

NOTE TO USERS

This reproduction is the best copy available.

UMI[®]

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

IMPLANTATION DE LA THÉORIE D'ÉQUIVALENCE DANS LA CHAÎNE DE
CALCUL DRAGON/DONJON-NDP

PAUL DUFOUR

DÉPARTEMENT DE GÉNIE PHYSIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

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

NOVEMBRE 2004



Library and
Archives Canada

Bibliothèque et
Archives Canada

Published Heritage
Branch

Direction du
Patrimoine de l'édition

395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Your file Votre référence

ISBN: 0-494-01313-3

Our file Notre référence

ISBN: 0-494-01313-3

NOTICE:

The author has granted a non-exclusive license allowing Library and Archives Canada to reproduce, publish, archive, preserve, conserve, communicate to the public by telecommunication or on the Internet, loan, distribute and sell theses worldwide, for commercial or non-commercial purposes, in microform, paper, electronic and/or any other formats.

The author retains copyright ownership and moral rights in this thesis. Neither the thesis nor substantial extracts from it may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

AVIS:

L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque et Archives Canada de reproduire, publier, archiver, sauvegarder, conserver, transmettre au public par télécommunication ou par l'Internet, prêter, distribuer et vendre des thèses partout dans le monde, à des fins commerciales ou autres, sur support microforme, papier, électronique et/ou autres formats.

L'auteur conserve la propriété du droit d'auteur et des droits moraux qui protègent cette thèse. Ni la thèse ni des extraits substantiels de celle-ci ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

In compliance with the Canadian Privacy Act some supporting forms may have been removed from this thesis.

Conformément à la loi canadienne sur la protection de la vie privée, quelques formulaires secondaires ont été enlevés de cette thèse.

While these forms may be included in the document page count, their removal does not represent any loss of content from the thesis.

Bien que ces formulaires aient inclus dans la pagination, il n'y aura aucun contenu manquant.

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé:

IMPLANTATION DE LA THÉORIE D'ÉQUIVALENCE DANS LA CHAÎNE DE
CALCUL DRAGON/DONJON-NDP

présenté par: DUFOUR Paul

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

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

M. HÉBERT Alain, D. ing., président

M. KOCLAS Jean, Ph.D., membre et directeur de recherche

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

Mme. VARIN Élisabeth, D. Sc., membre

Soit A l'ensemble des gens que j'aime et B l'ensemble des gens qui m'aiment.

Je dédie ce mémoire

à tous les gens qui appartiennent à l'intersection de A et B .

REMERCIEMENTS

Je voudrais en premier lieu remercier mes directeurs de thèse M. Guy Marleau et M. Jean Koclas qui, par leur savoir, ont su me guider et m'éclairer tout au long de ma recherche. Je voudrais aussi remercier tous les membres du jury qui ont bien voulu prendre le temps de lire ce mémoire.

J'adresse aussi un remerciement tout particulier à Mme. Elisabeth Varin pour toute l'aide qu'elle m'a apportée et sans qui ce travail n'aurait pu voir le jour aussi rapidement.

Un autre remerciement particulier va à M. Romain Letellier, étudiant au doctorat, qui m'a transmis une quantité impressionnante d'informations précieuses sur divers sujets et qui a bien voulu prendre un peu de son temps pour faire une révision préliminaire de ce document et ce dans un temps très court.

Je remercie aussi M. Richard-Pierre Chambon, étudiant au doctorat, pour l'aide qu'il a put m'apporter et les discussions que l'on a pu avoir et qui m'ont parfois éclairées sur différents aspects de mon travail.

Un remerciement va aussi à M. Alberto Teyssedou et M. Daniel Rozon pour le savoir qu'ils m'ont transmis par l'intermédiaire de leurs cours.

Je me doit aussi de remercier Hydro-Québec qui m'a décerné une bourse d'étude ainsi qu'un stage durant l'été 2003.

Et finalement je voudrais remercier tous mes parents et ami(e)s qui de près ou de loin ont su m'aimer et me supporter tout au long de mes études et ce même dans les moments où j'ai pu être d'une nature plutôt désagréable.

RÉSUMÉ

Le travail accompli dans le cadre de ce projet de maîtrise consiste à introduire la théorie d'équivalence à l'intérieur de la chaîne de calcul DRAGON/DONJON-NDF. Cette théorie prend en compte la discontinuité possible des flux homogènes aux surfaces dans les problèmes qui utilisent des procédures d'homogénéisation. Pour ce faire elle introduit de nouveaux facteurs appelés facteurs de discontinuité. Ces facteurs nous permettent donc, en théorie, d'obtenir des solutions plus exactes. Comme nous utilisons le code de cellule DRAGON pour générer tous nos paramètres homogènes nous avons donc utilisé DRAGON pour le calcul des flux de surface hétérogènes qui sont nécessaires pour obtenir les facteurs de discontinuité.

Le projet a été divisé en deux grandes parties. La première partie consistait à calculer les flux de surface hétérogènes à partir du code de cellule DRAGON. Pour ce faire nous avons développé une méthode que nous avons appelée méthode directe. Nous avons comparé notre méthode à une autre que nous avons appelée méthode des régions minces. Les résultats obtenus furent satisfaisants ce qui nous a poussé à aller de l'avant et à générer une librairie complète de flux de surface hétérogènes pour un réacteur nucléaire de type CANDU-6.

Pour la deuxième partie du projet il suffisait de faire des calculs réacteurs à l'aide de DONJON-NDF (sur des géométries de type CANDU-6) en utilisant les facteurs de discontinuité et de comparer les résultats obtenus à ceux obtenus en faisant des calculs sans facteurs de discontinuité. Il faut mentionner que nous ne sommes pas parvenu à utiliser les vrais facteurs de discontinuité dans le cadre de ce projet mais nous avons plutôt utilisé ce que nous avons appelé les facteurs de discontinuité d'assemblage (ADF) qui sont une approximation. Une méthode est toutefois proposée dans ce mémoire pour le calcul des vrais facteurs de discontinuité. Les résultats que nous avons obtenus avec les ADF nous démontrent qu'ils peuvent avoir un fort impact sur les distributions de flux et de puissance au niveau du réflecteur et des interfaces coeur-réflecteur ainsi qu'aux extrémités

axiales du réacteur. Par contre, ils ont peu d'effets au niveau des mécanismes de contrôle. On constate aussi que le facteur de multiplication est peu affecté par la présence des facteurs de discontinuité dans les calculs pour un réacteur de type CANDU-6 en fonctionnement normal.

ABSTRACT

The work accomplished in the scope of this master project consists in introducing the equivalence theory inside the computational schema DRAGON/DONJON-NDF. This theory takes into account the possible discontinuity of the homogeneous flux at the surfaces inside problems that involve an homogenisation procedure. To do it, the theory include new factors called discontinuity factors. These factors give us, in theory, more exact solutions. Because we use the cell code DRAGON to generate all our homogeneous parameters we also used DRAGON to compute the heterogeneous surface fluxes which are essential to obtain the discontinuity factors.

The project has been divided into two parts. The first part consists in computing the heterogeneous surface fluxes with the cell code DRAGON. To do this we have developed a new computational method which we have called the direct method. We have compared our method with another one which we have called the thin regions method. The obtained results were rather good and we have produced a complete heterogeneous surface flux library for a CANDU-6 reactor type.

For the second part of the project we have performed reactor computations using the code DONJON-NDF (over CANDU-6 geometry) with discontinuity factors and we have compared the results thus obtained with those computed without discontinuity factors. We have to mention that we haven't used true discontinuity factor in the scope of this project but what we have called the assembly discontinuity factors (ADF) which constitute an approximation. However, a method is proposed in this thesis to compute the true discontinuity factors. The results we have obtained with the ADF show us that they can have a strong impact on the flux and power distribution near the core-reflector frontier. However, their effect is weak near the control mechanisms. We also observed that the multiplication factor was weakly affected by the presence of the discontinuity factors in the computation for a CANDU-6 reactor type in normal operation.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE	iv
REMERCIEMENTS	v
RÉSUMÉ	vi
ABSTRACT	viii
TABLE DES MATIÈRES	ix
LISTE DES FIGURES	xii
LISTE DES TABLEAUX	xv
LISTE DES ANNEXES	xvi
INTRODUCTION	1
CHAPITRE 1 DÉFINITION DU PROBLÈME	5
1.1 La neutronique	5
1.2 L'homogénéisation	9
1.3 Théorie d'équivalence	13
CHAPITRE 2 THÉORIE	17
2.1 Les flux de surface en théorie du transport	17
2.1.1 L'équation intégrale de transport	18
2.1.2 Discrétisation spatiale de l'équation intégrale de transport	22
2.1.3 Formulation matricielle	24
2.2 Les flux de surface en théorie de la diffusion	27

2.2.1	L'approximation de la diffusion	27
2.2.2	Les méthodes nodales	29
2.2.3	Les différences finies centrées	33
2.2.4	Les flux de surface	36
2.3	L'équation de diffusion en différences finies centrées	41
2.3.1	L'équation de diffusion standard	41
2.3.2	L'équation de diffusion modifiée	44
2.3.3	Importance des facteurs de discontinuité	47
2.4	La méthode SPH	51
CHAPITRE 3 CALCUL DES FLUX DE SURFACE À L'INTÉRIEUR DU CODE DE CELLULE DRAGON		56
3.1	Conditions frontières isotropes	57
3.2	Conditions frontières spéculaires	60
3.3	Condensation et homogénéisation sur les flux	62
3.4	Analyse des résultats	64
3.4.1	Effets des conditions frontières	64
3.4.2	Effets de la discrétisation spatiale	69
3.4.3	Assemblage CANDU-6 3D	76
3.4.4	Géométrie de grappe	80
3.5	Discussion des résultats	83
CHAPITRE 4 CALCUL DE FLUX ET DE PUISSANCE À L'INTÉRIEUR DU CODE RÉACTEUR DONJON-NDP		85
4.1	Description du modèle de coeur	86
4.2	Les flux de surface homogènes et les facteurs de discontinuité d'assemblage	91
4.3	Analyse des résultats	93
4.3.1	Effet du réflecteur	94
4.3.2	Barre de compensation #11	103

4.3.3	Barre liquide #4	111
4.3.4	Ensemble des barres de compensation et contrôleurs liquides . .	119
4.4	Discussion des résultats	132
CONCLUSION		135
RÉFÉRENCES		139
ANNEXES		142

LISTE DES FIGURES

Figure 3.1	Effets des conditions frontières (géométrie)	67
Figure 3.2	Effets de la discrétisation spatiale (géométrie)	72
Figure 3.3	Effets de la discrétisation spatiale (résultats)	73
Figure 3.4	Effets de la discrétisation spatiale près des frontières	74
Figure 3.5	Assemblage CANDU6 3D	78
Figure 3.6	Géométrie de grappe	81
Figure 4.1	Vue aérienne d'un réacteur CANDU-6	89
Figure 4.2	Distribution des différentes zones de combustible utilisées dans le cadre des simulations réacteur (coupe dans le plan axial) . . .	90
Figure 4.3	Écart entre facteurs de discontinuité adjacents dans les directions X (haut) et Y (bas) pour le groupe thermique (effet du réflecteur)	97
Figure 4.4	Distribution du flux thermique plan #6 (effet du réflecteur) . . .	99
Figure 4.5	Écart entre les distributions du flux thermique plan #6 (effet du réflecteur)	100
Figure 4.6	Distribution de puissance plan #6 (effet du réflecteur)	101
Figure 4.7	Écart entre les distributions de puissance plan #6 (effet du réflecteur)	102
Figure 4.8	Écart entre facteurs de discontinuité adjacents dans les directions X (haut) et Y (bas) pour le groupe thermique (barre de compen- sation #11)	105
Figure 4.9	Distribution du flux thermique plan #6 (barre de compensation #11)	107
Figure 4.10	Écart entre les distributions du flux thermique plan #6 (barre de compensation #11)	108
Figure 4.11	Distribution de puissance plan #6 (barre de compensation #11) .	109

Figure 4.12	Écart entre les distributions de puissance plan #6 (barre de compensation #11)	110
Figure 4.13	Écart entre facteurs de discontinuité adjacents dans les directions X (haut) et Y (bas) pour le groupe thermique (barre liquide #4)	113
Figure 4.14	Distribution du flux thermique plan #4 (barre liquide #4)	115
Figure 4.15	Écart entre les distributions du flux thermique plan #4 (barre liquide #4)	116
Figure 4.16	Distribution de puissance plan #4 (barre liquide #4)	117
Figure 4.17	Écart entre les distributions de puissance plan #4 (barre liquide #4)	118
Figure 4.18	Écart entre facteurs de discontinuité adjacents dans la direction X pour le groupe thermique (tous les mécanismes de contrôle insérés)	122
Figure 4.19	Distribution du flux thermique plan #4 (tous les mécanismes de contrôle insérés)	124
Figure 4.20	Écart entre les distributions du flux thermique plan #4 (tous les mécanismes de contrôle insérés)	125
Figure 4.21	Distribution du flux thermique plan #6 (tous les mécanismes de contrôle insérés)	126
Figure 4.22	Écart entre les distributions du flux thermique plan #6 (tous les mécanismes de contrôle insérés)	127
Figure 4.23	Distribution de puissance plan #4 (tous les mécanismes de contrôles insérés)	128
Figure 4.24	Écart entre les distributions de puissance plan #4 (tous les mécanismes de contrôle insérés)	129
Figure 4.25	Distribution de puissance plan #6 (tous les mécanismes de contrôle insérés)	130
Figure 4.26	Écart entre les distributions de puissance plan #6 (tous les mécanismes de contrôle insérés)	131

Figure II.1	Géométrie en théorie de la diffusion	145
-------------	--	-----

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 3.1	Flux de surface (conditions frontières spéculaires et isotropes) .	68
Tableau 3.2	Flux de surface (conditions frontières isotropes)	68
Tableau 3.3	Flux de surface évalué sur la surface X_- (groupe rapide)	75
Tableau 3.4	Flux de surface évalué sur la surface X_- (groupe thermique) . .	75
Tableau 3.5	Flux de surface pour un assemblage 3D	79
Tableau 3.6	Flux de surface pour les géométries de grappe	82
Tableau 4.1	Constante de multiplication (effet du réflecteur)	98
Tableau 4.2	Constante de multiplication (barre de compensation #11)	106
Tableau 4.3	Constante de multiplication (barre liquide #4)	114
Tableau 4.4	Constante de multiplication (tous les mécanismes de contrôle insérés)	123

LISTE DES ANNEXES

ANNEXE I	DÉPENDANCE ANGULAIRE DES FLUX DE SURFACE À L'INTÉRIEUR DU CODE DE CELLULE DRAGON	142
ANNEXE II	GÉOMÉTRIE EN THÉORIE DE LA DIFFUSION	144
ANNEXE III	PROGRAMMATION À L'INTÉRIEUR DE DRAGON	146
III.1	Modules ASM et EXCELL	146
III.2	Module FLU	148
III.3	Module EDI	149
ANNEXE IV	LA VARIABLE PROB	152

INTRODUCTION

En regardant l'état de l'opinion publique vis-à-vis l'énergie nucléaire au cours des deux dernières décennies, on constate bien que cette dernière n'a cessée de chuter avec le temps. L'accident de Chernobyl est probablement l'élément majeur qui a soit enclenché ou accéléré la formation de cette mauvaise opinion. À cause de cette chute de popularité, très peu de centrales ont vu le jour au cours de ces deux dernières décennies et la plupart des centrales existantes ont été construites pendant les années soixante et soixante-dix. De ce fait, ces centrales devront cesser de produire d'ici quelques années car elles auront atteint le seuil d'usure fixé lors de leur conception. Les différentes sociétés qui produisent une partie de leur électricité à partir du nucléaire devront donc prendre des décisions majeures en ce qui concerne les moyens de production d'électricité qu'ils désirent utiliser dans le futur. Bien que présentement le nucléaire n'a pas la faveur de l'opinion publique, cela n'est pas une raison pour écarter ce choix à la hâte.

En effet, les réalités d'aujourd'hui ne sont peut-être plus les mêmes que celles d'il y a vingt ans de même que les réalités de demain ne seront sûrement pas les mêmes que celles d'aujourd'hui. Par exemple, aujourd'hui nous avons l'accord de Kyoto qui cherche à faire diminuer le plus possible les émissions de gaz à effet de serre ce qui risque un jour d'empêcher la production d'énergie par des procédés fossiles qui pour l'instant sont les procédés les plus largement utilisés dans le domaine. Dans un futur qui semble passablement rapproché, c'est tout simplement le manque de ressources naturelles qui nous empêchera d'utiliser ce mode de production. Ceci nous force donc à réfléchir à des moyens pour remplacer ce mode de production.

Les groupements écologiques ont tendance à prôner l'utilisation de ce que l'on appelle les sources d'énergie renouvelables comme moyen de remplacement. Les sources d'énergie renouvelables les plus souvent citées sont l'énergie éolienne et l'énergie so-

laire. Un problème majeur avec ces formes d'énergie c'est qu'elles exigent l'utilisation de grands espaces afin de produire des quantités raisonnables d'énergie qui permettent de subvenir au besoin d'une société. De plus, ces formes d'énergie ne pourront probablement jamais concurrencer les énergies nucléaire et thermique au niveau de la quantité d'énergie produite par unité de production. Sans compter que ces formes d'énergie (éolienne et solaire) produisent elles aussi leur lot de pollution.

Les groupements écologiques proposent aussi d'essayer d'éduquer les sociétés afin de changer les coutumes et les habitudes de vie des gens dans le but qu'ils consomment moins d'énergie inutilement ce qui permettrait de réduire la production. C'est un point intéressant mais on peut se demander s'il est très réaliste. Ce point est largement de nature philosophique et ne sera pas débattu ici. Mentionnons seulement qu'il peut soulever la question de régression d'une société. Ce point touche aussi le sort des sociétés dite sous-développées qui, pour se développer, n'auront d'autre choix que d'augmenter leur production d'énergie. N'oublions pas que la planète est composée essentiellement de sociétés sous-développées. Finalement, il ne faut pas oublier que la population mondiale va toujours en augmentant et que forcément cela implique une augmentation incontournable de la production d'énergie au niveau planétaire.

À la lumière de tout cela, il y a fort à parier que même les écologistes anti-nucléaires finiront majoritairement, avec le temps, par changer leurs discours vis-à-vis du nucléaire et à considérer cette source comme étant une solution éclairée pour subvenir aux besoins énergétiques de la planète dans le futur. Dans cette optique, cela implique que la neutronique a encore sa place comme science pratique et ce pour encore très longtemps. Par conséquent, cette science a besoin d'être améliorée pour faire face aux nouveaux problèmes soulevés par les nouveaux concepts de réacteurs nucléaires conçus dans le but de tirer un meilleur rendement des ressources naturelles, d'être plus sécuritaires et d'être plus compactes et plus facile à construire. Sans compter que les nouveaux types de réacteurs auront aussi comme tâche supplémentaire de produire de l'hydrogène, un

autre vecteur d'énergie prometteur.

En matière d'innovation, ce qui est proposé dans le cadre de ce projet de maîtrise c'est d'introduire la théorie d'équivalence à l'intérieur de la chaîne de calcul DRAGON / DONJON-NDF [IGE-174, 2000, IGE-208, 2000]. Ceci implique que nous avons dû intervenir dans les deux codes en y apportant des modifications importantes. La théorie d'équivalence introduit une nouvelle technique d'homogénéisation. Tout comme la théorie standard d'homogénéisation, la théorie d'équivalence impose la conservation des taux de réactions, la conservation des courants de surface ainsi que la conservation du facteur de multiplication entre deux échelles de calcul. La théorie standard souffre par contre d'un manque de degrés de liberté pour satisfaire toutes ces conditions. La théorie d'équivalence se démarque en introduisant les facteurs de discontinuité comme nouveaux degrés de liberté et permet ainsi de satisfaire toutes les conditions énumérées précédemment.

Ce mémoire se divise en quatre chapitres en plus de la conclusion et des annexes. Le premier chapitre introduit le contexte du problème. Pour y parvenir, on fait un bref survol de la neutronique ce qui nous amènera à parler de l'homogénéisation comme moyen pour accélérer les calculs avec par contre une perte de précision sur les solutions. L'homogénéisation pose quelques problèmes qui seront résolus par l'introduction de la théorie d'équivalence, cette dernière sera également exposée dans ce chapitre.

Le second chapitre traite de la théorie qui supporte l'ensemble du travail qui a été accompli dans le cadre de ce projet. On verra comment on parvient à calculer les flux de surface en théorie du transport à l'intérieur du code de cellule DRAGON. Ces flux sont nécessaires dans la construction des facteurs de discontinuité. On verra aussi comment on parvient à calculer les flux de surface en théorie de la diffusion à l'intérieur du code réacteur DONJON-NDF. Ces flux sont aussi nécessaires dans la construction des facteurs de discontinuité. À la fin il sera présenté comment on utilise les facteurs de discontinuité

en théorie de la diffusion en différence finies centrées à l'intérieur du code réacteur.

Le troisième chapitre présente les résultats que nous avons obtenus lors des calculs avec le code de cellule DRAGON. Quelques notions nécessaires, pour comprendre les simulations effectuées ainsi que la façon de générer les résultats, seront présentées. Ces notions concernent les conditions frontières isotropes, les conditions frontières spéculaires ainsi que les techniques de condensation et d'homogénéisation sur les flux. Suivra une analyse complète et détaillée de chacun des résultats puis les conclusions que l'on peut en tirer.

Le quatrième chapitre présente les résultats obtenus lors des calculs avec le code de calcul DONJON-NDF. En premier lieu on y traitera de l'importance des facteurs de discontinuité afin de bien comprendre leurs effets sur les calculs de réacteur. Ensuite, les facteurs de discontinuité d'assemblage (ADF) seront présentés, et suivra l'analyse sommaire des résultats ainsi que les conclusions que l'on peut en tirer.

Finalement, la conclusion présentera un condensé des résultats majeurs obtenus lors des simulations effectuées dans les codes DRAGON et DONJON-NDF ainsi qu'une liste de recommandations pouvant servir de ligne de conduite pour des projets futurs afin d'améliorer et de compléter le travail effectué dans le cadre de ce projet de maîtrise.

CHAPITRE 1

DÉFINITION DU PROBLÈME

Ce chapitre a pour but de présenter clairement la nature du problème à résoudre dans le cadre de ce projet de maîtrise afin de mettre le lecteur en contexte. Nous présenterons donc dans un premier temps le rôle et l'importance de la neutronique dans l'exploitation d'un réacteur nucléaire afin de justifier de manière générale les efforts apportés en matière d'innovation dans le domaine. Ensuite, nous discuterons de la notion d'homogénéisation et du problème du manque de degrés de liberté dans la théorie standard. La dernière section traitera de la Théorie d'Équivalence [Koebeke, 1981, Smith, 1980, Smith, 1986] (ET) qui introduit les facteurs de discontinuités comme degrés de liberté supplémentaires.

1.1 La neutronique

Lorsque l'on exploite un réacteur nucléaire il existe deux quantités importantes dont on désire connaître la valeur. La première de ces quantités est la puissance produite par le réacteur. On peut vouloir connaître ce paramètre de manière locale, c'est à dire la puissance produite à un endroit précis dans le réacteur, ou bien de manière globale, c'est à dire la puissance totale produite par le réacteur. La deuxième quantité importante est le facteur de multiplication. Cette quantité nous permet de déterminer l'état du réacteur. Est-il à l'état d'équilibre (réacteur critique) ou est-il en phase de transition (réacteur sous-critique ou sur-critique). Afin de déterminer ces deux quantités, on doit faire appel à la neutronique.

La neutronique utilise à la base l'équation de transport qui, lorsque résolue, nous permet

de connaître le flux de neutrons à l'intérieur d'un domaine précis en se basant uniquement sur les caractéristiques des différents matériaux qui le composent et la façon dont ces derniers sont distribués. Le flux nous permet alors de déterminer les différents taux de réaction locaux et finalement la puissance locale dans notre domaine. Si l'on désire la puissance globale il suffit d'intégrer la puissance locale sur tout le volume du domaine. Quant au facteur de multiplication il nous est directement fourni en résolvant l'équation de transport statique par l'intermédiaire de la valeur propre.

Afin de préciser ce qui a été dit précédemment, nous utiliserons un formalisme mathématique simplifié où l'on admet $\phi(\vec{r}, t, \vec{\Omega}, E)$ comme étant le flux de neutrons à l'intérieur du domaine que l'on considère. Comme on peut le constater, ce flux dépend de la position $\vec{r}$, du temps t , de la direction de propagation des neutrons $\vec{\Omega}$ ainsi que de leur énergie E . La densité de puissance locale sera égale au taux de fission (nombre de fissions par unité de temps) multiplié par l'énergie moyenne libérée lors de ce type de réaction. Les autres types de réaction (diffusion, absorption,...) produisent peu d'énergie en comparaison et sont donc négligés. Si $\Sigma_f(\vec{r}, t, E)$ représente la section efficace macroscopique de fission du combustible alors le taux de fission local sera donné par [Lamarsh, 1966, Henry, 1975, Rozon, 1992]

$$\text{taux de fission local}(\vec{r}, t) = \int_{\vec{\Omega}} d^2\Omega \int_0^\infty dE \Sigma_f(\vec{r}, t, E) \phi(\vec{r}, t, \vec{\Omega}, E) \quad (1.1)$$

et si ϵ représente l'énergie moyenne libérée par une fission alors la densité de puissance locale $P(\vec{r}, t)$ sera donnée par

$$P(\vec{r}, t) = \epsilon \times \text{taux de fission local}(\vec{r}, t) \quad (1.2)$$

La puissance globale $P(t)$ sera quant à elle donnée par

$$P(t) = \int_V P(\vec{r}, t) dV \quad (1.3)$$

En ce qui concerne le facteur de multiplication, il a déjà été mentionné qu'il était relié à la valeur propre de l'équation de transport statique et on se contentera de mentionner ici que son sens physique correspond au rapport entre le nombre de neutrons produit durant une génération et le nombre de neutrons produit à la génération précédente. Bien entendu, on souhaite normalement que ce rapport soit égal à 1 pour qu'il y ait équilibre. Si k_{eff} est la constante de multiplication alors on aura [Rozon, 1992]

$$k_{eff} = \frac{\text{nombre de neutrons produit à la génération } N+1}{\text{nombre de neutrons produit à la génération } N} \quad (1.4)$$

et

$$k_{eff} \begin{cases} < 1 & \text{réacteur sous critique} \\ = 1 & \text{réacteur critique} \\ > 1 & \text{réacteur surcritique} \end{cases}$$

Un réacteur critique signifie l'état d'équilibre. Les deux autres états permettent d'induire des transitoires afin d'augmenter ou de réduire la puissance du réacteur.

Cependant, l'équation de transport qui permet d'obtenir le flux de neutrons, est une équation relativement complexe qui ne peut être résolue analytiquement, sauf pour quelques géométries très simples. Pour parvenir à obtenir des solutions, sur des géométries représentant des réacteurs réels, on doit faire appel à l'outil informatique ainsi que différentes techniques de résolution. L'une de ces techniques est l'utilisation de l'équation de diffusion qui est une approximation de l'équation de transport. Résoudre l'équation de diffusion demande moins de ressources informatiques que la résolution de l'équation de transport mais fournit des solutions approximatives qui peuvent toutefois être acceptables. Une autre technique est l'homogénéisation qui consiste à définir des sous-géométries typiques du réacteur qui se répètent à plusieurs endroits à l'intérieur de ce dernier puis à générer une valeur unique de chacun des paramètres (sections efficaces,

coefficient de diffusion) pour l'ensemble de la sous-géométrie.

Ces deux techniques peuvent être utilisées ensemble de plusieurs manières. On pourrait par exemple utiliser la théorie du transport afin d'obtenir des solutions pour les différentes sous-géométries, procéder à l'homogénéisation puis utiliser encore une fois la théorie du transport pour résoudre le problème sur l'ensemble du réacteur à l'aide des propriétés homogénéisées. On pourrait aussi se définir plusieurs niveaux de sous-géométries, une telle méthode a déjà été utilisée dans le cadre d'une méthode nodale hiérarchique [Kaveh, 2000] où les différents niveaux de géométries étaient traités en théorie de la diffusion.

La méthode choisie dans le cadre de ce projet de maîtrise est une méthode à deux niveaux de géométrie. Le premier niveau représente une cellule de type CANDU6 à différents degrés de combustion ou encore des assemblages de cellules de type CANDU6 avec différents mécanismes de contrôle insérés entre elles. On utilisera le code de cellule DRAGON [IGE-174, 2000] pour obtenir des solutions pour tous ces types de sous-géométries. DRAGON utilise la méthode des probabilités de collision pour résoudre l'équation de transport. Le second niveau représente un réacteur CANDU-6 complet avec réflecteur, barres de compensations et contrôleurs liquides. Au niveau du réacteur complet, on utilisera le code de calcul DONJON-NDF [IGE-208, 2000] pour obtenir les solutions. DONJON-NDF utilise la théorie de diffusion et de manière générale des méthodes nodales pour résoudre l'équation de la diffusion. Dans le cadre de cette étude par contre, nous nous limiterons aux différences finies centrées qui constituent la plus faible approximation des méthodes nodales [Koclas, 1998]. Pour passer du premier niveau de géométrie au second niveau on devra employer une technique d'homogénéisation, ce qui sera le sujet de la prochaine section.

1.2 L'homogénéisation

Lorsque l'on passe d'un maillage fin à un maillage plus grossier, on désire que certaines quantités soient préservées lors de la transition. On prendra en compte cette exigence au moment de définir les nouvelles caractéristiques du milieu à maillage plus grossier. Tout ce processus entre dans ce que l'on appelle les techniques d'homogénéisation. Il existe plusieurs techniques d'homogénéisation comme les techniques de pondération par le flux et le volume [Stacey, 2001], la technique SPH («SuPerHomogenization Method») [Kavenoky, 1978, Hébert, 1993a, Hébert, 1993b, Hébert, 1997] et autres. La technique SPH est une technique déjà implantée dans DRAGON [IGE-174, 2000] et largement utilisée. Par contre, il sera exposé dans cette section et la section suivante que la technique qui fut utilisée dans le cadre de ce projet de maîtrise à savoir la théorie d'équivalence.

À l'inverse, lorsque l'on passe du maillage plus grossier au maillage plus fin, on désire toujours conserver certaines quantités et on procède donc à une déhomogénéisation du problème afin de retrouver les propriétés de la maille fine [Koebeke, 1981, Kaveh, 2000]. Ce type d'opération ne sera pas traité dans ce mémoire puisqu'on n'a aucunement eu besoin de recourir à des techniques de déhomogénéisations dans le cadre de ce projet.

Dans notre cas, les quantités que l'on désire conserver en passant du maillage fin au maillage grossier sont les différents types de taux de réactions à l'intérieur de chacune des mailles grossières, les courants intégrés aux surfaces de chacune des mailles grossières ainsi que le facteur de multiplication k_{eff} . Si l'on identifie les différents paramètres du maillage grossier (aussi appelés paramètres homogènes) à l'aide d'un $\hat{}$ et ceux du maillage fin (ou paramètres hétérogènes) sans $\hat{}$ alors ce que l'on désire conserver peut-être exprimé mathématiquement de la façon suivante [Smith, 1980, Smith, 1986, Kaveh, 2000]

- Les différents taux de réactions

$$\int_{V_{ijk}} \hat{\Sigma}_{\alpha}(\vec{r}, t, E) \hat{\phi}(\vec{r}, t, E) d^3r = \int_{V_{ijk}} \Sigma_{\alpha}(\vec{r}, t, E) \phi(\vec{r}, t, E) d^3r \quad (1.5)$$

avec $\alpha = t, s, f$ représentant les sections efficaces macroscopiques totale, de diffusion et de fission respectivement, $\hat{\phi}(\vec{r}, t, E)$ est la solution du problème grossier à l'intérieur de la maille grossière identifiée ijk (voir l'annexe II pour la description du maillage grossier) et V_{ijk} est le volume de la maille grossière ijk .

- Les courants de surface

$$\int_{\partial V_{ijk}^n} \hat{\vec{J}}(\vec{r}, t, E) \cdot d\vec{S} = \int_{\partial V_{ijk}^n} \vec{J}(\vec{r}, t, E) \cdot d\vec{S} \quad (1.6)$$

où ∂V_{ijk}^n ($n = 1, \dots, N_S$) représente l'une des N_S surfaces délimitant la maille grossière ijk .

- Le facteur de multiplication

$$\hat{k}_{eff} = k_{eff} \quad (1.7)$$

On ne considère que le cas où les paramètres homogènes sont constants à l'intérieur d'une maille grossière. La relation (1.5) nous permettra alors de définir les différentes sections efficaces

$$\hat{\Sigma}_{\alpha,ijk}(t, E) = \frac{\int_{V_{ijk}} \Sigma_{\alpha}(\vec{r}, t, E) \phi(\vec{r}, t, E) d^3r}{\int_{V_{ijk}} \hat{\phi}(\vec{r}, t, E) d^3r} \quad (1.8)$$

Pour obtenir le dénominateur de cette dernière expression on supposera la relation

$$\int_{V_{ijk}} \hat{\phi}(\vec{r}, t, E) d^3r = \int_{V_{ijk}} \phi(\vec{r}, t, E) d^3r$$

qui n'est en réalité pas toujours satisfaite puisque les conditions frontières à l'intérieur

du code de cellule différent généralement de celles à l'intérieur du code réacteur [Smith, 1986].

L'équation de diffusion sera résolue sur les mailles grossières. Dans le cadre de cette théorie, on utilise la loi de Fick pour exprimer la relation entre le courant et le flux. Cette loi s'exprime comme suit [Henry, 1975]

$$\vec{J}(\vec{r}, t, E) = -\hat{D}(\vec{r}, t, E) \vec{\nabla} \hat{\phi}(\vec{r}, t, E) \quad (1.9)$$

où $\hat{D}(\vec{r}, t, E)$ est le coefficient de diffusion que l'on considère constant à l'intérieur d'une maille grossière. À ce moment les relations (1.6) et (1.9) nous permettent de définir les coefficients de diffusion homogènes

$$\hat{D}_{ijk}(t, E) = \frac{-\int_{\partial V_{ijk}^n} \vec{J}(\vec{r}, t, E) \cdot d\vec{S}}{\int_{\partial V_{ijk}^n} \vec{\nabla} \hat{\phi}(\vec{r}, t, E) \cdot d\vec{S}} \quad (1.10)$$

Comme la solution hétérogène est obtenue en théorie du transport, on utilisera les méthodes B_n pour générer le courant hétérogène $\vec{J}(\vec{r}, t, E)$. On peut déjà ici entrevoir une difficulté à l'intérieur de cette théorie d'homogénéisation. La relation (1.10) risque de définir N_S valeurs différentes de $\hat{D}_{ijk}(t, E)$ alors que l'on désire avoir une valeur unique, il manque donc des degrés de liberté ce qui implique que la condition (1.6) ne pourra être totalement respectée [Smith, 1986]. Par contre, il est possible d'utiliser des coefficients de diffusion directionnels pour parer partiellement à ce problème [Navarro, 1996]. Soulignons aussi que l'équivalence entre les facteurs de multiplication homogène et hétérogène n'est pas tout à fait respectée en pratique. Ce fait est causé par la différence entre les termes de fuite du problème hétérogène et du problème homogène qui, encore une fois, est liée à la difficulté de respecter la relation (1.6) [Smith, 1986].

En plus des trois conditions imposées précédemment, on doit rajouter d'autres conditions qui concernent la continuité des flux homogènes aux différentes interfaces entre les

différents volumes définis par le maillage grossier ainsi que la continuité des courants homogènes à ces mêmes interfaces. Cela signifie que des degrés de liberté supplémentaires doivent être intégrés à la théorie afin de rencontrer toutes ces conditions.

1.3 Théorie d'équivalence

Comme il a été mentionné dans la section précédente, la théorie d'homogénéisation standard souffre d'un manque de degrés de liberté afin de satisfaire les conditions de continuité des flux et des courants aux interfaces. Koebke [Koebke, 1981] proposa une solution en définissant des nouveaux degrés de liberté qui permettent de contourner la condition de continuité des flux aux interfaces entre les mailles grossières du système homogène.

Une description de la géométrie utilisée dans le code de réacteur en théorie de la diffusion est fournie à l'annexe II. Cette géométrie définit les mailles grossières du problème homogène où chaque maille est identifiée par trois entiers ijk . Le flux homogène à l'intérieur de cette maille est noté $\hat{\phi}(E, t)_{ijk}$. Le flux homogène sur la surface orientée selon l'axe des x dans le sens négatif de cette même maille sera noté $\hat{\phi}(x_i, E, t)_{ijk}$ alors que le flux homogène sur la surface orienté en x mais dans le sens positif sera noté $\hat{\phi}(x_{i+1}, E, t)_{ijk}$. De façon similaire on pourrait définir les flux homogènes aux surfaces orientés selon l'axe y ou z . Avec ces définitions les conditions de continuité des flux homogènes aux interfaces peuvent s'écrire de manière générale

$$\begin{aligned}\hat{\phi}(x_i, E, t)_{ijk} &= \hat{\phi}(x_i, E, t)_{i-1jk} \\ \hat{\phi}(y_j, E, t)_{ijk} &= \hat{\phi}(y_j, E, t)_{ij-1k} \\ \hat{\phi}(z_k, E, t)_{ijk} &= \hat{\phi}(z_k, E, t)_{ijk-1}\end{aligned}$$

Koebke suggéra plutôt d'autoriser la discontinuité des flux homogènes et d'introduire des nouveaux facteurs dans la théorie qui tiendraient compte du niveau de discontinuité de ces flux sur chacune des surfaces. Ces nouveaux facteurs constitueraient les degrés de liberté manquant et les conditions de continuité des flux homogènes seraient remplacées

par les conditions suivantes

$$f_{x,ijk}^-(E, t) \hat{\phi}(x_i, E, t)_{ijk} = f_{x,i-1jk}^+(E, t) \hat{\phi}(x_i, E, t)_{i-1jk} \quad (1.11)$$

$$f_{y,ijk}^-(E, t) \hat{\phi}(y_j, E, t)_{ijk} = f_{y,ij-1k}^+(E, t) \hat{\phi}(y_j, E, t)_{ij-1k} \quad (1.12)$$

$$f_{z,ijk}^-(E, t) \hat{\phi}(z_k, E, t)_{ijk} = f_{z,ijk-1}^+(E, t) \hat{\phi}(z_k, E, t)_{ijk-1} \quad (1.13)$$

et le degré de discontinuité à la surface x_i par exemple serait donné par le rapport de ces facteurs

$$\frac{f_{x,i-1jk}^+(E, t)}{f_{x,ijk}^-(E, t)} = \frac{\hat{\phi}(x_i, E, t)_{ijk}}{\hat{\phi}(x_i, E, t)_{i-1jk}}$$

Maintenant, en considérant que les flux hétérogènes sont continus sur ces mêmes interfaces cela permet à Koebke de définir des facteurs de la façon suivante

$$\begin{aligned} f_{x,ijk}^-(E, t) &= \frac{\phi(x_i, E, t)_{ijk}}{\hat{\phi}(x_i, E, t)_{ijk}} \quad ; \quad f_{x,ijk}^+(E, t) = \frac{\phi(x_{i+1}, E, t)_{ijk}}{\hat{\phi}(x_{i+1}, E, t)_{ijk}} \\ f_{y,ijk}^-(E, t) &= \frac{\phi(y_j, E, t)_{ijk}}{\hat{\phi}(y_j, E, t)_{ijk}} \quad ; \quad f_{y,ijk}^+(E, t) = \frac{\phi(y_{j+1}, E, t)_{ijk}}{\hat{\phi}(y_{j+1}, E, t)_{ijk}} \\ f_{z,ijk}^-(E, t) &= \frac{\phi(z_k, E, t)_{ijk}}{\hat{\phi}(z_k, E, t)_{ijk}} \quad ; \quad f_{z,ijk}^+(E, t) = \frac{\phi(z_{k+1}, E, t)_{ijk}}{\hat{\phi}(z_{k+1}, E, t)_{ijk}} \end{aligned}$$

où les flux sans « $\hat{\phi}$ » correspondent aux flux hétérogènes. Ces définitions permettent bien d'exprimer la continuité des flux hétérogènes aux interfaces des mailles grossières comme il se doit théoriquement. Par exemple, en utilisant les définitions de $f_{x,ijk}^-(E, t)$ et de $f_{x,i-1jk}^+(E, t)$ à l'intérieur de la condition (1.11), on obtient

$$\phi(x_i, E, t)_{ijk} = \phi(x_i, E, t)_{i-1jk}$$

qui exprime la continuité du flux hétérogène à l'interface x_i entre les volumes $i-1jk$ et ijk . Il en est de même pour les autres interfaces.

