

Titre: Application de la méthode de modélisation de réflecteurs Baff-Refl
Title: dans Cocagne

Auteur: Thomas Schefler
Author:

Date: 2026

Type: Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

Référence: Schefler, T. (2026). Application de la méthode de modélisation de réflecteurs Baff-Refl dans Cocagne [Master's thesis, Polytechnique Montréal]. PolyPublie.
Citation: <https://publications.polymtl.ca/76501/>

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

URL de PolyPublie: <https://publications.polymtl.ca/76501/>
PolyPublie URL:

Directeurs de recherche: Charles Bienvenue, & Alain Hébert
Advisors:

Programme: Génie énergétique
Program:

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL

affiliée à l'Université de Montréal

**Application de la méthode de modélisation de réflecteurs Baff-Refl dans
Cocagne**

THOMAS SCHEFLER

Département de génie mécanique

Mémoire présenté en vue de l'obtention du diplôme de *Maîtrise ès sciences appliquées*
Génie énergétique

Avril 2026

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL

affiliée à l'Université de Montréal

Ce mémoire intitulé :

**Application de la méthode de modélisation de réflecteurs Baff-Refl dans
Cocagne**

présenté par **Thomas SCHEFLER**

en vue de l'obtention du diplôme de *Maîtrise ès sciences appliquées*
a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de :

Njuki MUREITHI, président

Charles BIENVENUE, membre et directeur de recherche

Alain HÉBERT, membre et codirecteur de recherche

Pierre LAURENT, membre externe

REMERCIEMENTS

Je remercie tout d’abord mon co-directeur de recherche, Alain Hébert, premièrement pour son cours de neutronique qui m’a permis de mieux comprendre ce domaine. Merci aussi pour l’opportunité que représente ce projet de recherche avec de nombreuses connaissances apprises au cours de mon pré-stage puis stage ainsi qu’une première expérience dans une entreprise impliquée dans le domaine du nucléaire. Enfin, merci pour l’encadrement toujours formateur et rassurant grâce aux explications et aux corrections d’erreurs de codes.

Je remercie mon directeur de recherche, Charles Bienvenue, pour son accompagnement malgré toutes ses nouvelles responsabilités au sein de l’Institut de Génie Nucléaire de Polytechnique Montréal.

Je tiens aussi à remercier mon encadrant de stage au sein d’EDF, Pierre Laurent, pour toutes ses explications qui m’ont permis d’approfondir le domaine de la neutronique et le fonctionnement d’EDF. Ses réflexions et conseils très pédagogiques m’ont orienté de manière à mener à bien ce projet de recherche. Je n’oublie pas tous les collègues du laboratoire I27 d’EDF pour toutes nos discussions et Jérôme Texeraud pour ses précieux conseils. Je pense en particulier à nos courses du mercredi ou jeudi midi avec de superbes sorties dans la boue ! Merci à Sami pour ses passages à EDF et son aide sur la méthode Baff-Refl.

Je remercie particulièrement les membres du jury de prendre le temps d’évaluer mon travail de recherche.

Merci aux étudiants de l’Institut de Génie Nucléaire pour nos riches discussions et leur aide durant les périodes de cours et le pré-stage.

Félicitations, Elouan, pour m’avoir supporté pendant 6 mois de stage (et même pendant plusieurs années au total). Tu as évité de commettre l’*irréparable*. Et bravo à Elias qui nous a supportés tous les deux dans une même pièce deux jours par semaine. Merci à ma famille et mes amis, dont Marion qui m’a donné l’impression d’être entouré de ma famille à Montréal, Vincent pour son aide avec les démarches administratives et ses invitations, ainsi que Hugo pour les sorties (et les expositions de *récipients*). Enfin, merci au gang de l’X (surtout Emil qui a survécu à l’épreuve de ma gastronomie) qui m’a donné l’impression d’être un polytechnicien de l’X (en plus de Montréal) en me faisant partager une partie de leur vie d’étudiants (en particulier dans leur magnifique salle de sports).

RÉSUMÉ

En simulation neutronique, la modélisation du réflecteur, entourant le cœur pour y confiner les neutrons, représente un enjeu essentiel pour la qualité des résultats à cause des pertes neutroniques élevées et de la géométrie irrégulière spécifique aux bords du cœur. Dans les schémas de calcul industriels, dont les calculs doivent être plus rapides que les calculs de référence et qui supposent l'hypothèse d'un milieu infini, les assemblages proches de la zone réflecteur ne peuvent pas satisfaire cette hypothèse, acceptable au centre du cœur. Cela entraîne inévitablement des erreurs notables dans le calcul de flux dans les assemblages aux bords du cœur.

Pour prendre en compte l'impact du réflecteur, l'entreprise Électricité De France (EDF) utilise la méthode 1D Lefèbvre-Lebigot au sein de ses codes de calcul CARABAS et CO-CAGNE. D'autres méthodes existent pour modéliser les réflecteurs, notamment Baff-Refl qui est implémentée dans la plateforme SCIENCE de Framatome et qui est disponible dans l'environnement de calculs neutroniques DONJON développé à Polytechnique Montréal.

Cette étude compare ces deux méthodes. Pour ce faire, après une phase de tests sur les géométries des traverses 1D de réflecteurs dans DONJON, les résultats de puissance d'un calcul cœur prenant en compte soit Lefèbvre-Lebigot soit Baff-Refl avec la formulation d'éléments finis Raviart-Thomas ont été comparés à une référence issue de CARABAS. Ces comparaisons ont eu lieu dans différentes configurations : cœurs homogènes, paramètres nominaux et attente à chaud. L'impact d'une modification du coefficient de diffusion D_1 dans le réflecteur ainsi que les différences de puissances calculées entre les modèles Golfier-Vergain et Todorova avec Baff-Refl ont été étudiés.

Les résultats démontrent des performances similaires entre Lefèbvre-Lebigot et Baff-Refl, à part dans la configuration attente à chaud où Lefèbvre-Lebigot se montre légèrement meilleure. Avec les deux méthodes, des bascules d'erreur de puissance apparaissent radialement dans les cœurs. De plus, les surrestimations et sous-estimations sont maximales à la frontière avec le réflecteur et en particulier dans les coins à cause de l'hypothèse d'un milieu infini et du caractère 1D des méthodes.

Baff-Refl présente l'avantage d'être déclinable en 2D ainsi que de calculer directement la valeur des coefficients de diffusion dans le réflecteur contrairement à Lefèbvre-Lebigot qui impose ces valeurs pour chaque type de palier de réacteurs. Elle peut aussi se baser sur différents formalismes de discretisation angulaire (SP_N à un ordre supérieur à 1) ou spatiale (méthode d'expansion nodale, méthode analytique nodale, éléments finis de Raviart-Thomas).

Ces arguments pourraient motiver des recherches futures sur Baff-Refl au sein de EDF.

ABSTRACT

In neutronic simulation, accurately modeling the reflector, surrounding the reactor core, is a critical challenge for ensuring high-quality results. Industrial calculation schemes, which are designed to be faster than reference models, often rely on the infinite medium hypothesis. While this assumption is valid for the center of the core, it becomes a major source of error for fuel assemblies located at the periphery. The resulting flux distortions at the core-reflector interface lead to significant power calculation inaccuracies that must be addressed.

To mitigate these effects, EDF currently utilizes the 1D Lefèbvre-Lebigot method within its proprietary CARABAS and COCAGNE codes. However, alternative approaches exist, such as the Baff-Refl method, which is implemented in the Framatome’s platform SCIENCE and which is available in the DONJON neutronic environment developed at Polytechnique Montréal. This study aims to benchmark these two methodologies by comparing power distribution results against a CARABAS reference. The evaluation was conducted across several configurations, including homogeneous cores and nominal parameters, with a specific focus on hot standby conditions. The research also investigated the influence of the D1 diffusion coefficient and compared the specific Golfier-Vergain and Todorova models within the Baff-Refl framework.

The results indicate that both Lefèbvre-Lebigot and Baff-Refl deliver comparable performance levels, although the former remains slightly more accurate in hot standby scenarios. In both cases, radial power shifts were observed, with overestimations and underestimations reaching their peak at the core-reflector boundary—particularly in the corners. These localized errors are primarily attributed to the inherent limitations of 1D modeling and the persistent bias of the infinite medium hypothesis.

Despite these similarities, Baff-Refl has the advantage of being adaptable to 2D geometries and allows for the direct calculation of the diffusion coefficients in the reflector, unlike Lefèbvre-Lebigot which imposes these values for each type of reactor. It can also be based on different angular (SP_N beyond order 1) or spatial discretization formalisms (nodal expansion method, nodal analytical method, Raviart-Thomas finite element). These advantages could lead to further research about Baff-Refl at EDF.

TABLE DES MATIÈRES

REMERCIEMENTS	iii
RÉSUMÉ	iv
ABSTRACT	vi
LISTE DES FIGURES	ix
LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS	xii
LISTE DES ANNEXES	xiii
CHAPITRE 1 INTRODUCTION	1
1.1 Contexte	1
1.2 Objectifs	3
1.3 Plan de l'exposé	3
CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE	5
2.1 Équation de transport de Boltzmann	5
2.1.1 Forme intégrro-différentielle de l'équation de Boltzmann	5
2.1.2 Forme stationnaire	5
2.1.3 Forme caractéristique	6
2.1.4 Forme intégrale	7
2.1.5 Approximation multi-groupes	7
2.1.6 Approximation de la diffusion	8
2.1.7 Albédo	9
2.2 Méthodologie de simulation des cœurs en neutronique et application à EDF .	10
2.2.1 Calcul réseau (CARABAS)	10
2.3 Méthode Lefèbvre-Lebigot	16
2.4 Méthodes d'équivalence nodale	19
2.5 Raviart-Thomas	20
2.6 Procédure Baff-Refl	23
2.6.1 Résumé de la méthode	23
2.6.2 Étapes de la méthode Baff-Refl	24
2.7 Modélisation des fuites et condensation des coefficients de diffusion	29
2.7.1 Approche de Golfier-Vergain	29

2.7.2	Modèle Todorova Outscatter	30
2.7.3	Modèle Todorova Inscatter	30
CHAPITRE 3 DÉTAILS DE LA SOLUTION		31
3.1	VERSION5	31
3.2	Costo2D	33
3.3	Etapes du projet	33
CHAPITRE 4 RÉSULTATS THÉORIQUES ET EXPÉRIMENTAUX		40
4.1	Résultats DONJON	40
4.1.1	Tests sur les géométries	40
4.1.2	Courbes de flux dans KAIST	43
4.1.3	Courbes de flux dans le réacteur 2	44
4.1.4	Courbes de flux dans le réacteur 3	45
4.2	Impact d'une modification du D1	46
4.2.1	KAIST	46
4.2.2	Réacteur 2	49
4.3	Réacteurs homogènes	51
4.3.1	KAIST	51
4.3.2	Réacteur 2	54
4.3.3	Réacteur 3	55
4.4	Paramètres nominaux	57
4.4.1	KAIST	58
4.4.2	Réacteur 2	61
4.4.3	Réacteur 3	64
4.5	HZP	67
4.5.1	Réacteur 2	67
4.5.2	Réacteur 3	69
4.6	Comparaison Golfier-Vergain / Todorova	71
4.6.1	KAIST	72
4.6.2	Réacteur 2	74
4.6.3	Réacteur 3	76
CHAPITRE 5 CONCLUSION		78
RÉFÉRENCES		80
ANNEXES		82

LISTE DES FIGURES

Figure 2.1	Schéma du calcul à deux niveaux réalisé dans CARABAS	12
Figure 2.2	Schéma d'un maillage 4×4 sur un assemblage	13
Figure 2.3	Schéma d'une traverse de réflecteur en 1D avec un maillage S_N	16
Figure 2.4	Schéma des deux calculs à deux densités en eau différentes et des droites résultantes dans la méthode Lefèbvre-Libigot	18
Figure 2.5	Macro-géométrie cartésienne en 1D	20
Figure 2.6	Géométries relatives au calcul de référence et au calcul d'éléments finis	24
Figure 2.7	Schéma d'une interface entre deux mailles et des facteurs de disconti- nuité associés	27
Figure 3.1	Architecture de VERSION5	32
Figure 3.2	Schéma simplifié de la procédure de comparaison entre les deux modèles réflecteur	34
Figure 3.3	Maillage homogène ou 4×4 du réflecteur KAIST en 1D	35
Figure 3.4	Géométrie 1D du réflecteur KAIST avec 2 et 6 assemblages combustibles	35
Figure 3.5	Géométrie 1D du réflecteur KAIST avec et sans gap dans la zone nour- ricière	36
Figure 3.6	Schéma d'un quart de cœur KAIST 1A	38
Figure 3.7	Schéma des deux principaux assemblages du cœur KAIST 1A	38
Figure 3.8	Traverse 1D du réflecteur KAIST	39
Figure 4.1	Flux (rapides à gauche et thermiques à droite) dans la traverse KAIST avec un maillage homogène ou 4×4 dans le réflecteur	40
Figure 4.2	Flux (rapides à gauche et thermiques à droite) dans la traverse KAIST avec deux ou six assemblages nourriciers	41
Figure 4.3	Flux (rapides à gauche et thermiques à droite) dans la traverse KAIST avec et sans gap dans la zone nourricière	42
Figure 4.4	Schéma d'une traverse 1D du réflecteur KAIST	43
Figure 4.5	Courbes de flux (rapides à gauche et thermiques à droite) de référence et après équivalence Baff-Refl lors de la procédure Baff-Refl pour le réflecteur KAIST	43
Figure 4.6	Courbes de flux (rapides à gauche et thermiques à droite) de référence et après équivalence Baff-Refl lors de la procédure Baff-Refl pour le réflecteur 2	45

Figure 4.7	Courbes de flux (rapides à gauche et thermiques à droite) de référence et après équivalence Baff-Refl lors de la procédure Baff-Refl pour le réflecteur 3	45
Figure 4.8	Cartes 2D de pourcents d'erreur de puissance par rapport à Carabas avec le réflecteur du réacteur KAIST, comparaison valeur de D1 optimisée / par défaut	47
Figure 4.9	Tableau de résultats pour l'étude de l'optimisation du D1 sur le réacteur KAIST	47
Figure 4.10	Cartes 2D de pourcents d'erreur de puissance par rapport à Carabas avec le réflecteur à eau, comparaison valeur de D1 optimisée / par défaut	49
Figure 4.11	Tableau de résultats pour l'étude de l'optimisation du D1 sur le réacteur 2	50
Figure 4.12	Cartes 2D de pourcents d'erreur de puissance par rapport à Carabas avec le réflecteur du cœur KAIST homogène	52
Figure 4.13	Tableau de résultats pour le cas homogène sur le réacteur KAIST . .	52
Figure 4.14	Cartes 2D de pourcents d'erreur de puissance par rapport à Carabas avec le réflecteur à eau et un cœur homogène	54
Figure 4.15	Tableau de résultats pour le cas homogène sur le réacteur 2	54
Figure 4.16	Tableau de résultats pour le cas homogène sur le réacteur 3	55
Figure 4.17	Cartes 2D de pourcents d'erreur de puissance par rapport à Carabas avec le réflecteur lourd et un cœur homogène	56
Figure 4.18	Cartes 2D de pourcents d'erreur de puissance par rapport à Carabas avec le réflecteur du réacteur KAIST à un burn-up de 0 GWj/t . . .	58
Figure 4.19	Tableau de résultats pour le cas nominal sur le réacteur KAIST . . .	58
Figure 4.20	Cartes 2D de pourcents d'erreur de puissance par rapport à Carabas avec le réflecteur du réacteur KAIST à un burn-up de 20 GWj/t . . .	60
Figure 4.21	Tableau de résultats pour le cas nominal à 20 GWj/t sur le réacteur KAIST	60
Figure 4.22	Cartes 2D de pourcents d'erreur de puissance par rapport à Carabas avec le réflecteur à eau à un burn-up de 0 GWj/t	61
Figure 4.23	Tableau de résultats pour le cas nominal sur le réacteur 2	62
Figure 4.24	Cartes 2D de pourcents d'erreur de puissance par rapport à Carabas avec le réflecteur à eau à un burn-up de 7 GWj/t	63
Figure 4.25	Tableau de résultats pour le cas nominal à 7 GWj/t sur le réacteur 2	63
Figure 4.26	Cartes 2D de pourcents d'erreur de puissance par rapport à Carabas avec le réflecteur lourd à un burn-up de 0 GWj/t	64
Figure 4.27	Tableau de résultats pour le cas nominal sur le réacteur 3	65

Figure 4.28	Cartes 2D de pourcents d'erreur de puissance par rapport à Carabas avec le réflecteur lourd à un burn-up de 3 GWj/t	66
Figure 4.29	Tableau de résultats pour le cas nominal à 3 GWj/t sur le réacteur 3	67
Figure 4.30	Tableau de résultats pour le cas HZP sur le réacteur 2	67
Figure 4.31	Cartes 2D de pourcents d'erreur de puissance par rapport à Carabas avec le réflecteur à eau en conditions HZP	68
Figure 4.32	Tableau de résultats pour le cas HZP sur le réacteur 3	70
Figure 4.33	Cartes 2D de pourcents d'erreur de puissance par rapport à Carabas avec le réflecteur lourd en conditions HZP	70
Figure 4.34	Cartes 2D de pourcents d'erreur de puissance par rapport à Carabas avec le réflecteur du réacteur KAIST, comparaison modèle Todorova / Golfier-Vergain	72
Figure 4.35	Tableau de résultats pour la comparaison Todorova/Golfier-Vergain sur le réacteur KAIST	72
Figure 4.36	Cartes 2D de pourcents d'erreur de puissance par rapport à Carabas avec le réflecteur à eau, comparaison modèle Todorova / Golfier-Vergain	74
Figure 4.37	Tableau de résultats pour la comparaison Todorova/Golfier-Vergain sur le réacteur 2	74
Figure 4.38	Cartes 2D de pourcents d'erreur de puissance par rapport à Carabas avec le réflecteur lourd, comparaison modèle Todorova / Golfier-Vergain	76
Figure 4.39	Tableau de résultats pour la comparaison Todorova/Golfier-Vergain sur le réacteur 3	76

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

EDF	Électricité de France
1D/2D	monodimensionnel/bidimensionnel
REP	réacteur à eau pressurisée
EPR	Evolutionary Power Reactor
IAEA	International Atomic Energy Agency
UOX	oxyde d'uranium
MOX	oxyde mixte d'isotopes lourds
SPH	superhomogénéisation
JEFF	Joint Evaluated Fission and Fusion File
OECD	Organisation for Economic Co-operation and Development
NEA	Nuclear Energy Agency
CEA	Commissariat à l'Énergie Atomique
SHEM	Santamarina-Hfaiedh energy mesh
MoC	method of characteristics
NGET	normalised generalised equivalence theory
ADF	assembly discontinuity factor
NEM	nodal expansion method
ANM	analytic nodal method
API	application programming interface
HDF5	Hierarchical Data Format, Version 5

LISTE DES ANNEXES

Annexe A	Démonstration de la base Raviart-Thomas	82
----------	---	----

CHAPITRE 1 INTRODUCTION

1.1 Contexte

Dans le contexte actuel de dérèglement climatique, une évolution des moyens de production s'effectue progressivement, avec une volonté de diminuer leur impact sur l'environnement. L'énergie nucléaire est une perspective importante dans ce cadre du fait de sa faible empreinte carbone et de sa capacité énergétique élevée. De nombreux pays dans le monde développent leurs capacités nucléaires de production d'électricité comme la Chine, les Etats-Unis ou encore la France. Ces développements visent à améliorer les performances et la sûreté nucléaire.

Des simulations numériques des cœurs de réacteur sont donc menées pour optimiser la technologie tout en garantissant des marges de sécurité conservatrices. Cette mission s'applique au parc actuel pour prévoir et adapter leur évolution, et aux parcs futurs pour établir leur dimensionnement. Dans tous les cas, le compromis entre la précision et le temps de calcul vise à être optimisé, avec des comparaisons aux résultats expérimentaux et aux modèles les plus précis (mais trop longs pour un usage dans des applications industrielles) disponibles. La simulation des cœurs permet donc de diriger les choix de conception, piloter les réacteurs en optimisant la répartition de la puissance dans le cœur et assurer la sécurité avec une précision suffisante pour estimer des marges de sécurité adaptées.

Aujourd'hui, les Réacteurs à Eau Pressurisée (REPs) sont les réacteurs nucléaires les plus répandus dans le monde puisqu'ils représentent 65% du parc nucléaire mondial (IAEA 2023). L'utilisation d'eau légère comme modérateur et caloporteur est un atout de cette technologie car elle permet de ralentir efficacement les neutrons à un coût inférieur par litre à celui de l'eau lourde. Plusieurs combustibles sont utilisables : par exemple UOX (Oxyde d'Uranium), enrichi en Uranium 235 entre 3 à 5%, ou MOX (Oxyde Mixte d'isotopes lourds). L'UOX est un combustible à base d'uranium tandis que le MOX contient à la fois de l'uranium et du plutonium obtenus par le recyclage et traitement des combustibles usés. En France, l'EPR (Evolutionary Power Reactor) est la génération de réacteurs que Framatome construit actuellement.

La simulation neutronique d'un cœur de réacteur nucléaire suit un schéma « en deux étapes ». Cela consiste à effectuer en premier lieu un calcul fin pour le type d'assemblage souhaité puis un calcul cœur entier prenant en entrée les résultats du premier calcul et en interpolant les valeurs obtenues. Procéder de cette manière permet une diminution importante du temps de calcul par rapport à un calcul fin sur tout le cœur.

La première étape ou *calcul de réseau* est un calcul précis sur un maillage spatial fin en prenant en compte un nombre élevé de groupes d'énergie (de plusieurs dizaines à quelques centaines) dans lesquels les neutrons sont classés en fonction de leur vitesse. Les flux neutroniques obtenus par le calcul précis sont utilisés pour homogénéiser les données neutroniques sur des mailles plus grossières et condensées à 2 groupes d'énergie (un groupe rapide et un groupe thermique). Cette opération a lieu en assurant la préservation des taux de réaction. Les mailles sont généralement de la taille d'un assemblage complet mais peuvent être plus fines. La seconde étape est un calcul de cœur entier réalisé avec la théorie de la diffusion neutronique.

Le calcul de réseau est réalisé en *mode fondamental*, c'est-à-dire qu'il est effectué avec l'hypothèse du milieu infini donc en supposant que l'assemblage est entouré d'autres assemblages identiques sur un plan infini. Les paramètres de contre-réaction, qui peuvent être la concentration en bore, la température modérateur et/ou combustible ou encore le burnup, sont tabulés pour être interpolés dans le calcul cœur. L'hypothèse principale du schéma à deux étapes est de supposer que les propriétés dans le mode fondamental sont suffisamment proches de celles dans le cœur malgré des flux différents influant sur l'étape de condensation/homogénéisation. L'approximation du mode fondamental est une simplification qui peut induire des erreurs conséquentes, en particulier pour des plans de chargement très hétérogènes ou en présence de barres de contrôle. Au bord du cœur, des erreurs apparaissent aussi puisque les assemblages sont adjacents au réflecteur et non seulement à des assemblages. Pour obtenir des résultats cohérents au bord du cœur, le réflecteur est modélisé dans un calcul à part, en mode non fondamental car les simulations réflecteur utilisent la condition limite de vide à l'extérieur du cœur, ce qui signifie une condition aux frontières de courant réentrant nul, incompatible avec les conditions de réflexion et de translation en mode fondamental.

EDF utilise la méthode Lefèbvre-Lebigot pour modéliser ses réflecteurs. Elle peut être assimilée à une méthode d'équivalence visant à conserver les courbes de réponse à l'interface entre combustible et réflecteur par rapport à celles obtenues dans un calcul de référence à une dimension. Le but est de calculer les propriétés équivalentes du réflecteur et ainsi prendre en compte l'impact du réflecteur sur la zone combustible, sans chercher à obtenir un flux physique dans le réflecteur. La méthode Baff-Refl partage le même objectif mais avec une stratégie différente. Les propriétés du réflecteur sont calculées avec un calcul de référence. Des facteurs de discontinuité sont ensuite calculés de façon à ce qu'un calcul grossier à deux groupes d'énergie produise les mêmes taux de réactions que le calcul de référence sur des mailles homogènes. Dans cette étude, les calculs sont menés à une dimension, ce qui permet de convertir les facteurs de discontinuité en facteurs d'équivalence, comme les facteurs SPH (superhomogénéisation) utilisés lors des calculs assemblages. La formulation de Baff-Refl uti-

lisée dans ce projet s’appuie sur la méthode d’éléments finis Raviart-Thomas. La formulation originale de Baff-Refl utilisée dans la plateforme SCIENCE de Framatome s’appuyait sur la méthode d’expansion nodale.

1.2 Objectifs

EDF utilise uniquement la méthode Lefèbvre-Lebigot pour modéliser des réflecteurs dans des calculs cœur en théorie de la diffusion. Il est intéressant de comparer une méthode différente pour mieux comprendre l’impact de chacune sur les résultats des calculs cœur et les mettre en perspective ainsi que faire de la validation croisée entre les deux méthodes. Un des intérêts de Baff-Refl est qu’il est possible de l’implémenter en 3D, ce qui est une perspective contrairement à Lefèbvre-Lebigot qui est utilisable uniquement en 1D par rapport aux références de calcul. La méthode Baff-Refl se distingue aussi de Lefèbvre-Lebigot par la possibilité de calculer les coefficients de diffusion du réflecteur. De plus, bien que Lefèbvre-Lebigot produise des résultats très satisfaisants, il est bon de comparer d’autres méthodes dans le cas où une nouvelle comme Baff-Refl pourrait permettre de diminuer encore les erreurs par rapport aux références de calcul. Cette étude peut aussi servir de première approche vers un développement dans le futur au sein de EDF de Baff-Refl s’appuyant sur la méthode SP_3 à 8 groupes d’énergie, déjà possible dans DONJON.

Si Baff-Refl produit de bons résultats, cette méthode pourrait faire l’objet de plus de recherche dans le futur en se plaçant dans d’autres contextes que celui de cette étude, en variant :

- Les environnements de calcul (pas forcément DONJON pour simuler les réflecteurs et pas forcément COCAGNE pour mener les calculs cœur)
- Les formulations de Baff-Refl (Raviart-Thomas dans cette étude)
- Les cas simulés (réacteurs différents, compositions de cœurs différentes)

De plus, si Baff-Refl s’avère pertinente, EDF pourrait choisir d’intégrer cette méthode à ses chaînes de calcul à long terme.

Au cours de cette étude, différents types de réflecteur ont été simulés avec la méthode Baff-Refl dans l’environnement de calculs neutroniques DONJON. Les bibliothèques obtenues ont été placées en entrée de l’environnement de codes de EDF nommé COCAGNE pour y comparer les performances des calculs cœur avec Lefèbvre-Lebigot et Baff-Refl.

1.3 Plan de l’exposé

Ce rapport se détaille en 5 parties. Après une première partie introductive, des éléments de théorie seront présentés. l’équation de Boltzmann qui est résolue au cours des calculs

neutroniques sera détaillée. La méthodologie de simulation des cœurs en neutronique sera ensuite expliquée avec le cas particulier de la chaîne de calculs ODYSSEE de EDF dans laquelle se place cette étude. La théorie des méthodes Lefèvre-Lebigot et Baff-Refl sera finalement présentée. Dans le chapitre 3, les environnements de calculs ainsi que les étapes suivies lors de cette étude seront précisées. Les résultats et analyses des tests associés se trouveront dans le chapitre 4. Enfin, le chapitre 5 synthétisera les grands points de cette étude et la conclura en précisant ses perspectives.

CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE

2.1 Équation de transport de Boltzmann

2.1.1 Forme intégrô-différentielle de l'équation de Boltzmann

Les codes de calcul déterministes s'appuient sur l'équation de transport de Boltzmann qui peut s'écrire sous la forme suivante¹ [1] :

$$\frac{1}{V_n} \frac{\partial}{\partial t} \phi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}, t) + \mathbf{\Omega} \cdot \nabla \phi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}, t) + \Sigma(\mathbf{r}, E, t) \phi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}, t) = Q(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}, t). \quad (2.1)$$

avec :

- V_n : module de la vitesse des neutrons dont l'énergie est $E = \frac{1}{2}m_n V_n^2$ et la masse d'un neutron est m_n
- $\phi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}, t) = n(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}, t)V_n$: flux neutronique angulaire à la position $\mathbf{r}$, dans la direction $\mathbf{\Omega}$, à l'instant t , associé à l'énergie E
- $\Sigma(\mathbf{r}, E, t)$: section efficace macroscopique totale du matériau
- $Q(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}, t)$: source neutronique, c'est-à-dire la quantité de neutrons produits dans le volume d^3r . Cette quantité regroupe les neutrons ralentis et déviés par collision et ceux créés par fission (prompte et retardée).

Cette équation signifie que, dans un volume d^3r , la variation temporelle du flux de neutrons est égale au nombre de neutrons créés (terme Q incluant les neutrons produits par fission ainsi que ceux déviés par collisions et provenant de sources externes) auxquels on ajoute les neutrons entrant dans le volume et auxquels on retire les neutrons sortant ainsi que ceux réalisant une réaction nucléaire. On a supposé que les noyaux étaient à l'équilibre et que les neutrons étaient non relativistes, n'interagissant pas entre eux mais se déplaçant en lignes droites entre les collisions.

Différentes hypothèses communément utilisées pour résoudre cette équation sont démontrées dans cette partie.

2.1.2 Forme stationnaire

Une première simplification possible est l'hypothèse stationnaire permettant de s'affranchir du terme temporel :

1. Les vecteurs sont en gras.

$$\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \Phi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) + \Sigma(\mathbf{r}, E) \Phi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) = Q(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}). \quad (2.2)$$

Pour obtenir cette forme, on a introduit dans le terme source Q le facteur de multiplication effectif k_{eff} pour compenser l'absence du terme dépendant du temps et ainsi conserver l'équilibre entre les neutrons perdus et créés. Le terme source s'écrit alors :

$$\begin{aligned} Q(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) = & \frac{1}{2\pi} \int_{4\pi} d^2\Omega' \int_0^\infty dE' \Sigma_s(\mathbf{r}, E \leftarrow E', \boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{\Omega}') \Phi(\mathbf{r}, E', \boldsymbol{\Omega}') \\ & + \frac{1}{4\pi k_{eff}} \sum_{j=1}^{J_{fiss}} \chi_j(E) \int_0^\infty dE' \nu \Sigma_{f,j}(\mathbf{r}, E') \Phi(\mathbf{r}, E'). \end{aligned} \quad (2.3)$$

Le premier et le deuxième terme à droite de l'égalité représentent respectivement :

- l'ensemble des neutrons créés ou déviés par diffusion dans la direction $\boldsymbol{\Omega}$ à l'énergie E à partir de tous les neutrons d'énergies E' compris entre 0 et $+\infty$ et des directions $\boldsymbol{\Omega}'$.
- l'ensemble des neutrons d'énergie E dans la direction $\boldsymbol{\Omega}$ produits par fission avec des neutrons d'énergie E' .

Σ_s est la section efficace macroscopique différentielle de diffusion. $\chi_j(E)$ représente la distribution liée à la probabilité qu'un neutron émis lors de la fission de l'isotope j soit émis à l'énergie E .

$\nu \Sigma_{f,j}(\mathbf{r}, E')$ correspond au produit du nombre moyen de neutrons émis par fission et de la section efficace macroscopique de fission de l'isotope j . $\Phi(\mathbf{r}, E')$ est le flux scalaire à la position $\mathbf{r}$, associé à l'énergie E' .

D'autres formes de l'équation de transport sont possibles et le choix de la forme de l'équation dépend de la méthode de résolution que le neutronicien choisit.

2.1.3 Forme caractéristique

En modélisation neutronique, il est commun de tracer des droites dans la géométrie étudiée pour estimer la présence et la position des neutrons dessus. Une telle droite se nomme une « caractéristique » et a une direction $\boldsymbol{\Omega}$. Sur la caractéristique, la position du neutron est notée $\mathbf{r} - s\boldsymbol{\Omega}$ avec $\mathbf{r}$ étant une position appartenant à la caractéristique. On a alors l'équation sous forme « caractéristique » suivante à partir de la formule (2.3) :

$$-\frac{d}{ds}\phi(\mathbf{r}-s\boldsymbol{\Omega}, E, \boldsymbol{\Omega}) + \Sigma(\mathbf{r}-s\boldsymbol{\Omega}, E)\phi(\mathbf{r}-s\boldsymbol{\Omega}, E, \boldsymbol{\Omega}) = Q(\mathbf{r}-s\boldsymbol{\Omega}, E, \boldsymbol{\Omega}). \quad (2.4)$$

2.1.4 Forme intégrale

Enfin, si l'on intègre l'équation (2.4) sur une caractéristique et à l'intérieur d'un domaine infini, on obtient la forme intégrale de l'équation de transport :

$$\phi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) = \int_0^{+\infty} ds e^{-\tau_{opt}(s,E)} Q(\mathbf{r}-s\boldsymbol{\Omega}, E, \boldsymbol{\Omega}). \quad (2.5)$$

Dans un domaine borné à l'intérieur duquel la caractéristique commence au point $\mathbf{r}_f$, on obtient :

$$\phi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) = e^{-\tau_{opt}(b,E)} \phi(\mathbf{r}_f, E, \boldsymbol{\Omega}) + \int_0^b ds e^{-\tau_{opt}(s,E)} Q(\mathbf{r}-s\boldsymbol{\Omega}, E, \boldsymbol{\Omega}) \quad (2.6)$$

avec $b = |\mathbf{r}-\mathbf{r}_f|$ et τ_{opt} le parcours optique, représentant la distance parcourue par un neutron avant de subir une interaction :

$$\tau_{opt}(s, E) = \int_0^s ds' \Sigma(\mathbf{r}-s'\boldsymbol{\Omega}, E). \quad (2.7)$$

2.1.5 Approximation multi-groupes

Pour résoudre numériquement l'équation de transport, l'énergie est séparée en plusieurs groupes sur une gamme allant de 0 à 20 MeV. Le flux neutronique multigroupe $\phi^g(\mathbf{r})$ appartenant au groupe d'énergie g apparait :

$$\phi^g(\mathbf{r}) = \int_{E_{g-1}}^{E_g} \phi(\mathbf{r}, E) dE,$$

E_{g-1} et E_g étant les bornes du groupe d'énergies.

La condensation des sections efficaces suit la formule suivante :

$$\Sigma^g = \frac{\int_{E_{g-1}}^{E_g} \Sigma(E) \phi(\mathbf{r}, E) dE}{\int_{E_{g-1}}^{E_g} \phi(\mathbf{r}, E) dE}. \quad (2.9)$$

La condensation revient à conserver les taux de réaction τ , ce qu'on remarque si l'on exprime le taux de réaction à partir des macro-groupes :

$$\begin{aligned} \tau_g &= \Sigma^g \phi^g(\mathbf{r}) \\ &= \left(\frac{\int_{E_{g-1}}^{E_g} \Sigma(E) \phi(\mathbf{r}, E) dE}{\int_{E_{g-1}}^{E_g} \phi(\mathbf{r}, E) dE} \right) \left(\int_{E_{g-1}}^{E_g} \phi(\mathbf{r}, E) dE \right) \\ &= \int_{E_{g-1}}^{E_g} \Sigma(E) \phi(\mathbf{r}, E) dE \\ &= \tau. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Effectuer correctement la condensation est essentiel lors d'un calcul de neutronique car une mauvaise conservation des taux de réaction entraine directement des erreurs sur la puissance finale calculée, cette dernière étant proportionnelle aux taux de réaction.

L'équation de transport multigroupe devient :

$$\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \Phi_g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) + \Sigma_g(\mathbf{r}) \Phi_g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = Q_g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) \quad (2.11)$$

avec :

$$Q_g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \sum_{h=1}^G \int_{4\pi} d^2\Omega' \Sigma_{s,g \leftarrow h}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}') \Phi_h(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}') + \frac{1}{4\pi k_{\text{eff}}} \sum_{j=1}^{J_{\text{fiss}}} \chi_{jg} \sum_{h=1}^G \nu \Sigma_{f,j,h}(\mathbf{r}) \Phi_h(\mathbf{r}). \quad (2.12)$$

La résolution de l'équation a lieu dans l'ordre des énergies les plus élevées vers les plus faibles en prenant en compte à chaque itération les neutrons ralentis dans le terme de collision.

