pour les 3 modèles

	420 régions	536 régions	616 régions
Σ_t^1	3,128E-01	3,128E-01	3,128E-01
$\nu\Sigma_f^1$	9,210E-04	9,213E-04	9,214E-04
$\Sigma_s^{1 \leftarrow 1}$	3,012E-01	3,011E-01	3,011E-01
$\Sigma_s^{1 \leftarrow 2}$	2,270E-06	2,268E-06	2,267E-06
Σ_t^2	4,195E-01	4,195E-01	4,195E-01
$\nu\Sigma_f^2$	4,868E-03	4,870E-03	4,870E-03
$\Sigma_s^{2 \leftarrow 1}$	9,786E-03	9,780E-03	9,780E-03
$\Sigma_s^{2 \leftarrow 2}$	4,148E-01	4,148E-01	4,148E-01
k_{∞}	0,941	0,944	0,945

En observant les résultats, on constate que les sections efficaces varient quelque peu entre le modèle à 420 régions et celui à 536 régions mais très peu entre le modèle à 536 régions et à 616 régions. Les écarts observés entre les deux premiers modèles sont très faibles soit tous inférieurs à 0.1%. On remarque que les sections efficaces de fission dans les deux groupes varient quelque

peu entre le 2^e et le 3^e modèle. Ceci démontre que la discrétisation du mécanisme a un impact sur le taux de fission puisque les neutrons pénétrant dans le tube guide et qui sont absorbés sont perdus et ne peuvent plus participer à la fission. On remarque également une légère variation de la section efficace de diffusion du groupe 1 vers le groupe 2 entre les deux premiers modèles ce qui peut s'expliquer par le fait que les neutrons peuvent être ralentis autour du mécanisme mais également à l'intérieur du tube guide car celui-ci contient du modérateur. Les variations dans les résultats, y compris k_{∞} , se situent donc entre les deux premiers modèles. Le tableau 4.12 présente les sections efficaces incrémentales obtenues.

Tableau 4.12 : Valeurs des sections efficaces incrémentales $\Delta\Sigma$ (cm⁻¹) et de Δk_{∞} (mk)

	420 régions	536 régions	616 régions
$\Delta\Sigma_t^1$	1,128E-03	1,099E-03	1,096E-03
$\Delta v\Sigma_f^1$	-6,828E-06	-6,557E-06	-6,514E-06
$\Delta\Sigma_s^{1 \leftarrow 1}$	9,209E-04	8,990E-04	8,972E-04
$\Delta\Sigma_s^{1 \leftarrow 2}$	1,120E-07	1,099E-07	1,095E-07
$\Delta\Sigma_t^2$	9,272E-05	7,743E-05	7,588E-05
$\Delta v\Sigma_f^2$	3,352E-05	3,660E-05	3,702E-05
$\Delta\Sigma_s^{2 \leftarrow 1}$	1,208E-04	1,156E-04	1,147E-04
$\Delta\Sigma_s^{2 \leftarrow 2}$	-4,527E-04	-4,513E-04	-4,502E-04
Δk_{∞} (mk)	106,066	102,514	101,979

On constate de manière générale que la discrétisation grossière a tendance à surestimer les résultats. Bien que les sections efficaces obtenues au tableau 4.11 ne présentaient pas de variations notables entre les différents modèles, on se rend compte que ces variations ne pouvaient être visibles qu'à l'échelle de grandeur des $\Delta\Sigma$. Le tableau 4.13 présente les écarts calculés à l'aide des formules 4.3 et 4.4.

Tableau 4.13 : Écarts relatifs (%) des sections efficaces incrémentales et Δk_∞ (mk)

	420 rég. et 536 rég.	536 rég. et 616 rég.
$\Delta\Sigma_t^1$	-0,009	-0,001
$\Delta v\Sigma_f^1$	0,029	0,005
$\Delta\Sigma_s^{1\leftarrow 1}$	-0,007	-0,001
$\Delta\Sigma_s^{1\leftarrow 2}$	-0,097	-0,017
$\Delta\Sigma_t^2$	-0,004	0,000
$\Delta v\Sigma_f^2$	0,064	0,009
$\Delta\Sigma_s^{2\leftarrow 1}$	-0,054	-0,009
$\Delta\Sigma_s^{2\leftarrow 2}$	0,000	0,000
Δk_∞ (mk)	-3,552	-0,535

On constate que le critère de convergence des $\Delta\Sigma$ est atteint pour la discrétisation entre les modèles à 536 régions et 616 régions. L'écart maximal observé est de -0.017% avec la section efficace de diffusion du groupe 2 vers le groupe 1. Les autres valeurs varient très peu entre les

deux derniers modèles ce qui reflète bien la tendance observée avec les sections efficaces (voir tableau 4.11). Toutefois, on remarque que la convergence n'est pas atteinte pour la constante k_{∞} . On observe un écart de -0,535 mk entre la géométrie à 536 régions et celle à 616 régions. En vertu des considérations mentionnées précédemment, on considère que l'écart observé pour le k_{∞} n'aura pas un très grand impact dans la géométrie globale du cœur. On considère donc que le modèle à 616 régions correspond au modèle pour lequel on atteint la convergence spatiale du flux.

Le fait d'avoir traité le problème de convergence spatiale en deux étapes nous a évité de générer trop de régions à la fois de telle sorte que la méthode des probabilités de collision n'aurait plus été efficace pour effectuer les calculs. Dans ce cas, il aurait alors été nécessaire d'utiliser la méthode des caractéristiques qui est la plus appropriée lorsqu'on a un problème avec un nombre très élevé de régions. Il est important de mentionner que les temps de calcul auraient été beaucoup plus longs dans ce cas.

4.3 Comparaison des résultats du modèle annulaire et du modèle exact

4.3.1 Comparaison des modèles dans DRAGON 3.06

Suite à l'étude de la convergence spatiale du flux, on conclut que le modèle à 616 régions pour la barre au cobalt de type 4 est celui que nous allons retenir pour les calculs subséquents. Nous avons donc effectué les simulations complètes en 3D avec cette même discrétisation pour les autres types de barres au cobalt dans la nouvelle méthodologie. Nous avons également conservé les mêmes paramètres de « tracking ». Nous pouvons ainsi comparer les résultats obtenus dans l'ancienne méthodologie et ceux de la nouvelle méthodologie.

La première comparaison à effectuer se situe au niveau des grappes de combustible dans la supercellule. Comme il a été expliqué à la section 3.2, dans la méthodologie de référence, on effectuait une étape de pré-homogénéisation de la cellule 2D en 4 régions équivalentes avant le

calcul 3D. Cette étape n'étant pas nécessaire dans la nouvelle méthodologie, on peut comparer les résultats obtenus dans les deux cas en absence de mécanisme de réactivité. Ces résultats sont présentés au tableau 4.14.

Tableau 4.14 : Comparaison des Σ_{NO} des modèles annulaire et exact (cm^{-1}) ainsi que de k_{∞} ,

ENDF-B/V et WINFRITH

	Modèle Exact ENDF-B/V	Modèle annulaire ENDF-B/V	Écarts	Modèle Exact WINFRITH	Modèle annulaire WINFRITH	Écarts
Σ_t^1	3,1453E-01	3,1342E-01	0,354 %	3,1171E-01	3,1066E-01	0,338 %
$\nu\Sigma_f^1$	9,3030E-04	9,1936E-04	1,190 %	9,2786E-04	9,1826E-04	1,045 %
$\Sigma_s^{1 \leftarrow 1}$	3,0291E-01	3,0182E-01	0,361 %	3,0024E-01	2,9921E-01	0,344 %
$\Sigma_s^{1 \leftarrow 2}$	4,1446E-06	4,4713E-06	-7,307 %	2,1576E-06	2,3468E-06	-8,062 %
Σ_t^2	4,3036E-01	4,2737E-01	0,700 %	4,1945E-01	4,1702E-01	0,583 %
$\nu\Sigma_f^2$	4,8423E-03	5,1358E-03	-5,715 %	4,8330E-03	5,1193E-03	-5,593 %
$\Sigma_s^{2 \leftarrow 1}$	9,8019E-03	9,7745E-03	0,280 %	9,6647E-03	9,6329E-03	0,330 %
$\Sigma_s^{2 \leftarrow 2}$	4,2611E-01	4,2286E-01	0,769 %	4,1525E-01	4,1257E-01	0,650 %
k_{∞}	1,039787	1,036607	0,307 mk	1,047032	1,044092	0,282 mk

Les écarts relatifs entre les sections efficaces sont calculés à l'aide de la formule suivante :

$$\text{Écart}(\%) = \frac{(\Sigma^{\text{exact}} - \Sigma^{\text{annulaire}})}{\Sigma^{\text{annulaire}}} \times 100 \quad (4.5)$$

Les écarts entre les constantes k_{∞} sont calculés à l'aide de la formule 4.4.

En observant le tableau 4.14, on constate que les deux bibliothèques utilisées donnent des résultats assez similaires.

On constate également que les écarts relatifs entre les sections efficaces des deux modèles sont inférieurs à 1% sauf pour la section efficace de diffusion du groupe 2 vers le groupe 1 (« up-scattering ») ainsi que la section efficace de fission thermique. En effet, pour $\Sigma_s^{1 \leftarrow 2}$, l'écart est de -7,307 % dans la bibliothèque ENDF-B/V et de -8,062 % dans la bibliothèque WINFRITH. Étant donné que cette section efficace est de l'ordre de 10^{-6} , ces variations ne sont pas significatives. Pour ce qui est de la fission thermique, on observe un écart de -5,715 % dans ENDF-B/V et -5,593 % dans WINFRITH. Ceci démontre que le modèle annulaire surestime la valeur de la section efficace de fission thermique ce qui est prévisible dans la mesure où le combustible et le caloporteur sont homogénéisés en une seule région. Pour ce qui est de la constante k_∞ , on observe un écart de 0,307 mk pour la bibliothèque ENDF-B/V et de 0,282 mk pour la bibliothèque WINFRITH ce qui est relativement faible. On peut donc affirmer que l'approximation du modèle annulaire donne des résultats qui ne sont pas très éloignés de ceux de la géométrie exacte.

Les tableaux 4.15 et 4.16 présentent les valeurs des sections efficaces et de la constante k_∞ pour les 4 types de barres au cobalt et ce dans les deux modèles de géométrie pour la bibliothèque ENDF-B/V.