Lorsque Koebke utilisa sa méthode pour la première fois, il effectua une itération au niveau des coefficients de diffusion afin de forcer l'égalité entre les facteurs d'une même maille orientés dans la même direction [Koebke, 1981, Smith, 1980, Smith, 1986]. Par exemple pour la maille ijk dans la direction x cela implique

$$f_{x,ijk}^{-}(E, t) = f_{x,ijk}^{+}(E, t)$$

En trois dimensions cela exige d'avoir des coefficients de diffusion directionnels afin d'avoir suffisamment de degrés de liberté. Il appela alors sa théorie l'«Equivalence Theory» (ET) et appela ces facteurs «equivalence factors». Smith [Smith, 1980, Smith, 1986] reprit la méthode de Koebke mais sans forcer l'équivalence entre les facteurs d'une même maille ayant la même direction. Dans le cadre de la théorie de Smith on peut se contenter d'un seul coefficient de diffusion par maille et ce peu importe le nombre de dimensions. Smith appela sa théorie la «Generalized Equivalence Theory » (GET) et nomma ses facteurs «discontinuity factors » ou facteurs de discontinuité.

Comme on l'a vu, la définition des facteurs de discontinuité exige la continuité des flux hétérogènes aux interfaces des mailles grossières. Dans la réalité, ce que nous utilisons comme flux hétérogène n'est jamais parfaitement continu aux interfaces mais plus la discontinuité est faible, plus nous obtenons des résultats valides. La théorie du transport ainsi que le fait de considérer les détails hétérogènes de la cellule lors du calcul des flux de surface hétérogènes permettraient d'obtenir de faibles discontinuités de ces flux aux interfaces.

Ce que nous proposons dans le cadre de ce projet de maîtrise est d'obtenir des flux de surfaces à partir du code de cellule DRAGON dans le cadre d'une théorie du transport. Nous utiliserons ensuite ces flux comme flux hétérogènes de surface dans le calcul des facteurs de discontinuité. Nous espérons ainsi obtenir des facteurs ayant une plus grande validité que ceux obtenus dans le cadre d'une théorie diffusion-diffusion qui ne tien-

nent pas compte des détails hétérogènes de la cellule lors du calcul des flux de surface hétérogènes [Kaveh, 2000]. Le code réacteur DONJON-NDF fournira les flux de surfaces homogènes dans le cadre d'une théorie de la diffusion. Nous testerons ensuite les facteurs de discontinuité dans le code réacteur DONJON-NDF dans le cadre des différences finies centrées afin de démontrer que ces derniers sont bien implantés dans la chaîne de calcul DRAGON-DONJON-NDF. De plus, cela nous permettra d'avoir une première impression de l'importance que peuvent avoir les facteurs de discontinuité pour des calcul de réacteur de type CANDU-6.

CHAPITRE 2

THÉORIE

Ce projet a été réalisé en deux grandes parties. La première partie se déroule à l'intérieur du code de cellule DRAGON [IGE-174, 2000] dans le cadre de la théorie du transport neutronique alors que la deuxième partie s'effectue à l'intérieur du code de réacteur DONJON-NDF [IGE-208, 2000] dans le cadre de la théorie de la diffusion neutronique. Ce chapitre se divisera par contre en quatre sous sections. La première sous section traitera de la théorie du transport et de la méthode des probabilités de collision utilisée pour résoudre l'équation de transport. On verra comment on obtient les flux de surface à partir de cette méthode. Dans la seconde sous section, il sera démontré comment on parvient à calculer les flux de surface dans le cadre de la théorie de la diffusion avec la méthode des différences finies centrées. Une troisième sous section traitera des modifications qu'apporte la théorie des facteurs de discontinuité à l'équation de diffusion dans le cadre des différences finies centrées et on mettra en lumière dans quels contextes les facteurs de discontinuité sont indispensable ou non. Une dernière section présentera l'équivalence entre la méthode SPH et la théorie d'équivalence lorsque tous les volumes homogènes possèdent un seul facteur de discontinuité pour chacune de leurs surfaces. Cette section permettra de mettre en évidence le cadre plus général qu'offre la théorie d'équivalence par rapport à la méthode SPH.

2.1 Les flux de surface en théorie du transport

Il sera démontré dans cette section comment on obtient théoriquement les flux de surface en théorie du transport lorsque l'on utilise la méthode des probabilités de collision.

2.1.1 L'équation intégrale de transport

L'équation de transport en neutronique est bien connue et prend la forme générale suivante à l'état d'équilibre statique [Henry, 1975, Davison, 1957, IGE-236, 2001]

$$\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) + \Sigma(\vec{r}, E) \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = Q(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \quad (2.1)$$

où $\phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$ représente le flux de neutrons, le terme $\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$ est le terme de fuite alors que $\Sigma(\vec{r}, E) \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$ est le terme d'interaction totale et finalement $Q(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$ représente l'ensemble des sources de neutrons (diffusion et fission) et s'exprime comme suit

$$\begin{aligned} Q(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = & \frac{\chi(E)}{k_{eff}} \int_{\vec{\Omega}'} \int_0^\infty \nu \Sigma_f(\vec{r}, E') \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E') dE' d^2\Omega' \\ & + \int_{\vec{\Omega}'} \int_0^\infty \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E') dE' d^2\Omega' \end{aligned} \quad (2.2)$$

avec $\chi(E)$ le spectre énergétique des neutrons, k_{eff} le facteur de multiplication, ν le nombre moyen de neutrons produits par fission, $\Sigma_f(\vec{r}, E')$ la section efficace macroscopique de fission et $\Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega})$ la section efficace macroscopique de diffusion.

L'équation de transport (2.1) représente un équilibre entre les neutrons qui disparaissent de l'élément d'hypervolume $\{\vec{r}, \vec{\Omega}, E\}$ (termes de gauche) et les neutrons qui apparaissent dans ce même élément d'hypervolume (terme de droite). Il est possible de réécrire l'équation (2.1) sous sa représentation multigroupe pour le groupe g comme suit

$$\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \Sigma^g(\vec{r}) \phi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = Q^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) \quad (2.3)$$

avec

$$Q^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{\chi^g}{k_{eff}} \int_{\vec{\Omega}'} \sum_{g'} \nu \Sigma_f^{g'}(\vec{r}) \phi^{g'}(\vec{r}, \vec{\Omega}') d^2\Omega' + \int_{\vec{\Omega}'} \sum_{g'} \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\vec{r}, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \phi^{g'}(\vec{r}, \vec{\Omega}') d^2\Omega' \quad (2.4)$$

où le flux ϕ^g est défini de la façon suivante

$$\phi^g \equiv \int_{E_g}^{E_{g-1}} \phi(E) dE \quad (2.5)$$

et où toutes les autres quantités X^g sont définies comme suit

$$X^g \equiv \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} X(E) f(E) dE}{\int_{E_g}^{E_{g-1}} f(E) dE} \quad (2.6)$$

avec $f(E)$ une fonction de poids et on utilisera généralement $\phi(E)$ pour tenir ce rôle [Henry, 1975].

On veut maintenant évaluer le flux de neutrons au point $\vec{r}$ engendré par les neutrons provenant de n'importe quel point $\vec{r}'$ qui l'entoure. Comme $\phi^g(\vec{r}', \vec{\Omega})$ satisfait localement l'équation de transport, nous pouvons alors écrire l'opérateur de fuite de la façon suivante $\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} = -d/dR$ pour chaque point $\vec{r}' = \vec{r} - R\vec{\Omega}$ avec $R = |\vec{r} - \vec{r}'|$ [IGE-236, 2001, Lewis & Miller, 1984]. À tout cela on rajoute l'hypothèse que la source est isotrope

$$Q^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} q^g(\vec{r})$$

et l'équation (2.3) s'écrit alors comme suit

$$\frac{-d}{dR} \phi^g(\vec{r} - R\vec{\Omega}, \vec{\Omega}) + \Sigma^g(\vec{r} - R\vec{\Omega}) \phi^g(\vec{r} - R\vec{\Omega}, \vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} q^g(\vec{r} - R\vec{\Omega}) \quad (2.7)$$

cette équation a la forme

$$\frac{df(x)}{dx} + g(x)f(x) = h(x) \quad (2.8)$$

et se résout par la méthode du facteur intégrant. Dans notre cas le facteur intégrant aura la forme suivante

$$e^{-\tau^g(R)} \quad (2.9)$$

où $\tau^g(R)$ représente le parcours optique des neutrons et est mathématiquement défini de la façon suivante

$$\tau^g(R) \equiv \int_0^R \Sigma^g(\vec{r} - R'\vec{\Omega}) dR' \quad (2.10)$$

En résolvant l'équation (2.7) à l'aide de la méthode du facteur intégrant on obtient

$$\begin{aligned} \phi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) &= e^{-\tau^g(R_s)} \phi^g(\vec{r}_s, \vec{\Omega}) \\ &+ \frac{1}{4\pi} \int_0^R e^{-\tau^g(R')} q^g(\vec{r}') dR' \end{aligned} \quad (2.11)$$

qui est l'équation integrale de transport avec

$$\vec{r}_s = \vec{r} - R_s \vec{\Omega} \quad \vec{r}' = \vec{r} - R' \vec{\Omega}$$

$$R_s = |\vec{r} - \vec{r}_s| \quad R' = |\vec{r} - \vec{r}'|$$

où $\vec{r}_s$ est un point sur la surface du domaine considéré. Ce point est déterminé par rapport au point $\vec{r}$ et l'orientation $\vec{\Omega}$.

Si l'on intègre sur l'angle solide $\phi^g(\vec{r}) = \int_{\vec{\Omega}} \phi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) d^2\Omega$ (en utilisant l'approximation concernant la dépendance angulaire du flux de surface décrite à l'annexe I) on aura [IGE-

236, 2001]

$$\begin{aligned}\phi^g(\vec{r}) = & \int_S \frac{e^{-\tau^g(R_s)}}{4\pi R_s^2} (\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_-) \phi_-^g(\vec{r}_s) d^2 r' \\ & + \int_V \frac{e^{-\tau^g(R')}}{4\pi R'^2} q^g(\vec{r}') d^3 r'\end{aligned}\quad (2.12)$$

où on a utilisé les relations

$$\begin{aligned}d^3 r &= R^2 d^2 \Omega dR \\ (\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_-) d^2 r &= R_s^2 d^2 \Omega\end{aligned}$$

ainsi que la relation (I.2) pour le flux de surface avec l'indice 0 supprimé.

Supposons une surface S_α et $\vec{r}_\alpha \in S_\alpha$. En prenant la limite $\vec{r} \rightarrow \vec{r}_\alpha$ dans (2.12) on obtient [IGE-236, 2001]

$$\begin{aligned}\phi_+^g(\vec{r}_\alpha) = & \int_S \frac{e^{-\tau^g(R_s)}}{4\pi R_s^2} (\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_-) \phi_-^g(\vec{r}_s, E) d^2 r' \\ & + \int_V \frac{e^{-\tau^g(R')}}{4\pi R'^2} q^g(\vec{r}') d^3 r'\end{aligned}\quad (2.13)$$

avec $\vec{r}_\alpha$ qui apparait dans R_s et R' ($R_s = |\vec{r}_\alpha - \vec{r}_s|$ et $R' = |\vec{r}_\alpha - \vec{r}'|$). Et on a $\phi_-^g(\vec{r}_s)$ qui est relié à $\phi_+^g(\vec{r}_s)$ par les conditions d'albédo [IGE-236, 2001]

$$\phi_-^g(\vec{r}_s) = \beta^g(\vec{r}_s) \phi_+^g(\vec{r}_s) \quad (2.14)$$

où $\beta^g(\vec{r}_s)$ est le coefficient de réflexion au point $\vec{r}_s$ de la surface considérée.

2.1.2 Discrétisation spatiale de l'équation intégrale de transport

On discrétise l'ensemble du domaine en N_V régions de volume V_i dans lesquelles toutes les propriétés (sections efficaces, densité atomique, etc.) sont constantes ainsi que N_S surfaces externes d'aire S_α sur lesquelles les propriétés sont également constantes. On définit aussi des flux constant sur ces mêmes volumes et ces mêmes surfaces de la façon suivante [IGE-236, 2001].

$$\begin{aligned}\phi_i^g &= \frac{1}{V_i} \int_{V_i} \phi^g(\vec{r}) d^3r \\ \phi_{\pm, \alpha}^g &= \frac{4}{S_\alpha} \int_{S_\alpha} d^2r (\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_\pm) \phi_\pm^g(\vec{r}_s)\end{aligned}$$

Si on utilise (2.12) pour ϕ_i^g on aura

$$\begin{aligned}V_i \phi_i^g &= \sum_{\alpha=1}^{N_S} \int_{V_i} \int_{S_\alpha} \frac{e^{-\tau^g(R_s)}}{4\pi R_s^2} (\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_-) \phi_{-, \alpha}^g d^3r d^2r' \\ &\quad + \sum_{j=1}^{N_V} \int_{V_i} \int_{V_j} \frac{e^{-\tau^g(R)}}{4\pi R^2} q_j^g d^3r' d^3r\end{aligned}\tag{2.15}$$

où q_j^g est la source constante à l'intérieur du volume j . À l'aide de (2.13) on obtient une relation pour le flux sortant à la surface S_α (soit $\phi_{+, \alpha}^g$)

$$\begin{aligned}\frac{S_\alpha}{4} \phi_{+, \alpha}^g &= \sum_{\beta=1}^{N_S} \int_{S_\alpha} \int_{S_\beta} \frac{e^{-\tau^g(R_s)}}{4\pi R_s^2} (\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_+) (\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_-) \phi_{-, \beta}^g d^2r d^2r' \\ &\quad + \sum_{j=1}^{N_V} \int_{S_\alpha} \int_{V_j} \frac{e^{-\tau^g(R)}}{4\pi R^2} (\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_+) q_j^g d^3r' d^2r\end{aligned}\tag{2.16}$$

Les conditions d'albédo (2.14) reliant ϕ_-^g à ϕ_+^g prendront maintenant la forme suivante

$$\phi_{-,\alpha}^g = \sum_{\beta=1}^{N_S} A_{\alpha\beta}^g \phi_{+,\beta}^g \quad (2.17)$$

où $A_{\alpha\beta}^g$ est un élément de la matrice d'albédo qui relie la surface S_α à la surface S_β .

On définit les probabilités de collision suivantes [IGE-236, 2001]

$$\tilde{p}_{ij}^g = V_i p_{ij}^g = \int_{V_i} \int_{V_j} \frac{e^{-\tau^g(R)}}{4\pi R^2} d^3 r' d^3 r \quad (2.18)$$

$$\tilde{p}_{i\alpha}^g = V_i p_{i\alpha}^g = \int_{V_i} \int_{S_\alpha} \frac{e^{-\tau^g(R_s)}}{4\pi R_s^2} (\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_-) d^3 r d^2 r' \quad (2.19)$$

$$\tilde{p}_{\alpha i}^g = \frac{S_\alpha}{4} p_{\alpha i}^g = \int_{S_\alpha} \int_{V_i} \frac{e^{-\tau^g(R)}}{4\pi R^2} (\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_+) d^3 r' d^2 r \quad (2.20)$$

$$\tilde{p}_{\alpha\beta}^g = \frac{S_\alpha}{4} p_{\alpha\beta}^g = \int_{S_\alpha} \int_{S_\beta} \frac{e^{-\tau^g(R_s)}}{4\pi R_s^2} (\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_-) (\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_+) d^2 r d^2 r' \quad (2.21)$$

ce qui permet de réécrire (2.15) et (2.16) comme suit [IGE-236, 2001]

$$\phi_i^g = \sum_{\alpha=1}^{N_S} p_{i\alpha}^g \phi_{-,\alpha}^g + \sum_{j=1}^{N_V} p_{ij}^g q_j^g \quad (2.22)$$

$$\phi_{+,\alpha}^g = \sum_{\beta=1}^{N_S} p_{\alpha\beta}^g \phi_{-,\beta}^g + \sum_{j=1}^{N_V} p_{\alpha j}^g q_j^g \quad (2.23)$$

2.1.3 Formulation matricielle

Il est possible d'écrire sous forme matricielle les équations (2.22), (2.23) et (2.17) comme suit

$$\vec{\phi}^g = [p_{VS}]^g \vec{J}_-^g + [p_{VV}]^g \vec{q}^g \quad (2.24)$$

$$\vec{J}_+^g = [p_{SS}]^g \vec{J}_-^g + [p_{SV}]^g \vec{q}^g \quad (2.25)$$

$$\vec{J}_-^g = [A]^g \vec{J}_+^g \quad (2.26)$$

où

$$\begin{aligned} \vec{\phi}^g &= (\phi_1^g, \dots, \phi_i^g, \dots, \phi_{N_V}^g)^T \\ \vec{J}_\pm^g &= (\phi_{\pm,1}^g, \dots, \phi_{\pm,\alpha}^g, \dots, \phi_{\pm,N_S}^g)^T \\ \vec{q}^g &= (q_1^g, \dots, q_i^g, \dots, q_{N_V}^g)^T \end{aligned}$$

les éléments des matrices $[p_{XY}]^g$ sont définis par les équations (2.18) à (2.21) et $[A]^g$ représente la matrice d'albédo.

Si l'on substitue (2.25) dans (2.26) on a, après manipulations

$$\vec{J}_-^g = \left([I] - [A]^g [p_{SS}]^g \right)^{-1} [A]^g [p_{SV}]^g \vec{q}^g \quad (2.27)$$

si l'on substitue (2.27) dans (2.24) on aura

$$\vec{\phi}^g = \left\{ [p_{VS}]^g \left([I] - [A]^g [p_{SS}]^g \right)^{-1} [A]^g [p_{SV}]^g + [p_{VV}]^g \right\} \vec{q}^g \quad (2.28)$$

et de la même façon si l'on substitue (2.27) dans (2.25) on obtient

$$\vec{J}_+^g = \left\{ [p_{SS}]^g \left([I] - [A]^g [p_{SS}]^g \right)^{-1} [A]^g [p_{SV}]^g + [p_{SV}]^g \right\} \vec{q}^g \quad (2.29)$$

On définit les matrices complètes suivantes

$$[P_{VV}^C]^g \equiv [p_{VS}]^g \left([I] - [A]^g [p_{SS}]^g \right)^{-1} [A]^g [p_{SV}]^g + [p_{VV}]^g \quad (2.30)$$

$$[P_{SV}^C]^g \equiv [p_{SS}]^g \left([I] - [A]^g [p_{SS}]^g \right)^{-1} [A]^g [p_{SV}]^g + [p_{SV}]^g \quad (2.31)$$

et les équations (2.28) et (2.29) deviennent alors

$$\boxed{\vec{\phi}^g = [P_{VV}^C]^g \vec{q}^g} \quad (2.32)$$

$$\boxed{\vec{J}_+^g = [P_{SV}^C]^g \vec{q}^g} \quad (2.33)$$

et on obtient $\vec{J}_-^g$ à l'aide de (2.26)

$$\boxed{\vec{J}_-^g = [A]^g \vec{J}_+^g} \quad (2.34)$$

On a finalement obtenu des expressions qui permettent d'exprimer les flux de volume et les flux de surface uniquement à partir du terme de source $\vec{q}^g$ et des matrices de probabilités de collision $[p_{XY}]^g$ et d'albédo $[A]^g$ que nous pouvons calculer à l'aide du logiciel DRAGON. Le flux de surface hétérogène que nous allons utiliser à l'intérieur des expressions pour les facteurs de discontinuité sera donc

$$\boxed{\vec{J}^g = \frac{\vec{J}_+^g + \vec{J}_-^g}{2}} \quad (2.35)$$

Bien entendu, le terme de source $\vec{q}^g$ a une dépendance directe sur le flux de volume $\vec{\phi}^g$

$$\vec{q}^g = \frac{1}{k_{eff}} \sum_{g'} [\chi^g \nu \Sigma_f^{g'}] \vec{\phi}^{g'} + \sum_{g'} [\Sigma_s^{g' \rightarrow g}] \vec{\phi}^{g'} \quad (2.36)$$

et le code DRAGON résout l'équation (2.32) à l'aide de méthodes itératives [IGE-236, 2001]. Par contre, le terme de source qui est utilisé dans (2.33) est calculé à partir du

flux de volume convergé.

2.2 Les flux de surface en théorie de la diffusion

Il sera démontré dans cette section comment on obtient théoriquement les flux de surface en théorie de la diffusion lorsque l'on utilise la méthode des différences finies centrées.

2.2.1 L'approximation de la diffusion

Pour commencer, nous rappelons que dans le cadre de ce projet, la théorie de la diffusion a été utilisée uniquement pour des problèmes homogénéisés sur maille grossière comme il a déjà été mentionné au chapitre 1. De ce fait, toutes les quantités utilisées en diffusion seront notées avec un « $\hat{\cdot}$ ». Maintenant réécrivons l'équation de transport statique (2.3) sous la forme [Rozon, 1992]

$$\vec{\nabla} \cdot [\hat{J}(\vec{r}, \vec{\Omega})] + [\hat{\Sigma}(\vec{r})][\hat{\phi}(\vec{r}, \vec{\Omega})] = [\hat{Q}(\vec{r}, \vec{\Omega})] \quad (2.37)$$

où nous avons utilisé la notation matricielle sur les groupes d'énergie afin de faciliter les manipulations mathématiques. On a donc

$$\begin{aligned} [\hat{\phi}(\vec{r}, \vec{\Omega})] &= [\hat{\phi}^1(\vec{r}, \vec{\Omega}), \dots, \hat{\phi}^g(\vec{r}, \vec{\Omega}), \dots, \hat{\phi}^{N_G}(\vec{r}, \vec{\Omega})]^T \\ [\hat{J}(\vec{r}, \vec{\Omega})] &= [\hat{J}^1(\vec{r}, \vec{\Omega}), \dots, \hat{J}^g(\vec{r}, \vec{\Omega}), \dots, \hat{J}^{N_G}(\vec{r}, \vec{\Omega})]^T \\ [\hat{Q}(\vec{r}, \vec{\Omega})] &= [\hat{Q}^1(\vec{r}, \vec{\Omega}), \dots, \hat{Q}^g(\vec{r}, \vec{\Omega}), \dots, \hat{Q}^{N_G}(\vec{r}, \vec{\Omega})]^T \end{aligned}$$

et

$$[\hat{\Sigma}(\vec{r})] = \begin{bmatrix} \hat{\Sigma}^1(\vec{r}) & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & \hat{\Sigma}^g(\vec{r}) & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & \hat{\Sigma}^{N_G}(\vec{r}) \end{bmatrix}$$

Nous utilisons la source $[\hat{Q}(\vec{r}, \vec{\Omega})]$ telle que définie par l'équation (2.4) mais avec les propriétés homogènes. Nous définissons le courant neutronique comme suit

$$[\hat{J}(\vec{r}, \vec{\Omega})] \equiv \vec{\Omega}[\hat{\phi}(\vec{r}, \vec{\Omega})] \quad (2.38)$$

Une première étape à l'approximation de diffusion consiste à intégrer (2.37) sur l'angle solide $\vec{\Omega}$ ce qui nous donne [Henry, 1975, Rozon, 1992]

$$\vec{\nabla} \cdot [\hat{J}(\vec{r})] + [\hat{\Sigma}(\vec{r})][\hat{\phi}(\vec{r})] = [\hat{Q}(\vec{r})] \quad (2.39)$$

avec

$$\begin{aligned} [\hat{J}(\vec{r})] &\equiv \int_{\vec{\Omega}} [\hat{J}(\vec{r}, \vec{\Omega})] d^2\Omega \\ [\hat{\phi}(\vec{r})] &\equiv \int_{\vec{\Omega}} [\hat{\phi}(\vec{r}, \vec{\Omega})] d^2\Omega \\ [\hat{Q}(\vec{r})] &\equiv \int_{\vec{\Omega}} [\hat{Q}(\vec{r}, \vec{\Omega})] d^2\Omega \end{aligned}$$

Une deuxième étape consiste à choisir une relation approximative entre le courant et le flux. La relation que nous utiliserons est une approximation bien connue sous le nom de

loi de Fick [Henry, 1975, Rozon, 1992]

$$[\hat{J}(\vec{r})] = -[\hat{D}(\vec{r})]\vec{\nabla}[\hat{\phi}(\vec{r})] \quad (2.40)$$

avec

$$[\hat{D}(\vec{r})] = \begin{bmatrix} \hat{D}^1(\vec{r}) & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & \hat{D}^g(\vec{r}) & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & \hat{D}^{N_G}(\vec{r}) \end{bmatrix}$$

on obtient ainsi l'équation de diffusion neutronique

$$-\vec{\nabla} \cdot [\hat{D}(\vec{r})]\vec{\nabla}[\hat{\phi}(\vec{r})] + [\hat{\Sigma}(\vec{r})][\hat{\phi}(\vec{r})] = [\hat{Q}(\vec{r})] \quad (2.41)$$

2.2.2 Les méthodes nodales

Notre objectif ultime est d'établir des relations entre les flux moyens de volume ijk (voir annexe II pour la description de la géométrie en diffusion) et les flux moyens aux surfaces de ces mêmes volumes dans le cadre des différences finies centrées. Pour ce faire on prendra comme point de départ les méthodes nodales pour aboutir finalement à la méthode des différences finies car cette dernière constitue une approximation des premières tel que démontré par Koclas [Koclas, 1998]. Nous reprendrons ici cette démonstration.

Dans les situations qui nous intéressent il n'y aura pas de source fixe de telle sorte que la

source sera constituée uniquement d'une somme de termes ayant la forme $[\hat{\Sigma}_\alpha(\vec{r})][\hat{\phi}(\vec{r})]$ où $[\hat{\Sigma}_\alpha]$ représente la section efficace de diffusion ou de fission. On peut donc à ce moment unir le terme de source au terme d'absorption totale en se définissant une section efficace globale $[\hat{\Sigma}'_{\hat{k}_{eff}}]$ qui dépend du facteur de multiplication $\hat{k}_{eff}$ par l'intermédiaire du terme de fission, c'est-à-dire

$$[\hat{\Sigma}'_{\hat{k}_{eff}}(\vec{r})] = [\hat{\Sigma}(\vec{r})] - \frac{1}{\hat{k}_{eff}} [\hat{\chi} \hat{\nu} \hat{\Sigma}_f(\vec{r})] - [\hat{\Sigma}_s(\vec{r})] \quad (2.42)$$

avec

$$[\hat{\chi} \hat{\nu} \hat{\Sigma}_f(\vec{r})] = \begin{bmatrix} \hat{\chi}^1 \hat{\nu} \hat{\Sigma}_f^1(\vec{r}) & \dots & \hat{\chi}^1 \hat{\nu} \hat{\Sigma}_f^g(\vec{r}) & \dots & \hat{\chi}^1 \hat{\nu} \hat{\Sigma}_f^{N_G}(\vec{r}) \\ \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ \hat{\chi}^g \hat{\nu} \hat{\Sigma}_f^1(\vec{r}) & \dots & \hat{\chi}^g \hat{\nu} \hat{\Sigma}_f^g(\vec{r}) & \dots & \hat{\chi}^g \hat{\nu} \hat{\Sigma}_f^{N_G}(\vec{r}) \\ \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hat{\chi}^{N_G} \hat{\nu} \hat{\Sigma}_f^1(\vec{r}) & \dots & \hat{\chi}^{N_G} \hat{\nu} \hat{\Sigma}_f^g(\vec{r}) & \dots & \hat{\chi}^{N_G} \hat{\nu} \hat{\Sigma}_f^{N_G}(\vec{r}) \end{bmatrix}$$

$$[\hat{\Sigma}_s(\vec{r})] = \begin{bmatrix} \hat{\Sigma}_s^{1 \leftarrow 1}(\vec{r}) & \dots & \hat{\Sigma}_s^{1 \leftarrow g}(\vec{r}) & \dots & \hat{\Sigma}_s^{1 \leftarrow N_G}(\vec{r}) \\ \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ \hat{\Sigma}_s^{g \leftarrow 1}(\vec{r}) & \dots & \hat{\Sigma}_s^{g \leftarrow g}(\vec{r}) & \dots & \hat{\Sigma}_s^{g \leftarrow N_G}(\vec{r}) \\ \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hat{\Sigma}_s^{N_G \leftarrow 1}(\vec{r}) & \dots & \hat{\Sigma}_s^{N_G \leftarrow g}(\vec{r}) & \dots & \hat{\Sigma}_s^{N_G \leftarrow N_G}(\vec{r}) \end{bmatrix}$$

et l'équation (2.39) devient [Koclas, 1996]

$$\vec{\nabla} \cdot [\hat{\vec{J}}(\vec{r})] + [\hat{\Sigma}'_{\hat{k}_{eff}}(\vec{r})][\hat{\phi}(\vec{r})] = 0 \quad (2.43)$$

Nous allons maintenant intégrer l'équation (2.43) ainsi que l'équation (2.40) selon deux directions à l'intérieur d'un élément de volume ijk afin d'obtenir une nouvelle équation.

Arbitrairement nous choisirons d'intégrer selon l'axe y et l'axe z en appliquant l'opérateur

$$\frac{1}{h_y^j h_z^k} \int_{y_j}^{y_{j+1}} dy \int_{z_k}^{z_{k+1}} dz$$

ceci nous donnera un système unidimensionnel dans la direction x mais une méthode totalement similaire peut être appliquée pour les directions y et z . On supposera le coefficient de diffusion et les sections efficaces constantes à l'intérieur d'un volume ijk et on les notera $[\hat{D}]_{ijk}$ et $[\hat{\Sigma}'_{\hat{k}_{eff}}]_{ijk}$. On définit aussi les quantités suivantes

$$\begin{aligned} [\hat{\phi}(x)]_{ijk} &= \frac{1}{h_y^j h_z^k} \int_{y_j}^{y_{j+1}} dy \int_{z_k}^{z_{k+1}} dz [\hat{\phi}(x, y, z)] \\ [\hat{J}_x(x)]_{ijk} &= \frac{1}{h_y^j h_z^k} \int_{y_j}^{y_{j+1}} dy \int_{z_k}^{z_{k+1}} dz [\hat{J}_x(x, y, z)] \end{aligned}$$

Le premier terme dans (2.43) fera aussi apparaître des termes de fuites transversales à la direction x à cause des éléments $[\hat{J}_y(x, y, z)]$ et $[\hat{J}_z(x, y, z)]$. Ces fuites seront réunies dans un seul terme que l'on dénotera $[\hat{S}_x(x)]_{ijk}$ et qui aura la forme générale suivante [Koclas, 1996].

$$[\hat{S}_x(x)]_{ijk} = \frac{1}{h_y^j h_z^k} \int_{y_j}^{y_{j+1}} dy \int_{z_k}^{z_{k+1}} dz \left[\frac{\partial}{\partial y} [\hat{J}_y(x, y, z)] + \frac{\partial}{\partial z} [\hat{J}_z(x, y, z)] \right]$$

Si l'on applique tout ce qui vient d'être dit, les équations (2.40) et (2.43) peuvent être réécrites de la façon suivante pour la direction x

$$\frac{\partial}{\partial x} [\hat{\phi}(x)]_{ijk} + [\hat{D}]_{ijk}^{-1} [\hat{J}_x(x)]_{ijk} = 0 \quad (2.44)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} [\hat{J}_x(x)]_{ijk} + [\hat{\Sigma}'_{\hat{k}_{eff}}]_{ijk} [\hat{\phi}(x)]_{ijk} = - [\hat{S}_x(x)]_{ijk} \quad (2.45)$$

Maintenant, si l'on se définit les vecteurs suivants [Koclas, 1996]

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \hat{\psi}(x) \end{bmatrix}_{ijk} &= \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\phi}(x) \end{bmatrix}_{ijk} \\ \begin{bmatrix} \hat{J}_x(x) \end{bmatrix}_{ijk} \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} \hat{L}_x(x) \end{bmatrix}_{ijk} &= \begin{bmatrix} [0] \\ -\begin{bmatrix} \hat{S}_x(x) \end{bmatrix}_{ijk} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

et la matrice suivante [Koclas, 1996]

$$\begin{bmatrix} \hat{N}_{\hat{k}_{eff}} \end{bmatrix}_{ijk} = \begin{bmatrix} [0] & \begin{bmatrix} \hat{D} \end{bmatrix}_{ijk}^{-1} \\ \begin{bmatrix} \hat{\Sigma}'_{\hat{k}_{eff}} \end{bmatrix}_{ijk} & [0] \end{bmatrix}$$

alors les équations (2.44) et (2.45) peuvent s'écrire en une seule équation qui prendra la forme suivante [Koclas, 1996]

$$\frac{\partial}{\partial x} \begin{bmatrix} \hat{\psi}(x) \end{bmatrix}_{ijk} + \begin{bmatrix} \hat{N}_{\hat{k}_{eff}} \end{bmatrix}_{ijk} \begin{bmatrix} \hat{\psi}(x) \end{bmatrix}_{ijk} = \begin{bmatrix} \hat{L}_x(x) \end{bmatrix}_{ijk} \quad (2.46)$$

De la même manière on aurait pu obtenir des équations identiques pour les directions y et z .

$$\frac{\partial}{\partial y} \begin{bmatrix} \hat{\psi}(y) \end{bmatrix}_{ijk} + \begin{bmatrix} \hat{N}_{\hat{k}_{eff}} \end{bmatrix}_{ijk} \begin{bmatrix} \hat{\psi}(y) \end{bmatrix}_{ijk} = \begin{bmatrix} \hat{L}_y(y) \end{bmatrix}_{ijk} \quad (2.47)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} \begin{bmatrix} \hat{\psi}(z) \end{bmatrix}_{ijk} + \begin{bmatrix} \hat{N}_{\hat{k}_{eff}} \end{bmatrix}_{ijk} \begin{bmatrix} \hat{\psi}(z) \end{bmatrix}_{ijk} = \begin{bmatrix} \hat{L}_z(z) \end{bmatrix}_{ijk} \quad (2.48)$$

Les équations (2.46), (2.47) et (2.48) constituent le point de départ de plusieurs méthodes nodales modernes [Koclas, 1996].

2.2.3 Les différences finies centrées

Pour obtenir la dérivation des différences finies centrées, il suffit dans un premier temps de négliger les fuites transversales à la direction considérée (prenons la direction x , $[\hat{S}_x(x)]_{ijk} = [0]$). À ce moment la solution de l'équation (2.46) prend la forme

$$[\hat{\psi}(x)]_{ijk} = \exp \left[-[\hat{N}_{\hat{k}_{eff}}]_{ijk} x \right] [\hat{A}]_{ijk} \quad (2.49)$$

où $[\hat{A}]_{ijk}$ est une constante spatiale qui dépend des conditions aux limites. Si l'on prend $[\hat{\psi}(x_i)]_{ijk}$ comme conditions limites alors on aura

$$[\hat{A}]_{ijk} = \exp \left[[\hat{N}_{\hat{k}_{eff}}]_{ijk} x_i \right] [\hat{\psi}(x_i)]_{ijk} \quad (2.50)$$

L'équation (2.49) prend alors la forme

$$[\hat{\psi}(x)]_{ijk} = \exp \left[-[\hat{N}_{\hat{k}_{eff}}]_{ijk} (x - x_i) \right] [\hat{\psi}(x_i)]_{ijk} \quad (2.51)$$

La seconde étape consiste à développer en série cette solution et de la tronquer au second terme ce qui nous donne

$$[\hat{\psi}(x)]_{ijk} = \left\{ [I] - [\hat{N}_{\hat{k}_{eff}}]_{ijk} (x - x_i) \right\} [\hat{\psi}(x_i)]_{ijk} \quad (2.52)$$

Et dans un troisième temps, on intègre la solution obtenue dans la direction restante (dans notre cas la direction x).

$$\begin{aligned}
\left[\hat{\psi}(x)\right]_{ijk} &= \frac{\int_{x_i}^{x_{i+1}} [I] \left[\hat{\psi}(x_i)\right]_{ijk} dx}{\int_{x_i}^{x_{i+1}} dx} - \frac{\int_{x_i}^{x_{i+1}} \left[\hat{N}_{\hat{k}_{eff}}\right]_{ijk} (x - x_i) \left[\hat{\psi}(x_i)\right]_{ijk} dx}{\int_{x_i}^{x_{i+1}} dx} \\
&= \frac{[I] \left[\hat{\psi}(x_i)\right]_{ijk}}{h_x^i} \int_{x_i}^{x_{i+1}} dx - \frac{\left[\hat{N}_{\hat{k}_{eff}}\right]_{ijk} \left[\hat{\psi}(x_i)\right]_{ijk}}{h_x^i} \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x - x_i) dx \\
&= \left[\hat{\psi}(x_i)\right]_{ijk} \frac{h_x^i}{h_x^i} - \frac{\left[\hat{N}_{\hat{k}_{eff}}\right]_{ijk} \left[\hat{\psi}(x_i)\right]_{ijk}}{h_x^i} \left\{ \frac{x_{i+1}^2 - x_i^2}{2} - (x_i x_{i+1} - x_i^2) \right\} \\
&= \left[\hat{\psi}(x_i)\right]_{ijk} - \frac{\left[\hat{N}_{\hat{k}_{eff}}\right]_{ijk} \left[\hat{\psi}(x_i)\right]_{ijk}}{h_x^i} \left\{ \frac{x_{i+1}^2 - x_i^2 - 2x_i x_{i+1} + 2x_i^2}{2} \right\} \\
&= \left[\hat{\psi}(x_i)\right]_{ijk} - \frac{\left[\hat{N}_{\hat{k}_{eff}}\right]_{ijk} \left[\hat{\psi}(x_i)\right]_{ijk}}{h_x^i} \left\{ \frac{x_{i+1}^2 - 2x_i x_{i+1} + x_i^2}{2} \right\} \\
&= \left[\hat{\psi}(x_i)\right]_{ijk} - \frac{\left[\hat{N}_{\hat{k}_{eff}}\right]_{ijk} \left[\hat{\psi}(x_i)\right]_{ijk}}{h_x^i} \frac{(h_x^i)^2}{2} \\
&= \left[\hat{\psi}(x_i)\right]_{ijk} - \frac{h_x^i}{2} \left[\hat{N}_{\hat{k}_{eff}}\right]_{ijk} \left[\hat{\psi}(x_i)\right]_{ijk}
\end{aligned}$$

On obtient alors comme solution du flux la relation suivante [Koclas, 1996]

$$\left[\hat{\phi}\right]_{ijk} = \left[\hat{\phi}(x_i)\right]_{ijk} - \frac{h_x^i}{2} [\hat{D}]_{ijk}^{-1} [\hat{J}_x(x_i)]_{ijk} \quad (2.53)$$

En utilisant $[\hat{\vec{\psi}}(x_{i+1})]_{ijk}$ comme conditions aux limites dans (2.49) et en procédant de la même manière on obtiendrait

$$[\hat{\phi}]_{ijk} = [\hat{\phi}(x_{i+1})]_{ijk} + \frac{h_x^i}{2} [\hat{D}]_{ijk}^{-1} [\hat{J}_x(x_{i+1})]_{ijk} \quad (2.54)$$

On peut réécrire (2.54) pour la cellule $i - 1jk$ ce qui nous donne

$$[\hat{\phi}]_{i-1jk} = [\hat{\phi}(x_i)]_{i-1jk} + \frac{h_x^{i-1}}{2} [\hat{D}]_{i-1jk}^{-1} [\hat{J}_x(x_i)]_{i-1jk} \quad (2.55)$$

Un raisonnement similaire aurait pu être appliqué pour les directions y et z à partir de (2.47) et (2.48) en utilisant les mêmes hypothèses qui ont été appliquées pour la direction x ce qui nous donnerait les relations suivantes

$$[\hat{\phi}]_{ijk} = [\hat{\phi}(y_j)]_{ijk} - \frac{h_y^j}{2} [\hat{D}]_{ijk}^{-1} [\hat{J}_y(y_j)]_{ijk} \quad (2.56)$$

$$[\hat{\phi}]_{ij-1k} = [\hat{\phi}(y_j)]_{ij-1k} + \frac{h_y^{j-1}}{2} [\hat{D}]_{ij-1k}^{-1} [\hat{J}_y(y_j)]_{ij-1k} \quad (2.57)$$

$$[\hat{\phi}]_{ijk} = [\hat{\phi}(z_k)]_{ijk} - \frac{h_z^k}{2} [\hat{D}]_{ijk}^{-1} [\hat{J}_z(z_k)]_{ijk} \quad (2.58)$$

$$[\hat{\phi}]_{ijk-1} = [\hat{\phi}(z_k)]_{ijk-1} + \frac{h_z^{k-1}}{2} [\hat{D}]_{ijk-1}^{-1} [\hat{J}_z(z_k)]_{ijk-1} \quad (2.59)$$

En utilisant la deuxième composante du vecteur $[\hat{\vec{\psi}}(x)]_{ijk}$ nous pouvons, de la même façon que pour les flux de volume, obtenir des relations pour les courants de volume.