2.1.6 Approximation de la diffusion

Les calculs à l'échelle du cœur entier se basent fréquemment sur l'approximation de la diffusion. Il s'agit d'un développement en harmoniques sphériques au premier ordre basé sur

l'hypothèse d'anisotropie linéaire du flux neutronique :

$$\Phi_g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} \left[\Phi_g(\mathbf{r}) + 3 \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{J}_g(\mathbf{r}) \right] \quad (2.13)$$

avec :

- $\Phi_g(\mathbf{r}) = \int_{4\pi} d^2\Omega \Phi_g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega})$ le flux neutronique intégré ou flux scalaire.
- $\mathbf{J}_g(\mathbf{r}) = \int_{4\pi} d^2\Omega \boldsymbol{\Omega} \Phi_g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega})$ le courant neutronique intégré.

On injecte finalement le développement (2.13) dans l'équation de transport multigroupe (2.11) et on modifie le terme de fission afin d'y regrouper l'ensemble des isotopes fissiles, en introduisant un spectre moyenné pondéré par les taux de fission propres à chaque isotope fissile. On obtient alors l'équation suivante :

$$\Sigma_g(\mathbf{r}) \Phi_g(\mathbf{r}) + \nabla \cdot \mathbf{J}_g(\mathbf{r}) = \sum_{h=1}^G \Sigma_{s,g \leftarrow h}(\mathbf{r}) \Phi_h(\mathbf{r}) + \frac{\chi(E)}{k_{\text{eff}}} \sum_{h=1}^G \nu \Sigma_{f,h}(\mathbf{r}) \Phi_h(\mathbf{r}). \quad (2.14)$$

Pour arriver à l'équation de la diffusion, la loi de Fick est à présent appliquée. Cette loi empirique prend la forme d'une formule reliant le courant neutronique, coefficient de diffusion et gradient du flux à travers la loi de Fick :

$$\mathbf{J}_g(\mathbf{r}) = -D_g(\mathbf{r}) \nabla \Phi_g(\mathbf{r}). \quad (2.15)$$

Elle signifie que le courant neutronique va naturellement des zones de flux élevé aux zones de flux faible. Cette approximation, ajoutée à la précédente, mène à l'équation de la diffusion :

$$-\nabla \cdot [D_g(\mathbf{r}) \nabla \Phi_g(\mathbf{r})] + \Sigma_g(\mathbf{r}) \Phi_g(\mathbf{r}) = \sum_{h=1}^G \Sigma_{s,g \leftarrow h}(\mathbf{r}) \Phi_h(\mathbf{r}) + \frac{\chi(E)}{k_{\text{eff}}} \sum_{h=1}^G \nu \Sigma_{f,h}(\mathbf{r}) \Phi_h(\mathbf{r}). \quad (2.16)$$

2.1.7 Albédo

Dans le cas multigroupe, on définit l'albédo d'une surface par $\beta_g(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{J}_g^-(\mathbf{r})}{\mathbf{J}_g^+(\mathbf{r})}$ avec $\mathbf{J}_g^-(\mathbf{r})$ le flux entrant et $\mathbf{J}_g^+(\mathbf{r})$ le flux sortant. Il vaut 0 si une condition de vide est fixée et 1 avec la condition de réflexion. Il trouve sa place dans l'expression suivante :

$$D_g(\mathbf{r}) \nabla \Phi_g(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{N}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \frac{1 - \beta_g(\mathbf{r})}{1 + \beta_g(\mathbf{r})} \Phi_g(\mathbf{r}) = 0 \quad (2.17)$$

où $\mathbf{N}(\mathbf{r})$ est un vecteur normal sortant de la surface considérée.

2.2 Méthodologie de simulation des cœurs en neutronique et application à EDF

Les simulations de cœur de réacteur nucléaire s'appuient sur des bibliothèques nucléaires, c'est-à-dire des tableaux de sections efficaces en fonction de l'énergie du neutron incident, sur une plage totale allant de 0 à 20 MeV. Ces bibliothèques proviennent d'évaluations de données nucléaires réalisées notamment par le groupe JEFF de l'OCDE/NEA. Elles ne sont néanmoins pas utilisées directement telles qu'évaluées par JEFF, mais condensées sur le maillage multigroupe du code de réseau. En effet, différents acteurs dans le monde, comme le CEA en France, condensent ces données neutroniques à quelques centaines de groupes d'énergie. Cela permet d'obtenir un maillage énergétique adapté au code de calcul réseau considéré. Les groupes sont resserrés sur les groupes d'énergie faible pour prendre en compte le phénomène de ralentissement neutronique. De plus, les bibliothèques obtenues sont plus légères de sorte à être directement utilisées en entrée des codes de calcul de réseau et réduire le temps de calcul lié à la prise en compte de ces données d'entrée.

Pour simuler un cœur de réacteur nucléaire, la méthodologie consiste à réaliser d'abord un calcul réseau prenant en entrée une bibliothèque de données nucléaires puis un calcul cœur entier prenant alors en entrée les résultats du calcul réseau tabulés en fonction d'un ou plusieurs paramètres comme la concentration en bore, la température ou le burnup. Le calcul cœur prend aussi en entrée des bibliothèques réflecteur, qui sont calculées en prenant aussi en entrée les assemblages combustibles. Cette stratégie permet de réduire grandement le temps de calcul total et permet l'usage de ces codes dans le cadre d'applications industrielles.

EDF utilise de telles bibliothèques dans la chaîne de calcul ODYSSEE [2]. Il s'agit d'un ensemble de codes développés par EDF et Framatome. Elle permet de réaliser des études de sûreté des réacteurs pour prévoir leurs comportements en fonctionnement normal, incidentel et accidentel ainsi que mettre en place des plans de chargement. La chaîne de calcul ODYSSEE vise à remplacer les chaînes SCIENCE de Framatome et Cassiopée de EDF. Le code de calcul de transport réseau CARABAS/APOLLO2 [3] [4] et le code de cœur COCAGNE [2] font partie de la chaîne.

2.2.1 Calcul réseau (CARABAS)

CARABAS intégrant le code APOLLO2 du CEA permet de générer les bibliothèques assemblages et réflecteurs pour alimenter COCAGNE. Il permet aussi de réaliser des calculs cœur de référence en transport 2D. Les simulations s'appuient sur une bibliothèque CEA520, à 281 groupes d'énergie (maillage SHEMA) issu d'une collaboration entre EDF, le CEA et Framatome pour posséder une bibliothèque commune et de référence. Le calcul réseau se divise

en plusieurs parties [5] : autoprotection, calcul à un ou deux niveaux, homogénéisation et condensation.

Autoprotection

L'autoprotection [6] consiste à adapter les sections efficaces microscopiques multigroupes en entrée du calcul, à 281 groupes chez EDF, pour rattraper l'erreur de condensation entre sections continues en énergie et sections à 281 groupes. Cette étape permet de conserver les taux de réaction alors que les flux neutroniques varient grandement au sein des matériaux des assemblages étudiés. En effet, les matériaux présentant des résonances des sections efficaces (de l'ordre de 1000 fois supérieures aux valeurs plates) entraînent une chute de flux spatiale et en énergie. L'effet d'autoprotection est spatial car davantage de réactions ont lieu à la surface de la pastille combustible à cause de la forte probabilité d'interaction, et en énergie car les neutrons qui réagissent sont ceux dont l'énergie est comprise dans la gamme correspondant au pic de section efficace. Le flux neutronique de ces neutrons est donc significativement plus faible au centre de la pastille combustible ou d'absorbant. C'est pour prendre en compte l'impact de cette variation rapide de flux sur la condensation des sections efficaces continues en énergie qu'une autoprotection est réalisée. Deux méthodes sont couramment utilisées : celle de Sanchez-Coste (originellement développée par Livolant-Jeanpierre dans APOLLO1) et celle des sous-groupes. Cette dernière est une méthode de référence, plus coûteuse et non recommandée pour des applications industrielles. La méthode de Sanchez-Coste est utilisée pour les applications industrielles.

Résolution de l'équation de transport ; homogénéisation et condensation

Une fois les sections efficaces autoprotégées déterminées, l'équation de transport est résolue sur un maillage spatial et énergétique fin. Dans la chaîne ODYSSEE, cette résolution a lieu au cours d'un calcul à deux niveaux (voir la figure 2.1) :

- 1 : Un flux de premier niveau à 281 groupes est calculé à l'aide de la méthode des probabilités de collision (ou méthode P_{ij}). Les sections efficaces à 281 groupes obtenues sont ensuite condensées à 36 groupes en menant un deuxième calcul avec la méthode des probabilités de collision (à 36 groupes) et en y appliquant des facteurs SPH pour corriger les sections efficaces homogénéisées et condensées. Un calcul de fuites est mené pour être appliqué au second niveau.
- 2 : Un flux de deuxième niveau sur un maillage spatial plus fin que lors des deux calculs P_{ij} et prenant en compte les sections efficaces à 36 groupes est calculé avec la méthode des caractéristiques (*MoC*).

$$\Sigma^g = \frac{\sum_{i \in V} V_i \Sigma_i^g \phi_i^g}{\sum_{i \in V} V_i \phi_i^g}. \quad (2.18)$$

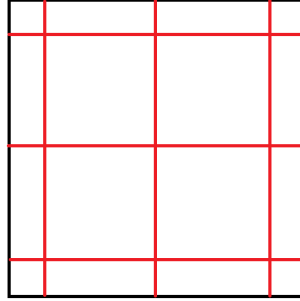


FIGURE 2.2 Schéma d'un maillage 4×4 sur un assemblage

Les bibliothèques de données en sortie de CARABAS

A la fin du calcul réseau, les sections efficaces macroscopiques et flux sont stockés dans des bibliothèques de données neutroniques appelées APEX. Elles sont ensuite converties dans un format lisible par le code de cœur COCAGNE, le format DKZip.

Du point de vue du maillage en énergie, le code CARABAS est en mesure de générer le maillage spécifié par l'utilisateur. En pratique, les maillages énergétiques les plus couramment employés dans les calculs de cœur comportent 2, 4, 6 ou 8 groupes (en pratique, EDF n'utilise presque que 2 ou 8 groupes). Ces découpages sont généralement standardisés afin de permettre des comparaisons cohérentes entre différentes études. Néanmoins, la détermination d'un maillage optimisé en fonction du nombre de groupes reste une problématique ouverte.

Calcul cœur (COCAGNE)

COCAGNE permet de réaliser des calculs cœur à partir de bibliothèques assemblages et réflecteurs provenant de CARABAS. Le calcul cœur prend en entrée les flux et sections efficaces de sortie du calcul réseau et les données réflecteur. Celui-ci est modélisé avec la méthode Lefèbvre-Lebigot dans la chaîne ODYSSEE. Elle sera détaillée dans la suite de cette partie. Dans le cadre de la chaîne ODYSSEE, le calcul cœur complet commence par un calcul de flux sur un maillage à deux groupes d'énergie en théorie de la diffusion ou sur un maillage à 8 groupes d'énergie en théorie SP_N . Or si on recalcule un flux neutronique à 2 groupes avec

le solveur SP_N , on obtient un flux neutronique (et donc des taux de réactions) différents de ceux du calcul de référence. Leurs valeurs sont donc corrigées avec une équivalence utilisant des facteurs SPH (« super homogénéisation ») s'appuyant sur les taux de réactions provenant du calcul réseau. En considérant ϕ_M^G le flux de référence pour le groupe G dans le milieu M , $\tilde{\phi}_M^G$ le flux calculé dans le code de cœur et Σ_M^G et $\tilde{\Sigma}_M^G$ les sections efficaces macroscopiques associées, on exprime le facteur SPH pour le groupe G dans le milieu M :

$$\lambda_M^G = \frac{\phi_M^G}{\tilde{\phi}_M^G} = \left(\frac{\tilde{\Sigma}_M^G \tilde{\phi}_M^G}{\Sigma_M^G \phi_M^G} \right) \frac{\phi_M^G}{\tilde{\phi}_M^G} = \frac{\tilde{\Sigma}_M^G}{\Sigma_M^G}.$$

Le rapport $\left(\frac{\tilde{\Sigma}_M^G \tilde{\phi}_M^G}{\Sigma_M^G \phi_M^G} \right)$ vaut 1 par hypothèse d'équivalence. Cette procédure d'équivalence est répétée itérativement avec le nouveau flux $\tilde{\phi}_M^G$ et les nouvelles sections efficaces $\tilde{\Sigma}_M^G$. Le processus s'arrête lorsque le flux calculé est suffisamment proche du flux de référence. En pratique, cette méthode ne conserve les taux de réaction que dans une configuration où l'assemblage est répété à l'infini, car le calcul d'équivalence est réalisé dans ces conditions.

Les sections efficaces de production de neutrons étant isotropes pour les différents matériaux du cœur, la connaissance du flux scalaire suffit pour déterminer la distribution spatiale de la puissance, sans avoir besoin du flux angulaire. L'évolution temporelle de la concentration des isotopes dans les assemblages doit également être modélisée. On utilise pour cela la variable « taux d'irradiation » (ou burnup) qui mesure la quantité d'énergie extraite d'une masse donnée de combustible nucléaire en GWj/t plutôt que le temps, car elle représente directement l'usure du combustible. Cette modélisation des concentrations isotopiques repose sur la résolution de l'équation de Bateman, en conservant les valeurs du flux neutronique obtenues par la solution de l'équation de Boltzmann.

Deux schémas de calcul dans ODYSSEE

Une fonctionnalité essentielle de la chaîne ODYSSEE pour l'utilisateur est le choix du schéma de calcul. Selon les besoins et notamment les contraintes de temps, il est possible d'ajuster la précision des maillages spatial, énergétique et angulaire : un calcul rapide mais moins précis correspond au schéma industriel, ou un calcul plus long et plus précis relève du schéma avancé de calcul neutronique.

Schéma industriel

Le schéma industriel est celui utilisé typiquement pour mener des études de sûreté de plans de chargement avec des calculs de moins de 6 heures. Il est donc principalement employé en exploitation. Ce schéma repose sur les équations les plus simples en neutronique : les équations de la diffusion. Ces équations sont similaires aux équations SP_1 en introduisant une loi de Fick et en supposant l'isotropie des chocs, ce qui permet de ne pas tenir compte des sections de scattering anisotropes :

$$\begin{cases} \mathbf{J}^g(\mathbf{r}) = -\frac{1}{3\Sigma_{tot}^g(\mathbf{r})} \nabla \phi^g(\mathbf{r}) \\ -\nabla \cdot \mathbf{J}^g + \Sigma_{tot}^g \phi^g(\mathbf{r}) = S^g(\mathbf{r}) \end{cases}$$

avec $D^g(\mathbf{r}) = \frac{1}{3\Sigma_{tot}^g(\mathbf{r})}$ représentant le coefficient de diffusion.

En théorie de la diffusion, le nombre de groupes d'énergie se limite généralement à deux : les neutrons rapides et les neutrons thermiques. Le maillage, sans atteindre la précision d'un calcul crayon par crayon, est de type multi-domaine.

Dans ce schéma industriel, les réflecteurs utilisés sont ceux du modèle Lefebvre-Lebigot. Il s'agit de réflecteurs homogènes dont le modèle ne dépend que de quelques variables. Ils sont donc facilement implémentables avec un temps de calcul réduit tout en rendant compte de la plupart des effets physiques.

Cette étude se place dans le cadre du schéma industriel.

Schémas avancés

Pour les schémas de calcul avancés en neutronique (SCAN), le choix des maillages est plus étendu. La plupart du temps, on utilise un maillage spatial crayon par crayon pour un meilleur suivi de l'évolution de la distribution de puissance. Un maillage à huit groupes est habituellement choisi dans le cadre de la résolution SP_3 . Les schémas avancés permettent également d'effectuer des calculs SP_N ou S_N .

Dans SCAN, il est obligatoire de choisir des réflecteurs en deux dimensions, calculés par CARABAS à l'échelle du cœur. Ces calculs sont plus précis car ils rendent compte des effets bidimensionnels induits par le réflecteur. Les sections d'un réflecteur 2D sont ainsi obtenues d'une manière proche de celle d'un assemblage combustible. Deux différences principales subsistent cependant :

- Le calcul d'un réflecteur dans CARABAS est effectué à l'échelle du cœur entier, alors que l'assemblage est calculé dans un milieu infini.

- L'étape d'équivalence superhomogène décrite en 2.3 n'est pas applicable pour un réflecteur, car les taux de réaction de fission γ sont nuls, le réflecteur n'étant pas un milieu fissile.

Calcul de référence (dans CARABAS)

Les puissances en sortie de calcul cœur peuvent être comparées à un calcul de référence, plus long et précis. Au-delà des calculs de bibliothèques, CARABAS peut mener de tels calculs de référence en 2 dimensions. Dans ce cas, le réflecteur est maillé finement comme les assemblages et l'équation de transport y est résolue de la même manière que pour les assemblages. Ce calcul constitue la référence dans cette étude, à laquelle les résultats COCAGNE seront comparés.

2.3 Méthode Lefèbvre-Lebigot

La méthode Lefèbvre-Lebigot [7] est une manière de simuler un réflecteur en calculant des grandeurs mathématiques permettant de conserver des courbes de réponse à l'interface entre le combustible et le réflecteur provenant d'un calcul de référence. Le réflecteur est approximé en une traverse 1D telle que sur la figure 2.3 avec la zone symbolisant le cœur (zone combustible ou nourricière) sur la gauche puis les couches d'eau et d'acier formant le réflecteur. L'équivalence des courbes de réponse est réalisée à l'interface entre le combustible et le réflecteur pour mener des calculs au sein du cœur en prenant en compte le comportement du réflecteur adjacent. Lefèbvre-Lebigot s'appuie sur un calcul de référence avec la méthode S_N à 281 groupes et sur des équations déterminées à l'aide de l'approximation de la diffusion à deux groupes d'énergie. Les équations sont présentées ici.

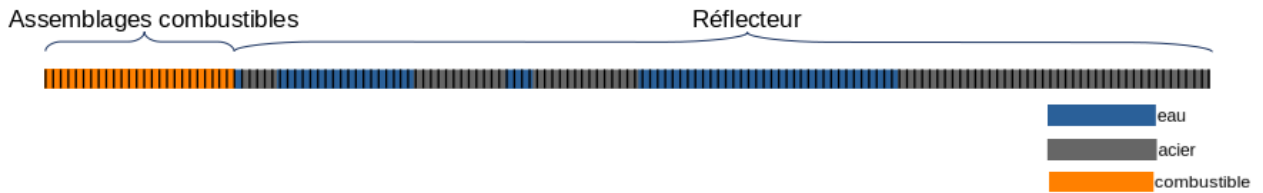


FIGURE 2.3 Schéma d'une traverse de réflecteur en 1D avec un maillage S_N

Dans un réacteur homogène en diffusion à deux groupes d'énergie, on peut écrire les équations

suivantes :

$$\begin{cases} -D_1 \Delta \phi_1 + (\Sigma_{a,1} + \Sigma_R) \phi_1 = \Sigma_U \phi_2 \\ -D_2 \Delta \phi_2 + (\Sigma_{a,2} + \Sigma_U) \phi_2 = \Sigma_R \phi_1 \\ \mathbf{J}_1 = -D_1 \nabla \phi_1 \\ \mathbf{J}_2 = -D_2 \nabla \phi_2 \end{cases} \quad (2.19)$$

Avec :

- D_i : Coefficient de diffusion du groupe i
- ϕ_i : Flux neutronique dans le groupe i
- $\Sigma_{a,i}$: Section efficace d'absorption dans le groupe i
- Σ_R : Section efficace de ralentissement (ou downscattering, c'est-à-dire le passage du groupe 1 (rapide) à 2 (thermique))
- Σ_U : Section efficace de diffusion avec gain d'énergie (ou upscattering, c'est-à-dire le passage du groupe 2 (thermique) à 1 (rapide))
- $\mathbf{J}_i$: Courant neutronique dans le groupe i

À une dimension, ce système devient :

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 \phi_1}{\partial x^2}(x) - \frac{1}{L_1^2} \phi_1(x) = \frac{1}{L_U^2} \phi_2(x) \\ \frac{\partial^2 \phi_2}{\partial x^2}(x) - \frac{1}{L_2^2} \phi_2(x) = \frac{1}{L_R^2} \phi_1(x) \\ J_1(x) = -D_1 \nabla \phi_1(x) \\ J_2(x) = -D_2 \nabla \phi_2(x) \end{cases} \quad (2.20)$$

Avec les constantes L_1, L_2, L_U et L_R :

$$L_1 = \sqrt{\frac{D_1}{\Sigma_{a,1} + \Sigma_R}}, \quad L_2 = \sqrt{\frac{D_2}{\Sigma_{a,2} + \Sigma_U}}, \quad L_U = \sqrt{\frac{D_1}{\Sigma_U}}, \quad L_R = \sqrt{\frac{D_2}{\Sigma_R}}$$

Ce système implique 4 équations et les 6 inconnues suivantes : $\Sigma_{a,1}, \Sigma_{a,2}, \Sigma_R, \Sigma_U, D_1, D_2$.

À l'interface x_I zone nourricière/rélecteur sur l'axe 1D le long de la traverse, sans négliger l'upscattering résonnant, on arrive aux expressions suivantes :

$$\begin{pmatrix} J_1(x_I) \\ J_2(x_I) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D_1 \left(\frac{\frac{1}{L_1^2} + \sqrt{\frac{1}{(L_1 L_2)^2} - \frac{1}{(L_U L_R)^2}}}{\nu} \right) & -\frac{\Sigma_U}{\nu} \\ -\frac{\Sigma_R}{\nu} & D_2 \left(\frac{\frac{1}{L_2^2} + \sqrt{\frac{1}{(L_1 L_2)^2} - \frac{1}{(L_U L_R)^2}}}{\nu} \right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1(x_I) \\ \phi_2(x_I) \end{pmatrix} \quad (2.21)$$

avec :

$$\nu = \sqrt{\frac{1}{L_1^2} + \frac{1}{L_2^2} + 2\sqrt{\frac{1}{(L_1 L_2)^2} - \frac{1}{(L_U L_R)^2}}} \quad (2.22)$$

En passant cette expression de la forme matricielle à linéaire et en divisant tout par ϕ_1 , on obtient deux lignes :

$$\begin{cases} \frac{J_1}{\phi_1} = \frac{-\Sigma_U}{\nu} \frac{\phi_2}{\phi_1} + D_1 \left(\frac{\frac{1}{L_1^2} + \sqrt{\frac{1}{(L_1 L_2)^2} - \frac{1}{(L_U L_R)^2}}}{\nu} \right) \\ \frac{J_2}{\phi_1} = D_2 \left(\frac{\frac{1}{L_2^2} + \sqrt{\frac{1}{(L_1 L_2)^2} - \frac{1}{(L_U L_R)^2}}}{\nu} \right) \frac{\phi_2}{\phi_1} - \frac{\Sigma_R}{\nu} \end{cases} \quad (2.23)$$

On obtient deux fonctions affines avec $\frac{\phi_2}{\phi_1}$ comme variable. Connaissant ces deux équations, les trois étapes suivantes sont réalisées :

— 1 :

Deux calculs S_N à 281 groupes d'énergie avec une zone combustible homogénéisée sur l'assemblage sont réalisés. La densité en eau est changée entre les deux calculs, ce qui modifie l'indice de spectre $\frac{\phi_2}{\phi_1}$ et permet donc d'avoir au total deux valeurs de $\frac{J_1}{\phi_1}(\frac{\phi_2}{\phi_1})$ et deux de $\frac{J_2}{\phi_1}(\frac{\phi_2}{\phi_1})$ et tracer deux droites comme présenté sur la figure 2.4.

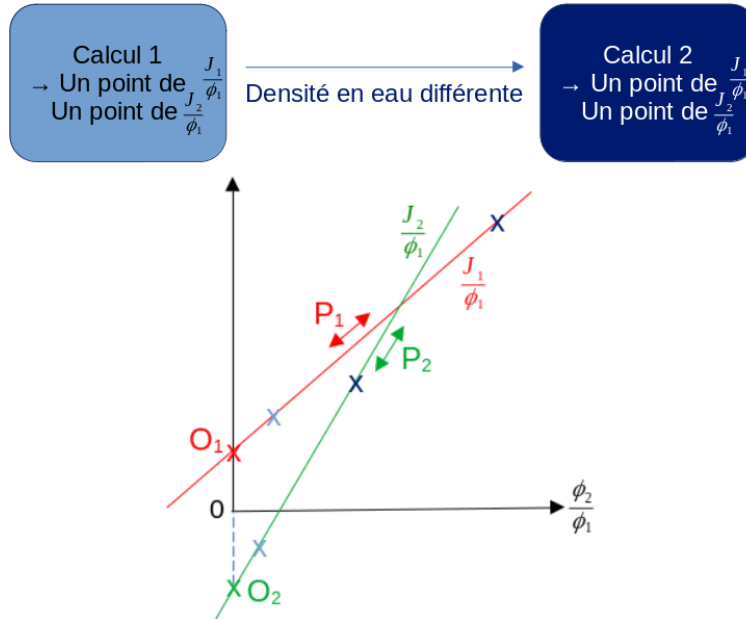


FIGURE 2.4 Schéma des deux calculs à deux densités en eau différentes et des droites résultantes dans la méthode Lefèbvre-Libigot

— 2 :

On déduit du système (2.23) les égalités suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{O_1}{D_1} = \frac{\frac{1}{L_1^2} + \sqrt{\frac{1}{(L_1 L_2)^2} - \frac{1}{(L_U L_R)^2}}}{\nu} \\ P_1 = -\frac{\Sigma_U}{\nu} \\ O_2 = -\frac{\Sigma_R}{\nu} \\ \frac{P_2}{D_2} = \frac{\frac{1}{L_2^2} + \sqrt{\frac{1}{(L_1 L_2)^2} - \frac{1}{(L_U L_R)^2}}}{\nu} \end{array} \right. \quad (2.24)$$

— 3 :

On fixe finalement les valeurs de D_1 et D_2 , ce qui permet de réduire le nombre d'inconnues à 4 au lieu de 6, et on peut résoudre le système pour obtenir :

$$\left\{ \begin{array}{l} \Sigma_R = -\left(\frac{O_1}{D_1} + \frac{P_2}{D_2}\right) O_2 \\ \Sigma_U = -\left(\frac{O_1}{D_1} + \frac{P_2}{D_2}\right) P_1 \\ \Sigma_{a,1} = \frac{O_1^2}{D_1} + \frac{P_1 O_2}{D_2} - \Sigma_R \\ \Sigma_{a,2} = \frac{P_2^2}{D_2} + \frac{P_1 O_2}{D_1} - \Sigma_U \end{array} \right. \quad (2.25)$$

D_1 et D_2 sont donc des paramètres libres. Leurs valeurs sont fixées arbitrairement, en fonction du palier, c'est-à-dire du type de réacteur simulé. Ensuite, les valeurs des 4 autres inconnues déterminées de sorte à retrouver les deux courbes de réponse.

2.4 Méthodes d'équivalence nodale

Dans une chaîne de calcul neutronique, la méthode d'équivalence nodale assure la résolution de l'équation de la diffusion à l'échelle du cœur. Elle utilise des propriétés homogènes sur un maillage spatio-énergétique plus grossier que celui du calcul réseau. Il est donc nécessaire d'homogénéiser et de condenser les données issues du calcul réseau pour les rendre compatibles avec le solveur nodal.

Dans les techniques d'équivalence nodale, les sections efficaces ne sont pas modifiées. Des facteurs de discontinuité du flux sont imposés aux interfaces entre mailles :

$$f_{i-1}^+ \phi(x_{i-1/2}^-) = f_i^- \phi(x_{i-1/2}^+) \quad (2.26)$$

et

$$f_i^+ \phi(x_{i+1/2}^-) = f_{i+1}^- \phi(x_{i+1/2}^+) \quad (2.27)$$

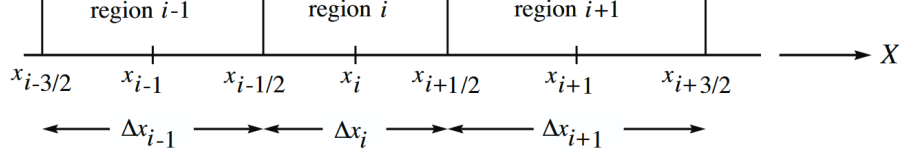


FIGURE 2.5 Macro-géométrie cartésienne en 1D

Il est possible d'obtenir les facteurs de discontinuité sur la géométrie de la figure 2.5 par une approche non itérative. Une solution de référence est d'abord obtenue par un calcul S_N à 281 ou 295 groupes d'énergie sur la géométrie avec une discrétisation fine en maille et en groupe d'énergie de l'équation de Boltzmann.

Soit f_i^- le facteur de discontinuité à droite de la région i . Ce facteur est donné par :

$$f_i^- = \frac{\phi^*(x_{i-1/2})}{\phi(x_{i-1/2}^+)} \quad (2.28)$$

avec :

- $\phi^*(x_{i-1/2})$ le flux surfacique de référence condensé, continu
- $\phi(x_{i-1/2}^+)$ le flux surfacique issu du macro-calcul, résultat du calcul Raviart-Thomas

2.5 Raviart-Thomas

La méthode d'éléments finis de Raviart-Thomas est répandue dans l'industrie en France. il s'agit d'une formulation numérique rigoureuse adaptée à la fois à la diffusion et à la méthode SP_N . Elle est implémentée dans COCAGNE et dans DONJON.

La démonstration menant à la base Raviart-Thomas est réalisée en Annexe A.

Le système matriciel à un groupe pour une approximation de la diffusion en géométrie cartésienne en 1D s'écrit :

$$\mathbf{M} \begin{bmatrix} \phi \\ \mathbf{J}_x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{S}_\phi \\ \mathbf{S}_x \end{bmatrix} \quad (2.29)$$

où ϕ contient les coefficients de Legendre du flux, J_x contient les courants nets entre les éléments finis, et M est une matrice symétrique définie par :

$$M = \begin{bmatrix} T & R_x^\top \\ R_x & A_x \end{bmatrix} \quad (2.30)$$

Les coefficients de la matrice M sont inversés. Le système linéaire 2.29 peut être réécrit sous la forme :

$$\tilde{A}_x J_x = -S_x + R_\phi T^{-1} S_\phi \quad (2.31)$$

où la matrice $\tilde{A}_x$ est le résultat d'une factorisation LU :

$$\tilde{A}_x = -A_x + R_\phi T^{-1} R_\phi^\top \quad (2.32)$$

on obtient donc :

$$J_x = A_x^{-1} \left[-S_x + R_\phi T^{-1} S_\phi \right] \quad (2.33)$$

Les flux sont ensuite obtenus à l'aide de la première ligne de l'équation 2.29 :

$$\phi = T^{-1} \left[S_\phi - R_\phi^\top J_x \right] \quad (2.34)$$

Cette équation est utilisée pour calculer les coefficients de Legendre du flux dans la procédure *Baff-Refl* basée sur les éléments finis de Raviart-Thomas, en fonction des courants nets de référence J_x^* . La procédure *Baff-Refl* nécessite aussi un calcul des flux sur les faces gauche et droite de chaque élément fini, notés $\phi_{i\pm 1/2}^\pm$. Ces valeurs dépendent des coefficients de Legendre du flux $a_{k,i}$, des valeurs gauche et droite du courant net $J_{i\pm 1/2}$, du coefficient de diffusion D_i , ainsi que du type de quadrature utilisé pour obtenir R_x et A_x .

Le flux est exprimé de la manière suivante :

$$\phi_{i,g}(u) = \sum_{k=0}^K a_{k,i,g} \tilde{P}_k(u) \quad (2.35)$$

où $\tilde{P}_\ell(u)$ est un polynôme de Legendre normalisé sur $\left[-\frac{1}{2}; \frac{1}{2}\right]$ défini par

$$\tilde{P}_0(u) = 1$$

$$\tilde{P}_1(u) = 2\sqrt{3}u$$

et

$$\tilde{P}_{k+1}(u) = 2\sqrt{\frac{2k+3}{2k+1} \frac{2k+1}{k+1}} u \tilde{P}_k(u) - \sqrt{\frac{2k+3}{2k-1} \frac{k}{k+1}} \tilde{P}_{k-1}(u) \quad \text{si } k \geq 1.$$

Les coefficients de Legendre du flux sont donnés par $a_{k,i,g} = \int_{-1/2}^{1/2} du \tilde{P}_k(u) \phi_{i,g}(u)$.

Trois expressions analytiques des flux aux interfaces sont possibles selon le type d'intégration :

Intégration analytique

$$\phi_{i-1/2}^+ = \begin{cases} \frac{\Delta x_i}{3D_i} J_{i-1/2} + \frac{\Delta x_i}{6D_i} J_{i+1/2} + a_{0,i}, & \text{si } K = 0 \\ \frac{\Delta x_i}{8D_i} J_{i-1/2} - \frac{\Delta x_i}{24D_i} J_{i+1/2} + a_{0,i} - \frac{5\sqrt{3}}{6} a_{1,i}, & \text{si } K = 1 \\ \frac{\Delta x_i}{15D_i} J_{i-1/2} + \frac{\Delta x_i}{60D_i} J_{i+1/2} + a_{0,i} - \frac{5\sqrt{3}}{6} a_{1,i} + \frac{7\sqrt{5}}{10} a_{2,i}, & \text{si } K = 2 \end{cases} \quad (2.36)$$

$$\phi_{i+1/2}^- = \begin{cases} -\frac{\Delta x_i}{6D_i} J_{i-1/2} - \frac{\Delta x_i}{3D_i} J_{i+1/2} + a_{0,i}, & \text{si } K = 0 \\ \frac{\Delta x_i}{24D_i} J_{i-1/2} - \frac{\Delta x_i}{8D_i} J_{i+1/2} + a_0 + \frac{5\sqrt{3}}{6} a_{1,i}, & \text{si } K = 1 \\ -\frac{\Delta x_i}{60D_i} J_{i-1/2} - \frac{\Delta x_i}{15D_i} J_{i+1/2} + a_0 + \frac{5\sqrt{3}}{6} a_{1,i} + \frac{7\sqrt{5}}{10} a_{2,i}, & \text{si } K = 2 \end{cases} \quad (2.37)$$

Quadrature de Gauss-Legendre

$$\phi_{i-1/2}^+ = \begin{cases} \frac{\Delta x_i}{4D_i} J_{i-1/2} + \frac{\Delta x_i}{4D_i} J_{i+1/2} + a_{0,i}, & \text{si } K = 0 \\ \frac{\Delta x_i}{12D_i} J_{i-1/2} - \frac{\Delta x_i}{12D_i} J_{i+1/2} + a_{0,i} - \sqrt{3} a_{1,i}, & \text{si } K = 1 \\ \frac{\Delta x_i}{24D_i} J_{i-1/2} + \frac{\Delta x_i}{24D_i} J_{i+1/2} + a_{0,i} - \frac{5\sqrt{3}}{6} a_{1,i} + \sqrt{5} a_{2,i}, & \text{si } K = 2 \end{cases} \quad (2.38)$$

$$\phi_{i+1/2}^- = \begin{cases} -\frac{\Delta x_i}{4D_i} J_{i-1/2} - \frac{\Delta x_i}{4D_i} J_{i+1/2} + a_{0,i}, & \text{si } K = 0 \\ \frac{\Delta x_i}{12D_i} J_{i-1/2} - \frac{\Delta x_i}{12D_i} J_{i+1/2} + a_{0,i} + \sqrt{3}a_{1,i}, & \text{si } K = 1 \\ -\frac{\Delta x_i}{24D_i} J_{i-1/2} - \frac{\Delta x_i}{24D_i} J_{i+1/2} + a_{0,i} + \frac{5\sqrt{3}}{6}a_{1,i} + \sqrt{5}a_{2,i}, & \text{si } K = 2 \end{cases} \quad (2.39)$$

C'est avec la quadrature de Gauss-Legendre que la méthode Baff-Refl a été utilisée dans cette étude.