Tableau 4.15 : Comparaison des Σ_{IN} des modèles annulaire et exact (cm^{-1}) ainsi que de k_∞ ,

ENDF-B/V

	Cobalt1 (Exact)	Cobalt1 (Annulaire)	Cobalt2 (Exact)	Cobalt2 (Annulaire)	Cobalt3 (Exact)	Cobalt3 (Annulaire)	Cobalt4 (Exact)	Cobalt4 (Annulaire)
Σ_t^1	3,1477E-01	3,1360E-01	3,1501E-01	3,1379E-01	3,1522E-01	3,1398E-01	3,1543E-01	3,1416E-01
$\nu\Sigma_f^1$	9,2808E-04	9,1732E-04	9,2634E-04	9,1590E-04	9,2484E-04	9,1448E-04	9,2361E-04	9,1313E-04
$\Sigma_s^{1 \leftarrow 1}$	3,0309E-01	3,0196E-01	3,0327E-01	3,0211E-01	3,0345E-01	3,0225E-01	3,0362E-01	3,0240E-01

$\Sigma_s^{1 \leftarrow 2}$	4,2221E-06	4,5360E-06	4,2816E-06	4,5860E-06	4,3348E-06	4,6363E-06	4,3782E-06	4,6853E-06
Σ_t^2	4,3040E-01	4,2710E-01	4,3033E-01	4,2707E-01	4,3022E-01	4,2699E-01	4,3014E-01	4,2691E-01
$\nu\Sigma_f^2$	4,8538E-03	5,1405E-03	4,8634E-03	5,1449E-03	4,8723E-03	5,1495E-03	4,8791E-03	5,1541E-03
$\Sigma_s^{2 \leftarrow 1}$	9,8450E-03	9,8002E-03	9,8816E-03	9,8317E-03	9,9093E-03	9,8593E-03	9,9306E-03	9,8852E-03
$\Sigma_s^{2 \leftarrow 2}$	4,2599E-01	4,2246E-01	4,2577E-01	4,2231E-01	4,2554E-01	4,2211E-01	4,2537E-01	4,2192E-01
k_∞	1,005622	1,011012	0,979084	0,988893	0,957806	0,968651	0,940985	0,949962

Tableau 4.16 : Comparaison des Σ_{IN} des modèles annulaire et exact (cm^{-1}) ainsi que de k_∞ ,

WINFRITH

	Cobalt1 (Exact)	Cobalt1 (Annulaire)	Cobalt2 (Exact)	Cobalt2 (Annulaire)	Cobalt3 (Exact)	Cobalt3 (Annulaire)	Cobalt4 (Exact)	Cobalt4 (Annulaire)
Σ_t^1	3,1201E-01	3,1088E-01	3,1229E-01	3,1110E-01	3,1256E-01	3,1133E-01	3,1281E-01	3,1155E-01
$\nu\Sigma_f^1$	9,2571E-04	9,1624E-04	9,2402E-04	9,1486E-04	9,2255E-04	9,1346E-04	9,2135E-04	9,1214E-04
$\Sigma_s^{1 \leftarrow 1}$	3,0048E-01	2,9939E-01	3,0070E-01	2,9957E-01	3,0092E-01	2,9975E-01	3,0114E-01	2,9993E-01
$\Sigma_s^{1 \leftarrow 2}$	2,1963E-06	2,3808E-06	2,2230E-06	2,4034E-06	2,2474E-06	2,4270E-06	2,2671E-06	2,4500E-06
Σ_t^2	4,1966E-01	4,1688E-01	4,1962E-01	4,1688E-01	4,1956E-01	4,1685E-01	4,1953E-01	4,1681E-01
$\nu\Sigma_f^2$	4,8445E-03	5,1243E-03	4,8541E-03	5,1290E-03	4,8632E-03	5,1339E-03	4,8701E-03	5,1390E-03
$\Sigma_s^{2 \leftarrow 1}$	9,7037E-03	9,6552E-03	9,7364E-03	9,6832E-03	9,7609E-03	9,7076E-03	9,7795E-03	9,7303E-03

$\Sigma_s^{2 \leftarrow 2}$	4,1528E-01	4,1230E-01	4,1511E-01	4,1218E-01	4,1493E-01	4,1203E-01	4,1480E-01	4,1189E-01
k_∞	1,012039	1,018059	0,984687	0,995482	0,962609	0,974738	0,945054	0,955549

Il est important de préciser que le modèle exact associé à la nouvelle méthodologie est celui où la supercellule c'est-à-dire les grappes de combustible et le mécanisme sont représentés dans la géométrie exacte (« clusters »). Le modèle annulaire associé à la méthodologie de référence est celui où la supercellule (combustible et mécanisme) est représentée en géométrie annulaire. Ainsi, les résultats du modèle annulaire présentés dans les deux tableaux précédents représentent le mécanisme annulaire inséré entre deux canaux de combustible annulaire. De la même manière, les résultats du modèle exact représentent le mécanisme exact inséré entre deux canaux de combustible en géométrie exacte.

En observant les deux tableaux précédents on remarque les éléments suivants :

- La section efficace de fission rapide diminue à mesure que l'on augmente le nombre de crayons dans la barre au cobalt. Cette section efficace représente la probabilité que des neutrons rapides se trouvant dans le combustible soient absorbés par l' U^{238} et engendrent une fission.
- La section efficace de fission thermique augmente à mesure que l'on augmente le nombre de crayons de cobalt. Étant donné que la fission est le phénomène qui suit l'absorption de neutrons c'est-à-dire qu'un neutron thermique absorbé peut engendrer la fission, cette section efficace est directement liée à la section efficace d'absorption (voir section 2.1). Aussi, comme il a été mentionné précédemment, les barres au cobalt ont pour fonction d'absorber les neutrons thermiques de sorte que la section efficace d'absorption dans le groupe 2 augmente en fonction du nombre de crayons de cobalt. La section efficace de fission thermique augmente parce que l'absorption de ces neutrons augmente. Mais il faut souligner qu'en fait, malgré cette augmentation, il y a moins de fissions qui se produisent puisque les neutrons sont perdus.
- La section efficace de diffusion dans le groupe rapide augmente tout comme la section efficace de diffusion du groupe 2 vers le groupe 1. On constate également que la section efficace de diffusion du groupe 1 vers le groupe 2 augmente tandis ainsi que la section

efficace de diffusion dans le groupe 2 diminue à mesure que le nombre de crayons de cobalt augmente. Ces effets sont reliés au fait qu'il y a une diminution de neutrons thermiques dans le réacteur dû à la présence du mécanisme de réactivité.

- Le facteur de multiplication infini diminue en fonction de l'augmentation du nombre de barres. Il s'agit du résultat attendu puisque l'absorption des neutrons par le mécanisme contribue à diminuer la réactivité dans le réacteur.

Il est à noter que ces observations sont valables pour les deux modèles (annulaire et exact) ainsi que les deux bibliothèques (ENDF-B/V et WINFRITH).

Avant de comparer les deux modèles de géométrie pour les barres au cobalt, rappelons que la géométrie annulaire est celle dans laquelle on a procédé à une « cylindrisation » de la géométrie exacte (voir section 3.2.2). Ainsi, un neutron pénétrant dans le mécanisme annulaire voit une plus faible densité de cobalt mais sur une plus grande distance alors que dans le modèle exact cette densité est beaucoup plus grande sur une plus petite distance. De plus, un neutron pénétrant dans le mécanisme annulaire n'a pas le choix que de rencontrer du cobalt sur son chemin ce qui n'est pas le cas pour la géométrie exacte. En effet, puisque ce sont des grappes disposées à des endroits spécifiques, le neutron peut ressortir du mécanisme sans croiser de cobalt et n'est donc pas absorbé. Ces considérations sont à prendre en compte dans l'interprétation des résultats.

En comparant les écarts observés entre les deux modèles, on constate les éléments suivants pour les deux bibliothèques:

- La section efficace de fission rapide est plus élevée pour le modèle exact avec un écart maximal de 1,173% (barre de type 1).
- La section efficace de diffusion dans le groupe rapide est plus élevée pour le modèle exact avec un écart maximal de 0,403% (barre de type 4).
- La section efficace de diffusion du groupe 2 vers le groupe 1 est plus élevée pour le modèle annulaire avec un écart maximal de -6,920% (barre de type 1).
- La section efficace de fission thermique est plus élevée pour le modèle annulaire avec un écart maximal de -5,577% (barre de type 1).
- La section efficace de diffusion du groupe 1 vers le groupe 2 est plus élevée pour le modèle exact avec un écart maximal de 0,508% (barre de type 2).

- La section efficace de diffusion dans le groupe 2 est plus élevée pour le modèle exact avec un écart maximal de 0,836% (barre de type 1).
- Le facteur de multiplication infini est plus élevé dans le modèle annulaire avec un écart maximal de -1,135% (barre de type 3).

Les écarts mentionnés sont ceux de la bibliothèque ENDF-B/V. On obtient sensiblement les mêmes résultats pour la bibliothèque WINFRITH. On constate que les valeurs ne sont pas très élevées soit près de 1% et moins excepté pour la fission thermique et la diffusion du groupe 2 vers le groupe 1. Les valeurs du facteur de multiplication infini montrent que l'on sous-estime la valeur de la réactivité du mécanisme avec le modèle annulaire (25.6 mk versus 34.2 mk pour le modèle Cobalt1). Le modèle exact donne donc des valeurs plus précises.

Comme il a déjà été mentionné, dans le calcul de cœur ce ne sont pas les Σ_{IN} qui sont pris en compte pour corriger les sections efficaces de cellule mais bien les $\Delta\Sigma$. On va donc s'intéresser à la différence entre les $\Delta\Sigma$ engendrés par les deux modèles. Les tableaux 4.17 et 4.18 présentent les écarts entre ces résultats pour les bibliothèques ENDF-B/V et WINFRITH respectivement. Il est à noter que les écarts relatifs des $\Delta\Sigma$ ont été calculés à l'aide de la formule 4.5 et ceux de la constante k_{∞} à l'aide de la formule 4.4.