Voici donc ces relations

$$\left[\hat{J}_x \right]_{ijk} = [\hat{J}_x(x_i)]_{ijk} - \frac{h_x^i}{2} [\hat{\Sigma}'_{\hat{k}_{eff}}]_{ijk} [\hat{\phi}(x_i)]_{ijk} \quad (2.60)$$

$$\left[\hat{J}_x \right]_{i-1jk} = [\hat{J}_x(x_i)]_{i-1jk} + \frac{h_x^{i-1}}{2} [\hat{\Sigma}'_{\hat{k}_{eff}}]_{i-1jk} [\hat{\phi}(x_i)]_{i-1jk} \quad (2.61)$$

$$\left[\hat{J}_y \right]_{ijk} = [\hat{J}_y(y_j)]_{ijk} - \frac{h_y^j}{2} [\hat{\Sigma}'_{\hat{k}_{eff}}]_{ijk} [\hat{\phi}(y_j)]_{ijk} \quad (2.62)$$

$$\left[\hat{J}_y \right]_{ij-1k} = [\hat{J}_y(y_j)]_{ij-1k} + \frac{h_y^{j-1}}{2} [\hat{\Sigma}'_{\hat{k}_{eff}}]_{ij-1k} [\hat{\phi}(y_j)]_{ij-1k} \quad (2.63)$$

$$\left[\hat{J}_z \right]_{ijk} = [\hat{J}_z(z_k)]_{ijk} - \frac{h_z^k}{2} [\hat{\Sigma}'_{\hat{k}_{eff}}]_{ijk} [\hat{\phi}(z_k)]_{ijk} \quad (2.64)$$

$$\left[\hat{J}_z \right]_{ijk-1} = [\hat{J}_z(z_k)]_{ijk-1} + \frac{h_z^k}{2} [\hat{\Sigma}'_{\hat{k}_{eff}}]_{ijk-1} [\hat{\phi}(z_k)]_{ijk-1} \quad (2.65)$$

2.2.4 Les flux de surface

À partir des équations (2.53) à (2.59) et des équations (2.60) à (2.65) il nous sera possible d'établir un lien entre les flux de surface et les flux de volume dans le cadre des différences finies centrées. Puisque les équations citées précédemment sont symétriques selon les trois directions x , y et z nous nous contenterons de dériver les équations pour la direction x , c'est-à-dire pour les flux de surface $[\hat{\phi}(x_i)]_{ijk}$ et $[\hat{\phi}(x_i)]_{i-1jk}$. Réécrivons de nouveau les équations (2.53), (2.55), (2.60) et (2.61)

$$\left[\hat{\phi} \right]_{ijk} = [\hat{\phi}(x_i)]_{ijk} - \frac{h_x^i}{2} [\hat{D}]_{ijk}^{-1} [\hat{J}_x(x_i)]_{ijk} \quad (2.66)$$

$$\left[\hat{\phi} \right]_{i-1jk} = [\hat{\phi}(x_i)]_{i-1jk} + \frac{h_x^{i-1}}{2} [\hat{D}]_{i-1jk}^{-1} [\hat{J}_x(x_i)]_{i-1jk} \quad (2.67)$$

$$\left[\hat{J}_x \right]_{ijk} = [\hat{J}_x(x_i)]_{ijk} - \frac{h_x^i}{2} [\hat{\Sigma}'_{\hat{k}_{eff}}]_{ijk} [\hat{\phi}(x_i)]_{ijk} \quad (2.68)$$

$$\left[\hat{J}_x \right]_{i-1jk} = [\hat{J}_x(x_i)]_{i-1jk} - \frac{h_x^{i-1}}{2} [\hat{\Sigma}'_{\hat{k}_{eff}}]_{i-1jk} [\hat{\phi}(x_i)]_{i-1jk} \quad (2.69)$$

Ici les flux de volume sont considérés connus, ils correspondront aux flux hétérogènes intégrés sur tout le volume

$$[\hat{\phi}]_{ijk} = \frac{\int_{V_{ijk}} [\phi(\vec{r})] d^3r}{V_{ijk}} \quad (2.70)$$

Ce système est donc constitué de quatre équations mais de six inconnues soit $[\hat{\phi}(x_i)]_{ijk}$, $[\hat{\phi}(x_i)]_{i-1jk}$, $[\hat{J}_x(x_i)]_{ijk}$, $[\hat{J}_x(x_i)]_{i-1jk}$, $[\hat{J}_x]_{ijk}$ et $[\hat{J}_{x,i-1jk}]$. En réalité nous n'avons que cinq inconnues puisque la théorie d'équivalence admet $[\hat{J}_x(x_i)]_{i-1jk} = [\hat{J}_x(x_i)]_{ijk}$.

Malgré le fait que nous avons seulement cinq inconnues, nous allons tout de même ajouter deux équations à notre système. Ces deux équations nous seront données par une approximation de la loi de Fick en différences finies et vont nous permettre de relier les courants de volume aux flux de surface. Les deux équations supplémentaires sont

$$[\hat{J}_x]_{ijk} = -[\hat{D}]_{ijk} \frac{[\hat{\phi}(x_{i+1})]_{ijk} - [\hat{\phi}(x_i)]_{ijk}}{h_x^i} \quad (2.71)$$

$$[\hat{J}_x]_{i-1jk} = -[\hat{D}]_{i-1jk} \frac{[\hat{\phi}(x_i)]_{i-1jk} - [\hat{\phi}(x_{i-1})]_{i-1jk}}{h_x^{i-1}} \quad (2.72)$$

En substituant l'expression pour $[\hat{J}_x]_{ijk}$ donnée par l'équation (2.71) à l'intérieur de l'équation (2.68) et de la même manière en substituant l'expression pour $[\hat{J}_x]_{i-1jk}$ donnée par l'équation (2.72) à l'intérieur de l'équation (2.69) on obtient respectivement après manipulations

$$\begin{aligned} [\hat{J}_x(x_i)]_{ijk} &= \frac{-[\hat{D}]_{ijk}}{h_x^i} [\hat{\phi}(x_{i+1})]_{ijk} + \left[\frac{[\hat{D}]_{ijk}}{h_x^i} + \frac{h_x^i [\hat{\Sigma}'_{\hat{k}_{eff}}]_{ijk}}{2} \right] [\hat{\phi}(x_i)]_{ijk} \\ [\hat{J}_x(x_i)]_{i-1jk} &= \frac{[\hat{D}]_{i-1jk}}{h_x^{i-1}} [\hat{\phi}(x_{i-1})]_{i-1jk} - \\ &\quad \left[\frac{[\hat{D}]_{i-1jk}}{h_x^{i-1}} + \frac{h_x^{i-1} [\hat{\Sigma}'_{\hat{k}_{eff}}]_{i-1jk}}{2} \right] [\hat{\phi}(x_i)]_{i-1jk} \end{aligned} \quad (2.73)$$

Utilisons ces deux expressions pour les courants de surface à l'intérieur des équations

(2.66) et (2.67) respectivement. Ceci nous donne après manipulations

$$\begin{aligned} [\hat{\phi}(x_i)]_{ijk} &= \left[\frac{1}{2} [I] - \frac{(h_x^i)^2}{4} [\hat{D}]_{ijk}^{-1} [\hat{\Sigma}'_{\hat{k}_{eff}}]_{ijk} \right]^{-1} \\ &\quad \left\{ [\hat{\phi}]_{ijk} - \frac{[\hat{\phi}(x_{i+1})]_{ijk}}{2} \right\} \end{aligned} \quad (2.75)$$

$$\begin{aligned} [\hat{\phi}(x_i)]_{i-1jk} &= \left[\frac{1}{2} [I] - \frac{(h_x^{i-1})^2}{4} [\hat{D}]_{i-1jk}^{-1} [\hat{\Sigma}'_{\hat{k}_{eff}}]_{i-1jk} \right]^{-1} \\ &\quad \left\{ [\hat{\phi}]_{i-1jk} - \frac{[\hat{\phi}(x_{i-1})]_{i-1jk}}{2} \right\} \end{aligned} \quad (2.76)$$

Nous allons maintenant définir la quantité $[M_{\hat{k}_{eff}}^x]_{ijk}$ comme suit

$$[M_{\hat{k}_{eff}}^x]_{ijk} \equiv \left[\frac{1}{2} [I] - \frac{(h_x^i)^2}{4} [\hat{D}]_{ijk}^{-1} [\hat{\Sigma}'_{\hat{k}_{eff}}]_{ijk} \right]$$

En utilisant (2.76) pour $[\hat{\phi}(x_{i+1})]_{ijk}$ et (2.75) pour $[\hat{\phi}(x_{i-1})]_{i-1jk}$ on obtient

$$[\hat{\phi}(x_{i+1})]_{ijk} = [M_{\hat{k}_{eff}}^x]_{ijk}^{-1} \left\{ [\hat{\phi}]_{ijk} - \frac{[\hat{\phi}(x_i)]_{ijk}}{2} \right\} \quad (2.77)$$

$$[\hat{\phi}(x_{i-1})]_{i-1jk} = [M_{\hat{k}_{eff}}^x]_{i-1jk}^{-1} \left\{ [\hat{\phi}]_{i-1jk} - \frac{[\hat{\phi}(x_i)]_{i-1jk}}{2} \right\} \quad (2.78)$$

Il suffit par la suite d'insérer (2.77) dans (2.75) et (2.78) dans (2.76) pour obtenir

$$\begin{aligned} [\hat{\phi}(x_i)]_{ijk} &= \left[[I] - \frac{1}{4} \left([M_{\hat{k}_{eff}}^x]_{ijk}^{-1} \right)^2 \right]^{-1} \\ &\quad \left[[M_{\hat{k}_{eff}}^x]_{ijk}^{-1} - \frac{1}{2} \left([M_{\hat{k}_{eff}}^x]_{ijk}^{-1} \right)^2 \right] [\hat{\phi}]_{ijk} \end{aligned} \quad (2.79)$$

$$\begin{aligned} [\hat{\phi}(x_i)]_{i-1jk} &= \left[[I] - \frac{1}{4} \left([M_{\hat{k}_{eff}}^x]_{i-1jk}^{-1} \right)^2 \right]^{-1} \\ &\quad \left[[M_{\hat{k}_{eff}}^x]_{i-1jk}^{-1} - \frac{1}{2} \left([M_{\hat{k}_{eff}}^x]_{i-1jk}^{-1} \right)^2 \right] [\hat{\phi}]_{i-1jk} \end{aligned} \quad (2.80)$$

En factorisant le premier terme de ces deux dernières équations on aura

$$\begin{aligned} [\hat{\phi}(x_i)]_{ijk} &= 2 \left[\left(2[I] - [M_{k_{eff}}^x]_{ijk}^{-1} \right) \left(2[I] + [M_{k_{eff}}^x]_{ijk}^{-1} \right) \right]^{-1} \\ &\quad \left[2[I] - [M_{k_{eff}}^x]_{ijk}^{-1} \right] [M_{k_{eff}}^x]_{ijk}^{-1} [\hat{\phi}]_{ijk} \end{aligned} \quad (2.81)$$

$$\begin{aligned} [\hat{\phi}(x_i)]_{i-1jk} &= 2 \left[\left(2[I] - [M_{k_{eff}}^x]_{i-1jk}^{-1} \right) \left(2[I] + [M_{k_{eff}}^x]_{i-1jk}^{-1} \right) \right]^{-1} \\ &\quad \left[2[I] - [M_{k_{eff}}^x]_{i-1jk}^{-1} \right] [M_{k_{eff}}^x]_{i-1jk}^{-1} [\hat{\phi}]_{i-1jk} \end{aligned} \quad (2.82)$$

Puis en utilisant la propriété $[AB]^{-1} = B^{-1}A^{-1}$ cela nous donne

$$[\hat{\phi}(x_i)]_{ijk} = \left[[I] + \frac{1}{2} [M_{k_{eff}}^x]_{ijk}^{-1} \right]^{-1} [M_{k_{eff}}^x]_{ijk}^{-1} [\hat{\phi}]_{ijk} \quad (2.83)$$

$$[\hat{\phi}(x_i)]_{i-1jk} = \left[[I] + \frac{1}{2} [M_{k_{eff}}^x]_{i-1jk}^{-1} \right]^{-1} [M_{k_{eff}}^x]_{i-1jk}^{-1} [\hat{\phi}]_{i-1jk} \quad (2.84)$$

En reprenant encore une fois la propriété $[AB]^{-1} = B^{-1}A^{-1}$ on obtient les solutions suivantes

$$\boxed{[\hat{\phi}(x_i)]_{ijk} = \left[[M_{k_{eff}}^x]_{ijk} + \frac{1}{2} [I] \right]^{-1} [\hat{\phi}]_{ijk}} \quad (2.85)$$

$$\boxed{[\hat{\phi}(x_i)]_{i-1jk} = \left[[M_{k_{eff}}^x]_{i-1jk} + \frac{1}{2} [I] \right]^{-1} [\hat{\phi}]_{i-1jk}} \quad (2.86)$$

Avec ces résultats on constate que $[\hat{\phi}(x_{i+1})]_{ijk} = [\hat{\phi}(x_i)]_{ijk}$ ce qui est restrictif mais n'est aucunement en contradiction avec la théorie de la discontinuité des flux homogènes sur

une même surface. Similairement pour les directions y et z , nous aurions obtenus

$$[\hat{\phi}(y_j)]_{ijk} = \left[M_{\hat{k}_{eff}}^y]_{ijk} + \frac{1}{2} [I] \right]^{-1} [\hat{\phi}]_{ijk} \quad (2.87)$$

$$[\hat{\phi}(y_j)]_{ij-1k} = \left[M_{\hat{k}_{eff}}^y]_{ij-1k} + \frac{1}{2} [I] \right]^{-1} [\hat{\phi}]_{ij-1k} \quad (2.88)$$

$$[\hat{\phi}(z_k)]_{ijk} = \left[M_{\hat{k}_{eff}}^z]_{ijk} + \frac{1}{2} [I] \right]^{-1} [\hat{\phi}]_{ijk} \quad (2.89)$$

$$[\hat{\phi}(z_k)]_{ijk-1} = \left[M_{\hat{k}_{eff}}^z]_{ijk-1} + \frac{1}{2} [I] \right]^{-1} [\hat{\phi}]_{ijk-1} \quad (2.90)$$

Ce sont les expressions (2.85) à (2.90) qui serviront à calculer les flux de surface homogènes pour nos facteurs de discontinuité à partir des flux de volume hétérogènes tel que spécifié par l'équation (2.70). On remarque que si le facteur

$(h_u^l)^2 [\hat{D}]_{lmn}^{-1} [\hat{\Sigma}'_{\hat{k}_{eff}}]_{lmn} \rightarrow [0]$ alors

$$\begin{aligned} \Rightarrow \quad & [M_{\hat{k}_{eff}}^u]_{lmn} \rightarrow 1/2 [I] \\ \Rightarrow \quad & \left[[M_{\hat{k}_{eff}}^u]_{lmn} + \frac{1}{2} [I] \right]^{-1} \rightarrow [I] \\ \Rightarrow \quad & [\hat{\phi}(u_l)]_{lmn} \rightarrow [\hat{\phi}]_{lmn} \end{aligned}$$

Dans cette situation on se retrouve avec un seul flux de surface homogène correspondant au flux de volume hétérogène. Ce cas particulier correspond aux facteurs de discontinuité d'assemblage (ADF). Ce sujet sera abordé à la section 4.2.

2.3 L'équation de diffusion en différences finies centrées

Il a été vu à la section 2.1 comment on obtenait les flux de surface en théorie du transport à partir de la méthode des probabilités de collision. La section 2.2 pour sa part présentait une méthode pour obtenir des expressions reliant les flux de surfaces aux flux de volumes en diffusion à l'aide de la méthode des différences finies centrées en supposant les courants aux interfaces continus mais les flux aux interfaces discontinus. Cette section aura pour premier objectif de présenter l'équation de diffusion dans sa forme standard telle que résolue par le logiciel DONJON-NDF [IGE-208, 2000] lorsqu'il ne prend pas en compte la théorie des facteurs de discontinuité. Le deuxième objectif de cette section sera de présenter l'équation de diffusion modifiée par les facteurs de discontinuité toujours à l'intérieur du cadre des différences finies centrées. Une dernière section traitera de l'importance que peuvent avoir les facteurs de discontinuité sur les calculs afin de bien mettre en évidence les situations pour lesquelles ils sont indispensables ou non.

2.3.1 L'équation de diffusion standard

Nous présenterons dans un premier temps comment on obtient des relations entre les courants de surface et les flux moyens de volume dans le cadre des différences finies centrées. Notre point de départ sera les équations (2.53), (2.55) et (2.56) à (2.59) obtenus à la section 2.2.3. Nous dériverons ces relations en supposant les flux aux surfaces ainsi

que les courants aux surfaces continus. Ceci s'exprime mathématiquement comme suit

$$\begin{aligned} [\hat{\phi}(x_i)]_{ijk} &= [\hat{\phi}(x_i)]_{i-1jk} \quad ; \quad [\hat{J}_x(x_i)]_{ijk} = [\hat{J}_x(x_i)]_{i-1jk} \\ [\hat{\phi}(y_j)]_{ijk} &= [\hat{\phi}(y_j)]_{ij-1k} \quad ; \quad [\hat{J}_y(y_j)]_{ijk} = [\hat{J}_y(y_j)]_{ij-1k} \\ [\hat{\phi}(z_k)]_{ijk} &= [\hat{\phi}(z_k)]_{ijk-1} \quad ; \quad [\hat{J}_z(z_k)]_{ijk} = [\hat{J}_z(z_k)]_{ijk-1} \end{aligned} \quad (2.91)$$

Maintenant, si l'on définit les coefficients de couplage suivants [Kaveh, 2000]

$$[\Delta_x^-]_{ijk} = \left[\frac{h_x^i}{2} [\hat{D}]_{ijk}^{-1} + \frac{h_x^{i-1}}{2} [\hat{D}]_{i-1jk}^{-1} \right]^{-1} \quad (2.92)$$

$$[\Delta_x^+]_{ijk} = \left[\frac{h_x^{i+1}}{2} [\hat{D}]_{i+1jk}^{-1} + \frac{h_x^i}{2} [\hat{D}]_{ijk}^{-1} \right]^{-1} \quad (2.93)$$

$$[\Delta_y^-]_{ijk} = \left[\frac{h_y^j}{2} [\hat{D}]_{ijk}^{-1} + \frac{h_y^{j-1}}{2} [\hat{D}]_{ij-1k}^{-1} \right]^{-1} \quad (2.94)$$

$$[\Delta_y^+]_{ijk} = \left[\frac{h_y^{j+1}}{2} [\hat{D}]_{ij+1k}^{-1} + \frac{h_y^j}{2} [\hat{D}]_{ijk}^{-1} \right]^{-1} \quad (2.95)$$

$$[\Delta_z^-]_{ijk} = \left[\frac{h_z^k}{2} [\hat{D}]_{ijk}^{-1} + \frac{h_z^{k-1}}{2} [\hat{D}]_{ijk-1}^{-1} \right]^{-1} \quad (2.96)$$

$$[\Delta_z^+]_{ijk} = \left[\frac{h_z^{k+1}}{2} [\hat{D}]_{ijk+1}^{-1} + \frac{h_z^k}{2} [\hat{D}]_{ijk}^{-1} \right]^{-1} \quad (2.97)$$

alors il est possible de manipuler les équations (2.53) à (2.59), tout en utilisant nos conditions de continuité aux surfaces (2.91), dans le but d'obtenir les relations suivantes entre les courants de surface et les flux moyens de volume

$$[\hat{J}_x(x_i)]_{ijk} = -[\Delta_x^-]_{ijk} \left\{ [\hat{\phi}]_{ijk} - [\hat{\phi}]_{i-1jk} \right\} \quad (2.98)$$

$$[\hat{J}_x(x_{i+1})]_{ijk} = -[\Delta_x^+]_{ijk} \left\{ [\hat{\phi}]_{i+1jk} - [\hat{\phi}]_{ijk} \right\} \quad (2.99)$$

$$[\hat{J}_y(y_j)]_{ijk} = -[\Delta_y^-]_{ijk} \left\{ [\hat{\phi}]_{ijk} - [\hat{\phi}]_{ij-1k} \right\} \quad (2.100)$$

$$[\hat{J}_y(y_{j+1})]_{ijk} = -[\Delta_y^+]_{ijk} \left\{ [\hat{\phi}]_{ij+1k} - [\hat{\phi}]_{ijk} \right\} \quad (2.101)$$

$$[\hat{J}_z(z_k)]_{ijk} = -[\Delta_z^-]_{ijk} \left\{ [\hat{\phi}]_{ijk} - [\hat{\phi}]_{ijk-1} \right\} \quad (2.102)$$

$$[\hat{J}_z(z_{k+1})]_{ijk} = -[\Delta_z^+]_{ijk} \left\{ [\hat{\phi}]_{ijk+1} - [\hat{\phi}]_{ijk} \right\} \quad (2.103)$$

Procédons maintenant à la dérivation de l'équation de diffusion dans le cadre des différences finies centrées. Notre point de départ sera l'équation de diffusion (2.43) sur laquelle nous appliquerons l'opérateur

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} dx \int_{y_j}^{y_{j+1}} dy \int_{z_k}^{z_{k+1}} dz$$

en plus d'appliquer le théorème de Gauss

$$\int_V \nabla \cdot \vec{J} = \int_S \vec{J} \cdot d\vec{A}$$

ce qui nous donne [Koclas, 1996]

$$\begin{aligned} & \left[\hat{J}_x(x_{i+1}) \right]_{ijk} - \left[\hat{J}_x(x_i) \right]_{ijk} \left] h_y^j h_z^k \right. \\ & + \left[\hat{J}_y(y_{j+1}) \right]_{ijk} - \left[\hat{J}_y(y_j) \right]_{ijk} \left] h_x^i h_z^k \right. \\ & + \left[\hat{J}_z(z_{k+1}) \right]_{ijk} - \left[\hat{J}_z(z_k) \right]_{ijk} \left] h_x^i h_y^j \right. \\ & \quad \left. + \left[\hat{\Sigma}'_{\hat{k}_{eff}} \right]_{ijk} [\hat{\phi}]_{ijk} V_{ijk} = 0 \end{aligned} \quad (2.104)$$

où nous avons utilisé les définitions de la section 2.2.2 pour $[\hat{J}_w(w)]_{ijk}$ ($w = x, y, z$), $[\hat{\phi}]_{ijk}$, $[\hat{\Sigma}'_{\hat{k}_{eff}}]_{ijk}$ et V_{ijk} . On constate que l'équation (2.104) exige des relations entre les courants de surface et les flux de volume afin d'avoir un système complet qui se résout. Nous utiliserons donc les relations (2.98) à (2.103) obtenues précédemment. En regroupant les flux correspondant à un volume commun on obtient [Kaveh, 2000, Koclas,

1996]

$$\begin{aligned}
& \begin{bmatrix} h_y^j h_z^k [\Delta_x^+]_{ijk} [\hat{\phi}]_{i+1jk} + [\Delta_x^-]_{ijk} [\hat{\phi}]_{i-1jk} \\ h_x^i h_z^k [\Delta_y^+]_{ijk} [\hat{\phi}]_{ij+1k} + [\Delta_y^-]_{ijk} [\hat{\phi}]_{ij-1k} \\ h_x^i h_y^j [\Delta_z^+]_{ijk} [\hat{\phi}]_{ijk+1} + [\Delta_z^-]_{ijk} [\hat{\phi}]_{ijk-1} \end{bmatrix} \\
& - \left\{ \begin{aligned} & h_y^j h_z^k [\Delta_x^+]_{ijk} + [\Delta_x^-]_{ijk} \\ & + h_x^i h_z^k [\Delta_y^+]_{ijk} + [\Delta_y^-]_{ijk} \\ & + h_x^i h_y^j [\Delta_z^+]_{ijk} + [\Delta_z^-]_{ijk} \end{aligned} \right\} [\hat{\phi}]_{ijk} \\
& + [\hat{\Sigma}'_{\hat{k}_{eff}}]_{ijk} [\hat{\phi}]_{ijk} V_{ijk} = 0
\end{aligned} \tag{2.105}$$

Ceci correspond à l'équation de diffusion dans le cadre de la méthode des différences finies centrées en supposant la continuité des flux et des courants aux interfaces. C'est une équation matricielle aux valeurs propres qui peut-être résolue à l'aide d'un processus itératif.

2.3.2 L'équation de diffusion modifiée

Redérivons encore une fois des relations entre les flux moyens de volume et les courants aux surfaces mais cette fois en supposant que les flux aux surfaces sont discontinus. Nous conserverons par contre la continuité des courants. Nos relations de continuité des flux prendra alors la forme suivante

$$\begin{aligned}
[f_x^-]_{ijk} [\hat{\phi}(x_i)]_{ijk} &= [f_x^+]_{i-1jk} [\hat{\phi}(x_i)]_{i-1jk} \\
[f_y^-]_{ijk} [\hat{\phi}(y_j)]_{ijk} &= [f_y^+]_{ij-1k} [\hat{\phi}(y_j)]_{ij-1k} \\
[f_z^-]_{ijk} [\hat{\phi}(z_k)]_{ijk} &= [f_z^+]_{ijk-1} [\hat{\phi}(z_k)]_{ijk-1}
\end{aligned} \tag{2.106}$$

avec

$$[f_u^\pm]_{lmn} = \begin{bmatrix} f_u^{\pm,1} & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & f_u^{\pm,g} & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & f_u^{\pm,N_G} \end{bmatrix}_{lmn}$$

Cette matrice correspond à la matrice des facteurs de discontinuité. Les éléments de la diagonale sont donnés par

$$f_{u,lmn}^{\pm,g} = \frac{\phi^g(u_l)_{lmn}}{\hat{\phi}^g(u_l)_{lmn}}$$

avec $\phi^g(u_l)_{lmn}$ le flux de surface hétérogène. En insérant ces définitions des facteurs de discontinuité à l'intérieur de nos nouvelles conditions de continuité (2.106) on obtient

$$[\phi(x_i)]_{ijk} = [\phi(x_i)]_{i-1jk}$$

$$[\phi(y_j)]_{ijk} = [\phi(y_j)]_{ij-1k}$$

$$[\phi(z_k)]_{ijk} = [\phi(z_k)]_{ijk-1}$$

qui correspond bien à la continuité du flux hétérogène aux surfaces comme il avait été émis en hypothèse. Maintenant, si l'on définit les coefficients de couplage suivants

$$[F_x^-]_{ijk} = \left[\frac{h_x^i}{2} [f_x^-]_{ijk} [\hat{D}]_{ijk}^{-1} + \frac{h_x^{i-1}}{2} [f_x^+]_{i-1jk} [\hat{D}]_{i-1jk}^{-1} \right]^{-1} \quad (2.107)$$

$$[F_x^+]_{ijk} = \left[\frac{h_x^{i+1}}{2} [f_x^-]_{i+1jk} [\hat{D}]_{i+1jk}^{-1} + \frac{h_x^i}{2} [f_x^+]_{ijk} [\hat{D}]_{ijk}^{-1} \right]^{-1} \quad (2.108)$$

$$[F_y^-]_{ijk} = \left[\frac{h_y^j}{2} [f_y^-]_{ijk} [\hat{D}]_{ijk}^{-1} + \frac{h_y^{j-1}}{2} [f_y^+]_{ij-1k} [\hat{D}]_{ij-1k}^{-1} \right]^{-1} \quad (2.109)$$

$$[F_y^+]_{ijk} = \left[\frac{h_y^{j+1}}{2} [f_y^-]_{ij+1k} [\hat{D}]_{ij+1k}^{-1} + \frac{h_y^j}{2} [f_y^+]_{ijk} [\hat{D}]_{ijk}^{-1} \right]^{-1} \quad (2.110)$$

$$[F_z^-]_{ijk} = \left[\frac{h_z^k}{2} [f_z^-]_{ijk} [\hat{D}]_{ijk}^{-1} + \frac{h_z^{k-1}}{2} [f_z^+]_{ijk-1} [\hat{D}]_{ijk-1}^{-1} \right]^{-1} \quad (2.111)$$

$$[F_z^+]_{ijk} = \left[\frac{h_z^{k+1}}{2} [f_z^-]_{ijk+1} [\hat{D}]_{ijk+1}^{-1} + \frac{h_z^k}{2} [f_z^+]_{ijk} [\hat{D}]_{ijk}^{-1} \right]^{-1} \quad (2.112)$$

Et en manipulant encore une fois les équations (2.53) à (2.59) tout en utilisant nos nouvelles conditions de continuité pour les flux aux surfaces (2.106) et en conservant les conditions de continuité des courants sur ces mêmes surfaces alors on parvient à obtenir les relations suivantes entre les courants aux surfaces et les flux moyens de volume

$$[\hat{J}_x(x_i)]_{ijk} = -[F_x^-]_{ijk} \left\{ [f_x^-]_{ijk} [\hat{\phi}]_{ijk} - [f_x^+]_{i-1jk} [\hat{\phi}]_{i-1jk} \right\} \quad (2.113)$$

$$[\hat{J}_x(x_{i+1})]_{ijk} = -[F_x^+]_{ijk} \left\{ [f_x^-]_{i+1jk} [\hat{\phi}]_{i+1jk} - [f_x^+]_{ijk} [\hat{\phi}]_{ijk} \right\} \quad (2.114)$$

$$[\hat{J}_y(y_j)]_{ijk} = -[F_y^-]_{ijk} \left\{ [f_y^-]_{ijk} [\hat{\phi}]_{ijk} - [f_y^+]_{ij-1k} [\hat{\phi}]_{ij-1k} \right\} \quad (2.115)$$

$$[\hat{J}_y(y_{j+1})]_{ijk} = -[F_y^+]_{ijk} \left\{ [f_y^-]_{ij+1k} [\hat{\phi}]_{ij+1k} - [f_y^+]_{ijk} [\hat{\phi}]_{ijk} \right\} \quad (2.116)$$

$$[\hat{J}_z(z_k)]_{ijk} = -[F_z^-]_{ijk} \left\{ [f_z^-]_{ijk} [\hat{\phi}]_{ijk} - [f_z^+]_{ijk-1} [\hat{\phi}]_{ijk-1} \right\} \quad (2.117)$$

$$[\hat{J}_z(z_{k+1})]_{ijk} = -[F_z^+]_{ijk} \left\{ [f_z^-]_{ijk+1} [\hat{\phi}]_{ijk+1} - [f_z^+]_{ijk} [\hat{\phi}]_{ijk} \right\} \quad (2.118)$$

Nous allons maintenant dériver l'équation de diffusion mais cette fois dans le cadre de la théorie des facteurs de discontinuité. On constatera que l'équation que nous allons obtenir aura une forme similaire à l'équation (2.105) mais avec des nuances à l'intérieur

des coefficients de couplage. Notre point de départ sera l'équation (2.104). Nous prendrons cette fois les relations (2.113) à (2.118) pour relier nos courants de surface à nos flux de volume. En regroupant les flux correspondant à un volume commun nous obtenons l'équation suivante

$$\begin{aligned}
 & h_y^j h_z^k \left[[F_x^+]_{ijk} [f_x^-]_{i+1jk} [\hat{\phi}]_{i+1jk} + [F_x^-]_{ijk} [f_x^+]_{i-1jk} [\hat{\phi}]_{i-1jk} \right] \\
 & h_x^i h_z^k \left[[F_y^+]_{ijk} [f_y^-]_{ij+1k} [\hat{\phi}]_{ij+1k} + [F_y^-]_{ijk} [f_y^+]_{ij-1k} [\hat{\phi}]_{ij-1k} \right] \\
 & h_x^i h_y^j \left[[F_z^+]_{ijk} [f_z^-]_{ijk+1} [\hat{\phi}]_{ijk+1} + [F_z^-]_{ijk} [f_z^+]_{ijk-1} [\hat{\phi}]_{ijk-1} \right] \\
 & - \left\{ \begin{aligned} & h_y^j h_z^k \left[[F_x^+]_{ijk} [f_x^+]_{ijk} + [F_x^-]_{ijk} [f_x^-]_{ijk} \right] \\ & + h_x^i h_z^k \left[[F_y^+]_{ijk} [f_y^+]_{ijk} + [F_y^-]_{ijk} [f_y^-]_{ijk} \right] \\ & + h_x^i h_y^j \left[[F_z^+]_{ijk} [f_z^+]_{ijk} + [F_z^-]_{ijk} [f_z^-]_{ijk} \right] \end{aligned} \right\} [\hat{\phi}]_{ijk} \\
 & + [\hat{\Sigma}'_{\hat{k}_{eff}}]_{ijk} [\hat{\phi}]_{ijk} V_{ijk} = 0
 \end{aligned} \tag{2.119}$$

Ceci constitue l'équation de diffusion dans le cadre de la méthode des différences finies centrées en supposant la continuité des courants aux interfaces mais la discontinuité des flux homogènes à ces mêmes interfaces. Cette équation constitue toujours une équation aux valeurs propres pouvant être résolue par un processus itératif.

2.3.3 Importance des facteurs de discontinuité

On a vu que la technique d'homogénéisation standard manquait de degrés de liberté afin qu'il y ait une équivalence complète entre le problème homogène et le problème hétérogène. La théorie d'équivalence vient régler ce problème en autorisant la discontinuité des flux aux interfaces dans le problème homogène et en introduisant des nouveaux

degrés de liberté qui sont les facteurs de discontinuité. Les facteurs de discontinuité ont pour intérêt de conserver l'information sur l'amplitude de la discontinuité du flux aux différentes interfaces.

Les facteurs de discontinuité prennent beaucoup d'importance lorsque le niveau de discontinuité est élevé. Ce dernier est généralement élevé lorsque le gradient de la fonction solution (en valeur absolue) est grand, ou en d'autres termes, lorsque le courant neutronique est élevé. De ce fait on remarque que les facteurs de discontinuité n'apparaissent qu'à l'intérieur du terme de fuite dans l'équation de diffusion discrétisée (2.119).

Dans la situation particulière où tous les flux de surfaces homogènes sont équivalents à leurs homologues hétérogènes $\{[\hat{\phi}(u_l)]_{lmn} = [\phi(u_l)]_{lmn}$ et $[\hat{\phi}(u_{l+1})]_{lmn} = [\phi(u_{l+1})]_{lmn}\}$ on constate, d'après la définition des facteurs de discontinuité, qu'ils prennent tous la valeur unitaire $\{[f_u^\pm]_{lmn} = [I]\}$ ce qui signifie du même coup que les flux homogènes aux surfaces sont continus puisque l'on suppose par défaut que les flux hétérogènes aux surfaces sont continus. À ce moment, par exemple pour la direction $X-$, on a

$$\begin{aligned} [F_x^-]_{ijk} &= \left[\frac{h_x^i}{2} [I] [\hat{D}]_{ijk}^{-1} + \frac{h_x^{i-1}}{2} [I] [\hat{D}]_{i-1jk}^{-1} \right]^{-1} \\ &= \left[\frac{h_x^i}{2} [\hat{D}]_{ijk}^{-1} + \frac{h_x^{i-1}}{2} [\hat{D}]_{i-1jk}^{-1} \right]^{-1} \\ &= [\Delta_x^-]_{ijk} \end{aligned} \tag{2.120}$$

et de la même façon on obtiendrait des résultats équivalents pour chacune des cinq autres directions. L'équation (2.119) prendrait alors exactement la même forme que l'équation (2.105). On conclut donc que dans le cas où les flux homogènes de surfaces sont égaux aux flux hétérogènes de surfaces, les facteurs de discontinuité ont un effet nul sur les calculs de diffusion.

Il existe une autre situation plus générale où les facteurs de discontinuité n'ont pas d'effet. Cette situation implique la continuité ou la presque continuité des flux ho-

mogènes aux interfaces $\{[\hat{\phi}(u_l)]_{l-1mn} = [\hat{\phi}(u_l)]_{lmn}\}$ mais sans impliquer l'égalité entre les flux homogènes et les flux hétérogènes $\{[\hat{\phi}(u_l)]_{lmn} \neq [\phi(u_l)]_{lmn} \text{ et } [\hat{\phi}(u_{l+1})]_{lmn} \neq [\phi(u_{l+1})]_{lmn}\}$. Dans une telle situation on n'a pas nécessairement $[f_u^\pm]_{lmn} = [I]$ mais on a par contre $[f_u^-]_{lmn} = [f_u^+]_{l-1mn}$. Maintenant, si l'on examine la relation (2.113) qui relie le courant de surface aux flux de volume dans la direction X – dans le cadre de la théorie des facteurs de discontinuité et que l'on applique l'égalité $[f_x^-]_{ijk} = [f_x^+]_{i-1jk} = [f]$ alors on aura

$$\begin{aligned} [\hat{J}_x(x_i)]_{ijk} &= -[F_x^-]_{ijk} \left\{ [f][\hat{\phi}]_{ijk} - [f][\hat{\phi}]_{i-1jk} \right\} \\ &= -[F_x^-]_{ijk} [f] \left\{ [\hat{\phi}]_{ijk} - [\hat{\phi}]_{i-1jk} \right\} \end{aligned} \quad (2.121)$$

et en utilisant la définition (2.107) pour $[F_x^-]_{ijk}$ on obtient

$$[F_x^-]_{ijk} = \left[\frac{h_x^i}{2} [f][\hat{D}]_{ijk}^{-1} + \frac{h_x^{i-1}}{2} [f][\hat{D}]_{i-1jk}^{-1} \right]^{-1} = [\Delta_x^-]_{ijk} [f]^{-1} \quad (2.122)$$

En insérant (2.122) dans (2.121) on a

$$[\hat{J}_x(x_i)]_{ijk} = -[\Delta_x^-]_{ijk} \left\{ [\hat{\phi}]_{ijk} - [\hat{\phi}]_{i-1jk} \right\} \quad (2.123)$$

On retombe bien sur la relation classique (2.98) entre les courants de surface et les flux de volume. De façon tout à fait similaire on obtient les relations classiques entre courants de surface et flux de volume pour chacune des directions restantes ce qui implique que l'équation de diffusion avec facteur de discontinuité (2.119) aura la même forme que l'équation de diffusion standard (2.105).

Cette étude des facteurs de discontinuité nous permet donc à l'avance de déterminer si ces derniers auront un effet majeur sur la solution ou non. Puisque la discontinuité est généralement élevée lorsque le courant neutronique est grand on s'attend à ce que les facteurs de discontinuité aient de l'importance aux interfaces entre deux milieux de

compositions très différentes, par exemple à la frontière coeur-réflecteur ainsi que près des mécanismes de contrôle de réactivité.

2.4 La méthode SPH

La méthode SPH («SuperHomogenization Method») est une méthode d'homogénéisation introduit par Kavenoky [Kavenoky, 1978] dans le but d'apporter une correction sur les différentes sections efficaces homogénéisées. Cette correction permet de conserver les taux de réaction à l'intérieur des différents assemblages homogénéisés. Mondot [Mondot, 1978] a généralisé l'idée en utilisant les facteurs SPH pour corriger les erreurs causées par l'utilisation de la loi de Fick ainsi que la discrétisation d'ordre peu élevée de l'équation de diffusion [Hébert, 1993a]. Il a été démontré, entre autre par Tanker et Henry [Tanker, 1985], que la théorie d'équivalence est identique à la méthode SPH dans le cas particulier où tous les volumes homogènes possèdent des facteurs de discontinuité ayant la même valeur sur chacune de leurs surfaces. Cette section a pour but de démontrer cette équivalence.