Quadrature de Gauss-Lobatto

Enfin, pour la quadrature de Gauss-Lobatto, les flux aux interfaces sont donnés par :

$$\phi_{i-1/2}^+ = \frac{\Delta x_i}{(K+1)(K+2)D_i} J_{i-1/2} + \sum_{k=0}^K (-1)^k \sqrt{2k+1} \left[1 - \frac{k(K+1)}{(K+1)(K+2)} \right] a_{k,i} \quad (2.40)$$

$$\phi_{i+1/2}^- = -\frac{\Delta x_i}{(K+1)(K+2)D_i} J_{i+1/2} + \sum_{k=0}^K \sqrt{2k+1} \left[1 - \frac{k(K+1)}{(K+1)(K+2)} \right] a_{k,i} \quad (2.41)$$

2.6 Procédure Baff-Refl

2.6.1 Résumé de la méthode

Baff-Refl est une méthode de modélisation de réflecteur développée et utilisée dans la plateforme SCIENCE de Framatome [8]. Elle existe en 2D mais est traitée uniquement en 1D dans cette étude. L'objectif est de calculer les flux et sections efficaces dans le réflecteur pour les utiliser ensuite dans le calcul cœur et pouvoir calculer les flux neutroniques dans la zone combustible. Baff-Refl est basée sur un calcul d'éléments finis (ici Raviart-Thomas) séparant la zone réflecteur de la zone combustible, et sur un calcul de référence (dans cette étude, S_N à 295 groupes). Le but est de conserver le flux dans le combustible obtenu par le calcul d'éléments finis par rapport à celui de référence. Cela passe par un calcul de facteurs de discontinuité associés à des gaps. Les gaps sont des lames d'eau très fines séparant la géométrie en plusieurs zones : une zone combustible et une zone réflecteur avec chacune de ces deux zones pouvant être sous-divisées en plus de zones avec d'autres gaps. Les facteurs de discontinuité sont ensuite transformés en facteurs SPH en les inversant, pour corriger les

sections efficaces dans le réflecteur de manière à obtenir dans le combustible des valeurs de flux neutronique proches du calcul de référence S_N . Trois géométries sont donc utilisées et sont présentées sur la figure 2.6. La première est une géométrie S_N à maillage spatial fin pour le calcul de référence. La deuxième est le résultat de l'homogénéisation de la première en une zone combustible et une réflecteur. La troisième est la géométrie Raviart-Thomas à deux zones. Une zone de "résidu" est coupée sur la droite de la géométrie S_N pour conserver seulement la partie de la traverse 1D comportant un flux neutronique calculé non nul. La largeur du résidu est choisie en testant différentes valeurs lors de la procédure Baff-Refl.

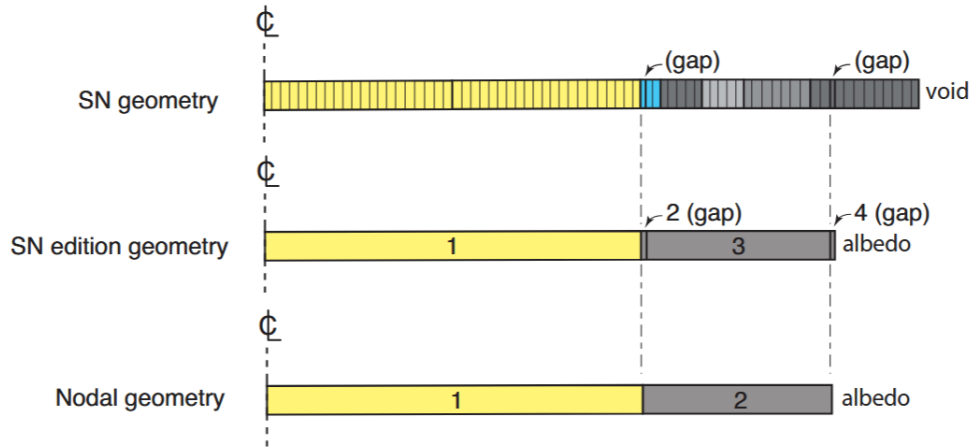


FIGURE 2.6 Géométries relatives au calcul de référence et au calcul d'éléments finis

2.6.2 Étapes de la méthode Baff-Refl

Étape 1 : Calcul de référence S_N sur une géométrie unidimensionnelle combustible-réflecteur

Une première étape consiste à réaliser un calcul de référence par la méthode S_N sur une géométrie unidimensionnelle représentant un cœur combustible et un réflecteur. Les sections efficaces homogènes à groupes fins utilisées pour représenter deux assemblages combustibles identiques (en jaune sur la figure) sont issues d'un calcul de réseau en mode fondamental de l'assemblage considéré. Le réflecteur est modélisé par une succession de lames d'eau et d'acier représentative du réflecteur considéré.

Un buckling (c'est-à-dire un facteur décrivant la courbure du flux) géométrique fixe est imposé à l'équation de Boltzmann afin de représenter les fuites transversales :

$$B^2 = \left(\frac{\pi}{L_z} \right)^2 + \left(\frac{\pi}{L_y} \right)^2 \quad (2.42)$$

où L_z et L_y désignent respectivement la hauteur et l'épaisseur du cœur. La valeur du buckling un impact très faible sur les résultats. Dans les calculs DRAGON, une valeur non nulle lui est associée car dans les fichiers de sortie, il est affiché multiplié au coefficient de fuites d sous la forme dB^2 . Sa valeur ayant peu d'impact sur les résultats, dans les applications courantes, elle est communément fixée à $B^2 = 1 \times 10^{-6} \text{ cm}^{-2}$ qui est une valeur cohérente pour un cœur moyen.

Le calcul de référence utilise un jeu de sections efficaces à groupes fins (à 295 groupes dans cette étude car il s'agit de la bibliothèque recommandée par Polytechnique Montréal pour la simulation des réacteurs thermiques et cette valeur est proche des 281 groupes d'EDF) et un spectre de fuites $L_{i,g} = d_{i,g} B^2 \phi_{i,g}$, où les coefficients de fuite à groupes fins $d_{i,g}$ peuvent être obtenus à partir de différents modèles qui seront présentés dans la partie suivante.

Un calcul de K_{eff} est effectué avec le calcul S_N à groupes fins en imposant le buckling B^2 . Les coefficients de fuite $d_{i,g}$ et les sections efficaces sont ensuite homogénéisés et condensés vers un maillage à deux groupes et à un nombre réduit de régions. Les flux condensés dans les gaps ($\phi_{i\pm 1/2,g}^*$) sont ensuite récupérés ainsi que les flux moyens :

$$\langle \phi^* \rangle_{i,g} = \int_{-1/2}^{1/2} du \phi_g^*(u). \quad (2.43)$$

Les courants nets dans les gaps sont calculés à partir de la condition $J_{1/2,g}^* = 0$ et de la relation :

$$J_{i+1/2,g}^* = J_{i-1/2,g}^* + \frac{V_i \chi_{i,g}}{K_{\text{eff}}} \sum_{h=1}^G \nu \Sigma_{f,i,h} \phi_{i,h} - V_i \left(\Sigma_{i,g} + B^2 D_{i,g} \right) \phi_{i,g} + V_i \sum_{h=1}^G \Sigma_{s,i,g \leftarrow h} \phi_{i,h} \quad (2.44)$$

où :

- V_i est le volume de la région i ,
- $\phi_{i,g}$ est le flux neutronique,
- K_{eff} est le facteur de multiplication effectif,
- $\chi_{i,g}$ est le spectre de fission,
- $\nu \Sigma_{f,i,h}$ est le produit du nombre de neutrons par fission et de la section efficace macroscopique de fission,
- $\Sigma_{i,g}$ est la section efficace macroscopique totale,

- B^2 est le buckling imposé,
- $D_{i,g}$ est le coefficient de diffusion.

Étape 2 : Calcul des coefficients de Legendre du flux

L'équation 2.34 est ensuite résolue pour obtenir les coefficients de Legendre du flux en fonction des courants nets de référence $J_{i-1/2,g}^*$ et $J_{i+1/2,g}^*$ issus du calcul S_N .

Étape 3 : Calcul des flux nodaux aux interfaces

Les flux aux interfaces sont calculés à l'aide des équations 2.36 à 2.39, selon le type d'intégration choisi (intégration analytique, quadrature de Gauss-Legendre ou quadrature de Gauss-Lobatto).

Étape 4 : Calcul des facteurs de discontinuité gauche et droit

Les facteurs de discontinuité gauche et droit sont déterminés à partir de l'équation 2.28 :

$$f_{i,g}^- = \frac{\phi_{i-1/2,g}^*}{\phi_{i-1/2,g}^+} \quad (2.45)$$

$$f_{i,g}^+ = \frac{\phi_{i+1/2,g}^*}{\phi_{i+1/2,g}^-} \quad (2.46)$$

où $\phi_{i-1/2,g}^*$ et $\phi_{i+1/2,g}^*$ sont les flux aux interfaces obtenus par le calcul de référence S_N .

Étape 5 : Calcul de l'albédo multigroupe à la frontière droite

La condition aux limites d'albédo P_1 à la frontière droite ($u = 1/2^-$) pour le groupe g s'écrit :

$$\left. \frac{D_{l,g}}{\Delta x_i} \frac{d\phi_{l,g}}{du} \right|_{1/2^-} + \Lambda_g^+ \phi_{I+1/2,g}^- = -J_{I+1/2,g}^* + \Lambda_g^+ \phi_{I+1/2,g}^- = 0 \quad (2.47)$$

où la fonction d'albédo est exprimée en fonction de l'albédo β_g^+ par

$$\Lambda_g^+ = \frac{1}{2} \frac{1 - \beta_g^+}{1 + \beta_g^+} = 0,5 \quad (2.48)$$

car la condition de vide entraine $\beta_g^+ = 0$.

Étape 6 : Normalisation NGET des facteurs de discontinuité

La renormalisation par la théorie généralisée de l'équivalence nodale (NGET) [9] des facteurs de discontinuité est décrite dans la référence de Müller (1989). L'équation de continuité du flux nodal à l'interface $x_{i-1/2}$ s'écrit selon l'équation 2.26 (voir figure 2.7) :

$$f_{i-1,g}^+ \phi_g(x_{i-1/2}^-) = f_{i,g}^- \phi_g(x_{i-1/2}^+) \quad (2.49)$$

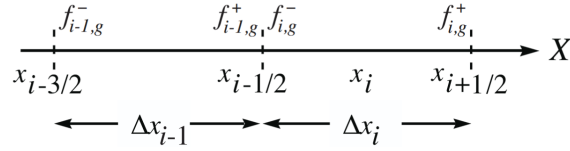


FIGURE 2.7 Schéma d'une interface entre deux mailles et des facteurs de discontinuité associés

Les membres gauche et droit de l'équation 2.49 peuvent être multipliés par une constante de normalisation. Ainsi, les corrections apportées par les facteurs de discontinuité dépendent du rapport des deux facteurs de discontinuité adjacents et non de la valeur de chacun.

La théorie NGET repose sur un ajustement successif des facteurs de discontinuité à chaque interface, de sorte qu'en chaque nœud de la traverse, le facteur de discontinuité à gauche et à droite sont égaux :

$$f_{i,g}^- = f_{i,g}^+ = f_{i,g}$$

Bien que la théorie NGET permette de relier les facteurs de discontinuité, leur détermination complète se fait à l'aide d'un paramètre libre. Pour fixer ce paramètre, les valeurs des facteurs de discontinuité sont imposées à l'interface combustible-réflecteur. Les valeurs doivent être les plus cohérentes possibles avec le futur calcul de cœur. Deux options sont possibles.

La première option est de fixer la valeur du facteur de discontinuité côté cœur à 1 et de calculer la valeur correspondantes côté réflecteur.

La deuxième option reprend la même procédure, mais cette fois conservant les valeurs des ADFs (Assembly Discontinuity Factors), c'est-à-dire des facteurs de discontinuité des assemblages périphériques obtenus à l'issue du calcul réseau. Cette approche entraîne toutefois une dépendance vis-à-vis des tables multiparamétrées des assemblages périphériques, ce qui nécessite une multiparamétrisation, notamment en fonction du burn-up.

Étape 7 : Définition des facteurs SPH

La méthode d'éléments finis Raviart-Thomas ne permet pas l'utilisation directe des facteurs de discontinuité, contrairement aux méthodes NEM (Nodal Expansion Method) et ANM (Analytic Nodal Method) utilisées chez Framatome [10]. Dans le cas 1D, il est toujours possible de remplacer les facteurs de discontinuité par des facteurs SPH, en utilisant des facteurs SPH par [11] :

$$\mu_{i,g} = \frac{1}{f_{i,g}} \quad (2.50)$$

et en corrigeant les coefficients de diffusion, les sections efficaces et les albédos selon les équations suivantes :

$$\tilde{D}_{i,g} = \mu_{i,g} D_{i,g}, \quad (2.51)$$

$$\tilde{\Sigma}_{i,g} = \mu_{i,g} \Sigma_{i,g}, \quad (2.52)$$

$$\nu \tilde{\Sigma}_{f,i,g} = \mu_{i,g} \nu \Sigma_{f,i,g}, \quad (2.53)$$

$$\tilde{\Sigma}_{s0,i,g \leftarrow h} = \mu_{i,h} \Sigma_{s0,i,g \leftarrow h} \quad (2.54)$$

La fonction d'albédo est également corrigée par :

$$\tilde{\Lambda}_g^+ = \mu_{i,g} \Lambda_g^+ \quad (2.55)$$

Dans le cadre de ce mémoire, le processus d'équivalence Baff-Refl est réalisé dans le code DRAGON version 5.1. On obtient des valeurs non-corrigées pour les sections efficaces, coefficients de diffusion et albédos, ainsi que des facteurs SPH qui sont stockés dans un fichier APEX de sortie. Il est important de noter que COCAGNE n'utilise pas les albédos inscrits dans l'APEX de DRAGON car cette condition frontière n'est pas disponible. Une condition de flux nul est toujours utilisée dans COCAGNE quelque soit l'information de condition frontière contenue dans l'APEX. Les résultats sont très peu impactés car l'albédo est quasiment nul sur la droite de la traverse, puisque le réflecteur diminue drastiquement le flux neutronique, le rendant presque nul sur la droite de la traverse 1D.

2.7 Modélisation des fuites et condensation des coefficients de diffusion

La détermination des coefficients de fuites, ainsi que leur procédure de condensation en coefficients de diffusion, constitue un enjeu critique pour la précision des calculs cœur. Le choix du modèle de fuite peut induire une variation significative du coefficient de diffusion des neutrons rapides D_1 .

Dans le cadre de cette étude, deux méthodologies de calcul sont comparées : Golfier-Vergain et Todorova [12] en diffusion entrante (Inscatter).

2.7.1 Approche de Golfier-Vergain

Le modèle Golfier-Vergain consiste à exprimer le coefficient de diffusion $D_{i,g}$ en fonction des sections efficaces de transport condensées $\Sigma_{tr,i,g}$ et d'un terme correctif α_g .

La formule initiale du coefficient de diffusion non corrigé est :

$$D_{i,g} = \frac{1}{3\Sigma_{tr,i,g}} \quad (2.56)$$

avec la condensation directe des sections efficaces de transport $\Sigma_{tr,i,g}$ pour chaque zone i et groupe d'énergie g :

$$\Sigma_{tr,i,g} = \frac{\int_{u_{g-1}}^{u_g} du (\Sigma_i(u) - \Sigma_{s1,i}(u)) \phi_i(u)}{\int_{u_{g-1}}^{u_g} du \phi_i(u)} \quad (2.57)$$

Sans coefficient de correction, cette formule de $D_{i,g}$ s'avère insuffisante pour restituer fidèlement le flux de référence. Pour y remédier, le modèle de Golfier-Vergain introduit un coefficient correcteur α_g . Ce dernier intègre une information spectrale globale issue de la résolution du système multi-groupe sur la traverse :

$$\bar{d}(u)\bar{\Sigma}(u)\bar{\phi}(u) - \int_0^\infty du' \bar{d}(u)\bar{\Sigma}_{s1}(u \leftarrow u')\bar{\phi}(u) = \frac{\bar{\phi}(u)}{3} \quad (2.58)$$

Les grandeurs surmontées d'une barre désignent ici une moyenne spatiale.

Le coefficient α_g est ensuite calculé en fonction du $\bar{d}(u)$ (la moyenne spatiale des coefficients de diffusion multi-groupes) solution de l'équation 2.58 pour chaque groupe afin d'ajuster les coefficients de diffusion finaux :

$$\alpha_g = \frac{\int_{u_{g-1}}^{u_g} du \bar{d}(u) \bar{\phi}(u)}{\sum_i \phi_{i,g} / (3 \Sigma_{tr,i,g})} \quad (2.59)$$

La formule du coefficient de diffusion est finalement :

$$D_{i,g} = \frac{\alpha_g}{3 \Sigma_{tr,i,g}} \quad (2.60)$$

2.7.2 Modèle Todorova Outscatter

La première approche de Todorova est le modèle en diffusion sortante (*Outscatter*). Celui-ci adopte une stratégie différente en calculant les coefficients de fuites sur un maillage fin en énergie en fonction des sections efficaces de transport puis en effectuant la condensation directement sur ces coefficients de fuites à plusieurs groupes, plutôt que sur les sections de transport. Cette approche traite chaque zone i de manière indépendante :

$$d_i(u) = \frac{1}{3 (\Sigma_i(u) - \Sigma_{s1,i}(u))} \quad (2.61)$$

Le coefficient de diffusion condensé est alors obtenu par :

$$D_{i,g} = \frac{\int_{u_{g-1}}^{u_g} du d_i(u) \phi_i(u)}{\int_{u_{g-1}}^{u_g} du \phi_i(u)} \quad (2.62)$$

Il est à noter que, dans cette configuration, le système ne présente aucun couplage spectral.

2.7.3 Modèle Todorova Inscatter

Afin de pallier l'absence de couplage spectral inhérente au modèle *Outscatter*, le modèle *Inscatter* propose une amélioration par la résolution d'un système couplé, tout en maintenant l'indépendance de chaque zone i . La relation fondamentale s'écrit alors :

$$d_i(u) \Sigma_i(u) \phi_i(u) - \int_0^\infty du' d_i(u') \Sigma_{s1,i}(u \leftarrow u') \phi_i(u') = \frac{\phi_i(u)}{3} \quad (2.63)$$

La phase de condensation suit la formule 2.62 en fonction du $\bar{d}(u)$ solution de l'équation 2.63.

CHAPITRE 3 DÉTAILS DE LA SOLUTION

Plusieurs environnements de calcul ont été utilisés dans cette étude. Premièrement, l'environnement VERSION5 de Polytechnique Montréal intégrant les codes de calcul DRAGON [13] et DONJON [14] a permis de simuler les réflecteurs avec la méthode Baff-Refl. Ensuite, l'environnement d'études Costo2D a permis de faire tourner les codes CARABAS et COCAGNE dans le cadre du schéma ODYSSEE pour réaliser des comparaisons sur les nappes de puissance à deux dimensions à l'échelle du cœur en intégrant les modèles de réflecteurs simulés dans VERSION5. L'objet de cette partie est de détailler les spécificités de ces différents environnements et codes de calcul.

3.1 VERSION5

L'environnement VERSION5 est un ensemble de codes de calculs nucléaires open-source et disponible en version 5.1 sur le site GitLab du NEA Data Bank. Ces codes sont utilisés par des entreprises de recherche en nucléaire, mais aussi à l'Ecole Polytechnique de Montréal par des professeurs et des étudiants en études supérieures. Différents types de cœur sont simulés dans VERSION5. C'est par exemple le cas des REPs [15], mais aussi des CANDU dans une optique de maintenance de ces réacteurs canadiens.

Entre autres, VERSION5 contient le code de calcul réseau et cœur de référence DRAGON ainsi que le code de calcul cœur DONJON qui permet aussi de réaliser des calculs de modélisation de réflecteur. Les principaux avantages de ces codes de calculs sont leur caractère open-source et leurs nombreuses possibilités de simulation. Par exemple, DRAGON est capable de se baser sur différentes bibliothèques nucléaires comme SHEM295 ou CEA93. Un autre exemple est l'implémentation dans DONJON de la méthode Baff-Refl avec différents moyens d'éléments finis comme Raviart-Thomas ou la méthode d'expansion nodale, mais aussi la méthode Lefèbvre-Lebigot comme autre méthode de modélisation de réflecteur.

Le langage de programmation utilisé dans VERSION5 est le CLE-2000 pour les schémas de calcul [16], et les langages Fortran et C pour les modules de calcul. Un API Python est aussi implémenté pour paramétrer et appeler des schémas de calcul ainsi que traiter des données en sortie de modélisations. VERSION5 contient en plus un ensemble de modules indépendants classés dans TRIVAC, DRAGON [17] et DONJON. L'ensemble de VERSION5 est représenté dans la figure suivante :

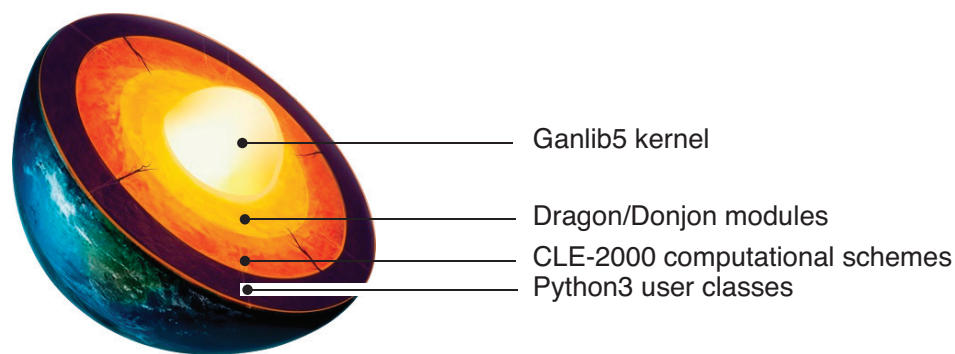


FIGURE 3.1 Architecture de VERSION5

GANLIB est le noyau contenant les librairies permettant d'enchaîner l'exécution des modules de calcul et la gestion des structures de données en entrée et en sortie. TRIVAC [18] est une collection de modules éléments finis permettant de calculer le flux de neutrons en théorie de la diffusion ou en approximation SP_N . Les modules de TRIVAC peuvent être utilisés par DRAGON pour réaliser des équivalences ou par DONJON pour effectuer des calculs de cœur entier. Le langage CLE-2000 contenu dans GANLIB permet de définir une séquence de modules utilitaires ou de modules TRIVAC, DRAGON ou DONJON de façon à programmer un schéma de calcul répondant à un usage spécifique. Son utilisation est similaire à celle de GIBIANE dans APOLLO2 et dans ODYSSEE. En principe, un calcul Baff-Refl peut être entièrement réalisé dans DRAGON en appelant des modules TRIVAC pour obtenir le flux en théorie de la diffusion. DONJON est uniquement requis pour effectuer le calcul de vérification final afin de s'assurer que le calcul d'équivalence respecte les taux de réactions du calcul de référence.

Dans cette étude, les modèles de réflecteur basés sur la méthode Baff-Refl ont été simulés avec DONJON. C'est le module **BREF** : qui réalise l'équivalence Baff-Refl sur une traverse 1D constituée de la partie combustible ainsi que de la partie réflecteur. L'ensemble présente deux zones de fuites, une dans le combustible et dans le réflecteur. Il s'agit de zones dans lesquelles une contrainte de coefficient de diffusion uniforme est appliquée pour chaque groupe d'énergie. Les coefficients de diffusion sont calculés avec le modèle Todorova Inscatter et avec le modèle Golfier-Vergain grâce au mot clé **GOLVER**. Les résultats des deux seront comparés dans la suite de ce rapport. La sortie choisie de chaque modélisation Baff-Refl de cette étude est un fichier APEX au format HDF5 contenant principalement les albédos, coefficients de fuites, flux neutroniques, facteur SPH et les différentes sections efficaces macroscopiques. L'APEX est ensuite transformée en DKLib qui est finalement utilisée en entrée de calcul cœur de EDF, à la place de la DKLib produite à partir du modèle Lefèvre-Lebigot.

3.2 Costo2D

Au cours de cette étude, CARABAS et COCAGNE ont été utilisés par l'intermédiaire de Costo2D, un environnement de calcul complet intégrant différents cœurs de réacteur. Costo2D permet de générer des bibliothèques neutroniques pour les assemblages combustibles de ces cœurs ainsi que pour leur réflecteur avec des fichiers dont l'extension est `.kbf` et de lancer des calculs de référence CARABAS ainsi que des calculs COCAGNE. Pour tester la modélisation Baff-Refl, les DKLibs Lefèbvre-Lebigot générées via Costo2D ont été remplacées par des DKLibs dont les données sont obtenues dans DONJON avec Baff-Refl.

Deux adaptations ont été réalisées pour pouvoir utiliser les sections efficaces issues de la procédure Baff-Refl. La première est de transformer le format de sortie `.hdf` en ou `.dkzip` en adaptant le script de conversion APEX2DKzip de EDF. Le deuxième est de modifier les codes Python au sein de l'environnement Costo2D pour appliquer les facteurs SPH contenus dans la DKLib issue de Baff-Refl. Cette fonctionnalité n'était pas réalisée automatiquement par COCAGNE car la méthode Lefèbvre-Lebigot n'utilise pas de facteurs SPH (contrairement aux DKLibs des assemblages combustibles, pour lesquelles les facteurs SPH sont automatiquement chargés).

Ainsi au cours de cette étude, pour chaque cas de calcul de cœur complet, un a été effectué en utilisant une DKLib Lefèbvre-Lebigot puis un deuxième identique à la seule différence que la DKLib utilisée était une DKLib Baff-Refl. Les cartes 2D de pourcentage d'erreur de puissance par rapport à la référence CARABAS obtenues pour chaque méthode ont alors été comparées entre elles.

3.3 Etapes du projet

La réalisation de cette étude autour de Baff-Refl a suivi les étapes présentées sur la figure 3.2. Les fichiers APEX associées à la méthode Baff-Refl ont été produites dans DONJON et celles associées à Lefèbvre-Lebigot ont été produites dans Costo2D. Ensuite, des calculs cœurs identiques mais avec une DKLib Baff-Refl ou une DKLib Lefèbvre-Lebigot ont été menés. Les résultats sont des comparaisons de puissance par rapport à CARABAS.

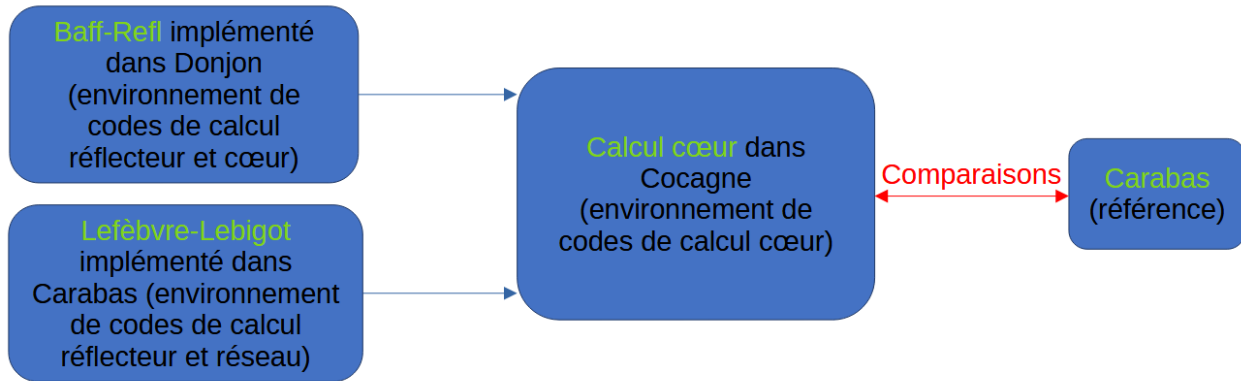


FIGURE 3.2 Schéma simplifié de la procédure de comparaison entre les deux modèles réflecteur

Utilisation de DONJON

La première étape est la modélisation des réflecteurs dans DONJON. Tous les réflecteurs ont été modélisés à partir d'un jeu de données servant d'exemple d'utilisation de la méthode Baff-Refl. Les paramètres modifiés sont :

- La géométrie du réflecteur avec des couches d'eau et d'acier agencées différemment en fonction de la géométrie de la traverse 1D représentative du réflecteur.
- Le maillage et placement des gaps dans la zone nourricière et dans la zone réflecteur.
- La proportion en bore dont l'unité a été modifiée de PPM à $\text{atomes}/\text{cm}^3$ et le ratio de bore 10 par rapport au bore 11 par cohérence avec l'axe de concentration en bore accepté par COCAGNE ainsi que la température en entrée du réflecteur.
- Le modèle de calcul de coefficient de diffusion Todorova ou Golfier-Vergain.

Les géométries possibles de l'ensemble {assemblages nourriciers + réflecteurs} a fait l'objet de plusieurs tests pour évaluer leur impact. Les paramètres testés dans DONJON sont :

- Le placement des gaps dans le réflecteur
- La longueur de la zone nourricière
- Le placement ou non de gaps dans le combustible

L'explication de ces tests est réalisée ci-dessous avec l'exemple du réflecteur associé au cœur KAIST dont les caractéristiques seront précisées dans la partie 3.3.

Le placement des gaps dans le réflecteur

Dans la chaîne ODYSSEE [19], les assemblages peuvent être maillés de manière homogène ou en 4×4 (Fig. 2.2). Ces deux maillages ont été comparés au sein du réflecteur au cours de

la procédure Baff-Refl. Le placement des gaps dans les deux cas est le suivant :

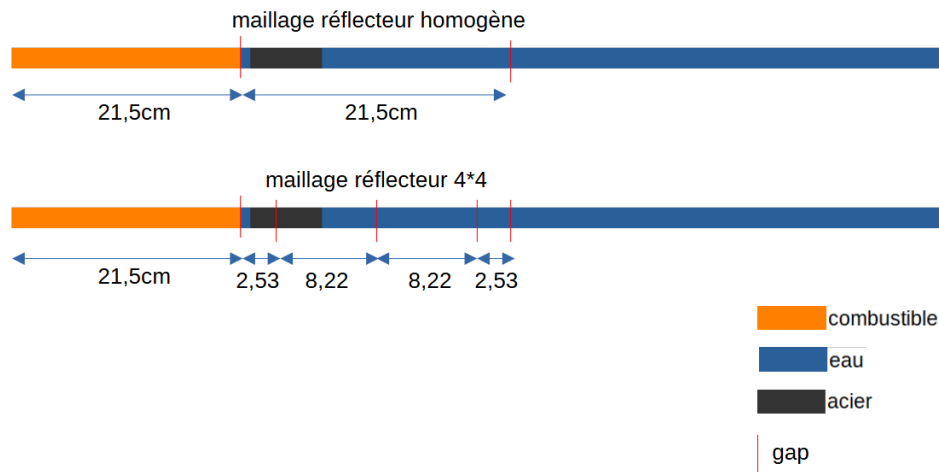


FIGURE 3.3 Maillage homogène ou 4×4 du réflecteur KAIST en 1D

La longueur de la zone nourricière

La longueur de la zone nourricière est libre dans la procédure Baff-Refl. L'impact de sa longueur a été testée en comparant une longueur de 2 et de 6 assemblages combustibles dans la zone nourricière tel que sur la figure 3.4.

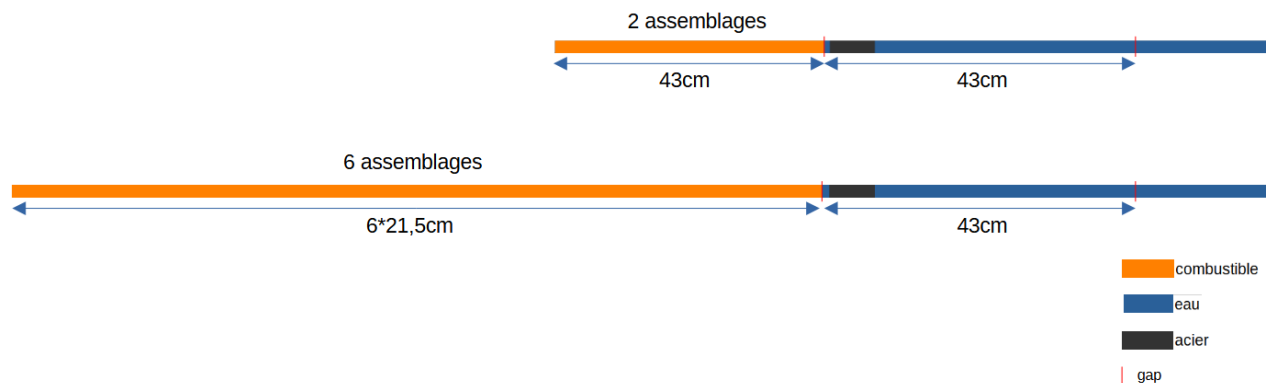


FIGURE 3.4 Géométrie 1D du réflecteur KAIST avec 2 et 6 assemblages combustibles

Le placement ou non de gaps dans le combustible

L'impact du nombre de gaps dans la zone nourricière sur les flux calculés a été testé.

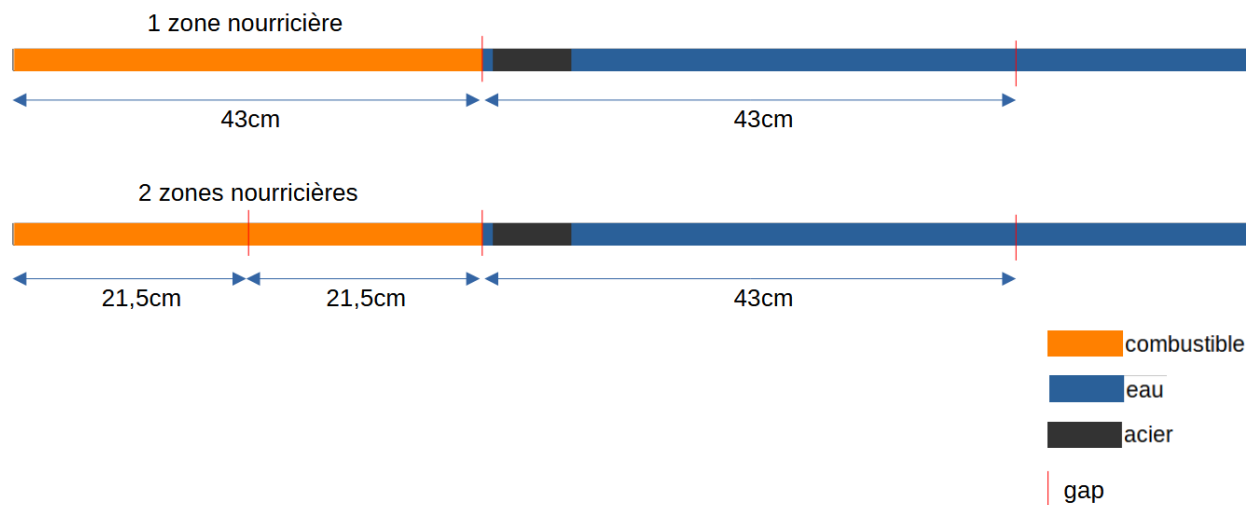


FIGURE 3.5 Géométrie 1D du réflecteur KAIST avec et sans gap dans la zone nourricière

Utilisation de Costo2D

Dans Costo2D, la première étape pour chaque réflecteur est la génération des bibliothèques assemblages et réflecteurs avec quelques dizaines de minutes à quelques heures de calculs par bibliothèque.

La deuxième étape est le calcul de référence CARABAS générant un maximum de points de burnup en trois jours de calculs : pour KAIST, 20 GWj/t, pour le réacteur 2, 7 GWj/t et pour le réacteur 3, 3 GWj/t.

La troisième étape est la réalisation de calculs COCAGNE avec chaque type de réflecteur Baff-Refl/Lefèbvre-Lebigot et le développement des cartes d'écarts de puissance à CARABAS pour chaque point de burnup, pour un temps d'environ 5 à 10 min pour chaque calcul de réflecteur sur tous les points de burnup. Pour prendre en compte les facteurs SPH avec les DKLibs associées à Baff-Refl, une fonction a été ajoutée ainsi qu'un argument au lancement des codes et la prise en compte de l'application des facteurs SPH dans le réflecteur dans les différents fichiers Python.