Tableau 4.17 : Écarts relatifs (%) des sections efficaces incrémentales et Δk_{∞} (mk), ENDF-B/V

	Cobalt1	Cobalt2	Cobalt3	Cobalt4
$\Delta\Sigma_t^1$	37,606	30,460	26,220	22,635
$\Delta\nu\Sigma_f^1$	8,627	14,244	11,753	7,199
$\Delta\Sigma_s^{1\leftarrow 1}$	33,284	29,285	26,575	24,353
$\Delta\Sigma_s^{1\leftarrow 2}$	19,747	19,442	15,142	9,108
$\Delta\Sigma_t^2$	-117,936	-89,807	-64,183	-53,681
$\Delta\nu\Sigma_f^2$	147,695	132,878	119,388	98,811

$\Delta\Sigma_s^{2\leftarrow 1}$	67,782	39,343	26,694	16,050
$\Delta\Sigma_s^{2\leftarrow 2}$	-69,118	-37,842	-23,865	-20,770
Δk_∞ (mk)	8,570	12,990	-34,268	14,027

Tableau 4.18 : Écarts relatifs (%) des sections efficaces incrémentales et Δk_∞ (mk), WINFRITH

	Cobalt1	Cobalt2	Cobalt3	Cobalt4
$\Delta\Sigma_t^1$	35,554	29,788	25,885	22,090
$\Delta v\Sigma_f^1$	6,640	12,842	10,625	6,264
$\Delta\Sigma_s^{1\leftarrow 1}$	31,657	28,512	25,808	22,971
$\Delta\Sigma_s^{1\leftarrow 2}$	14,063	15,711	11,997	6,105
$\Delta\Sigma_t^2$	-245,602	-219,276	-165,306	-135,911
$\Delta v\Sigma_f^2$	129,816	116,602	105,031	86,687
$\Delta\Sigma_s^{2\leftarrow 1}$	74,608	42,383	28,663	17,605
$\Delta\Sigma_s^{2\leftarrow 2}$	-114,118	-64,505	-41,256	-33,471
Δk_∞ (mk)	8,960	13,735	-35,814	15,071

Il est important de noter que les variations présentées sont celles calculées entre les $\Delta\Sigma$ du modèle exact et du modèle annulaire. En observant les deux tableaux précédents, on remarque

que les écarts entre les deux modèles sont beaucoup plus élevés dans le domaine des neutrons thermiques. Autrement dit, le groupe thermique est fortement influencé par la nouvelle modélisation de la barre au cobalt ce qui est prévisible dans la mesure où le mécanisme absorbe les neutrons thermiques. Comme il a déjà été mentionné, la section efficace de fission du groupe 2 semble la plus affectée par la modélisation de la super cellule puisqu'elle présente les plus grands écarts avec une valeur maximale de 147,695% pour la barre de type 1. Ici la valeur de l'écart semble très élevée comparativement à ce qui était observé dans les tableaux précédents en raison de l'ordre de grandeur des $\Delta\Sigma$ qui sont beaucoup plus petits que les Σ . On peut voir également que le modèle annulaire a tendance à surestimer $\Delta\Sigma$, dans le groupe thermique.

On constate également que les écarts entre les deux modèles diminuent à mesure que l'on augmente le nombre de crayons au cobalt. Étant donné que les crayons sont disposés à égale distance sur une même circonférence, plus on augmente le nombre de crayons dans le modèle exact, plus le modèle s'apparente au modèle annulaire où le cobalt est distribué uniformément sur une région annulaire (voir figure 3.9).

De manière générale, on peut affirmer que les différences entre les $\Delta\Sigma$ obtenus pour les deux modèles semblent élevées. De plus, les écarts entre les valeurs en réactivité se situent environ entre 9 mk et -35 mk pour les deux bibliothèques. Afin de vérifier jusqu'à quel point les écarts observés entre les deux modèles sont significatifs, nous avons procédé à un calcul de diffusion sur le cœur complet avec ces modèles. Les résultats obtenus sont présentés à la section suivante.

4.3.2 Comparaison des modèles dans DONJON

La dernière étape de ce projet est en fait une étape de vérification permettant de juger de l'écart réel qu'engendrent les deux modèles de mécanisme au niveau du réacteur. Pour cela, nous avons généré les fichiers COMPO créés à l'aide du module CPO : dans DRAGON pour le modèle annulaire et le modèle exact dans la bibliothèque ENDF-B/V. Ces fichiers contiennent les propriétés 2D ainsi que les deux séries de propriétés homogénéisées sur la super cellule et condensées à deux groupes qui ont été générées à partir du calcul de transport.

Nous nous sommes servis des procédures DONJON créées pour le réacteur CANDU-6 [8]. Puisque ces fichiers modélisent le réacteur complet avec les anciennes barres de compensation en acier, nous avons dû remplacer les dimensions et les mélanges par celles des barres au cobalt.

Notons qu'en fait les positions des barres n'ont pas changé en x et en z mais que la longueur en y est différente. Une même barre au cobalt voit son nombre de crayons varier sur la longueur. Dans le modèle de réacteur, les barres de compensation au cobalt sont insérées dans le réacteur.

Les simulations ont été réalisées en effectuant un calcul « time average ». Il s'agit d'une procédure itérative qui consiste à répéter toutes les étapes requises pour calculer la forme de puissance axiale. On répète les itérations jusqu'à ce que l'erreur relative entre deux formes de puissance successives soit aussi petite que possible selon le critère de précision spécifié par l'utilisateur. On a effectué tout d'abord un calcul complet pour les barres de compensation du modèle annulaire jusqu'à l'obtention des deux valeurs du « burnup » pour lesquelles $k_{eff} = 1$. On obtient alors les puissances de grappe de tous les plans en z pour le modèle annulaire. Par la suite, on efface et on reconstruit la géométrie du réacteur avec les propriétés du modèle exact. On se sert des valeurs de « burnup » trouvées précédemment pour calculer les puissances de grappe associées au modèle exact ainsi que la valeur de k_{eff} correspondante.

Tableau 4.19 : Comparaison de k_{eff} pour le modèle annulaire et le modèle exact

k_{eff} modèle annulaire	k_{eff} modèle exact	Δk_{eff} (mk)
0,9999998 ⁴	0,9981928	-1,807

On constate que l'écart en réactivité (formule 4.4) entre les deux modèles est de 1,8 mk ce qui représente environ 12% de la valeur totale en réactivité des barres de compensation dans le réacteur. Voyons ce qu'il en est de l'effet local avec les puissances de grappes.

La position normale des barres de compensation est d'être complètement insérées dans les régions centrales du cœur car c'est là que le flux est le plus élevé. Elles contribuent donc à aplanir

⁴ Cette valeur est imposée par le calcul « time average » effectué dans DONJON.

la forme de flux en absorbant les neutrons thermiques dans les directions axiales (en z) et radiales (en x et y). La figure 4.7 illustre cet effet des barres de compensation sur la distribution du flux.

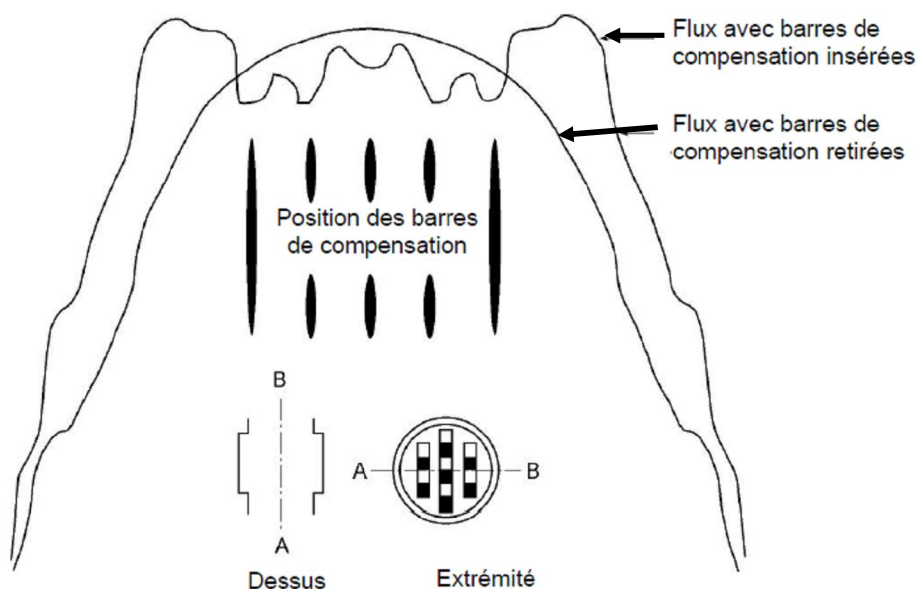


Figure 4.7: Effet des barres de compensation sur la forme de flux dans le réacteur

Grâce aux informations transmises par Hydro-Québec, nous avons été en mesure de connaître la description exacte des 21 barres de compensation dans le cœur. Elles sont positionnées sur 3 plans en z chacun comprenant 7 barres. Nous avons donc sélectionné 2 des plans en z car par symétrie axiale, le troisième plan présente des puissances de grappes identiques au premier. Les figures 4.8 et 4.9 présentent les puissances de grappes pour les plans $z = 5$ et $z = 6$.

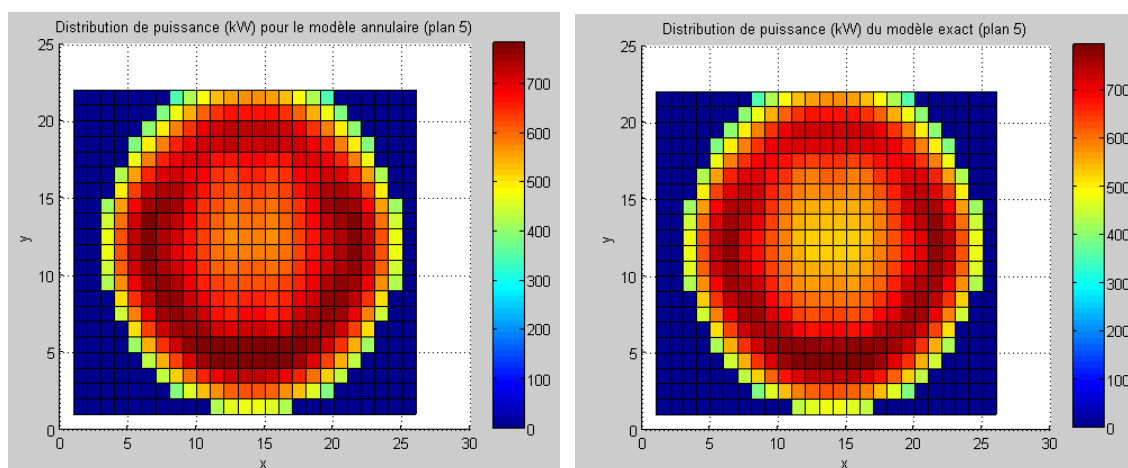


Figure 4.8: Comparaison des puissances de grappe pour les deux modèles dans le plan 5.

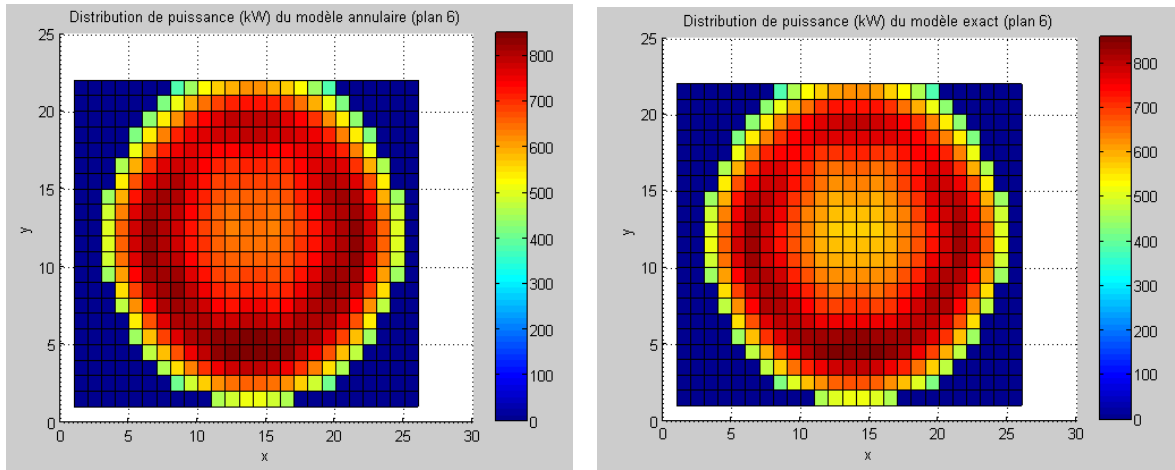


Figure 4.9: Comparaison des puissances de grappe pour les deux modèles dans le plan 6.