L'idée essentielle de la méthode SPH est de multiplier chacune des sections efficaces homogènes et chacun des coefficients de diffusions homogènes par un facteur de correction appelé facteur SPH. On définit un facteur SPH par région homogène et par groupe d'énergie condensé. Afin de rester consistant avec l'équation de conservation des neutrons, il faut aussi multiplier tous les flux homogènes par l'inverse du facteur SPH correspondant. Tel que présenté par Hébert [Hébert, 1993a] cela donne

$$\begin{aligned}
 [\tilde{\Sigma}_\alpha]_{ijk} &= [\mu]_{ijk} [\hat{\Sigma}_\alpha]_{ijk} \\
 [\tilde{D}]_{ijk} &= [\mu]_{ijk} [\hat{D}]_{ijk} \\
 [\tilde{\phi}]_{ijk} &= [\mu]_{ijk}^{-1} [\hat{\phi}]_{ijk}
 \end{aligned} \tag{2.124}$$

avec

$$[\mu]_{ijk} = \begin{bmatrix} \mu^1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & \mu^g & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & \mu^{N_G} \end{bmatrix}_{ijk}$$

où $[\mu]_{ijk}$ est la matrice de facteurs SPH, $[\tilde{\Sigma}_\alpha]_{ijk}$ sont les sections efficaces homogènes corrigées ($\alpha = f, s, t$), $[\tilde{D}]_{ijk}$ est le coefficient de diffusion homogène corrigé et $[\tilde{\phi}]_{ijk}$ est le nouveau flux homogène. Il ne sera pas exposé ici comment les facteurs SPH peuvent être calculés mais différentes techniques sont présentées par Hébert [Hébert, 1993a, Hébert, 1993b, Hébert, 1997]. Ces facteurs sont définis comme étant le rapport du flux hétérogène intégré sur le flux homogène intégré

$$[\mu]_{ijk} = \frac{\int_{V_{ijk}} [\phi(\vec{r})]}{\int_{V_{ijk}} [\hat{\phi}(\vec{r})]}$$

Maintenant, si nous reprenons les équations (2.107) à (2.112) pour les facteurs $[F_u^\pm]_{lmn}$ en posant les facteurs de discontinuité égaux à l'intérieur d'une même région (soit

$[f_x^-]_{ijk} = [f_x^+]_{ijk} = [f_y^-]_{ijk} = [f_y^+]_{ijk} = [f_z^-]_{ijk} = [f_z^+]_{ijk} = [f]_{ijk}$) cela nous donne

$$[F_x^-]_{ijk} = \left[\frac{h_x^i}{2} [f]_{ijk} [\hat{D}]_{ijk}^{-1} + \frac{h_x^{i-1}}{2} [f]_{i-1jk} [\hat{D}]_{i-1jk}^{-1} \right]^{-1} \quad (2.125)$$

$$[F_x^+]_{ijk} = \left[\frac{h_x^{i+1}}{2} [f]_{i+1jk} [\hat{D}]_{i+1jk}^{-1} + \frac{h_x^i}{2} [f]_{ijk} [\hat{D}]_{ijk}^{-1} \right]^{-1} \quad (2.126)$$

$$[F_y^-]_{ijk} = \left[\frac{h_y^j}{2} [f]_{ijk} [\hat{D}]_{ijk}^{-1} + \frac{h_y^{j-1}}{2} [f]_{ij-1k} [\hat{D}]_{ij-1k}^{-1} \right]^{-1} \quad (2.127)$$

$$[F_y^+]_{ijk} = \left[\frac{h_y^{j+1}}{2} [f]_{ij+1k} [\hat{D}]_{ij+1k}^{-1} + \frac{h_y^j}{2} [f]_{ijk} [\hat{D}]_{ijk}^{-1} \right]^{-1} \quad (2.128)$$

$$[F_z^-]_{ijk} = \left[\frac{h_z^k}{2} [f]_{ijk} [\hat{D}]_{ijk}^{-1} + \frac{h_z^{k-1}}{2} [f]_{ijk-1} [\hat{D}]_{ijk-1}^{-1} \right]^{-1} \quad (2.129)$$

$$[F_z^+]_{ijk} = \left[\frac{h_z^{k+1}}{2} [f]_{ijk+1} [\hat{D}]_{ijk+1}^{-1} + \frac{h_z^k}{2} [f]_{ijk} [\hat{D}]_{ijk}^{-1} \right]^{-1} \quad (2.130)$$

Par la suite, en posant l'égalité $[f]_{ijk} = [\mu]_{ijk}^{-1}$ et en insérant cette égalité à l'intérieur des équations (2.125) à (2.130) ceci nous donnera les coefficients de diffusion tels que définis par la méthode SPH et on aura

$$[F_x^-]_{ijk} = \left[\frac{h_x^i}{2} [\tilde{D}]_{ijk}^{-1} + \frac{h_x^{i-1}}{2} [\tilde{D}]_{i-1jk}^{-1} \right]^{-1} = [\tilde{\Delta}_x^-]_{ijk} \quad (2.131)$$

$$[F_x^+]_{ijk} = \left[\frac{h_x^{i+1}}{2} [\tilde{D}]_{i+1jk}^{-1} + \frac{h_x^i}{2} [\tilde{D}]_{ijk}^{-1} \right]^{-1} = [\tilde{\Delta}_x^+]_{ijk} \quad (2.132)$$

$$[F_y^-]_{ijk} = \left[\frac{h_y^j}{2} [\tilde{D}]_{ijk}^{-1} + \frac{h_y^{j-1}}{2} [\tilde{D}]_{ij-1k}^{-1} \right]^{-1} = [\tilde{\Delta}_y^-]_{ijk} \quad (2.133)$$

$$[F_y^+]_{ijk} = \left[\frac{h_y^{j+1}}{2} [\tilde{D}]_{ij+1k}^{-1} + \frac{h_y^j}{2} [\tilde{D}]_{ijk}^{-1} \right]^{-1} = [\tilde{\Delta}_y^+]_{ijk} \quad (2.134)$$

$$[F_z^-]_{ijk} = \left[\frac{h_z^k}{2} [\tilde{D}]_{ijk}^{-1} + \frac{h_z^{k-1}}{2} [\tilde{D}]_{ijk-1}^{-1} \right]^{-1} = [\tilde{\Delta}_z^-]_{ijk} \quad (2.135)$$

$$[F_z^+]_{ijk} = \left[\frac{h_z^{k+1}}{2} [\tilde{D}]_{ijk+1}^{-1} + \frac{h_z^k}{2} [\tilde{D}]_{ijk}^{-1} \right]^{-1} = [\tilde{\Delta}_z^+]_{ijk} \quad (2.136)$$

En insérant les équations (2.131) à (2.136) à l'intérieur de l'équation (2.119) et en ou-

bliant pas l'égalité entre les facteurs de discontinuité d'une même cellule on obtient

$$\begin{aligned}
& h_y^j h_z^k \left[[\tilde{\Delta}_x^+]_{ijk} [f]_{i+1jk} [\hat{\phi}]_{i+1jk} + [\tilde{\Delta}_x^-]_{ijk} [f]_{i-1jk} [\hat{\phi}]_{i-1jk} \right] \\
& h_x^i h_z^k \left[[\tilde{\Delta}_y^+]_{ijk} [f]_{ij+1k} [\hat{\phi}]_{ij+1k} + [\tilde{\Delta}_y^-]_{ijk} [f]_{ij-1k} [\hat{\phi}]_{ij-1k} \right] \\
& h_x^i h_y^j \left[[\tilde{\Delta}_z^+]_{ijk} [f]_{ijk+1} [\hat{\phi}]_{ijk+1} + [\tilde{\Delta}_z^-]_{ijk} [f]_{ijk-1} [\hat{\phi}]_{ijk-1} \right] \\
& - \left\{ \begin{aligned} & h_y^j h_z^k \left[[\tilde{\Delta}_x^+]_{ijk} + [\tilde{\Delta}_x^-]_{ijk} \right] \\ & + h_x^i h_z^k \left[[\tilde{\Delta}_y^+]_{ijk} + [\tilde{\Delta}_y^-]_{ijk} \right] \\ & + h_x^i h_y^j \left[[\tilde{\Delta}_z^+]_{ijk} + [\tilde{\Delta}_z^-]_{ijk} \right] \end{aligned} \right\} [f]_{ijk} [\hat{\phi}]_{ijk} \quad (2.137) \\
& + \left[\hat{\Sigma}'_{\hat{k}_{eff}} \right]_{ijk} [\hat{\phi}]_{ijk} V_{ijk} = 0
\end{aligned}$$

De plus, on multiplira le flux de volume homogène du dernier terme de (2.137) par $[f]_{ijk}$ et on multiplira la section efficace de ce même terme par $[f]_{ijk}^{-1}$. Cette opération n'affecte nullement le dernier terme puisqu'on le multiplie seulement par un facteur unitaire ($[f]_{ijk} [f]_{ijk}^{-1} = [I]$). Par contre cela nous permet d'utiliser les définitions de sections efficaces et de flux de volume homogènes tels que définis par la méthode SPH.

L'équation (2.137) prendra alors la forme

$$\begin{aligned}
& h_y^j h_z^k \left[[\tilde{\Delta}_x^+]_{ijk} [\tilde{\phi}]_{i+1jk} + [\tilde{\Delta}_x^-]_{ijk} [\tilde{\phi}]_{i-1jk} \right] \\
& h_x^i h_z^k \left[[\tilde{\Delta}_y^+]_{ijk} [\tilde{\phi}]_{ij+1k} + [\tilde{\Delta}_y^-]_{ijk} [\tilde{\phi}]_{ij-1k} \right] \\
& h_x^i h_y^j \left[[\tilde{\Delta}_z^+]_{ijk} [\tilde{\phi}]_{ijk+1} + [\tilde{\Delta}_z^-]_{ijk} [\tilde{\phi}]_{ijk-1} \right] \\
& - \left\{ \begin{aligned} & h_y^j h_z^k \left[[\tilde{\Delta}_x^+]_{ijk} + [\tilde{\Delta}_x^-]_{ijk} \right] \\ & + h_x^i h_z^k \left[[\tilde{\Delta}_y^+]_{ijk} + [\tilde{\Delta}_y^-]_{ijk} \right] \\ & + h_x^i h_y^j \left[[\tilde{\Delta}_z^+]_{ijk} + [\tilde{\Delta}_z^-]_{ijk} \right] \end{aligned} \right\} [\tilde{\phi}]_{ijk} \\
& + [\tilde{\Sigma}'_{\hat{k}_{eff}}]_{ijk} [\tilde{\phi}]_{ijk} V_{ijk} = 0
\end{aligned} \tag{2.138}$$

Cette équation a la même forme que l'équation (2.104) mais avec les propriétés homogènes définies par la méthode SPH.

Nous venons de démontrer que dans le cas où chaque volume homogène possède un seul facteur de discontinuité, identique pour chacune de ses surfaces, alors la théorie d'équivalence devient identique à la méthode SPH. Ceci suggère, entre autre chose, que la théorie d'équivalence offre un cadre plus général que la méthode SPH. Mentionnons finalement qu'une technique pour obtenir un seul facteur de discontinuité par région est suggérée par Tanker [Tanker, 1985].

CHAPITRE 3

CALCUL DES FLUX DE SURFACE À L'INTÉRIEUR DU CODE DE CELLULE DRAGON

Ce chapitre présente l'analyse des résultats qui correspondent à la première partie de ce projet de maîtrise, c'est-à-dire le calcul des flux de surface à l'intérieur du code de cellule DRAGON [IGE-174, 2000] en théorie du transport. Les résultats que nous avons obtenus à l'aide de la méthode directe, présentée à la section 2.1.3, seront comparés à une autre méthode de calcul des flux de surface à l'intérieur de DRAGON et développée par Marleau [Marleau, 2003]. Cette méthode consiste à définir des régions très minces près des surfaces considérées et de supposer les flux de volume correspondant à ces régions minces comme équivalents aux flux des surfaces correspondantes. Ces deux méthodes comprennent deux approximations sur les conditions frontières. La première approximation consiste à supposer que les flux aux surfaces externes ont un comportement isotrope. La seconde approximation consiste à poser une condition d'albédo aux frontières, c'est-à-dire une réflexion parfaite des neutrons sur les surfaces extérieures du domaine. Ces deux approximations seront exposées en détail dans ce chapitre. Pour contourner ces approximations, on a utilisé la méthode des conditions frontières spéculaires qui sera aussi exposée dans ce chapitre. Une section traitera des méthodes d'homogénéisation et de condensation sur les flux de surface et les flux de volume que nous avons utilisées afin d'obtenir tous nos résultats. À la fin nous présenterons une analyse de nos résultats avec une description de chaque type de simulations qui sont à l'origine de chacun des résultats.

3.1 Conditions frontières isotropes

Lorsque nous calculons les flux de surface par la méthode directe, nous utilisons en fait l'équation (2.35) de la section 2.1.3 qui est retranscrite ici

$$\bar{J}^g = \frac{\bar{J}_+^g + \bar{J}_-^g}{2} \quad (3.1)$$

et on calcule $\bar{J}_+^g$ et $\bar{J}_-^g$ de la façon suivante

$$\bar{J}_+^g = [P_{SV}^C]^g \bar{q}^g \quad (3.2)$$

$$\bar{J}_-^g = [A]^g \bar{J}_+^g \quad (3.3)$$

où $[P_{SV}^C]^g$ est la matrice de fuite complète et $[A]^g$ la matrice d'albédo. Lorsque l'on calcule le flux de surface par la méthode des régions minces on utilise plutôt l'équation (2.32) qui est retranscrite ici

$$\bar{\phi}^g = [P_{VV}^C]^g \bar{q}^g \quad (3.4)$$

où $[P_{VV}^C]^g$ est la matrice de probabilité de collision complète. Les deux matrices complètes $[P_{VV}^C]^g$ et $[P_{VS}^C]^g$ sont définies comme suit

$$[P_{VV}^C]^g \equiv [p_{VS}]^g \left([I] - [A]^g [p_{SS}]^g \right)^{-1} [A]^g [p_{SV}]^g + [p_{VV}]^g \quad (3.5)$$

$$[P_{SV}^C]^g \equiv [p_{SS}]^g \left([I] - [A]^g [p_{SS}]^g \right)^{-1} [A]^g [p_{SV}]^g + [p_{SV}]^g \quad (3.6)$$

Les éléments qui composent les différentes matrices de probabilités de collision et de fuite sont définis par les relations (2.18) à (2.21).

Je rappelle que lorsque nous avons dérivé le système d'équations (2.24) à (2.26) et adopté les définitions de nos matrices de probabilités de collision et de fuite, nous avons procédé

à deux approximations. La première approximation est présentée à l'annexe I. Elle consiste à donner aux flux de surface une dépendance angulaire qui correspond à une expansion en harmoniques sphériques tronquée au premier terme, ce qui implique alors que nos flux de surface n'ont aucune dépendance angulaire puisque la première harmonique sphérique est une constante. La deuxième approximation est la condition d'albédo représentée par la matrice $[A]^g$, sur laquelle nous n'avons accordé aucune dépendance angulaire dans un premier temps et dans un second temps nous avons supposé des conditions frontières de réflexion totale, cette matrice ne reflète pas nécessairement la réalité.

Sans l'approximation isotrope sur les flux de surface on a

$$\phi_{\pm}^g(\vec{r}_s, \vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} \sum_{\nu=0}^{N_{\nu}} \phi_{\pm}^{g,\nu}(\vec{r}_s) \psi^{\nu}(\vec{\Omega}, \vec{N}_{\pm}) \quad (3.7)$$

le système d'équations (2.24) à (2.26) garde sensiblement la même forme mais avec une somme supplémentaire sur les harmoniques sphériques [IGE-236, 2001]

$$\vec{\phi}^g = \sum_{\nu=0}^{N_{\nu}} [P_{SV}]^{g,\nu} \vec{J}_{+}^{g,\nu} + [P_{VV}]^g \vec{q}^g \quad (3.8)$$

$$\vec{J}_{+}^{g,\nu} = \sum_{\mu=0}^{N_{\mu}} [P_{SS}]^{g,\nu\mu} \vec{J}_{-}^{g,\mu} + [P_{VS}]^{g,\nu} \vec{q}^g \quad (3.9)$$

$$\vec{J}_{-}^{g,\nu} = \sum_{\mu=0}^{N_{\mu}} [A]^{g,\nu\mu} \vec{J}_{+}^{g,\mu} \quad (3.10)$$

Les harmoniques sphériques apparaissent évidemment à l'intérieur des nouvelles définitions

des éléments des matrices de probabilités de fuite [IGE-236, 2001]

$$p_{ij}^g = \frac{1}{V_i} \int_{V_i} \int_{V_j} \frac{e^{-\tau^g(R)}}{4\pi R^2} d^3 r' d^3 r \quad (3.11)$$

$$p_{i\alpha}^{g,\nu} = \frac{1}{V_i} \int_{V_i} \int_{S_\alpha} \frac{e^{-\tau^g(R_s)}}{4\pi R_s^2} (\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_-) \psi^\nu(\vec{\Omega}, \vec{N}_-) d^3 r d^2 r' \quad (3.12)$$

$$p_{\alpha i}^{g,\nu} = \frac{4}{S_\alpha} \int_{S_\alpha} \int_{V_i} \frac{e^{-\tau^g(R)}}{4\pi R^2} (\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_+) \psi^\nu(\vec{\Omega}, \vec{N}_+) d^3 r' d^2 r \quad (3.13)$$

$$p_{\alpha\beta}^{g,\nu\mu} = \frac{4}{S_\alpha} \int_{S_\alpha} \int_{S_\beta} \frac{e^{-\tau^g(R_s)}}{4\pi R_s^2} (\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_-) \psi^\nu(\vec{\Omega}, \vec{N}_-) (\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_+) \psi^\mu(\vec{\Omega}, \vec{N}_+) d^2 r d^2 r' \quad (3.14)$$

Si l'on compare les définitions (3.11) à (3.14) avec les définitions (2.18) à (2.21) on constate bien que la seule nuance concerne la présence des harmoniques sphériques. Le seul terme qui n'est pas affecté est le terme de probabilité de volume à volume p_{ij}^g .

Maintenant, si l'on compare la définition des deux matrices complètes $[P_{VV}^C]^g$ et $[P_{SV}^C]^g$ on constate que $[P_{SV}^C]^g$ implique le terme $[p_{SS}]^g$ au lieu de $[p_{VS}]^g$ et le terme $[p_{SV}]^g$ au lieu de $[p_{VV}^C]^g$. De plus, lorsque nous calculons les flux de surface par la méthode directe, en utilisant l'équation (3.1), on doit aussi calculer $\vec{J}_-^g$ ce qui implique l'utilisation de la matrice $[A]^g$ une seconde fois. La méthode directe est donc plus affectée par l'approximation des conditions frontières isotropes que la méthode des régions minces. Donc l'erreur de calcul causée par cette approximation sera normalement plus grande sur la méthode directe que la méthode des régions minces. Nous devons garder à l'esprit ce fait lors de l'analyse des résultats.

3.2 Conditions frontières spéculaires

Pour contourner les deux approximations présentées à la section précédente il est possible d'utiliser les conditions frontières spéculaires lors du calcul des flux de volume. Cette technique ne pourra être utilisée que dans le cadre de la méthode des régions minces lors du calcul des flux aux surfaces. Les conditions frontières spéculaires consiste à éliminer toutes les frontières d'une géométrie donnée et de dupliquer cette géométrie à l'infini afin d'obtenir un réseau périodique infini. De cette façon on élimine les conditions aux frontières, c'est-à-dire la matrice d'albédo $[A]^g$, des calculs ainsi que les flux aux surfaces extérieures $J_{\pm}^g$ puisqu'il n'y a plus de surfaces externes. Dans le système d'équations (2.24) à (2.26) ne subsiste que l'équation (2.24) et seulement le second terme de cette équation.

Voici réécrite l'équation (2.24) dans le cadre de la technique des conditions frontières spéculaires et sous une forme non-matricielle

$$\phi_i^g = \sum_{j=1}^{\infty} p_{ij}^g q_j^g \quad (3.15)$$

On constate que l'on a une somme infinie puisque l'on a une réseau périodique infini. Et puisque ce réseau est périodique, on connaît tous les termes de cette somme. En prenant la définition (2.18) pour p_{ij}^g et en considérant le parcours optique $\tau^g(R)$ constant à l'intérieur de chaque volume i ou j , alors (3.15) devient

$$\phi_i^g = \sum_{j=1}^{\infty} V_j \frac{e^{-\tau_{ij}^g}}{4\pi R_{ij}^2} q_j^g \quad (3.16)$$

avec R_{ij} la distance entre le volume i et le volume j . Puisque le parcours optique croît avec la distance, c'est-à-dire croît lorsque l'index j augmente, alors nous avons une somme d'exponentielles décroissantes sur une distance qui augmente au carré. Cette

somme est donc convergente et donne un résultat fini.

3.3 Condensation et homogénéisation sur les flux

Pour tous nos calculs de flux de volume ou de surface nous avons utilisé des bibliothèques de sections efficaces microscopiques dont la discrétisation en énergie fut réalisée sur 69 groupes ce qui génère donc des flux pour 69 groupes. Pour nos résultats finaux par contre, nous désirions seulement deux groupes d'énergies, le groupe thermique comprenant les neutrons ayant une énergie comprise entre 0 eV et 4 eV et le groupe rapide comprenant les neutrons ayant une énergie de plus de 4 eV. Pour ce faire nous avons dû procéder à ce que l'on appelle une technique de condensation. Cette technique consiste à sommer ensemble les flux des sous-groupes appartenant à un même groupe principal (thermique ou rapide) de la façon suivante

$$\phi_i^G = \sum_{g \in G} \phi_i^g \quad (3.17)$$

où ϕ_i^G représente le flux dans le groupe principal G appartenant à la région i et ϕ_i^g représente le flux pour un sous-groupe donné g pour la même région i .

De la même façon nous devons parfois déterminer un flux pour une région composée de plusieurs sous-régions ayant chacune leur propre flux. Pour ce faire nous utilisons ce que l'on appelle une technique d'homogénéisation. L'homogénéisation est un sujet qui a été abordé à la section 1.2 en ce qui concerne les sections efficaces, les coefficients de diffusions ainsi que le facteur de multiplication. Ici nous présentons l'homogénéisation des flux de volume et de surface. Dans le cas des flux de volume nous procédons de la façon suivante

$$\phi_I^g = \frac{\sum_{V_i \in V_I} \phi_i^g V_i}{\sum_{V_i \in V_I} V_i} = \frac{\sum_{V_i \in V_I} \phi_i^g V_i}{V_I} \quad (3.18)$$

où ϕ_I^g représente le flux de volume de la région I dans le groupe d'énergie g et ϕ_i^g

représente le flux de volume de la sous-région i dans le même groupe d'énergie g . V_I est le volume de la région I alors que V_i est le volume de la sous-région i . Pour les flux de surface on procède de manière tout à fait similaire

$$\phi_A^g = \frac{\sum_{S_\alpha \in S_A} \phi_\alpha^g S_\alpha}{\sum_{S_\alpha \in S_A} S_\alpha} = \frac{\sum_{S_\alpha \in S_A} \phi_\alpha^g S_\alpha}{S_A} \quad (3.19)$$

où ϕ_A^g représente le flux de surface de la région A dans le groupe d'énergie g et ϕ_α^g représente le flux de surface de la sous-région α dans le même groupe d'énergie g . S_A est la surface de la région A alors que S_α est la surface de la sous-région α .

3.4 Analyse des résultats

Cette section a pour but d'expliquer chaque type de simulation réalisé à l'intérieur du code de cellule DRAGON dans le cadre de ce projet et de mettre en évidence les résultats obtenus pour chacune des simulations et les conclusions que l'on peut en tirer. Nous avons testé la méthode directe de calcul des flux de surface sur quatre types de simulation. Le premier type a été réalisé dans le but de calculer l'ampleur des erreurs que peuvent créer les conditions frontières isotropes. Le second type de simulation avait pour but de vérifier l'effet que peut avoir la discrétisation spatiale sur les calculs de flux. Le troisième type est un calcul de flux sur une géométrie tridimensionnelle. Et finalement, le dernier type de simulation a été effectué sur une géométrie de grappe en deux dimensions qui représente en fait une grappe de combustible CANDU-6 détaillée [Dufour, 2004]. Les écarts que l'on trouve dans chacune des simulations sont tous calculés de la façon suivante

$$\text{Écart} = \frac{\left| \phi_{(\text{méthode directe})} - \phi_{(\text{méthode régions minces})} \right|}{\phi_{(\text{méthode régions minces})}} \times 100\% \quad (3.20)$$

3.4.1 Effets des conditions frontières

Le premier type de simulations fut réalisé sur une géométrie bidimensionnelle représentant une cellule CANDU-6 simplifiée tel qu'illustrée sur la Figure 3.1. On y voit la grappe de combustible d'uranium naturel représentée par des cercles concentriques au centre de la cellule. Les autres régions entourant la grappe sont remplies de modérateur d'eau lourde. De minces régions ont été définies près de chaque surface afin de pouvoir utiliser la méthode des régions minces. À cause de la symétrie du problème, seulement deux régions minces présentent des valeurs de flux de volume qui diffèrent, ces régions sont représentées en vert et en bleu sur la Figure 3.1.

La méthode des régions minces a été employée avec les conditions frontières spéculaires afin d'éliminer les effets dus aux conditions frontières isotropes. Nous avons aussi effectué des calculs avec la méthode des régions minces en utilisant les conditions frontières isotropes. Les résultats obtenus pour les régions verte et bleue sont présentés à l'intérieur du Tableau 3.1. Nous avons par la suite refait les mêmes calculs mais cette fois en utilisant la méthode directe qui implique automatiquement l'utilisation des conditions frontières isotropes. Les résultats obtenus pour les régions verte et bleue sont présentés à l'intérieur du Tableau 3.2 et sont comparés aux résultats obtenus par la méthode des régions minces dans les mêmes conditions d'approximations.

La caractéristique principale des Tableaux 3.1 et 3.2 est que l'écart, entre les résultats obtenus à l'aide des différentes méthodes, est plus élevé à l'intérieur du groupe rapide qu'à l'intérieur du groupe thermique. La raison de ce comportement est liée au fait que les neutrons thermiques ont une distribution angulaire beaucoup plus uniforme que les neutrons rapides, ou en d'autres termes, les neutrons thermiques sont beaucoup plus isotropes que les neutrons rapides et sont, par le fait même, moins affectés par notre approximation isotropique sur les flux de surface. Mais dans tous les cas, tous les écarts sont très faibles (inférieures à 1.20%) et nous pouvons conclure que la méthode directe est fort probablement adaptée au calcul des flux de surface et peut être utilisée pour générer les facteurs de discontinuité.

Une autre caractéristique intéressante que nous pouvons observer est que les résultats obtenus dans le groupe rapide sont généralement surestimés par la méthode directe alors que les résultats obtenus dans le groupe thermique sont généralement sous-estimés. Par contre nous n'avons pas trouvé d'explication claire sur le fait que ce soit presque toujours le groupe rapide qui soit surestimé. N'oublions pas que si la limite entre le groupe rapide et le groupe thermique avait été fixée ailleurs qu'à 4 eV la situation aurait pu être totalement différente. Nous pensons tout de même que l'approximation des flux de surface isotropes pourrait être à l'origine du problème. En effet, cette approximation est

équivalente à moyenner et à redistribuer le flux sur l'ensemble de l'angle solide, cette opération ayant pour effet «d'ajouter» des neutrons à des endroits où normalement il y aurait moins de neutrons. Comme le flux rapide est très directionnel, alors il serait normal de surestimer ce dernier lorsque l'on procède à notre approximation des flux de surface isotropes.

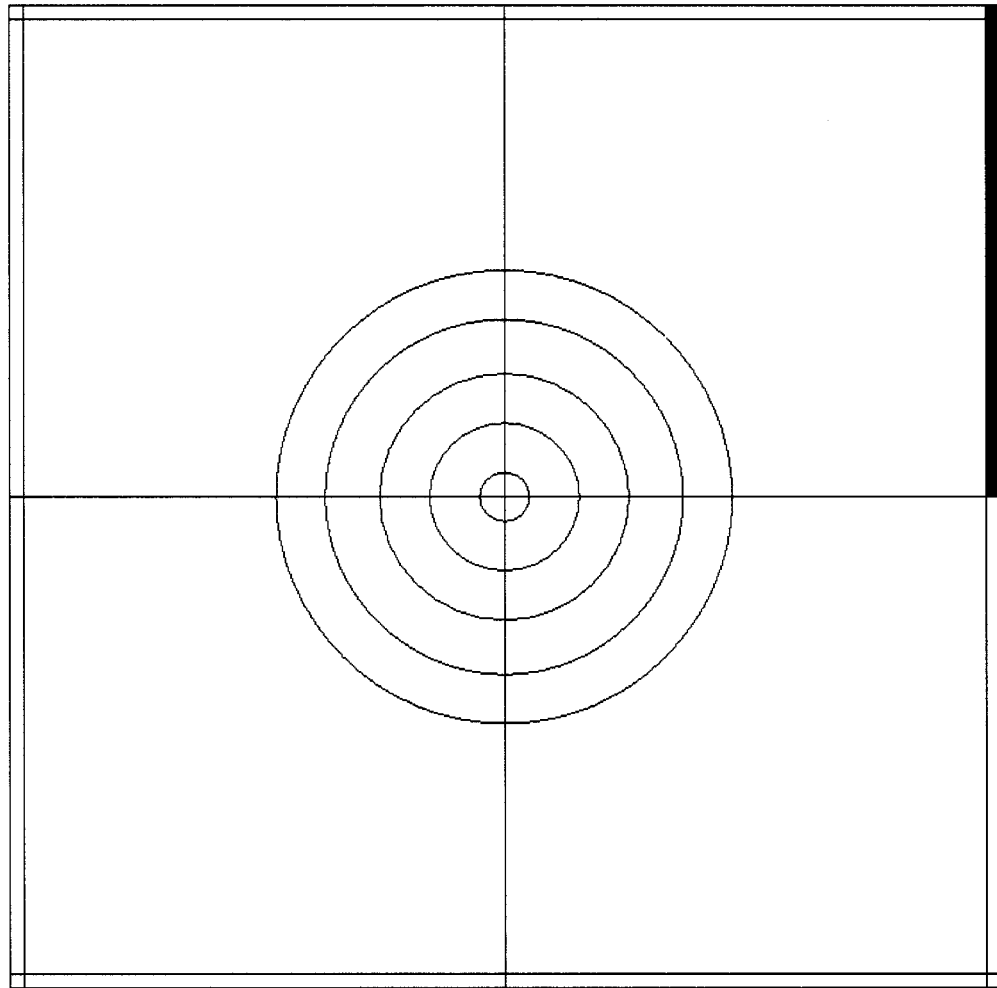


Figure 3.1 Effets des conditions frontières (géométrie)

Tableau 3.1 Flux de surface (conditions frontières spéculaires et isotropes)

GROUPE RAPIDE			
RÉGION	Méthode des régions minces (spéculaire) 1×10^{-1} ($n/s \text{ cm}^2$)	Méthode des régions minces (isotropique) 1×10^{-1} ($n/s \text{ cm}^2$)	Écart (%)
VERT	1.0046	1.0158	1.11
BLEU	1.0200	1.0278	0.76
GROUPE THERMIQUE			
RÉGION	Méthode des régions minces (spéculaire) 1×10^{-1} ($n/s \text{ cm}^2$)	Méthode des régions minces (isotropique) 1×10^{-1} ($n/s \text{ cm}^2$)	Écart (%)
VERT	2.1838	2.1806	0.15
BLEU	2.1743	2.1722	0.10

Tableau 3.2 Flux de surface (conditions frontières isotropes)

GROUPE RAPIDE			
RÉGION	Méthode des régions minces (isotropique) 1×10^{-1} ($n/s \text{ cm}^2$)	Méthode directe (isotropique) 1×10^{-1} ($n/s \text{ cm}^2$)	Écart (%)
VERT	1.0158	1.0181	0.23
BLEU	1.0278	1.0400	1.19
GROUPE THERMIQUE			
RÉGION	Méthode des régions minces (isotropique) 1×10^{-1} ($n/s \text{ cm}^2$)	Méthode directe (isotropique) 1×10^{-1} ($n/s \text{ cm}^2$)	Écart (%)
VERT	2.1806	2.1823	0.08
BLEU	2.1722	2.1703	0.09

3.4.2 Effets de la discrétisation spatiale

Pour le second type de simulations nous avons seulement utilisé les conditions frontières isotropes. La méthode directe ainsi que la méthode des régions minces ont été utilisées pour le calcul des flux de surface la dernière méthode étant notre référence. Dans ce cas, toutes les simulations ont été réalisées sur une géométrie bidimensionnelle qui représente deux cellules identiques de type CANDU-6 ayant chacune sa grappe de combustible au centre représentée par un ensemble de cercles concentriques. Chacune des grappes est entourées d'une région de forme carrée qui contient de l'eau lourde qui sert de modérateur. Tout ceci est représenté sur la Figure 3.2 . Différentes discrétisations spatiales ont été réalisées pour obtenir le flux de surface avec la méthode des régions minces sur la surface externe orientée en X_- .

Les résultats sont présentés à l'intérieur du Tableau 3.3 pour le groupe rapide et à l'intérieur du Tableau 3.4 pour le groupe thermique. La notation " $BvRw$ " signifie que les zones représentées en bleu (ou vert) sur la Figure 3.2 ont été divisées en v régions identiques perpendiculairement à l'axe x alors que les régions représentées en rouge ont été divisées en w régions identiques et également de manière perpendiculaire à l'axe des x . Les flux des régions minces qui apparaissent à l'intérieur des Tableaux 3.3 et 3.4 correspondent toujours aux flux homogénéisés à partir des régions de la zone verte dont l'une des surfaces est en contact avec une partie de la surface orientée en X_- .

La caractéristique principale des Tableaux 3.3 et 3.4 est encore une fois le grand écart entre les résultats obtenus dans le groupe rapide par rapport à ceux obtenus dans le groupe thermique. Ceci s'explique toujours par le fait que les neutrons thermiques sont beaucoup plus isotropes que les neutrons rapides et sont donc moins affectés par notre approximation isotrope sur les flux de surfaces. On constate aussi que les écarts entre les deux méthodes de calcul augmentent avec une discrétisation plus fine dans les zones rouges et diminuent avec une discrétisation plus fine dans les zones bleues (et vertes).

Mais dans tous les cas, le flux finit par converger. De plus, on remarque que les valeurs de flux de surface sont toujours surestimées par la méthode directe à l'intérieur du groupe rapide et sous-estimées à l'intérieur du groupe thermique.

Nous pouvons aussi observer que les résultats obtenus sont plus sensibles aux discrétisations faites dans les zones rouges que dans les zones bleues (et vertes) mais dans tous les cas les résultats convergent vers une valeur stable au fur et à mesure que l'on augmente le nombre de divisions sur le maillage. Ceci est bien illustré sur les graphiques de la Figure 3.3. Chaque point noir de la Figure 3.3 représente un résultat des Tableaux 3.3 et 3.4 dont la valeur est donnée par l'axe z . L'axe identifié R représente le nombre de discrétisations dans les zones rouges alors que l'axe identifié B représente le nombre de discrétisations dans les zones bleues (et vertes). La plus grande sensibilité des résultats face aux discrétisations effectuées dans les zones rouges est liée au fait que ces zones sont de grandes dimensions (6.6cm) ce qui a beaucoup plus d'effet sur les calculs de flux car le libre parcours moyen des neutrons dans l'eau lourde est d'environ 2cm. Alors que les zones bleues (ou vertes) ont une largeur de 0.4cm ce qui est de beaucoup inférieur au libre parcours moyen des neutrons et donc une discrétisation fine de ces zones avait très peu d'effet sur le calcul des parcours optiques et indirectement sur le calcul des flux. La Figure 3.3 nous permet de conclure qu'une discrétisation B2R4 aurait été suffisante pour les deux groupes d'énergie.

Une dernière constatation intéressante pour ce type de simulation est le fait que le flux rapide est surestimé avec une discrétisation spatiale grossière des zones rouges alors que le flux thermique est sous-estimé. Ceci s'explique par le comportement du «vrai flux» à l'intérieur de ces deux groupes d'énergie près des frontières. On entend ici par «comportement du vrai flux» le comportement qualitatif de la pente du flux que l'on mesurerait en pratique près des frontières pour un tel type de cellule. Soit une pente positive ou négative. La Figure 3.4 appuie les explications qui vont suivre. En effet, le vrai flux rapide près des frontières a une pente négative et notre discrétisation spatiale

approche ce flux par une fonction escalier qui comme on peut le voir sur la Figure 3.4, a tendance à surestimer la fonction de vrai flux à la surface. Le vrai flux thermique a pour sa part une pente positive près des frontières ce qui engendre donc l'effet inverse de sous-estimation à la surface lorsque l'on approche cette fonction par une fonction escalier.