Pour les différents cas d'étude, le calcul de référence CARABAS a été lancé :

- Le cas homogène en plaçant le même assemblage dans tout le cœur dans le fichier Python de définition de la géométrie.
- Le cas en fonctionnement nominal avec les paramètres par défaut.
- Le cas attente à chaud.
- Pour analyser l'impact de la modification du D1, un argument a simplement été déclaré

au lancement du calcul et le résultat a été comparé au cas nominal.

- Pour la comparaison Golfier-Vergain/Todorova, le calcul nominal a aussi été utilisé en changeant seulement la DKLib Baff-Refl en entrée du calcul COCAGNE.

Tous les autres paramètres sont identiques entre les différents cas. Les cartes présentées représentent des calculs à burnup nul sauf mention contraire.

Les réflecteurs étudiés

KAIST

Le cœur KAIST est un réacteur fictif servant de référence dans plusieurs publications scientifiques pour comparer les résultats de différents codes de neutronique. Au cours de cette étude, le cœur KAIST 1A a été utilisé. Les caractéristiques essentielles sont rappelées ci-dessous.

Le cœur KAIST est un modèle réduit de réacteur à eau pressurisée composé de 52 assemblages et délivrant une puissance thermique de 900 MW. Malgré sa petite taille, ce modèle présente une grande diversité d'assemblages :

- 20 assemblages UOX enrichis à 2% en ^{235}U , placés en périphérie
- 16 assemblages UOX enrichis à 3,3% en ^{235}U , seuls assemblages de ce modèle à contenir des grappes de contrôle
- 4 assemblages UOX enrichis à 3,3% en ^{235}U comprenant chacun 16 crayons gadolinés
- 8 assemblages MOX avec trois concentrations différentes en ^{239}Pu :
 - 8,7% au centre
 - 7,0% en zone intermédiaire
 - 4,3% en périphérie
- 4 assemblages MOX de même configuration mais avec 8 crayons remplacés par des crayons gadolinés

Tous les assemblages sont modélisés à taux d'irradiation nul. Ils sont entourés d'un cloisonnement (*baffle*) en acier inoxydable, puis d'eau borée. L'ensemble de ces éléments autour du combustible constitue le réflecteur. Cette configuration est illustrée sur les figures 3.6 et 3.7.

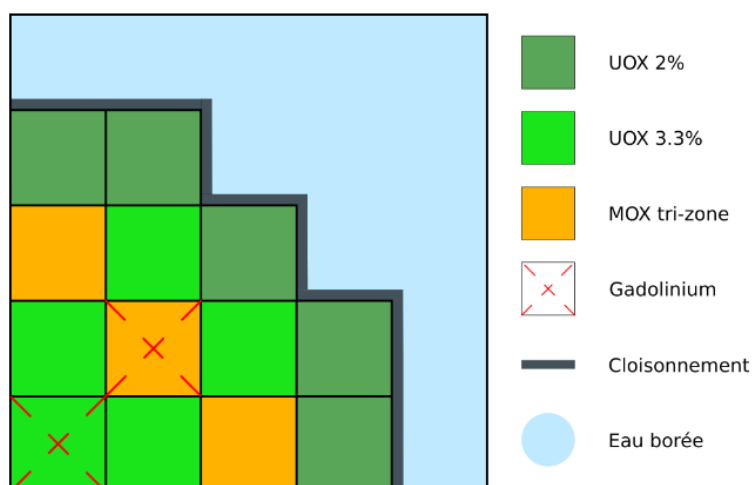


FIGURE 3.6 Schéma d'un quart de cœur KAIST 1A

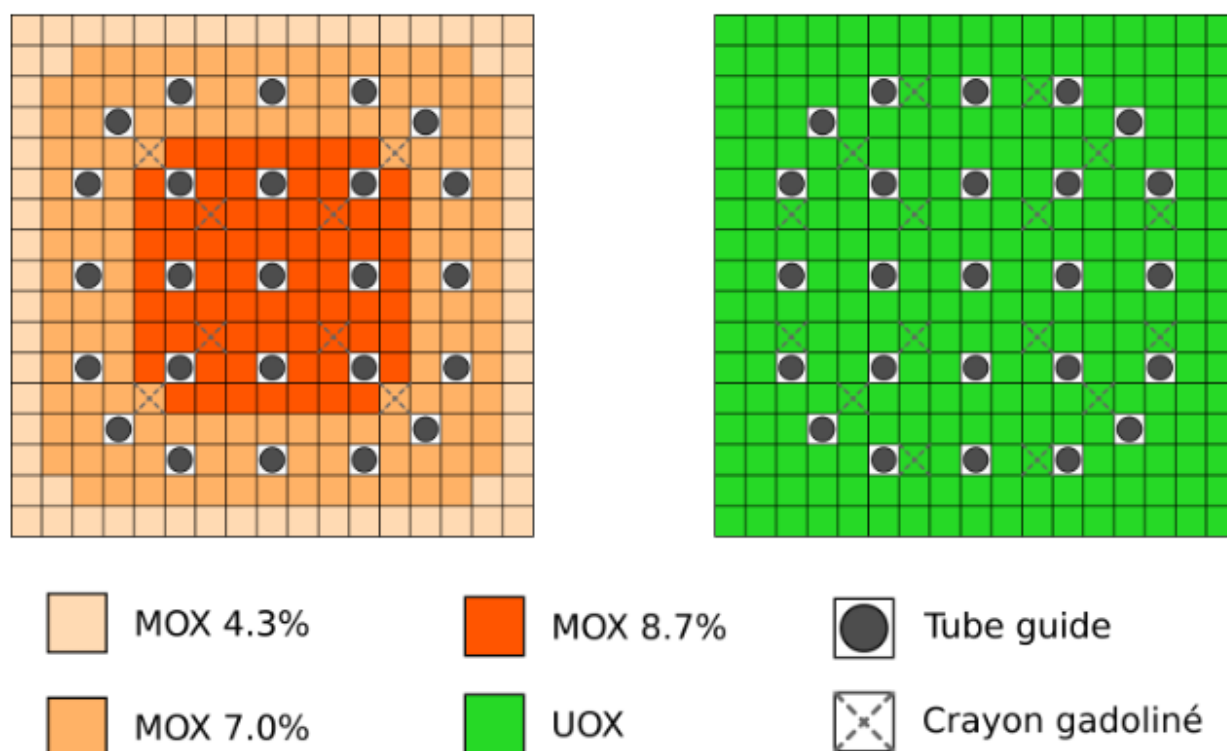


FIGURE 3.7 Schéma des deux principaux assemblages du cœur KAIST 1A

La géométrie du réflecteur KAIST est représentée sur la figure 3.8. Ce réflecteur est composé d'une première couche fine d'eau suivie d'une couche d'acier puis d'une longue zone d'eau.

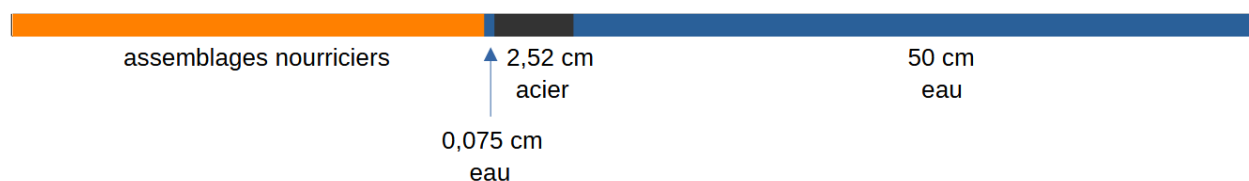


FIGURE 3.8 Traverse 1D du réflecteur KAIST

Lors des calculs COCAGNE dont les résultats seront présentés dans le chapitre suivant, les paramètres sont les suivants pour le réacteur KAIST :

- Température combustible = 900°C
- Pression = 155,1 bar
- Densité modérateur = 0,72950
- Proportion de ^{10}B dans le bore = 6,4691e-06

Réacteurs 2 et 3

Le deuxième réflecteur est un réflecteur à eau comme celui de KAIST mais avec une géométrie différente et associée à un cœur de plus grandes dimensions.

Le troisième réflecteur est cette fois-ci un réflecteur lourd, ou à acier. À l'inverse des deux premiers, il est composé majoritairement d'acier et minoritairement d'eau. Le cœur associé est le plus grand des trois.

Les détails de composition et de géométrie de ces deux cœurs et réflecteurs demeurent confidentiels au sein de EDF.

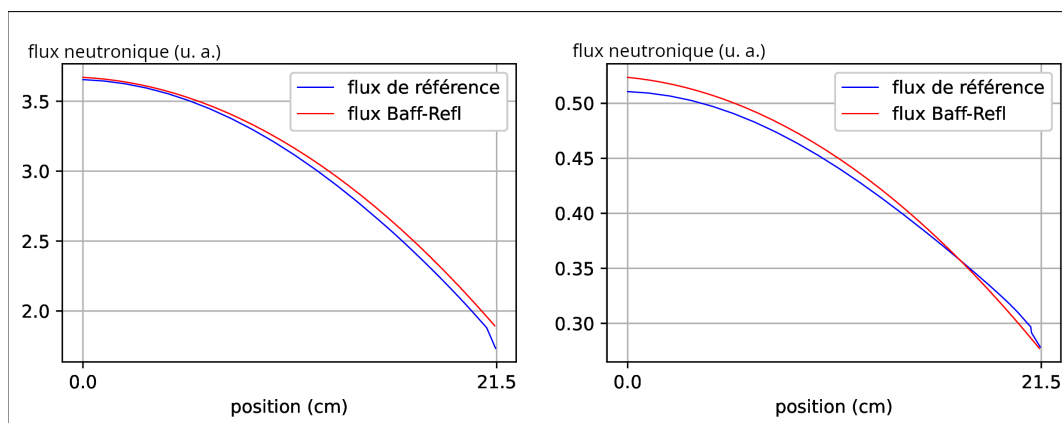
CHAPITRE 4 RÉSULTATS THÉORIQUES ET EXPÉRIMENTAUX

4.1 Résultats DONJON

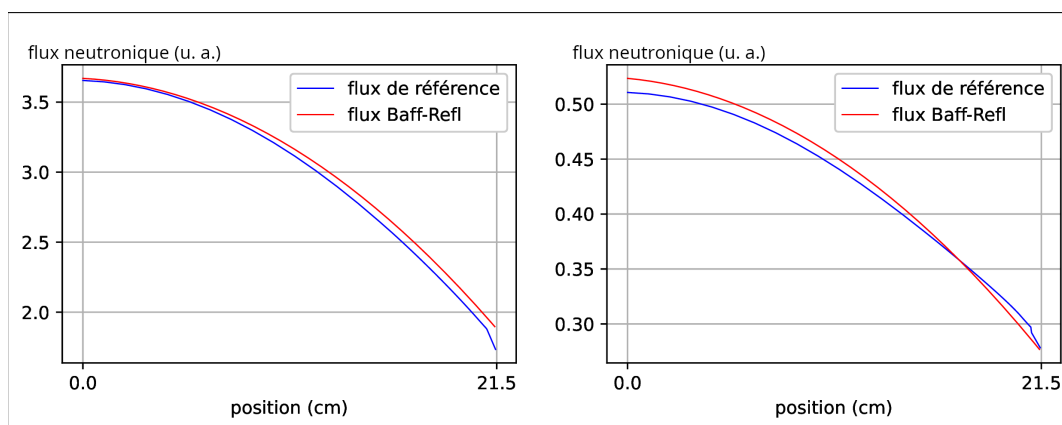
Dans cette partie, les tests sur les géométries {zone nourricière + réflecteur} abordés dans la partie 3.3 seront présentés pour KAIST. Ensuite, les courbes de flux calculés au sein du cœur avec la méthode Baff-Refl seront détaillées pour chaque réacteur.

4.1.1 Tests sur les géométries

Placement des gaps dans le réflecteur



(a) Maillage homogène

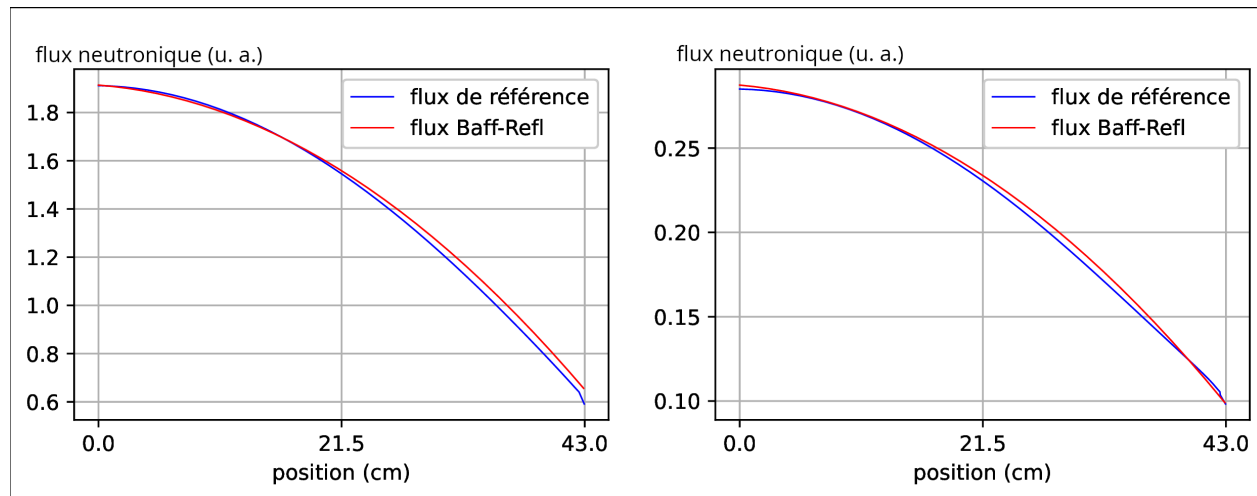


(b) Maillage 4×4

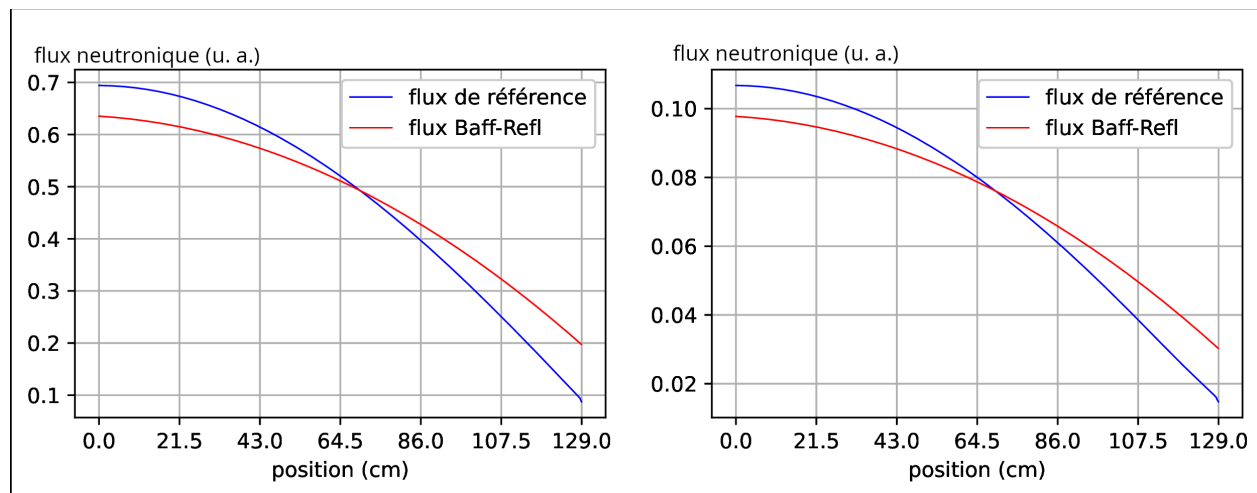
FIGURE 4.1 Flux (rapides à gauche et thermiques à droite) dans la traverse KAIST avec un maillage homogène ou 4×4 dans le réflecteur

Sur la figure 4.1, un maillage homogène et en 4×4 dans le réflecteur sont comparés. Un maillage plus raffiné pourrait modifier les valeurs à l'intérieur de la zone dans laquelle on calcule le flux par l'intermédiaire des valeurs des facteurs de discontinuité. Or on observe que peu importe le maillage dans le réflecteur, le flux calculé dans le cœur est le même. Dans la suite, les maillages au sein des réflecteurs seront donc choisis homogènes.

Longueur de la zone nourricière



(a) Deux assemblages nourriciers



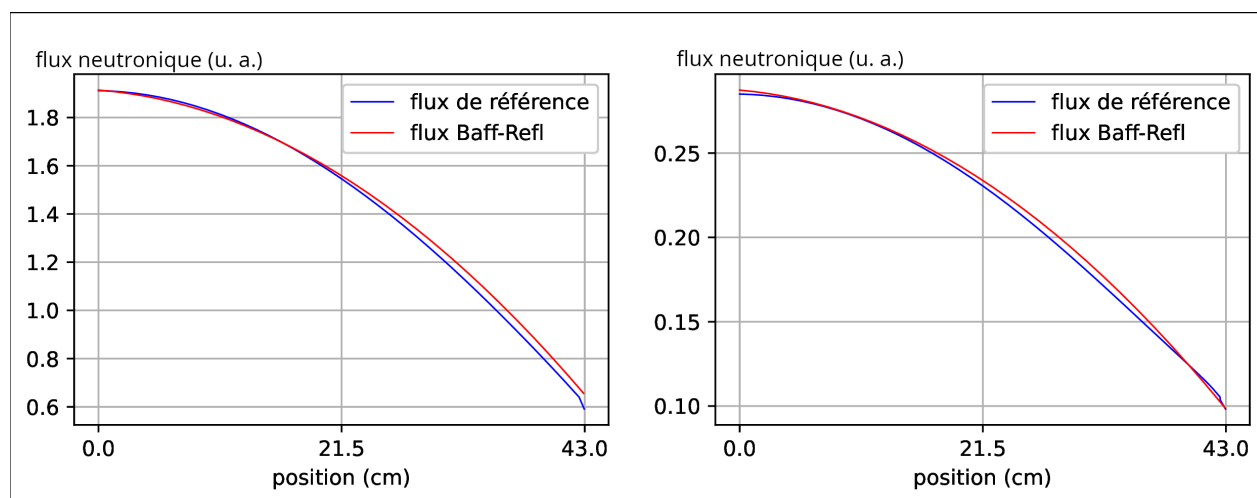
(b) Six assemblages nourriciers

FIGURE 4.2 Flux (rapides à gauche et thermiques à droite) dans la traverse KAIST avec deux ou six assemblages nourriciers

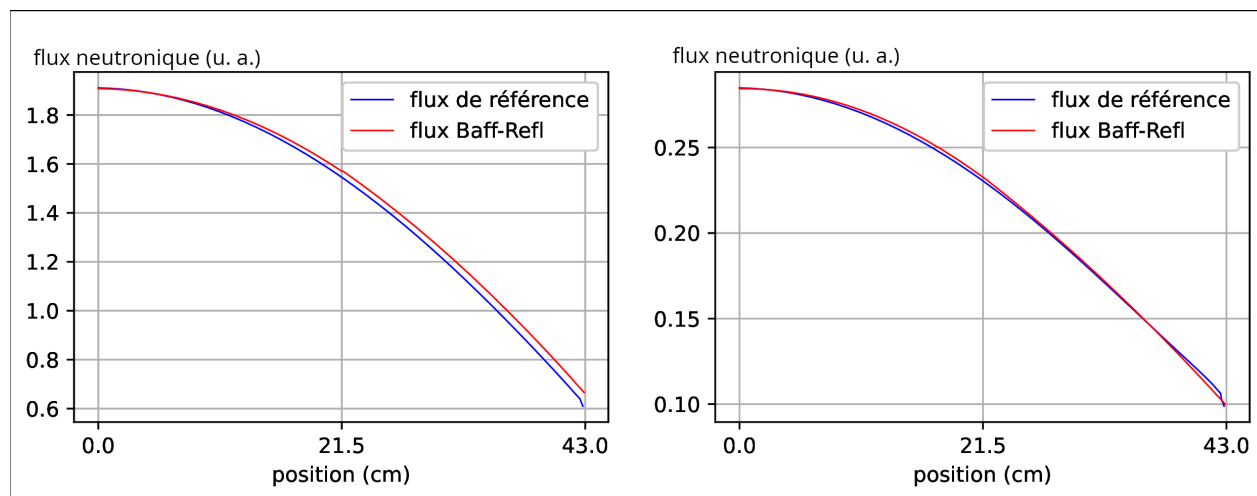
Sur la figure 4.2, une zone nourricière composée de 2 assemblages et une zone composée

de 6 assemblages sont comparées. On remarque que le flux est bien mieux conservé avec seulement deux assemblages. La moyenne du flux est conservée dans les deux cas. Cependant avec 6 assemblages, le flux issu de Baff-Refl est inférieur sur les 3 premiers assemblages puis supérieur au flux de référence. Cela met en exergue le fait que la précision baisse sur une longue zone combustible homogène. Dans la suite, la zone nourricière aura une longueur de 2 assemblages.

Le placement ou non de gaps dans le combustible



(a) Sans gap dans la zone nourricière



(b) 1 gap dans la zone nourricière

FIGURE 4.3 Flux (rapides à gauche et thermiques à droite) dans la traverse KAIST avec et sans gap dans la zone nourricière

Le placement d'un gap au sein de la zone nourricière est étudié ici. On observe sur la figure 4.3 qu'avec 2 assemblages nourriciers, le placement d'un gap au milieu implique une différence minime dans les courbes de flux. La dégradation des résultats est donc minime entre 1 et 2 assemblages nourriciers contrairement à l'augmentation à 6 assemblages sans gap qui les séparent. Le facteur clé est donc la longueur de la ou des zones combustibles entre les gaps. Dans la suite, une longueur de 2 assemblages sans gap au milieu sera choisie.

La géométrie pour chaque réflecteur sera donc 2 assemblages dans la zone nourricière, 2 dans la zone réflecteur et un maillage homogène dans chacune des 2. Cette géométrie est synthétisée dans la figure 4.4.

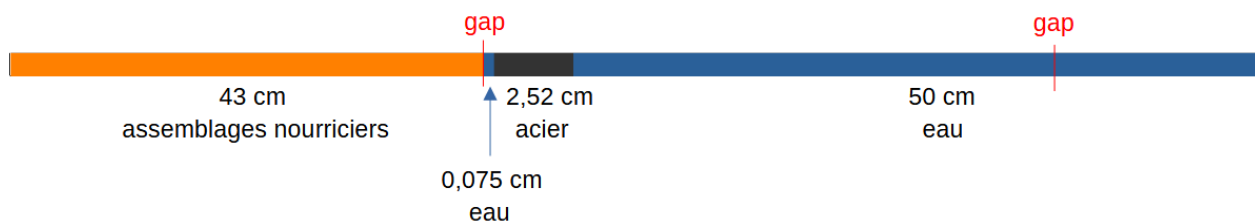


FIGURE 4.4 Schéma d'une traverse 1D du réflecteur KAIST

4.1.2 Courbes de flux dans KAIST

La procédure Baff-Refl en diffusion avec la méthode d'éléments finis Raviart-Thomas donne les courbes de flux de la figure 4.5.

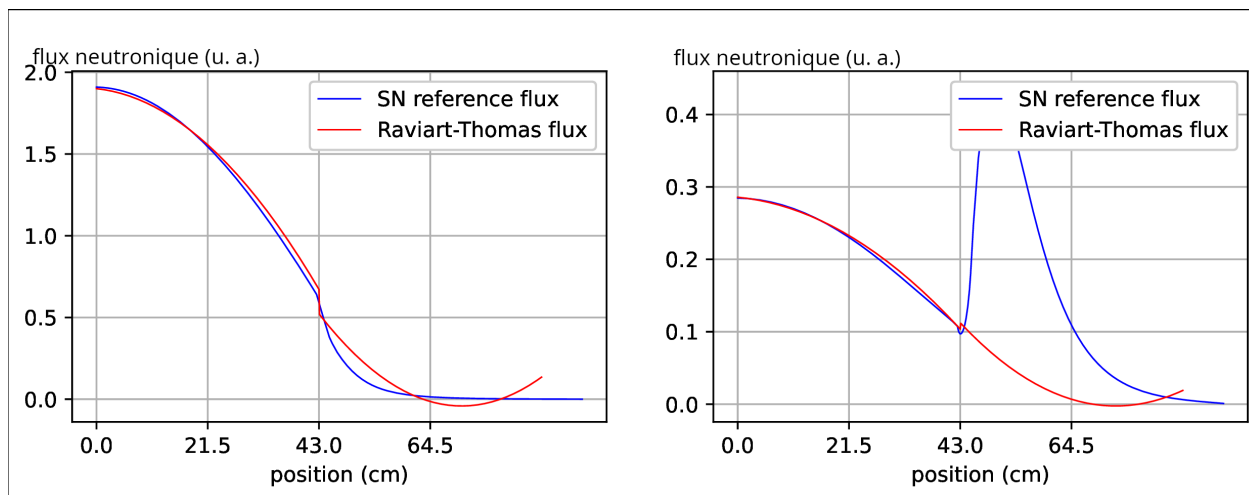


FIGURE 4.5 Courbes de flux (rapides à gauche et thermiques à droite) de référence et après équivalence Baff-Refl lors de la procédure Baff-Refl pour le réflecteur KAIST

Le flux neutronique chute rapidement dans les deux groupes d'énergie par fuite des neutrons à travers le réflecteur. La zone dans laquelle le flux est important en simulation neutronique est l'ensemble des assemblages combustibles, néanmoins on peut observer le comportement du flux dans le réflecteur avec le flux S_N : dans le groupe thermique, une forte remontée de flux a lieu à l'entrée du réflecteur à cause de la thermalisation des neutrons dans l'eau et de l'absence soudaine de fissions nucléaires causées par le combustible.

On observe que le flux est effectivement conservé dans la partie combustible de 0 à 43 cm, dans le groupe thermique et dans le rapide. Les flux de référence S_N et de diffusion calculés par la procédure Baff-Refl se suivent jusqu'à l'interface avec le réflecteur. Les flux donnent ensuite des résultats très différents car les facteurs de discontinuité ne sont pas appliqués pour conserver les flux dans le réflecteur, l'objectif étant de conserver le flux dans le combustible seulement. Le flux devient même négatif dans le réflecteur. Ce résultat non physique serait probablement évité en discrétisant davantage la traverse. Améliorer le flux dans cette zone n'est cependant pas le but recherché car c'est le flux dans la zone combustible qui vise à être conservé. Ce dernier n'est pas impacté par les valeurs de flux Baff-Refl non physiques dans le réflecteur.

La courbe de flux Raviart-Thomas s'arrête à 86cm sans aller jusqu'au bout du réflecteur comme la courbe de référence. Cela est dû à la limite de prise en compte du réflecteur avec Baff-Refl fixée à 86cm dans le script DONJON. On se permet cette limite car le flux neutronique est quasiment nul avant d'atteindre le bout du réflecteur.

4.1.3 Courbes de flux dans le réacteur 2

L'application de la méthode Baff-Refl au réflecteur du réacteur 2 aboutit aux courbes de flux de la figure 4.6.

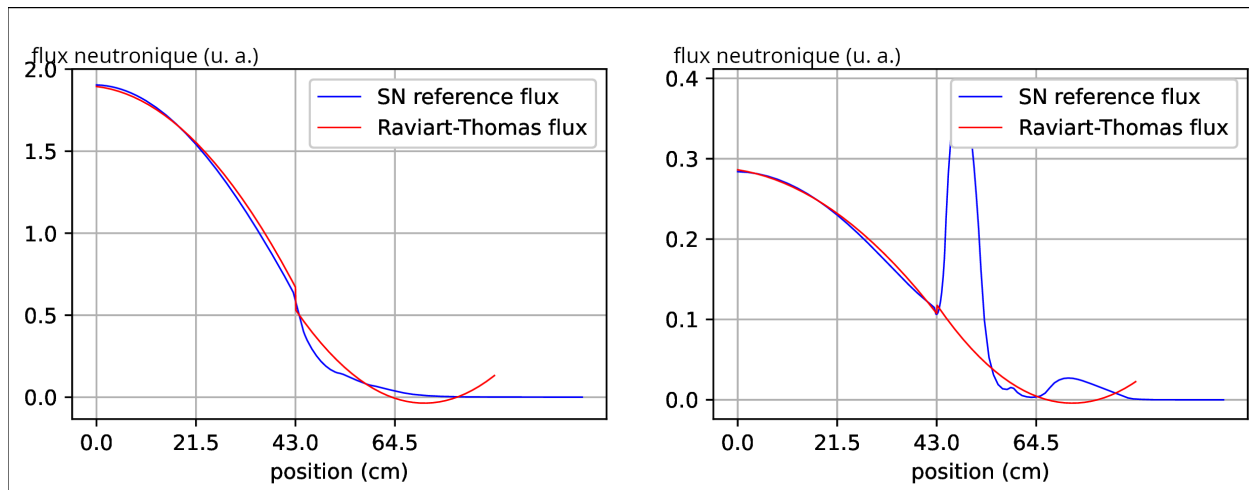


FIGURE 4.6 Courbes de flux (rapides à gauche et thermiques à droite) de référence et après équivalence Baff-Refl lors de la procédure Baff-Refl pour le réflecteur 2

Les observations sont les mêmes que pour le premier réflecteur avec des valeurs proches. Cela s'explique par le fait que les deux réflecteurs sont des réflecteurs à eau et que l'assemblage placé en entrée du calcul est le même.

4.1.4 Courbes de flux dans le réacteur 3

Pour le réacteur 3, les courbes de flux issues de la procédure Baff-Refl sont présentées sur la figure 4.7.

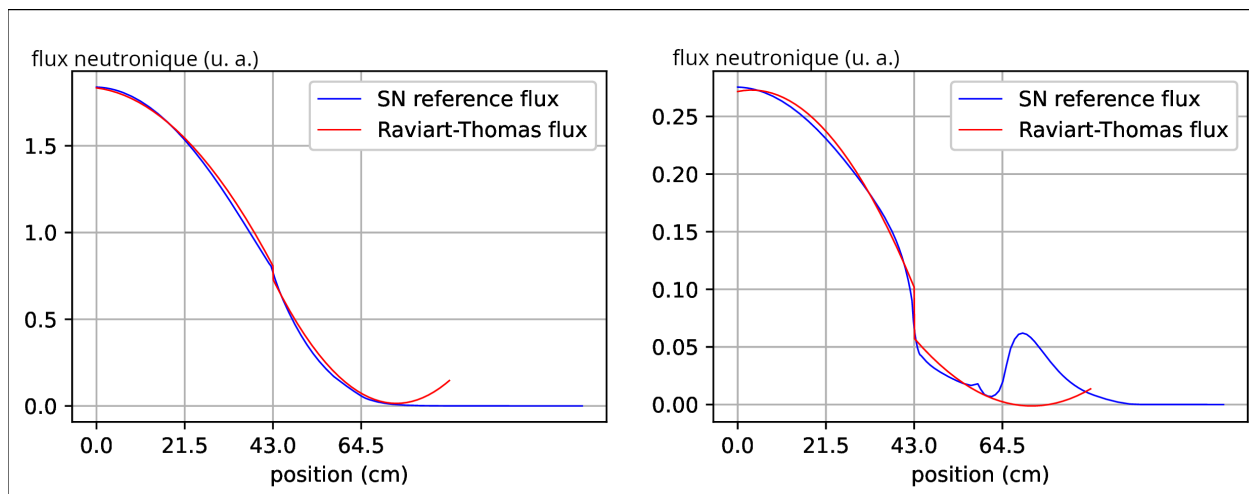


FIGURE 4.7 Courbes de flux (rapides à gauche et thermiques à droite) de référence et après équivalence Baff-Refl lors de la procédure Baff-Refl pour le réflecteur 3

La forme des flux est la même que dans les deux cas précédents mais le flux chute proportionnellement moins dans le groupe rapide car la proportion plus faible d'eau dans le réflecteur lourd diminue le nombre de chocs entre neutrons et noyaux d'hydrogène.

4.2 Impact d'une modification du D1

Dans cette partie, les figures présentées sont des cartes 2D d'écarts de puissance entre le calcul COCAGNE et la référence CARABAS. Les calculs menés par COCAGNE ont pris en entrée des fichiers issus de modélisations de réflecteurs avec la méthode Lefèbvre-Lebigot. Deux cas sont alors comparés : un dans lequel on choisit une valeur pour le D1 dans le réflecteur minimisant l'écart par rapport à CARABAS, et un pris à une valeur différente devrait dégrader les résultats. La valeur la plus optimisée a été identifiée testant plusieurs valeurs dans chaque cas jusqu'à réduire au maximum les pourcentages d'erreur rapport à CARABAS.

Les cartographies obtenues présentent des valeurs de puissance crayon par crayon et des valeurs assemblage par assemblage.

4.2.1 KAIST

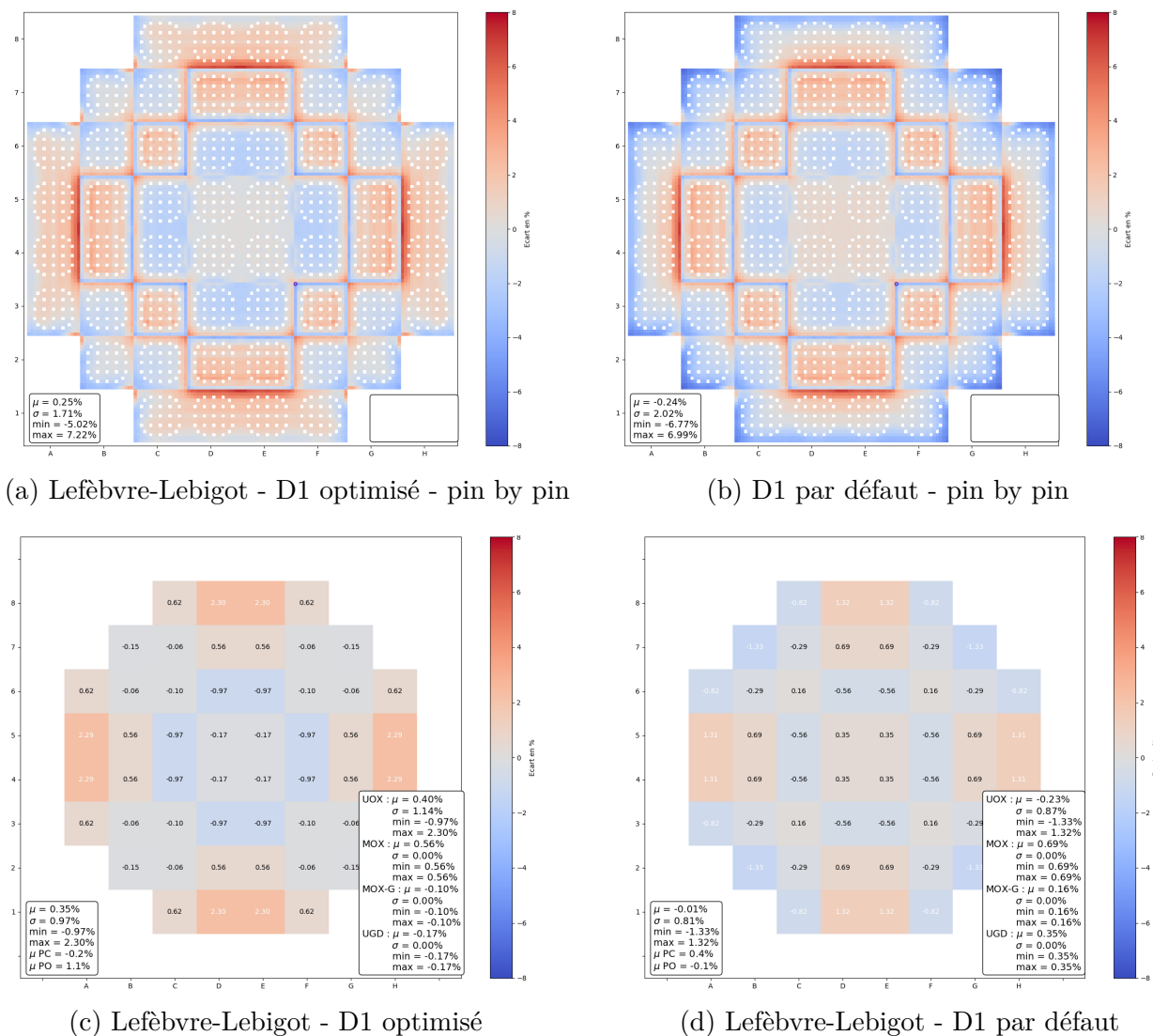


FIGURE 4.8 Cartes 2D de pourcents d'erreur de puissance par rapport à Carabas avec le réflecteur du réacteur KAIST, comparaison valeur de D1 optimisée / par défaut

	maillage pin by pin		maillage par assemblage	
	D1 optimisé	D1 par défaut	D1 optimisé	D1 par défaut
RMS (%)	1,71	2,02	0,97	0,81
min (%)	-5,02	-6,77	-0,97	-1,33
max (%)	7,22	6,99	2,3	1,32

FIGURE 4.9 Tableau de résultats pour l'étude de l'optimisation du D1 sur le réacteur KAIST

Résultats à l'échelle pin by pin

Sur les calculs pin by pin de la figure 4.8, l'optimisation du D1 améliore sensiblement la dispersion des écarts. L'écart-type rappelé dans la figure 4.9 passe de 2,02% avec le D1 par défaut à 1,71% avec le D1 optimisé, soit une réduction de 0,31%. Cette amélioration est cohérente puisque la valeur du D1 dans le réflecteur impacte directement la diffusion neutronique, avec un effet essentiellement radial, et une valeur adaptée permet d'approcher les résultats de la référence CARABAS.