Les deux figures montrent que les puissances des grappes placées en périphérie ne sont pas très affectées par les modèles de représentation des barres. On observe plutôt une différence dans les régions du centre. En effet, le mécanisme représenté en géométrie exacte permet de réduire davantage la puissance dans ces régions. Afin de quantifier la différence entre les deux modèles, nous avons représenté dans les figures 4.9 et 4.10 les écarts relatifs des puissances de grappe pour les deux plans. Ces écarts ont été calculés à partir de la formule suivante :

$$\acute{E}cart(\%) = \frac{(P^{exact} - P^{annulaire})}{P^{annulaire}} \times 100 \quad (4.6)$$

	01	02	03	04	05	06	07	08	09	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	
A									3	3	3	3	3	3									A
B						3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3						B
C					3	3	3	2	2	2	2	2	2	2	2	3	3	3					C
D				3	2	2	2	2	1	1	1	1	1	1	2	2	2	2	3				D
E			2	2	2	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	1	1	2	2	2			E
F			2	2	1	0	-1	-2	-2	-3	-3	-3	-3	-2	-2	-1	0	1	2	2			F
G		2	2	1	1	-1	-3	-4	-4	-5	-5	-5	-5	-4	-4	-3	-1	1	1	2	2		G
H		2	2	1	0	-2	-4	-5	-6	-6	-7	-7	-6	-6	-5	-4	-2	0	1	2	2		H
J	2	2	1	0	-1	-3	-5	-6	-7	-8	-8	-8	-7	-7	-6	-5	-3	-1	0	1	2	2	J
K	2	2	1	0	-2	-4	-6	-7	-8	-8	-9	-9	-8	-8	-7	-6	-4	-2	0	1	2	2	K
L	2	1	1	-1	-3	-5	-6	-7	-8	-9	-9	-9	-9	-8	-7	-6	-5	-3	-1	1	1	2	L
M	2	1	1	-1	-3	-5	-6	-8	-8	-9	-9	-9	-9	-8	-7	-6	-5	-3	-1	1	2	2	M
N	2	2	1	-1	-3	-4	-6	-7	-8	-9	-9	-9	-9	-8	-7	-6	-4	-3	0	1	2	2	N
O	2	2	1	0	-1	-3	-5	-6	-7	-8	-8	-8	-8	-7	-6	-5	-3	-1	0	1	2	2	O
P		2	1	1	-1	-2	-4	-6	-7	-7	-7	-7	-7	-6	-6	-4	-2	-1	1	1	2		P
Q		2	1	1	0	-1	-3	-4	-5	-6	-6	-6	-6	-5	-4	-3	-1	0	1	1	2		Q
R			2	1	1	0	-2	-2	-3	-3	-4	-4	-3	-3	-2	-2	0	1	1	2			R
S			2	2	1	1	0	0	-1	-1	-1	-1	-1	-1	0	0	1	1	2	2			S
T				2	2	2	1	1	1	1	0	0	1	1	1	1	2	2	2				T
U					2	2	2	2	2	2	1	2	2	2	2	2	2	2					U
V						2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2						V
W									3	3	3	3	3	3									W
	01	02	03	04	05	06	07	08	09	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	

Figure 4.10: Écart relatifs (%) des puissances de grappe entre les deux modèles dans le plan 5

	01	02	03	04	05	06	07	08	09	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	
A									3	3	3	3	3	3									A
B						3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3							B
C					3	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	3					C
D				2	2	2	2	1	1	1	1	1	1	1	1	2	2	2	2				D
E			2	2	2	1	1	0	0	0	-1	-1	0	0	0	1	1	2	2	2			E
F			2	2	1	0	-1	-2	-3	-3	-3	-3	-3	-3	-2	-1	0	1	2	2			F
G		2	2	1	0	-1	-3	-4	-5	-5	-5	-5	-5	-5	-4	-3	-1	0	1	2	2		G
H		2	1	1	0	-2	-4	-5	-6	-7	-7	-7	-7	-6	-5	-4	-2	0	1	1	2		H
J	2	1	1	0	-1	-3	-5	-6	-7	-8	-9	-9	-8	-7	-6	-5	-3	-1	0	1	1	2	J
K	2	1	1	-1	-2	-4	-6	-7	-8	-9	-9	-9	-9	-8	-7	-6	-4	-2	-1	1	1	2	K
L	2	1	0	-1	-3	-5	-7	-8	-9	-9	-10	-10	-9	-9	-8	-7	-5	-3	-1	0	1	2	L
M	2	1	0	-1	-3	-5	-6	-8	-9	-10	-10	-10	-10	-9	-8	-7	-5	-3	-1	0	1	2	M
N	2	1	1	-1	-3	-4	-6	-7	-9	-9	-10	-10	-9	-9	-7	-6	-4	-3	-1	0	1	2	N
O	2	1	1	0	-2	-3	-5	-7	-8	-8	-9	-9	-8	-8	-7	-5	-3	-2	0	1	1	2	O
P		1	1	0	-1	-2	-4	-6	-7	-7	-8	-8	-7	-7	-6	-4	-2	-1	0	1	1		P
Q		2	1	1	0	-1	-3	-4	-5	-6	-6	-6	-6	-5	-4	-3	-1	0	1	1	2		Q
R			1	1	0	-1	-2	-3	-3	-4	-4	-4	-4	-3	-3	-2	-1	0	1	2			R
S			2	1	1	0	0	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	0	0	1	1	2			S
T				2	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	2				T
U					2	2	2	2	1	1	1	1	1	1	2	2	2	2					U
V						2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2						V
W									2	2	2	2	2	2									W
	01	02	03	04	05	06	07	08	09	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	

Figure 4.11: Écart relatifs (%) des puissances de grappe entre les deux modèles dans le plan 6

On constate dans les deux plans que les écarts relatifs diminuent dans les régions en périphérie jusqu'à un maximum de 3%. Par contre, ils augmentent dans les régions centrales jusqu'à un maximum de -9% pour le plan 5 et -10% pour le plan 6. Les valeurs négatives indiquent que la puissance est plus faible pour le modèle exact. Ainsi, l'écart entre les deux modèles est plus prononcé dans les régions où la puissance est plus élevée. On doit donc prendre en compte ces différences lorsqu'on veut représenter les mécanismes dans le cœur.

CONCLUSION

Pour conclure, ce travail nous a permis de comparer deux méthodologies permettant de simuler la présence des barres de compensation au cobalt dans le réacteur CANDU-6. La première méthodologie dite de référence est celle employée depuis des années dans l'industrie nucléaire canadienne. Elle représente les mécanismes ainsi que les grappes de combustible dans des géométries simplifiées et ce en raison des limitations associés aux codes de calcul de l'époque. Les progrès effectués dans la version 3.06 du code DRAGON permettent aujourd'hui d'introduire une nouvelle méthodologie dans laquelle les mécanismes et le combustible sont représentés dans leur géométrie exacte. Afin d'effectuer les calculs de transport, nous nous sommes basés sur les travaux de Roy et al. présentés dans le rapport IGE227 [3]. Ce rapport emploie la méthodologie de référence pour obtenir les propriétés associées aux mécanismes.

Nous avons tout d'abord vérifié la cohérence entre le module de « tracking » EXCELT: utilisé dans le rapport IGE227 et le module NXT: qui permet entre autres de traiter des géométries complexes comme celle des barres au cobalt. Nous avons effectué les mêmes calculs de transport avec les deux modules et avons obtenu des résultats cohérents dans les deux cas. Les écarts observés étaient pratiquement nuls. Le module NXT: est celui qui a été utilisé pour tous les calculs subséquents.

En employant la méthodologie de référence, nous avons réalisé les calculs de transport 2D et 3D nous permettant d'obtenir les sections efficaces incrémentales ($\Delta\Sigma$) dépendantes du « burnup » ainsi que le facteur de multiplication infini. Les calculs ont été réalisés dans les bibliothèques WINFRITH (69 groupes) et ENDF-B/V (89 groupes).

En employant la nouvelle méthodologie, nous avons généré les modèles des 4 types de barres au cobalt dans la géométrie exacte et avons procédé à l'étude de la convergence spatiale du flux dans la super cellule. Nous avons employé une stratégie de calcul en 2 étapes c'est-à-dire que nous avons étudié la convergence en discrétisant dans les canaux de combustible tout en gardant une géométrie grossière pour le mécanisme. Nous avons trouvé que le critère de convergence était atteint pour le modèle de discrétisation à 420 régions. Par la suite, nous avons discrétisé le mécanisme et avons retenu le modèle de discrétisation à 616 régions. Dans les deux cas, nous

n'avons pas réussi à atteindre la convergence pour le k_{∞} . Nous avons appliqué la discrétisation du modèle à 616 régions aux autres types de barres de cobalt et avons réalisé les calculs de transport en 2D et en 3D dans les deux bibliothèques.

En comparant les sections efficaces incrémentales obtenues avec les deux modèles, nous avons observé des écarts beaucoup plus prononcés dans le domaine thermique variant de 8,627% à 147,695% pour la barre de type 1. Nous avons observé une diminution des écarts en fonction du nombre croissant de crayons au cobalt de sorte que la barre à 4 crayons présente les écarts les moins élevés. Les deux bibliothèques ont donné sensiblement les mêmes résultats.

Afin d'évaluer l'impact réel des deux modèles de représentation, nous avons réalisé un calcul de diffusion complet à l'aide du code DONJON avec les résultats des calculs de transport obtenus dans la bibliothèque ENDF-B/V. Nous avons observé que la représentation exacte des mécanismes entraîne un écart en réactivité de 1,8 mk ce qui représente environ 12% de la valeur totale en réactivité des barres de compensation dans le réacteur. Afin de connaître l'effet local sur les grappes de combustible, nous avons calculé les écarts relatifs des puissances de grappes obtenus avec les deux modèles dans les plans $z=5$ et $z=6$. Nous avons observé des écarts beaucoup plus prononcés dans les régions centrales là où le flux est plus élevé et des écarts moins élevés dans les régions près de la périphérie du réacteur. Le modèle exact permettait de diminuer davantage la puissance dans les régions centrales. Les valeurs obtenues allaient de 2% à -9% dans le plan 5 et de 2% à -10% dans le plan 6. Afin de corroborer ces résultats, il serait nécessaire de procéder à des simulations Monte-Carlo [7] ce qui consisterait en une étape de vérification.

