

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

**APPLICATION DE LA THÉORIE DES PERTURBATIONS GÉNÉRALISÉES
AUX CALCULS DE CELLULES UTILISANT LA MÉTHODE DES
PROBABILITÉS DE COLLISION**

**TANGUY COURAU
DÉPARTEMENT DE GÉNIE MÉCANIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL**

**THÈSE PRÉSENTÉE EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE PHILOSOPHIÆ DOCTOR
(GÉNIE NUCLÉAIRE)
JUN 2001**

© Tanguy Courau, 2001.



**National Library
of Canada**

**Acquisitions and
Bibliographic Services**

**395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada**

**Bibliothèque nationale
du Canada**

**Acquisitions et
services bibliographiques**

**395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada**

Your file Votre référence

Our file Notre référence

The author has granted a non-exclusive licence allowing the National Library of Canada to reproduce, loan, distribute or sell copies of this thesis in microform, paper or electronic formats.

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

L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque nationale du Canada de reproduire, prêter, distribuer ou vendre des copies de cette thèse sous la forme de microfiche/film, de reproduction sur papier ou sur format électronique.

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

0-612-65538-5

Canada

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Cette thèse intitulée:

APPLICATION DE LA THÉORIE DES PERTURBATIONS GÉNÉRALISÉES
AUX CALCULS DE CELLULES UTILISANT LA MÉTHODE DES
PROBABILITÉS DE COLLISION

présentée par: COURAU Tanguy

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

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

M. KOCLAS Jean, Ph.D., président

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

M. ROZON Daniel, Ph.D., membre et codirecteur de recherche

M. QUISLOUMEN Mohamed, Ph.D., membre

M. TEYSSEDOU Alberto, Ph.D., membre

À Montréal pour ses charmes. à Gaëlle pour sa patience.

REMERCIEMENTS

Merci à Guy Marleau pour son encadrement de grande qualité, sa disponibilité, sa rigueur et les nombreuses pauses café.

Merci à Daniel Rozon pour les remarques enrichissantes qu'il a su faire tout au long de cette codirection.

Merci à Robert Roy pour les échanges productifs et les références judicieuses qu'il a su m'apporter.

Je tiens également à remercier le jury d'avoir pris le temps de lire cette thèse malgré des délais très courts.

Enfin, je remercie le personnel et les étudiants de l'institut de génie nucléaire. Grâce à eux, mon passage à l'École Polytechnique de Montréal aura été des plus agréables.

RÉSUMÉ

Depuis les années 70, la théorie des perturbations généralisées appliquée à la physique des réacteurs a connu un développement des plus importants. Si les domaines couverts par cette théorie sont très vastes (calculs de coefficients de réactivité, cinétique, analyse de sensibilité et d'incertitudes, ...), la majorité des applications reste confinée à l'approximation de la diffusion.

L'objet de cette thèse est la mise en application de la théorie des perturbations au premier ordre en transport neutronique dans le formalisme des probabilités de première collision.

Les applications visées sont l'évaluation de la variation des sections efficaces homogénéisées et condensées suite à une perturbation des sections efficaces macroscopiques ainsi que le calcul de coefficients de sensibilité. Les perturbations considérées sont associées à des variations des densités isotopiques des mélanges présents dans la cellule, de l'enrichissement du combustible ainsi que des effets de température (variations de température du combustible, du caloporteur ou du modérateur) ou de vide (vidange du caloporteur).

La théorie des perturbations est basée sur l'utilisation des flux adjoints et adjoints généralisés comme fonction poids. Les adjoints généralisés sont associés aux sections efficaces homogénéisées et condensées. Le calcul des flux adjoints et adjoints généralisés a été implanté dans le code de cellule DRAGON.

Dans le formalisme des probabilités de collision, l'essentiel de l'effort de calcul est dédié au calcul de la matrice des probabilités de collision. Cette dernière dépend de la section efficace totale. Suite à une variation de la section efficace totale, la matrice des probabilités de collision est perturbée. Nous avons donc proposé une approximation (à l'aide d'un terme source équivalent) qui permet de s'affranchir du calcul de la variation de la matrice des probabilités de collision pour chacune des perturbations considérées.

Les résultats obtenus pour les divers tests et applications montrent que la méthode implantée permet une bonne approximation de la variation des propriétés homogénéisées et condensées suite à des perturbations relativement importantes.

ABSTRACT

In the field of nuclear engineering, the range of studies relying on perturbation theory is rather large (reactivity coefficients, kinetics, sensitivity analyses). However, most of the applications are limited to the neutron diffusion approximation.

The purpose of this thesis is the development of a first order generalized perturbation theory applied to the transport equation and based on the collision probability (CP) technique. It is a means to evaluate the variation of homogenized and condensed cross sections due to a perturbation of the multigroup cross sections, and to compute sensitivity coefficients. We considered perturbations resulting from isotopic density and enrichment variations and void and temperature effects.

Perturbation theory uses adjoint and generalized adjoint fluxes as weighting functions. The adjoint and generalized adjoint fluxes associated with the homogenized and condensed properties are computed in the cell code DRAGON.

With the CP technique, most of the computation effort is dedicated to the calculation of the CP matrix which depends on the total cross-section. We proposed an approximation to avoid the computation of the perturbed CP matrix for each perturbation involving the total cross section.

The results obtained show that the method gives a good approximation for the variation of homogenized and condensed properties due to various types of perturbations.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE	iv
REMERCIEMENTS	v
RÉSUMÉ	vi
ABSTRACT	viii
TABLE DES MATIÈRES	ix
LISTE DES FIGURES	xiii
LISTE DES TABLEAUX	xv
LISTE DES ANNEXES	xvii
LISTE DES NOTATIONS ET DES SYMBOLES	xviii
INTRODUCTION	1
CHAPITRE 1 ÉQUATION DE TRANSPORT: GÉNÉRALITÉS	5
1.1 Équation intégrodifférentielle	5
1.1.1 Intégration sur les angles: diffusion isotrope	7
1.1.2 Diffusion anisotrope et correction de transport	9
1.1.3 Condensation en énergie: formalisme multigroupe	11
1.2 Équation intégrale	12
1.2.1 Probabilités de collision	14
1.2.2 Prise en compte de l'anisotropie de la diffusion	15
1.2.3 Équation intégrale: forme matricielle	16
1.2.4 Forme standard des équations discrétisées	17

CHAPITRE 2	FORMALISME ADJOINT	18
2.1	Produit scalaire et opérateur adjoint	18
2.1.1	Dérivation des opérateurs adjoints	19
2.1.2	Discrétisation et opérateurs matriciels	19
2.2	Équation intégrodifférentielle adjointe	21
2.3	Équation intégrale adjointe	22
2.3.1	Équation intégrale adjointe: forme matricielle	23
2.3.2	Forme standard des équations discrétisées	24
2.3.3	Sources et flux adjoints généralisés	25
2.3.4	Flux adjoint: remarques et propriétés	26
CHAPITRE 3	THÉORIE DES PERTURBATIONS	28
3.1	Perturbation au premier ordre: hypothèses	29
3.2	Réacteur avec source: calcul de δR	30
3.3	Réacteur critique: calcul de $\delta\lambda$	31
3.4	Réacteur critique: calcul de δG	32
3.5	Théorie des perturbations et analyses de sensibilité	33
3.5.1	Coefficients de sensibilité	34
3.5.2	Calculs d'incertitudes	36
3.6	Propriétés des formules de perturbation	37
3.6.1	Approches implicites et explicites	37
3.6.2	Interprétation géométrique de la perturbation	38
3.6.3	Formules de perturbation exactes	39
CHAPITRE 4	CALCUL DU FLUX DIRECT ET DES PROPRIÉTÉS HO- MOGÉNÉISÉES	42
4.1	Résolution de l'équation de transport à l'aide du code de calcul DRAGON	42
4.2	Calcul du flux et du k_{eff} à l'aide du code DRAGON	44

6.2.4	Ordre de l'erreur	93
6.2.5	Additivité des perturbations	97
6.3	Prise en compte de la variation de la matrice $\mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}$	99
6.3.1	Approximation d'ordre 0	100
6.3.2	Prise en compte des ordres élevés	106
6.4	Analyse stochastique des erreurs	115
6.5	Coefficients de sensibilité	132
6.5.1	Assemblage REP 17x17	133
6.5.2	Cellule CANDU	135
CHAPITRE 7 APPLICATIONS DE LA THÉORIE DES PERTURBATIONS GÉNÉRALISÉES		138
7.1	Étude paramétrique pour un assemblage REP 17x17	139
7.2	Analyse d'incertitudes sur le k_{eff} et le coefficient de vide pour une cellule CANFLEX	143
CONCLUSION		153
RÉFÉRENCES		157
ANNEXES		164

LISTE DES FIGURES

Figure 4.1	Itérations externes	47
Figure 4.2	Structure de la matrice de diffusion: cas direct	50
Figure 4.3	Itérations internes: cas direct	51
Figure 5.1	Structure de la matrice de diffusion: cas adjoint	64
Figure 5.2	Itérations internes: cas adjoint	65
Figure 5.3	Assemblage "Small Cell"	71
Figure 5.4	Assemblage REP 17x17	72
Figure 5.5	Cellule CANDU	73
Figure 6.1	"Small Cell": variation relative δF_r	95
Figure 6.2	"Small Cell": aspect quadratique de l'erreur $(\varepsilon_r^f)^{1/2}$	96
Figure 6.3	"Small Cell": ratio erreur-variation	112
Figure 6.4	REP 17x17: ratio erreur-variation	113
Figure 6.5	CANDU: ratio erreur-variation	114
Figure 6.6	"Small Cell": erreur sur le k_{eff} en fonction de α	116
Figure 6.7	"Small Cell": erreur sur $\nu\Sigma_f$ en fonction de α	117
Figure 6.8	"Small Cell": erreur sur Σ en fonction de α	118
Figure 6.9	"Small Cell": erreur sur Σ_s en fonction de α	119
Figure 6.10	"Small Cell": variation stochastique - k_{eff}	120
Figure 6.11	"Small Cell": variation stochastique - $\nu\Sigma_f$	121
Figure 6.12	"Small Cell": variation stochastique - Σ	122
Figure 6.13	"Small Cell": variation stochastique - Σ_s	123
Figure 6.14	REP 17x17: variation stochastique - k_{eff}	124
Figure 6.15	REP 17x17: variation stochastique - $\nu\Sigma_f$	125
Figure 6.16	REP 17x17: variation stochastique - Σ	126
Figure 6.17	REP 17x17: variation stochastique - Σ_s	127
Figure 6.18	CANDU: variation stochastique - k_{eff}	128

Figure 6.19	CANDU: variation stochastique - $\nu\Sigma_f$	129
Figure 6.20	CANDU: variation stochastique - Σ	130
Figure 6.21	CANDU: variation stochastique - Σ_s	131
Figure 7.1	Cellule CANFLEX	145

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 5.1	“Small Cell”: sections efficaces	70
Tableau 5.2	“Small Cell”: résultats et erreurs	74
Tableau 5.3	REP 17x17: calcul des flux direct et adjoint	75
Tableau 5.4	CANDU: calcul des flux direct et adjoint	76
Tableau 5.5	REP 17x17: flux adjoint généralisé associé à $\nu\Sigma_{f,H,1}^1$	80
Tableau 5.6	REP 17x17: flux adjoint généralisé associé à $\nu\Sigma_{f,H,1}^2$	80
Tableau 5.7	CANDU: flux adjoint généralisé associé à $\nu\Sigma_{f,H,2}^1$	81
Tableau 5.8	CANDU: flux adjoint généralisé associé à $\nu\Sigma_{f,H,2}^2$	81
Tableau 6.1	Propriétés intégrales à l'état de référence	88
Tableau 6.2	“Small Cell”: scénario de perturbation	89
Tableau 6.3	REP 17x17: scénario de perturbation	89
Tableau 6.4	CANDU: scénario de perturbation	89
Tableau 6.5	“Small Cell”: erreur ε_F^r	90
Tableau 6.6	“Small Cell”: erreur $\varepsilon_F^p = \varepsilon_F^n$	91
Tableau 6.7	REP 17x17: erreur ε_F^r	91
Tableau 6.8	REP 17x17: erreur $\varepsilon_F^p = \varepsilon_F^n$	91
Tableau 6.9	CANDU: erreur ε_F^r	92
Tableau 6.10	CANDU: erreur $\varepsilon_F^p = \varepsilon_F^n$	92
Tableau 6.11	“Small Cell”: variation relative $\delta\bar{F}_r$	94
Tableau 6.12	“Small Cell”: variation $\delta\bar{F}_r$ sur le k_{eff}	98
Tableau 6.13	“Small Cell”: erreur ε_F^r sur le k_{eff} et valeur de C	99
Tableau 6.14	“Small Cell”: erreur ε_F^r	103
Tableau 6.15	“Small Cell”: erreur $\varepsilon_F^p = \varepsilon_F^{tr} + \varepsilon_F^n$	103
Tableau 6.16	REP 17x17: variation relative $\delta\bar{F}_r$	104
Tableau 6.17	REP 17x17: erreur ε_F^r	104
Tableau 6.18	REP 17x17: erreur $\varepsilon_F^p = \varepsilon_F^{tr} + \varepsilon_F^n$	104