Pour les valeurs extrêmes en pin by pin, on observe également une réduction de l'écart entre la valeur minimale et maximale. Avec le D1 par défaut, les erreurs s'échelonnent de -6,77% à 6,89%, tandis qu'avec le D1 optimisé on obtient -5,02% à 7,22%. Le minimum remonte de 1,75%, ce qui est significatif, mais le maximum augmente légèrement de 0,33%, créant une légère asymétrie.

Sur les deux cartes pin by pin, on observe que les erreurs extrêmes sont concentrées au bord du cœur pour les erreurs minimales et à l'interface entre les deux couches d'assemblages les plus proches du réflecteur pour les erreurs maximales. Celles-ci peuvent provenir de la faible taille du cœur KAIST étant donc plus sensible aux réflecteurs. Les zones proches des réflecteurs subissent toujours des erreurs plus élevées dues à l'hypothèse de milieu infini qui n'est pas respectée puisque les assemblages ne sont pas adjacents à d'autres assemblages mais au réflecteur.

Résultats avec un maillage par assemblage

Les calculs par assemblage donnent des résultats plus contrastés. L'écart-type avec le D1 optimisé est de 0,97% contre 0,81% avec le D1 par défaut. A l'échelle assemblage, le D1 par défaut produit donc une dispersion plus faible que le D1 optimisé, ce qui va à l'encontre de l'intuition.

Les valeurs extrêmes en assemblage confirment cette tendance. Avec D1 optimisé, on observe des valeurs allant de -0,97% à 2,30%, tandis qu'avec D1 par défaut on obtient -1,33% à 1,32%. L'étendue est de 3,27% pour l'optimisé contre 2,65% pour le défaut, et surtout le maximum est presque deux fois plus élevé avec l'optimisé (2,30% contre 1,32%).

Interprétation

Les écarts plus faibles obtenus avec le D1 par défaut en assemblage pourraient provenir de dilutions d'erreurs au sein des assemblages avec des erreurs allant de -0,97% à 2,3% avec un

D1 optimisé mais recentré autour de 0 avec le D1 par défaut.

Le D1 par défaut a une valeur plus élevée que celle du D1 optimisé. Cela se traduit par une diminution de la surrestimation de puissance. Ainsi l'augmentation du D1 entraine plus de diffusion des neutrons et moins de réactions donc une puissance calculée plus faible.

4.2.2 Réacteur 2

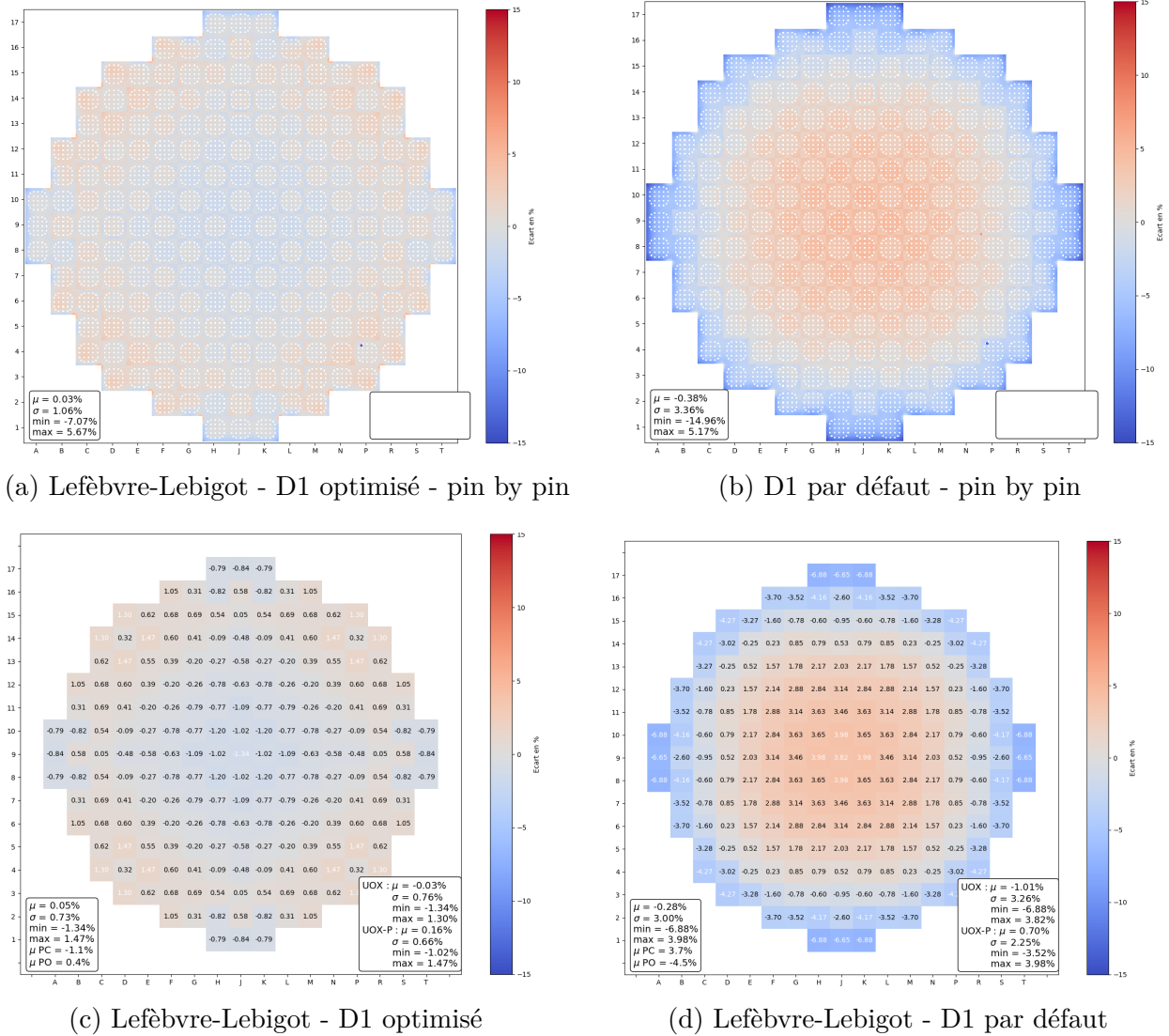


FIGURE 4.10 Cartes 2D de pourcents d'erreur de puissance par rapport à Carabas avec le réflecteur à eau, comparaison valeur de D1 optimisée / par défaut

	maillage pin by pin		maillage par assemblage	
	D1 optimisé	D1 par défaut	D1 optimisé	D1 par défaut
RMS (%)	1,06	3,36	0,73	3
min (%)	-7,07	-14,96	-1,34	-6,88
max (%)	5,67	5,17	1,47	3,98

FIGURE 4.11 Tableau de résultats pour l'étude de l'optimisation du D1 sur le réacteur 2

Analyse des résultats pour le réacteur 2 (réflecteur à eau)

Pour le réacteur 2, plus grand que KAIST et comportant un réflecteur à eau, les résultats présentés sur la figure 4.10 montrent des différences encore plus marquées entre les deux configurations.

Résultats pin by pin

L'optimisation du D1 améliore très nettement la dispersion des erreurs. L'écart-type passe de 3,36% avec le D1 par défaut à 1,06% avec le D1 optimisé, soit une réduction de 2,3%. Ces valeurs sont rappelées dans la figure 4.11.

Les valeurs extrêmes sont encore plus éloignées. Avec D1 par défaut, les erreurs couvrent un intervalle de plus de 20% non centrée sur 0, allant de -14,86% à 5,17%. Avec D1 optimisé, on obtient -7,07% à 5,67%. Le minimum remonte de près de 8%, ce qui est considérable. Le maximum augmente seulement légèrement, de 0,5% et les valeurs extrêmes sont bien centrées en 0.

Sur les deux cartes pin by pin, on observe une bascule de puissance radiale. Avec un D1 optimisé, la puissance est légèrement sous-estimée par rapport à la référence au centre et surestimée près des bords. Avec le D1 par défaut, la puissance est sur-estimée au centre et très sous-estimée près des bords, particulièrement à l'interface avec le réflecteur. Les pics d'erreurs sont au centre et à cette interface. Comme pour KAIST, la valeur de D1 par défaut est supérieure à celle optimisée, ce qui diminue l'intervalle de valeurs de puissance calculées et impacte surtout les bords.

Résultats à l'échelle de l'assemblage

Les calculs par assemblage confirment et amplifient les tendances observées à l'échelle du crayon. Avec D1 optimisé, l'écart-type est de 0,73% avec des valeurs extrêmes allant de -1,34% à 1,47%. Avec D1 par défaut, l'écart-type atteint 3% avec un intervalle de valeurs de -6,88% à 3,98%.

L'amélioration apportée par l'optimisation est donc encore plus nette qu'en pin by pin. L'écart-type est divisé par plus de 4, passant de 3% à 0,73%. Les valeurs extrêmes sont également très resserrées avec le D1 optimisé, avec une étendue de moins de 3% contre près de 11% pour le D1 par défaut.

Interprétation

Sur ce réacteur plus grand, l'impact de l'optimisation du D1 est beaucoup plus visible que sur KAIST malgré les petites dimensions de ce dernier.

Les fortes erreurs locales avec le D1 par défaut (jusqu'à -14,86% en crayon par crayon et -6,88% en assemblage) montrent qu'avec une valeur non optimale, la modélisation peut sérieusement sous-estimer la puissance dans certaines zones. L'optimisation corrige ces écarts tout en maintenant des maximums comparables ou plus faibles.

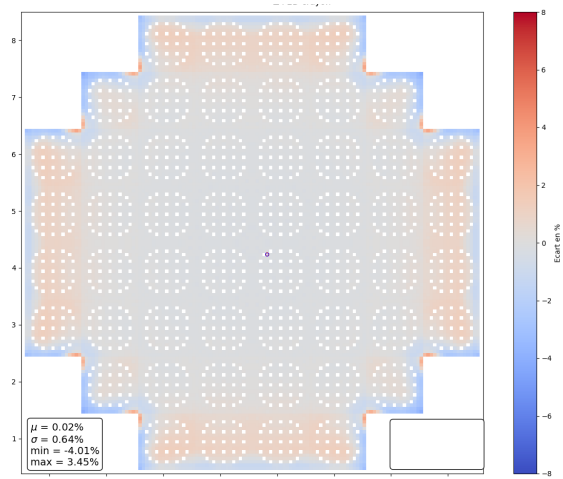
Le potentiel effet de compensation d'erreurs observé sur KAIST, où le D1 par défaut donnait de meilleurs résultats en assemblage qu'en pin by pin, ne se retrouve pas ici. Sur ce plus grand réacteur, le D1 optimisé améliore les résultats à toutes les échelles.

4.3 Réacteurs homogènes

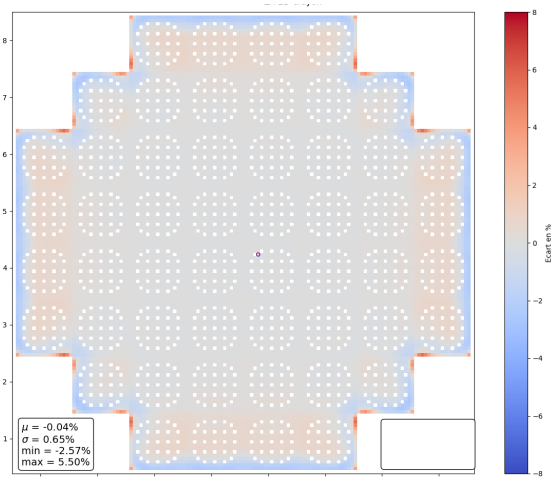
Dans cette partie, la disposition des assemblages est homogénéisée. Les assemblages sont donc tous identiques au sein du cœur. Cette homogénéisation permet de s'affranchir des erreurs liées à l'hypothèse milieu infini entre les assemblages combustible et donc de mieux distinguer les erreurs provenant des calculs réflecteur.

4.3.1 KAIST

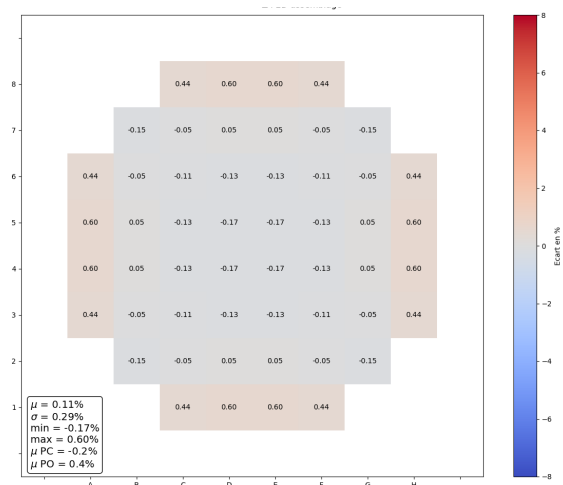
Le premier cœur homogène présenté est KAIST avec un cœur composé d'assemblages enrichis à 2%, menant aux cartographies de la figure 4.12.



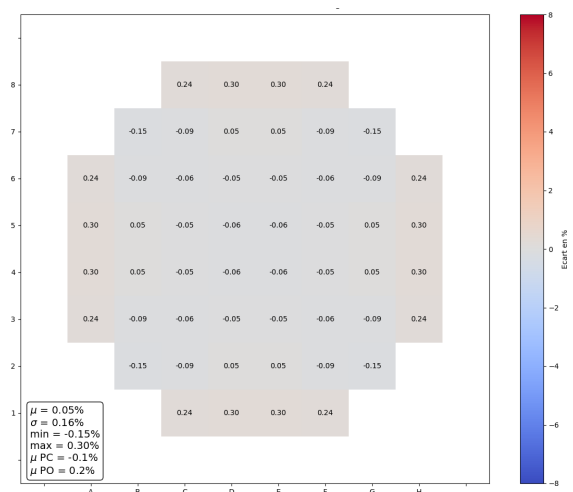
(a) Lefèbvre-Lebigot - pin by pin



(b) Baff-Refl - pin by pin



(c) Lefèbvre-Lebigot - assemblages



(d) Baff-Refl - assemblages

FIGURE 4.12 Cartes 2D de pourcents d'erreur de puissance par rapport à Carabas avec le réflecteur du cœur KAIST homogène

	maillage pin by pin		maillage par assemblage	
	Lefèbvre-Lebigot	Baff-Refl	Lefèbvre-Lebigot	Baff-Refl
RMS (%)	0,64	0,65	0,29	0,16
min (%)	-4,01	-2,57	-0,17	-0,15
max (%)	3,45	5,5	0,6	0,3

FIGURE 4.13 Tableau de résultats pour le cas homogène sur le réacteur KAIST

Résultats pin by pin

Les deux méthodes donnent des dispersions très proches avec des résultats crayon par crayon. Sur le tableau 4.13, on observe que l'écart-type est de 0,64% pour Lefèbvre-Lebigot contre 0,65% pour Baff-Refl, soit une différence négligeable. Les valeurs extrêmes sont elles aussi proches avec des résultats plus centrés en 0 pour Lefèbvre-Lebigot (-4,01% à 3,45% contre -2,57% à 5,5% pour Baff-Refl).

On remarque dans les deux cas des surestimations maximales de puissance dans les coins entrants. Cela s'explique par l'hypothèse 1D qui est moins réaliste dans les coins que sur les bords droits.

Résultats par assemblage

Le maillage par assemblage présente des erreurs plus faibles pour les deux méthodes puisque la reconstruction fine de puissance est un calcul supplémentaire entièrement réalisé à partir de données en milieu infini faisant perdre légèrement en précision pour déterminer les valeurs pin by pin. Pour Lefèbvre-Lebigot, l'écart-type passe à 0,29% avec des extrêmes de -0,17% à 0,6%. Pour Baff-Refl, l'écart-type est de 0,16% avec un intervalle de valeurs de -0,15% à 0,3%.

Baff-Refl donne donc de meilleurs résultats que Lefèbvre-Lebigot à cette échelle, avec un écart-type presque deux fois plus faible et des valeurs extrêmes deux fois plus resserrées. Les écarts restent très faibles dans les deux cas, ce qui est cohérent étant donné que l'unique source d'erreurs maximales est la partie réflecteur, les problèmes d'interface entre assemblages étant annulés par la configuration homogène du cœur. En outre, cette configuration entraîne probablement une puissance très centrée dans le cœur, ce qui peut rendre le calcul moins sensible à la puissance dans la zone réflecteur.

Interprétation

Sur ce cas homogène, les deux méthodes se valent à l'échelle du crayon avec des écarts-types quasiment identiques et des répartitions d'erreurs proches.

À l'échelle assemblage, les deux méthodes présentent des très faibles erreurs. Ce cas homogène permet d'observer que l'impact seul des réflecteurs ne dépasse pas 5,5% d'erreurs localisées à l'interface cœur/réflecteur sur le réacteur KAIST avec de faibles variations au sein du cœur.

4.3.2 Réacteur 2

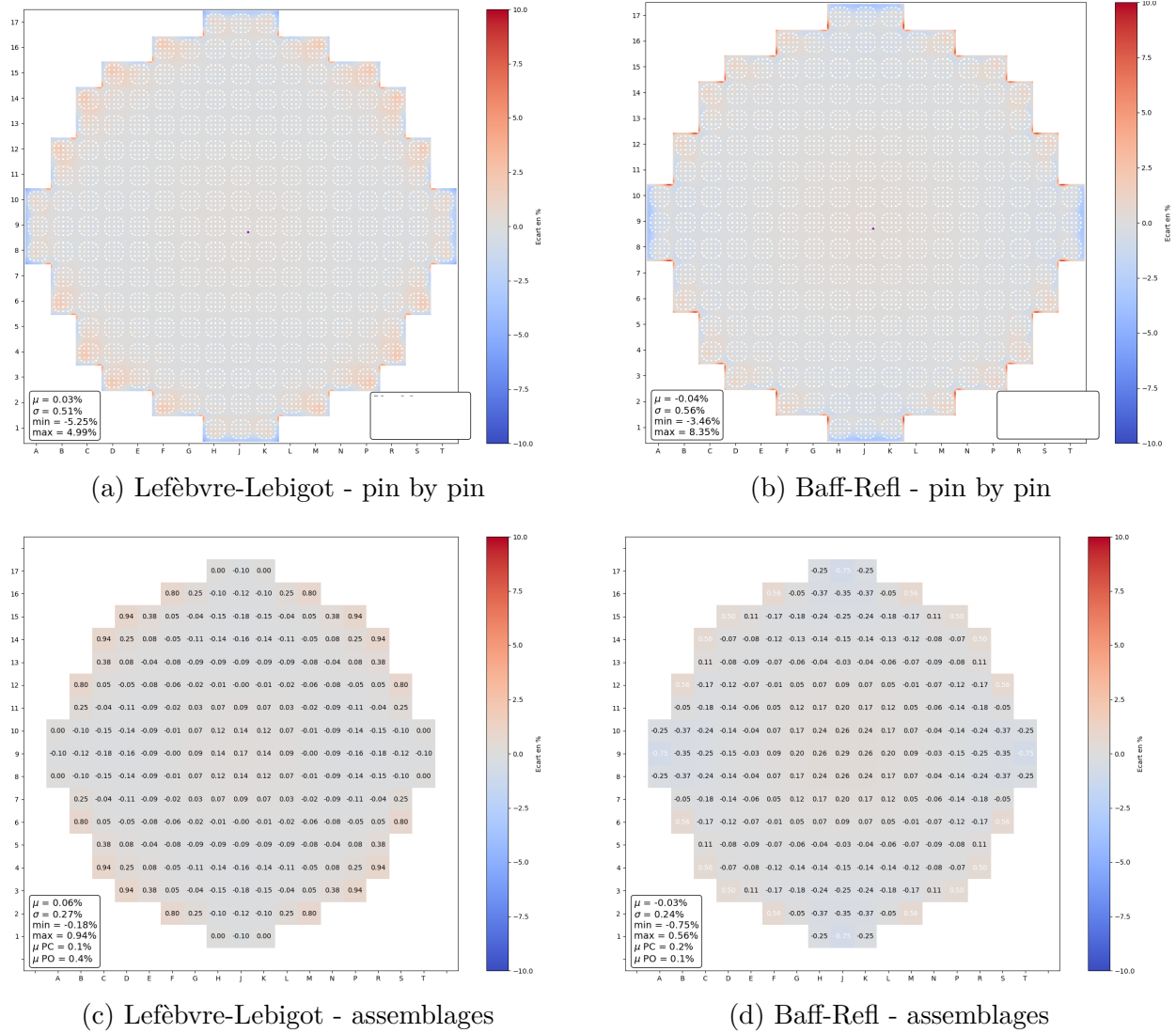


FIGURE 4.14 Cartes 2D de pourcents d'erreur de puissance par rapport à Carabas avec le réflecteur à eau et un cœur homogène

	maillage pin by pin		maillage par assemblage	
	Lefèbvre-Lebigot	Baff-Refl	Lefèbvre-Lebigot	Baff-Refl
RMS (%)	0,51	0,56	0,27	0,24
min (%)	-5,25	-3,46	-0,18	-0,75
max (%)	4,99	8,35	0,94	0,56

FIGURE 4.15 Tableau de résultats pour le cas homogène sur le réacteur 2

Résultats pin by pin

On observe sur le tableau 4.15 des écarts-types très faibles et quasi identiques avec 0,56% pour Baff-Refl et 0,51% pour Lefèbvre-Lebigot. Les valeurs extrêmes de Baff-Refl sont asymétriques avec un intervalle de -3,46% à 8,35% contrairement à celui de Lefèbvre-Lebigot (-5,25% à 4,99%).

De nouveau, on remarque sur la figure 4.14 que les surrestimations d'erreurs sont maximales dans les coins entrants à cause de l'hypothèse 1D.

Résultats par assemblage

Le calcul par assemblage réduit les erreurs pour les deux méthodes. Lefèbvre-Lebigot présente un écart-type de seulement 0,27% avec des extrêmes de -0,18% à 0,94%. Baff-Refl donne un écart-type de 0,24% avec un intervalle de valeurs de -0,75% à 0,56%.

Les deux méthodes mènent à nouveau à des erreurs très proches et faible.

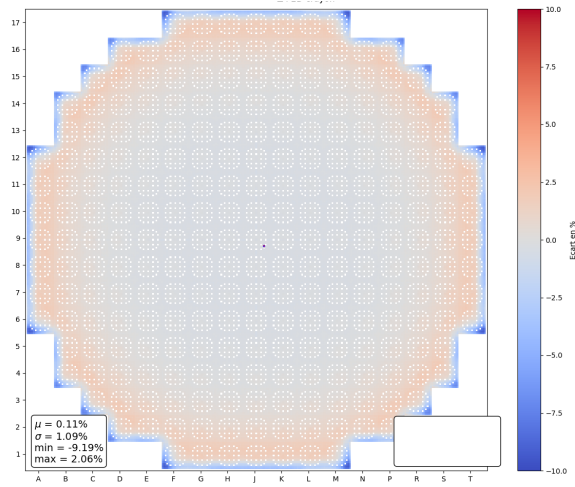
Interprétation

Sur ce réacteur plus grand, aucune des deux méthodes ne se démarque, comme pour KAIST. On en déduit que sur les réflecteurs à eau, Lefèbvre-Lebigot et Baff-Refl sont tout aussi fiables.

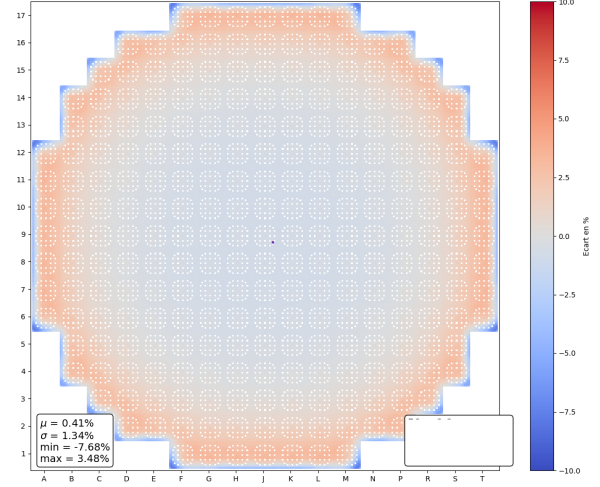
4.3.3 Réacteur 3

	maillage pin by pin		maillage par assemblage	
	Lefèbvre-Lebigot	Baff-Refl	Lefèbvre-Lebigot	Baff-Refl
RMS (%)	1,09	1,34	0,52	0,97
min (%)	-9,19	-7,68	-0,46	-0,71
max (%)	2,06	3,48	1,26	2,28

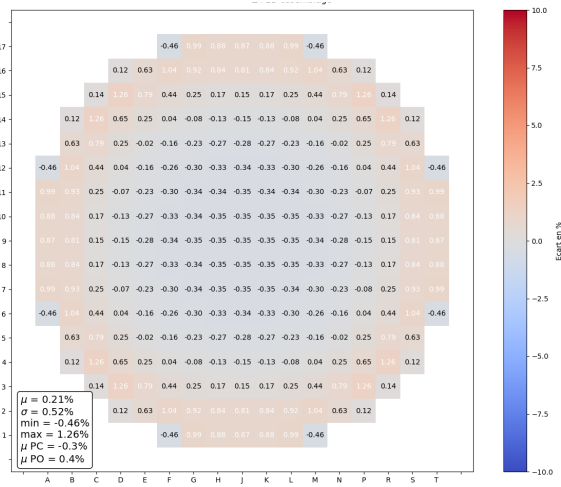
FIGURE 4.16 Tableau de résultats pour le cas homogène sur le réacteur 3



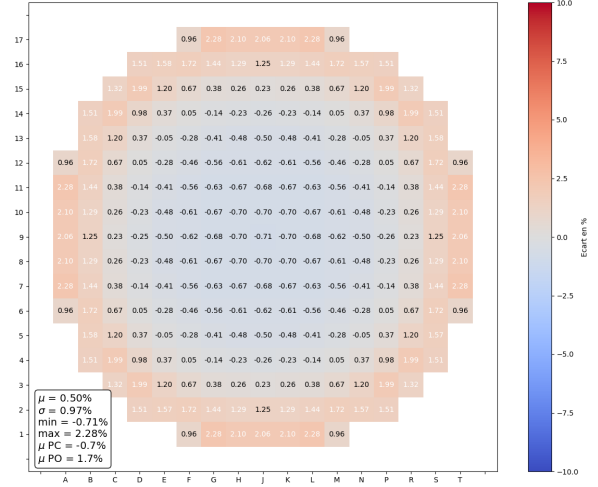
(a) Lefèbvre-Lebigot - pin by pin



(b) Baff-Refl - pin by pin



(c) Lefèbvre-Lebigot - assemblages



(d) Baff-Refl - assemblages

FIGURE 4.17 Cartes 2D de pourcents d'erreur de puissance par rapport à Carabas avec le réflecteur lourd et un cœur homogène

Résultats pin by pin

Les écarts-types visibles sur la figure 4.17 et rassemblés dans le tableau 4.16 sont du même ordre pour les deux méthodes. Lefèbvre-Lebigot donne un écart-type de 1,09% contre 1,34% pour Baff-Refl, soit un écart de 0,25% en faveur de Lefèbvre-Lebigot.

Les valeurs extrêmes montrent des intervalles comparables. Pour Lefèbvre-Lebigot, les erreurs vont de -9,19% à 2,06%, avec une forte asymétrie et des sous-estimations importantes. Pour Baff-Refl, on obtient -7,68% à 3,48%, avec une asymétrie également négative mais moins marquée et un maximum plus élevé.

Résultats par assemblage

Le calcul par assemblage réduit les erreurs pour les deux méthodes mais avec des amplitudes différentes. Lefèbvre-Lebigot voit son écart-type chuter à 0,52% avec des extrêmes de -0,46% à 1,26%. Baff-Refl donne un écart-type de 0,97% avec des valeurs allant de -0,71% à 2,28%.

Lefèbvre-Lebigot devient donc un peu plus précis que Baff-Refl à cette échelle.

Interprétation

Sur ce réacteur à réflecteur lourd, les erreurs sont plus faibles pour Lefèbvre-Lebigot contrairement aux cas précédents, en particulier dans la configuration par assemblages. Les différences restent néanmoins faibles.

4.4 Paramètres nominaux

Dans cette partie, les cartographies 2D sont associées à des calculs avec des paramètres nominaux. Cela concerne la température, la concentration en bore et la configuration non homogène des assemblages dans le cœur. Les résultats proviennent de calculs à des burnups de 0 GWj/t mais aussi à 20 GWj/t pour KAIST, 7 GWj/t pour le réacteur 2 et 3 GWj/t pour le réacteur 3. Ils permettront de rendre compte des erreurs induites par les deux méthodes de modélisation de réflecteur avec différents points de fonctionnement.

4.4.1 KAIST

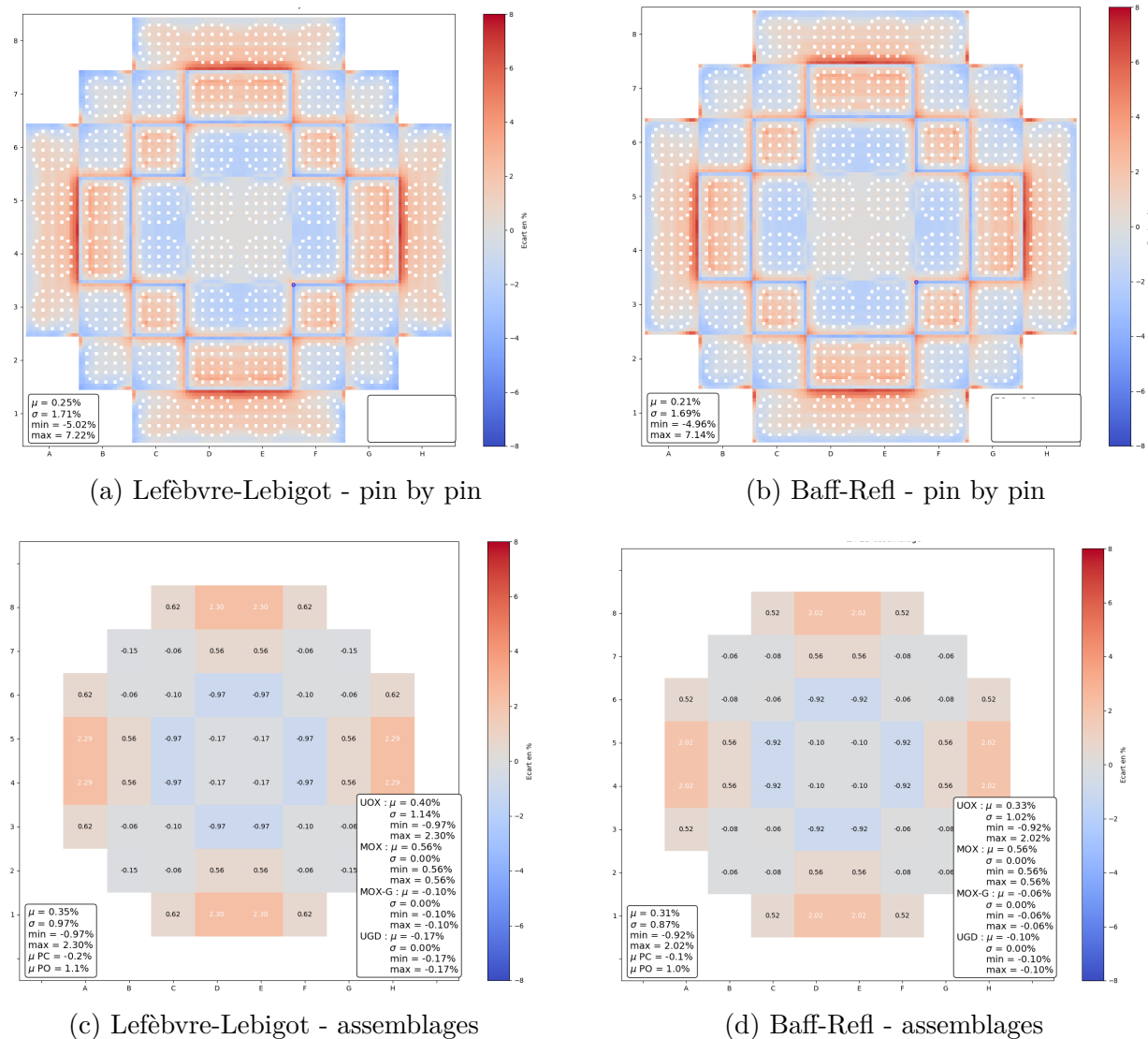


FIGURE 4.18 Cartes 2D de pourcents d'erreur de puissance par rapport à Carabas avec le réflecteur du réacteur KAIST à un burn-up de 0 GWj/t

	maillage pin by pin		maillage par assemblage	
	Lefèbvre-Lebigot	Baff-Refl	Lefèbvre-Lebigot	Baff-Refl
RMS (%)	1,71	1,69	0,97	0,87
min (%)	-5,02	-4,96	-0,97	-0,92
max (%)	7,22	7,14	2,3	2,02

FIGURE 4.19 Tableau de résultats pour le cas nominal sur le réacteur KAIST

Résultats pin by pin

Les deux méthodes donnent des résultats très proches à l'échelle du crayon sur la figure 4.18. Lefèbvre-Lebigot présente un écart-type de 1,71% contre 1,69% pour Baff-Refl dans le tableau 4.19, soit une différence négligeable. Les valeurs extrêmes sont également comparables : pour Lefèbvre-Lebigot, les erreurs vont de -5,02% à 7,22%, tandis que Baff-Refl donne -4,96% à 7,14%. Les intervalles sont quasi identiques et centrés de la même façon.

On retrouve les mêmes surestimations de puissances que dans le cas homogène entre les deux assemblages les plus proches du réflecteur et dans les coins entrants, toujours à cause des hypothèses 1D et milieu infini.

Résultats par assemblage

Le calcul par assemblage présente très peu d'écart entre les deux méthodes. Lefèbvre-Lebigot voit son écart-type passer à 0,97% avec des extrêmes de -0,97% à 2,3%. Baff-Refl donne un écart-type de 0,87% avec des valeurs allant de -0,92% à 2,02%.

Interprétation

Sur ce cas nominal avec assemblages réalistes, les deux méthodes se valent à l'échelle fine avec des performances quasiment identiques. Les écarts-types et les intervalles d'erreur sont pratiquement superposables, ce qui n'était pas le cas sur les configurations homogènes où l'une ou l'autre méthode prenait légèrement l'avantage selon le réacteur.

À l'échelle assemblage, les différences restent faibles. Les deux méthodes donnent des résultats satisfaisants avec des écarts-types inférieurs à 1% et des erreurs maximales autour de 2%.