On a donc démontré que la représentation des barres de compensation au cobalt et des deux cellules environnantes dans la géométrie exacte donne des écarts élevés entre les $\Delta\Sigma$ mais a un effet global peu élevé sur la réactivité du cœur. Les calculs de transport effectués dans DRAGON ont donné sensiblement les mêmes résultats pour les bibliothèques à 69 groupes et à 89 groupes.

Les analyses futures possibles suite à ce projet sont les suivantes :

- Reprendre cette étude dans une bibliothèque NDAS semblable à celle utilisée par WIMS-IST dans l'industrie.
- Effectuer les mêmes simulations et analyses dans DRAGON et DONJON pour les LZC.

- Effectuer un calcul d'évolution en 3D:
 - Dans le combustible pour analyser l'effet des barres de compensation sur le « burnup ».
 - Dans les grappes de cobalt afin d'effectuer le suivi de la production de cobalt-60 et d'évaluer l'impact de l'usure des barres sur leur valeur en réactivité.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] G. Marleau, A. Hébert and R. Roy, « A user Guide for DRAGON Version 3.06 », Report IGE-174 Rév. 7, École Polytechnique de Montréal, 2008.
- [2] D. Sekki, A. Hébert et R. Chambon, « A user Guide for DONJON Version 4 », Report IGE-300, École Polytechnique de Montréal, Juillet 2010.
- [3] R. Roy and E. Varin, « DRAGON models used for producing two-group CANDU-6 nuclear properties », Report IGE-227 Rev. 1, École Polytechnique de Montréal, Janvier 1999.
- [4] Énergie Atomique du Canada Limité (EACL), « Sommaire technique du réacteur CANDU-6 », Énergie Atomique du Canada Limité (EACL), Mississauga, Ontario, Rapport technique de la division opérationnelle de développement des réacteurs, 2005. [En ligne]. Disponible: <http://www.eacl-aecl.ca/Reacteurs/CANDU6-f.htm>.
- [5] Commission Canadienne de Sûreté Nucléaire (CCSN), « Principes fondamentaux des réacteurs CANDU », Commission Canadienne de Sûreté Nucléaire (CCSN), 2005. [En ligne]. Disponible: <http://canteach.candu.org/library/20060300.pdf>
- [6] J. Koclas, « Contrôle et simulation des réacteurs nucléaires », École Polytechnique de Montréal, 1998.
- [7] E.D. Gugi, R.J. Ellis et Cs. Roth, « The applications of Monte Carlo codes to Romanian TRIGA and CANDU reactors », *Conference MC2005, The Monte Carlo Method: Versatility unbounded in a dynamic computing world*, 2005. [En ligne].
Disponible: http://www.rsicc.ornl.gov/rsiccnew/MC2005_Presentations/Gugiu.pps
- [8] E. Varin, R. Roy, R. Baril et G. Hotte, « CANDU-6 operation post-simulations using the reactor physics codes DRAGON/DONJON », *Annals of Nuclear Energy*, vol. 31, pp. 2139-2155, 2004.
- [9] A. Hébert, « Applied reactor physics », Report IGE-281 Rév.1, École Polytechnique de Montréal, 2006.
- [10] P. Reuss, « Précis de neutronique », Paris : EDP France, 2003.
- [11] G. Marleau, « Calcul neutronique des réacteurs », École Polytechnique de Montréal, 2010.

- [12] M. Dahmani, G. Marleau et R. Le Tellier, « Modeling reactivity devices for advanced CANDU reactors using the code DRAGON », *Annals of Nuclear Energy*, vol. 35, no. 5, pp. 804-812, 2008.
- [13] R. Le Tellier, M. Dahmani, G. Marleau and A. Hébert, « Improvements of the reactivity devices modeling for the advanced CANDU reactor », *Annals of Nuclear Energy*, v 35, n 5, pp. 868-876, May 2008.
- [14] R. Roy, G. Marleau, J. Tajmouati and D. Rozon, « Modeling of CANDU reactivity control devices with the lattice code DRAGON », *Annals of Nuclear Energy*, v 21, pp. 115-132, 1994.
- [15] A. Hébert et G. Marleau, « Generalization of the Stamm'ler Method for the Self-Shielding of Resonant Isotopes in Arbitrary Geometries », *Nuclear Science and Engineering*, 108, 230-239, 1991.
- [16] M. Dahmani, G. Marleau and E. Varin, « Effect of burnup on ACR-700 3-D reactivity devices cross sections », *PHYSOR-2006 - American Nuclear Society's Topical Meeting on Reactor Physics*, v 2006, 2006.
- [17] A. Ziek and G. Marleau, « A verification of DRAGON : The NXT tracking module », *28th Annual Canadian Nuclear Society Conference & 31st CNS/CAN Student Conference*, 2007, 525-535.

ANNEXE A

SCHÉMA DE CALCUL DRAGON

1. Fichiers du calcul de cellule (2D) pour la nouvelle méthodologie

1.1 Fichier d'entrée cell5.x2m

```

*-----
* 2-D cell calculation for reactivity device simulations.
* Gentilly-2 cell model with Cartesian boundary.
*
*
PROCEDURE GeoC6C FluC6 LibC6 ;
MODULE PSP: DELETE: END: EVO: EDI: ;
LINKED_LIST TRKS TRKF
          FLUX EDIT BURNUP LIBR ;
SEQ_BINARY TRACK6S TRCAN6F TRCAN6S ;
SEQ_ASCII  BURN LIBRARY      ;
REAL  evobeg evoend delta :=
      0.0    0.0    5.0    ;
STRING library := "E5WLIB" ;
INTEGER istep := 1 ;
*-----
* GEOMETRIES
*-----
      TRKF TRKS TRCAN6F TRCAN6S := GeoC6C ;

TRACK6S := TRKS  ;
*-----
* FIGURES
*-----
*SEQ_ASCII  Fig.ps ;
*Fig.ps := PSP: TRKS  ;
*Fig.ps := PSP: Fig.ps TRKS :: TYPE MIXTURE ;
*Fig.ps := PSP: Fig.ps TRKF ;
*Fig.ps := PSP: Fig.ps TRKF :: TYPE MIXTURE ;
*-----
* LIBRARY
*-----
LIBR := LibC6 :: <<library>> 0.7114 941.29 560.66 345.66
      10.4375 99.30 99.92 0.0 ;
*-----
* FLUX
*-----
FLUX LIBR := FluC6 LIBR TRKF TRKS TRCAN6F TRCAN6S :: <<istep>> ;
*-----

```

```

* EVOLUTION
*-----
WHILE istep 19 < DO
  EVALUATE evoend := evobeg delta +      ;
  IF istep 1 = THEN
    BURNUP LIBR := EVO: LIBR FLUX TRKF ::
      DEPL <<evobeg>> <<evoend>> DAY POWR 31.9713 ;
  ELSE
    BURNUP LIBR := EVO: BURNUP LIBR FLUX TRKF ::
      DEPL <<evobeg>> <<evoend>> DAY POWR 31.9713 ;
  ENDIF ;
  EVALUATE istep := istep 1 + ;
  EVALUATE evobeg := evoend ;
  FLUX LIBR := FluC6
  FLUX LIBR TRKF TRKS TRCAN6F TRCAN6S :: <<istep>> ;
  IF istep 11 = THEN EVALUATE delta := delta 5. + ;
  ENDIF ;
ENDWHILE ;

BURN := BURNUP ;
LIBRARY := LIBR ;
*-----
* CLEAN-UP
*-----
FLUX LIBR := DELETE: FLUX LIBR ;
TRKF TRKS TRCAN6F := DELETE: TRKS TRKF TRCAN6F ;
END: ;
QUIT "LIST" .

```

1.2 Procédure GeoC6C.c2m

```

*
* PROCEDURE:   GeoC6C
* AUTHOR:      M.MUSONGELA (2009/03/16)
* CALL:
*
* TRACK6F TRACK6S TRCAN6F TRCAN6S := GeoC6C ;
*
* NOTES:
*   TRACK6S must be used only for self-shielding.
*   TRACK6F can be used for flux calculations.
*
*
PARAMETER  TRACK6F TRACK6S TRCAN6F TRCAN6S ::
::: LINKED_LIST TRACK6S TRACK6F ;
::: SEQ_BINARY  TRCAN6F TRCAN6S      ; ;
LINKED_LIST CANDU6S CANDU6F          ;
MODULE  GEO: NXT: DELETE: END:       ;
*
* CANDU-6 SELF-SHIELDING GEOMETRY
*
CANDU6S := GEO: :: CARCEL 6 1 1
  X- REFL MESHX 0.0 28.575 X+ REFL
  Y- REFL MESHY 0.0 28.575 Y+ REFL

```



```

*
*   * Procedure parameters:
*   NEWLIB      : XSM_FILE containing the new microlib where:
*               Mix  1 = coolant at full density
*               Mix  2 = pressure tube
*               Mix  3 = helium for gap and LZC
*               Mix  4 = Zr for calandrial tube and adjuster
*               Mix  5 = moderator
*               Mix  6 = central fuel
*               Mix  7 = 6 pin fuel
*               Mix  8 = 12 pin fuel
*               Mix  9 = outer fuel
*               Mix 10 = fuel sheating
*               (see GeoLZC.c2m for mixture location in
*               geometry)
*
PARAMETER  LIBRARY ::  ::: LINKED_LIST LIBRARY ; ;
MODULE     LIB: INFO: END: ;
STRING     library    ;
REAL       enrich Tfuel Pcool Tcool Pmode Tmode ;
REAL       Dfuel Dcool Dmode ppmB ;
REAL       wgtOX wgtU4 wgtU5 wgtU8 ;
REAL       wgt1Hc wgt1Hm wgt2Dc wgt2Dm wgtOXc wgtOXm wgtB ;
INTEGER    ngroup ngtrcor ;
STRING     nam1H nam2D namBn namZr namFe namCr namNi namNb ;

:: >>library<< >>enrich<< >>Tfuel<< >>Tcool<< >>Tmode<< >>Dfuel<<
    >>Pcool<< >>Pmode<< >>ppmB<< ;

*-----
* library ENDF/B-IV
*-----
IF library "WIMSLIB" = THEN
    EVALUATE ngroup ngtrcor := 69 27 ;
    EVALUATE nam1H nam2D namBn namZr namFe namCr namNi namNb :=
        "H1" "D2" "B-NAT" "ZR91" "FE56A" "CR52" "NI58" "NB93" ;
ELSE
*-----
* library ENDF/B-V
*-----
    IF library "E5WLIB" = THEN
        EVALUATE ngroup ngtrcor := 89 47 ;
        EVALUATE nam1H nam2D namBn namZr namFe namCr namNi namNb :=
            "H-H2O" "D-D2O" "B10" "ZR-NAT" "FE" "CR" "NI" "NB93" ;
        ENDIF ;
    ENDIF ;

* COMPUTE WGT% FOR FUEL
INFO: ::
    ENR: <<enrich>> WGT%
    LIB: WIMS FIL: <<library>>
    ISO: 3      U238 O16 U235
    CALC WGT% UO2 >>wgtU8<< >>wgtOX<< >>wgtU5<<
    ;

* COMPUTE DENSITY AND WGT% FOR COOLANT AND MODERATOR
INFO: ::
    TMP: <<Tcool>> K