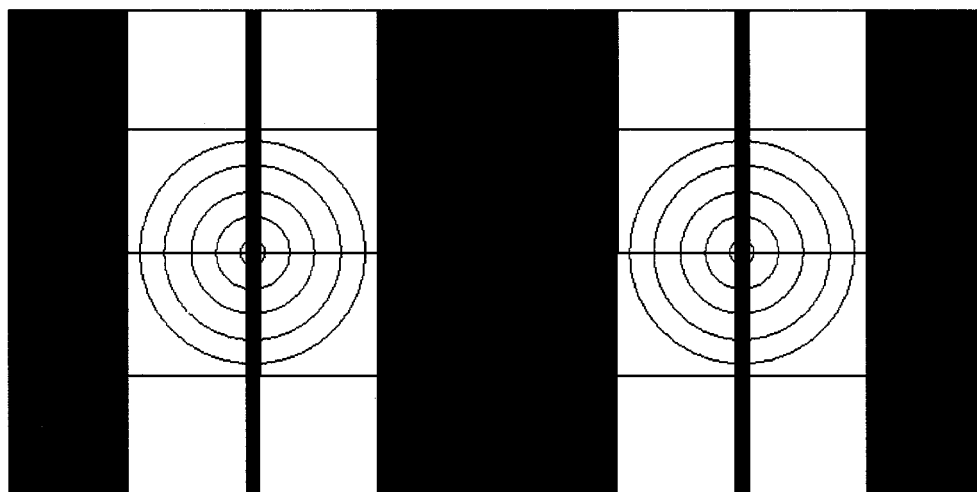


Figure 3.2 Effets de la discrétisation spatiale (géométrie)

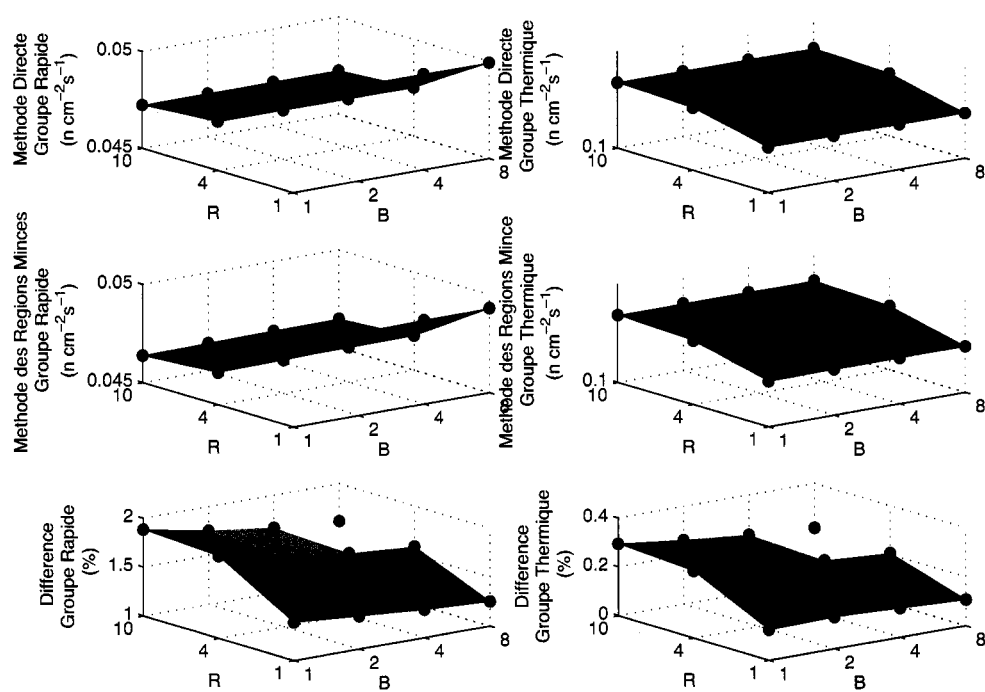


Figure 3.3 Effets de la discrétisation spatiale (résultats)

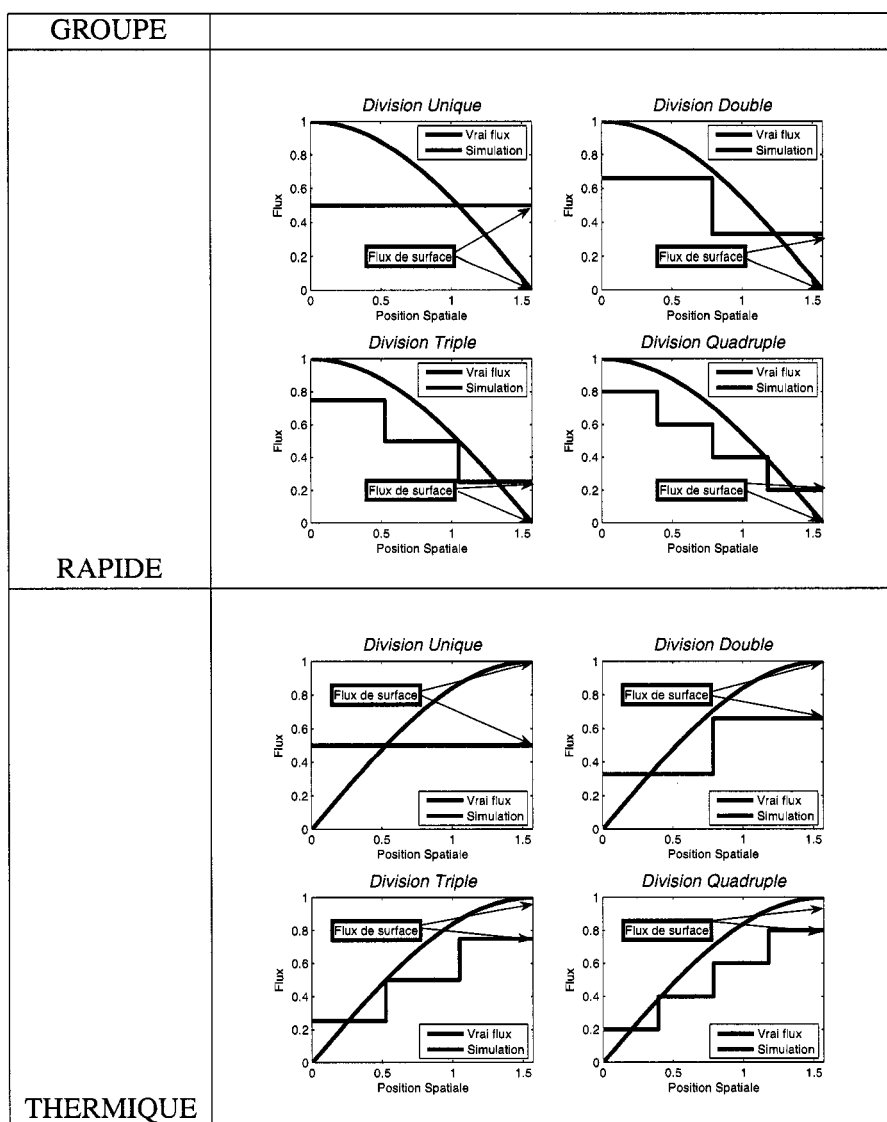


Figure 3.4 Effets de la discrétisation spatiale près des frontières

Tableau 3.3 Flux de surface évalué sur la surface X_- (groupe rapide)

TYPE DE DIVISION	Méthode directe 1×10^{-2} ($n/s \text{ cm}^2$)	Méthode des régions minces 1×10^{-2} ($n/s \text{ cm}^2$)	Écart (%)
B1R1	4.99201	4.92353	1.39
B2R1	4.99204	4.92614	1.34
B4R1	4.99205	4.92868	1.29
B8R1	4.99205	4.93020	1.25
B1R4	4.75052	4.66475	1.84
B2R4	4.75058	4.67050	1.71
B4R4	4.75061	4.67434	1.63
B8R4	4.75061	4.67648	1.59
B1R8	4.72326	4.63600	1.88
B2R8	4.72333	4.64204	1.75
B4R8	4.72335	4.64600	1.66
B8R8	4.72335	4.64820	1.62

Tableau 3.4 Flux de surface évalué sur la surface X_- (groupe thermique)

TYPE DE DIVISION	Méthode directe 1×10^{-1} ($n/s \text{ cm}^2$)	Méthode des régions minces 1×10^{-1} ($n/s \text{ cm}^2$)	Écart (%)
B1R1	1.185541	1.187021	0.12
B2R1	1.185544	1.187085	0.13
B4R1	1.185544	1.186955	0.12
B8R1	1.185544	1.186819	0.11
B1R4	1.257181	1.260630	0.27
B2R4	1.257172	1.260279	0.25
B4R4	1.257170	1.259979	0.22
B8R4	1.257170	1.259765	0.21
B1R8	1.269694	1.273427	0.29
B2R8	1.269684	1.273010	0.26
B4R8	1.269681	1.272685	0.24
B8R8	1.269681	1.272459	0.22

3.4.3 Assemblage CANDU-6 3D

Le troisième type de simulation est un assemblage de deux cellules CANDU-6 avec ou sans barre de contrôle insérée entre les deux grappes de combustible, le tout dans un environnement tridimensionnel. La Figure 3.5 montre la géométrie en question. On y voit très bien les deux grappes de combustible représentées par deux assemblages de cylindres concentriques orientés selon l'axe z . On remarque aussi la barre de contrôle représentée par un ensemble de cylindres concentriques et orientée selon l'axe y . Le tout est entouré d'une zone en parallélépipède qui contient de l'eau lourde servant de modérateur. La méthode directe et la méthode des régions minces furent utilisées dans ce type de simulation, la dernière méthode servant de référence. Des régions minces ont été établies près de chacune des surfaces externes orientées en X_+ , X_- , Y_+ , Y_- , Z_+ et Z_- respectivement afin de pouvoir utiliser la méthode des régions minces, mais un seul type de discrétisation spatiale a été effectué.

Les résultats sont présentés à l'intérieur du Tableau 3.5. Par la symétrie du problème, il n'est présenté que les résultats obtenus pour les surfaces orientées en X_- , Y_- et Z_- . Lorsque la barre de contrôle et le tube guide ne sont pas présents dans l'assemblage, nous avons un problème symétrique dans le plan xy et nous observons bien des valeurs similaires de flux de surface sur les surfaces X_- et Y_- . Nous pouvons encore une fois observer un écart plus grand entre les résultats obtenus par les deux méthodes dans le flux rapide que dans le flux thermique et les résultats sont toujours surestimés par la méthode directe dans le groupe rapide et sous-estimés dans le groupe thermique. Nous observons par contre un écart exceptionnellement grand (2.83%) dans le groupe thermique sur la plan Y_- dans le cas où le tube guide est présent et la barre de contrôle insérée. Ce grand écart est causé par la présence accrue de matière absorbante. En effet, la matière absorbante crée plus d'hétérogénéité à l'intérieur de l'assemblage. Encore une fois c'est l'approximation des conditions frontières isotropes qui est à l'origine de ce grand écart

car cette approximation est particulièrement sensible au niveau d'hétérogénéité.

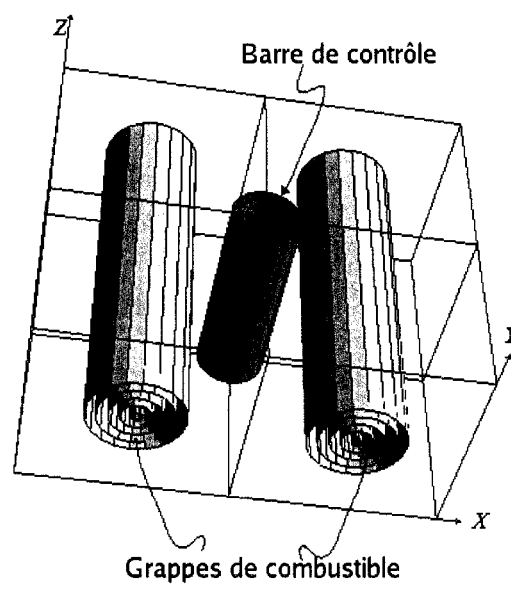


Figure 3.5 Assemblage CANDU6 3D

Tableau 3.5 Flux de surface pour un assemblage 3D

BARRE DE CONTRÔLE RETIRÉE SANS TUBE GUIDE				
GROUPE	SURFACE	Méthode directe 1×10^{-3} (n/s cm ²)	Méthode des régions minces 1×10^{-3} (n/s cm ²)	Écart (%)
RAPIDE	X ₋	1.0069	0.9968	1.01
	Y ₋	1.0063	0.9968	0.95
	Z ₋	1.1887	1.1862	0.21
THERMIQUE	X ₋	2.4013	2.4019	0.02
	Y ₋	2.4024	2.4015	0.04
	Z ₋	2.1818	2.1805	0.06
BARRE DE CONTRÔLE RETIRÉE AVEC TUBE GUIDE				
GROUPE	SURFACE	Méthode directe 1×10^{-3} (n/s cm ²)	Méthode des régions minces 1×10^{-3} (n/s cm ²)	Écart (%)
RAPIDE	X ₋	1.0085	0.9985	1.00
	Y ₋	1.0088	0.9987	1.01
	Z ₋	1.1909	1.1881	0.24
THERMIQUE	X ₋	2.4041	2.4049	0.03
	Y ₋	2.4013	2.4037	0.10
	Z ₋	2.1820	2.1828	0.04
BARRE DE CONTRÔLE INSÉRÉE AVEC TUBE GUIDE				
GROUPE	SURFACE	Méthode directe 1×10^{-3} (n/s cm ²)	Méthode des régions minces 1×10^{-3} (n/s cm ²)	Écart (%)
RAPIDE	X ₋	1.0308	1.0236	0.70
	Y ₋	1.0303	1.0233	0.68
	Z ₋	1.2138	1.2160	0.18
THERMIQUE	X ₋	2.4602	2.4646	0.18
	Y ₋	2.3783	2.4480	2.83
	Z ₋	2.1856	2.2274	1.88

3.4.4 Géométrie de grappe

Le dernier type de simulation fut réalisé sur une géométrie de grappe. Ici la méthode des régions minces ne fonctionne pas encore et seulement la méthode directe a pu être utilisée. Ce type de simulation fut réalisée seulement pour démontrer les possibilités de la méthode directe. La géométrie en question est présentée sur la Figure 3.6. On voit une grappe de combustible CANDU-6 modélisée par un ensemble de grands cercles concentriques contenus à l'intérieur d'une cellule carré en plus des 37 crayons d'uranium naturel modélisés par des petits cercles centrés à différents endroits dans la grappe. Précisons que les grands cercles extérieurs ainsi que les quatre coins du carré sont remplis d'eau lourde qui sert de modérateur. Les résultats obtenus sont présentés au Tableau 3.6. Par symétrie, les valeurs de flux de surface sont les mêmes pour chacune des quatre surfaces du carré et seulement une valeur de flux de surface est présentée pour chaque groupe d'énergie.

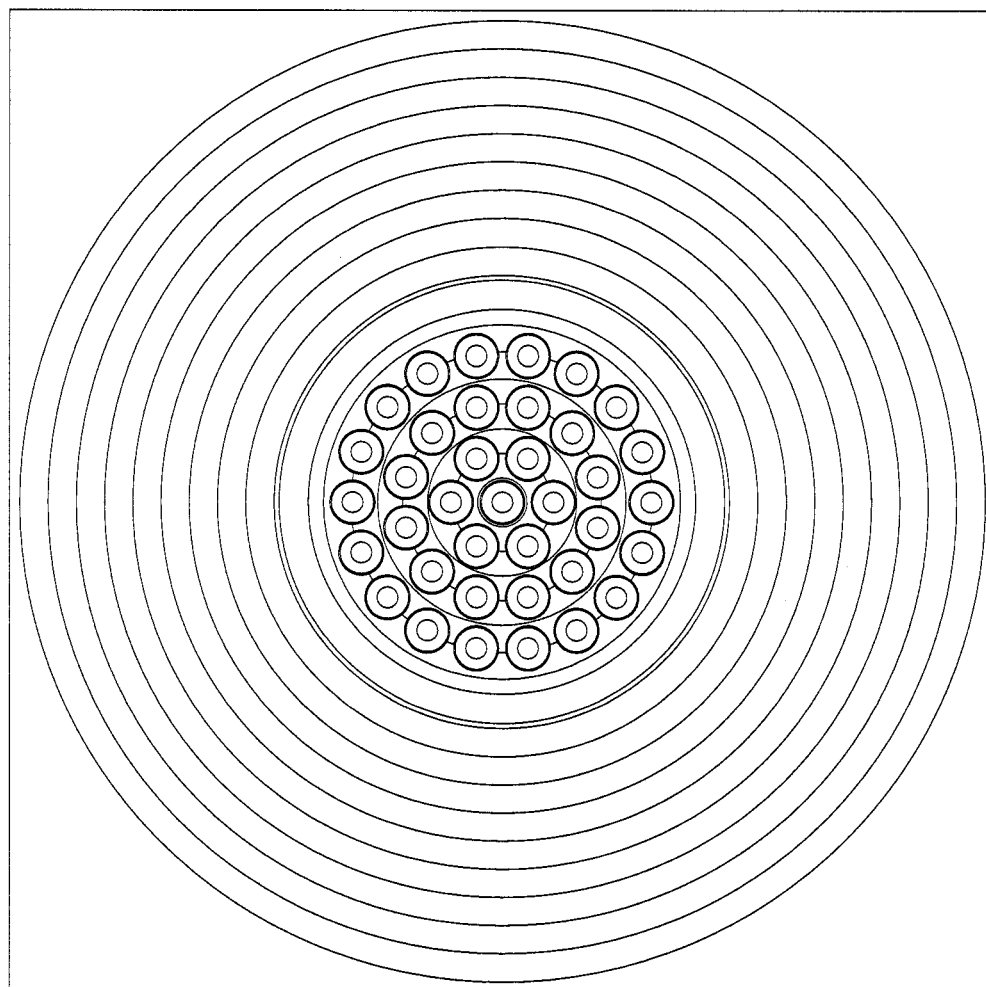


Figure 3.6 Géométrie de grappe

Tableau 3.6 Flux de surface pour les géométries de grappe

GROUPE RAPIDE	
Flux de volume	Flux de surface (Méthode directe)
1×10^{-1} ($n/s \text{ cm}^2$)	1×10^{-1} ($n/s \text{ cm}^2$)
1.0067	7.6133
GROUPE THERMIQUE	
Flux de volume	Flux de surface (Méthode directe)
1×10^{-1} ($n/s \text{ cm}^2$)	1×10^{-1} ($n/s \text{ cm}^2$)
3.8611	10.9379

3.5 Discussion des résultats

Quatre types de simulations ont été effectués afin de vérifier les calculs de flux de surface par la méthode directe. Le premier type de simulation avait pour objectif d'estimer l'ampleur des erreurs que peut générer l'approximation des conditions frontières isotropes. On a utilisé les conditions frontières spéculaires afin d'estimer ces erreurs. Le deuxième type de simulation avait pour but de vérifier les effets de la discrétisation spatiale sur les calculs. Le troisième type de simulation consistait à effectuer des calculs de flux de surface sur un assemblage CANDU6 tridimensionnel et le dernier type de simulation a été réalisé sur une géométrie de grappe bidimensionnelle.

Le résultat le plus marquant est le fait que les écarts entre les deux méthodes de calcul sont toujours plus élevés à l'intérieur du groupe rapide que du groupe thermique. On parvient à expliquer ce résultat à travers l'approximation des flux de surface isotropes. Un autre fait majeur est la surestimation des flux par la méthode directe dans le groupe rapide et la sous-estimation dans le groupe thermique qui est presque toujours observé. On ne parvient pas très clairement à expliquer ce fait mais l'on soupçonne encore une fois l'approximation isotrope des flux de surface d'être à l'origine de ces résultats. On a aussi remarqué qu'une discrétisation spatiale grossière surestime le flux dans le groupe rapide et sous-estime le flux dans le groupe thermique. On explique cela par le comportement réel du flux près des frontières dans chacun des deux groupes d'énergie. On a par contre montré que les résultats convergent lorsque l'on augmente la discrétisation spatiale. Un dernier fait important que l'on a constaté lors des simulations sur l'assemblage tridimensionnel, c'est l'écart accru entre les deux méthodes de calcul causé par la présence d'un mécanisme de contrôle qui augmente le niveau d'hétérogénéité de la cellule.

Malgré le fait que la méthode directe est plus sensible à l'approximation des conditions frontières isotropes que la méthode des régions minces, elle offre l'avantage de calculer

un vrai flux de surface. La méthode directe demande aussi moins de temps de calcul car il n'est pas nécessaire de définir de multiples régions minces près des surfaces pour obtenir des flux de surface. Un autre avantage de cette méthode est qu'elle peut être utilisée sur des géométries de grappe alors que la méthode des régions minces ne le peut pas encore. Par contre, la méthode directe ne peut être utilisée que pour calculer des flux sur les surfaces extérieures d'un assemblage donné alors que la méthode des régions minces peut calculer des flux de surface pour les surfaces internes de l'assemblage.

CHAPITRE 4

CALCUL DE FLUX ET DE PUISSANCE À L'INTÉRIEUR DU CODE RÉACTEUR DONJON-NDF

Ce chapitre expose les résultats obtenus lors des calculs de distribution de flux et de puissance pour un réacteur complet de type CANDU-6 dans le cadre de la théorie d'équivalence. Tous les calculs ont été effectués à l'aide du code réacteur DONJON-NDF [IGE-208, 2000]. Dans un premier temps on abordera la description du modèle de coeur utilisé pour les différentes simulations effectuées. Dans un second temps, on expliquera comment il était envisagé d'obtenir les flux de surface homogènes en différences finies centrées et on abordera aussi le sujet des facteurs de discontinuité d'assemblage (ADF) que nous avons plutôt utilisés et qui nous évitent de calculer les flux de surface homogènes à l'intérieur de la théorie de la diffusion. Et dans un troisième temps, on fera la description des résultats obtenus pour chacune des simulations ainsi qu'une analyse sommaire et les conclusions que l'on peut en tirer. L'objectif de ce chapitre est avant tout de démontrer que la théorie d'équivalence a été implantée correctement à l'intérieur de la chaîne de calcul DRAGON/DONJON-NDF. On aura aussi un bref aperçu de l'importance que peut avoir la théorie pour un réacteur de type CANDU-6 à l'équilibre. Différentes simulations furent réalisées afin d'essayer de faire ressortir l'effet des facteurs de discontinuité sur les calculs. Pour chaque simulation un calcul sans facteurs de discontinuité est effectué à titre de référence et l'analyse sera particulièrement axée sur les différences entre les calculs avec et sans facteurs de discontinuité.

4.1 Description du modèle de coeur

Cette section a pour objectif de préciser certains détails concernant le modèle utilisé lors des simulations d'un coeur complet de type CANDU-6. Dans un premier temps on exposera les informations sur les types de cellules utilisés et dans un second temps on apportera des précisions sur le coeur complet en général.

Pour représenter le combustible nous avons utilisé le modèle de grappe en 2 dimensions tel que décrit à la section 3.4.4. Nous avons généré une librairie de sections efficaces, de coefficients de diffusion et d'ADF homogénéisés et condensés pour 16 valeurs de burnup (soit de 0 MW dT^{-1} à 9593 MW dT^{-1}) afin de pouvoir procéder à une interpolation en burnup au besoin. La technique d'homogénéisation utilisée est celle présentée à la section 1.2. La technique de condensation utilisée est une simple technique de sommation sur les sous-groupes d'énergie appartenant à un même groupe principal (thermique ou rapide). Nous avons donc condensé à 2 groupes d'énergie, soit de 0 eV à 4 eV (groupe thermique) et de 4 eV et plus (groupe rapide). Tous les calculs ont été réalisés à partir d'une librairie de sections efficaces microscopiques WINFRITH à 69 groupes d'énergie. Le modèle de fuite utilisé est un modèle B1 homogène. Pour représenter le réflecteur nous avons utilisé exactement le même modèle en remplaçant le combustible par de l'eau lourde avec une valeur nulle en burnup.

Dans le cas des contrôleurs liquides ou des barres de compensation nous avons utilisé le modèle d'assemblage à 3 dimensions présenté à la section 3.4.3. Nous avons généré une librairie de sections efficaces, de coefficients de diffusion et d'ADF homogénéisés et condensés pour une seule valeur de burnup moyen. Nous avons homogénéisé et condensé de la même manière que pour les cellules de type grappe et réflecteur. La librairie de sections efficaces microscopiques WINFRITH à 89 groupes d'énergie a été utilisée pour tous les calculs. Le modèle de fuite utilisé est aussi un modèle B1 homogène.

Précisons aussi que pour chacun des contrôleurs simulés on a procédé à un calcul avec contrôleur et tube guide, seulement avec tube guide et sans contrôleur ni tube guide.

Pour générer les ADF on a utilisé la méthode directe. Dans le cas des modèles de cellule en 2 dimensions on a forcé les ADF dans la direction Z à être égaux à l'unité. Une fois que le code DRAGON a homogénéisé et condensé toutes les propriétés nucléaires d'une cellule à l'aide du module EDI (voir annexe III) il transfère ces données au module CPO qui génère un fichier contenant les mêmes données mais sous un autre format. Les fichiers générés par le module CPO sont appelés fichiers compo. Les fichiers compo sont compatibles avec le code de calcul DONJON ou DONJON-NDF.

Le code de calcul DONJON (ou DONJON-NDF) utilise le module CRE lire les fichiers compo. Ce module a dû être modifié afin de pouvoir lire les ADF. C'est aussi le module CRE qui procède à l'interpolation en burnup s'il y a lieu. L'algorithme utilisé pour faire l'interpolation sur les ADF est le même que celui utilisé pour les sections efficaces. Mentionnons que le module NEWMAC a aussi dû être modifié. Le module NEWMAC modifie les sections efficaces, les coefficients de diffusion et les ADF d'une cellule en fonction de la fraction de volume occupée par un mécanisme de contrôle. Dans le cas où il n'y a pas de contrôleur présent dans une cellule ces propriétés ne subissent aucune modification.

Une fois tous ces modules modifiés, il nous était possible de procéder à la simulation d'un coeur de type CANDU-6. Une vue aérienne du réacteur avec la position de tous les mécanismes de contrôle qui le composent est présentée à la Figure 4.1. Tous les calculs effectués sont des calculs statiques représentant un coeur à l'équilibre. Nous avons simulé un coeur à deux zones de combustion en utilisant un modèle appelé «time average» en spécifiant le burnup d'entrée et de sortie (soit de 0 $MWdT^{-1}$ à 8675.9 $MWdT^{-1}$ pour la zone 1 et de 0 $MWdT^{-1}$ à 7124.6 $MWdT^{-1}$ pour la zone 2). La Figure 4.2 présente la distribution de ces zones dans le plan avec le réflecteur qui entoure

le coeur. Précisons que la zone identifiée «Combustible 2 » possède le même burnup d'entrée et de sortie que la zone identifiée «Combustible 3 ». Nous avons aussi procédé à une discrétisation spatiale selon les directions X et Y en 26 parties tel que présenté par la Figure 4.2. Le pas de discrétisation aux extrémités est de 41.9 cm, le pas de discrétisation adjacent aux extrémités est de 23.475 cm et les autres pas étant tous de 28.575 cm. En Z on a procédé à une discrétisation en 12 parties identiques de 49.53 cm de largeur définissant ainsi 12 plans que l'on numérote de 1 à 12 en ordre croissant. Les plans #1 et #12 étant situés aux extrémités axiales du coeur (voir Figure 4.1).

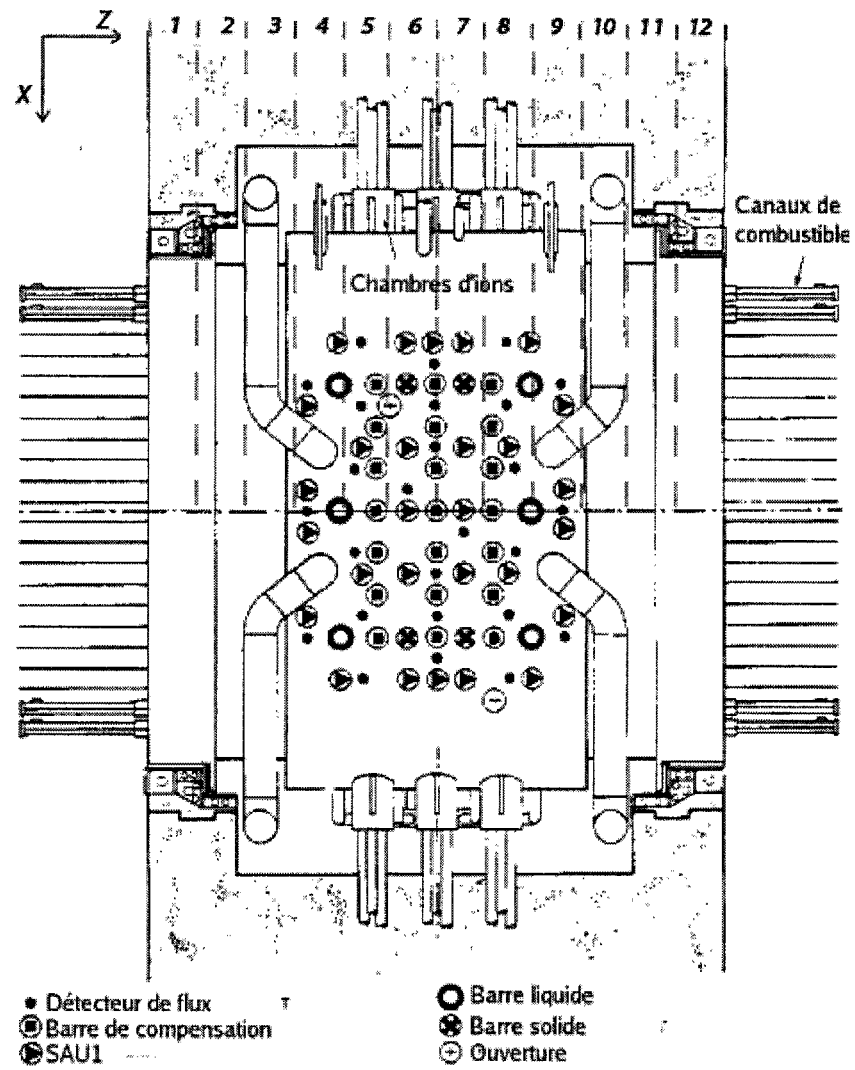


Figure 4.1 Vue aérienne d'un réacteur CANDU-6

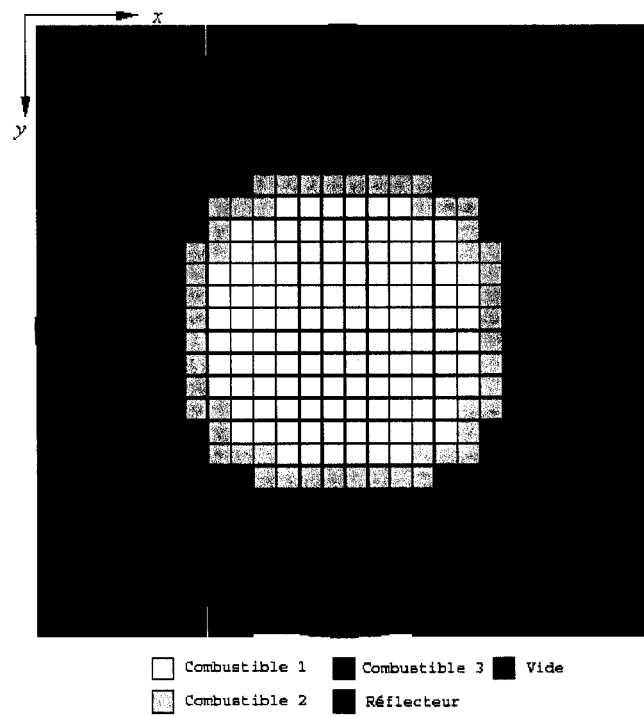


Figure 4.2 Distribution des différentes zones de combustible utilisées dans le cadre des simulations réacteur (coupe dans le plan axial)

4.2 Les flux de surface homogènes et les facteurs de discontinuité d'assemblage

À la section 2.2.4 il a été démontré comment on prévoyait calculer les flux de surface homogènes dans le cadre de la théorie de la diffusion en différences finies centrées à partir des flux hétérogènes de volume. Cette méthode exige la connaissance de la valeur propre homogène $\hat{k}_{eff}$ et par conséquent le flux de surface homogène doit être calculé à l'intérieur du processus itératif qui sert à résoudre l'équation de diffusion pour le flux homogène de volume. Ceci peut donc augmenter le nombre de calculs nécessaires à la résolution du problème et pourrait même, à la limite, engendrer des problèmes de convergence sur la solution car cela peut impliquer que la matrice système ne conserve pas un rayon spectral inférieur à 1 à chaque itération tout comme dans le cas d'un problème non linéaire.

Afin de contourner cette difficulté, on a procédé à une approximation et on s'est limité à cette dernière dans le cadre de ce projet de maîtrise. Cette approximation consiste à utiliser directement le flux de volume hétérogène comme flux de surface homogène. Dans le cadre de cette approximation, chacune des six surfaces d'un volume donné aura le même flux de surface homogène. Les facteurs de discontinuité seront donc donnés par les expressions suivantes pour la région homogène ijk .

$$\begin{aligned} f_{x,ijk}^{-,g} &= \frac{\phi^g(x_i)_{ijk}}{\phi_{ijk}^g} ; & f_{x,ijk}^{+,g} &= \frac{\phi^g(x_{i+1})_{ijk}}{\phi_{ijk}^g} \\ f_{y,ijk}^{-,g} &= \frac{\phi^g(y_j)_{ijk}}{\phi_{ijk}^g} ; & f_{y,ijk}^{+,g} &= \frac{\phi^g(y_{j+1})_{ijk}}{\phi_{ijk}^g} \\ f_{z,ijk}^{-,g} &= \frac{\phi^g(z_k)_{ijk}}{\phi_{ijk}^g} ; & f_{z,ijk}^{+,g} &= \frac{\phi^g(z_{k+1})_{ijk}}{\phi_{ijk}^g} \end{aligned} \quad (4.1)$$

où ϕ_{ijk}^g est le flux de volume hétérogène pour la cellule ijk et $\phi^g(u_l)_{lmn}$ sont les flux hétérogènes de surface. Les facteurs (4.1) sont appelés facteurs de discontinuité d'assemblage ou ADF («Assembly Discontinuity Factors»). Rappelons que la méthode pour

le calcul des flux de surface homogènes présentée à la section 2.2.4 est équivalente à l'approximation des ADF dans la limite où les facteurs $(h_u^l)^2 \left[\hat{D} \right]_{lmn}^{-1} \left[\hat{\Sigma}'_{\hat{k}_{eff}} \right]_{lmn} \rightarrow [0]$.

4.3 Analyse des résultats

Cette section présente l'ensemble des simulations effectuées afin de tester l'implantation de la théorie d'équivalence à l'intérieur du code réacteur DONJON-NDF [IGE-208, 2000] dans le cadre d'une théorie de la diffusion en différences finies centrées. Nous allons donc essentiellement comparer les résultats obtenus à partir de l'équation (2.105) et ceux obtenus à partir de l'équation (2.119).

Dans la première simulation le réacteur comporte le réflecteur mais aucun mécanisme de contrôle. Cette simulation avait pour but de bien mettre en évidence l'effet du réflecteur dans les calculs. Pour la deuxième simulation on a rajouté la barre de compensation #11 (BC#11) qui est située complètement au centre du réacteur. Cette simulation avait pour but de montrer l'effet causé par une seule barre de compensation. La troisième simulation consistait à vérifier l'effet causé par la présence d'un contrôleur liquide. De ce fait on y retrouve que le contrôleur liquide #4 (LZC#4) complètement rempli. La quatrième et dernière simulation comprenait l'ensemble des BC complètement insérées en plus des LZC complètement remplis. Cette dernière simulation représentant la configuration la plus hétérogène que l'on pouvait obtenir. Elle permettra de démontrer que les facteurs de discontinuité sont bien implantés dans le code DONJON-NDF, mais nous permettra aussi de tirer des conclusions sommaires quant à la pertinence de l'utilisation de la théorie d'équivalence pour les calculs de type CANDU-6 en fonctionnement normal.

Mentionnons que toutes les analyses sur le flux ont été effectuées uniquement sur le groupe thermique. Le groupe rapide se comporte essentiellement comme le groupe thermique dans sa forme et varie seulement sur l'amplitude n'apportant ainsi aucune information supplémentaire qui pourrait nous intéresser dans le cadre de ces analyses.

4.3.1 Effet du réflecteur

La première simulation représente un coeur de type CANDU-6 ne possédant aucun mécanisme de contrôle et ayant seulement un réflecteur d'eau lourde entourant sa surface radiale. Cette situation est loin d'être réaliste mais nous permet de voir l'effet que peut avoir le réflecteur sur les calculs avec facteurs de discontinuité.

Comme il a été mentionné précédemment, le réacteur a été divisé en 12 parties identiques selon l'axe des z ce qui nous donne 12 orientés selon l'axe z (voir Figure 4.1). Ces plans sont numérotés en ordre croissant de telle sorte que les plans #6 et #7 sont situés en plein centre du réacteur. Par la symétrie du problème les plans #6 et #7 présenteront des résultats similaires. De ce fait nous nous limiterons seulement à l'analyse des résultats obtenus dans le plan #6, soit un plan situé complètement au centre.

Une première étape consiste à étudier la distribution de l'écart entre facteurs de discontinuité adjacents. En effet, comme il a été mentionné à la section 2.3.3, si $f_{u,lmn}^{-,g} = f_{u,l-1mn}^{+,g}$ alors les termes de couplage, dans l'équation de diffusion modifiée (2.119), deviennent identiques aux termes de couplage de l'équation de diffusion standard (2.105) et les facteurs de discontinuité n'ont plus aucun effet. Pour réaliser l'étude nous avons appliqué l'équation suivante

$$\frac{|f_{x,ijk}^{-,g} - f_{x,i-1jk}^{+,g}|}{f_{x,ijk}^{-,g}} \times 100\% \quad (4.2)$$

sur l'ensemble du plan et les résultats sont présentés sur la Figure 4.3 pour les directions X et Y . Comme on peut le constater, les résultats sont de 0% sur l'ensemble des deux plans à l'exception de l'interface coeur-réflecteur où les écarts atteignent une valeur de 7.44%. Ceci s'explique par le fait que la seule hétérogénéité est créée par la présence du réflecteur. Nous avons donc des résultats qui se comportent exactement comme nous le supposions et cela confirme que les facteurs de discontinuité sont bien implantés au

niveau du réflecteur. On s'attend de ce fait à ce que les écarts dans les distributions de flux et de puissance soient majeures près du réflecteur.

Avant de passer à l'étude de la distribution des flux nous analyserons la constante de multiplication $\hat{k}_{eff}$ et la différence de réactivité entre les deux types de calcul en millik (mk). Pour ce faire nous avons utilisé l'équation suivante

$$\left(\rho[\text{AVEC ADF}] - \rho[\text{SANS ADF}] \right) \times 1000mk \quad (4.3)$$

avec

$$\rho = \frac{1}{\hat{k}_{eff}} - 1 \quad (4.4)$$

Les résultats sont présentés au Tableau 4.1. Comme on le constate, le calcul avec facteurs de discontinuité a un effet négligeable sur la réactivité dans ce cas-ci. On calcule une légère différence de seulement 0.066 mk. Afin d'avoir une meilleur idée de ce faible effet mentionnons que l'ensemble des BC et des LZC a un effet total en réactivité d'environ 20 mk.

Les distributions de flux sans et avec facteurs de discontinuité sont présentées sur la Figure 4.4. On y constate une légère augmentation du flux près des frontières causée par la présence du réflecteur. Dans tous les cas, nous avons des résultats tout à fait normaux. Les écarts entre les deux distributions sont présentés sur la Figure 4.5. Nous avons utilisé l'équation suivante pour obtenir ces résultats

$$\frac{|\hat{\phi}_{ijk}^g[\text{SANS ADF}] - \hat{\phi}_{ijk}^g[\text{AVEC ADF}]|}{\hat{\phi}_{ijk}^g[\text{SANS ADF}]} \times 100\% \quad (4.5)$$

On constate que les écarts majeurs sont situés au réflecteur comme nous nous y attendions et ces écart atteignent des valeurs de l'ordre de 8.00% ce qui n'est pas négligeable. Ceci s'explique par le fait que c'est à cet endroit que le gradient du flux, donc le courant neutronique, est le plus élevé.

Pour ce qui est des distributions de puissance sans et avec facteurs de discontinuité, elles sont présentées sur la Figure 4.6. Ces distributions sont similaires à celles du flux dans la forme. Encore une fois nous avons procédé à une analyse des écarts entre ces deux distributions en appliquant l'équation suivante

$$\frac{|\hat{P}_{ijk}[\text{SANS ADF}] - \hat{P}_{ijk}[\text{AVEC ADF}]|}{\hat{P}_{ijk}[\text{SANS ADF}]} \times 100\% \quad (4.6)$$

Les résultats sont présentés sur la Figure 4.7. On constate que l'écart majeur se retrouve à l'interface coeur-réfecteur tout comme pour le flux. Cet écart atteint une amplitude de 2.14% ce qui est beaucoup plus petit que l'écart sur le flux.