Dans tous les cas, on observe logiquement que les écarts par rapport à la référence sont plus faibles que dans le cas homogène.

Cartographies à 20 GWj/t pour KAIST

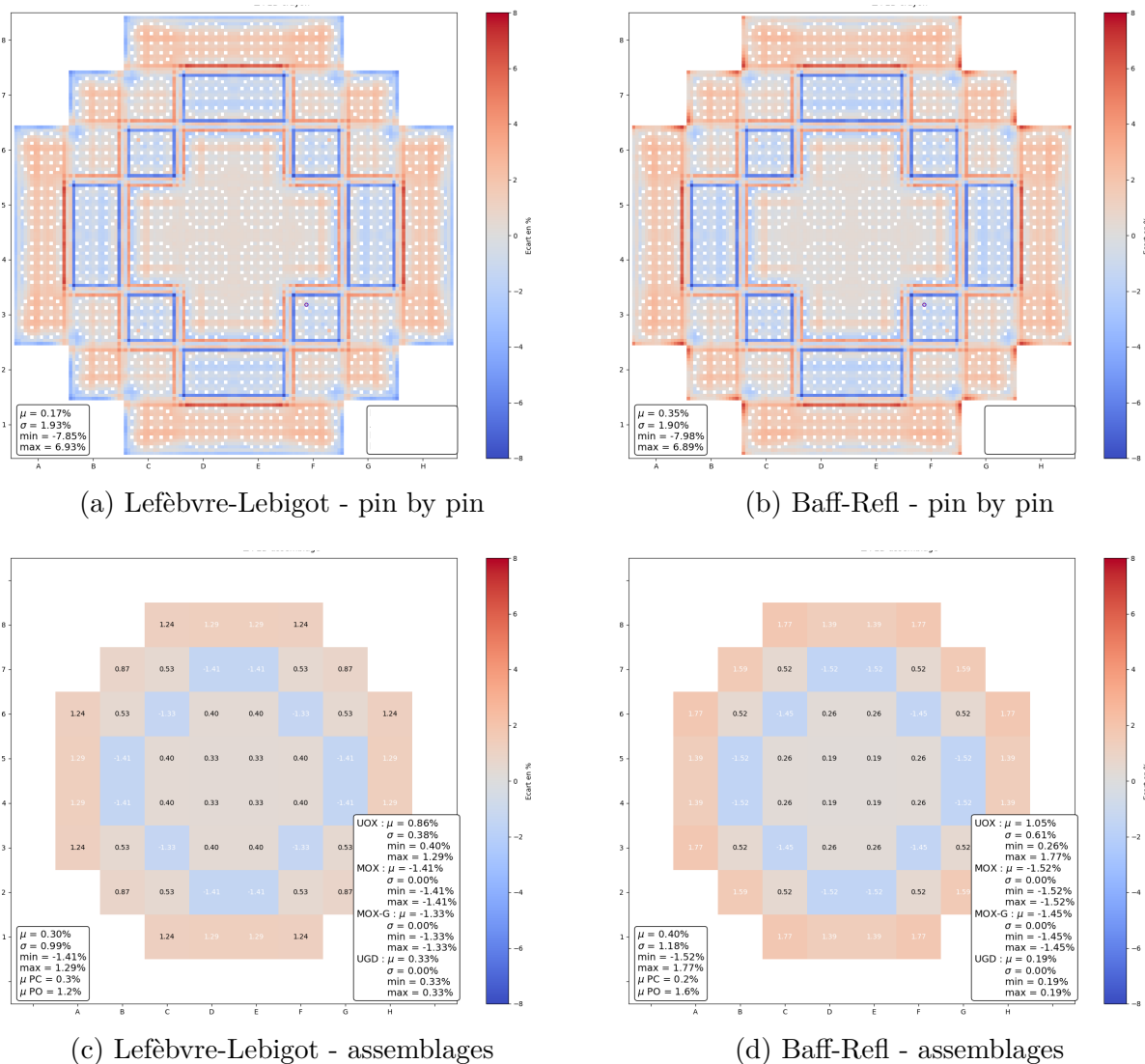


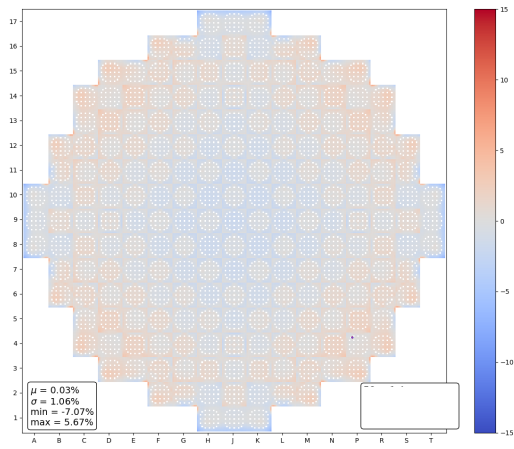
FIGURE 4.20 Cartes 2D de pourcents d'erreur de puissance par rapport à Carabas avec le réflecteur du réacteur KAIST à un burn-up de 20 GWj/t

	maillage pin by pin		maillage par assemblage	
	Lefèbvre-Lebigot	Baff-Refl	Lefèbvre-Lebigot	Baff-Refl
RMS (%)	1,93	1,9	0,99	1,18
min (%)	-7,85	-7,98	-1,41	-1,52
max (%)	6,93	6,89	1,29	1,77

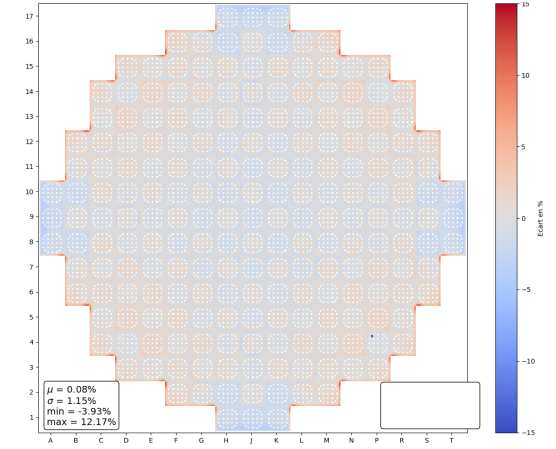
FIGURE 4.21 Tableau de résultats pour le cas nominal à 20 GWj/t sur le réacteur KAIST

En augmentant le burnup à 20 GWj/t, on observe une légère dégradation des résultats sur la figure 4.20, de la même manière pour les deux méthodes. On remarque en particulier que les zones de maxima sont plus nettes. Les zones avec très peu d'écart par rapport à la référence sont donc très peu dégradées, les augmentations d'erreurs ont lieu principalement au niveau des maxima. Les valeurs de pourcents (4.21) sont à nouveau quasiment identiques en crayon par crayon mais Baff-Refl s'est plus dégradé que Lefèbvre-Lebigot dans les résultats par assemblages. Les différences restent très faibles et tous les écarts par rapport à CARABAS sont satisfaisants.

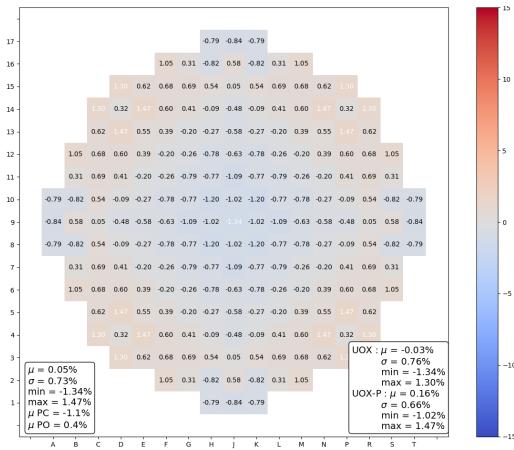
4.4.2 Réacteur 2



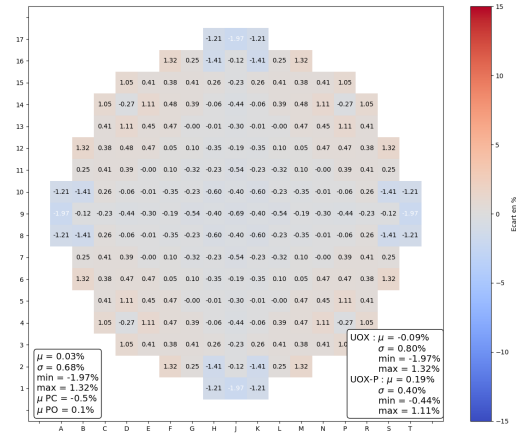
(a) Lefèbvre-Lebigot - pin by pin



(b) Baff-Refl - pin by pin



(c) Lefèbvre-Lebigot - assemblages



(d) Baff-Refl - assemblages

FIGURE 4.22 Cartes 2D de pourcents d'erreur de puissance par rapport à Carabas avec le réflecteur à eau à un burn-up de 0 GWj/t

	maillage pin by pin		maillage par assemblage	
	Lefèbvre-Lebigot	Baff-Refl	Lefèbvre-Lebigot	Baff-Refl
RMS (%)	1,06	1,15	0,73	0,68
min (%)	-7,07	-3,93	-1,34	-1,97
max (%)	5,67	12,17	1,47	1,32

FIGURE 4.23 Tableau de résultats pour le cas nominal sur le réacteur 2

Résultats pin by pin

Les deux méthodes donnent des dispersions proches à l'échelle du crayon (4.22) avec un écart-type de 1,06% pour Lefèbvre-Lebigot contre 1,15% pour Baff-Refl dans le tableau 4.23. Les valeurs extrêmes montrent en revanche des comportements très différents. Pour Lefèbvre-Lebigot, les erreurs vont de -7,07% à 5,67%, avec une asymétrie légèrement négative. Pour Baff-Refl, on obtient -3,93% à 12,17%, avec une forte asymétrie et un maximum beaucoup plus élevé que pour Lefèbvre-Lebigot.

Résultats par assemblage

Le calcul par assemblage rapproche les valeurs des maxima entre les deux méthodes. Lefèbvre-Lebigot voit son écart-type passer à 0,73% avec des extrêmes de -1,34% à 1,47%. Baff-Refl donne un écart-type de 0,68% avec des valeurs entre -1,97% et 1,32%. Les résultats sont très proches.

Interprétation

Sur ce réacteur 2 à burn-up nul, Lefèbvre-Lebigot est plus stable à l'échelle fine avec une fenêtre de valeurs plus centrée autour de 0. La forte asymétrie de Baff-Refl en crayon par crayon suggère des surestimations localisées importantes, visibles dans les coins entrants.

Comme pour KAIST, les écarts sont plus élevés qu'en configuration homogène mais restent faibles. Lefèbvre-Lebigot est légèrement meilleur pour la symétrie de ses valeurs mais les résultats sont similaires en configuration par assemblage.

Cartographies à 7 GWj/t pour le réacteur 2

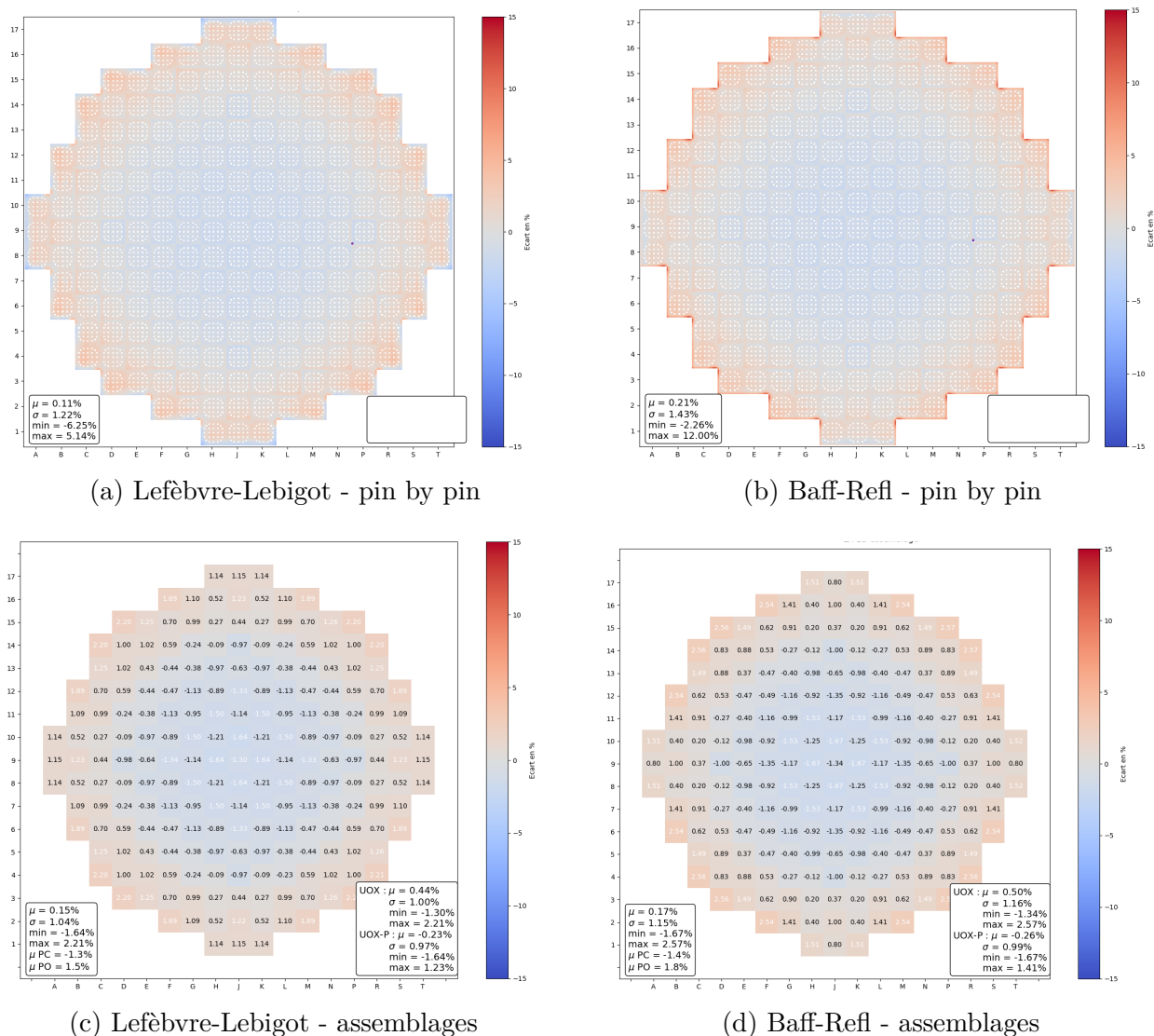


FIGURE 4.24 Cartes 2D de pourcents d'erreur de puissance par rapport à Carabas avec le réflecteur à eau à un burn-up de 7 GWj/t

	maillage pin by pin		maillage par assemblage	
	Lefèbvre-Lebigot	Baff-Refl	Lefèbvre-Lebigot	Baff-Refl
RMS (%)	1,22	1,43	1,04	1,15
min (%)	-6,25	-2,26	-1,64	-1,67
max (%)	5,14	12	2,21	2,57

FIGURE 4.25 Tableau de résultats pour le cas nominal à 7 GWj/t sur le réacteur 2

Comme pour KAIST, l'écart-type est légèrement augmenté par rapport au cas à 0 GWj/t (tableau 4.25). En pin by pin sur la figure 4.24, les maxima changent néanmoins très peu alors qu'elles augmentent légèrement dans la configuration par assemblage. On observe une légère bascule à proximité des réflecteurs par rapport au centre du cœur, qui est moins marquée à burnup nul. On retrouve toujours une surrestimation de la puissance dans les coins entrants.

4.4.3 Réacteur 3

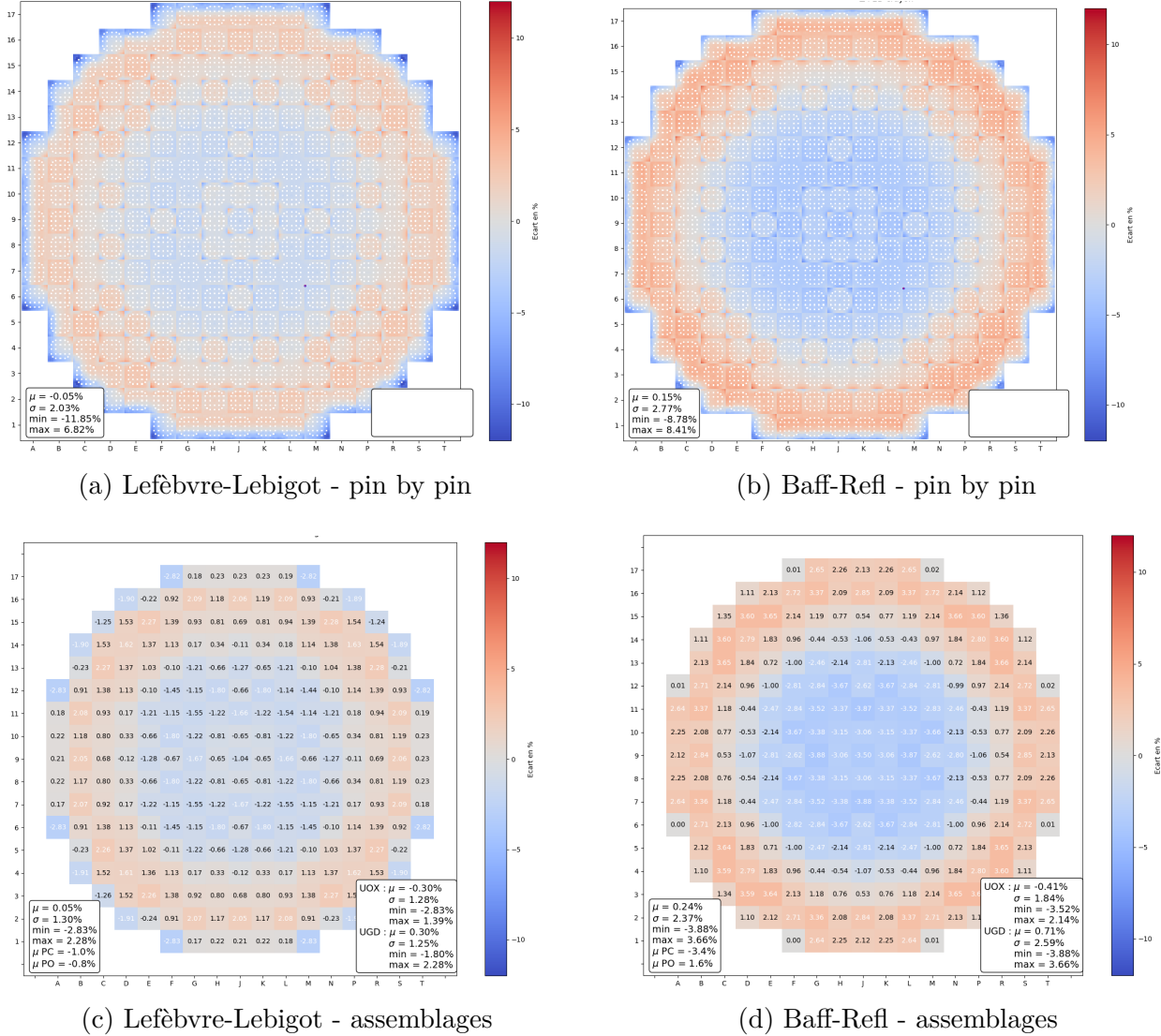


FIGURE 4.26 Cartes 2D de pourcents d'erreur de puissance par rapport à Carabas avec le réflecteur lourd à un burn-up de 0 GWj/t

	maillage pin by pin		maillage par assemblage	
	Lefèbvre-Lebigot	Baff-Refl	Lefèbvre-Lebigot	Baff-Refl
RMS (%)	2,03	2,77	1,3	2,37
min (%)	-11,85	-8,78	-2,83	-3,88
max (%)	6,82	8,41	2,28	3,66

FIGURE 4.27 Tableau de résultats pour le cas nominal sur le réacteur 3

Résultats pin by pin

D'après le tableau 4.27, Lefèbvre-Lebigot donne un écart-type un peu plus bas avec 2,03% contre 2,77% pour Baff-Refl, soit un écart de 0,74% en faveur de Lefèbvre-Lebigot. En revanche l'intervalle de valeurs est mieux centré en 0 pour Baff-Refl (-8,78% à 8,41%) que pour Lefèbvre-Lebigot (-11,85% à 6,82%).

Dans les deux cas, une bascule de puissance est flagrante (4.26) entre une sous-estimation de puissance au centre et une surrestimation près des bords. On observe un contraste entre cette zone de puissance surestimée et l'interface avec le réflecteur qui présente de fortes sous-estimations, surtout dans les coins sortants. Cela s'oppose aux sur-estimations dans les coins entrants présents dans les cartographies précédentes.

Résultats par assemblage

Le calcul par assemblage réduit les erreurs mais Lefèbvre-Lebigot voit son écart-type chuter à 1,3% avec des extrêmes de -2,83% à 2,28% alors que l'écart-type de Baff-Refl baisse seulement à 2,37% avec un intervalle de -3,88% à 3,66%. Lefèbvre-Lebigot est donc plus précis à cette échelle.

Interprétation

Dans le cas du réacteur 3, Lefèbvre-Lebigot donne des valeurs plus proches de CARABAS, comme c'était le cas dans la configuration homogène. Lefèbvre-Lebigot semble donc plus adapté dans ce cas avec un réflecteur lourd ou dans un réacteur de dimensions associées au réacteur 3 qui possède un cœur plus grand que KAIST et les réacteur 2. Il est important de préciser que les écarts restent satisfaisants dans les deux cas.

La puissance dans les coins est globalement plus sous-estimée qu'auparavant. Cela permet de faire disparaître les surrestimations dans les coins entrants mais fait apparaître des sous-estimations plus marquées dans les coins sortants. Le fait que la bascule soit plus marquée

que dans les autres réacteurs peut s'expliquer par le fait que le cœur est plus grand donc une plus grande différence d'estimation de puissance se crée entre le centre et les zones proches des bords. Cela rappelle que parmi les sources d'erreur principales, on ne trouve pas que l'interface avec le réflecteur mais aussi l'interface entre assemblages différents. La bascule est plus marquée que dans le cas réacteur 3 homogène car l'hétérogénéité des assemblages augmentent toutes les erreurs. Globalement, les écarts à la référence sont plus faibles qu'avec les autres réacteurs.

Cartographies à 3 GWj/t pour le réacteur 3

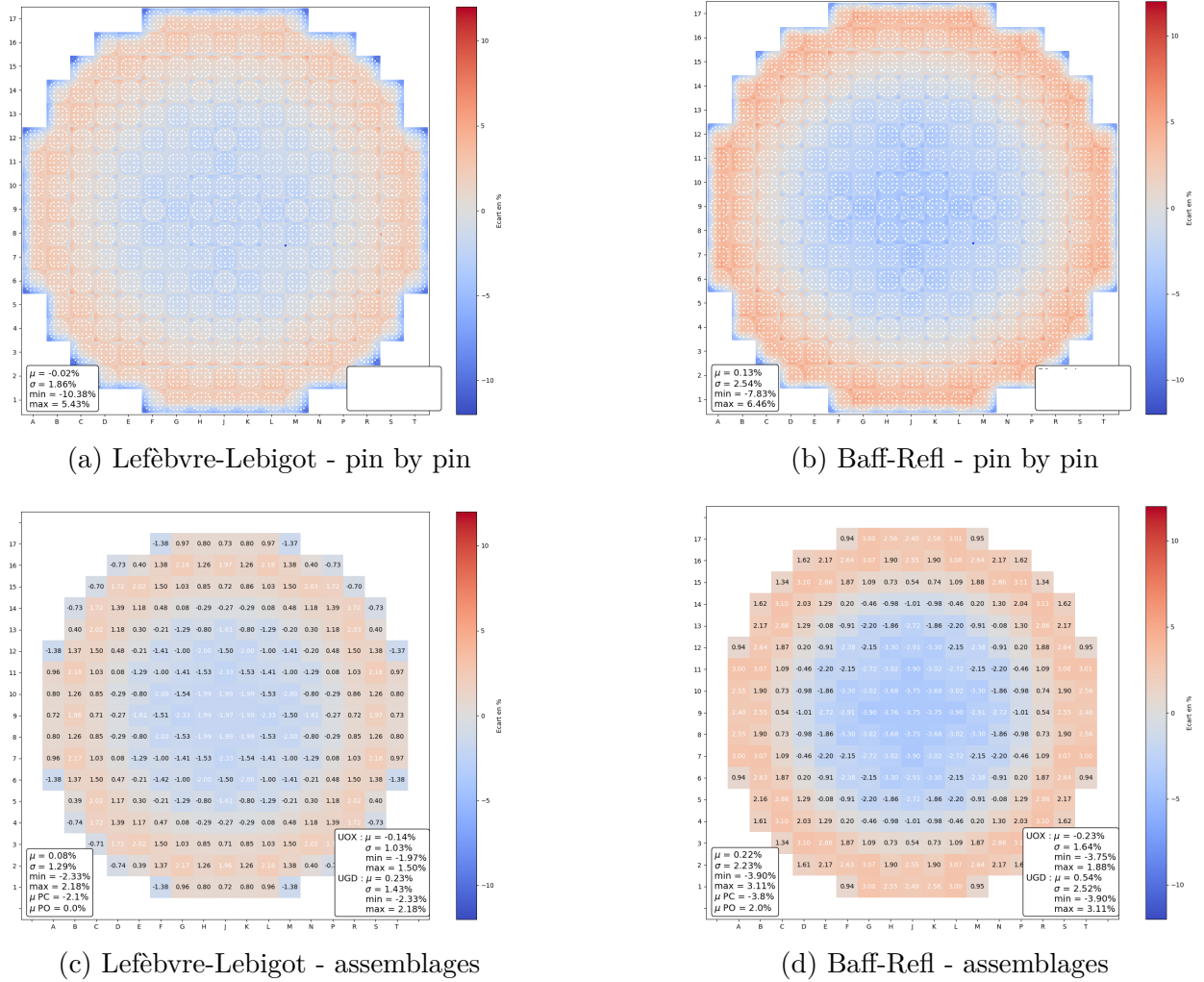


FIGURE 4.28 Cartes 2D de pourcents d'erreur de puissance par rapport à Carabas avec le réflecteur lourd à un burn-up de 3 GWj/t

	maillage pin by pin		maillage par assemblage	
	Lefèbvre-Lebigot	Baff-Refl	Lefèbvre-Lebigot	Baff-Refl
RMS (%)	1,86	2,54	1,29	2,23
min (%)	-10,38	-7,83	-2,33	-3,9
max (%)	5,43	6,46	2,18	3,11

FIGURE 4.29 Tableau de résultats pour le cas nominal à 3 GWj/t sur le réacteur 3

D'après les figures 4.28 et 4.29, à 3 GWj/t de burnup, les écarts par rapport à la référence ont cette fois légèrement diminué dans tous les cas. La bascule de puissance est toujours très visible bien qu'un peu moins marquée.

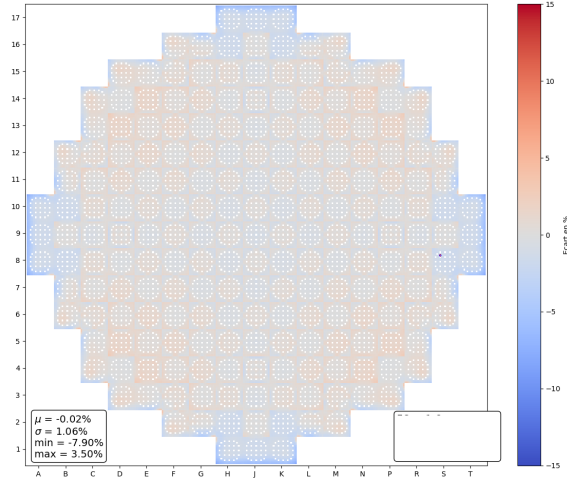
4.5 HZP

Cette partie recense les cartographies 2D d'écart de puissance par rapport à la référence en conditions HZP (Hot Zero Power). Il s'agit d'un état dans lequel le cœur est arrêté mais encore chaud. Il produit ainsi une puissance très faible et négligeable issue du flux neutronique résiduel et des produits de fission suite à l'activité nucléaire précédant l'arrêt du cœur. Le comportement du modèle Baff-Refl sera donc comparé à celui de Lefèbvre-Lebigot dans ces conditions.

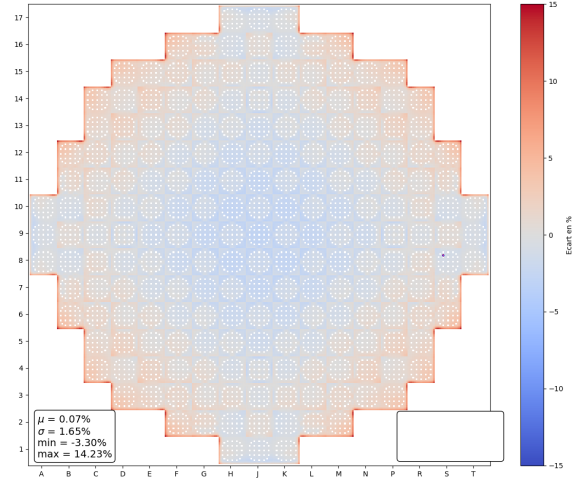
4.5.1 Réacteur 2

	maillage pin by pin		maillage par assemblage	
	Lefèbvre-Lebigot	Baff-Refl	Lefèbvre-Lebigot	Baff-Refl
RMS (%)	1,06	1,65	0,67	1,22
min (%)	-7,9	-3,3	-1,93	-2,3
max (%)	3,5	14,23	1,21	2,56

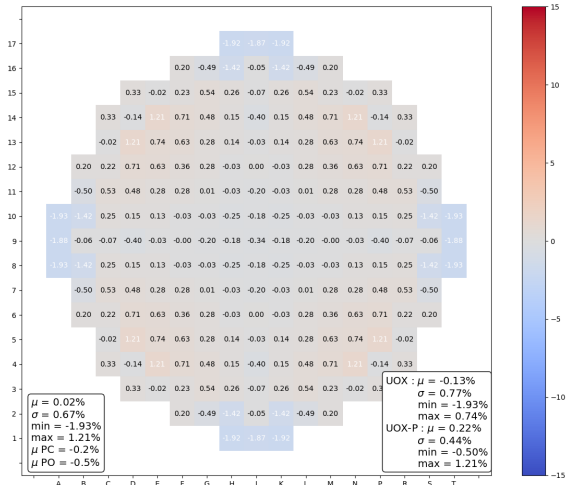
FIGURE 4.30 Tableau de résultats pour le cas HZP sur le réacteur 2



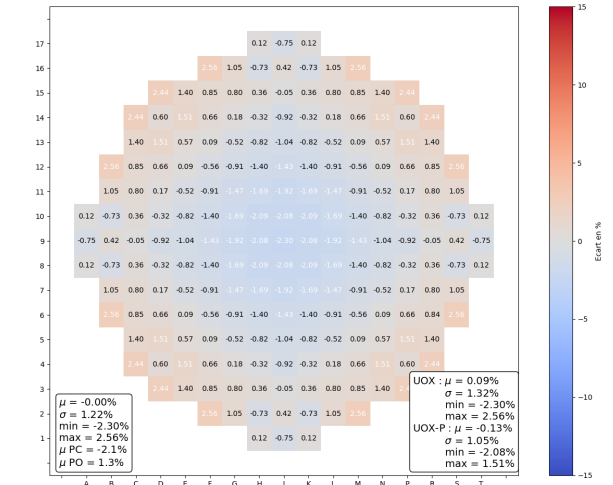
(a) Lefèbvre-Lebigot - pin by pin



(b) Baff-Refl - pin by pin



(c) Lefèbvre-Lebigot - assemblages



(d) Baff-Refl - assemblages

FIGURE 4.31 Cartes 2D de pourcents d'erreur de puissance par rapport à Carabas avec le réflecteur à eau en conditions HZP

Résultats pin by pin

Les deux méthodes présentent des écarts différents à l'échelle du crayon sur les nappes de puissance obtenues en figure 4.31. Lefèbvre-Lebigot donne un écart-type de 1,06% contre 1,65% pour Baff-Refl, soit un écart de 0,59% en faveur de Lefèbvre-Lebigot 4.30. Les valeurs extrêmes montrent des comportements plus contrastés. Pour Lefèbvre-Lebigot, les erreurs vont de -7,9% à 3,5%, avec une asymétrie marquée. Pour Baff-Refl, on obtient -3,3% à 14,23%, avec une très forte asymétrie et un maximum élevé à 14,23%.

Résultats par assemblage

Le calcul par assemblage réduit les erreurs pour les deux méthodes mais maintient un écart entre les maxima et surtout entre les écart-types. Lefèbvre-Lebigot voit son écart-type passer à 0,67% avec des extrêmes de -1,93% à 1,21%. Baff-Refl donne un écart-type de 1,22% avec des valeurs allant de -2,3% à 2,56%.

Lefèbvre-Lebigot reste donc un peu plus précis à cette échelle.

Interprétation

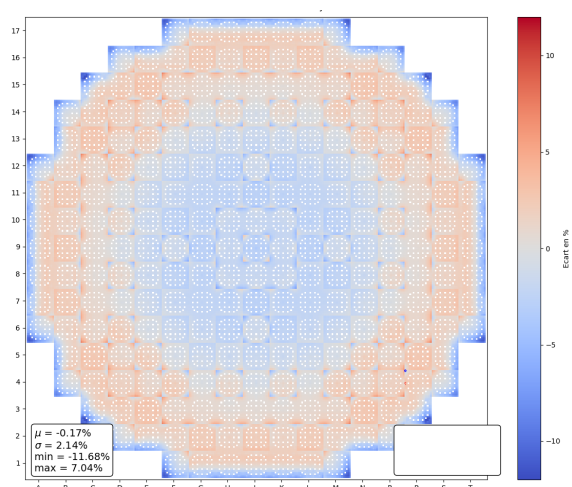
En conditions HZP, l'écart entre les deux méthodes se creuse par rapport aux conditions nominales observées précédemment sur le même réacteur. Baff-Refl présente des surestimations locales conséquentes dans les coins entrants et sortants en crayon par crayon (14,23%). Ces surrestimations sont très localisées et on observe de faibles écarts en-dehors de ces zones.

Par rapport à la configuration nominale, les écarts avec Lefèbvre-Lebigot ont été peu altérés mais avec Baff-Refl ils se sont sensiblement dégradés. Ils restent acceptables car ils sont proches des valeurs de Lefèbvre-Lebigot qui est utilisée en pratique dans les calculs industriels de EDF et dont les résultats correspondent à ceux présentés dans cette étude (s'approchant de 15% au maximum).