Tableau 6.19	CANDU: variation relative $\delta\bar{F}_r$	105
Tableau 6.20	CANDU: erreur $\varepsilon_{\bar{F}}^r$	105
Tableau 6.21	CANDU: erreur $\varepsilon_{\bar{F}}^p = \varepsilon_{\bar{F}}^{lr} + \varepsilon_{\bar{F}}^n$	105
Tableau 6.22	“Small Cell”: variation relative $\delta\bar{F}_r$ avec correction	109
Tableau 6.23	“Small Cell”: erreur $\varepsilon_{\bar{F}}^r$ avec correction	109
Tableau 6.24	REP 17x17: variation relative $\delta\bar{F}_r$ avec correction	109
Tableau 6.25	REP 17x17: erreur $\varepsilon_{\bar{F}}^r$ avec correction	110
Tableau 6.26	CANDU: variation relative $\delta\bar{F}_r$ avec correction	110
Tableau 6.27	CANDU: erreur $\varepsilon_{\bar{F}}^r$ avec correction	111
Tableau 6.28	REP 17x17: coefficients de sensibilité	134
Tableau 6.29	REP 17x17: $\delta\lambda/\lambda$	134
Tableau 6.30	CANDU: coefficients de sensibilité	136
Tableau 6.31	CANDU: $\delta\lambda/\lambda$	136
Tableau 7.1	REP 17x17: propriétés en fonction de la position	139
Tableau 7.2	REP 17x17: état NOMINAL	140
Tableau 7.3	REP 17x17: propriétés de l’assemblage	141
Tableau 7.4	REP 17x17: variation et erreur relatives	142
Tableau 7.5	REP 17x17: enrichissement et taux de combustion	144
Tableau 7.6	REP 17x17: densités isotopiques après évolution	146
Tableau 7.7	CANDU et CANFLEX: coefficients de vide	147
Tableau 7.8	CANFLEX: coefficients de sensibilité	149
Tableau 7.9	CANFLEX: $\delta\lambda_r/\lambda_r$, $\delta\lambda_v/\lambda_v$ et $\delta\rho/\rho$	150
Tableau 7.10	CANFLEX: densités isotopiques et incertitudes	151
Tableau 7.11	CANFLEX: incertitudes sur k_{eff}^r , k_{eff}^v et ρ	152

LISTE DES ANNEXES

ANNEXE I	COMPLÉMENTS THÉORIQUES	164
I.1	Structure matricielle des opérateurs	164
I.2	Dérivation des opérateurs adjoints	166
I.3	Transfert de section efficace et correction de transport	169
ANNEXE II	STRUCTURE DES MODULES DE DRAGON CRÉÉS OU MODIFIÉS	170
II.1	Module FLU:	170
II.2	Module SAD:	171
II.3	Module PER:	172
ANNEXE III	FICHIERS D'ENTRÉE DE DRAGON	173
III.1	Calcul des flux adjoints et adjoints généralisés	173
III.1.1	"Small Cell"	173
III.1.2	REP 17x17	177
III.1.3	CANDU	184
III.2	Théorie des perturbations : tests et validation	190
III.2.1	"Small Cell"	190
III.2.2	REP 17x17	195
III.2.3	CANDU	203
III.2.4	REP 17x17 et évolution	210
III.3	Théorie des perturbations : applications	225
III.3.1	REP 17x17: propriétés homogénéisées sur l'assemblage et condensées à deux groupes d'énergie	225

LISTE DES NOTATIONS ET DES SYMBOLES

Symbole	Désignation	Unité ¹
A	matrice d'absorption	—
E, E'	variables d'énergie	eV
ε_o	erreur relative sur le flux	—
ε_k	erreur relative sur le k_{eff}	—
ε_F^s	incertitude statistique sur la fonctionnelle F	—
ε_q^s	incertitude statistique sur le paramètre α_q	—
ε_F^r	erreur relative sur δF_r	—
ε_F^p	erreur relative sur δF_p	—
ε_F^n	erreur numérique associée à la précision des calculs	—
F	matrice de production par fission	—
F	fonctionnelle considérée $F = \{R, \lambda, G\}$	[F]
F_r	fonctionnelle F perturbée évaluée avec le flux de l'état de référence	[F]
F_p	fonctionnelle F perturbée évaluée avec le flux de l'état perturbé	[F]
F_c	fonctionnelle F perturbée calculée explicitement	[F]
δF_i	variation de la fonctionnelle F . $\delta F = F_i - F$ avec $i = \{r, p, c\}$	[F]
$\delta \bar{F}_i$	variation relative de F , $\delta \bar{F}_i = \delta F_i / F$	—
ϕ	flux scalaire	$cm^{-2} \cdot s^{-1}$

Symbole	Désignation	Unité ¹
ϕ^*	flux adjoint	—
ϕ^-	flux pseudo-adjoint	cm
ψ_m^l	composante l, m du flux dans la base des harmoniques sphériques	$cm^{-2} \cdot s^{-1}$
g, g'	indices de groupe d'énergie	—
G	rapport de taux de réaction	—
G	nombre de groupes d'énergie considérés dans la discrétisation	—
Γ^*	flux adjoint généralisé (associé à un rapport de taux réaction)	$cm^2 \cdot s$
Γ^-	flux pseudo-adjoint généralisé (associé à un rapport de taux réaction)	$cm^3 \cdot s$
i	indice de région	—
I	matrice identité	—
k_{eff}	facteur de multiplication effectif	—
$k_{eff}^* = k_{eff}$	facteur de multiplication adjoint	—
χ	spectre de fission des neutrons	—
$\lambda = 1/k_{eff}$	valeur propre fondamentale de l'équation de transport	—
$\lambda^* = \lambda$	valeur propre de l'équation de transport adjointe	—
N	nombre de régions considérées dans la discrétisation	—
N_q	densité de l'isotope d'indice q	$10^{-24} cm^{-3}$

Symbole	Désignation	Unité ¹
ν	nombre moyen de neutrons produit par fission	—
$\nu\Sigma_f$	section efficace macroscopique de production de neutrons	cm^{-1}
\mathbf{P}_{VV}	matrice des probabilités de collision réduite	cm
Q_e	source fixe de neutrons	$cm^{-3} \cdot s^{-1}$
R	taux de réaction	$cm^{-3} \cdot s^{-1}$
\mathbf{R}_λ	matrice de source incluant fission et diffusion	cm^{-1}
\vec{r}, \vec{r}'	vecteurs position	cm
S_e	source fixe de neutrons	$cm^{-2} \cdot s^{-1}$
S^*	source adjointe (associée à un rapport de taux réaction)	$cm^2 \cdot s$
S_f^q	coefficient de sensibilité associé à la fonctionnelle F et au paramètre α_q	—
σ	section efficace microscopique totale	$cm^2(\text{barn})$
σ_f	section efficace microscopique de fission	$cm^2(\text{barn})$
σ_s	section efficace microscopique de diffusion	$cm^2(\text{barn})$
σ_F	écart type sur la fonctionnelle F	$[F]$
σ_q	écart type sur le paramètre α_q	$[\alpha_q]$
Σ	section efficace macroscopique totale	cm^{-1}
Σ_f	section efficace macroscopique de fission	cm^{-1}
Σ_s	section efficace macroscopique de diffusion	cm^{-1}
\vec{X}	représentation vectorielle de la quantité X avec: $\vec{X} = \{\vec{\sigma}, \vec{\Sigma}, \vec{S}, \dots\}$	$[\vec{X}]$
\mathbf{X}_p	opérateur \mathbf{X} perturbé $\mathbf{X} = \{\mathbf{A}, \mathbf{F}, \dots\}$	$[\mathbf{X}]$

Symbole	Désignation	Unité ¹
$\delta\mathbf{X}$	variation de l'opérateur $\delta\mathbf{X} = \mathbf{X}_p - \mathbf{X}$	$[\mathbf{X}]$
ξ_0	critère de convergence sur le flux	—
ξ_k	critère de convergence sur le k_{eff}	—
$\vec{\Omega}, \vec{\Omega}'$	vecteurs unitaires associés à une direction	sr

¹Pour les symboles sans dimension l'unité est "—". Par $[\mathbf{X}]$ on entend même unité que \mathbf{X} .

INTRODUCTION

La connaissance du flux de neutrons dans un réacteur requiert la résolution de l'équation de transport de Boltzmann. En général, cette équation n'a pas de solution analytique et nécessite un certain nombre d'approximations pour être résolue. Il est alors indispensable de s'appuyer sur l'outil informatique pour mener à bien ces calculs. Le flux de neutrons est déterminé pour une géométrie et un ensemble de propriétés physiques (sections efficaces) donnés. L'imprécision sur les propriétés du réacteur, les effets de température ou encore l'insertion de mécanismes de contrôle de réactivité induisent des perturbations sur l'état de référence calculé auparavant. Il est intéressant d'évaluer l'impact de ces perturbations sur des paramètres intégraux tels que le k_{eff} , des taux de réactions ou les sections efficaces homogénéisées.

Les méthodes de perturbation proposent une approximation sur les variations de ces paramètres, elles évitent ainsi de faire un calcul complet pour chacune des perturbations considérées.

Travaux précédents

En physique des réacteurs, les méthodes de perturbation ont été introduites dans les années 50. Davison (Davison, 1957) en fait une présentation standard à partir du concept de flux adjoint. Les premières formules ont été dérivées pour évaluer la variation du k_{eff} et les coefficients de réactivité suite à une perturbation des opérateurs de Boltzmann. La généralisation de la théorie des perturbations, dont Gandini (Gandini, 1967; Gandini, 1985) donne une présentation en 1967, propose une approche basée sur des variations de fonctionnelles linéaires et bilinéaires des

flux réels et adjoints. Dans son livre, Stacey (Stacey, Jr., 1974) retrouve les formules de perturbation généralisées à partir d'une approche variationnelle. Les relations obtenues ont eu des applications très larges et dans des domaines très divers: études de sensibilité et calcul d'erreurs (Oblow, 1983; Salvatores, 1988; Blanco et al., 2000; Blaise et al., 2000), cinétique ponctuelle (Rozon, 1992), gestion du combustible et optimisation (Rozon et al., 1981; Beaudet, 1991; Rozon et Beaudet, 1992), estimation du facteur de conversion pour les réacteurs rapides (Usachev, 1964), ajustement des données neutroniques mesurées (perturbations inverses) (Planchard, 1988; Chavent et al., 1990), ...

Les équations d'évolution ont également été traitées à l'aide de méthodes de perturbation. Gandini, Salvatores et Tondinelli (Gandini et al., 1977) ainsi que Yang et H. Khalil (Yang et Khalil, 1994) traitent du champ des noyaux. Le couplage entre le champ des noyaux et des neutrons est proposé par Gandini (Gandini, 1988), Williams (Williams, 1979) ainsi que Sekimoto et Nemoto (Sekimoto et Nemoto, 2000).

La plupart des méthodes de perturbation ont été développées au premier ordre. Afin d'obtenir une précision acceptable dans certaines configurations, des méthodes d'ordres supérieurs ont aussi été mises au point (White et Swanbon, 1990; Gandini, 1994; Blanco et al., 2000).

La littérature sur le sujet est très abondante. En général les relations obtenues sont indépendantes de la forme prise par les opérateurs de Boltzmann, cependant l'essentiel des applications reste confiné au cadre de l'équation de diffusion.

L'impact sur le k_{eff} lors d'une perturbation sur les conditions aux frontières a été étudié par Pomraning (Pomraning, 1976), Rahnema (Rahnema, 1996) et Yamamoto (Yamamoto, 1997).