```

```

PUR: <<Pcool>> WGT%
CALC DENS WATER >>Dcool<<
LIB: WIMS FIL: <<library>>
ISO: 3 <<nam1H>> <<nam2D>> O16
CALC WGT% D2O >>wgt1Hc<< >>wgt2Dc<< >>wgtOXc<<
;

INFO: ::
TMP: <<Tmode>> K
PUR: <<Pmode>> WGT%
CALC DENS WATER >>Dmode<<
LIB: WIMS FIL: <<library>>
ISO: 3 <<nam1H>> <<nam2D>> O16
CALC WGT% D2O >>wgt1Hm<< >>wgt2Dm<< >>wgtOXm<<
;

ECHO " ISOTOPIC PURITY, DENSITY COOLANT " Pcool Dcool ;
ECHO " ISOTOPIC PURITY, DENSITY MODERATOR " Pmode Dmode ;
* ADD THE WGT% FOR BORON
EVALUATE wgtB := ppmB .0001 * ;

LIBRARY := LIB: ::
NMIX      10                      !MAXIMUM NUMBER OF MATERIAL MIXTURES
CTRA WIMS                      !WIMS TYPE TRANSPORT CORRECTION

DEPL LIB: WIMS FIL: <<library>>
MIXS LIB: WIMS FIL: <<library>>

*MIX 1: COOLANT
MIX 1 <<Tcool>> <<Dcool>>
H1 = <<nam1H>> <<wgt1Hc>>
D2 = <<nam2D>> <<wgt2Dc>>
O16 <<wgtOXc>>
*MIX 2: PRESS TUBE ZR-NB
MIX 2 <<Tcool>> 6.57
ZR = <<namZr>> 97.5
NB = <<namNb>> 2.5
B = <<namBn>> 0.00021
*MIX 3: GAP HE
MIX 3 <<Tmode>> 0.0014
HE4 100.
*MIX 4: CALEND TUBE ZR-II
MIX 4 <<Tmode>> 6.44
ZR = <<namZr>> 99.71
FE = <<namFe>> 0.16
CR = <<namCr>> 0.11
NI = <<namNi>> 0.06
B = <<namBn>> 0.00031
*MIX 5: MODERATOR
MIX 5 <<Tmode>> <<Dmode>>
H1 = <<nam1H>> <<wgt1Hm>>
D2 = <<nam2D>> <<wgt2Dm>>
O16 <<wgtOXm>>
BM = <<namBn>> <<wgtB>>
*MIX 6: FUEL INNER ROD
MIX 6 <<Tfuel>> <<Dfuel>>
O16 <<wgtOX>>

```

```

      U235 <<wgtU5>> 1
      U236 0.0      1
      U238 <<wgtU8>> 1
      PU239 0.0     1
*MIX 7: FUEL NPIN 6
      MIX 7 <<Tfuel>> <<Dfuel>>
      O16 <<wgtOX>>
      U235 <<wgtU5>> 1
      U236 0.0      1
      U238 <<wgtU8>> 1
      PU239 0.0     1
*MIX 8: FUEL NPIN 12
      MIX 8 <<Tfuel>> <<Dfuel>>
      O16 <<wgtOX>>
      U235 <<wgtU5>> 1
      U236 0.0      1
      U238 <<wgtU8>> 1
      PU239 0.0     1
*MIX 9: FUEL NPIN 18
      MIX 9 <<Tfuel>> <<Dfuel>>
      O16 <<wgtOX>>
      U235 <<wgtU5>> 1
      U236 0.0      1
      U238 <<wgtU8>> 1
      PU239 0.0     1
*MIX 10: FUEL SHEAT ZR-II
      MIX 10 <<Tcool>> 6.44
      ZR = <<namZr>> 99.71
      FE = <<namFe>> 0.16
      CR = <<namCr>> 0.11
      NI = <<namNi>> 0.06
      B = <<namBn>> 0.00031
;

```

```
ECHO "PROC(LibC6): LIBRARY object generated." ;
```

```
END: ;
```

1.4 Procédure FluC6.c2m

```

*
* PROCEDURE:  FluC6
* USE:        FLUX CALCULATIONS FOR CANDU6 INPUTS
* AUTHOR:     M.MUSONGELA (2009/03/16)
* CALL:
*
* FLUX6 LIBRARY := FluC6
*               LIBRARY TRACK6F TRACK6S TRCAN6F TRCAN6S :: <<step>> ;
*
* NOTES:
*       TRACK6S must be used only for self-shielding.
*       TRACK6F can be used for flux calculations.
*

```

```

*
PARAMETER      FLUX6 LIBRARY
                TRACK6F TRACK6S TRCAN6F TRCAN6S ::
::: LINKED_LIST FLUX6 LIBRARY TRACK6F ;
::: SEQ_BINARY  TRCAN6F TRCAN6S ; ;
XSM_FILE       SYS ;
MODULE         SHI: ASM: FLU: EDI: END: DELETE: ;
REAL           Keff  B2  B2read      ;
INTEGER        step  ;
:: >>step<< ;
* -----
* CANDU-6 SELF-SHIELDING CALCULATION
* -----
LIBRARY := SHI: LIBRARY TRACK6S TRCAN6S :: ;
* -----
* CANDU-6 PIJ CALCULATION
* -----
SYS := ASM: LIBRARY TRACK6F TRCAN6F :: ;
* -----
* CANDU-6 FLUX CALCULATION
* -----
IF step 1 = THEN
    FLUX6 := FLU: SYS LIBRARY TRACK6F :: TYPE B B1 PNL ;
ELSE
    FLUX6 := FLU: FLUX6 SYS LIBRARY TRACK6F :: TYPE B B1 PNL ;
ENDIF ;
END: ;
QUIT "LIST" .

```

2. Exemple de fichiers du calcul 3D pour la nouvelle méthodologie (cobalt)

2.1 Fichier d'entrée resco1E5.x2m (contient le calcul 3D)

```

*
* INPUT: 1 SEQUENTIAL FILE CONTAINING CELL PROPERTIES AT 69 OR 89
*         ENERGY GROUPS HOMOGENEIZED OVER THE 2D CELL.
*
* OUTPUT: 1 SEQUENTIAL FILE CONTAINING THE COBALT PROPERTIES
*
*
*
*
PROCEDURE      GeoCol GeoC6C LibCo Flu3D LibC6 ;
LINKED_LIST    NEWLIB T3D  Burn           ;
LINKED_LIST    FLUXA EDITA TRKS TRKF      ;
MODULE         DELETE: END: LIB: SHI:     ;
SEQ_BINARY     TRKFIL                      ;
SEQ_BINARY     TRCAN6F TRCAN6S             ;
SEQ_ASCII      BURNOLD                     ;
STRING         library := "E5WLIB"        ;
* STRING       Type := "1"                ;

```

```

STRING      Position1 := "Out"      ;
STRING      Position2 := "In"      ;
STRING      NnoBC     NBC          ;
STRING      C := "1"              ;
INTEGER     NbAngles  := 8          ;
REAL        Density   := 300.0      ;
Burn := BURNOLD ;

EVALUATE NnoBC      NBC      :=
      "'NOBC' C +" "'BC' C +" ;
*-----
*  LIBRARY
*-----
NEWLIB := LibC6 :: <<library>> 0.7114 941.29 560.66 345.66
      10.4375 99.30 99.92 0.0 ;
NEWLIB := LIB: NEWLIB Burn :: BURN 130.0 ;

TRKF TRKS TRCAN6F TRCAN6S := GeoC6C ;

NEWLIB := SHI: NEWLIB TRKS TRCAN6S :: ;
NEWLIB := LibCo NEWLIB :: <<Position1>> <<library>> ;

TRKF TRCAN6F := DELETE: TRKF TRCAN6F ;
*-----
*  GEOMETRY
*-----

TRKFIL T3D := GeoCol :: <<NbAngles>> <<Density>> ;

*-----
*  FLUX CALCULATIONS
*-----
*  MODERATOR ONLY
*-----
FLUXA EDITA := Flu3D NEWLIB T3D TRKFIL :: 'New' <<NnoBC>> ;

NEWLIB DELETE: NEWLIB ;
*-----
*  Cobalt in
*-----
NEWLIB := LibC6 :: <<library>> 0.7114 941.29 560.66 345.66
      10.4375 99.30 99.92 0.0 ;
NEWLIB := LIB: NEWLIB Burn :: BURN 130.0 ;
NEWLIB := SHI: NEWLIB TRKS TRCAN6S :: ;

NEWLIB := LibCo NEWLIB :: <<Position2>> <<library>> ;
FLUXA EDITA := Flu3D
      FLUXA EDITA NEWLIB T3D TRKFIL :: 'Old' <<NBC>> ;

FLUXA EDITA := DELETE: FLUXA EDITA ;

END: ;
QUIT "LIST".