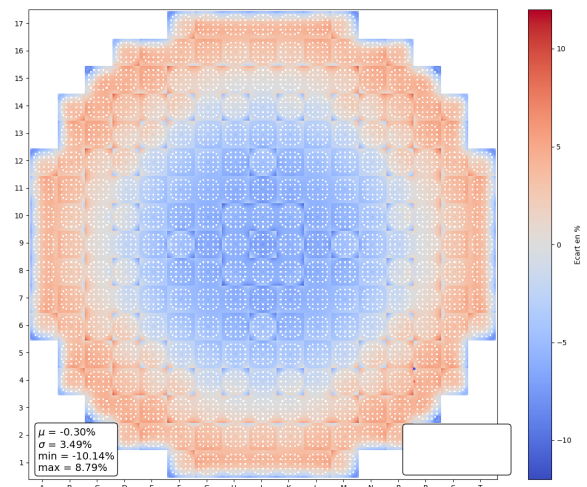
4.5.2 Réacteur 3

	maillage pin by pin		maillage par assemblage	
	Lefèbvre-Lebigot	Baff-Refl	Lefèbvre-Lebigot	Baff-Refl
RMS (%)	2,14	3,49	1,51	3,21
min (%)	-11,68	-10,14	-2,65	-6,23
max (%)	7,04	8,79	2,39	3,93

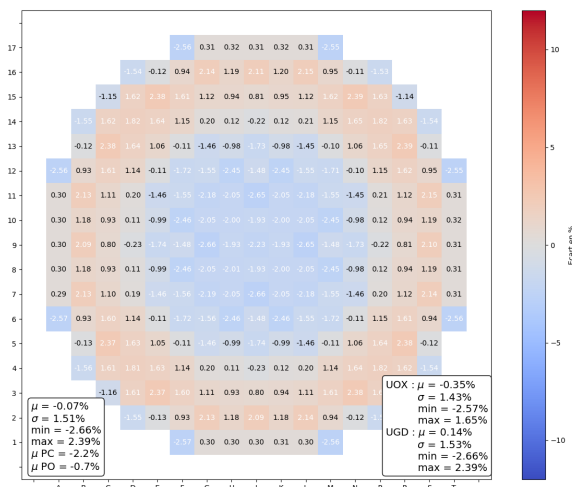
FIGURE 4.32 Tableau de résultats pour le cas HZP sur le réacteur 3



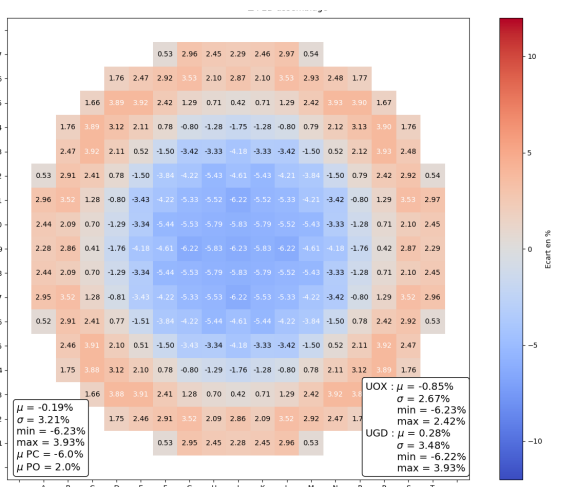
(a) Lefèbvre-Lebigot - pin by pin



(b) Baff-Refl - pin by pin



(c) Lefèbvre-Lebigot - assemblages



(d) Baff-Refl - assemblages

FIGURE 4.33 Cartes 2D de pourcents d'erreur de puissance par rapport à Carabas avec le réflecteur lourd en conditions HZP

Résultats pin by pin

D'après les nappes de puissance de la figure 4.33, les deux méthodes présentent des écarts différents à l'échelle du crayon. Lefèbvre-Lebigot donne un écart-type de 2,14% contre 3,49% pour Baff-Refl, soit un écart de 1,35% en faveur de Lefèbvre-Lebigot 4.32. Pour Lefèbvre-Lebigot, les erreurs vont de -11,68% à 7,04%, avec une asymétrie marquée. Pour Baff-Refl, on obtient -10,14% à 8,79%.

Résultats par assemblage

Le calcul par assemblage réduit les erreurs mais augmente l'écart entre les deux méthodes. Lefèbvre-Lebigot voit son écart-type passer à 1,51% avec des extrêmes de -2,65% à 2,39%. Baff-Refl donne un écart-type de 3,21% avec des valeurs entre -6,23% et 3,93%.

Lefèbvre-Lebigot est donc plus précis à cette échelle, avec un écart-type plus de deux fois plus faible.

Interprétation

On observe dans tous les cas une forte bascule, même dans le cas puissance par assemblage. La puissance est sous-estimée au centre, sur-estimée près des bords et largement sous-estimée dans les angles sortants.

En conditions HZP sur réacteur à réflecteur lourd, l'avantage de Lefèbvre-Lebigot sur Baff-Refl est plus marqué qu'en conditions nominales. Les résultats de Baff-Refl restent acceptables car ils sont proches des valeurs de Lefèbvre-Lebigot qui est utilisée en pratique dans les calculs industriels de EDF et dont les résultats correspondent à ceux présentés dans cette étude (s'approchant de 15% au maximum).

4.6 Comparaison Golfier-Vergain / Todorova

L'objectif de cette partie est de comparer la précision des résultats entre le modèle Todorova Inscatter et Golfier-Vergain. Ils se basent sur une formule différente pour calculer le coefficient de diffusion. Les deux modèles ont été testés dans la procédure Baff-Refl de DONJON et utilisés dans COCAGNE. Les résultats sont présentés dans les cartographies suivantes.

4.6.1 KAIST

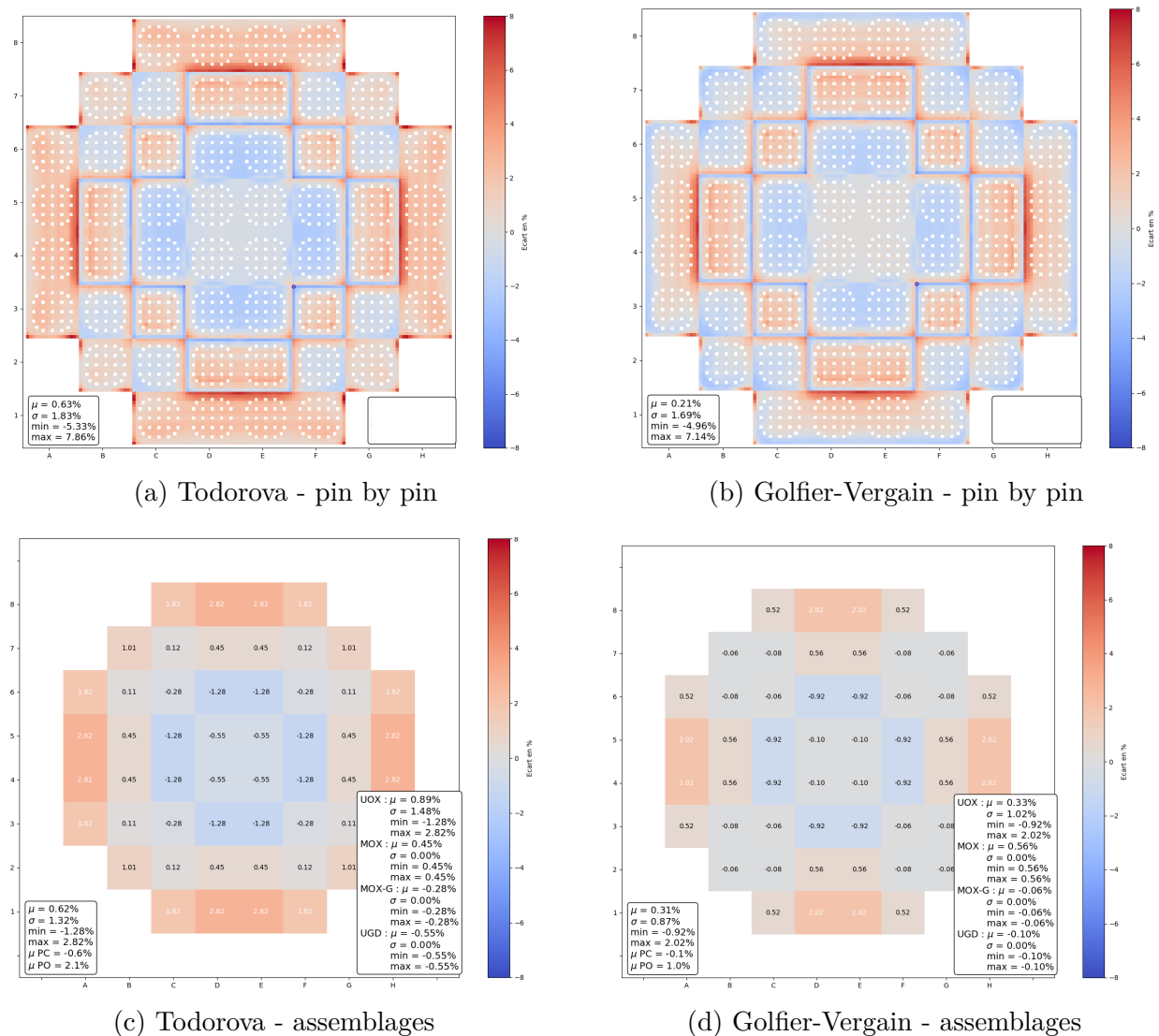


FIGURE 4.34 Cartes 2D de pourcents d'erreur de puissance par rapport à Carabas avec le réflecteur du réacteur KAIST, comparaison modèle Todorova / Golfier-Vergain

	maillage pin by pin		maillage par assemblage	
	Todorova	Golfier-Vergain	Todorova	Golfier-Vergain
RMS (%)	1,83	1,69	1,32	0,87
min (%)	-5,33	-4,96	-1,28	-0,92
max (%)	7,86	7,14	2,82	2,02

FIGURE 4.35 Tableau de résultats pour la comparaison Todorova/Golfier-Vergain sur le réacteur KAIST

Résultats pin by pin

Sur la figure 4.34, les deux modèles donnent des dispersions proches mais avec un avantage pour Golfier-Vergain. En effet, l'écart-type précisé dans le tableau 4.35 est de 1,83% pour Todorova contre 1,69% pour Golfier-Vergain, soit une différence de 0,14%. Les valeurs extrêmes confirment cette tendance. Pour Todorova, les erreurs vont de -5,33% à 7,86%, tandis que Golfier-Vergain donne -4,96% à 7,14%. L'intervalle est plus resserré pour Golfier-Vergain, avec un minimum moins bas et un maximum plus faible.

La cartographie 2D de puissance montre que toutes les zones de puissance surrestimée le sont encore plus avec le modèle Todorova, en particulier dans les coins entrants et sortants.

Résultats par assemblage

Le calcul par assemblage amplifie l'écart entre les deux modèles. Le modèle Todorova voit son écart-type passer à 1,32% avec des extrêmes de -1,28% à 2,82%. Le modèle Golfier-Vergain donne un écart-type de 0,87% avec des valeurs allant de -0,92% à 2,02%.

Interprétation

Sur ce cas KAIST, le choix du modèle de calcul du coefficient de diffusion a un impact significatif sur la qualité des résultats. Le modèle Golfier-Vergain donne systématiquement de meilleures performances que Todorova, que ce soit à l'échelle fine ou à l'échelle assemblage. Une explication intuitive pourrait être qu'avec le modèle de Golfier-Vergain, les sections efficaces sont condensées puis le calcul de coefficients de diffusion est mené avec les valeurs condensées. Au contraire, le modèle de Todorova consiste à mener les calculs puis à condenser les coefficients de fuites obtenus pour calculer les coefficients de diffusion. Ainsi la perte d'information a lieu (lors de la condensation) sur le résultat de tous les calculs précédents. Cette explication intuitive n'est pas universelle car le modèle de Golfier-Vergain n'est pas systématiquement meilleur dans la littérature [10].

L'écart reste cependant faible entre les deux modèles puisque qu'on observe des valeurs faibles de pourcents d'erreur par rapport à CARABAS. Les résultats obtenus avec Lefèbvre-Lebigot sur les mêmes configurations se situent entre ceux de Todorova et de Golfier-Vergain, mais plus proches de ces derniers.

4.6.2 Réacteur 2

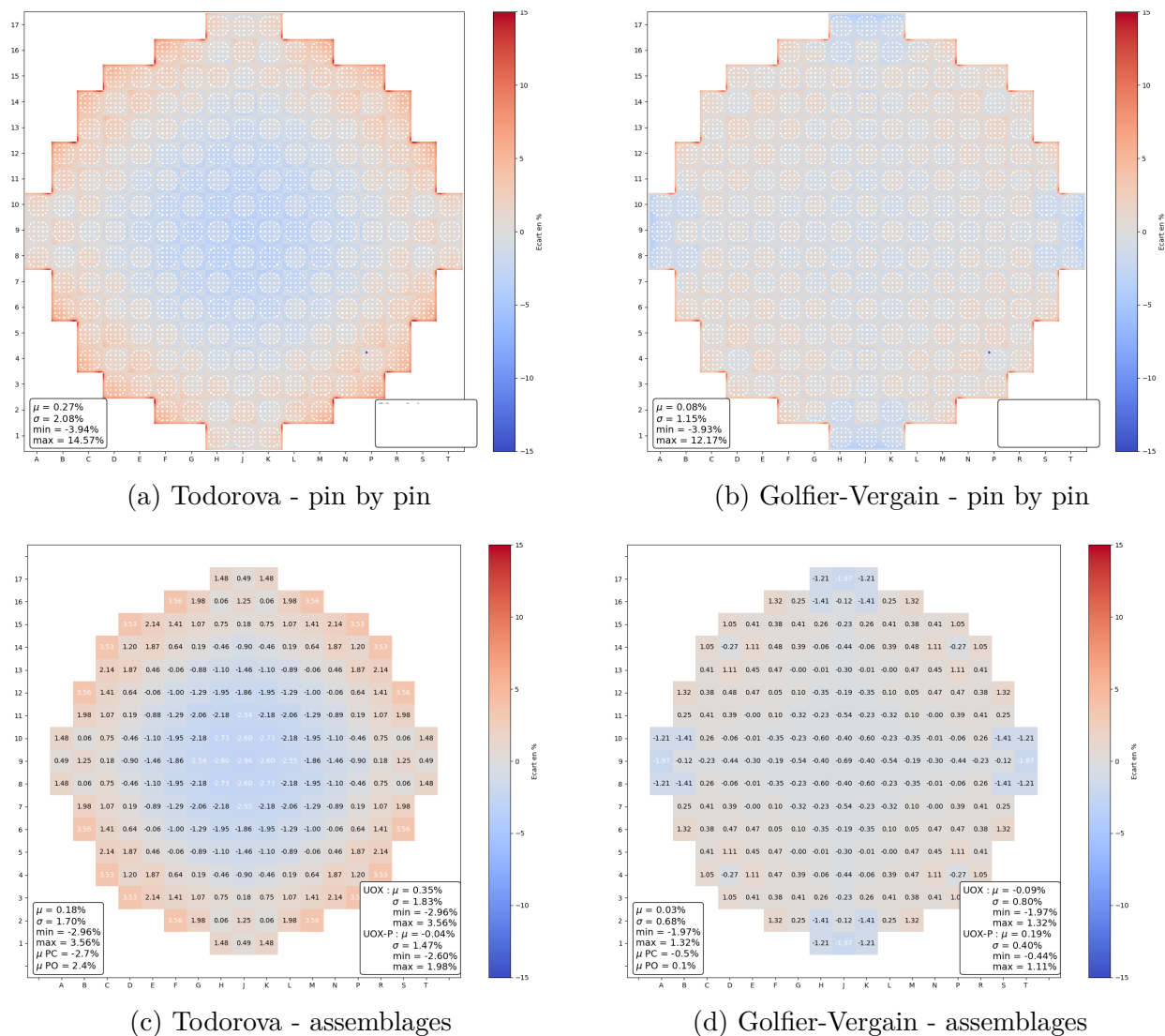


FIGURE 4.36 Cartes 2D de pourcents d'erreur de puissance par rapport à Carabas avec le réflecteur à eau, comparaison modèle Todorova / Golfier-Vergain

	maillage pin by pin		maillage par assemblage	
	Todorova	Golfier-Vergain	Todorova	Golfier-Vergain
RMS (%)	2,08	1,15	1,7	0,68
min (%)	-3,94	-3,93	-2,96	-1,97
max (%)	14,57	12,17	3,56	1,32

FIGURE 4.37 Tableau de résultats pour la comparaison Todorova/Golfier-Vergain sur le réacteur 2

Résultats pin by pin

Les deux modèles présentent des écarts très différents à l'échelle du crayon. Todorova donne un écart-type de 2,08% contre 1,15% pour Golfier-Vergain, soit un écart de 0,93% en faveur de Golfier-Vergain (tableau 4.37). Les valeurs extrêmes confirment cet avantage. Pour Todorova, les erreurs vont de -3,94% à 14,57%, avec une forte asymétrie et un maximum très élevé. Golfier-Vergain donne -3,93% à 12,17%, avec un maximum plus faible de 2,4%.

Le modèle Todorova présente une bascule de puissance (figure 4.36) marquée qui amplifie la surrestimation dans les coins entrants et sortants.

Résultats par assemblage

Le calcul par assemblage accentue encore l'écart entre les deux modèles. Todorova voit son écart-type passer à 1,7% avec des extrêmes de -2,96% à 3,56%. Golfier-Vergain donne un écart-type de seulement 0,68% avec un intervalle de valeurs de -1,97% à 1,32%.

Golfier-Vergain est donc plus précis à cette échelle, avec un écart-type plus de deux fois plus faible et des valeurs extrêmes plus resserrées.

Interprétation

Sur ce réacteur 2 à réflecteur à eau, la supériorité du modèle Golfier-Vergain sur Todorova est plus marquée que sur KAIST. Les écarts-types sont plus faibles et les intervalles d'erreur légèrement mieux contrôlés, en particulier les surestimations qui atteignaient 14,57% avec Todorova en pin by pin.

Les résultats de Lefèbvre-Lebigot présentés précédemment sur ce même réacteur (écart-type de 1,06% en crayon par crayon et 0,73% en assemblage) sont très proches des résultats avec le modèle Golfier-Vergain et donc meilleurs que ceux avec Todorova.

4.6.3 Réacteur 3

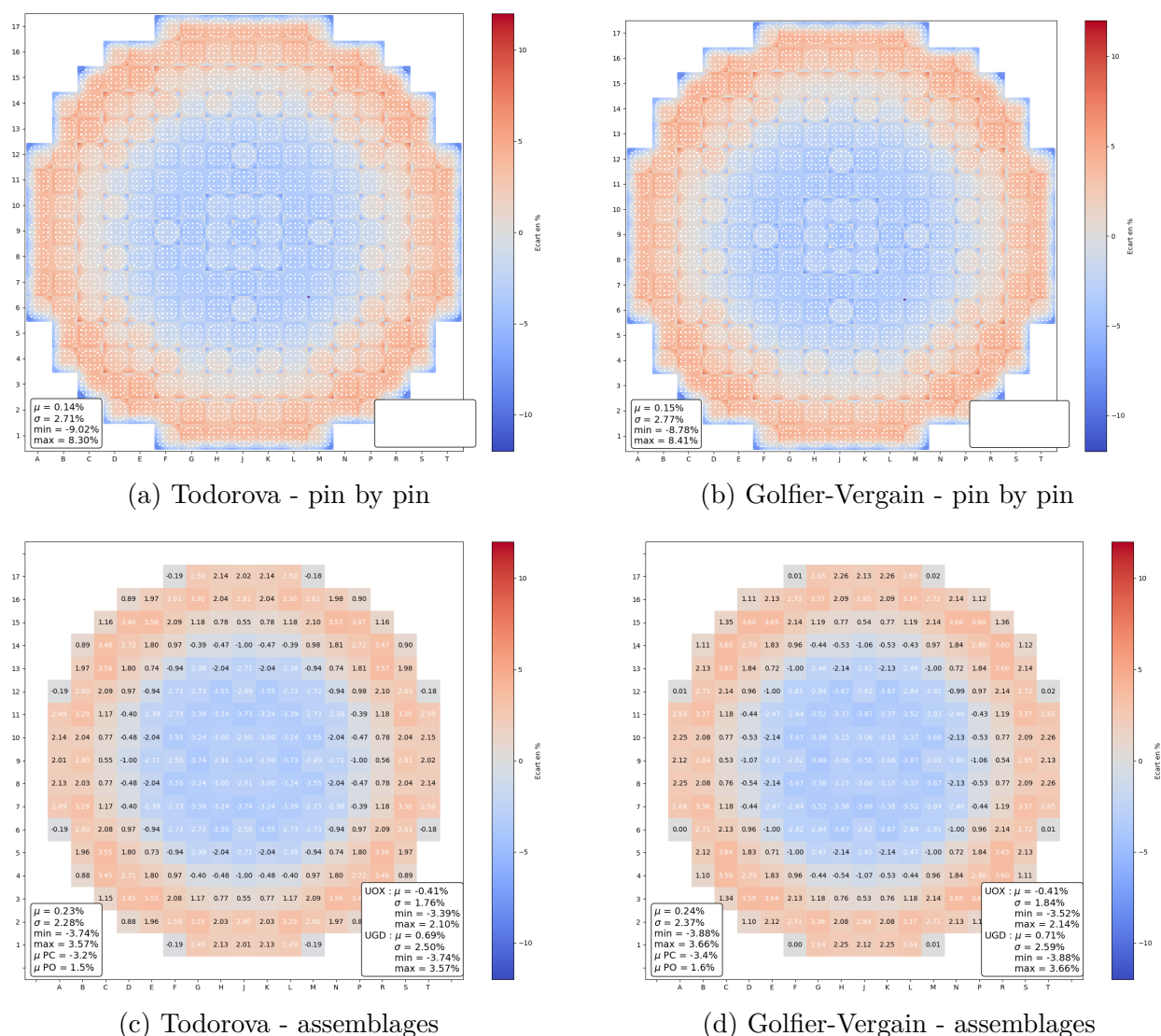


FIGURE 4.38 Cartes 2D de pourcents d'erreur de puissance par rapport à Carabas avec le réflecteur lourd, comparaison modèle Todorova / Golfier-Vergain

	maillage pin by pin		maillage par assemblage	
	Todorova	Golfier-Vergain	Todorova	Golfier-Vergain
RMS (%)	2,71	2,77	2,28	2,37
min (%)	-9,02	-8,78	-3,74	-3,88
max (%)	8,3	8,41	3,57	3,66

FIGURE 4.39 Tableau de résultats pour la comparaison Todorova/Golfier-Vergain sur le réacteur 3

Résultats pin by pin

Les deux modèles donnent des résultats très proches à l'échelle du crayon. Todorova présente un écart-type de 2,71% contre 2,77% pour Golfier-Vergain, soit une différence négligeable de 0,06% d'après le tableau 4.39. Les valeurs extrêmes sont également comparables. Pour Todorova, les erreurs vont de -9,02% à 8,3%, tandis que Golfier-Vergain donne -8,78% à 8,41%. Les intervalles sont quasi identiques, avec une légère asymétrie pour les deux modèles.

La bascule et la sous-estimation des puissance aux bords sont flagrantes dans les deux cas sur les nappes de puissance de la figure 4.38.

Résultats par assemblage

Le calcul par assemblage maintient la proximité entre les deux modèles. Todorova voit son écart-type passer à 2,28% avec des extrêmes de -3,74% à 3,57%. Golfier-Vergain donne un écart-type de 2,37% avec des valeurs de -3,88% à 3,66%.

Les différences restent minimales, avec un léger avantage pour Todorova en termes d'écart-type (2,28% contre 2,37%) et de valeurs extrêmes légèrement mieux resserrées.

Interprétation

Sur ce réacteur 3 à réflecteur lourd, contrairement aux cas précédents sur KAIST et réacteur 2, les modèles Todorova et Golfier-Vergain donnent des résultats quasiment identiques. Les écarts-types sont très proches à toutes les échelles et les intervalles d'erreur se recouvrent largement.

Cela suggère que pour ce type de configuration avec réflecteur lourd, le choix du modèle de coefficient de diffusion a moins d'impact que pour les réflecteurs à eau ou les petits cœurs. Les deux modèles peinent à descendre en dessous de 2,3% d'écart-type en assemblage, ce qui est nettement supérieur aux performances observées sur les autres réacteurs avec les mêmes modèles.

Les résultats de Lefèbvre-Lebigot sur ce même réacteur (2,03% en crayon par crayon et 1,3% en assemblage) sont meilleurs que les deux modèles Baff-Refl, confirmant que pour le réflecteur lourd, Lefèbvre-Lebigot reste la méthode la plus adaptée.

CHAPITRE 5 CONCLUSION

Au cours de cette étude, la méthode de modélisation de réflecteurs Baff-Refl implémentée dans DONJON a été comparée à Lefèbvre-Lebigot au sein des codes de calculs de EDF. Dans un premier temps, plusieurs géométries de réflecteurs ont été testées avec différentes longueurs de zone combustible et réflecteur et différents maillages. Ces tests démontrent que le maillage au sein de la zone réflecteur n'a pas d'impact significatif sur les données neutroniques calculées et que la longueur de chaque maille de la zone nourricière doit rester faible, proche de 43 cm ou moins.

Les calculs cœurs mènent à plusieurs observations. Tout d'abord, sans comparer Baff-Refl et Lefèbvre-Lebigot, une modification du coefficient de diffusion rapide D_1 a un impact conséquent sur la qualité des résultats, notamment sur une bascule de puissance radiale calculée dans certains cas. Dans le cadre de l'utilisation de Baff-Refl, on remarque que le modèle Golfier-Vergain produit des erreurs plus faibles que Todorova. De manière générale, les résultats sont légèrement meilleurs pour KAIST que pour les deux autres réacteurs malgré des dimensions plus faibles et donc un réflecteur proportionnellement plus présent. La qualité des résultats pourrait venir du fait que le réflecteur présente moins d'angles induits par des assemblages en diagonale sur les bords alors que les erreurs maximales sont localisées sur les angles. De plus, la géométrie du réflecteur de KAIST est plus simple que les deux autres avec seulement deux couches d'eau et une d'acier. La traverse 1D est donc plus représentative du vrai réflecteur en 3D que dans le cas des autres réacteurs.

Les comparaisons entre Baff-Refl et Lefèbvre-Lebigot montrent un léger avantage pour Lefèbvre-Lebigot dans le cas attente à chaud. Dans tous les autres cas, on retient des performances équivalentes entre les deux méthodes. Les écart-types, valeurs extrêmes et répartitions des valeurs autour de 0% sont très proches dans les comparaisons de puissances à la référence.

Les deux méthodes partagent des erreurs récurrentes. La première est une bascule au sein des cœurs traduisant une surestimation de puissance au centre et une sous-estimation près des bords, ou inversement. Cette imprécision vient de l'hypothèse milieu infini qui est une bonne approximation au centre du cœur mais qui est loin d'être atteinte près du réflecteur. L'erreur la plus récurrente est l'apparition de fortes surrestimations ou sous-estimations de puissance dans les coins aux bords des cœurs. Cette erreur est aussi dûe à l'hypothèse milieu infini mais surtout à la modélisation 1D du réflecteur. Cette condition est satisfaisante pour les bords réguliers mais loin d'être juste dans les coins. Les erreurs les plus extrêmes restent toujours en-dessous de 15% d'erreur par rapport à la référence, ce qui démontre la fiabilité

des deux méthodes de modélisation de réflecteur. En effet, les erreurs sont proches des valeurs de Lefèbvre-Lebigot qui est utilisée en pratique dans les calculs industriels de EDF et dont les résultats correspondent à ceux présentés dans cette étude (s’approchant de 15% au maximum).

la méthode Baff-Refl a été implémentée dans DRAGON et DONJON, avec des bibliothèques à 295 groupes, alors que Lefèbvre-Lebigot est obtenue au sein des codes de calculs de EDF. Cette différence suggère que les erreurs liées à Baff-Refl pourraient être réduites en la codant au sein des environnements de calcul de EDF. Deux tests intéressants à mener dans un projet futur sont le cas des schémas avancés de EDF avec la méthode SP_3 8 *groupes* et des calculs en 3D contrairement à ceux en 2D réalisés dans cette étude. Une autre perspective est la mise au point d’une modélisation 2D de Baff-Refl tandis qu’elle a été menée en 1D dans cette étude. Le développement de la méthode en 2D est en cours dans le cadre d’une thèse réalisée par Sami Machach chez Framatome, mais uniquement avec un calcul de flux basé sur la méthode d’expansion nodale (NEM).

RÉFÉRENCES

- [1] A. Hébert, *Applied Reactor Physics, Third edition*, 2020.
- [2] M. E. et al., “ODYSSEE, The New EDF and Framatome Nuclear Code,” Torino, Italy, Rapport technique, 19-23 avril 2026, à paraître.
- [3] R. Sanchez, I. Zmijarevic, M. Coste-Delclaux, E. Masiello, S. Santandrea, E. Martinolli, L. Villate, N. Schwartz et N. Guler, “APOLLO2 year 2010,” *Nuclear Engineering and Technology*, vol. 42, 10 2010.
- [4] S. Loubière, R. Sanchez, M. Coste, A. Hébert, Z. Stankovski, C. V. D. Gucht et I. Zmijarevic, “APOLLO2, Twelve Years Later,” dans *Int. Conf. on Mathematics and Computation, Reactor Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications*, Madrid, Spain, 1999.
- [5] M. Coste-Delclaux, C. Diop, A. Nicolas et B. Bonin, *Neutronique*, ser. E-den, Une monographie de la Direction de l’énergie nucléaire. CEA Saclay ; Groupe Moniteur, juin 2013. [En ligne]. Disponible : <https://cea.hal.science/cea-01152822>
- [6] M. Coste-Delclaux, “Modélisation du phénomène d’autoprotection dans le code de transport multigroupe APOLLO2,” Thèse de doctorat, 2006, thèse de doctorat dirigée par Mastrangelo, Victor Sciences et technologies nucléaires Paris, CNAM 2006. [En ligne]. Disponible : <http://www.theses.fr/2006CNAM0516>
- [7] S. Marguet, *La physique des réacteurs nucléaires, 3e édition*, France, 2018.
- [8] P. Girieud *et al.*, “SCIENCE Version 2 : The Most Recent Capabilities of the Framatome 3D Nuclear Code Package,” Framatome, Rapport technique, 1999.
- [9] E. Mueller et P. S. A. Atomic Energy Corp. of South Africa Ltd., “The one-dimensional normalised generalised equivalence theory (NGET) for generating equivalent diffusion theory group constants for PWR reflector regions,” janv 1991.
- [10] S. Machach, A. Hébert et A. Dall’Osso, “Improvements to the Baff-Refl Equivalence Technique Applied to Reflector Models in PWRs,” *Nuclear Science and Engineering*, vol. 199, n°. sup1, p. S1–S16, 2025. [En ligne]. Disponible : <https://doi.org/10.1080/00295639.2024.2328451>
- [11] A. Hébert, “A Consistent Technique for the Pin-by-Pin Homogenization of a Pressurized Water Reactor Assembly,” *Nuclear Science and Engineering*, vol. 113, n°. 3, p. 227–238, 1993. [En ligne]. Disponible : <https://doi.org/10.13182/NSE92-10>
- [12] G. Todorova, H. Nishi et J. Ishibashi, “Method for Condensation of the Macroscopic Transport Cross-Sections for Criticality Analyses of FBR MONJU by the Code

- NSHEX,” *Journal of Nuclear Science and Technology*, vol. 41, n°. 12, p. 1237–1244, 2004. [En ligne]. Disponible : <https://doi.org/10.1080/18811248.2004.9726353>
- [13] G. Marleau, A. Hébert et R. Roy, “A User Guide for DRAGON Version5,” Polytechnique Montréal, Rapport technique IGEG335, 2022. [En ligne]. Disponible : <http://merlin.polymtl.ca/downloads/IGE335.pdf>
- [14] A. Hébert, D. Sekki et R. Chambon, “A User Guide for DONJON Version5,” Polytechnique Montréal, Rapport technique IGEG344, 2022. [En ligne]. Disponible : <http://merlin.polymtl.ca/downloads/IGE344.pdf>
- [15] A. Hébert, “DRAGON5 and DONJON5, the contribution of École Polytechnique de Montréal to the SALOME platform,” *Annals of Nuclear Energy*, vol. 87, p. 12–20, 2016, special Issue of The 3rd International Conference on Physics and Technology of Reactors and Application. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0306454915001103>
- [16] R. Roy. (1999) The CLE-2000 Tool-Box. [En ligne]. Disponible : <http://merlin.polymtl.ca/downloads/IGE163.pdf>
- [17] A. Hébert, G. Marleau et R. Roy, “A Description of the DRAGON and TRIVAC Version5 Data Structures,” Polytechnique Montréal, Rapport technique IGEG351, 2022. [En ligne]. Disponible : <http://merlin.polymtl.ca/downloads/IGE351.pdf>
- [18] A. Hébert, “A User Guide for TRIVAC Version5,” Polytechnique Montréal, Rapport technique IGEG369, 2022. [En ligne]. Disponible : <http://merlin.polymtl.ca/downloads/IGE369.pdf>
- [19] Picard, Jean-François et Martinolli, Emanuele, “ODYSSEE - Future chaîne de calcul des coeurs commune EDF/Framatome,” p. 01, 2018. [En ligne]. Disponible : <https://doi.org/10.1051/jtsfen/2018out01>
- [20] A. Hébert, “Application of a dual variational formulation to finite element reactor calculations,” *Annals of Nuclear Energy*, vol. 20, n°. 12, p. 823–845, 1993. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0306454993900762>
- [21] —, “Mixed-dual implementations of the simplified Pn method,” *Annals of Nuclear Energy*, vol. 37, n°. 4, p. 498–511, 2010. [En ligne]. Disponible : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0306454910000277>

ANNEXE A DÉMONSTRATION DE LA BASE RAVIART-THOMAS

La méthode Baff-Refl utilisant la formulation d'éléments finis Raviart-Thomas dépend d'une base Raviart-Thomas associée à la méthode SP_N basée sur une formulation duale. La démonstration théorique de ces fondements est réalisée ici et s'appuie sur [20] et [21].

Forme de l'équation de transport utilisée

L'équation de transport stationnaire à une vitesse (ou indépendante du temps) sous sa forme du premier ordre pour les particules neutres est utilisée dans cette méthode :

$$\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) + \Sigma(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = Q(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) \quad (\text{A.1})$$

avec :

- $\phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega})$ le flux angulaire des particules
- $\Sigma(\mathbf{r})$ la section efficace macroscopique totale
- $Q(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega})$ la distribution de source de particules

Le flux angulaire est égal au produit de la densité de population des particules par leur vitesse.

Conditions aux limites

Pour résoudre l'équation A.1, des conditions aux limites sont appliquées sur ∂V qui est la surface entourant le domaine de calcul.

La frontière du domaine est décomposée en :

$$\partial V = \partial V_0 \cup \partial V_r \cup \partial V_a,$$

où :

- ∂V_0 : flux nul ;
- ∂V_r : condition de réflexion ;
- ∂V_a : condition d'albédo P_1 .

La condition d'albédo P_1 sur ∂V_a s'écrit telle que présentée dans l'équation 2.17.

Application de la méthode SP_n

La méthode SP_n , présentée dans les travaux originaux de Gelbard (1960), repose sur les équations P_n en géométrie plane 1D obtenues en se basant sur un développement en polynômes de Legendre du flux dans l'équation A.1 :

$$\frac{\ell}{2\ell+1} \frac{d}{dx} \phi_{\ell-1}(x) + \frac{\ell+1}{2\ell+1} \frac{d}{dx} \phi_{\ell+1}(x) + \Sigma(x) \phi_{\ell}(x) = Q_{\ell}(x) \quad \forall 0 \leq \ell \leq n \quad (\text{A.2})$$

avec :

- $\phi_{\ell}(x)$ le ℓ -ième moment de Legendre du flux angulaire
- $\Sigma(x)$ la section efficace macroscopique totale
- $Q_{\ell}(x)$ le ℓ -ième moment de Legendre de la source angulaire.

On suppose que $\phi_{n+1}(x)$ est nul.

Pour obtenir les équations SP_n , les deux modifications suivantes sont appliquées :

1. Remplacement de l'opérateur $\frac{d}{dx}$ par l'opérateur divergence pour ℓ pair.
2. Remplacement de l'opérateur $\frac{d}{dx}$ par l'opérateur gradient pour ℓ impair.

ce qui donne l'équation scalaire suivante pour $0 \leq \ell \leq n-1$ et ℓ pair :

$$\frac{\ell}{2\ell+1} \nabla \cdot \Phi_{\ell-1}(\mathbf{r}) + \frac{\ell+1}{2\ell+1} \nabla \cdot \Phi_{\ell+1}(\mathbf{r}) + \Sigma(\mathbf{r}) \phi_{\ell}(\mathbf{r}) = Q_{\ell}(\mathbf{r}) \quad (\text{A.3})$$

et l'équation vectorielle suivante pour $1 \leq \ell \leq n$ et ℓ impair :

$$\frac{\ell}{2\ell+1} \nabla \phi_{\ell-1}(\mathbf{r}) + \frac{\ell+1}{2\ell+1} \nabla \phi_{\ell+1}(\mathbf{r}) + \Sigma(\mathbf{r}) \Phi_{\ell}(\mathbf{r}) = \mathbf{Q}_{\ell}(\mathbf{r}) \quad (\text{A.4})$$

avec $\Phi_{\ell}(\mathbf{r})$ et $\mathbf{Q}_{\ell}(\mathbf{r})$ étant les termes de l'équation A.2 sous forme vectorielle.