La théorie des perturbations a également été appliquée aux méthodes S_n (Blanco et al., 2000). On trouve aussi des méthodes basées sur des perturbations singulières (Losey et al., 1996; Losey et Lee, 1997). Ces travaux ont été développés dans des configurations particulières: équation monodimensionnelle, diffusion isotrope, ...

Dans le formalisme des probabilités de collision, Stacey (Stacey, Jr., 1970) donne une dérivation de l'équation adjointe et propose une méthode itérative pour le calcul simultané du k_{eff} du flux et du flux adjoint. Il n'y a pas, à notre connaissance, de mise en application systématique des méthodes de perturbation au premier ordre dans le formalisme des probabilités de collision.

Contributions du présent travail

L'objet de ce travail est de mettre en oeuvre des méthodes de perturbation, dans le formalisme des probabilités de collision, afin de pouvoir évaluer les variations sur divers taux de réactions (et sections efficaces homogénéisées) imputables à des variations sur les sections efficaces macroscopiques associées à un changement des sections efficaces microscopiques ou des densités isotopiques.

Dans une approche variationnelle, on cherchera à évaluer l'impact sur les paramètres intégraux de variations des sections efficaces macroscopiques associées à divers phénomènes physiques tels que: effets de température ou de vide, variation de l'enrichissement, changement de composition isotopique, ...

L'évaluation de coefficients de sensibilité devrait permettre de qualifier les résultats obtenus dans les calculs directs et de déterminer les paramètres jouant un rôle majeur sur la valeur du k_{eff} , les sections efficaces homogénéisées ou d'autres propriétés intégrales.

Dans une approche de calculs d'incertitude, on sera intéressé à évaluer l'impact sur les sections efficaces homogénéisées des incertitudes sur les sections efficaces macroscopiques. Ces incertitudes sont associées aux données nucléaires de base: sections efficaces microscopique, densité des isotopes et température.

Organisation de la thèse

La structure de cette thèse s'articule autour des points suivants:

- Partant de l'équation de transport sous sa forme intégrodifférentielle, nous dérivons la forme matricielle de l'équation de transport intégrale dans le formalisme des probabilités de collisions.
- Par la suite, nous traiterons des concepts de produit scalaire et d'opérateurs adjoints afin de définir les flux adjoints et adjoints généralisés.
- Après avoir défini les propriétés des opérateurs directs et adjoints, nous pourrions dériver les formules de perturbation appliquées aux variations de valeur propre et de taux de réaction.
- Le quatrième chapitre donnera une description du calcul de flux et des propriétés homogénéisées tels qu'il sont implantés dans le code DRAGON.
- Ensuite, on s'intéressera à l'implantation dans le code DRAGON du calcul des flux adjoints ainsi que des sources et des flux adjoints généralisés.
- Le sixième chapitre analysera les erreurs obtenues en vue de définir une plage de validité associée aux méthodes de perturbation et aux coefficients de sensibilité.
- Après quoi, nous présenterons quelques applications types de la méthode.
- Pour finir, nous ferons une synthèse du présent travail et proposerons quelques améliorations et avenues de recherche.

CHAPITRE 1

ÉQUATION DE TRANSPORT: GÉNÉRALITÉS

1.1 Équation intégrodifférentielle

L'équation de transport intégrodifférentielle indépendante du temps et continue (en espace, direction et énergie) s'écrit: (Davison, 1957; Bell et Glasstone, 1970; Lewis et Miller, Jr., 1984)

$$\begin{aligned} & \left[\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} + \Sigma(\vec{r}, E) \right] \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \\ &= \chi(\vec{r}, E) \int dE' \frac{\nu \Sigma_f(\vec{r}, E')}{k_{eff}} \int d^2\Omega' \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E') \\ &+ \int dE' \int d^2\Omega' \Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega}', \vec{\Omega}, E \leftarrow E') \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E') + Q_e(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \end{aligned} \quad (1.1)$$

avec:

- $\phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$: le flux angulaire au point \vec{r} , dans la direction $\vec{\Omega}$ et à l'énergie E .
- $\Sigma(\vec{r}, E)$: la section efficace macroscopique totale au point \vec{r} et à l'énergie E .
- $\Sigma_f(\vec{r}, E')$: la section efficace macroscopique de fission au point \vec{r} et à l'énergie E' .
- ν : le nombre moyen de neutrons produit par fission.
- $\chi(\vec{r}, E)$: le spectre de fission des neutrons au point \vec{r} et à l'énergie E .
- $\Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}, E \leftarrow E')$: la section efficace de diffusion au point \vec{r} pour un neutron incident d'énergie E' et de direction $\vec{\Omega}'$ se retrouvant à l'énergie E

et dans la direction $\vec{\Omega}$ après diffusion.

- $Q_e(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$: la source fixe de neutrons.
- k_{eff} : le facteur de multiplication effectif.
- $d^2\Omega$: angle solide normalisé défini par la relation (1.2).

$$\int d^2\Omega = \frac{1}{4\pi} \int_0^\pi \sin \theta \, d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = 1 \quad (1.2)$$

L'équation (1.1) est un bilan de neutrons: le terme de gauche représente les pertes (par fuite et par collision), celui de droite représente les sources (de fission, de diffusion et fixe). Si la source fixe est non nulle, on posera $k_{eff} = 1$. Si elle est nulle, l'équation devient alors une équation aux valeurs propres où $\lambda = 1/k_{eff}$ est la valeur propre fondamentale de l'équation. Ici k_{eff} représente également un paramètre d'ajustement permettant d'équilibrer le bilan de neutrons. Pour plus de simplicité, nous nous limiterons, dans les calculs qui suivent, à la forme critique de l'équation de transport (en l'absence de source fixe). Toutefois certains des résultats seront présentés pour les deux formes de l'équation (critique ou avec source fixe).

À cette équation, il faut ajouter des conditions aux frontières. On choisira, par exemple, dans le cas d'un volume fini et isolé dans l'espace:

- $\phi(\vec{r}_s, \vec{\Omega}, E) = 0$ si $\vec{\Omega} \cdot \vec{N} < 0$, avec: \vec{r}_s un point sur la frontière et \vec{N} la normale sortante. Cette condition correspond à un flux réentrant nul.

Dans le cas d'un milieu infini (Roy, 1998b), on pourra considérer alternativement:

- Des conditions de type réflexion spéculaire ou isotrope.
- Des conditions de périodicité spéculaire ou isotrope.

Cette équation ne peut être résolue analytiquement que dans des cas très simples. Plusieurs méthodes numériques, stochastiques (Lewis et Miller, Jr., 1984) ou déterministes, ont été mises au point pour la résoudre.

Parmi les méthodes déterministes, on peut citer:

- Les méthodes S_n (Carlson et Lathrop, 1968; Stamm'ler et Abbate, 1983).
- Les méthodes P_n (Bell et Glasstone, 1970; Henry, 1975).
- Les méthodes B_n (Bell et Glasstone, 1970; Henry, 1975).
- La méthode des caractéristiques (Halsall, 1980).
- La méthode des probabilités de collision (Davison, 1957; Lewis et Miller, Jr., 1984).

Les méthodes des probabilités de collision et des caractéristiques (Roy, 1998a) ont été implantées dans le code DRAGON (Marleau et al., 2000). Cependant, on se limitera à la description de la méthode des probabilités de première collision car c'est cette dernière qui a été choisie pour mettre en oeuvre notre approche de la théorie des perturbations.

1.1.1 Intégration sur les angles: diffusion isotrope

En l'absence de source fixe, l'équation (1.1) s'écrit:

$$\begin{aligned} \left[\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} + \Sigma(\vec{r}, E) \right] \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) &= \chi(\vec{r}, E) \int dE' \frac{\nu \Sigma_f(\vec{r}, E')}{k_{eff}} \int d^2\Omega' \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E') \\ &+ \int dE' \int d^2\Omega' \Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega}', \vec{\Omega}, E \leftarrow E') \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E') \end{aligned}$$

Lorsque la section efficace de diffusion est isotrope (en angle), on a:

$$\Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}, E \leftarrow E') \equiv \Sigma_s(\vec{r}, E \leftarrow E')$$

La correction de transport (Stamm'ler et Abbate, 1983; Macfarlane, 1992) permet, dans une certaine mesure, de tenir compte de l'effet d'anisotropie linéaire et de se ramener à une diffusion isotrope.

L'intégration sur les angles solides nous donne donc pour la diffusion isotrope:

$$\int d^2\Omega' \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E') = \phi(\vec{r}, E')$$

$$\int d^2\Omega' \Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}, E \leftarrow E') \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E') = \Sigma_s(\vec{r}, E \leftarrow E') \phi(\vec{r}, E')$$

On obtient donc:

$$\left[\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} + \Sigma(\vec{r}, E) \right] \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = Q(\vec{r}, E) \quad (1.3)$$

où:

$$Q(\vec{r}, E) = \chi(\vec{r}, E) \int dE' \frac{\nu \Sigma_f(\vec{r}, E')}{k_{eff}} \phi(\vec{r}, E') + \int dE' \Sigma_s(\vec{r}, E \leftarrow E') \phi(\vec{r}, E')$$

Ainsi défini, $\phi(\vec{r}, E)$ est le flux scalaire (intégré en angle) au point \vec{r} et à l'énergie E .

En définissant le courant intégré de neutrons $\vec{J}(\vec{r}, E)$ par:

$$\vec{J}(\vec{r}, E) = \int d^2\Omega \vec{\Omega} \cdot \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$$

on obtient une équation pour le flux scalaire, par intégration sur les angles:

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

Cette équation exacte ne peut être résolue simplement, il faut la connaissance d'une relation entre le courant intégré et le flux scalaire. En diffusion, on propose l'approximation (Bell et Glasstone, 1970; Henry, 1975):

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

où $D(\vec{r}, E)$ est le coefficient de diffusion.

1.1.2 Diffusion anisotrope et correction de transport

En l'absence de source fixe et dans le cas monoénergétique, l'équation (1.1) s'écrit:

$$\left[\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} + \Sigma(\vec{r}) \right] \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{\chi(\vec{r}) \nu \Sigma_f(\vec{r})}{k_{eff}} \int d^2\Omega' \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}') + \int d^2\Omega' \Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega}', \vec{\Omega}) \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}') \quad (1.4)$$

Le flux directionnel $\phi(\vec{r}, \vec{\Omega})$ peut s'écrire dans la base des harmoniques sphériques comme (Courant et Hilbert, 1989):

$$\phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \psi_l^m(\vec{r}) Y_l^m(\vec{\Omega}) \quad \text{où} \quad \psi_l^m(\vec{r}) = \int d^2\Omega \bar{Y}_l^m(\vec{\Omega}) \phi(\vec{r}, \vec{\Omega})$$

avec: $Y_l^m(\vec{\Omega})$ harmonique d'ordre m, l et $\bar{Y}_l^m(\vec{\Omega})$ sa conjuguée complexe.