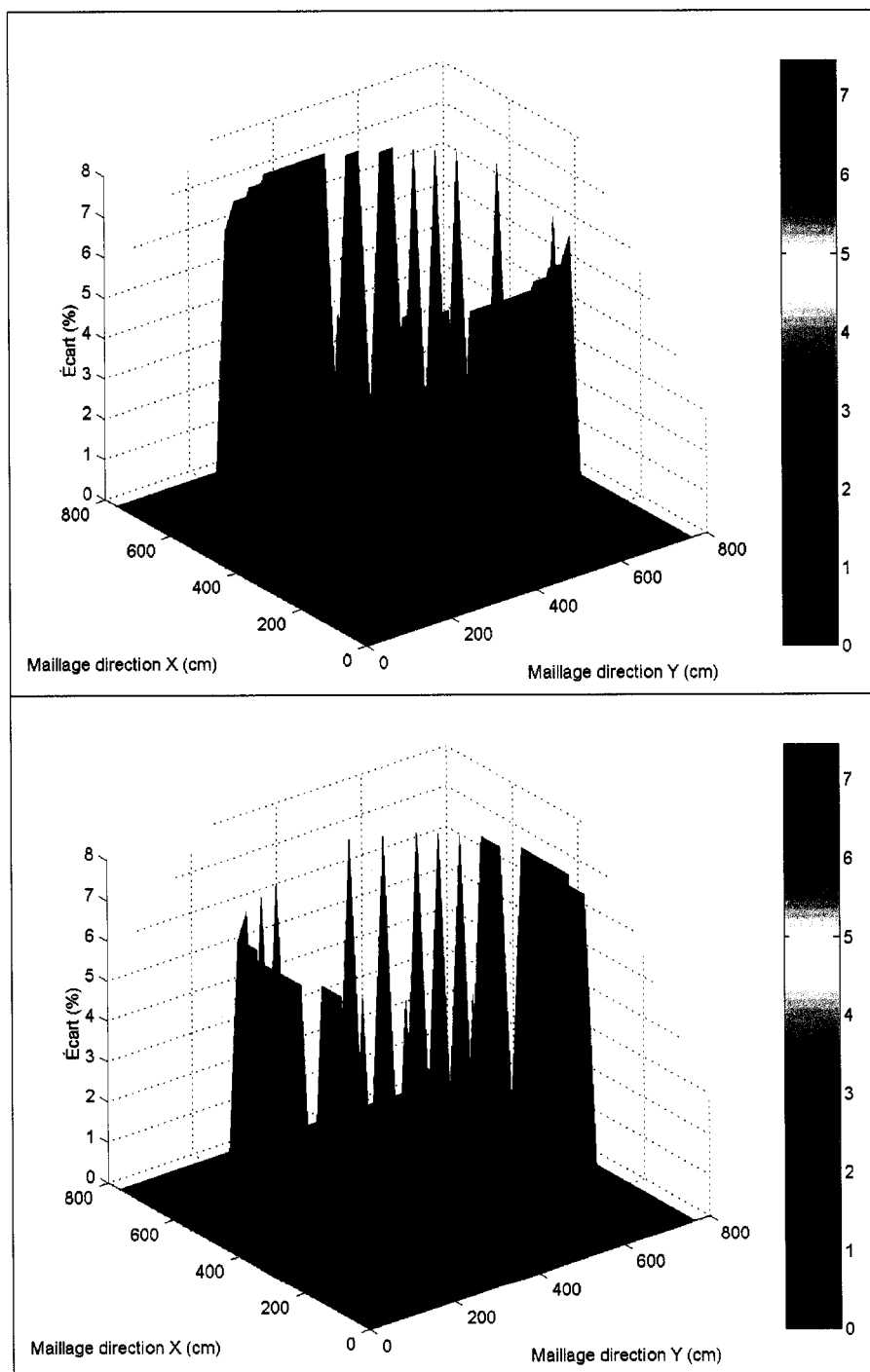


Figure 4.3 Écart entre facteurs de discontinuité adjacents dans les directions X (haut) et Y (bas) pour le groupe thermique (effet du réflecteur)

Tableau 4.1 Constante de multiplication (effet du réflecteur)

$\hat{k}_{eff}$ [SANS ADF]	$\hat{k}_{eff}$ [AVEC ADF]	$\Delta\rho$ (mk)
1.044314	1.044242	0.066

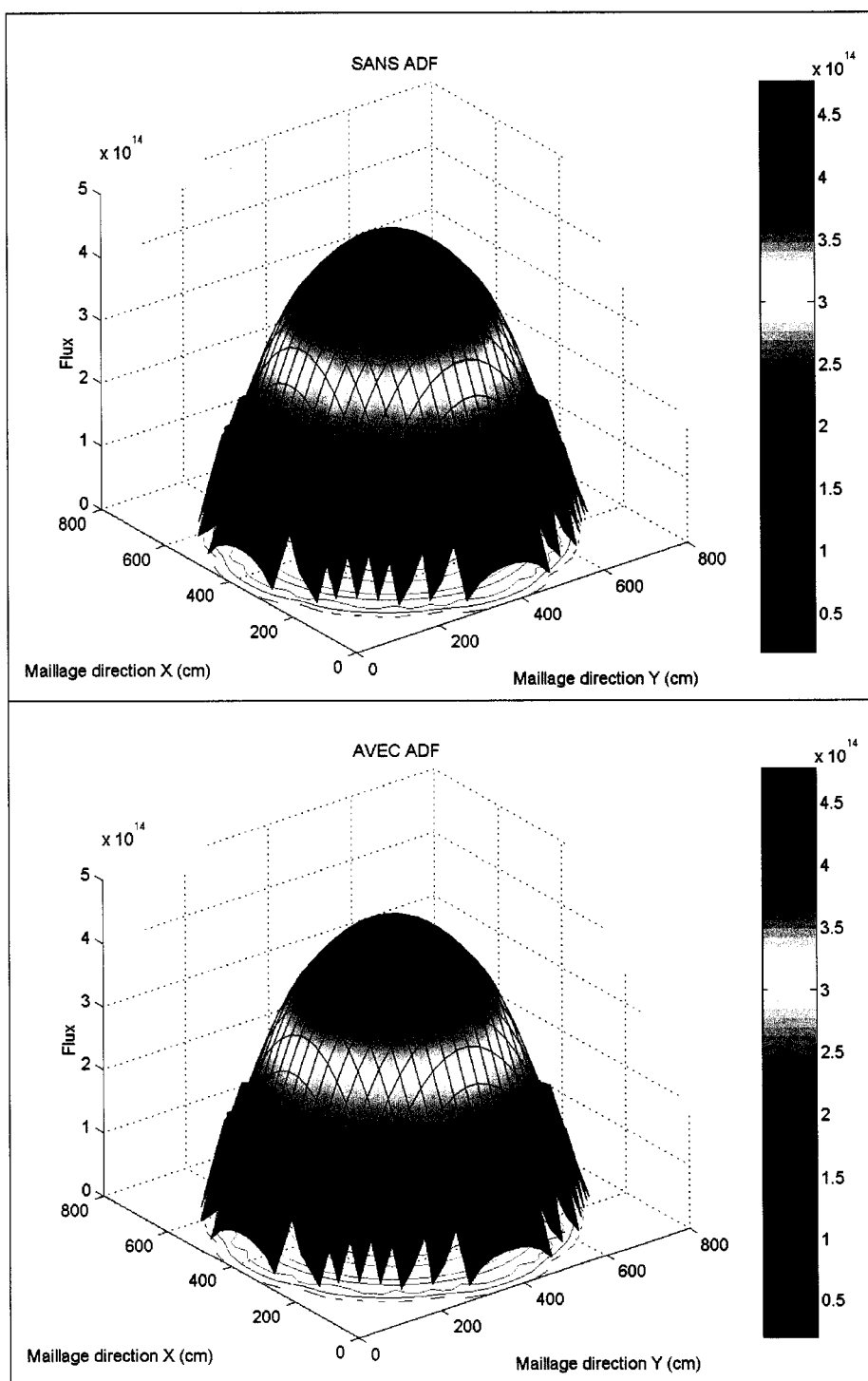


Figure 4.4 Distribution du flux thermique plan #6 (effet du réflecteur)

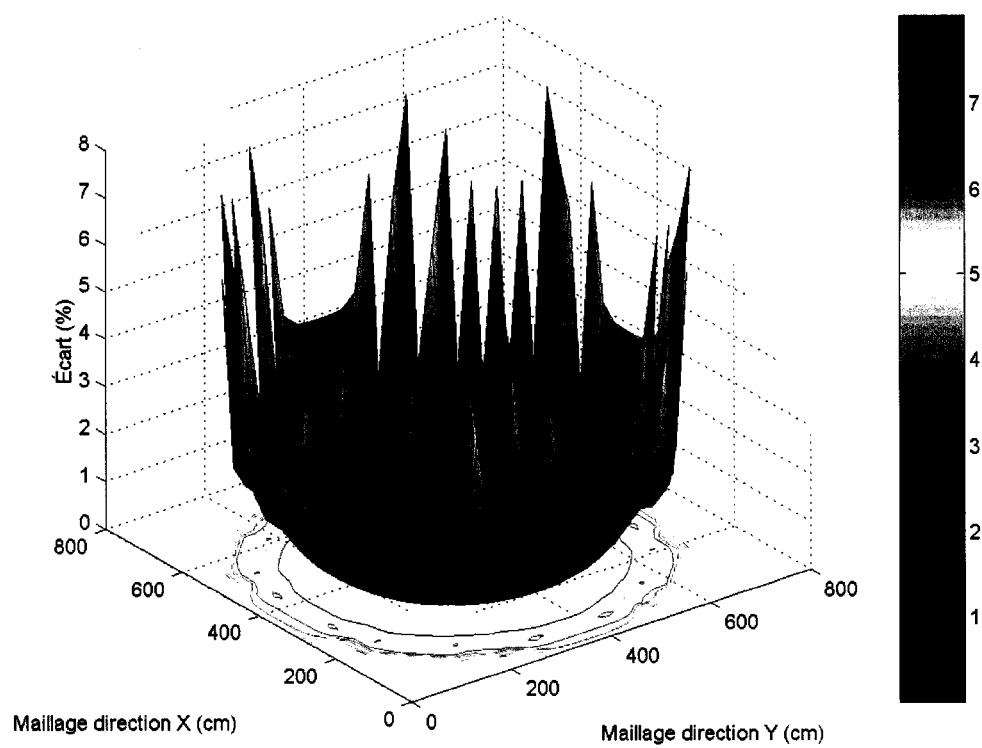


Figure 4.5 Écart entre les distributions du flux thermique plan #6 (effet du réflecteur)

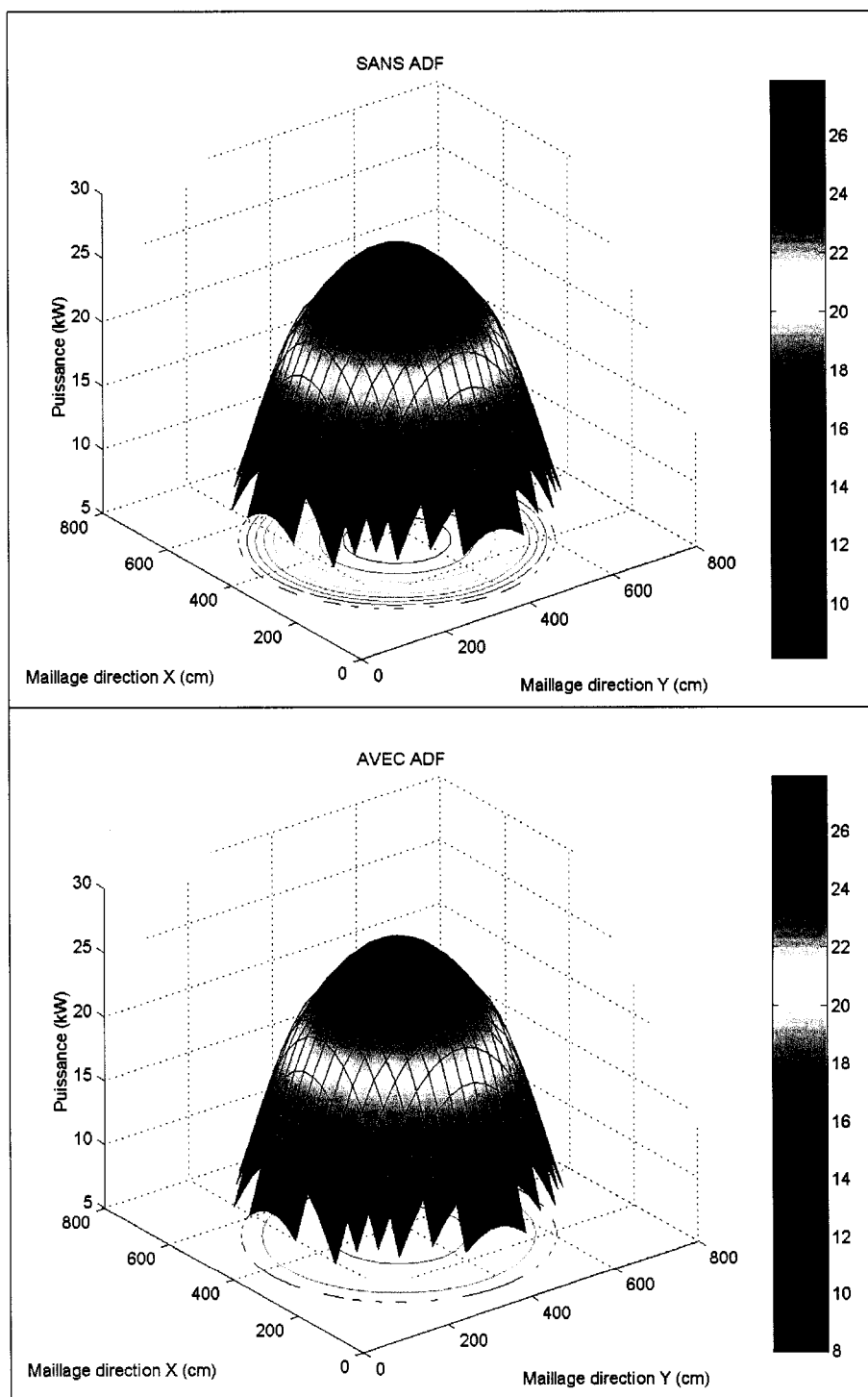


Figure 4.6 Distribution de puissance plan #6 (effet du réflecteur)

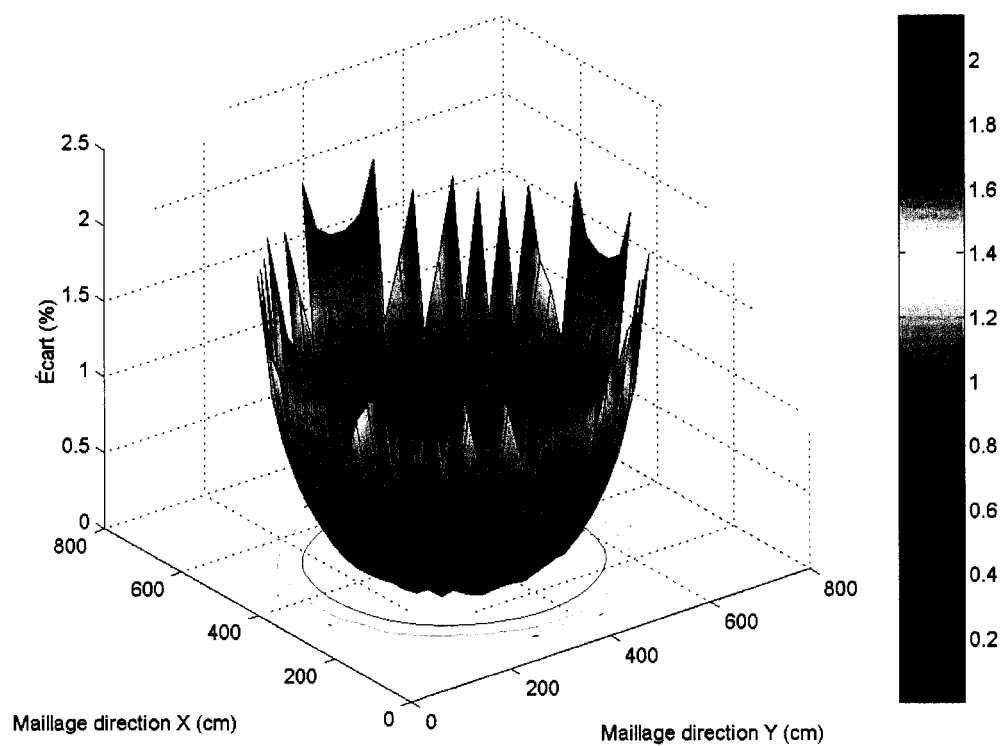


Figure 4.7 Écart entre les distributions de puissance plan #6 (effet du réflecteur)

4.3.2 Barre de compensation #11

L'objectif de cette simulation était de voir l'effet sur les calculs avec facteurs de discontinuité que peut engendrer la présence d'une barre de compensation. Pour cela nous avons utilisé un coeur de type CANDU-6 avec réflecteur et nous y avons ajouté la barre de compensation #11 complètement insérée. Cette barre est située au centre du réacteur (voir Figure 4.1) et aura des effets majeurs sur les plans #6 et #7. Par la symétrie du problème, ces deux plans présenteront des résultats identiques et nous limiterons notre étude au plan #6.

Nous commencerons par l'analyse de l'écart entre les facteurs de discontinuité adjacents pour les directions X et Y . Nous avons utilisé à nouveau l'équation (4.2) pour notre analyse et les résultats sont présentés sur la Figure 4.8 qui ne présente que le centre du plan #6 afin de masquer les écarts produit par le réflecteur qui sont de 7.44% tout comme pour la simulation précédente. On constate donc un écart au centre causé par la présence de la barre de compensation #11 et atteignant des valeurs de 0.91% dans la direction X . Cet écart est composé de trois zones distinctes conformément à la géométrie d'une BC qui présente plus de matériel absorbant au centre d'où l'écart plus élevé au centre. Dans la direction Y on enregistre de faible écart de 0.00165% aux deux interfaces où la géométrie de la barre varie. Il y a aussi des écarts de 0.7% au deux extrémités de la barre qui n'apparaissent pas sur la figure car ils masquaient l'effet d'interface. On perçoit aussi sur l'image du haut de la Figure 4.8 les écarts à l'interface des deux zones de combustion qui forment un cercle. Ces écarts sont faibles et atteignent la valeur de 0.07%. Tous ceci nous confirme que les facteurs de discontinuité sont bien implantés au niveau des barres de compensation et des zones de combustion.

La différence entre les réactivités obtenues lors des calculs sans et avec facteurs de discontinuité nous est donnée au Tableau 4.2. Nous avons encore une fois utilisé la relation (4.3). On voit que la différence est de 0.067 mk ce qui est plutôt négligeable.

Lorsque l'on regarde les distributions de flux présentées sur la Figure 4.9 on y voit clairement l'absorption des neutrons au centre du réacteur causée par la présence de la barre de compensation #11. Nous avons donc un comportement normal dans les deux cas. Maintenant, si nous regardons les écarts entre ces deux distributions qui apparaissent à la Figure 4.10 et que nous avons obtenus en utilisant l'équation (4.5), on constate que nous avons un écart majeur à l'endroit où est située la barre et on y voit la présence de trois zones distinctes le long de l'axe de la barre ce qui est en accord avec la géométrie d'une BC. L'amplitude de ces écarts peut atteindre la valeur de 0.33% aux extrémités ce qui est très faible. L'effet maximum est aux extrémité car à cet endroit on a l'effet combiné des facteurs de discontinuité dans les directions X et Y . Notons que la Figure 4.9 ne présente que les résultats obtenus au centre du plan afin que ces derniers ne soient pas obscurcis par les écarts de plus grande amplitude présents près du réflecteur qui sont à peu près identiques aux écarts analysés à la section 4.3.1 et qui n'apportent rien de nouveau dans le cadre de cette analyse.

Les distributions de puissance sont présentées à la Figure 4.11 et se comportent sensiblement comme les distributions de flux. Les écarts entre ces deux distributions sont présentées sur la Figure 4.11 et nous avons obtenu ces résultats en utilisant l'équation (4.6). Tout comme pour les écarts entre les flux, on s'est limité aux résultats au centre du plan. On perçoit encore la présence de la barre en trois zones distinctes et cette fois l'amplitude peut atteindre une valeur de 0.32% aux extrémités ce qui est pratiquement identique au cas des flux.

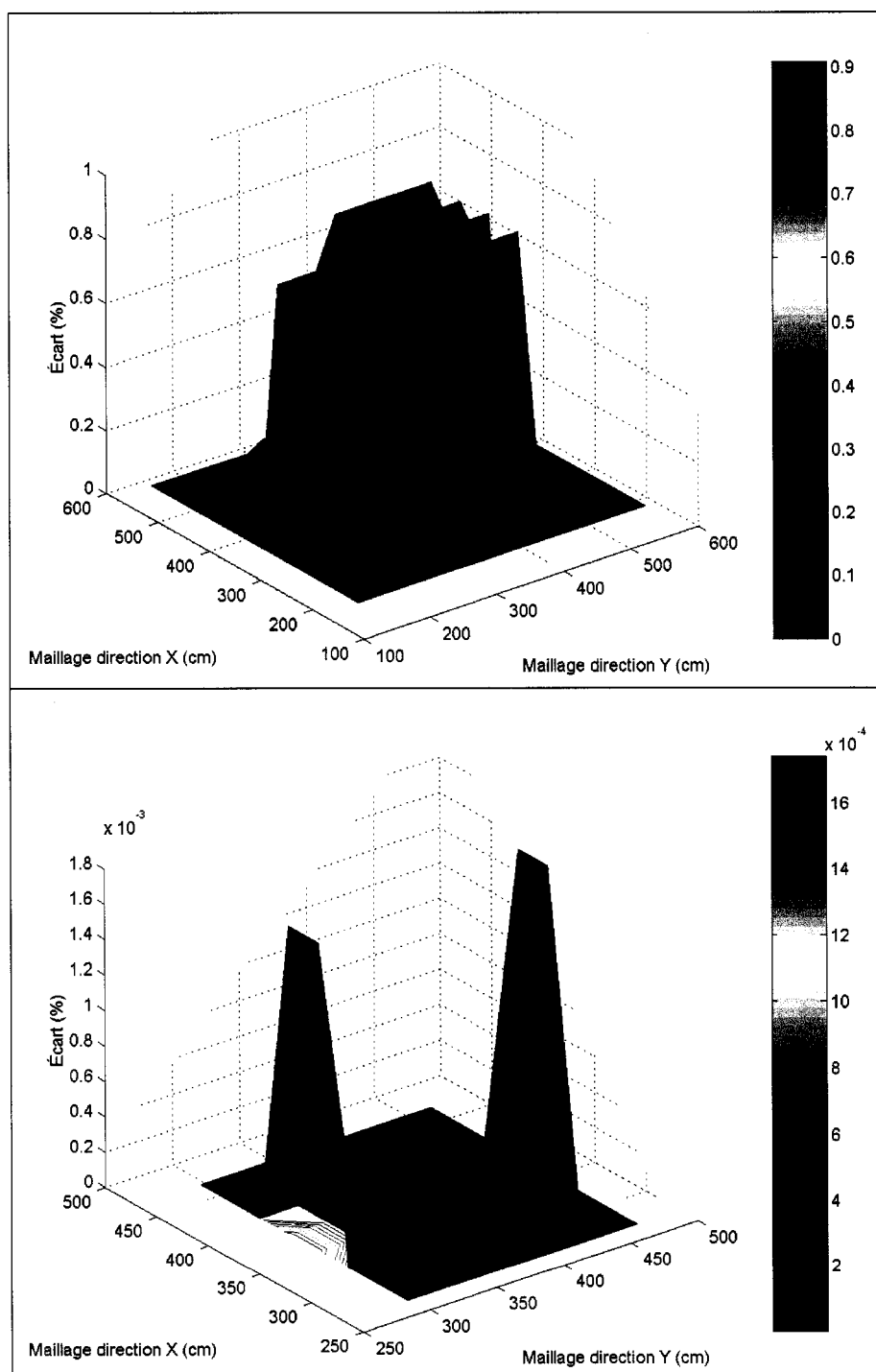


Figure 4.8 Écart entre facteurs de discontinuité adjacents dans les directions X (haut) et Y (bas) pour le groupe thermique (barre de compensation #11)

Tableau 4.2 Constante de multiplication (barre de compensation #11)

$\hat{k}_{eff}$ [SANS ADF]	$\hat{k}_{eff}$ [AVEC ADF]	$\Delta\rho$ (mk)
1.043296	1.043223	0.067

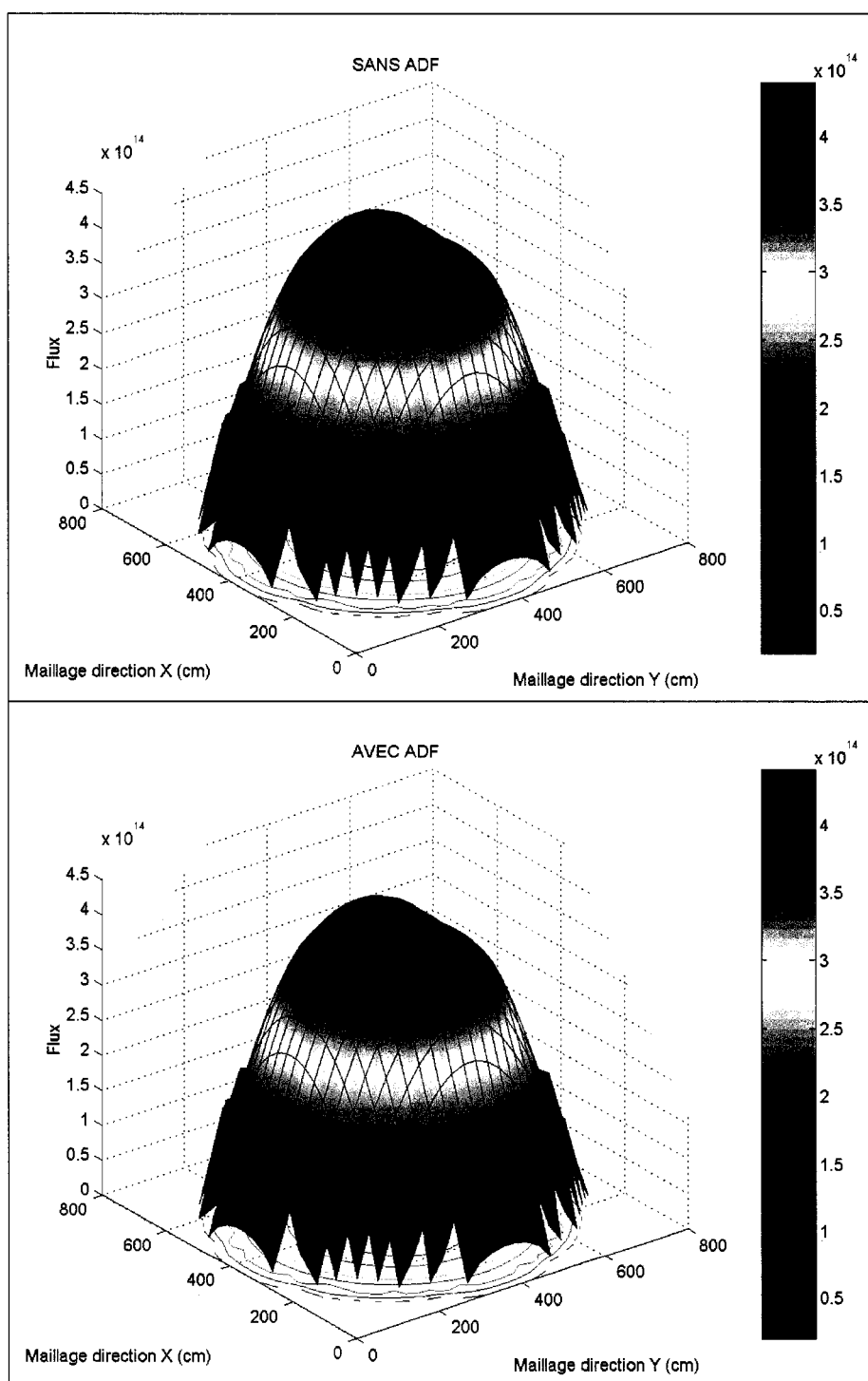


Figure 4.9 Distribution du flux thermique plan #6 (barre de compensation #11)

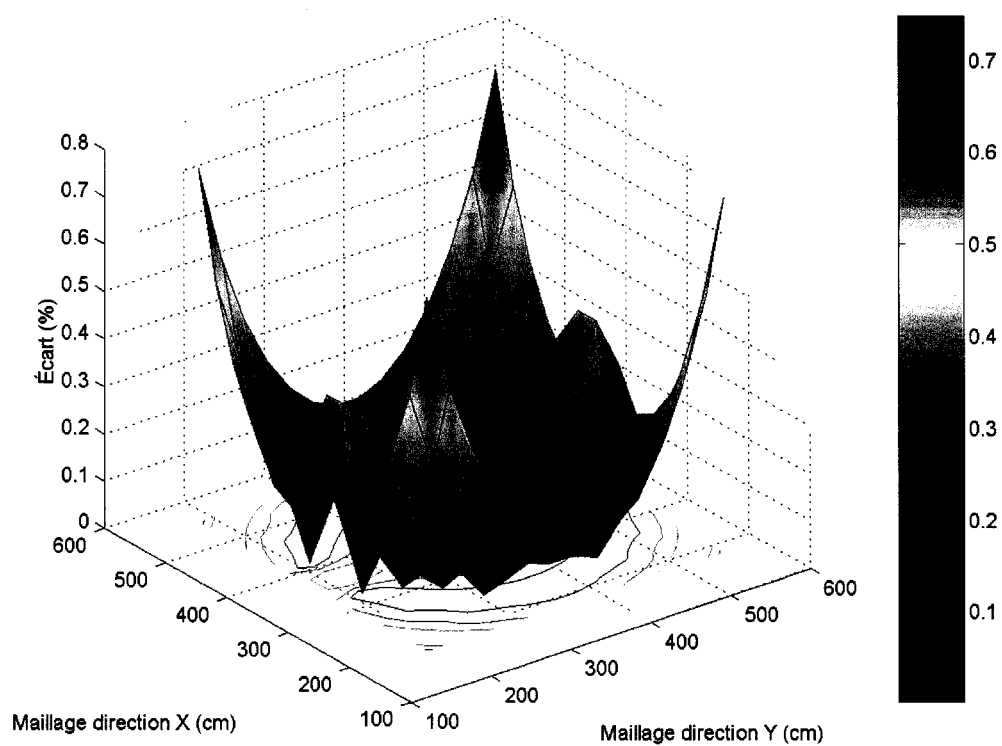


Figure 4.10 Écart entre les distributions du flux thermique plan #6 (barre de compensation #11)

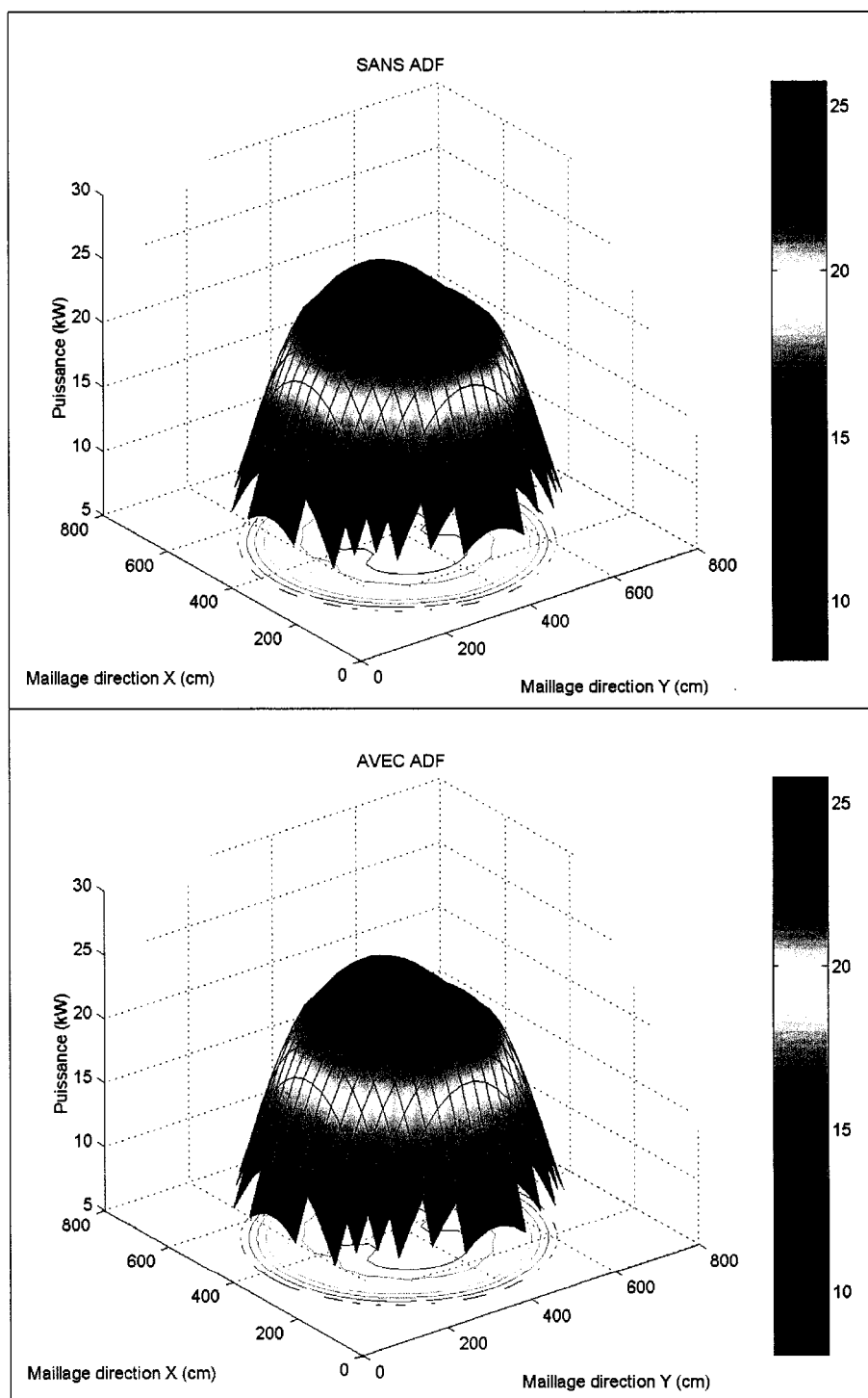


Figure 4.11 Distribution de puissance plan #6 (barre de compensation #11)

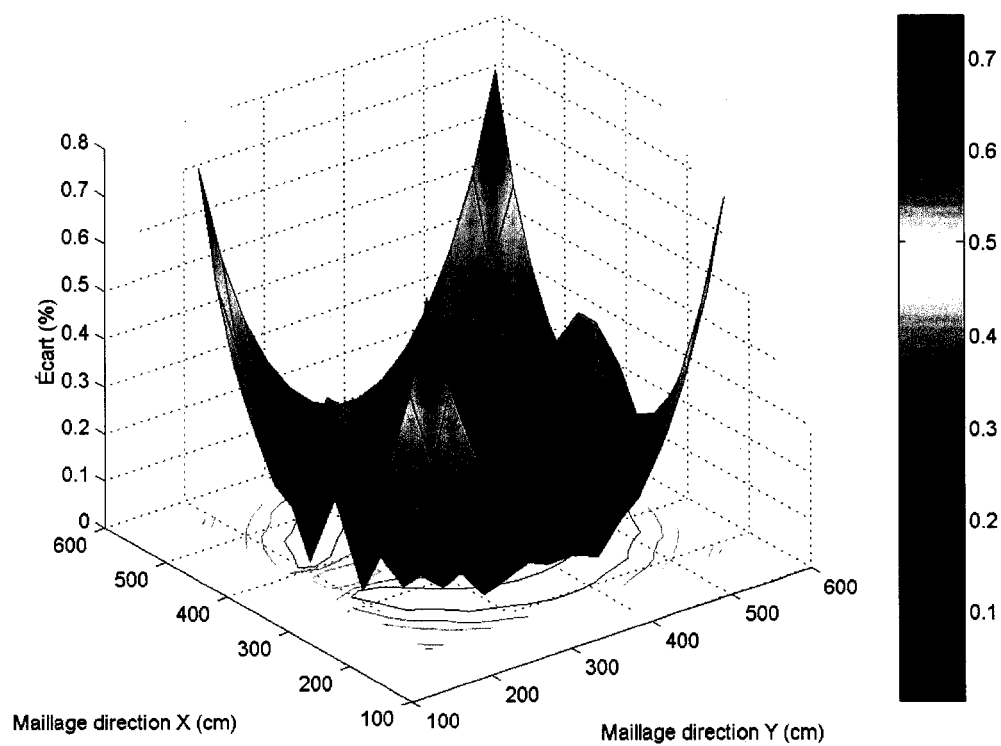


Figure 4.12 Écart entre les distributions de puissance plan #6 (barre de compensation #11)

4.3.3 Barre liquide #4

Lors de cette simulation nous avons voulu faire ressortir les effets causés par la présence d'un contrôleur liquide sur les calculs avec facteurs de discontinuité. Pour ce faire nous avons utilisé un réacteur de type CANDU-6 avec la barre de contrôle liquide #4 située au centre du réacteur un peu vers l'avant (voir Figure 4.1). Nous avons fait la simulation avec la barre complètement remplie. C'est particulièrement le plan #4 qui est perturbé par la présence de ce mécanisme de contrôle et nous limiterons notre étude à ce plan. L'analyse que nous avons faite est similaire à l'analyse faite lors de la simulation avec la barre de compensation #11 (voir section 4.3.2) et nous avons utilisé les relations (4.2) à (4.6) pour obtenir les différences relatives entre chacun des paramètres.

Pour ce qui est des écarts entre facteurs de discontinuité adjacents, on s'est limité encore une fois aux directions X et Y et les résultats sont présentés à la Figure 4.13 pour le centre du plan #4. Dans les deux directions on voit l'effet causé par les deux zones de combustion dont les écarts de 0.07% forment un cercle. Dans la direction X l'écart majeur suit l'axe du contrôleur liquide et atteint une valeur de 1.61%. Selon la direction Y on a des écarts seulement aux extrémités de la barre. Ces écarts atteignent la valeur de 0.155%. Encore une fois cela démontre que les facteurs de discontinuité semblent être bien implantés.

L'étude de la réactivité présentée au Tableau 4.3 nous montre une différence de 0.066 mk qui est encore une fois très faible.

Les distributions de flux sont présentées sur la Figure 4.14 et on y voit très bien la dépression au centre causée par la présence du contrôleur liquide comme on pouvait s'y attendre. Les écarts entre les deux distributions apparaissent à la Figure 4.15 où on s'est limité à la partie centrale du plan pour ne pas être gêné par l'effet du réflecteur qui n'apporte rien d'intéressant à cette analyse. On constate donc un écart suivant l'axe

de la barre qui peut atteindre des valeurs de 0.93% à une extrémité. Les distributions de puissance apparaissent sur la Figure 4.16 et se comportent sensiblement comme les distributions de flux. Les écarts entre les distributions de puissance sont présentées à la Figure 4.17 et seulement pour la partie centrale du plan toujours pour cacher l'effet au réflecteur. On constate que l'écart des distributions de puissance se comporte de façon similaire à l'écart des distributions flux et peut atteindre des valeurs de 0.95% à une extrémité. L'asymétrie que l'on constate sur l'écart de flux et de puissance au niveau du contrôleur liquide est probablement causée par l'interface entre les deux zones de combustion qui est située près de l'extrémité supérieur de la barre et passablement loin de son extrémité inférieure.