```

2.2 Procédure GeoCo1.c2m (géométrie 3D)


```

* Name           : GeoCol.c2m
* Mesh           : DRAGON procedure
* Use            : Cobalt geometry
*                : for G2 (cluster model)
* Author         : M.Musongela
* Date           : 2010/02/19
*
*-----
* Define procedure parameters and options and read
* the procedure input data
*-----
PARAMETER TRKFIL T3D ::
::: LINKED_LIST T3D      ;
::: SEQ_BINARY TRKFIL    ; ;
XSM_FILE Geometry       ;
INTEGER   NbAngles       ;
REAL      Density        ;
:: >>NbAngles<< >>Density<< ;
*-----
* Local procedures and modules used in this procedure
*-----
PROCEDURE   DimFuel DimCell DimCobalt      ;
MODULE      GEO: NXT: END: DELETE: ;
*-----
* Get overall cell dimensions using procedure DimCell
*-----
REAL        rcool4 rpt rgap rct LPitch BLength ;
DimCell     ::
    >>rcool4<< >>rpt<< >>rgap<< >>rct<< >>LPitch<< >>BLength<< ;
*-----
* Get ring by ring description of fuel using procedure DimFuel
*-----
INTEGER      Ring      ;
INTEGER      npinp1    npinp2    npinp3    npinp4    ;
REAL         rradf1    rrads1    rpinp1    apinp1    ;
REAL         rradf2    rrads2    rpinp2    apinp2    ;
REAL         rradf3    rrads3    rpinp3    apinp3    ;
REAL         rradf4    rrads4    rpinp4    apinp4    ;
EVALUATE     Ring := 1 ;
DimFuel      :: <<Ring>>
    >>npinp1<< >>rpinp1<< >>apinp1<< >>rradf1<< >>rrads1<< ;
EVALUATE     Ring := 2 ;
DimFuel      :: <<Ring>>
    >>npinp2<< >>rpinp2<< >>apinp2<< >>rradf2<< >>rrads2<< ;
EVALUATE     Ring := 3 ;
DimFuel      :: <<Ring>>
    >>npinp3<< >>rpinp3<< >>apinp3<< >>rradf3<< >>rrads3<< ;
EVALUATE     Ring := 4 ;
DimFuel      :: <<Ring>>
    >>npinp4<< >>rpinp4<< >>apinp4<< >>rradf4<< >>rrads4<< ;
*-----
* Get Cobalt using procedure DimCobalt
*-----
REAL   RinnGT RoutGT RCo Rclad Rdummy
        RZrc Rcent ;
DimCobalt ::
    >>RinnGT<< >>RoutGT<< >>RCo<< >>Rclad<< >>Rdummy<<

```

```

    >>RZrc<< >>Rcent<< ;

*-----
* Evaluate derived dimensions for supercell description
*-----
REAL HLPitch    := LPitch 2.0 / ;
REAL HBLength   := BLength 2.0 / ;
REAL LimCoCell  := HLPitch rct - RoutGT + 2.0 / ;
REAL IntFCell   := LPitch LimCoCell - ;
REAL IntYCell   := HLPitch LimCoCell - ;
REAL OffsetXL OffsetXR := LimCoCell 2.0 / LimCoCell -2.0 / ;
* Left and right fuel cell X position
REAL XLFmin      XLFint      XLFcent      XLFmax
      XRFmin      XRFint      XRFcent      XRFmax :=
      LPitch -1.0 * IntFCell -1.0 * HLPitch -1.0 * LimCoCell -1.0 *
      LimCoCell      IntFCell      HLPitch      LPitch ;
* Cell Y position
REAL YFmin      YFintb      YFcent      YFintt      YFmax      :=
      XLFcent IntYCell -1.0 * 0.0      IntYCell XRFcent ;
* Cell Z position
REAL ZFmin      ZFintf      ZFcent      ZFintb      ZFmax      :=
      HBLength -1.0 * XLFmax 0.0      XRFmin HBLength ;
*-----
* Derived dimensions for fuel
*-----
REAL          eps1 := 0.1 ;
REAL          rcool1 rcool2 rcool3      :=
      rrads1 eps1 + rpinp2 rrads2 - + 2.0 /
      rpinp2 rrads2 + rpinp3 rrads3 - + 2.0 /
      rpinp3 rrads3 + rpinp4 rrads4 - + 2.0 / ;
REAL          rmod := HLPitch LimCoCell - eps1 - ;
*-----
* Define mixtures
*-----
INTEGER mcl1 mpt mgap mct mmod      := 1 2 3 4 5      ;
INTEGER mfl1 mfl2 mfl3 mfl4         := 6 7 8 9         ;
INTEGER mfr1 mfr2 mfr3 mfr4         := 6 7 8 9         ;
INTEGER ms                          := 10                ;
INTEGER mp1 mp2 mcr mgt mod         := 11 12 13 14 15    ;

REAL          PIO2 PIO6 := $Pi_R 2.0 / $Pi_R 6.0 /      ;
REAL          ApinZP1 ApinZP2 ApinZP3 ApinZP4
      ApinZP5                      :=
      PIO2 PIO2 3.0 * PIO6 7.0 *
      PIO6 11.0 * PIO6                      ;
REAL          ApinXP1 ApinXP2 ApinXP3
      ApinXP4 ApinXP5                      :=
      PIO2 ApinZP1 - PIO2 ApinZP2 - PIO2 ApinZP3 -
      PIO2 ApinZP4 - PIO2 ApinZP5 -          ;
ECHO          ApinZP1 ApinZP2 ApinZP3 ApinZP4 ApinZP5 ;
*-----
* Geometry
*-----
Geometry := GEO: :: CAR3D 3 1 1
      X- REFL X+ REFL Y- REFL Y+ REFL Z- REFL Z+ REFL
      CELL FuelL Cobalt FuelR
*-----
* Fuel on the left

```


[illegible]

[illegible]

```

        <<mmod>>    <<mgt>>    <<mmod>> <<mmod>>
        <<mmod>>    <<mgt>>    <<mmod>> <<mmod>>
        <<mmod>>    <<mgt>>    <<mmod>> <<mmod>>
        <<mmod>>    <<mgt>>    <<mmod>> <<mmod>>
        <<mmod>>    <<mgt>>    <<mmod>> <<mmod>>
        <<mmod>>    <<mgt>>    <<mmod>> <<mmod>>
        <<mmod>>    <<mgt>>    <<mmod>> <<mmod>>
CLUSTER P1 P2 CR
::: P1 := GEO: TUBEY 2 4
  NPIN  1 RPIN <<Rcent>> APIN <<ApinZP1>>
  MESHY   <<YFmin>>   <<YFintb>> <<YFcent>>   <<YFintt>> <<YFmax>>
  RADIUS 0.0 <<RCo>>  <<Rclad>>
  SPLITR 2 2
  MIX <<mp1>>  <<mcr>>
      <<mp1>>  <<mcr>>
      <<mp1>>  <<mcr>>
      <<mp1>>  <<mcr>>
      ;
::: P2 := GEO: TUBEY 1 4
  NPIN  1 RPIN <<Rcent>> APIN <<ApinZP2>>
  MESHY   <<YFmin>>   <<YFintb>> <<YFcent>>   <<YFintt>> <<YFmax>>
  RADIUS 0.0 <<Rdummy>>
  SPLITR 2
  MIX <<mp2>> <<mp2>> <<mp2>> <<mp2>>
      ;
::: CR := GEO: TUBEY 1 4
  NPIN  1 RPIN 0.0 APIN 0.0
  MESHY   <<YFmin>>   <<YFintb>> <<YFcent>>   <<YFintt>> <<YFmax>>
  RADIUS 0.0 <<RZrc>>
  SPLITR 2
  MIX <<mcr>> <<mcr>> <<mcr>> <<mcr>>
      ;
      ;
*-----
* Fuel on the right
*-----
::: FuelR := GEO: CARCELZ 5 3 4 4
  MESHX   <<XRFmin>> <<XRFcent>> <<XRFint>> <<XRFmax>>
  MESHY   <<YFmin>>   <<YFintb>> <<YFcent>>   <<YFintt>> <<YFmax>>
  MESHZ   <<ZFmin>>   <<ZFintf>> <<ZFcent>>   <<ZFintb>> <<ZFmax>>
  RADIUS  0.00000 <<rcool4>> <<rpt>>
              <<rgap>>  <<rct>>    <<rmod>>
  OFFCENTER <<OffsetXR>> 0.0      0.0
  MIX       <<mcLl>>  <<mpt>>    <<mgap>> <<mct>>
              <<mmod>> <<mmod>>
              <<mcLl>> <<mpt>>    <<mgap>> <<mct>>
              <<mmod>> <<mmod>>
              <<mcLl>> <<mpt>>    <<mgap>> <<mct>>
              <<mmod>> <<mmod>>
              <<mcLl>> <<mpt>>    <<mgap>> <<mct>>
              <<mmod>> <<mmod>>
              <<mcLl>> <<mpt>>    <<mgap>> <<mct>>

```



```
<<mcL1>> <<mpt>> <<mgap>> <<mct>>  
<<mmod>> <<mmod>>  
<<mcL1>> <<mpt>> <<mgap>> <<mct>>  
<<mmod>> <<mmod>>  
<<mcL1>> <<mpt>> <<mgap>> <<mct>>  
<<mmod>> <<mmod>>  
<<mcL1>> <<mpt>> <<mgap>> <<mct>>  
<<mmod>> <<mmod>>  
<<mcL1>> <<mpt>> <<mgap>> <<mct>>  
<<mmod>> <<mmod>>  
<<mcL1>> <<mpt>> <<mgap>> <<mct>>  
<<mmod>> <<mmod>>  
<<mcL1>> <<mpt>> <<mgap>> <<mct>>  
<<mmod>> <<mmod>>  
<<mcL1>> <<mpt>> <<mgap>> <<mct>>  
<<mmod>> <<mmod>>  
<<mcL1>> <<mpt>> <<mgap>> <<mct>>  
<<mmod>> <<mmod>>  
<<mcL1>> <<mpt>> <<mgap>> <<mct>>  
<<mmod>> <<mmod>>  
<<mcL1>> <<mpt>> <<mgap>> <<mct>>  
<<mmod>> <<mmod>>  
CLUSTER ROD1 ROD2 ROD3 ROD4  
::: ROD1 := GEO: TUBEZ 2 4  
NPIN <<npin1>> RPIN <<rpin1>> APIN <<apin1>>  
MESHZ <<ZFmin>> <<ZFintf>> <<ZFcent>> <<ZFintb>> <<ZFmax>>  
RADIUS 0.00000 <<rradf1>> <<rrads1>>  
MIX <<mfr1>> <<ms>>  
    <<mfr1>> <<ms>>  
    <<mfr1>> <<ms>>  
    <<mfr1>> <<ms>> ;  
::: ROD2 := GEO: TUBEZ 2 4  
NPIN <<npin2>> RPIN <<rpin2>> APIN <<apin2>>  
MESHZ <<ZFmin>> <<ZFintf>> <<ZFcent>> <<ZFintb>> <<ZFmax>>  
RADIUS 0.00000 <<rradf2>> <<rrads2>>  
MIX <<mfr2>> <<ms>>  
    <<mfr2>> <<ms>>  
    <<mfr2>> <<ms>>  
    <<mfr2>> <<ms>> ;  
::: ROD3 := GEO: TUBEZ 2 4  
NPIN <<npin3>> RPIN <<rpin3>> APIN <<apin3>>  
MESHZ <<ZFmin>> <<ZFintf>> <<ZFcent>> <<ZFintb>> <<ZFmax>>  
RADIUS 0.00000 <<rradf3>> <<rrads3>>  
MIX <<mfr3>> <<ms>>  
    <<mfr3>> <<ms>>  
    <<mfr3>> <<ms>>  
    <<mfr3>> <<ms>> ;  
::: ROD4 := GEO: TUBEZ 2 4  
NPIN <<npin4>> RPIN <<rpin4>> APIN <<apin4>>  
MESHZ <<ZFmin>> <<ZFintf>> <<ZFcent>> <<ZFintb>> <<ZFmax>>  
RADIUS 0.00000 <<rradf4>> <<rrads4>>
```



```

      MIX  <<mfr4>> <<ms>>
           <<mfr4>> <<ms>>
           <<mfr4>> <<ms>>
           <<mfr4>> <<ms>> ;

;

TRKFIL T3D := NXT: Geometry ::
  EDIT 2
  TITLE 'INCREMENTAL CALCULATION FOR G-2'
  TISO <<NbAngles>> <<Density>> ;

Geometry DELETE: Geometry ;

END: ;

QUIT "LIST" .