De la définition des harmoniques sphériques et des propriétés des polynômes de

Legendre, il vient:

$$\begin{aligned} \psi_0^0(\vec{r}) &= \phi(\vec{r}) \\ \left[\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} + \Sigma(\vec{r}) \right] \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) &= \left[\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} + \Sigma(\vec{r}) \right] \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \psi_l^m(\vec{r}) Y_l^m(\vec{\Omega}) \\ \frac{\chi(\vec{r}) \nu \Sigma_f(\vec{r})}{k_{eff}} \int d^2\Omega' \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}') &= \frac{\chi(\vec{r}) \nu \Sigma_f(\vec{r})}{k_{eff}} \psi_0^0(\vec{r}) \\ \int d^2\Omega' \Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega}', \vec{\Omega}) \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}') &= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \Sigma_{s,l}(\vec{r}) \psi_l^m(\vec{r}) Y_l^m(\vec{\Omega}) \end{aligned}$$

En introduisant cette décomposition du flux dans l'équation (1.4), on obtient:

$$\begin{aligned} \left[\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} + \Sigma(\vec{r}) \right] \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \psi_l^m(\vec{r}) Y_l^m(\vec{\Omega}) &= \\ \frac{\chi(\vec{r}) \nu \Sigma_f(\vec{r})}{k_{eff}} \psi_0^0(\vec{r}) + \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \Sigma_{s,l}(\vec{r}) \psi_l^m(\vec{r}) Y_l^m(\vec{\Omega}) \end{aligned}$$

Si on soustrait de cette équation un terme du type:

$$\Sigma_{s,l}(\vec{r}) \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \psi_l^m(\vec{r}) Y_l^m(\vec{\Omega})$$

on obtient:

$$\begin{aligned} \left[\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} + \Sigma(\vec{r}) - \Sigma_{s,1}(\vec{r}) \right] \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \psi_l^m(\vec{r}) Y_l^m(\vec{\Omega}) &= \\ \left(\frac{\chi(\vec{r}) \nu \Sigma_f(\vec{r})}{k_{eff}} + \Sigma_{s,0}(\vec{r}) - \Sigma_{s,1}(\vec{r}) \right) \psi_0^0(\vec{r}) + \sum_{l=2}^{\infty} \sum_{m=-l}^l (\Sigma_{s,l} - \Sigma_{s,1}) Y_l^m(\vec{\Omega}) \psi_l^m(\vec{r}) \end{aligned}$$

En négligeant tous les termes d'ordre supérieur à 2 pour le membre de droite de

l'équation (Macfarlane, 1992):

$$(\Sigma_{s,l}(\vec{r}) - \Sigma_{s,1}(\vec{r})) \psi_l^m(\vec{r}) = 0 \text{ si } l \geq 2 \text{ et } -l \leq m \leq l$$

on obtient alors:

$$\left[\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} + \Sigma_{tr}(\vec{r}) \right] \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \psi_l^m(\vec{r}) Y_l^m(\vec{\Omega}) = \left(\frac{\chi(\vec{r}) \nu \Sigma_f(\vec{r})}{k_{eff}} + \Sigma_{str}(\vec{r}) \right) \psi_0^0(\vec{r}) \quad (1.5)$$

avec: $\Sigma_{tr}(\vec{r}) = \Sigma(\vec{r}) - \Sigma_{s,1}(\vec{r})$ et $\Sigma_{str}(\vec{r}) = \Sigma_{s,0}(\vec{r}) - \Sigma_{s,1}(\vec{r})$.

L'équation (1.5) est dite corrigée transport, elle prend en compte partiellement l'anisotropie linéaire de la section efficace de diffusion. Dans ce qui suit, nous supposons que les sections efficaces totale et de diffusion sont corrigées transport. Pour ne pas alourdir la notation, nous n'utiliserons pas l'indice tr .

1.1.3 Condensation en énergie: formalisme multigroupe

Après avoir intégré le flux sur les angles solides, il reste à intégrer l'équation (1.3) en énergie. Pour cela, on recourt à la discrétisation multigroupe qui consiste à subdiviser le domaine d'énergie des neutrons ($E_G \leq E \leq E_0$) en G groupes. Après quoi, il est possible de définir un flux et des sections efficaces de groupe:

$$\phi^g(\vec{r}) = \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE \phi(\vec{r}, E) \quad \text{et} \quad \chi(\vec{r})^g = \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE \chi(\vec{r}, E)$$

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

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

$$\Sigma_s^{g \leftarrow g'}(\vec{r}) = \frac{1}{\phi^{g'}(\vec{r})} \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE \int_{E'_g}^{E_{g'-1}} dE' \Sigma_s(\vec{r}, E \leftarrow E') \phi(\vec{r}, E')$$

Dans ce formalisme, il apparait un couplage entre le flux de groupe, les sections efficaces condensées et le flux continu en énergie, $\phi(\vec{r}, E)$. Un certain nombre d'approximations (séparation des variables d'espace et d'énergie, sections efficaces microscopiques indépendantes de la forme du flux) permettent de s'en affranchir (Lewis et Miller, Jr., 1984).

Après intégration en énergie, nous obtenons l'équation de transport dans sa forme multigroupe:

$$\left[\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} + \Sigma^g(\vec{r}) \right] \phi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \chi^g(\vec{r}) \sum_{g'=1}^G \frac{\nu \Sigma_f^{g'}(\vec{r})}{k_{eff}} \phi^{g'}(\vec{r}) + \sum_{g'=1}^G \Sigma_s^{g \leftarrow g'}(\vec{r}) \phi^{g'}(\vec{r}) \quad (1.6)$$

Afin de prendre en compte le terme de fuite $\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi^g(\vec{r}, \vec{\Omega})$, nous allons l'associer à une dérivée directionnelle pour obtenir, après intégration, l'équation de transport dans sa forme intégrale.

1.2 Équation intégrale

L'équation (1.6) s'écrit:

$$\left[\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} + \Sigma^g(\vec{r}) \right] \phi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = Q^g(\vec{r})$$

avec:

$$Q^g(\vec{r}) = \chi^g(\vec{r}) \sum_{g'=1}^G \frac{\nu \Sigma_f^{g'}(\vec{r})}{k_{eff}} \phi^{g'}(\vec{r}) + \sum_{g'=1}^G \Sigma_s^{g \leftarrow g'}(\vec{r}) \phi^{g'}(\vec{r})$$

De même, nous avons au point $\vec{r}' = \vec{r} - R.\vec{\Omega}$:

$$\left[\vec{\Omega}.\vec{\nabla}' + \Sigma^g(\vec{r}') \right] \phi^g(\vec{r}', \vec{\Omega}) = Q^g(\vec{r}')$$

Sachant que $\vec{r}' = \vec{r} - R.\vec{\Omega}$, il vient $\frac{d\vec{r}'}{dR} = -\vec{\Omega}$. On en déduit: $\vec{\Omega}.\vec{\nabla}' = -\frac{d}{dR}$

On a donc:

$$\left[-\frac{d}{dR} + \Sigma^g(\vec{r} - R.\vec{\Omega}) \right] \phi^g(\vec{r} - R.\vec{\Omega}, \vec{\Omega}) = Q^g(\vec{r} - R.\vec{\Omega})$$

En posant $\tau^g(R, \vec{\Omega}) = \int_0^R dR' \Sigma^g(\vec{r} - R'.\vec{\Omega})$, on obtient:

$$-\frac{d}{dR} e^{-\tau^g(R, \vec{\Omega})} \phi^g(\vec{r} - R.\vec{\Omega}, \vec{\Omega}) = e^{-\tau^g(R, \vec{\Omega})} Q^g(\vec{r} - R.\vec{\Omega})$$

ce qui s'intègre ($\vec{r}'_s = \vec{r} - R_s.\vec{\Omega}$ étant un point à la surface):

$$\phi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = e^{-\tau^g(R_s, \vec{\Omega})} \phi^g(\vec{r} - R_s.\vec{\Omega}, \vec{\Omega}) + \int_0^{R_s} dR' e^{-\tau^g(R', \vec{\Omega})} Q^g(\vec{r} - R'.\vec{\Omega}) \quad (1.7)$$

Si on choisit R_s tel que la condition à la limite $\phi^g(\vec{r} - R_s.\vec{\Omega}, \vec{\Omega}) = 0$ soit vérifiée, on a alors:

$$\phi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \int_0^{R_s} dR' e^{-\tau^g(R', \vec{\Omega})} Q^g(\vec{r} - R'.\vec{\Omega})$$

Après intégration sur toutes les directions $\vec{\Omega}$ des neutrons (intégration sur les angles solides) et en utilisant $d^3r' = 4\pi R'^2 dR' d^2\Omega$ (Eq. 1.2), on obtient:

$$\phi^g(\vec{r}) = \int_V d^3r' \frac{e^{-\tau^g(\vec{r}-\vec{r}')}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|^2} Q^g(\vec{r} - R'.\vec{\Omega}) \quad (1.8)$$

avec:

$$Q^g(\vec{r} - R' \cdot \vec{\Omega}) = Q^g(\vec{r}') = \chi^g(\vec{r}') \sum_{g'=1}^G \frac{\nu \Sigma_f^{g'}(\vec{r}')}{k_{eff}} \phi^{g'}(\vec{r}') + \sum_{g'=1}^G \Sigma_s^{g \leftarrow g'}(\vec{r}') \phi^{g'}(\vec{r}')$$

1.2.1 Probabilités de collision

Divisons le volume V en N sous-volumes où les sources sont supposées constantes spatialement. Le taux de réaction dans le sous-volume V_i est noté R_i , il est défini par:

$$R_i = \int_{V_i} d^3r \Sigma^g(\vec{r}) \phi^g(\vec{r}) = V_i \Sigma_i^g \phi_i^g$$

$$V_i \Sigma_i^g \phi_i^g = \int_{V_i} d^3r \Sigma^g(\vec{r}) \sum_{j=1}^N \left[\int_{V_j} d^3r' \frac{e^{-\tau^g(|\vec{r}-\vec{r}'|)}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|^2} Q^g(\vec{r}') \right]$$

Étant donné que les sources et les sections efficaces sont constantes dans les sous-volumes, on peut diviser l'équation par Σ_i^g et obtenir:

$$V_i \phi_i^g = \sum_{j=1}^N Q_j^g \int_{V_i} d^3r \int_{V_j} d^3r' \frac{e^{-\tau^g(|\vec{r}-\vec{r}'|)}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|^2}$$

En définissant

$$p_{ij}^g = \frac{1}{V_i} \int_{V_i} d^3r \int_{V_j} d^3r' \frac{e^{-\tau^g(|\vec{r}-\vec{r}'|)}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|^2} \quad (1.9)$$

on obtient:

$$\phi_i^g = \sum_{j=1}^N p_{ij}^g Q_j^g$$

soit:

$$\phi_i^g = \sum_{j=1}^N p_{ij}^g \left[\chi_j^g \sum_{g'=1}^G \frac{\nu \Sigma_f^{g'}}{k_{eff}} \phi_j^{g'} + \sum_{g'=1}^G \Sigma_{s,j}^{g \leftarrow g'} \phi_j^{g'} \right] \quad (1.10)$$

Les coefficients p_{ij}^g ainsi définis sont les probabilités de collision réduites. Ils

obéissent à la relation de réciprocity suivante:

$$V_i p_{ij}^g = V_j p_{ji}^g \quad (1.11)$$

La probabilité de collision P_{ij}^g est la probabilité qu'un neutron (du groupe g) créé dans le sous-volume i effectue sa première collision dans le sous-volume j . Elle se définit comme suit: $P_{ij}^g = \sum_j p_{ij}^g$ et obéit à la relation de fermeture: $\sum_{j=1}^N P_{ij}^g = 1$. La relation ainsi obtenue permet d'évaluer le flux, intégré en angle, en énergie (par groupe) et moyenné sur un volume donné V_i .

Dans le cas le plus général, la condition de frontière $\phi^g(\vec{r} - R_s, \vec{\Omega}, \vec{\Omega}) = 0$ n'est plus vérifiée. L'équation (1.7) peut tout de même se réduire à la forme (1.10) en modifiant (1.9) de façon à tenir compte des nouvelles conditions aux frontières. On définit alors des coefficients complets $\tilde{p}_{ij}^g = \tilde{p}_{ij}^g (p_{ij}^g \cdot p_{is}^g \cdot p_{si}^g \cdot p_{ss}^g)$ qui vérifient également les relations de réciprocity et de fermeture (Roy, 1998b) et où les effets de surfaces sont représentés par des coefficients p_{is}^g , p_{si}^g et p_{ss}^g . Cette forme de l'équation de transport peut se représenter par un système matriciel.

1.2.2 Prise en compte de l'anisotropie de la diffusion

L'équation (1.10) est corrigée transport, il est possible de déterminer une relation plus générale prenant en compte toutes les composantes du développement dans la base des polynômes de Legendre de la section efficace de diffusion. On obtient alors une relation couplée entre les divers composantes du flux dans la base des harmoniques sphériques: ψ_l^m .