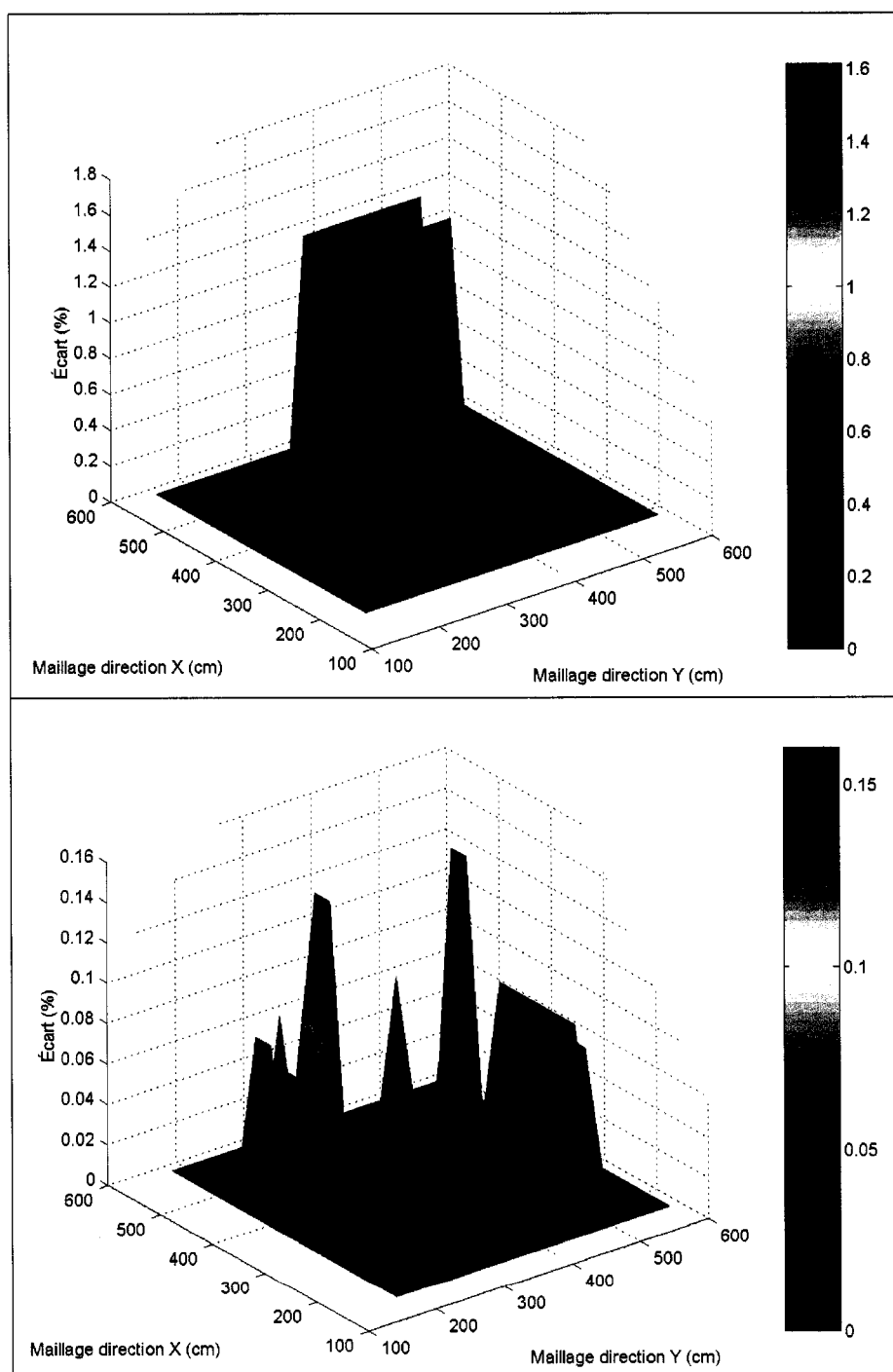


Figure 4.13 Écart entre facteurs de discontinuité adjacents dans les directions X (haut) et Y (bas) pour le groupe thermique (barre liquide #4)

Tableau 4.3 Constante de multiplication (barre liquide #4)

$\hat{k}_{eff}[\text{SANS ADF}]$	$\hat{k}_{eff}[\text{AVEC ADF}]$	$\Delta\rho$ (mk)
1.043540	1.043468	0.066

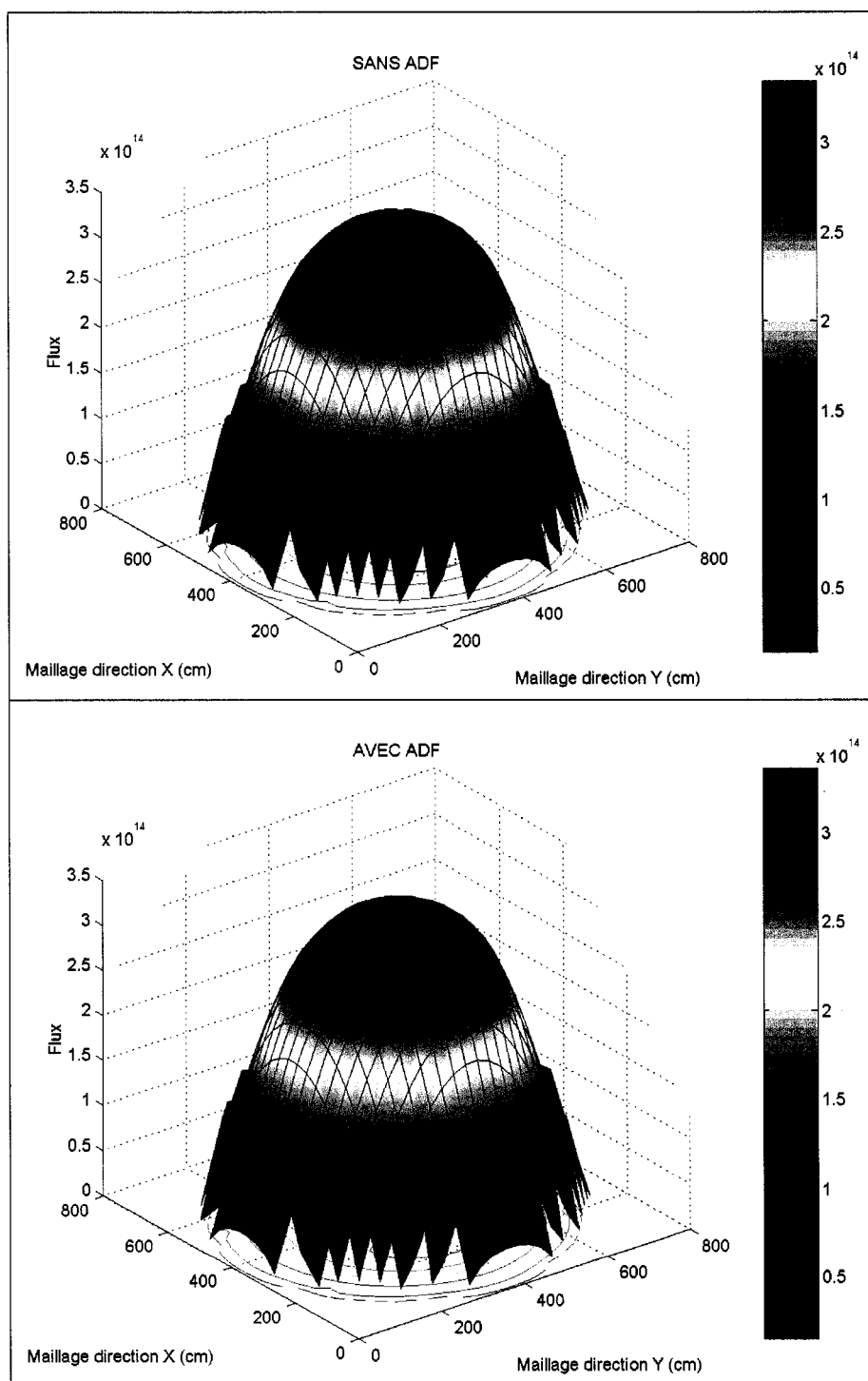


Figure 4.14 Distribution du flux thermique plan #4 (barre liquide #4)

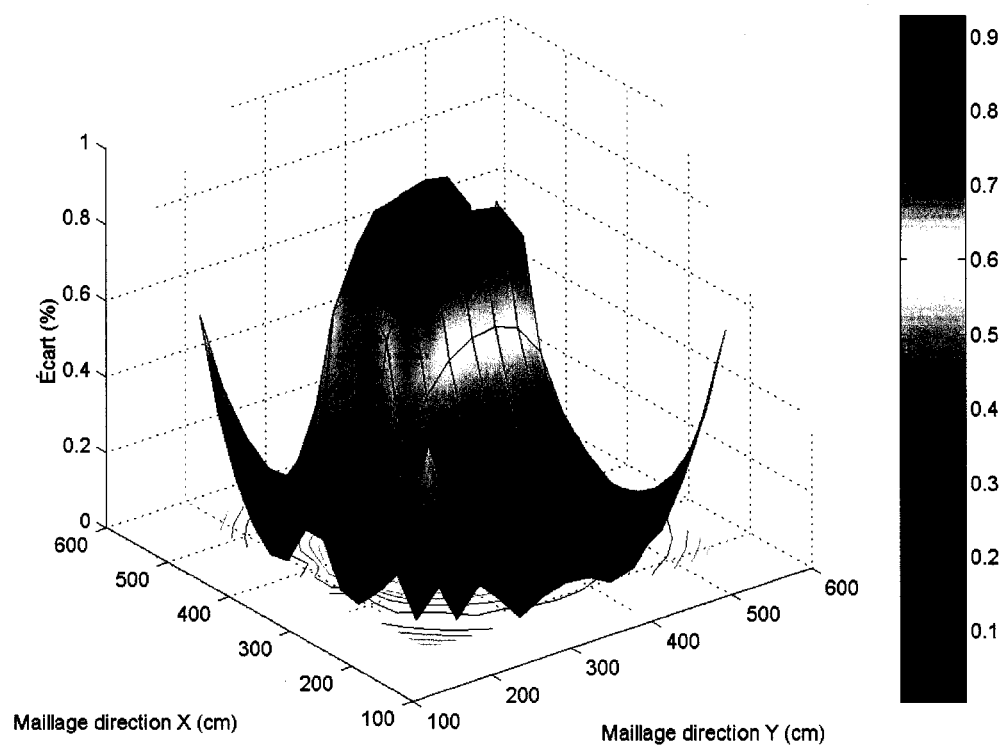


Figure 4.15 Écart entre les distributions du flux thermique plan #4 (barre liquide #4)

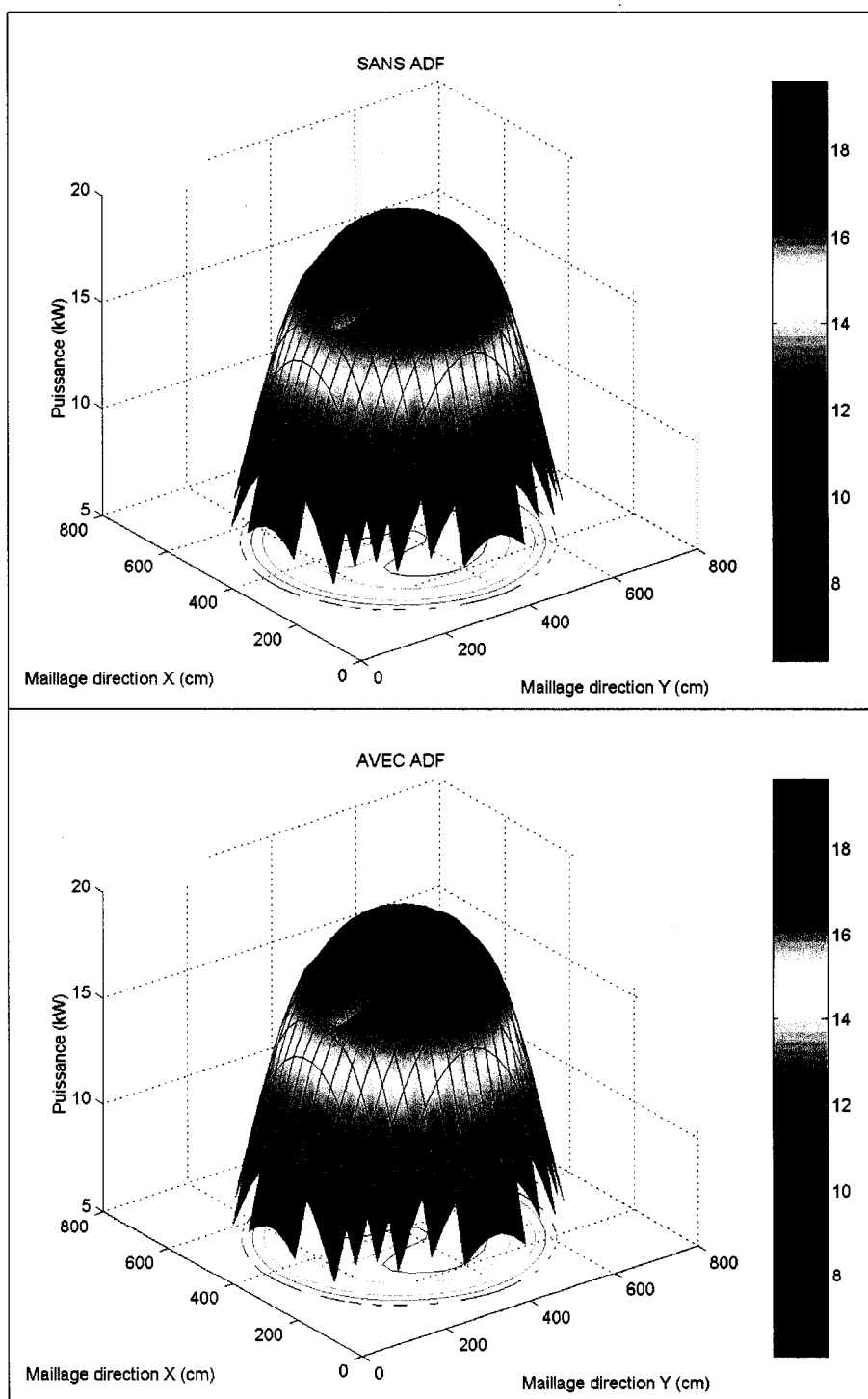


Figure 4.16 Distribution de puissance plan #4 (barre liquide #4)

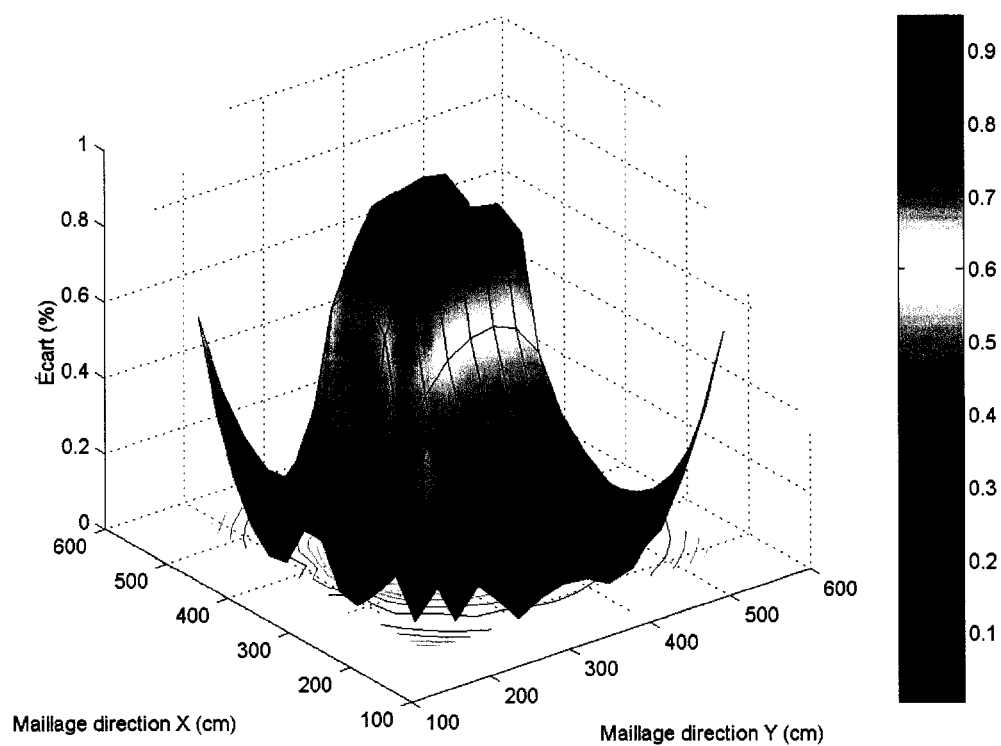


Figure 4.17 Écart entre les distributions de puissance plan #4 (barre liquide #4)

4.3.4 Ensemble des barres de compensation et contrôleurs liquides

Pour la dernière simulation, nous avons voulu créer la situation la plus hétérogène possible. Pour ce faire nous avons utilisé un réacteur de type CANDU-6 avec réflecteur et nous y avons inséré complètement l'ensemble des 21 barres de compensations. Nous avons de plus placé l'ensemble des 14 contrôleurs liquides complètement remplis. Dans ce cas-ci, les effets majeurs sont situés au niveau des plans #4, #6, #7 et #9. Pour des raisons de symétrie nous nous limiterons à l'étude des plans #4 et #6. Tout comme précédemment nous utiliserons les équations (4.2) à (4.6) pour l'analyse de nos écarts sur chaque paramètre.

Nous commencerons encore une fois par l'étude des écarts entre les facteurs de discontinuité adjacents. Les résultats pour les deux plans sont présentés à la Figure 4.18 et seulement pour la direction X (la direction Y ne montrant des écarts qu'aux extrémités des différents contrôleurs). Pour les résultats sur le plan #4 on voit très bien l'effet causé par la présence du réflecteur avec des écarts atteignant 8.40%. On voit aussi les effets causés par la présence des contrôleurs liquides #1 à #7 qui sont tous situés à l'intérieur du plan #4. Les écarts causés par les contrôleurs liquides peuvent atteindre la valeur de 1.76%. Pour ce qui est du plan #6 on voit l'effet causé par le réflecteur atteignant la valeur de 7.44%. On y voit aussi l'effet des 7 barres de compensation #8 à #14 qui sont situées toutes les 7 au centre du réacteur par rapport à son axe. Les écarts causés par ces 7 barres peuvent atteindre la valeur de 1.26%.

Les résultats pour la constante de multiplication apparaissent au Tableau 4.4. On voit que la différence de réactivité entre les deux calculs est de 0.058 mk ce qui est toujours très faible. On peut fort probablement conclure à ce stade que les facteurs de discontinuité n'ont qu'un très faible effet sur le calcul de la constante de multiplication dans le cas d'un réacteur de type CANDU-6 à l'équilibre et en fonctionnement normal.

Maintenant, si nous passons à l'analyse des distributions de flux qui apparaissent à la Figure 4.19 pour le plan #4 et à la Figure 4.21 pour le plan #6, on y constate un comportement tout à fait normal avec une forte absorption du flux dans le plan #4 causée par la présence des barres liquides. On constate aussi dans le plan #4 l'effet d'applatissage du flux causé par la présence des barres de compensation ainsi que l'effet de débalancement haut-bas causé par la présence des barres liquides. Soulignons que ce débalancement aura pour effet de créer des écarts légèrement plus élevés dans le bas du réacteur car le courant neutronique y est légèrement supérieur. Pour ce qui est du plan #6 on y voit essentiellement l'effet d'applatissage du flux ainsi que le débalancement haut-bas. Encore une fois nous avons des résultats tout à fait normaux. Si nous regardons les écarts entre les distributions qui sont présentées sur la Figure 4.20 pour le plan #4 et sur la Figure 4.22 pour le plan #6 on voit bien que les écarts les plus importants apparaissent aux endroits où il y a des contrôleurs et ces écarts peuvent atteindre la valeur de 1.39% aux extrémités des LZC pour le plan #4 et la valeur de 0.77% aux extrémités des BC pour le plan #6. Notons qu'ici aussi on ne présente les écarts que pour le centre des plans afin de cacher l'effet du réflecteur.

Dans le cas des distributions de puissance les résultats sont présentés sur la Figure 4.23 pour le plan #4 et sur la Figure 4.25 pour le plan #6. Ici aussi les distributions de puissance se comportent essentiellement comme les distributions de flux. Les écarts entre distributions de puissance apparaissent sur la Figure 4.24 pour le plan #4 et sur la Figure 4.26 pour le plan #6. Les résultats sont concentrés sur la partie centrale des plans et tout comme pour les flux ces écarts sont majeurs là où il y a des mécanismes de contrôle. Ces écarts peuvent être de 1.42% aux extrémités des LZC dans le plan #4 et de 0.77% aux extrémités des BC dans le plan #6.

Rajoutons que la présence des mécanismes de contrôle a peu d'effet sur les écarts entre distributions de flux et de puissance à l'interface coeur-réflecteur. Toutefois, la puissance est plus affectée que le flux. L'effet majeur se situe au niveau des écarts de dis-

tributions de puissance dans le plan #1 qui passe de 4.04% (voir section 4.3.1) à 5.09% lorsque l'ensemble des mécanismes de contrôle sont présents et complètement insérés. Ce phénomène est lié à l'applatissage de flux causé par la présence des BC. Cet applatissage de flux a pour effet d'augmenter le courant neutronique aux extrémités du réacteur.

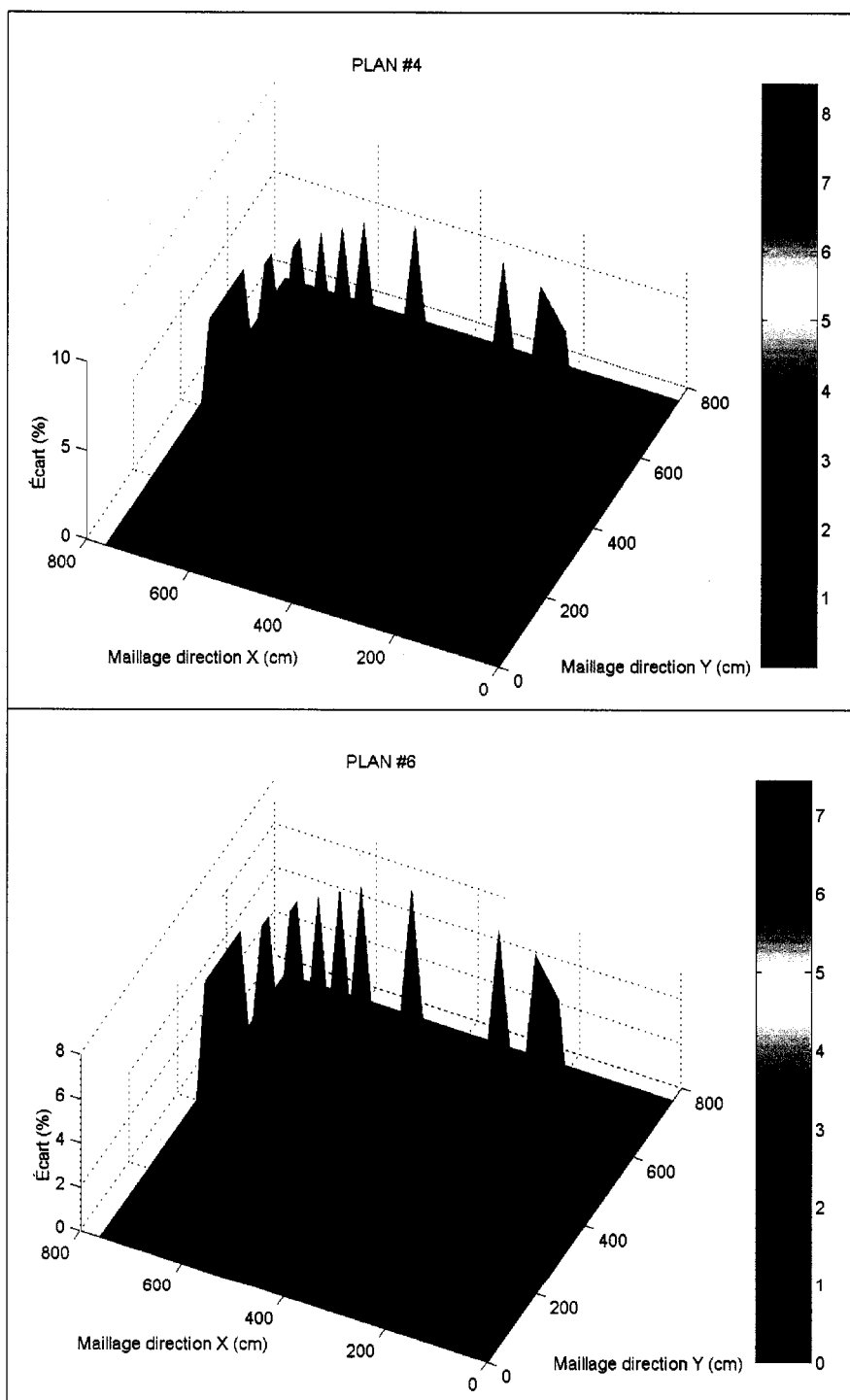


Figure 4.18 Écart entre facteurs de discontinuité adjacents dans la direction X pour le groupe thermique (tous les mécanismes de contrôle insérés)

Tableau 4.4 Constante de multiplication (tous les mécanismes de contrôle insérés)

$\hat{k}_{eff}$ [SANS ADF]	$\hat{k}_{eff}$ [AVEC ADF]	$\Delta\rho$ (mk)
1.022313	1.022252	0.058

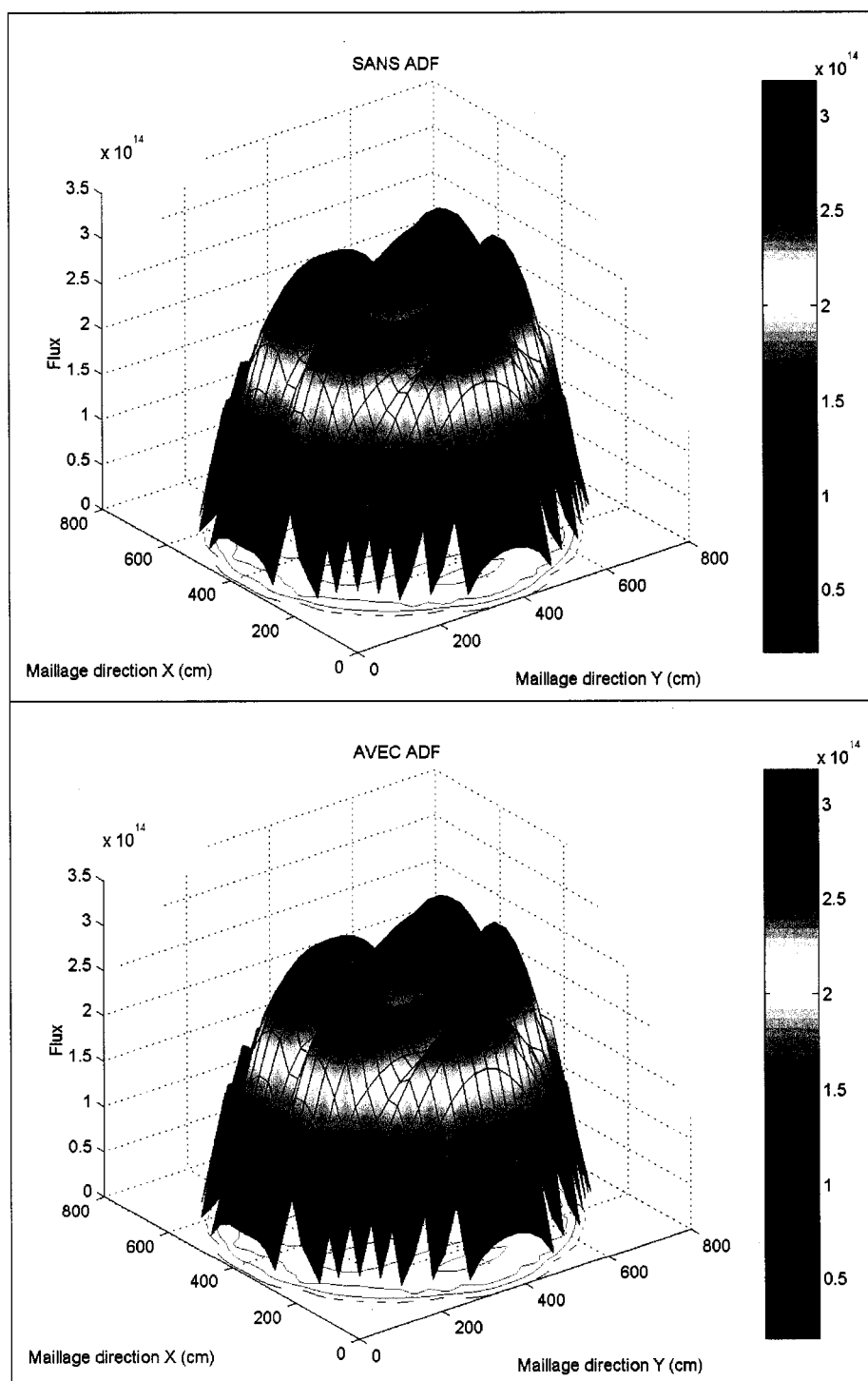


Figure 4.19 Distribution du flux thermique plan #4 (tous les mécanismes de contrôle insérés)

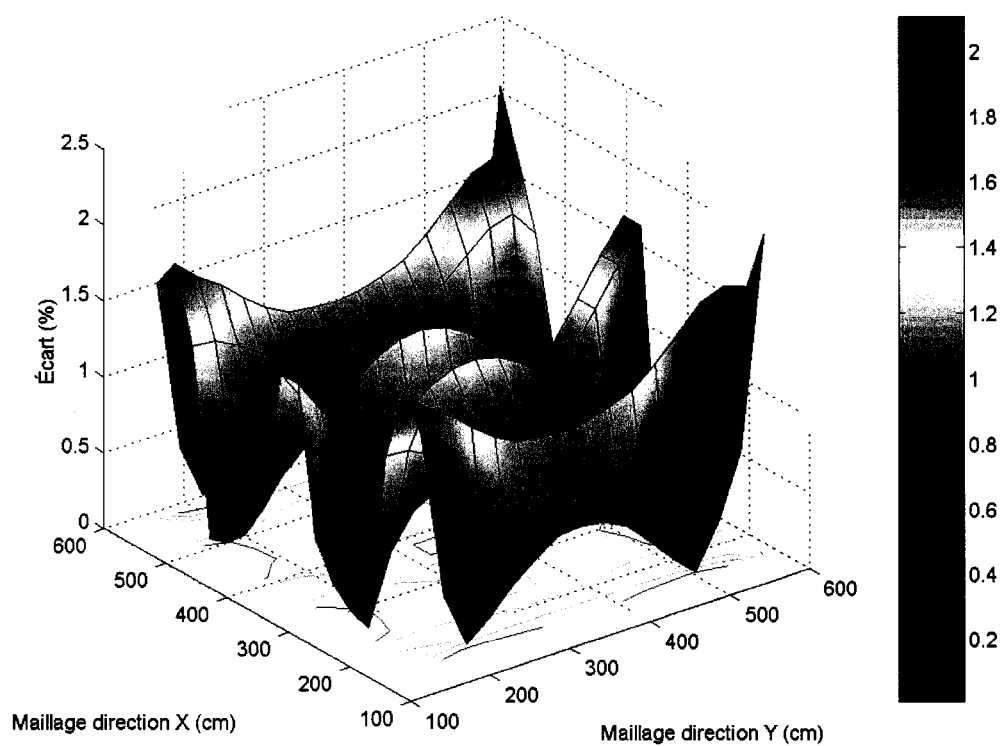


Figure 4.20 Écart entre les distributions du flux thermique plan #4 (tous les mécanismes de contrôle insérés)

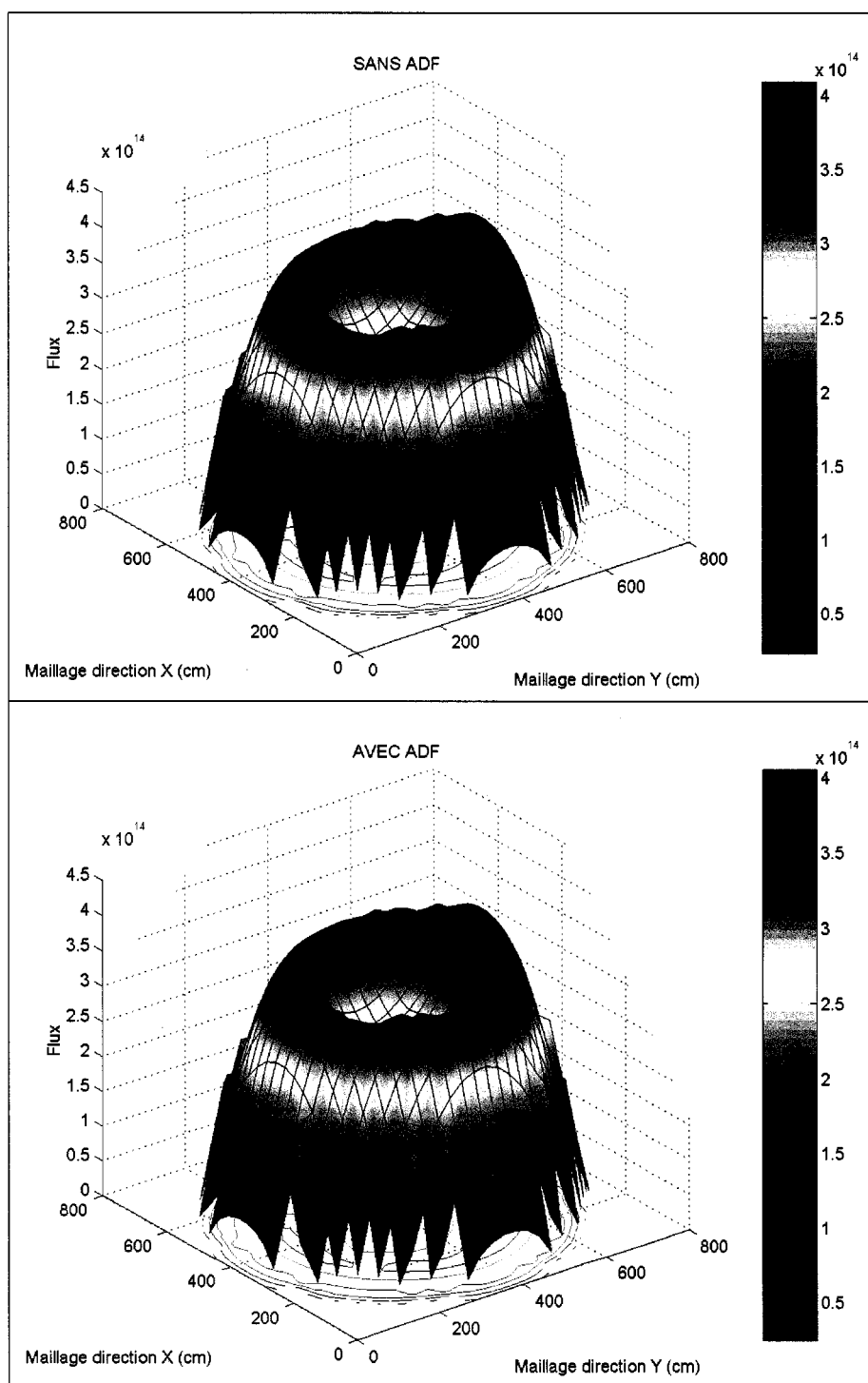


Figure 4.21 Distribution du flux thermique plan #6 (tous les mécanismes de contrôle insérés)

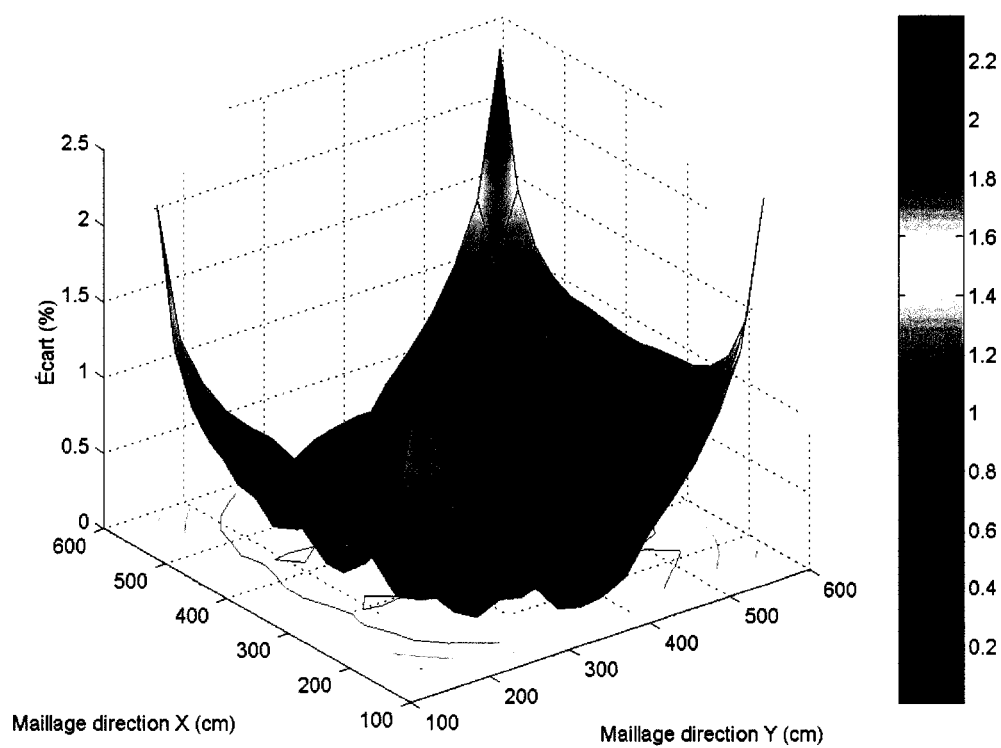


Figure 4.22 Écart entre les distributions du flux thermique plan #6 (tous les mécanismes de contrôle insérés)

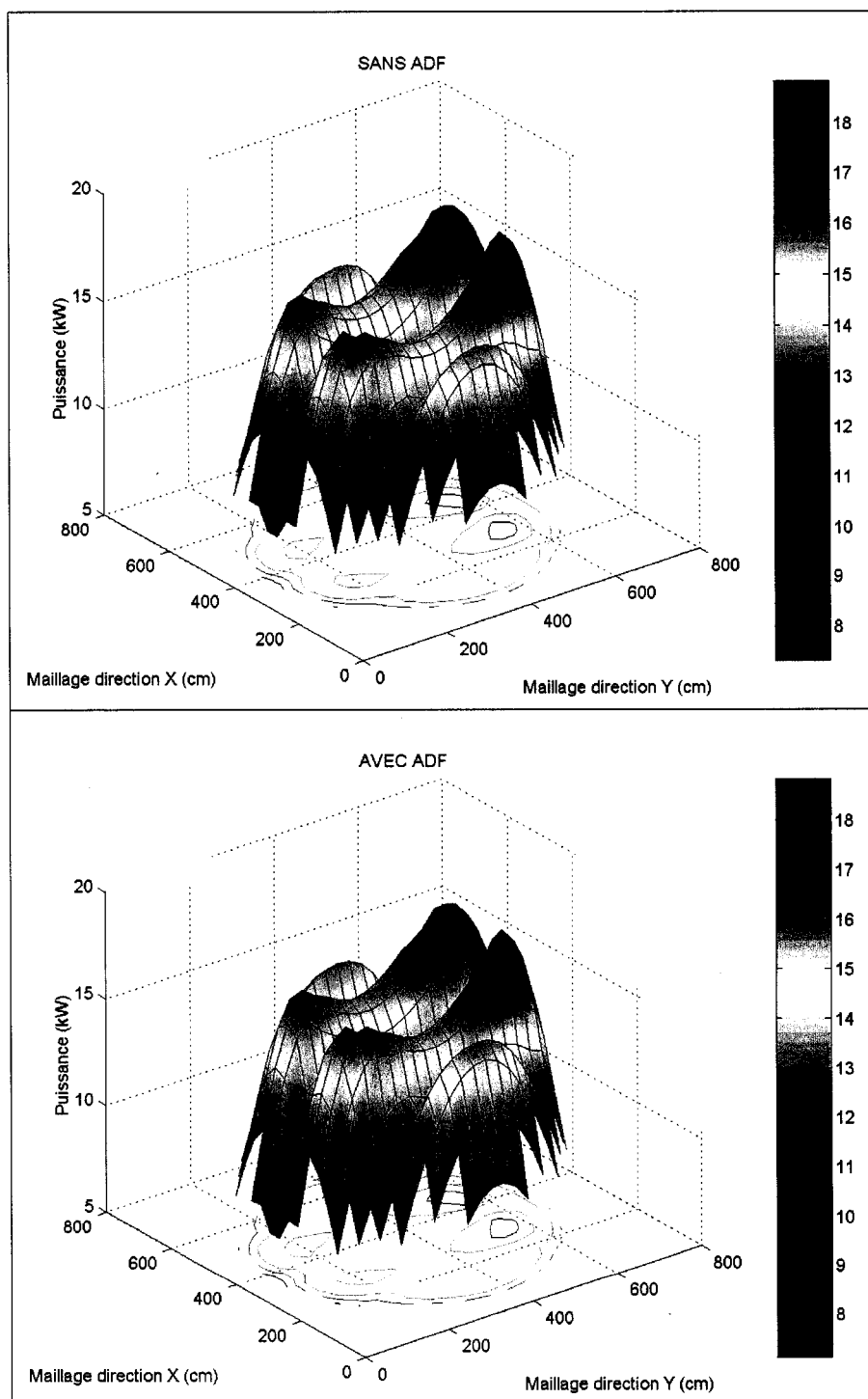


Figure 4.23 Distribution de puissance plan #4 (tous les mécanismes de contrôles insérés)