```

2.3 Procédure LibCo.c2m (librairie 3D)

```

* Name           : LibCo.c2m
* Type           : DRAGON procedure
* Use            : Add cobalt mixtures to Gentilly-2 fuel microlib
*                  with cross sections from the from the ENDF/B-V and Winfrith
*                  libraries.(cluster model)
* Author         : M.Musongela
* Date           : 2010/01/13
*
* Procedure description:
*   NEWLIB := LibCo NEWLIB :: <<Position>> (STRING)
*                  <<Type>> (STRING)
*                  <<library>> (STRING(WIMSLIB,...))
*
*
*   NEWLIB       : XSM_FILE containing the updated microlib where:
*
*       Mix 11 = mixture in cobalt pencils
*       Mix 12 = mixture in dummy pencil
*       Mix 13 = mixture in centre rod
*       Mix 14 = mixture in guide tube
*       Mix 15 = mixture in moderator
*
*   Type         : Cobalt type
*
*       1 -> 1 cobalt pencil and one dummy pencil
*       2 -> 2 cobalt pencils
*       3 -> 3 cobalt pencils
*       4 -> 4 cobalt pencils
*
*   Position     : Cobalt pencils position
*
*       In       -> Pencil in
*       Out      -> Moderator only.
*
*-----
* Define procedure parameters and options and read
* the procedure input data
*-----
PARAMETER NEWLIB ::
::: LINKED_LIST NEWLIB ; ;
REAL      Tco  Perfor      ;
REAL      N59 := 9.0944E-02 ;

```

```

REAL      N60                ;
REAL      DzirII := 6.4003    ;
REAL      MzirII FzirII Mmode Fmode DGT ;
REAL      Wz1   Wf6   Wc2   Wn8   Wbn   :=
98.2083  0.135  0.10  0.055  0.00005962 ;
EVALUATE   Tco      := 345.66 ;
EVALUATE   Perfor   := 0.3566 ;
STRING     Position ;
STRING     library  ;

:: >>Position<< >>library<< ;
*-----
*   Define modules
*-----
MODULE INFO: LIB: DELETE: END: ;
*-----
*   Define Properties
*-----
REAL      Mtemp Mprty := 345.66 99.92 ;
REAL      Mwgth1 Mwgtd2 Mwgtd16 Mdens ;
REAL      Wtemp Wprty := Mtemp 0.001 ;
REAL      Wwgth1 Wwgtd2 Wwgtd16 Wdens ;
REAL      Wh1GT Wd2GT Wo6GT WbnGT Wb10GT Wb11GT ;
REAL      Wz1GT Wf6GT Wc2GT Wn8GT ;
STRING     nam1H nam2D namBn namZr namB1 namFe namCr namNi namNb ;
*-----
*   Library and isotope names
*-----
* library ENDF/B-V
*-----
IF library "E5WLIB" = THEN
  EVALUATE nam1H nam2D namBn namB1 namZr namFe namCr namNi namNb :=
    "H-H2O" "D-D2O" "B11" "B10" "ZR-NAT" "FE" "CR" "NI" "NB93" ;
*-----
* library ENDF/B-IV
*-----
ELSEIF library "WIMSLIB" = THEN
  EVALUATE nam1H nam2D namBn namB1 namZr namFe namCr namNi namNb :=
    "H1" "D2" "B-NAT" "B10" "ZR91" "FE56A" "CR52" "NI58" "NB93" ;

ENDIF ;

*-----
* COMPUTE DENSITY AND WGT%
*-----
INFO: ::
  TMP: <<Mtemp>> K
  PUR: <<Mprty>> WGT%
  CALC DENS WATER >>Mdens<<
  LIB: WIMS FIL: <<library>>
  ISO: 3 <<nam1H>> <<nam2D>> O16
  CALC WGT% D2O >>Mwgth1<< >>Mwgtd2<< >>Mwgtd16<< ;
INFO: ::
  TMP: <<Wtemp>> K
  PUR: <<Wprty>> WGT%
  CALC DENS WATER >>Wdens<<
  LIB: WIMS FIL: <<library>>

```

```

ISO: 3 <<nam1H>> <<nam2D>> O16
CALC WGT% D2O >>WwgtH1<< >>WwgtD2<< >>WwgtO16<< ;

EVALUATE DGT := 1. Perfor 1. Mdens / * 1. Perfor - 1. DzirII / * + / ;
EVALUATE Mmode := WwgtH1 WwgtD2 + WwgtO16 + ;
EVALUATE Fmode := 100.0 Perfor * Mdens * DGT / Mmode / ;
EVALUATE MzirII := Wz1 Wf6 + Wc2 + Wn8 + Wbn + ;
EVALUATE FzirII := 100.0 1. Perfor - * DzirII * DGT / MzirII / ;

EVALUATE Wh1GT          Wd2GT          Wo6GT :=
      WwgtH1 Fmode * WwgtD2 Fmode * WwgtO16 Fmode * ;
EVALUATE Wz1GT          Wf6GT          Wc2GT          Wn8GT :=
      Wz1 FzirII * Wf6 FzirII * Wc2 FzirII * Wn8 FzirII * ;
EVALUATE WbnGT :=
      Wbn FzirII * ;
EVALUATE Wb10GT Wb11GT := WbnGT .199 * WbnGT .801 * ;
*-----
* Complete Microscopic cross section library
*-----
IF Position 'In' = THEN
      NEWLIB := LIB: NEWLIB ::
      NMIX 15 CTRA WIMS
      MIXS LIB: WIMS FIL: <<library>>
*MIX 11 - COBALT PENCILS
      MIX 11 <<Tco>>
      CO59 <<N59>>
*MIX 12 - DUMMY PENCIL
      MIX 12 <<Tco>> <<DzirII>>
      ZR = <<namZr>> <<Wz1>>
      FE = <<namFe>> <<Wf6>>
      CR = <<namCr>> <<Wc2>>
      NI = <<namNi>> <<Wn8>>
      BO = <<namBn>> <<Wbn>>
*MIX 13 - ZR CENTRE ROD
      MIX 13 <<Tco>> <<DzirII>>
      ZR = <<namZr>> <<Wz1>>
      FE = <<namFe>> <<Wf6>>
      CR = <<namCr>> <<Wc2>>
      NI = <<namNi>> <<Wn8>>
      BO = <<namBn>> <<Wbn>>
*MIX 14 - GUIDETUBE: ZR11 WITH 35.66% PERFORATION
      MIX 14 <<Mtemp>> <<DGT>>
      ZR = <<namZr>> <<Wz1GT>>
      FE = <<namFe>> <<Wf6GT>>
      CR = <<namCr>> <<Wc2GT>>
      NI = <<namNi>> <<Wn8GT>>
      BO = <<namBn>> <<Wb11GT>>
      B0 = <<namB1>> <<Wb10GT>>
      D2 = <<nam2D>> <<Wd2GT>>
      H1 = <<nam1H>> <<Wh1GT>>
      O16 <<Wo6GT>>

*MIX 15 - MODERATOR
      MIX 15 <<Mtemp>> <<Mdens>>
      H1 = <<nam1H>> <<MwgtH1>>
      D2 = <<nam2D>> <<MwgtD2>>

```

```

        O16                <<MwgtO16>>
    ;

ELSE
    NEWLIB    := LIB: NEWLIB ::
    NMIX 15   CTRA WIMS
    MIXS LIB: WIMS FIL: <<library>>
*MIX  11 TO 15 - MODERATOR ONLY
    MIX  11 <<Mtemp>> <<Mdens>>
    H1   = <<nam1H>> <<MwgtH1>>
    D2   = <<nam2D>> <<MwgtD2>>
    O16                <<MwgtO16>>
    MIX  12 COMB 11 100.0
    MIX  13 COMB 11 100.0
    MIX  14 COMB 11 100.0
    MIX  15 COMB 11 100.0
    ;
ENDIF ;

END: ;

```

2.4 Procédure Flu3D.c2m (transport 3D)

```

* PROCEDURE:   Flu3D.c2m
* USE:         FLUX CALCULATIONS FOR GENTILLY-2 SUPERCELL INPUTS
* AUTHOR:      M.MUSONGELA (2009/07/01)
* CALL:
*
* 1. WHEN Option = 'New', CALL WITH:
* -----
* FLUXA EDITA := Flu3D NEWLIB T3D TRKFIKL :: Option Title ;
*
* 2. WHEN Option = 'Old', CALL WITH:
* -----
* FLUXA EDITA := Flu3DC FLUXA EDITA NEWLIB T3D TRKFIL ::
*                Option Title ;
*
* NOTES:
*
*      Option = { 'New' | 'Old' }
*      Title  = to be provide for Edit purpose (STRING)
*                B2 = buckling value
*
* REMARK: With Option = 'New', try to keep same options as
*          the previous calculation.
*
PARAMETER   FLUXA EDITA NEWLIB T3D TRKFIL ::
::: LINKED_LIST FLUXA EDITA NEWLIB T3D ;
::: SEQ_BINARY  TRKFIL ; ;
MODULE      ASM: FLU: GREP: EDI: DELETE: END: ;
STRING      Option Title ;
REAL        Keff ;
XSM_FILE     SYS ;
*
:: >>Option<< >>Title<< ;

```

```

*-----
* CANDU-6 PIJ CALCULATION
*-----
SYS := ASM: NEWLIB T3D TRKFIL ;
*-----
* CANDU-6 FLUX CALCULATIONS AND CONDENSATION
*-----
IF Option "New" = THEN
    FLUXA := FLU: SYS NEWLIB T3D :: TYPE B B1 PNL ;
    EDITA := EDI: FLUXA NEWLIB T3D ::
        EDIT 10 COND 4.0 MERGE COMP
    SAVE ON <<Title>> ;

ELSE
    FLUXA := FLU: FLUXA SYS T3D NEWLIB :: TYPE B B1 PNL ;
    EDITA := EDI: EDITA FLUXA NEWLIB T3D ::
        EDIT 10 COND 4.0 MERGE COMP STAT DELS
    SAVE ON <<Title>> ;

ENDIF ;
GREP: FLUXA :: GETVAL 'K-EFFECTIVE' 1 >>Keff<< ;
ECHO "PROC(Flu3D): K-effective=" Keff ;
*SYS T3D TRKFIL := DELETE: SYS T3D TRKFIL ;
END: ;
QUIT "LIST" .

```