Dans le cas monocinétique, on a une relation du type (Roy, 1991):

$$\psi_{l,j}^{m'} = \sum_{j=1}^N \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l p_{ij}^{l'm' \leftarrow lm} Q_{l,j}^m \quad (1.12)$$

avec:

$$Q_{0,j}^0 = \left(\frac{1}{k_{eff}} \chi \nu \Sigma_{f,j} + \Sigma_{s,0,j} \right) \psi_{0,j}^0 \quad \text{et} \quad Q_{l,j}^m = \Sigma_{s,l,j} \psi_{l,j}^m \text{ si } l > 0$$

1.2.3 Équation intégrale: forme matricielle

Considérons le cas d'une discrétisation $N \times G$ (N régions et G groupes). L'équation (1.10) se met sous la forme d'un système matriciel du type:

$$\vec{\phi} = \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \mathbf{R}_{\lambda} \cdot \vec{\phi} \quad (1.13)$$

Le vecteur $\vec{\phi}$, de dimension $N \times G$, est défini par:

$$\vec{\phi} = [\phi_1^1 \dots \phi_N^1 \dots \phi_1^G \dots \phi_N^G]^T$$

Les matrices $\mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}$ et \mathbf{R}_{λ} sont de dimension $(N \times G)^2$. La matrice \mathbf{R}_{λ} se décompose comme suit:

$$\mathbf{R}_{\lambda} = \Sigma_s + \lambda \chi \cdot \nu \Sigma_f^T = \Sigma_s + \frac{1}{k_{eff}} \chi \cdot \nu \Sigma_f^T$$

La formulation matricielle: $\vec{\phi} = \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \mathbf{R}_{\lambda} \cdot \vec{\phi}$ fait apparaître que $\mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}$ est diagonale au sens énergétique et qu'elle est pleine au sens spatial, tandis que \mathbf{R}_{λ} est diagonale au sens spatial et pleine au sens énergétique. Cela permet d'affecter \mathbf{R}_{λ} au couplage énergétique et $\mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}$ au couplage spatial. On se référera à l'annexe (L.1) pour une présentation plus détaillée de la structure matricielle de l'équation intégrale

discrétisée. L'équation (1.13) est bien sûr une équation aux valeurs propres. la matrice \mathbf{R}_λ dépend de k_{eff} . En présence d'une source fixe \vec{Q}_e on a $k_{eff} = 1$ ce qui s'écrit:

$$\vec{\phi} = \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \mathbf{R} \cdot \vec{\phi} + \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \vec{Q}_e \quad (1.14)$$

Si on pose $\vec{S} = \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \vec{Q}_e$, cette équation s'écrit alors:

$$\vec{\phi} = \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \mathbf{R} \cdot \vec{\phi} + \vec{S} \quad (1.15)$$

1.2.4 Forme standard des équations discrétisées

Les équations précédentes s'écrivent également sous la forme d'opérateurs.

- Dans le cas critique, on a:

$$\mathbf{A} \cdot \vec{\phi} = \lambda \mathbf{F} \cdot \vec{\phi} \quad (1.16)$$

avec:

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \mathbf{I} - \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \Sigma_s \\ \mathbf{F} &= \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \chi \cdot \nu \Sigma_f^T \\ \lambda &= 1/k_{eff} \end{aligned}$$

- Pour un réacteur avec source on a:

$$\mathbf{A} \cdot \vec{\phi} = \vec{S} \quad (1.17)$$

avec:

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \mathbf{I} - \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot (\Sigma_s + \chi \cdot \nu \Sigma_f^T) \\ \vec{S} &= \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \vec{Q}_e \end{aligned}$$

CHAPITRE 2

FORMALISME ADJOINT

2.1 Produit scalaire et opérateur adjoint

Pour toute distribution $D(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$ et pour toute fonction $F(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$ à valeurs réelles, on peut définir le produit scalaire suivant:

$$\langle F(\vec{r}, \vec{\Omega}, E), D(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \rangle = \int d^3r' \int dE' \int d^2\Omega F(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) D(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$$

Considérons un opérateur \mathbf{A} qui, à une distribution donnée $D(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$, fait correspondre une autre distribution $D'(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \mathbf{A}D(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$. On a alors, l'égalité des produits scalaires:

$$\langle F(\vec{r}, \vec{\Omega}, E), D'(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \rangle = \langle F(\vec{r}, \vec{\Omega}, E), \mathbf{A}D(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \rangle$$

À tout opérateur \mathbf{A} sur les distributions, on peut faire correspondre un opérateur adjoint \mathbf{A}^* , à valeurs réelles, qui opère sur les fonctions. Il est défini par la conservation du produit scalaire:

$$\langle F(\vec{r}, \vec{\Omega}, E), \mathbf{A}D(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \rangle = \langle \mathbf{A}^*F(\vec{r}, \vec{\Omega}, E), D(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \rangle \quad (2.1)$$

2.1.1 Dérivation des opérateurs adjoints

La dérivation explicite des opérateurs adjoints est présentée à l'annexe (I.2), nous rappelons ici leurs définitions (Williams, 1986):

- Opérateur scalaire:

$$\mathbf{A} = K(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \longrightarrow \mathbf{A}^* = K(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$$

- Opérateur de fuite:

$$\mathbf{A} = \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \longrightarrow \mathbf{A}^* = -\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla}$$

- Opérateur laplacien (de diffusion):

$$\mathbf{A} = \nabla^2 \longrightarrow \mathbf{A}^* = \nabla^2$$

- Opérateur intégral:

$$\mathbf{A} = \int K(\vec{r} \leftarrow \vec{r}', \vec{\Omega} \leftarrow \vec{\Omega}', E \leftarrow E') \longrightarrow \mathbf{A}^* = \int K(\vec{r}' \leftarrow \vec{r}, \vec{\Omega}' \leftarrow \vec{\Omega}, E' \leftarrow E)$$

2.1.2 Discrétisation et opérateurs matriciels

Si on considère une distribution $D(\vec{r}, E)$ et une fonction $F(\vec{r}, E)$, le produit scalaire est défini par:

$$\langle F(\vec{r}, E), D(\vec{r}, E) \rangle = \int d^3r \int dE F(\vec{r}, E) D(\vec{r}, E)$$

Pour discrétiser en énergie, on procédera selon la méthode multigroupe (Stamm 'ler

et Abbate, 1983):

- $D^g(\vec{r}) = \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE D(\vec{r}, E)$
- $F^g(\vec{r}) = \frac{1}{D^g(\vec{r})} \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE F(\vec{r}, E) D(\vec{r}, E)$

Le produit précédent peut se mettre sous la forme:

$$\langle F(\vec{r}, E), D(\vec{r}, E) \rangle = \int d^3r \sum_{g=1}^G \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE F(\vec{r}, E) D(\vec{r}, E)$$

On obtient donc:

$$\langle F(\vec{r}, E), D(\vec{r}, E) \rangle = \int d^3r \sum_{g=1}^G F^g(\vec{r}) D^g(\vec{r})$$

Pour discrétiser spatialement, on procédera de manière analogue:

- $D_i^g(\vec{r}) = \frac{1}{V_i} \int_{V_i} d^3r D^g(\vec{r})$
- $F_i^g = \frac{1}{D_i^g(\vec{r}) V_i} \int_{V_i} d^3r F^g(\vec{r}) D^g(\vec{r})$

On obtient donc:

$$\langle F(\vec{r}, E), D(\vec{r}, E) \rangle = \sum_{i=1}^N \sum_{g=1}^G F_i^g V_i D_i^g$$

En définissant \mathbf{V} la matrice diagonale des volumes, le produit scalaire peut alors s'écrire sous forme vectorielle:

$$\langle \vec{F}, \vec{D} \rangle = \vec{F}^T \cdot \mathbf{V} \cdot \vec{D}$$

avec:

$$\begin{aligned}\vec{F} &= [F_1^1 \dots F_N^1, \dots, F_1^G \dots F_N^G]^T \\ \vec{D} &= [D_1^1 \dots D_N^1, \dots, D_1^G \dots D_N^G]^T\end{aligned}$$

À tout opérateur matriciel \mathbf{A} sur les distributions, on peut faire correspondre un opérateur adjoint \mathbf{A}^* , qui opère sur les fonctions. Il est défini par la conservation du produit scalaire:

$$\begin{aligned}\langle \vec{F} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{D} \rangle &= \langle \mathbf{A}^* \cdot \vec{F} \cdot \vec{D} \rangle \\ \langle \vec{F} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{D} \rangle &= \vec{F}^T \cdot \mathbf{V} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{D} = (\mathbf{A}^* \cdot \vec{F})^T \cdot \mathbf{V} \cdot \vec{D} = \vec{F}^T \cdot \mathbf{A}^{*T} \cdot \mathbf{V} \cdot \vec{D} \\ \mathbf{A}^{*T} \cdot \mathbf{V} &= \mathbf{V} \cdot \mathbf{A} \Rightarrow \mathbf{A}^{*T} = \mathbf{V} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{V}^{-1}\end{aligned}$$

On en déduit:

$$\mathbf{A}^* = \mathbf{V}^{-1} \cdot \mathbf{A}^T \cdot \mathbf{V} \quad (2.2)$$

2.2 Équation intégrodifférentielle adjointe

En l'absence de source fixe, l'équation de transport intégrodifférentielle continue (Eq. 1.1) s'écrit:

$$\begin{aligned}& \left[\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} + \Sigma(\vec{r}, E) \right] \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = \\ & \int dE' \int d^2\Omega' \left[\chi(\vec{r}, E) \frac{\nu \Sigma_f(\vec{r}, E')}{k_{eff}} + \Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega}', \vec{\Omega}, E \leftarrow E') \right] \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E')\end{aligned}$$

Dans le sens où il peut être associé à une densité, le flux fondamental $\phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$ est une distribution à valeurs réelles et positives, en espace, direction et énergie.

Le k_{eff} est la valeur propre fondamentale positive qui est associée au flux.

Le flux adjoint fondamental, noté $\phi^*(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$, est une fonction réelle et positive associée à la valeur propre $k_{eff}^* = k_{eff}$ positive. Il vérifie l'équation adjointe qui est obtenue en remplaçant les opérateurs directs par leurs adjoints.

On peut déduire des propriétés sur les opérateurs adjoints l'équation intégrodifférentielle adjointe suivante:

$$\left[-\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} + \Sigma(\vec{r}, E) \right] \phi^*(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = \int dE' \int d^2\Omega' \left[\chi(\vec{r}, E') \frac{\nu \Sigma_f(\vec{r}, E)}{k_{eff}^*} + \Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega}, \vec{\Omega}', E' \leftarrow E) \right] \phi^*(\vec{r}, \vec{\Omega}', E')$$

À cette équation, il faut ajouter des conditions aux frontières. On choisira, par exemple, dans le cas d'un volume fini: $\phi^*(\vec{r}_s, \vec{\Omega}, E) = 0$ si $\vec{\Omega} \cdot \vec{N} \geq 0$ avec: \vec{r}_s un point sur la frontière et \vec{N} la normale sortante.

Cela permettra de vérifier la condition: $\vec{N} \cdot \left(\vec{\Omega} \phi^*(\vec{r}_s, \vec{\Omega}, E) \phi(\vec{r}_s, \vec{\Omega}, E) \right) = 0$ sur toute la surface.

2.3 Équation intégrale adjointe

L'équation de transport dans sa forme intégrale continue en espace et discrétisée en énergie (Eq. 1.8) peut s'écrire:

$$\phi^g(\vec{r}) = \int_V d^3r' \frac{e^{-\tau^g(\vec{r}-\vec{r}')}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|^2} K^{-g,g'}(\vec{r}') \phi^{g'}(\vec{r}')$$

avec:

$$K^{g,g'}(\vec{r}') = \chi^g(\vec{r}') \sum_{g'=1}^G \frac{\nu_{\Sigma_f^{g'}}(\vec{r}')}{k_{eff}} + \sum_{g'=1}^G \Sigma_s^{g \leftarrow g'}(\vec{r}')$$

L'équation adjointe associée s'écrira:

$$\phi^{*g}(\vec{r}) = \int_{V'} d^3 r' K^{g',g}(\vec{r}) \frac{e^{-\tau_{g'}(|\vec{r}'-\vec{r}|)}}{4\pi|\vec{r}'-\vec{r}|^2} \phi^{*g'}(\vec{r}')$$

avec:

$$K^{g',g}(\vec{r}) = \nu_{\Sigma_f^g}(\vec{r}) \sum_{g'=1}^G \frac{\chi^{g'}(\vec{r})}{k_{eff}} + \sum_{g'=1}^G \Sigma_s^{g' \leftarrow g}(\vec{r})$$

À cela, on ajoutera les conditions de frontières précédentes, notamment:

$\phi^{*g}(\vec{r}_s, \vec{\Omega}) = 0$ si $\vec{\Omega} \cdot \vec{N} \geq 0$ où \vec{r}_s est un point sur la frontière et \vec{N} la normale sortante.