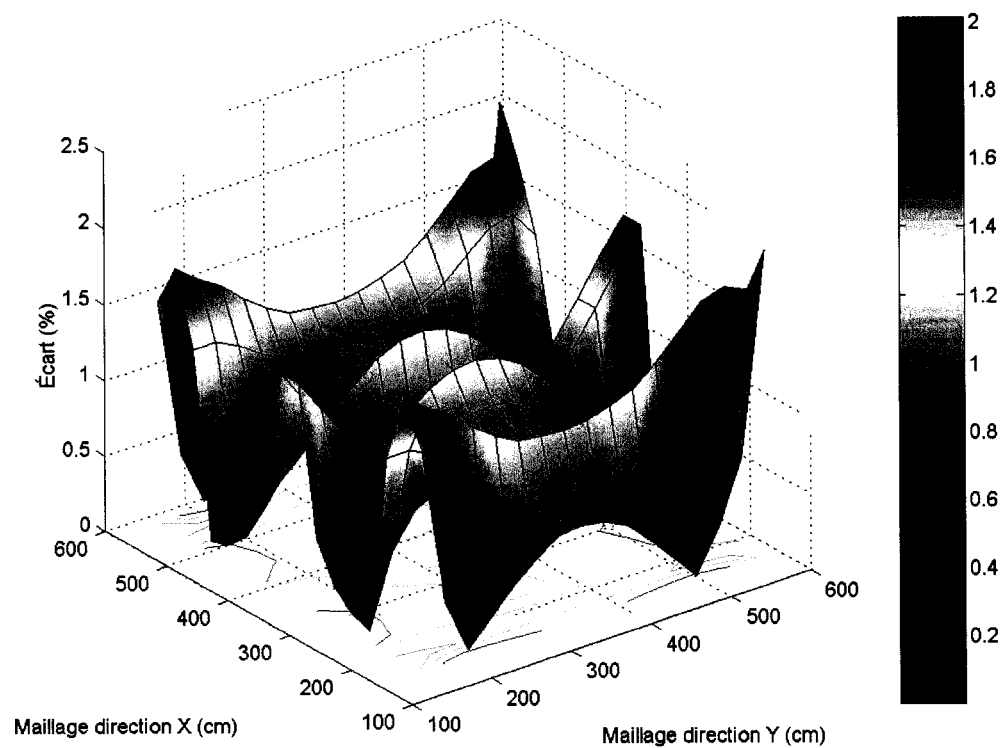


Figure 4.24 Écart entre les distributions de puissance plan #4 (tous les mécanismes de contrôle insérés)

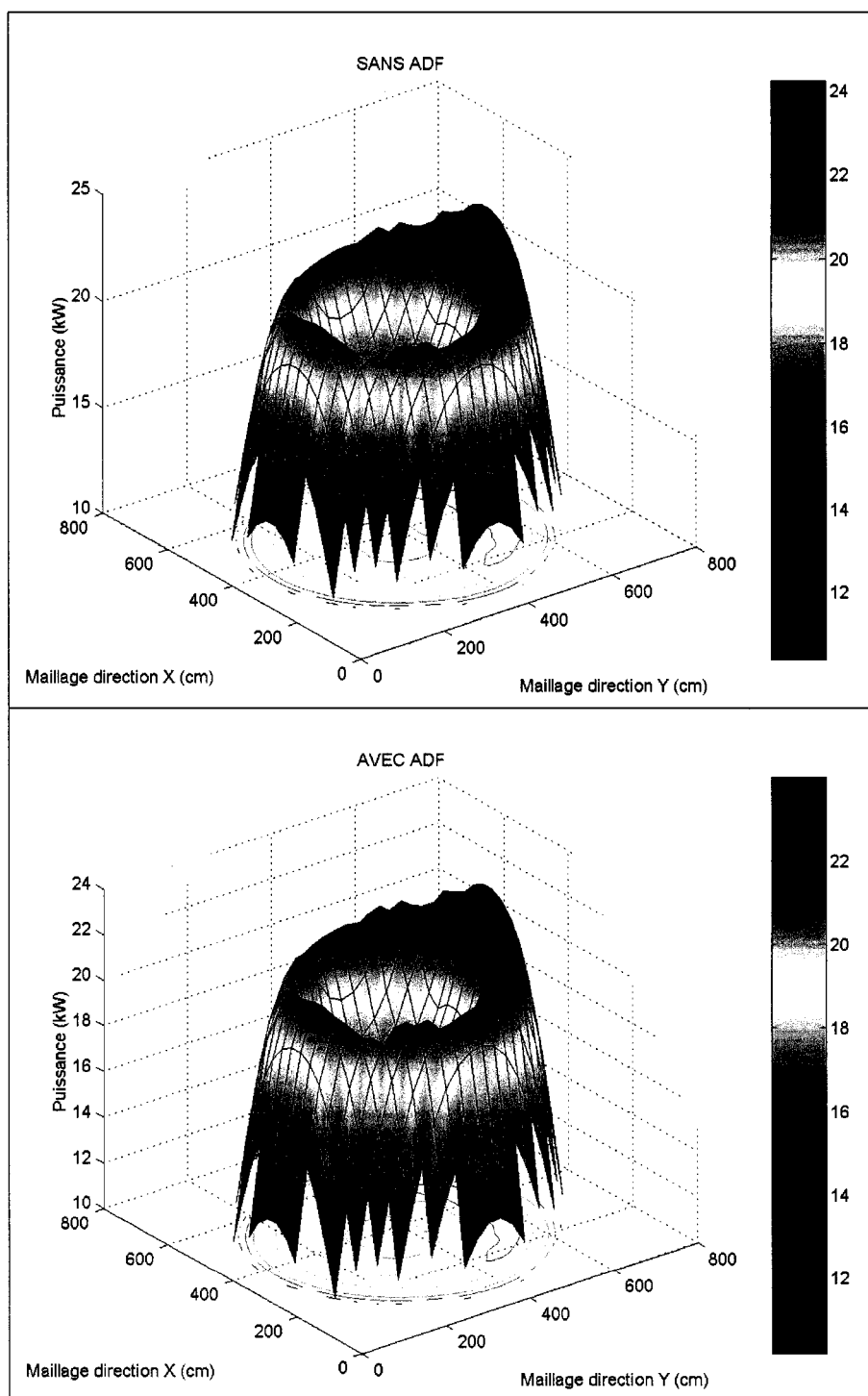


Figure 4.25 Distribution de puissance plan #6 (tous les mécanismes de contrôle insérés)

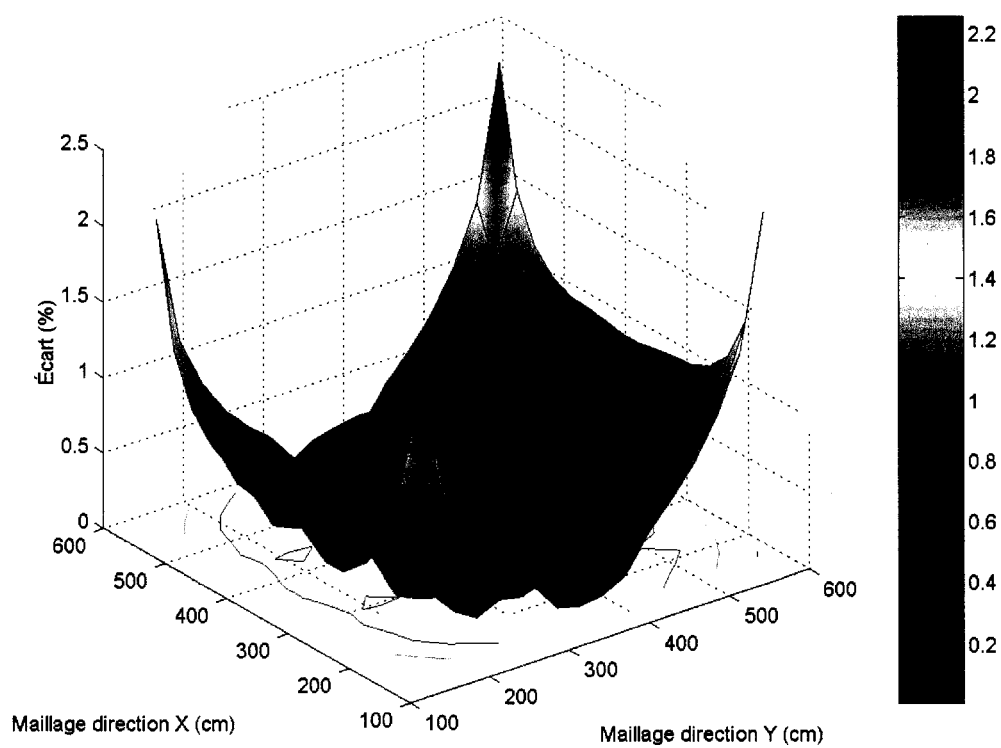


Figure 4.26 Écart entre les distributions de puissance plan #6 (tous les mécanismes de contrôle insérés)

4.4 Discussion des résultats

Quatre simulations différentes ont été effectuées afin de bien mettre en évidence le fait que les facteurs de discontinuité sont bien implantés dans le code DONJON-NDF. Dans tous les cas nous avons utilisé un modèle de type CANDU-6 à deux zones de combustion. Dans le premier cas nous avons fait un calcul sur un réacteur ayant seulement un réflecteur d'eau lourde le long de sa surface radiale. Cette simulation avait pour but de bien mettre en évidence l'effet du réflecteur. Dans le deuxième cas nous avons introduit la BC#11 complètement afin de bien voir l'effet produit par ce type de contrôleur. Pour le troisième cas nous avons retiré la BC#11 et nous l'avons remplacé par le LZC#4 complètement rempli toujours dans le but de bien mettre en évidence les effets créés par un type de contrôleur particulier. La dernière simulation consistait à introduire complètement l'ensemble des 21 BC et de remplir complètement l'ensemble des 14 LZC afin de créer la situation la plus hétérogène possible ce qui nous a permis de voir toute l'importance que peuvent avoir les facteurs de discontinuité sur les calculs pour un réacteur de type CANDU-6 à l'équilibre et en fonctionnement normal.

Pour chaque cas nous avons fait une étude sur l'écart entre les facteurs de discontinuité adjacents dans les directions X et Y ce qui nous a permis de déterminer à l'avance les zones qui seraient les plus affectées lors des calculs de distribution de flux et de puissance. Comme nous nous y attendions, les zones les plus affectées se situent à l'interface coeur-réflecteur avec des écarts d'environ 7.4% à 8.4% et près des mécanismes de contrôle. Les écarts au niveau des contrôleurs sont beaucoup plus faibles variant de au plus 1.26% pour les BC et de au plus 1.76% pour les LZC.

Nous avons aussi étudié les différences entre les constantes de multiplication. Nous avons constaté que dans le cas d'un réacteur de type CANDU-6 à l'équilibre en fonctionnement normal, les facteurs de discontinuité n'ont qu'un très faible impact sur le

calcul du facteur de multiplication effectif. Toutes les différences de réactivité que nous avons obtenues sont inférieures ou égales à 0.067 mk ce qui est extrêmement faible. Ceci peut nous laisser supposer que dans l'optique où les flux homogènes de surface seraient calculés à partir des relations (2.85) à (2.90) présentés à la section 2.2.4, plutôt que d'utiliser une relation directe avec les flux de volume hétérogènes tel que présenté à la section 4.2, les calculs auraient de fortes chances de converger malgré la nature non-linéaire du problème causée par la présence du facteur de multiplication dans les relations (2.85) à (2.90).

L'analyse des distributions de flux nous a démontré que les écarts majeurs apparaissent au réflecteur et aux endroits où sont situés les contrôleurs tel que prédit par l'analyse des écarts entre facteurs de discontinuité adjacents. Dans le cas du réflecteur ces écarts sont d'environ 8%, ce qui n'est pas négligeable, et peuvent atteindre la valeur de 12% aux extrémités axiales du réacteur. Les extrémités axiales du réacteur étant les zones les plus hétérogènes à cause de la présence du vide de l'autre côté de la frontière. À ces endroits, l'effet des facteurs de discontinuité orientés selon la direction Z se font aussi sentir. Physiquement on explique ce phénomène par la présence d'un courant neutronique beaucoup plus élevé dans ces régions. Par contre, aux endroits où sont situés les mécanismes de contrôle les écarts sont plutôt négligeables atteignant la valeur maximum de 0.77% aux extrémités des BC et la valeur maximum de 1.4% aux extrémités des LZC. Ce sont les extrémités qui sont le plus affectées car on y retrouve l'effet combiné des facteurs de discontinuité dans les directions X et Y .

Finalement, l'analyse des distributions de puissance nous a montré un comportement similaire à celui des flux mais avec une amplitude beaucoup moins élevée au niveau des écarts. Le réflecteur offrant toujours un écart majeur de 2.14% et de 4.04% aux extrémités du réacteur. Lorsque tous les contrôleurs sont présents cet écart aux extrémités passe de 4.04% à 5.09% soit une augmentation d'environ 1% ce qui n'est pas négligeable. On explique ce phénomène par l'applatissage du flux causé par la présence des BC ce qui

augmente les fuites aux extrémités. Au niveau des mécanismes de contrôle, ces écarts demeurent toujours très faibles, soit 0.77% aux extrémités des BC et 1.4% aux extrémités des LZC.

CONCLUSION

Le but de ce projet de maîtrise était d'introduire la théorie d'équivalence à l'intérieur de la chaîne de calcul DRAGON/DONJON-NDF [IGE-174, 2000, IGE-208, 2000]. Le premier objectif était le calcul des flux de surface à l'aide du code cellule DRAGON. Ces flux de surface étaient nécessaires pour la construction des facteurs de discontinuité. Dans ce projet nous avons seulement utilisé ce que nous appelons les facteurs de discontinuité approximatés (ADF). Toute l'information nécessaire à la construction des ADF provient de DRAGON (voir section 4.2). Par contre, une méthode pour le calcul des vrais facteurs de discontinuité (mais toujours à partir des flux de volume calculés dans DRAGON) a été proposée (voir section 2.2) et cette méthode prend en compte des éléments propres à l'approximation de la diffusion.

La méthode de calcul des flux de surface dans DRAGON, appelée méthode directe, a été comparée à la méthode des régions minces. Pour ce faire nous avons procédé à quatre type de simulations. Le premier type avait pour but d'estimer l'ampleur des erreurs que pouvait générer l'approximation des conditions frontières isotropes. Le deuxième type de simulations servait à vérifier les effets de la discrétisation spatiale sur les calculs. Le troisième type vérifiait comment se comportaient les calculs sur des géométries tridimensionnelles et le dernier type de simulations servait à démontrer l'application de la méthode directe sur les géométries de grappe. Les résultats majeurs que l'on a pu tirer de ces simulations sont les suivants

- *Les écarts entre les deux méthodes de calculs sont toujours plus élevés à l'intérieur du groupe rapide que du groupe thermique.*
- *On constate généralement une surestimation des flux par la méthode directe dans le groupe rapide et une sous-estimation dans le groupe thermique.*

- *Une discrétisation spatiale grossière surestime le flux dans le groupe rapide et sous-estime le flux dans le groupe thermique.*
- *Les résultats convergent lorsque l'on augmente la discrétisation spatiale.*
- *Les écarts sont accrus entre les deux méthodes de calcul lorsqu'il y a plus d'hétérogénéité à l'intérieur d'une cellule.*

Les avantages d'utiliser la méthode directe sont que l'on calcule des vrais flux de surface, les temps de calculs sont diminués et on peut utiliser la méthode sur des géométries de grappe. Par contre, on ne peut pas calculer des flux de surface sur les surfaces internes d'un assemblage contrairement à la méthode des régions minces.

Nous avons par la suite effectué des calculs de distribution de flux et de puissance ainsi que de constantes de multiplication à l'intérieur du code DONJON-NDF afin de vérifier que la théorie d'équivalence était bien implantée dans la chaîne de calcul neutronique DRAGON/DONJON-NDF. Nous avons effectué des calculs avec et sans ADF afin de pouvoir faire des comparaisons. Quatre simulations légèrement différentes sur une géométrie représentant un réacteur nucléaire de type CANDU-6 ont été réalisées. La première simulation visait à mettre en évidence l'effet du réflecteur. La deuxième simulation servait à démontrer l'effet d'une barre de compensation (BC). La troisième simulation mettait en évidence l'effet causé par un contrôleur liquide (LZC) et la dernière simulation consistait à remplir le réacteur de tous ses mécanismes de contrôle afin de créer une situation extrêmement hétérogène et de bien voir si les facteurs de discontinuité peuvent avoir un impact majeur sur les calculs. Les résultats majeurs que l'on a pu tirer de ces simulations sont les suivants:

- *Dans le cas d'un réacteur de type CANDU-6 à l'équilibre et en fonctionnement normal, les facteurs de discontinuité n'ont qu'un très faible impact sur la constante de multiplication.*

- *Dans les distributions de flux, les écarts majeurs apparaissent à l'interface coeur-réacteur et près des mécanismes de contrôle. Ces écarts peuvent atteindre 12% à l'interface coeur-réacteur, 0.77% aux extrémités des BC et 1.4% aux extrémités des LZC.*

- *Dans les distributions de puissance, les écarts majeurs apparaissent à l'interface coeur-réacteur et près des mécanismes de contrôles. Ces écarts peuvent atteindre 5% à l'interface coeur-réacteur, 0.77% aux extrémités des BC et 1.4% aux extrémités des LZC.*

On constate donc que même pour un réacteur de type CANDU-6 à l'équilibre et en fonctionnement normal les facteurs de discontinuité peuvent avoir un impact passablement important au niveau des distributions de flux et de puissance particulièrement à l'interface coeur-réacteur et aux extrémités axiales du réacteur. Par contre, sur la constante de multiplication ils n'ont qu'un très faible effet.

Ce projet ouvre la voie à un ensemble de projets futurs. Voici énuméré un ensemble de recommandations pouvant servir de ligne de conduite à de tels travaux.

- *Faire des analyses plus détaillées pour chercher à comprendre plus en profondeur les différents impacts des ADF sur les calculs pour les différentes composantes ou caractéristiques du coeur de type CANDU-6. Par exemple l'étude du «notch».*

- *Programmer les équations (2.85) à (2.90) présentées à la section 2.2.4 à l'intérieur du code de calcul DONJON-NDF afin de pouvoir utiliser les vrais facteurs de discontinuité dans les calculs.*

- *Proposer de meilleures méthodes pour les calculs de flux de surface homogènes. Ces méthodes devraient être plus générales que celle présentée à la section 2.2.4, et ne devraient pas forcer l'égalité entre les flux aux surfaces opposées à l'intérieur d'une*

même cellule.

- *Utiliser les facteurs de discontinuité avec une méthode nodale d'ordre plus élevée que les différences finies centrées. Comparer les résultats obtenus à ceux obtenus à l'aide de méthode Monte-Carlo*

- *Faire des comparaisons entre des calculs effectués dans le cadre de la théorie d'équivalence avec un seul facteur de discontinuité par région et des calculs effectués à l'aide de la méthode SPH.*

- *Faire des comparaisons entre les valeurs de flux et de puissance calculées et des mesures afin de valider la méthode avec facteurs de discontinuité.*

- *Utiliser les facteurs de discontinuité à l'intérieur de calculs dynamiques en créant des transitoires importantes. Une simulation de LOCA avec insertion des barres d'arrêt pourrait vraiment être intéressante et permettrait probablement de voir toute l'importance que peuvent avoir les facteurs de discontinuité pour des calculs sur des réacteurs de type CANDU-6.*

- *Réaliser des calculs pour le ACR («Advanced CANDU Reactor») avec facteurs de discontinuité. Un pas de réseau plus serré (22cm au lieu de 28cm), du combustible enrichi, et un caloporteur d'eau légère peuvent faire en sorte que l'effet des facteurs de discontinuité soit plus important à l'intérieur du ACR que du CANDU-6.*

RÉFÉRENCES

- DAVISON, B. 1957. Neutron Transport Theory. London : Oxford University Press.
- DUFOUR, P. MARLEAU, G. KOCLAS, J. 2004. «Computation of Surface Fluxes in the Lattice Code DRAGON ». 25th Annual Conference of the Canadian Nuclear Society. Toronto.
- HÉBERT, A. 1993. «A Consistent Technique for the Pin-by-Pin Homogenization of a Pressurized Water Reactor Assembly». Nuclear Science and Engineering. 113:3. 227-238.
- HÉBERT, A. 1993. «Development of a Third-Generation Superhomogenisation Method for the Homogenization of a Pressurized Water Reactor Assembly». Nuclear Science and Engineering. 115:2. 129-141.
- HÉBERT, A. 1997. «Application of Transport Methods to Lattice Calculations». Frédérick Joliot summer school. Cadarache.
- HENRY, A. F. 1975. Nuclear Reactor Analysis. Cambridge (Mass.) : MIT Press.
- KAVEH, S. 2000. Nuclear Reactor Kinetics Based on Hierarchical Nodal Analysis. Thèse de doctorat en génie nucléaire, École Polytechnique de Montréal.
- KAVENOKY, A. 1978. «The SPH Homogenization Method». Proc. Specialist' Mtg. Homogenization Methods in Reactor Physics. Lugano (Switzerland).
- KOEBKE, K. 1981. «Advances in Homogenization and Dehomogenization». Advances in Mathematical Method for the Solution of Nuclear Engineering Problems. Munchen.

- KOCLAS, J. 1998. «Comparisons of the Different Approximations Leading to Mesh Centered Finite Differences Starting from Analytic Nodal Method». *Annal of Nuclear Energy*. 25:11. 821-838
- KOCLAS, J. 1996. Calcul neutronique de réacteur (notes de cours). École Polytechnique de Montréal.
- LAMARSH, X. 1966. *Introduction to Nuclear Reactor Theory*. Reading (Mass.). : Addison-Wesley, Publishing Co.
- LEWIS, E. E. MILLER, W. F. 1984. *Computational Methods of Neutron Transport*. New York : John Wiley and Sons.
- MARLEAU, G. HÉBERT, A. ROY, R. 2000. *A User's Guide for DRAGON*. Montréal : Institut de Génie Nucléaire. IGE-174 Rev. 5.
- MARLEAU, G. 2001. *Dragon Theory Manual Part1: Collision Probability Calculations*. Montréal : Institut de Génie Nucléaire. IGE-236 Rev. 1.
- MARLEAU, G. 2003. «Approximate Discontinuity Factor Evaluation in DRAGON». 24th Annual Conference of the Canadian Nuclear Society. Toronto.
- MONDOT, J. 1978. «Détermination de la constante équivalente pour les calculs de diffusion aux différences finies». *Proc. Specialist' Mtg. Homogenization Methods in Reactor Physics*. Lugano (Switzerland).
- NAVARRO, S. 1996. Étude numérique des effets de diffusion directionnels dans le coeur du réacteur Gentilly-2. Mémoire de maîtrise en génie énergétique, École Polytechnique de Montréal.
- ROZON, D. 1992. *Introduction à la cinétique des réacteurs nucléaires*. Montréal : Éditions de l'École Polytechnique de Montréal.

- SMITH, K. S. 1980. Spatial Homogenization Methods for Light Water Reactor Analysis. Thèse de doctorat en génie nucléaire, Massachusetts Institute of Technology.
- SMITH, K. S. 1986. «Assembly Homogenization Techniques for Light Water Reactor Analysis». Progress in Nuclear Energy. 17:3. 303-335.
- STACEY, W. M. 2001. Nuclear Reactor Physics. New York : John Wiley and Sons.
- TANKER, E. HENRY, A. F. 1985. «Finite Difference Group-Diffusion Theory Parameters That Reproduce Reference Results». Transactions of the American Nuclear Society. San Francisco (California).
- VARIN, E. HÉBERT, A. Roy, R. KOCLAS, J. 2000. A User Guide for DONJON. Montréal : Institut de Génie Nucléaire. IGE-208 Ver. 2.01.

ANNEXE I

**DÉPENDANCE ANGULAIRE DES FLUX DE SURFACE À L'INTÉRIEUR DU
CODE DE CELLULE DRAGON**

Dans la programmation du logiciel DRAGON [IGE-174, 2000] on a supposé que les flux de surfaces avaient une dépendance angulaire exprimée par une expansion en harmoniques sphériques [IGE-236, 2001].

$$\phi_{\pm}^g(\vec{r}_s, \vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} \sum_{\nu=0}^{N_{\nu}} \phi_{\pm}^{g,\nu}(\vec{r}_s) \psi^{\nu}(\vec{\Omega}, \vec{N}_{\pm}) \quad (\text{I.1})$$

où $\vec{r}_s$ est élément d'une surface quelconque et les $\psi^{\nu}(\vec{\Omega}, \vec{N}_{\pm})$ correspondent aux harmoniques sphériques définies sur une moitié du domaine de l'angle solide $\vec{\Omega}$.

$$\psi^{\nu}(\vec{\Omega}, \vec{N}_{\pm}) = \begin{cases} 1 & \text{pour } \nu = 0 \\ \sqrt{2}(3\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_{\pm}^1 - 2) & \text{pour } \nu = 1 \\ 2\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_{\pm}^2 & \text{pour } \nu = 2 \\ 2\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_{\pm}^3 & \text{pour } \nu = 3 \end{cases}$$

et les $\vec{N}_{\pm}^i$, ($i = 1, 2, 3$) représentent les composantes du vecteur unitaire normal à la surface considérée (orientée entrante + ou sortante -). Bien entendu les harmoniques sphériques satisfont la relation d'orthogonalité suivante

$$\int_{(\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_{\pm}) > 0} (\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_{\pm}) \psi^{\nu}(\vec{\Omega}, \vec{N}_{\pm}) \psi^{\mu}(\vec{\Omega}, \vec{N}_{\pm}) d^2\Omega = \pi \delta_{\nu\mu}$$

On suppose par la suite que les termes $\phi_{\pm}^{g,\nu}(\vec{r}_s) = 0$ pour $\nu \geq 1$, ce qui nous donne [IGE-

236, 2001]

$$\phi_{\pm}^g(\vec{r}_s) = \frac{1}{4\pi} \phi_{\pm}^{g,0}(\vec{r}_s) \quad (\text{I.2})$$

et constitue une approximation au 1^{er} ordre sur la dépendance angulaire des flux de surface.

ANNEXE II

GÉOMÉTRIE EN THÉORIE DE LA DIFFUSION

Tous les problèmes que nous allons résoudre en théorie de la diffusion ont des géométries cartésiennes. De plus nous travaillons toujours avec une géométrie tridimensionnelle et on subdivise le domaine en plusieurs régions selon les axes x , y et z . On divisera donc l'axe x en I sections, l'axe y en J sections et l'axe z en K sections de telle sorte que l'on aura $I \times J \times K$ régions notées ijk ($i = 1, \dots, I / j = 1, \dots, J / k = 1, \dots, K$) [Koclas, 1996, Kaveh, 2000].

La région ijk sera comprise dans le domaine $\{x_i \leq x \leq x_{i+1} / y_j \leq y \leq y_{j+1} / z_k \leq z \leq z_{k+1}\}$ et aura un volume V_{ijk} . Ce volume est calculé de la façon suivante

$$V_{ijk} = h_x^i h_y^j h_z^k$$

où h_x^i , h_y^j et h_z^k représentent les dimensions de la région ijk selon les trois directions x , y et z respectivement.

$$h_x^i = x_{i+1} - x_i \quad h_y^j = y_{j+1} - y_j$$

$$h_z^k = z_{k+1} - z_k$$

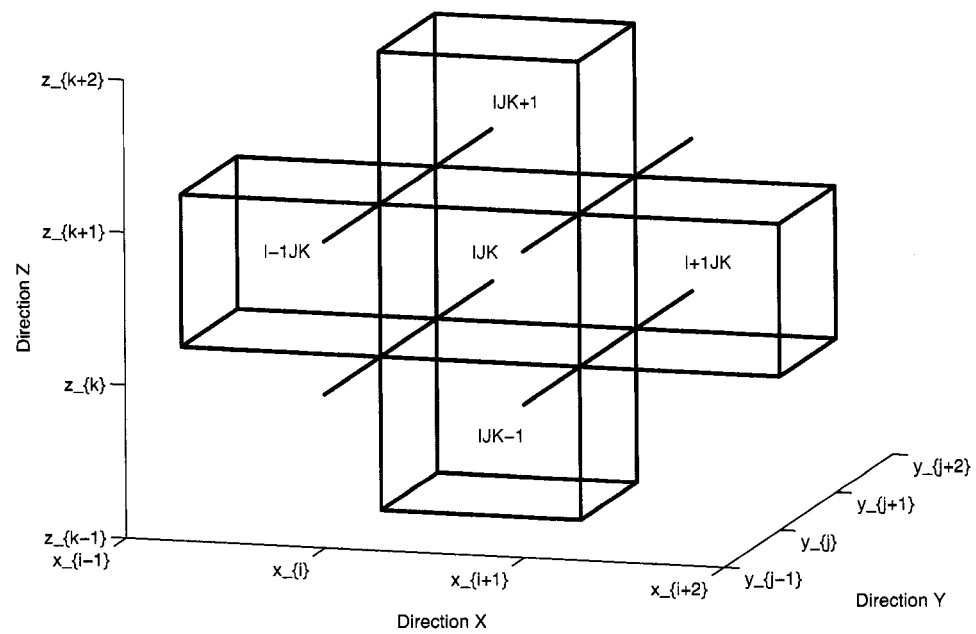


Figure II.1 Géométrie en théorie de la diffusion

ANNEXE III

PROGRAMMATION À L'INTÉRIEUR DE DRAGON

Nous abordons ici la manière de résoudre l'équation (2.33) à partir du logiciel de calcul neutronique DRAGON qui résout l'équation de transport (2.32) par la méthode des probabilités de collision.

III.1 Modules ASM et EXCELL

Le module ASM et le module EXCELL du logiciel DRAGON calculent les probabilités de collision et les stockent dans un vecteur appelée *PROB*. Dans la routine PIJSBC (où QIJSBC pour le module EXCELL), on commence par calculer la matrice $[\tilde{P}_{SV}^C]^g$ à l'aide de la variable *PROB*. Cette matrice est définie comme suit

$$[\tilde{P}_{SV}^C]^g \equiv [\tilde{P}_{SV}]^g + [\tilde{P}_{SS}]^g([S][A]^{-1} - [\tilde{P}_{SS}]^g)^{-1}[\tilde{P}_{SV}]^g \quad (\text{III.1})$$

où $[S]$ est la matrice des surfaces

$$[S] = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} S_1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & S_\alpha & \\ & & & \ddots \\ & & & & S_{N_s} \end{bmatrix}$$

Ce que l'on désire avoir cependant, selon l'équation des flux de surface (2.33), est plutôt la matrice $[P_{SV}^C]$ qui a la forme suivante

$$[P_{SV}^C] \equiv [p_{SV}] + [p_{SS}]([A]^{-1} - [p_{SS}])^{-1} [p_{SV}] \quad (\text{III.2})$$

les matrices $[\tilde{P}_{XY}]$ sont des matrices dont les éléments sont contenus dans la variable PROB (voir annexe IV) et sont définis pour des raisons de symétrie.

$$[\tilde{P}_{VV}] = [\tilde{P}_{VV}]^T \quad (\text{III.3})$$

$$[\tilde{P}_{VS}] = [\tilde{P}_{VS}]^T = [\tilde{P}_{SV}] = [\tilde{P}_{SV}]^T \quad (\text{III.4})$$

$$[\tilde{P}_{SS}] = [\tilde{P}_{SS}]^T \quad (\text{III.5})$$

Elles sont reliées aux matrices $[p_{XY}]$ par les relations suivantes

$$[p_{VV}] = [V]^{-1} [\Sigma]^{-1} [\tilde{P}_{VV}] [\Sigma]^{-1} \quad [p_{SV}] = [S]^{-1} [\tilde{P}_{SV}] [\Sigma]^{-1}$$

$$[p_{VS}] = [V]^{-1} [\Sigma]^{-1} [\tilde{P}_{VS}] \quad [p_{SS}] = [S]^{-1} [\tilde{P}_{SS}]$$

où $[\Sigma]$ est la matrice des sections efficaces totales et $[V]$ la matrice des volumes

$$[\Sigma] = \begin{bmatrix} \Sigma_1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & \Sigma_i & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & \Sigma_{N_V} \end{bmatrix}$$

$$[V] = \begin{bmatrix} V_1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & V_i & \\ & & & \ddots \\ & & & & V_{N_V} \end{bmatrix}$$

Maintenant, si l'on applique l'opérateur $[S]^{-1}[MATRICE][\Sigma]^{-1}$ sur la matrice $[\tilde{P}_{SV}^C]$ on obtient

$$\begin{aligned} [S]^{-1}[\tilde{P}_{SV}^C][\Sigma]^{-1} &= [S]^{-1}[\tilde{P}_{SV}][\Sigma]^{-1} + [S]^{-1}[\tilde{P}_{SS}]([S][A]^{-1} - [\tilde{P}_{SS}])^{-1}[\tilde{P}_{SV}][\Sigma]^{-1} \\ &= [p_{SV}] + [p_{SS}]([S][A]^{-1} - [S][S]^{-1}[\tilde{P}_{SS}])^{-1}[\tilde{P}_{SV}][\Sigma]^{-1} \\ &= [p_{SV}] + [p_{SS}]([S]\{[A]^{-1} - [p_{SS}]\})^{-1}[\tilde{P}_{SV}][\Sigma]^{-1} \\ &= [p_{SV}] + [p_{SS}]([A]^{-1} - [p_{SS}])^{-1}[S]^{-1}[\tilde{P}_{SV}][\Sigma]^{-1} \\ &= [p_{SV}] + [p_{SS}]([A]^{-1} - [p_{SS}])^{-1}[p_{SV}] \\ &= [P_{SV}^C] \end{aligned} \tag{III.6}$$

On vient donc de démontrer que $[P_{SV}^C] = [S]^{-1}[\tilde{P}_{SV}^C][\Sigma]^{-1}$.

III.2 Module FLU

Une fois la matrice $[P_{SV}^C]^g$ obtenue et entreposée dans une structure «asmpij» il sera possible d'appliquer l'équation (2.33) à l'intérieur du module FLU. L'équation prend la

forme suivante à l'intérieur de la sous-routine FLUSUR

$$\begin{aligned} FUNPOS(IS, IG) = & FUNPOS(IS, IG) + (PSVFUI(IS, IV) * \\ & SUNKNO(KEYFLX(IV), IG)) \end{aligned} \quad (III.7)$$

où $FUNPOS$ correspond à $\bar{J}_+^g$, $PSVFUI$ correspond à $[P_{SV}^C]^g$ et $SUNKNO$ correspond au terme de source $\bar{q}^g$. Le terme de source, qui est également disponible dans le module FLU, est calculé à partir du flux de volume convergé.

On procède par la suite au calcul du flux de surface final $\bar{J}^g$ (équation (2.35)). On retrouve donc à l'intérieur de la sous-routine FLUSUR l'équation

$$\begin{aligned} FUNSUR(-KEYMRG(-IS), IG) = & (FUNPOS(-KEYMRG(-IS), IG) \\ & + ALBEDO(IS) * FUNPOS(BCRFTR(-KEYMRG(-IS)), IG)) / 2.0 \end{aligned} \quad (III.8)$$

On remarque que le flux entrant $\bar{J}_-^g$ est donné par l'expression $ALBEDO * FUNPOS$.

III.3 Module EDI

Une fois l'équation (2.35) évaluée, l'étape suivante consistera à homogénéiser le flux de surface sur chacune des 6 surfaces (X_- , X_+ , Y_- , Y_+ , Z_- , Z_+). Notons que le logiciel DRAGON ne permet de calculer les probabilités de fuite $[p_{SS}]^g$, $[p_{SV}]^g$ et $[p_{VS}]^g$ que pour les surfaces externes d'une géométrie donnée. Ce seront donc les équations (3.17) et (3.19) qui seront résolues à l'intérieur de la sous-routine EDIADF du module EDI.

L'équation programmée a la forme suivante pour un groupe d'énergie donné

$$FLUSUR(I) = FLXNOR * FLUINT(I) * VOLMRG / (AREA(I) * FLXINT) \quad (III.9)$$

où $FLXNOR$ correspond à une constante de normalisation qui permet d'avoir un seul neutron produit au total sur l'ensemble du domaine et dans tous les groupes d'énergie (notons que ce terme n'apparaît pas dans les équations (3.17) et (3.19)). $AREA$ correspond à la dimension d'une surface homogène. Le rapport $VOLMRG/FLXINT$ correspond au flux de volume inverse homogénéisé sur l'ensemble du domaine et nous permet d'obtenir les facteurs de discontinuité approximatés (notons que ce terme n'apparaît pas dans les équations (3.17) et (3.19)). Et finalement $FLUINT$ est le flux de surface intégré (numérateur de l'équation (3.19) et est donné par

$$FLUINT(-MATALB(-ISUR)) = FLUINT(-MATALB(-ISUR)) + FUNSUR(-KEYMRG(-ISUR)) * VOLSUR(-ISUR) \quad (III.10)$$

Pour faire le lien entre les $\phi_{s,\alpha}^g$ et les S_α qui apparaissent dans l'équation (3.19) on utilise la variable $KEYMRG$ contenue dans le fichier TRACKING. L'information concernant l'orientation d'une surface est contenue dans la variable $MATALB$ que l'on retrouve également dans le fichier TRACKING. Par exemple, si $MATALB(\alpha) = -1$, cela signifie que la surface S_α est élément de la surface homogène S_{X_-} . On a en fait les six

relations suivantes

$$MATALB(\alpha) = -1 \Rightarrow S_\alpha \in S_{X-}$$

$$MATALB(\alpha) = -2 \Rightarrow S_\alpha \in S_{X+}$$

$$MATALB(\alpha) = -3 \Rightarrow S_\alpha \in S_{Y-}$$

$$MATALB(\alpha) = -4 \Rightarrow S_\alpha \in S_{Y+}$$

$$MATALB(\alpha) = -5 \Rightarrow S_\alpha \in S_{Z-}$$

$$MATALB(\alpha) = -6 \Rightarrow S_\alpha \in S_{Z+}$$

Pour ce qui est des dimensions des surfaces, elles sont contenues dans *VOLSUR* qui se retrouve lui aussi dans le fichier *TRACKING*. Les N_S premiers éléments de cette variable concernent la dimension des surfaces alors que les éléments $VOLSUR(N_S+1)$ jusqu'à $VOLSUR(N_S + 1 + N_V)$ concernent la dimension des volumes. Les éléments de flux de surface (*FUNSUR*) sont lus dans le fichier *FLU*.

Finalement, on procède à la condensation sur les groupes d'énergie (équation (3.17)) en faisant une simple somme sur les sous-groupes d'énergie appartenant à un même groupe condensé.

ANNEXE IV

LA VARIABLE PROB

La variable PROB qui apparaît dans les modules ASM et EXCELL sert à entreposer les éléments des matrices de probabilités de collision ainsi que les dimensions des N_S surfaces externes et des N_V volumes. Pour bien comprendre la construction de cette variable il faut considérer la matrice suivante

$[\tilde{P}_{SS}]$	$\vec{S}^T$	$[\tilde{P}_{SV}]$
$\vec{S}$	0	$\Sigma \vec{V}$
$[\tilde{P}_{VS}]$	$\Sigma \vec{V}^T$	$[\tilde{P}_{VV}]$

où

$$\begin{aligned}\vec{S} &= \frac{1}{4}(S_{N_S}, \dots, S_\alpha, \dots, S_1) \\ \Sigma \vec{V} &= (\Sigma_1 V_1, \dots, \Sigma_i V_i, \dots, \Sigma_{N_V} V_{N_V})\end{aligned}$$

On constate que cette matrice est complètement symétrique d'après les relations (III.3) à (III.5). On entrepose donc dans PROB que les éléments de la partie supérieure à la diagonale ainsi que les éléments de la diagonale même. L'ordre dans lequel ils sont entreposés est le suivant

1	2	4	7	11
	3	5	8	12
		6	9	:
			10	

Notons aussi que les indices de surface sont inversés dans la matrice. C'est à dire que les éléments de la matrice sont numérotés de la façon suivante

The diagram shows a rectangular grid of points. The horizontal axis is labeled with indices: $-N_S, -(N_S - 1), \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots, N_V - 1, N_V$. The vertical axis is labeled with indices: $-N_S, -(N_S - 1), \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots, N_V - 1, N_V$. The grid is composed of small squares, with the central square at $(0,0)$ highlighted in light blue. The grid extends from $-N_S$ to N_V in both directions, with the total width and height being $2N_S + 1$ units.