La condition aux limites d'albédo de Marshak en géométrie plane est généralisable à la méthode SP_n :

$$(1 + \beta(\mathbf{r})) \Phi_{\ell}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{N}(\mathbf{r}) - (1 - \beta(\mathbf{r})) \sum_{\substack{m=0 \\ m \text{ pair}}}^{n-1} M_{\ell,m} \phi_m(\mathbf{r}) = 0 \quad \text{si } \mathbf{r} \in \partial V_{\beta} \quad (\text{A.5})$$

avec ℓ un entier impair. Les coefficients de Marshak dans cette équation sont définis par :

$$M_{\ell,m} = (2m+1) \int_0^1 d\mu P_{\ell}(\mu) P_m(\mu). \quad (\text{A.6})$$

Les éléments finis de Raviart-Thomas doivent s'appuyer sur des équations impliquant une inconnue scalaire et une vectorielle. C'est le cas ici avec les équations A.3 et A.4 impliquant le flux scalaire de parité paire $\phi_\ell(\mathbf{r})$ et le flux vectoriel de parité impaire $\Phi_\ell(\mathbf{r})$.

Formulation primale

Dans la formulation primale, un flux $\phi(\mathbf{r})$ continu est imposé sur tout le domaine. La fonctionnelle associée est définie sur l'espace de Sobolev $H(V)$:

$$H(V) = \{\phi \in L^2(V) \mid \nabla \phi \in L^2(V)\}.$$

Le carré de ϕ est donc intégrable ainsi que sa dérivée, $L^2(V)$ étant le domaine sur lequel les carrés des fonctions sont intégrables sur le volume V .

Et ϕ est nulle sur les frontières ∂V_0 :

$$H_{\partial V_0}(V) = \{\phi \in H^1(V) \mid \phi|_{\partial V_0} = 0\}.$$

La fonctionnelle primale, utilisée dans de nombreux travaux liés à la méthode des éléments finis, est définie par :

$$\begin{aligned} F_a(\phi) = \frac{1}{2} \int_V d^3\mathbf{r} \left\{ \nabla \phi(\mathbf{r}) \cdot [D(\mathbf{r}) \nabla \phi(\mathbf{r})] + \Sigma_r(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r})^2 - 2\phi(\mathbf{r}) S(\mathbf{r}) \right\} \\ + \frac{1}{4} \int_{\partial V_\beta} d^2\mathbf{r} \frac{1 - \beta(\mathbf{r})}{1 + \beta(\mathbf{r})} \phi(\mathbf{r})^2 \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Avec le flux neutronique appartenant à l'espace de Sobolev

$$\phi(\mathbf{r}) \in H_{\partial V_0}(V),$$

c'est-à-dire qu'il est L^2 -intégrable sur V , possède des dérivées premières L^2 -intégrables, et s'annule sur la partie du bord où la condition de flux nul est imposée. Les fonctions de $H_{\partial V_0}(V)$ sont continues sur V .

Formulation duale

Dans la formulation duale, la continuité du *courant neutronique* est imposée plutôt que celle du flux. Le flux peut donc être discontinu entre les sous-domaines.

Une fonctionnelle mixte–duale peut alors s’écrire :

$$F_b\{\phi, \mathbf{J}\} = \frac{1}{2} \int_V d^3\mathbf{r} \left\{ -\mathbf{J}(\mathbf{r}) \cdot [D(\mathbf{r})^{-1} \mathbf{J}(\mathbf{r})] + 2\phi(\mathbf{r}) \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}) + \Sigma_r(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r})^2 - 2\phi(\mathbf{r}) S(\mathbf{r}) \right\} \quad (\text{A.8})$$

$$- \int_{\partial V_a} d^2\mathbf{r} \frac{1 + \beta(\mathbf{r})}{1 - \beta(\mathbf{r})} [\mathbf{J}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{r})]^2$$

où

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) \in H_{\partial V_r}(\text{div}; V)$$

Avec

$$H_{\partial V_r}(\text{div}; V) = \left\{ \mathbf{v} \left| \mathbf{v} \in [L^2(V)]^3 \text{ and } \nabla \cdot \mathbf{v} \in L^2(V) \right. \right\}.$$

Formulation variationnelle duale

Dans la formulation duale, on impose que le flux impair $\Phi_{\ell+1}(\mathbf{r})$ soit continu à travers toute interface interne du domaine. La continuité du flux pair ϕ_ℓ provient d’une condition naturelle résultant de la fonctionnelle.

La fonctionnelle mixte–duale dépend de deux champs inconnus, $\phi_\ell(\mathbf{r})$ (flux pair d’ordre ℓ) et $\Phi_{\ell+1}(\mathbf{r})$ (flux impair d’ordre $\ell + 1$), où ℓ est un entier pair.

Une fonctionnelle de premier ordre est choisie ici pour que ses équations d’Euler reproduisent à la fois les équations SP_ℓ obtenues précédemment et les conditions aux limites physiques. La fonctionnelle mixte–duale dépend de deux champs inconnus, $\phi_\ell(\mathbf{r})$ (flux pair d’ordre ℓ) et $\Phi_{\ell+1}(\mathbf{r})$ (flux impair d’ordre $\ell + 1$), avec ℓ un entier pair. On obtient la formule suivante pour la fonctionnelle duale :

$$\begin{aligned} F_b\{\phi_\ell, \Phi_{\ell+1}\} = & \frac{1}{2} \int_V d^3r \{ -(2\ell + 3) \Phi_{\ell+1}(\mathbf{r}) \cdot [\Sigma_{\ell+1}(\mathbf{r}) \Phi_{\ell+1}(\mathbf{r})] \\ & + 2(\ell + 1) \phi_\ell(\mathbf{r}) \nabla \cdot \Phi_{\ell+1}(\mathbf{r}) + 2\ell \phi_\ell(\mathbf{r}) \nabla \cdot \Phi_{\ell-1}(\mathbf{r}) \\ & + 2(\ell + 2) \phi_{\ell+2}(\mathbf{r}) \nabla \cdot \Phi_{\ell+1}(\mathbf{r}) + (2\ell + 1) \Sigma_\ell(\mathbf{r}) \phi_\ell(\mathbf{r})^2 \\ & - 2(2\ell + 1) \phi_\ell(\mathbf{r}) Q_\ell(\mathbf{r}) + 2(2\ell + 3) \Phi_{\ell+1}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{Q}_{\ell+1}(\mathbf{r}) \} \quad (\text{A.9}) \\ & - \frac{1}{2} \int_{\partial V_\beta} d^2r (2\ell + 3) \Lambda(\mathbf{r}) [\Phi_{\ell+1}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{N}(\mathbf{r})] \\ & \times \sum_{\substack{m=1 \\ m \text{ impair}}}^n (2 - \delta_{\ell+1,m}) \widehat{M}_{\ell+1,m} [\Phi_m(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{N}(\mathbf{r})] \end{aligned}$$

L’espace Sobolev utilisé pour le flux impair est :

$$H_{\partial V_1}(\text{div}; V) = \left\{ \mathbf{v} ; \mathbf{v} \in [L^2(V)]^3 \text{ and } \nabla \cdot \mathbf{v} \in L^2(V) \right\} \quad (\text{A.10})$$

Si $\Phi_{\ell+1} \in H_{\text{div}}(V)$, son flux normal $\Phi_{\ell+1} \cdot \mathbf{N}$ est alors continu pour toute normale unitaire $\mathbf{N}$. Cela impose la continuité du flux impair dans tout le domaine.

Les coefficients de Marshak apparaissant dans (A.9) sont exprimés de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \widehat{M}_{\ell,m} &= (2m+1) \int_0^1 d\mu \mu P_\ell(\mu) P_m(\mu) \\ &= \frac{\ell}{2\ell+1} M_{\ell-1,m} + \frac{\ell+1}{2\ell+1} M_{\ell+1,m}. \end{aligned}$$

Conditions de stationnarité

Les conditions de stationnarité sont exprimées par rapport aux deux champs :

$$\delta_{\delta\Phi} F_b = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ \frac{d}{d\epsilon} F_b \{ \phi_\ell(\mathbf{r}), \Phi_{\ell+1}(\mathbf{r}) + \epsilon \delta \Phi_{\ell+1}(\mathbf{r}) \} \right\} = 0$$

$$\delta_{\delta\phi} F_b = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ \frac{d}{d\epsilon} F_b \{ \phi_\ell(\mathbf{r}) + \epsilon \delta \phi_\ell(\mathbf{r}), \Phi_{\ell+1}(\mathbf{r}) \} \right\} = 0$$

En développant l'expression de la variation par rapport au flux impair, on obtient :

$$\begin{aligned} \delta_{\delta\Phi} F_b &= \int_V d^3r \left\{ - (2\ell+3) \delta \Phi_{\ell+1}(r) \cdot [\Sigma_{\ell+1}(r) \Phi_{\ell+1}(r)] \right. \\ &\quad + (\ell+1) \phi_\ell(r) \nabla \cdot \delta \Phi_{\ell+1}(r) + (\ell+2) \phi_{\ell+2}(r) \nabla \cdot \delta \Phi_{\ell+1}(r) \\ &\quad \left. + (2\ell+3) \delta \Phi_{\ell+1}(r) \cdot Q_{\ell+1}(r) \right\} \\ &\quad - \int_{\partial V_\beta} d^2r (2\ell+3) \Lambda(r) [\delta \Phi_{\ell+1}(r) \cdot N(r)] \\ &\quad \times \sum_{\substack{m=1 \\ m \text{ impair}}}^n \widehat{M}_{\ell+1,m} [\Phi_m(r) \cdot N(r)] = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

On obtient aussi la variation par rapport au flux pair :

$$\begin{aligned} \delta_{\delta\phi} F_b &= \int_V d^3r \delta \phi_\ell(r) \{ \ell \nabla \cdot \Phi_{\ell-1}(r) + (\ell+1) \nabla \cdot \Phi_{\ell+1}(r) \\ &\quad + (2\ell+1) \Sigma_\ell(r) \phi_\ell(r) - (2\ell+1) Q_\ell(r) \} = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

Subdivision du domaine et théorème de Gauss

Le domaine est décomposé en sous-volumes V_i . En appliquant l'identité vectorielle $\nabla \cdot (c\mathbf{v}) = (\nabla c) \cdot \mathbf{v} + c \nabla \cdot \mathbf{v}$ puis le théorème de Gauss, on obtient pour chaque sous-volume :

$$\int_{V_i} d^3r \nabla \phi_\ell(\mathbf{r}) \cdot \delta \Phi_{\ell+1}(\mathbf{r}) = - \int_{V_i} d^3r \phi_\ell(\mathbf{r}) \nabla \cdot \delta \Phi_{\ell+1}(\mathbf{r}) + \int_{\partial V_i} d^2r \phi_\ell(\mathbf{r}) \delta \Phi_{\ell+1}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{N}_i(\mathbf{r}). \quad (\text{A.13})$$

Chaque frontière se décompose en :

$$\partial V_i = \partial V_{iI} \cup \partial V_{iB},$$

où ∂V_{iI} correspond aux interfaces internes et ∂V_{iB} au bord physique.

En introduisant (A.13) dans (A.11), on obtient :

$$\begin{aligned} \delta_{\delta \Phi} F_b = \sum_{i=1}^N & \left[- \int_{V_i} d^3r \left[(2\ell + 3) \Sigma_{\ell+1} \Phi_{\ell+1}(\mathbf{r}) + (\ell + 1) \nabla \phi_\ell(\mathbf{r}) \right. \right. \\ & \left. \left. + (\ell + 2) \nabla \phi_{\ell+2}(\mathbf{r}) - (2\ell + 3) \mathbf{Q}_{\ell+1}(\mathbf{r}) \right] \cdot \delta \Phi_{\ell+1}(\mathbf{r}) \right. \\ & \left. + \int_{\partial W_i} d^2r \left[(\ell + 1) \phi_\ell(\mathbf{r}) + (\ell + 2) \phi_{\ell+2}(\mathbf{r}) \right] \left[\delta \Phi_{\ell+1}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{N}_i(\mathbf{r}) \right] \right. \\ & \left. + \int_{\partial U_i} d^2r \left\{ (\ell + 1) \phi_\ell(\mathbf{r}) + (\ell + 2) \phi_{\ell+2}(\mathbf{r}) - (2\ell + 3) \Lambda(\mathbf{r}) \right. \right. \\ & \left. \left. \times \sum_{\substack{m=1 \\ m \text{ impair}}}^n \widehat{\mathcal{M}}_{\ell+1,m} \left[\Phi_m(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{N}_i(\mathbf{r}) \right] \right\} \left[\delta \Phi_{\ell+1}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{N}_i(\mathbf{r}) \right] \right] = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

Équations d'Euler de la formulation duale

En combinant (A.12), (A.14) et les conditions de bord, on obtient les équations naturelles suivantes :

1. Équation d'ordre pair SP_ℓ

$$\frac{\ell}{2\ell + 1} \nabla \cdot \Phi_{\ell-1}(\mathbf{r}) + \frac{\ell + 1}{2\ell + 1} \nabla \cdot \Phi_{\ell+1}(\mathbf{r}) + \Sigma_\ell(\mathbf{r}) \phi_\ell(\mathbf{r}) = Q_\ell(\mathbf{r}) \quad (\text{A.15})$$

2. Équation d'ordre impair $\mathbf{SP}_{\ell+1}$

$$\frac{\ell+1}{2\ell+3}\nabla\phi_\ell(\mathbf{r}) + \frac{\ell+2}{2\ell+3}\nabla\phi_{\ell+2}(\mathbf{r}) + \Sigma_{\ell+1}\mathbf{\Phi}_{\ell+1}(\mathbf{r}) = \mathbf{Q}_{\ell+1}(\mathbf{r}) \quad (\text{A.16})$$

3. Continuité du flux impair

$$\Phi_{\ell+1} \cdot \mathbf{N} \quad \text{continu sur tout le domaine.} \quad (\text{A.17})$$

4. Condition d'albédo de Marshak

$$\phi_\ell(\mathbf{r}) - \Lambda(\mathbf{r}) \sum_{\substack{m=1 \\ m \text{ impair}}}^n \mathcal{M}_{\ell,m}[\mathbf{\Phi}_m(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{N}(\mathbf{r})] = 0 \quad \text{si } \mathbf{r} \in \partial V_\rho \quad (\text{A.18})$$

5. Condition de flux nul

$$\phi_\ell(\mathbf{r}) = 0 \quad \mathbf{r} \in \partial V_c. \quad (\text{A.19})$$

Introduction de la base de Raviart–Thomas

La discrétisation par éléments finis adaptée à la formulation variationnelle mixte–duale représentée par les équations A.11 et A.12 est introduite dans cette partie. La recherche du point stationnaire $\{\phi_\ell(\mathbf{r}), \Phi_{\ell+1}(\mathbf{r})\}$ est limitée à un sous-espace polynomial de type Raviart–Thomas :

$$\phi_\ell(\mathbf{r}) \in L^2(V), \quad \Phi_{\ell+1}(\mathbf{r}) \in H_{\partial V_1}(\text{div}; V).$$

Cette démonstration se limite aux éléments cartésiens sans développement dans le cas d'éléments hexagonaux.

L'élément de référence est le cube unitaire :

$$-1/2 \leq u \leq 1/2, \quad -1/2 \leq v \leq 1/2, \quad -1/2 \leq w \leq 1/2.$$

En se basant sur cet élément de référence, une base polynomiale tensorielle peut être définie à partir de produits de polynômes de Legendre.

Les termes apparaissant dans les équations variationnelles A.11 et A.12 sont évalués à l'aide de matrices d'intégration pré-calculées. Pour un entier impair i , on a :

$$\langle \delta \mathbf{\Phi}_\ell, A_\ell \mathbf{\Phi}_\ell \rangle = -(2\ell+1) \int_V d^3r \delta \mathbf{\Phi}_\ell(\mathbf{r}) \cdot [\Sigma_\ell(\mathbf{r}) \mathbf{\Phi}_\ell(\mathbf{r})] \quad (\text{A.20})$$

$$\langle \phi_{\ell\pm 1}, R\delta\Phi_\ell \rangle = \int_V d^3r \phi_{\ell+1}(\mathbf{r}) \nabla \cdot \delta\Phi_\ell(\mathbf{r}) \quad (\text{A.21})$$

$$\langle \delta\Phi_\ell, S_\ell \rangle = -(2\ell + 1) \int_V d^3r \delta\Phi_\ell(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{Q}_\ell(\mathbf{r}) \quad (\text{A.22})$$

$$\langle \delta\Phi_\ell, \Lambda_{\ell,m} \Phi_m \rangle_{\partial V_\beta} = -(2\ell + 1) \tilde{\mathcal{M}}_{\ell,m} \int_{\partial V_\beta} d^2r \Lambda(\mathbf{r}) [\delta\Phi_\ell(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{N}(\mathbf{r})] \times [\Phi_m(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{N}(\mathbf{r})] \quad (\text{A.23})$$

En utilisant ces définitions, l'équation A.11 devient :

$$\langle \delta\Phi_\ell, A_\ell \Phi_\ell \rangle + \ell \langle \phi_{\ell-1}, R\delta\Phi_\ell \rangle + (\ell + 1) \langle \phi_{\ell+1}, R\delta\Phi_\ell \rangle + \sum_{\substack{m=1 \\ m \text{ impair}}}^n \langle \delta\Phi_\ell, \Lambda_{\ell,m} \Phi_m \rangle_{\partial V_\beta} = \langle \delta\Phi_\ell, S_\ell \rangle \quad (\text{A.24})$$

De même, les termes de l'équation A.12 peuvent être exprimés ainsi :

$$\langle \delta\phi_\ell, R\Phi_{\ell\pm 1} \rangle = \int_V d^3r \delta\phi_\ell(\mathbf{r}) \nabla \cdot \Phi_{\ell\pm 1}(\mathbf{r}) \quad (\text{A.25})$$

$$\langle \delta\phi_\ell, T_\ell \phi_\ell \rangle = (2\ell + 1) \int_V d^3r \delta\phi_\ell(\mathbf{r}) \Sigma_\ell(\mathbf{r}) \phi_\ell(\mathbf{r}) \quad (\text{A.26})$$

$$\langle \delta\phi_\ell, S_\ell \rangle = (2\ell + 1) \int_V d^3r \delta\phi_\ell(\mathbf{r}) Q_\ell(\mathbf{r}) \quad (\text{A.27})$$

L'équation A.12 devient alors :

$$\langle \delta\phi_\ell, T_\ell \phi_\ell \rangle + \ell \langle \delta\phi_\ell, R\Phi_{\ell-1} \rangle + (\ell + 1) \langle \delta\phi_\ell, R\Phi_{\ell+1} \rangle = \langle \delta\phi_\ell, S_\ell \rangle \quad (\text{A.28})$$

Le flux pair est représenté dans une base de Raviart–Thomas :

$$\phi_\ell(u, v, w) = \sum_{k_1=0}^{K-1} \sum_{k_2=0}^{K-1} \sum_{k_3=0}^{K-1} \phi_{k_1, k_2, k_3} \tilde{P}_{k_1}(u) \tilde{P}_{k_2}(v) \tilde{P}_{k_3}(w) \quad (\text{A.29})$$

et la variation :

$$\delta\phi_\ell(u, v, w) = \sum_{k_1=0}^{K-1} \sum_{k_2=0}^{K-1} \sum_{k_3=0}^{K-1} \delta\phi_{k_1, k_2, k_3} \tilde{P}_{k_1}(u) \tilde{P}_{k_2}(v) \tilde{P}_{k_3}(w) \quad (\text{A.30})$$

Dans le cas du flux impair, des polynômes de Legendre normalisés $L_{k_1}(u)$, $L_{k_2}(v)$ et $L_{k_3}(w)$ sont introduits et deux formules pour chaque coordonnée u , v et w sont obtenues :

$$\Phi_{u,\ell+1}(u, v, w) = \sum_{k_1=0}^K \sum_{k_2=0}^{K-1} \sum_{k_3=0}^{K-1} \Phi_{u,k_1,k_2,k_3} L_{k_1}(u) \tilde{P}_{k_2}(v) \tilde{P}_{k_3}(w) \quad (\text{A.31})$$

$$\delta \Phi_{u,\ell+1}(u, v, w) = \sum_{k_1=0}^K \sum_{k_2=0}^{K-1} \sum_{k_3=0}^{K-1} \delta \Phi_{u,k_1,k_2,k_3} L_{k_1}(u) \tilde{P}_{k_2}(v) \tilde{P}_{k_3}(w) \quad (\text{A.32})$$

$$\Phi_{v,\ell+1}(u, v, w) = \sum_{k_1=0}^{K-1} \sum_{k_2=0}^K \sum_{k_3=0}^{K-1} \Phi_{v,k_1,k_2,k_3} \tilde{P}_{k_1}(u) L_{k_2}(v) \tilde{P}_{k_3}(w) \quad (\text{A.33})$$

$$\delta \Phi_{v,\ell+1}(u, v, w) = \sum_{k_1=0}^{K-1} \sum_{k_2=0}^K \sum_{k_3=0}^{K-1} \delta \Phi_{v,k_1,k_2,k_3} \tilde{P}_{k_1}(u) L_{k_2}(v) \tilde{P}_{k_3}(w) \quad (\text{A.34})$$

$$\Phi_{w,\ell+1}(u, v, w) = \sum_{k_1=0}^{K-1} \sum_{k_2=0}^{K-1} \sum_{k_3=0}^K \Phi_{w,k_1,k_2,k_3} \tilde{P}_{k_1}(u) \tilde{P}_{k_2}(v) L_{k_3}(w) \quad (\text{A.35})$$

$$\delta \Phi_{w,\ell+1}(u, v, w) = \sum_{k_1=0}^{K-1} \sum_{k_2=0}^{K-1} \sum_{k_3=0}^K \delta \Phi_{w,k_1,k_2,k_3} \tilde{P}_{k_1}(u) \tilde{P}_{k_2}(v) L_{k_3}(w) \quad (\text{A.36})$$

En substituant les équations (A.29) à (A.36) dans l'équation (A.24), le système linéaire associé

à l'équation d'ordre impair suivant apparaît :

$$\begin{aligned}
& \begin{bmatrix} \delta\Phi_{x,\ell} \\ \delta\Phi_{y,\ell} \\ \delta\Phi_{z,\ell} \end{bmatrix}^\top \cdot \left\{ \ell \begin{bmatrix} \mathbb{R}_x \Phi_{\ell-1} \\ \mathbb{R}_y \Phi_{\ell-1} \\ \mathbb{R}_z \Phi_{\ell-1} \end{bmatrix} \right. \\
& + \begin{bmatrix} A_{x,\ell} & \circ & \circ \\ \circ & A_{y,\ell} & \circ \\ \circ & \circ & A_{z,\ell} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi_{x,\ell} \\ \Phi_{y,\ell} \\ \Phi_{z,\ell} \end{bmatrix} \\
& + \sum_{\substack{m=1 \\ m \text{ impair} \neq \ell}}^n \begin{bmatrix} Q_{x,\ell,m} & \circ & \circ \\ \circ & Q_{y,\ell,m} & \circ \\ \circ & \circ & Q_{z,\ell,m} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi_{x,m} \\ \Phi_{y,m} \\ \Phi_{z,m} \end{bmatrix} \\
& \left. + (\ell+1) \begin{bmatrix} \mathbb{R}_x \Phi_{\ell+1} \\ \mathbb{R}_y \Phi_{\ell+1} \\ \mathbb{R}_z \Phi_{\ell+1} \end{bmatrix} \right\} \\
& = \begin{bmatrix} \delta\Phi_{x,\ell} \\ \delta\Phi_{y,\ell} \\ \delta\Phi_{z,\ell} \end{bmatrix}^\top \cdot \begin{bmatrix} S_{x,\ell} \\ S_{y,\ell} \\ S_{z,\ell} \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{A.37}$$

- ϕ_ℓ est le vecteur des coefficients d'ordre ℓ des polynômes de Legendre représentant le flux pair.
- $\Phi_{x,\ell}$, $\Phi_{y,\ell}$ et $\Phi_{z,\ell}$ sont les vecteurs des coefficients d'ordre ℓ des polynômes de Legendre représentant le flux impair.
- $S_{\phi,\ell}$, $S_{x,\ell}$ et $S_{y,\ell}$, $S_{z,\ell}$ sont les vecteurs des termes sources issus des équations A.22 et A.27.

On définit également les matrices suivantes :

- $A_{x,\ell}$, $A_{y,\ell}$, $A_{z,\ell}$: matrices diagonales représentant les courants issues de l'équation A.24 ainsi que les contributions surfaciques de l'équation A.23 avec $m = \ell$.
- $\Omega_{x,\ell}$, $\Omega_{y,\ell}$, $\Omega_{z,\ell}$: matrices diagonales des contributions surfaciques issues de l'équation A.23 avec $m \neq \ell$.
- K est l'ordre des polynômes de Lagrange
- $\mathbb{R}_x$, $\mathbb{R}_y$, $\mathbb{R}_z$: matrices de couplage flux-courant issues des équations A.21 et A.25, indépendantes des sections efficaces, de l'ordre de Legendre et du groupe d'énergie. Leurs nombre de colonnes vaut $2K$ et leur nombre de lignes est égal au nombre de composantes du courant.

La substitution des équations (A.29) à (A.36) dans l'équation (A.28) donne le système cor-

respondant à l'équation d'ordre pair :

$$\begin{aligned} & \ell \delta \boldsymbol{\phi}_\ell \cdot \left[R_x^\top \boldsymbol{\Phi}_{x,\ell-1} + R_y^\top \boldsymbol{\Phi}_{y,\ell-1} + R_z^\top \boldsymbol{\Phi}_{z,\ell-1} \right] + \delta \boldsymbol{\phi}_\ell T_\ell \boldsymbol{\phi}_\ell \\ & + (\ell + 1) \delta \boldsymbol{\phi}_\ell \cdot \left[R_x^\top \boldsymbol{\Phi}_{x,\ell+1} + R_y^\top \boldsymbol{\Phi}_{y,\ell+1} + R_z^\top \boldsymbol{\Phi}_{z,\ell+1} \right] = \delta \boldsymbol{\phi}_\ell \cdot \boldsymbol{S}_{\phi,\ell} \end{aligned} \quad (\text{A.38})$$

où T_ℓ est une matrice diagonale contenant les termes de couplage flux-flux de l'équation A.26.

Procédure ADI (Alternating Direction Implicit)

La procédure ADI consiste à regrouper les flux pairs d'ordre ℓ et les flux impairs d'ordre $\ell + 1$ pour les résoudre simultanément. A chaque sous-étape, les inconnues d'ordre supérieur et inférieur sont supposées connues. Les matrices présentées ici sont associées à l'approximation de la diffusion, qui est celle utilisée lors de cette étude.

Géométrie cartésienne 3D

Le système matriciel s'écrit :

$$M \Phi = \boldsymbol{S}. \quad (\text{A.39})$$

avec :

$$\Phi = \text{col}(\boldsymbol{\phi}, J_x, J_y, J_z), \quad S = \text{col}(S_\phi, S_x, S_y, S_z). \quad (\text{A.40})$$

$$M = \begin{bmatrix} T & R_x^\top & R_y^\top & R_z^\top \\ R_x & A_x & \circ & \circ \\ R_y & \circ & A_y & \circ \\ R_z & \circ & \circ & A_z \end{bmatrix}. \quad (\text{A.41})$$

Dans le cas P_ℓ simplifié (avec ℓ entier pair), l'équation de parité paire issue de l'équation (A.38) s'écrit

$$\begin{aligned} & \ell \left[\mathbb{R}_x^\top \mathbf{J}_{x,\ell-1} + \mathbb{R}_y^\top \mathbf{J}_{y,\ell-1} + \mathbb{R}_z^\top \mathbf{J}_{z,\ell-1} \right] + \mathbb{T}_\ell \boldsymbol{\phi}_\ell \\ & + (\ell + 1) \left[\mathbb{R}_x^\top \mathbf{J}_{x,\ell+1} + \mathbb{R}_y^\top \mathbf{J}_{y,\ell+1} + \mathbb{R}_z^\top \mathbf{J}_{z,\ell+1} \right] = \mathbf{S}_{\phi,\ell} \end{aligned} \quad (\text{A.42})$$

tandis que le bloc de parité impaire (courants) associé à l'équation (A.37) est

$$\begin{aligned}
& \ell \begin{bmatrix} \mathbb{R}_x \phi_{\ell-1} \\ \mathbb{R}_y \phi_{\ell-1} \\ \mathbb{R}_z \phi_{\ell-1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbb{A}_{x,\ell} & \circ & \circ \\ \circ & \mathbb{A}_{y,\ell} & \circ \\ \circ & \circ & \mathbb{A}_{z,\ell} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{J}_{x,\ell} \\ \mathbf{J}_{y,\ell} \\ \mathbf{J}_{z,\ell} \end{bmatrix} \\
& + \sum_{\substack{m=1 \\ m \text{ impair} \neq \ell}}^n \begin{bmatrix} \mathbb{Q}_{x,\ell,m} & \circ & \circ \\ \circ & \mathbb{Q}_{y,\ell,m} & \circ \\ \circ & \circ & \mathbb{Q}_{z,\ell,m} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{J}_{x,m} \\ \mathbf{J}_{y,m} \\ \mathbf{J}_{z,m} \end{bmatrix} + (\ell+1) \begin{bmatrix} \mathbb{R}_x \phi_{\ell+1} \\ \mathbb{R}_y \phi_{\ell+1} \\ \mathbb{R}_z \phi_{\ell+1} \end{bmatrix} \\
& = \begin{bmatrix} S_{x,\ell} \\ S_{y,\ell} \\ S_{z,\ell} \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{A.43}$$

avec ℓ un entier impair. Les matrices Γ_ℓ , $A_{x,\ell}$, $A_{y,\ell}$ et $A_{z,\ell}$ dépendent désormais de l'ordre de Legendre ℓ car elles dépendent maintenant des section efficace. Afin d'alléger la notation, cette dépendance ne sera pas écrite explicitement.

La combinaison des équations A.42 et A.43 mène à l'égalité suivante :

$$\begin{aligned}
& \ell(\ell-1) \begin{bmatrix} R_x T^{-1} R_x^T & R_x T^{-1} R_y^T & R_x T^{-1} R_z^T \\ R_y T^{-1} R_x^T & R_y T^{-1} R_y^T & R_y T^{-1} R_z^T \\ R_z T^{-1} R_x^T & R_z T^{-1} R_y^T & R_z T^{-1} R_z^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{J}_{x,\ell-2} \\ \mathbf{J}_{y,\ell-2} \\ \mathbf{J}_{z,\ell-2} \end{bmatrix} \\
& + \begin{bmatrix} \tilde{A}_x & \ell^2 R_x T^{-1} R_y^T & \ell^2 R_x T^{-1} R_z^T \\ \ell^2 R_y T^{-1} R_x^T & \tilde{A}_y & \ell^2 R_y T^{-1} R_z^T \\ \ell^2 R_z T^{-1} R_x^T & \ell^2 R_z T^{-1} R_y^T & \tilde{A}_z \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{J}_{x,\ell} \\ \mathbf{J}_{y,\ell} \\ \mathbf{J}_{z,\ell} \end{bmatrix} \\
& - \sum_{\substack{m=1 \\ m \text{ impair} \neq \ell}}^n \begin{bmatrix} \mathbb{Q}_{x,\ell,m} & \circ & \circ \\ \circ & \mathbb{Q}_{y,\ell,m} & \circ \\ \circ & \circ & \mathbb{Q}_{z,\ell,m} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{J}_{x,m} \\ \mathbf{J}_{y,m} \\ \mathbf{J}_{z,m} \end{bmatrix} - (\ell+1) \begin{bmatrix} R_x \phi_{\ell+1} \\ R_y \phi_{\ell+1} \\ R_z \phi_{\ell+1} \end{bmatrix} \\
& = \begin{bmatrix} -S_{x,\ell} + \ell^2 R_x T^{-1} \mathbf{S}_{\phi,\ell-1} \\ -S_{y,\ell} + \ell^2 R_y T^{-1} \mathbf{S}_{\phi,\ell-1} \\ -S_{z,\ell} + \ell^2 R_z T^{-1} \mathbf{S}_{\phi,\ell-1} \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{A.44}$$

avec :

$$\tilde{A}_x = -A_x + \ell^2 R_x T^{-1} R_x^T, \quad \tilde{A}_y = -A_y + \ell^2 R_y T^{-1} R_y^T, \quad \tilde{A}_z = -A_z + \ell^2 R_z T^{-1} R_z^T. \tag{A.45}$$

L'équation A.44 peut être exprimée sous une forme adaptée à un algorithme ADI à trois dimensions. Chaque inconnue d'ordre ℓ (entier impair) à l'itération $(n+1)$ est calculée grâce aux valeurs de l'itération précédente par :

$$\begin{aligned}
\begin{bmatrix} \mathbf{J}_{x,\ell}^{(n+1)} \\ \mathbf{J}_{y,\ell}^{(n+1)} \\ \mathbf{J}_{z,\ell}^{(n+1)} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \tilde{A}_x & \circ & \circ \\ \ell^2 R_y T^{-1} R_x^\top & \tilde{A}_y & \circ \\ \ell^2 R_z T^{-1} R_x^\top & \ell^2 R_z T^{-1} R_y^\top & \tilde{A}_z \end{bmatrix}^{-1} \\
&\times \left(\ell(\ell-1) \begin{bmatrix} R_x T^{-1} R_x^\top & R_x T^{-1} R_y^\top & R_x T^{-1} R_z^\top \\ R_y T^{-1} R_x^\top & R_y T^{-1} R_y^\top & R_y T^{-1} R_z^\top \\ R_z T^{-1} R_x^\top & R_z T^{-1} R_y^\top & R_z T^{-1} R_z^\top \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{J}_{x,\ell-2}^{(n+1)} \\ \mathbf{J}_{y,\ell-2}^{(n+1)} \\ \mathbf{J}_{z,\ell-2}^{(n+1)} \end{bmatrix} \right. \\
&\quad \left. - \ell^2 \begin{bmatrix} \circ & R_x T^{-1} R_y^\top & R_x T^{-1} R_z^\top \\ \circ & \circ & R_y T^{-1} R_z^\top \\ \circ & \circ & \circ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{J}_{x,\ell}^{(n)} \\ \mathbf{J}_{y,\ell}^{(n)} \\ \mathbf{J}_{z,\ell}^{(n)} \end{bmatrix} \right. \\
&\quad + \sum_{\substack{m=1 \\ m \text{ impair}}}^{\ell-2} \begin{bmatrix} \mathcal{Q}_{x,\ell,m} & \circ & \circ \\ \circ & \mathcal{Q}_{y,\ell,m} & \circ \\ \circ & \circ & \mathcal{Q}_{z,\ell,m} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{J}_{x,m}^{(n+1)} \\ \mathbf{J}_{y,m}^{(n+1)} \\ \mathbf{J}_{z,m}^{(n+1)} \end{bmatrix} \\
&\quad + \sum_{\substack{m=\ell+2 \\ m \text{ impair}}}^n \begin{bmatrix} \mathcal{Q}_{x,\ell,m} & \circ & \circ \\ \circ & \mathcal{Q}_{y,\ell,m} & \circ \\ \circ & \circ & \mathcal{Q}_{z,\ell,m} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{J}_{x,m}^{(n)} \\ \mathbf{J}_{y,m}^{(n)} \\ \mathbf{J}_{z,m}^{(n)} \end{bmatrix} \\
&\quad \left. + (\ell+1) \begin{bmatrix} R_x \phi_{\ell+1}^{(n)} \\ R_y \phi_{\ell+1}^{(n)} \\ R_z \phi_{\ell+1}^{(n)} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -S_{x,\ell} + \ell^2 R_x T^{-1} \mathbf{S}_{\phi,\ell-1} \\ -S_{y,\ell} + \ell^2 R_y T^{-1} \mathbf{S}_{\phi,\ell-1} \\ -S_{z,\ell} + \ell^2 R_z T^{-1} \mathbf{S}_{\phi,\ell-1} \end{bmatrix} \right)
\end{aligned} \tag{A.46}$$

L'obtention des flux correspondants à l'itération $(n+1)$ s'effectue via l'équation A.42, une fois les inconnues courantes calculées.