2.3.1 Équation intégrale adjointe: forme matricielle

L'équation de transport sous forme matricielle (Eq. 1.13) s'écrit:

$$\vec{\phi} = \mathbf{P}_{VV} \cdot \mathbf{R}_\lambda \cdot \vec{\phi}$$

La relation de réciprocité $V_i p_{i,j}^g = V_j p_{j,i}^g$ (Eq. 1.11), donne sous forme matricielle:

$$\mathbf{V} \cdot \mathbf{P}_{VV} = \mathbf{P}_{VV}^T \cdot \mathbf{V}$$

La matrice \mathbf{R}_λ étant diagonale spatialement, \mathbf{V} et \mathbf{R}_λ commutent, on a: $\mathbf{V} \cdot \mathbf{R}_\lambda = \mathbf{R}_\lambda \cdot \mathbf{V}$. Compte tenu de la définition de l'opérateur adjoint discrétisé (Eq. 2.2), on obtient une formulation de l'équation adjointe discrétisée identique à celle de

Stacey. (Stacey, Jr., 1970):

$$\begin{aligned}
 \vec{\phi} &= \mathbf{V}^{-1} \cdot \mathbf{R}_\lambda^T \cdot \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}^T \cdot \mathbf{V} \cdot \vec{\phi} \\
 \vec{\phi} &= \mathbf{V}^{-1} \cdot \mathbf{R}_\lambda^T \cdot \mathbf{V} \cdot \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \vec{\phi} \\
 \vec{\phi} &= \mathbf{R}_\lambda^T \cdot \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \vec{\phi}
 \end{aligned} \tag{2.3}$$

En présence d'une source fixe, l'équation directe s'écrit (Eq. 1.15):

$$\vec{\phi} = \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \mathbf{R} \cdot \vec{\phi} + \vec{S}$$

L'équation adjointe associée s'écrira pour une source adjointe \vec{S}^* arbitraire:

$$\vec{\phi}^* = \mathbf{R}^T \cdot \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \vec{\phi}^* + \vec{S}^* \tag{2.4}$$

Contrairement aux équations intégrodifférentielle et intégrale adjointes, l'équation matricielle adjointe ne comporte pas de conditions aux frontières qui lui sont associées. Cela provient du fait que dans le cas direct, les conditions aux frontières sont directement prises en compte dans la matrice des probabilités de collision (Eq. 1.9).

2.3.2 Forme standard des équations discrétisées

De même que les équations directes s'écrivent sous forme d'opérateurs (Eqs. 1.16 et 1.17), on a dans le cas adjoint et pour un réacteur critique:

$$\mathbf{A}^* \cdot \vec{\phi}^* = \lambda^* \mathbf{F}^* \cdot \vec{\phi}^* \tag{2.5}$$

avec:

$$\begin{aligned}\mathbf{A}^* &= \mathbf{I} - \Sigma_s^T \cdot \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \\ \mathbf{F}^* &= \nu \Sigma_f \cdot \chi^T \cdot \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \\ \lambda^* &= \lambda = 1/k_{eff}\end{aligned}$$

Pour un réacteur avec source on a:

$$\mathbf{A}^* \cdot \vec{\phi}^* = \vec{S}^* \quad (2.6)$$

avec:

$$\mathbf{A}^* = \mathbf{I} - (\Sigma_s^T + \nu \Sigma_f \cdot \chi^T) \cdot \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}$$

2.3.3 Sources et flux adjoints généralisés

On sera amené, dans le cadre de la théorie des perturbations, à calculer des flux adjoints généralisés. Ils sont définis par les équations:

$$\begin{aligned}(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{F}) \cdot \vec{\phi} &= 0 \\ (\mathbf{A}^* - \lambda \mathbf{F}^*) \cdot \vec{\Gamma}^* &= \vec{S}^*\end{aligned} \quad (2.7)$$

Compte tenu de ce qui a été dit précédemment, l'équation (2.7) peut s'écrire:

$$\vec{\Gamma}^* = \mathbf{R}_\lambda^T \cdot \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \vec{\Gamma}^* + \vec{S}^* \quad (2.8)$$

La matrice $\mathbf{A} - \lambda \mathbf{F}$ étant singulière, la source adjointe généralisée \vec{S}^* doit vérifier la relation:

$$\langle \vec{S}^* \cdot \vec{\phi} \rangle = \langle \vec{\Gamma}^* \cdot (\mathbf{A} - \lambda \mathbf{F}) \cdot \vec{\phi} \rangle = 0 \quad (2.9)$$

Il est possible de construire une solution itérative à cette équation (Stacey, Jr., 1972a; Stacey, Jr., 1974):

$$\vec{\Gamma}^* = \sum_{k=0}^{k=\infty} \vec{\Gamma}_k^*$$

On résoudra pour cela:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}^* \cdot \vec{\Gamma}_0^* &= \vec{S}^* \\ \mathbf{A}^* \cdot \vec{\Gamma}_k^* &= \lambda \mathbf{F}^* \cdot \vec{\Gamma}_{k-1}^* \end{aligned}$$

Cette solution sera l'unique solution vérifiant: $\langle \vec{\Gamma}^*, \mathbf{F} \cdot \vec{\phi} \rangle = 0$.

En effet, on a:

$$\begin{aligned} \langle \vec{\Gamma}_k^*, \mathbf{F} \cdot \vec{\phi} \rangle &= \frac{1}{\lambda} \langle \vec{\Gamma}_k^*, \mathbf{A} \cdot \vec{\phi} \rangle = \frac{1}{\lambda} \langle \mathbf{A}^* \cdot \vec{\Gamma}_k^*, \vec{\phi} \rangle \\ \langle \vec{\Gamma}_k^*, \mathbf{F} \cdot \vec{\phi} \rangle &= \langle \mathbf{F}^* \cdot \vec{\Gamma}_{k-1}^*, \vec{\phi} \rangle = \langle \vec{\Gamma}_{k-1}^*, \mathbf{F} \cdot \vec{\phi} \rangle \end{aligned}$$

ainsi on obtient:

$$\langle \vec{\Gamma}_k^*, \mathbf{F} \cdot \vec{\phi} \rangle = \dots = \langle \vec{\Gamma}_0^*, \mathbf{F} \cdot \vec{\phi} \rangle = \frac{1}{\lambda} \langle \mathbf{A}^* \cdot \vec{\Gamma}_0^*, \vec{\phi} \rangle = \frac{1}{\lambda} \langle \vec{S}^*, \vec{\phi} \rangle = 0$$

Afin de limiter la contamination numérique du mode fondamental, on évaluera:

$$\vec{\Gamma}_k^* = \vec{\Gamma}_k^* - \frac{\langle \vec{\Gamma}_k^*, \mathbf{F} \cdot \vec{\phi} \rangle}{\langle \vec{\phi}^*, \mathbf{F} \cdot \vec{\phi} \rangle} \vec{\phi}^* \quad (2.10)$$

2.3.4 Flux adjoint: remarques et propriétés

Les opérateurs adjoints sont obtenus par *transposition* des opérateurs directs, ils sont directement fonction des propriétés du milieu étudié. Pour un réacteur cri-

tique, le flux direct dépend uniquement des opérateurs directs. Dans ce cas, le flux adjoint peut être associé à l'importance des neutrons (Henry, 1975).

En présence d'une source fixe, le flux direct dépendra des opérateurs directs et de la valeur de la source fixe, qui est indépendante du flux dans le milieu étudié. Dans ce cas, le flux adjoint sera fonction des opérateurs adjoints et de la source adjointe qui est, à priori, arbitraire. Il sera donc plus difficile d'associer le flux adjoint à une importance pour un réacteur avec une source fixe.

Si le passage d'une forme à l'autre de l'équation directe: intégrodifférentielle, intégrale et matricielle se fait *naturellement* (par des intégrations successives), il n'en n'est rien pour le passage d'une forme à l'autre des équations adjointes. En effet, à chaque forme prise par un opérateur direct correspond un opérateur adjoint. Si on manipule les opérateurs directs en les multipliant à gauche par des opérateurs quelconques, le flux direct sera toujours solution du système obtenu. Mais, en *transposant* ces opérateurs, nous obtenons une équation adjointe particulière dont la solution dépend des manipulations effectuées sur l'équation directe.

Dans le cas d'un réacteur à un groupe d'énergie, les opérateurs de l'équation de diffusion sont symétriques:

$$-D\nabla^2\vec{\phi} + \Sigma \cdot \vec{\phi} = [\Sigma_s + \lambda\chi \cdot \nu\Sigma_f] \cdot \vec{\phi}$$

Les opérateurs étant symétriques, ils sont auto-adjoints. Le flux est donc auto-adjoint à un groupe d'énergie en diffusion. En transport, ce n'est pas le cas. En effet, la matrice des probabilités de collision $\mathbf{P}_{\mathbf{v}\mathbf{v}}$ est pleine s'il y a plusieurs régions. Elle sera auto-adjointe si on se limite au cas *un groupe et une région*, les opérateurs étant alors des scalaires (Davison, 1957).

CHAPITRE 3

THÉORIE DES PERTURBATIONS

Après avoir défini les flux adjoint et adjoint généralisé, nous allons discuter de la théorie des perturbations. Compte tenu de la taille des systèmes à résoudre en transport, nous nous limiterons aux perturbations au premier ordre.

Une perturbation, quelle qu'elle soit, se traduira par une variation des opérateurs \mathbf{A} et \mathbf{F} , et de la source externe s'il y a lieu. Le flux sera également perturbé. Nous chercherons à évaluer, suite à une perturbation, les variations de taux de réaction δR , avec $R = \langle \vec{\Sigma}, \vec{\phi} \rangle$, pour un réacteur avec source et la variation de valeur propre $\delta\lambda$, et de rapports de taux de réaction δG , avec $G = \frac{\langle \vec{\Sigma}_1, \vec{\phi} \rangle}{\langle \vec{\Sigma}_2, \vec{\phi} \rangle}$, pour un réacteur critique. Dans tous les cas, nous supposerons que les variations des opérateurs $\delta\mathbf{A}$, $\delta\mathbf{F}$ et de la source $\delta\vec{S}$ sont connues.

La théorie des perturbations peut être considérée sous deux approches:

- Approche standard: partant d'un état de référence, nous cherchons à évaluer l'impact d'une petite perturbation sur un taux de réaction donné ou encore sur la valeur propre du système.
- Approche variationnelle: à partir d'une fonctionnelle d'intérêt, un taux de réaction par exemple, on peut construire un principe variationnel pour cette fonctionnelle qui nous permettra d'évaluer le taux de réaction pour différents états des opérateurs \mathbf{A} , \mathbf{F} et de la source \vec{S} .

Dans ce qui suit, nous nous limiterons à présenter l'approche standard et nous

renvoyons à Stacey (Stacey, Jr., 1972b; Stacey, Jr., 1974) pour une comparaison plus approfondie des deux approches.

3.1 Perturbation au premier ordre: hypothèses

Suite à une perturbation, nous aurons:

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}_p = \mathbf{A} + \delta\mathbf{A}$$

$$\mathbf{F} \rightarrow \mathbf{F}_p = \mathbf{F} + \delta\mathbf{F}$$

$$\vec{S} \rightarrow \vec{S}_p = \vec{S} + \delta\vec{S}$$

Les opérateurs \mathbf{A} , \mathbf{F} et la source \vec{S} correspondent à l'état de référence, l'indice p est associé à l'état perturbé, $\delta\mathbf{A}$, $\delta\mathbf{F}$ et $\delta\vec{S}$ sont les variations caractérisant la perturbation.

La perturbation des opérateurs induira une perturbation du flux et, dans le cas critique, de la valeur propre.

On aura:

$$\vec{o} \rightarrow \vec{o}_p = \vec{o} + \delta\vec{o}$$

$$\lambda \rightarrow \lambda_p = \lambda + \delta\lambda$$

Dans les calculs qui suivent nous négligerons les termes *d'ordre 2* qui s'écrivent sous la forme $\delta X \delta Y$ avec: X ou $Y = \{\mathbf{A}, \mathbf{F}, \vec{o}, \vec{S}, \lambda\}$. Cela suppose que les perturbations considérées soient de petites perturbations dont l'impact sur le flux ou le k_{eff} n'est pas trop grand ou que l'on reste dans un cadre linéaire.

3.2 Réacteur avec source: calcul de δR

Suite à une perturbation, nous avons les relations:

$$\begin{aligned} \mathbf{A} \cdot \vec{\phi} &= \vec{S} \quad \text{et} \quad R = \langle \vec{\Sigma}, \vec{\phi} \rangle \\ \mathbf{A}_p \cdot \vec{\phi}_p &= \vec{S}_p \quad \text{et} \quad R_p = \langle \vec{\Sigma}_p, \vec{\phi}_p \rangle \end{aligned}$$

Si on soustrait les équations, on obtient au premier ordre:

$$\begin{aligned} \mathbf{A} \cdot \delta \vec{\phi} &= \delta \vec{S} - \delta \mathbf{A} \cdot \vec{\phi} \\ \delta R &= \langle \delta \vec{\Sigma}, \vec{\phi} \rangle + \langle \vec{\Sigma}, \delta \vec{\phi} \rangle \end{aligned}$$

Si on résout l'équation adjointe $\mathbf{A}^* \vec{\phi}^* = \vec{S}^*$ en fixant $\vec{S}^* = \vec{\Sigma}$, on obtient:

$$\langle \vec{\Sigma}, \delta \vec{\phi} \rangle = \langle \vec{\phi}^*, \mathbf{A} \cdot \delta \vec{\phi} \rangle = \langle \vec{\phi}^*, \delta \vec{S} - \delta \mathbf{A} \cdot \vec{\phi} \rangle$$

En définitive, on obtient:

$$\delta R = \underbrace{\langle \delta \vec{\Sigma}, \vec{\phi} \rangle}_{\text{Composante directe}} + \underbrace{\langle \vec{\phi}^*, \delta \vec{S} - \delta \mathbf{A} \cdot \vec{\phi} \rangle}_{\text{Composante indirecte}} \quad (3.1)$$

La relation précédente comporte deux composantes, la première est dite directe et traduit l'impact de $\delta \vec{\Sigma}$ sur le taux de réaction, la composante indirecte quant à elle traduit l'impact de $\delta \vec{\phi}$.

3.3 Réacteur critique: calcul de $\delta\lambda$

Au premier ordre on a: $\mathbf{F}_p \sim \mathbf{F}$. Dans les relations suivantes, on a choisi une formulation en fonction de \mathbf{F}_p car cette dernière est en général plus précise.

Suite à une perturbation, nous avons les relations:

$$\begin{aligned}\mathbf{A} \cdot \vec{\phi} &= \lambda \mathbf{F} \cdot \vec{\phi} \\ \mathbf{A}_p \cdot \vec{\phi}_p &= \lambda_p \mathbf{F}_p \cdot \vec{\phi}_p\end{aligned}$$

En soustrayant les équations, on obtient au premier ordre:

$$(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{F}) \cdot \delta \vec{\phi} + (\delta \mathbf{A} - \lambda \delta \mathbf{F}) \cdot \vec{\phi} = \delta \lambda \mathbf{F}_p \cdot \vec{\phi}$$

Multiplions scalairement cette équation par le flux adjoint.

Sachant que $\langle \vec{\phi}^*, (\mathbf{A} - \lambda \mathbf{F}) \cdot \delta \vec{\phi} \rangle = 0$, on a:

$$\langle \vec{\phi}^*, (\delta \mathbf{A} - \lambda \delta \mathbf{F}) \cdot \vec{\phi} \rangle = \langle \vec{\phi}^*, \delta \lambda \mathbf{F}_p \cdot \vec{\phi} \rangle$$

On obtient ainsi la formule de perturbation:

$$\delta \lambda = \frac{\langle \vec{\phi}^*, \delta \mathbf{A} \cdot \vec{\phi} \rangle - \lambda \langle \vec{\phi}^*, \delta \mathbf{F} \cdot \vec{\phi} \rangle}{\langle \vec{\phi}^*, \mathbf{F}_p \cdot \vec{\phi} \rangle} \quad (3.2)$$

3.4 Réacteur critique: calcul de δG

Suite à une perturbation, nous avons les relations:

$$\mathbf{A} \cdot \vec{\phi} = \lambda \mathbf{F} \cdot \vec{\phi} \quad \text{et} \quad G = \frac{\langle \vec{\Sigma}_i \cdot \vec{\phi} \rangle}{\langle \vec{\Sigma}_j \cdot \vec{\phi} \rangle}$$

$$\mathbf{A}_p \cdot \vec{\phi}_p = \lambda_p \cdot \mathbf{F}_p \cdot \vec{\phi}_p \quad \text{et} \quad G_p = \frac{\langle \vec{\Sigma}_{i,p} \cdot \vec{\phi}_p \rangle}{\langle \vec{\Sigma}_{j,p} \cdot \vec{\phi}_p \rangle}$$

Si on soustrait les équations et en utilisant une formulation en $\delta \lambda \mathbf{F}_p$, on obtient au premier ordre:

$$(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{F}) \cdot \delta \vec{\phi} = (\delta \lambda \mathbf{F}_p + \lambda \delta \mathbf{F} - \delta \mathbf{A}) \cdot \vec{\phi}$$

$$\delta G = \frac{\langle \delta \vec{\Sigma}_i \cdot \vec{\phi} \rangle}{\langle \vec{\Sigma}_j \cdot \vec{\phi} \rangle} - G \cdot \frac{\langle \delta \vec{\Sigma}_j \cdot \vec{\phi} \rangle}{\langle \vec{\Sigma}_j \cdot \vec{\phi} \rangle} + \frac{\langle \vec{\Sigma}_i \cdot \delta \vec{\phi} \rangle}{\langle \vec{\Sigma}_j \cdot \vec{\phi} \rangle} - G \cdot \frac{\langle \vec{\Sigma}_j \cdot \delta \vec{\phi} \rangle}{\langle \vec{\Sigma}_j \cdot \vec{\phi} \rangle}$$

Si on résout l'équation adjointe généralisée:

$$(\mathbf{A}^* - \lambda \mathbf{F}^*) \cdot \vec{\Gamma}^* = \vec{S}^* \quad \text{avec} \quad \vec{S}^* = \frac{\vec{\Sigma}_i}{\langle \vec{\Sigma}_j \cdot \vec{\phi} \rangle} - G \cdot \frac{\vec{\Sigma}_j}{\langle \vec{\Sigma}_j \cdot \vec{\phi} \rangle}$$

on a:

$$\langle \vec{S}^* \cdot \delta \vec{\phi} \rangle = \langle \vec{\Gamma}^* \cdot (\mathbf{A} - \lambda \mathbf{F}) \cdot \delta \vec{\phi} \rangle = \langle \vec{\Gamma}^* \cdot (\delta \lambda \mathbf{F}_p + \lambda \delta \mathbf{F} - \delta \mathbf{A}) \cdot \vec{\phi} \rangle$$

En définitive, on obtient:

$$\delta G = \underbrace{\frac{\langle \delta \bar{\Sigma}_i, \vec{\phi} \rangle}{\langle \bar{\Sigma}_j, \vec{\phi} \rangle} - G \cdot \frac{\langle \delta \bar{\Sigma}_j, \vec{\phi} \rangle}{\langle \bar{\Sigma}_j, \vec{\phi} \rangle}}_{\text{Composante directe}} + \underbrace{\langle \vec{\Gamma}^* \cdot (\delta \lambda \mathbf{F}_p + \lambda \delta \mathbf{F} - \delta \mathbf{A}) \cdot \vec{\phi} \rangle}_{\text{Composante indirecte}} \quad (3.3)$$

La composante directe traduit l'impact de $\delta \bar{\Sigma}_i$ et $\delta \bar{\Sigma}_j$ sur le taux de réaction, tandis que la composante indirecte traduit l'impact de $\delta \vec{\phi}$.

Il faut noter que le calcul de $\delta \lambda \mathbf{F}_p \vec{\phi}$ requiert au préalable celui de $\delta \lambda$ et donc la connaissance du flux adjoint, $\vec{\phi}^*$.

Pour évaluer les variations d'un taux de réaction (réacteur avec source) ou d'un rapport de taux de réaction (réacteur critique) pour une ou plusieurs perturbations données, il faudra faire un calcul de flux direct, un calcul de flux adjoint et, si le réacteur est critique, un calcul d'adjoint généralisé. La matrice $\mathbf{A}^* - \lambda \mathbf{F}^*$ étant singulière, on doit avoir $\langle \vec{S}^*, \vec{\phi} \rangle = 0$. Cette condition est facilement vérifiée (Eq. 2.9).

3.5 Théorie des perturbations et analyses de sensibilité

La théorie des perturbations généralisées est souvent utilisée dans le cadre des analyses de sensibilité (Cacuci et al., 1980; Williams, 1986). Parmi les différents domaines couverts par les analyses de sensibilité (Salvatores, 1988), nous allons plus particulièrement nous intéresser aux coefficients de sensibilité et aux calculs d'incertitudes.

3.5.1 Coefficients de sensibilité

Considérons une fonctionnelle F (k_{eff} , section efficaces homogénéisée, ...), on aura: $F = F(\alpha_1, \dots, \alpha_n)$. Les paramètres α_q font référence aux propriétés nucléaires de base (section efficace microscopique, densité isotopique, température). Ces propriétés permettent l'évaluation des sections efficaces macroscopiques multigroupes définies pour chacun des mélanges.

Suite à une variation des paramètres α_q , on a au premier ordre:

$$\delta F = \sum_{q=1}^n \frac{\partial F}{\partial \alpha_q} \delta \alpha_q$$

On définit les coefficients de sensibilité (associés à F et α_q) par:

$$S_F^q = \frac{\alpha_q}{F} \frac{\partial F}{\partial \alpha_q} \quad (3.4)$$

Notons que l'équation (3.4) peut se réécrire:

$$S_F^q = \frac{\partial \ln(F)}{\partial \ln(\alpha_q)} \quad (3.5)$$

Cela nous permet d'obtenir une relation du type:

$$\frac{\delta F}{F} = \sum_{q=1}^n S_F^q \frac{\delta \alpha_q}{\alpha_q} \quad (3.6)$$

Si les coefficients de sensibilité S_F^q sont définis pour chacun des paramètres nucléaires de base (auxquels on a associé l'indice q), il est possible d'évaluer l'effet d'une variation des données de base sur la fonctionnelle F . En comparant entre eux ces coefficients, on pourra déterminer quels sont les paramètres physiques qui ont le

plus d'influence sur la fonctionnelle d'intérêt.

Les coefficients de sensibilité associés à la valeur propre λ se calculent à l'aide du flux adjoint.

Sachant que $\lambda = \frac{\langle \vec{\phi}^* \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{\phi} \rangle}{\langle \vec{\phi}^* \cdot \mathbf{F} \cdot \vec{\phi} \rangle}$, on obtient:

$$\frac{\partial \lambda}{\partial \alpha_q} = \frac{\langle \vec{\phi}^* \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \alpha_q} - \lambda \cdot \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \alpha_q} \right) \cdot \vec{\phi} \rangle}{\langle \vec{\phi}^* \cdot \mathbf{F} \cdot \vec{\phi} \rangle}$$

pour en déduire:

$$S_\lambda^q = \frac{\alpha_q}{\lambda} \frac{\langle \vec{\phi}^* \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \alpha_q} - \lambda \cdot \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \alpha_q} \right) \cdot \vec{\phi} \rangle}{\langle \vec{\phi}^* \cdot \mathbf{F} \cdot \vec{\phi} \rangle} \quad (3.7)$$

Les coefficients de sensibilité peuvent également être obtenus à partir des formules de perturbation (3.1) à (3.3). Dans ce cas, il faut remplacer l'opérateur δ par $\frac{\partial}{\partial \alpha_q}$ dans les formules et normaliser la variation δF obtenue. Pour les coefficients de sensibilité associés aux propriétés homogénéisées, on aura:

$$S_G^q = \frac{\alpha_q}{G} \left[\frac{\langle \frac{\partial \vec{\Sigma}_1}{\partial \alpha_q} \cdot \vec{\phi} \rangle}{\langle \vec{\Sigma}_1 \cdot \vec{\phi} \rangle} - G \frac{\langle \frac{\partial \vec{\Sigma}_j}{\partial \alpha_q} \cdot \vec{\phi} \rangle}{\langle \vec{\Sigma}_j \cdot \vec{\phi} \rangle} + \left\langle \vec{\Gamma}^* \cdot \left(\frac{\partial(\lambda \mathbf{F})}{\partial \alpha_q} - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \alpha_q} \right) \cdot \vec{\phi} \right\rangle \right] \quad (3.8)$$

Dans le cas où les opérateurs \mathbf{A} et \mathbf{F} dépendent linéairement des propriétés nucléaires de base l'évaluation des matrices dérivées ($\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \alpha_q}$ et $\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \alpha_q}$) est immédiate, le calcul des coefficients de sensibilité en est alors simplifié (section 6.5).

3.5.2 Calculs d'incertitudes

Compte tenu des définitions précédentes, une approche statistique permet de relier les incertitudes sur les propriétés intégrales et les données nucléaires de base (Ronen, 1988; Salvatores, 1988).

D'une manière générale (Bevington, 1969), si $F = F(\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ on a alors:

$$\sigma_F^2 = \sum_{q=1}^n \sigma_q^2 \left(\frac{\partial F}{\partial \alpha_q} \right)^2 + \sum_{p \neq q} \sigma_{p,q}^2 \frac{\partial F}{\partial \alpha_p} \frac{\partial F}{\partial \alpha_q}$$

avec: σ_F^2 la variance associée à la fonctionnelle F , σ_q^2 la variance associée au paramètre α_q et $\sigma_{q,p}^2 = \sigma_{p,q}^2$ la covariance entre α_q et α_p .

Considérons les paramètres α_q et α_p indépendants entre eux ($\sigma_{q,p} = \sigma_{p,q} = 0$). En introduisant les coefficients de sensibilité S_F^q (Eq. 3.4), la relation précédente s'écrit:

$$\frac{\sigma_F^2}{F^2} = \sum_{q=1}^n \frac{\sigma_q^2}{\alpha_q^2} (S_F^q)^2$$

Dans une approche statistique, on définit l'incertitude statistique ε_F^s sur la fonctionnelle F et l'incertitude ε_q^s sur le paramètre α_q par les relations: $\varepsilon_F^s = \frac{\sigma_F}{F}$ et $\varepsilon_q^s = \frac{\sigma_q}{\alpha_q}$.

On en déduit:

$$(\varepsilon_F^s)^2 = \sum_{q=1}^n (\varepsilon_q^s)^2 (S_F^q)^2 \quad (3.9)$$

Une telle approche devrait permettre pour un ensemble d'incertitudes données sur les paramètres nucléaires (concentrations isotopiques, section efficaces microscopiques, température, ...) d'évaluer l'incertitude sur les propriétés homogénéisées sur la cellule. En répétant le même type de calcul sur l'ensemble du coeur (perturbations généralisées en diffusion), il sera alors possible de corrélérer les incertitudes

sur les paramètres nucléaires avec les incertitudes sur les données fondamentales du réacteur (puissance d'un canal par exemple). Pour le calcul de coeur, les adjoints généralisés calculés sont alors associés aux données fondamentales du réacteur.

3.6 Propriétés des formules de perturbation

3.6.1 Approches implicites et explicites

La présentation précédente peut être décrite comme l'approche implicite de la théorie des perturbations (Rozon et al., 1981). Dans ce cas, il s'agit d'évaluer l'impact sur un nombre réduit de fonctionnelles (propriétés homogénéisées et condensées) d'un grand nombre de paramètres perturbés (sections efficaces macroscopiques).

L'approche explicite ou des perturbations inverses (Chavent et al., 1990) est préconisée lorsque le nombre de fonctionnelles est élevé et ce, pour un nombre de paramètres perturbés relativement faible. La variation des opérateurs \mathbf{A} et \mathbf{F} s'écrira en fonction des paramètres α_i ($1 \leq i \leq n$):

$$\delta \mathbf{A} = \sum_{i=1}^n \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \alpha_i} \delta \alpha_i \quad \text{et} \quad \delta \mathbf{F} = \sum_{i=1}^n \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \alpha_i} \delta \alpha_i$$

Cela induira une perturbation sur le flux:

$$\delta \vec{\phi} = \sum_{i=1}^n \frac{\partial \vec{\phi}}{\partial \alpha_i} \delta \alpha_i$$

Afin d'évaluer les composantes $\vec{\Gamma}_i = \frac{\partial \vec{\phi}}{\partial \alpha_i}$, on calculera les flux généralisés:

$$(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{F}) \cdot \vec{\Gamma}_i = \vec{S}_i$$

avec:

$$\vec{S}_i = - \frac{\partial (\mathbf{A} - \lambda \mathbf{F})}{\partial \alpha_i} \cdot \vec{\phi}$$

La relation d'orthogonalité entre le flux adjoint et la source est symétrique avec l'approche implicite:

$$\langle \vec{\phi}^* \cdot \vec{S}_i \rangle = \langle \vec{S}_i^* \cdot \vec{\phi} \rangle = 0$$

La connaissance des différents flux généralisés $\vec{\Gamma}_i$, permettra de reconstruire le flux perturbé au premier ordre et d'évaluer l'impact d'une perturbation sur le flux et par conséquent, sur n'importe quelle fonctionnelle.

3.6.2 Interprétation géométrique de la perturbation

Considérons la variation δG d'un rapport de taux de réaction, la composante directe s'écrit:

$$\delta G_{DIR} = \left\langle \left(\frac{\delta \vec{\Sigma}_i}{\langle \vec{\Sigma}_j \cdot \vec{\phi} \rangle} - G \cdot \frac{\delta \vec{\Sigma}_j}{\langle \vec{\Sigma}_j \cdot \vec{\phi} \rangle} \right) \cdot \vec{\phi} \right\rangle$$

En décomposant les sections efficaces et le flux perturbé selon deux composantes respectivement parallèle et orthogonale au flux, nous pouvons écrire:

$$\begin{aligned} \vec{\phi} &= \vec{\phi}_{//} & \text{et} & & \delta \vec{\phi} &= \delta \vec{\phi}_{//} + \delta \vec{\phi}_{\perp} \\ \vec{\Sigma} &= \vec{\Sigma}_{//} + \vec{\Sigma}_{\perp} & \text{et} & & \delta \vec{\Sigma} &= \delta \vec{\Sigma}_{//} + \delta \vec{\Sigma}_{\perp} \end{aligned}$$

Tel que:

$$\langle \delta \vec{\Sigma}_{\perp} \cdot \vec{\phi}_{//} \rangle = 0 \quad \text{et} \quad \langle \vec{\Sigma}_{//} \cdot \delta \vec{\phi}_{\perp} \rangle = 0$$

Cela permet d'écrire:

$$\delta G_{DIR} = \left\langle \left(\frac{\delta \vec{\Sigma}_{i//}}{\langle \vec{\Sigma}_j, \vec{\phi} \rangle} - G \cdot \frac{\delta \vec{\Sigma}_{j//}}{\langle \vec{\Sigma}_j, \vec{\phi} \rangle} \right) \cdot \vec{\phi}_{//} \right\rangle$$

et:

$$(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{F}) \cdot \delta \vec{\phi} = (\mathbf{A} - \lambda \mathbf{F}) \cdot \delta \vec{\phi}_{\perp}$$

Cela revient à dire que la perturbation ne peut exciter qu'une composante orthogonale au flux, donc $\delta \vec{\phi} = \delta \vec{\phi}_{\perp}$. La composante indirecte s'écrit alors:

$$\delta G_{IND} = \left\langle \left(\frac{\vec{\Sigma}_{i\perp}}{\langle \vec{\Sigma}_j, \vec{\phi} \rangle} - G \cdot \frac{\vec{\Sigma}_{j\perp}}{\langle \vec{\Sigma}_j, \vec{\phi} \rangle} \right) \cdot \delta \vec{\phi}_{\perp} \right\rangle$$

Sous cette forme, on peut considérer que, pour une perturbation au premier ordre, la composante directe est *parallèle* au flux et que la composante indirecte lui est *orthogonale*.

3.6.3 Formules de perturbation exactes

Les formules de perturbation sont des approximations au premier ordre qui dépendent des flux direct, adjoint ou adjoints généralisés de l'état de référence, ainsi que des variations des opérateurs. En réécrivant ces formules avec l'aide du flux perturbé, il est possible d'obtenir des formules de perturbation exactes. Ces formulations exactes présentent à priori un intérêt purement académique car elles nécessitent la connaissance du flux perturbé que l'on évite normalement de calculer. Cependant elles facilitent grandement la mise en place de la théorie des perturbations en qualifiant l'ordre de grandeur des erreurs numériques ainsi que les erreurs imputables à d'éventuelles approximations utilisées pour évaluer la variation des opérateurs.

- Réacteur avec source, calcul de δR^e :

$$\delta R^e = \langle \bar{\Sigma}_p, \bar{\phi}_p \rangle - \langle \bar{\Sigma}, \bar{\phi} \rangle = \langle \delta \bar{\Sigma}, \bar{\phi}_p \rangle + \langle \bar{\Sigma}, \delta \bar{\phi} \rangle$$

En combinant les relations:

$$\begin{aligned} \mathbf{A} \cdot \delta \bar{\phi} &= \delta \bar{S} - \delta \mathbf{A} \cdot \bar{\phi}_p \\ \mathbf{A}^* \cdot \bar{\phi}^* &= \bar{\Sigma} \end{aligned}$$

on obtient:

$$\delta R^e = \langle \delta \bar{\Sigma}, \bar{\phi}_p \rangle + \langle \bar{\phi}^*, \delta \bar{S} - \delta \mathbf{A} \cdot \bar{\phi}_p \rangle \quad (3.10)$$

Si on remplace le flux de l'état perturbé par le flux de référence dans la formule exacte (3.10), on retrouve alors la formulation approximative (Eq. 3.1).

- Réacteur critique, calcul de $\delta \lambda^c$:

$$\delta \lambda^c = \frac{\langle \bar{\phi}^*, \mathbf{A}_p \bar{\phi}_p \rangle}{\langle \bar{\phi}^*, \mathbf{F}_p \bar{\phi}_p \rangle} - \lambda \frac{\langle \bar{\phi}^*, \mathbf{F}_p \bar{\phi}_p \rangle}{\langle \bar{\phi}^*, \mathbf{F}_p \bar{\phi}_p \rangle} = \frac{\langle \bar{\phi}^*, (\mathbf{A}_p - \lambda \mathbf{F}_p) \bar{\phi}_p \rangle}{\langle \bar{\phi}^*, \mathbf{F}_p \bar{\phi}_p \rangle}$$

En utilisant la relation $(\mathbf{A}^* - \lambda \mathbf{F}^*) \bar{\phi}^* = 0$, on obtient:

$$\delta \lambda^c = \frac{\langle \bar{\phi}^*, (\delta \mathbf{A} - \lambda \delta \mathbf{F}) \bar{\phi}_p \rangle}{\langle \bar{\phi}^*, \mathbf{F}_p \bar{\phi}_p \rangle} \quad (3.11)$$

Là encore, les formulations approximative (Eq. 3.2) et exacte (Eq. 3.11) sont identiques si on remplace le flux de l'état perturbé par le flux de référence dans la formule exacte.

- Réacteur critique, calcul de δG^e :

Pour le calcul de δG^e , nous nous limiterons au cas où seule la section efficace

du numérateur est susceptible de varier ($\delta\vec{\Sigma}_j = 0$)¹. Dans cette configuration l'équation (3.3) s'écrit:

$$\delta G = \frac{\langle \delta\vec{\Sigma}_i, \vec{\phi} \rangle}{\langle \vec{\Sigma}_j, \vec{\phi} \rangle} + \langle \vec{\Gamma}^* \cdot (\delta\lambda\mathbf{F}_p + \lambda\delta\mathbf{F} - \delta\mathbf{A}) \cdot \vec{\phi} \rangle \quad (3.12)$$

$$\delta G^e = \frac{\langle \vec{\Sigma}_{i,p}, \vec{\phi}_p \rangle}{\langle \vec{\Sigma}_j, \vec{\phi}_p \rangle} - \frac{\langle \vec{\Sigma}_i, \vec{\phi} \rangle}{\langle \vec{\Sigma}_j, \vec{\phi} \rangle} = \frac{\langle \delta\vec{\Sigma}_i, \vec{\phi}_p \rangle + \langle \vec{\Sigma}_i, \vec{\phi}_p \rangle - G \cdot \langle \vec{\Sigma}_j, \vec{\phi}_p \rangle}{\langle \vec{\Sigma}_j, \vec{\phi}_p \rangle}$$

On obtient:

$$\delta G^e = \frac{\langle \delta\vec{\Sigma}_i, \vec{\phi}_p \rangle}{\langle \vec{\Sigma}_j, \vec{\phi}_p \rangle} + \frac{\langle \vec{\Sigma}_j, \vec{\phi} \rangle}{\langle \vec{\Sigma}_j, \vec{\phi}_p \rangle} \langle \vec{S}^* \cdot \vec{\phi}_p \rangle$$

avec:

$$\vec{S}^* = \frac{\vec{\Sigma}_i}{\langle \vec{\Sigma}_j, \vec{\phi} \rangle} - G \cdot \frac{\vec{\Sigma}_j}{\langle \vec{\Sigma}_j, \vec{\phi} \rangle}$$

En combinant les relations:

$$\begin{aligned} (\mathbf{A}^* - \lambda\mathbf{F}^*) \cdot \vec{\Gamma}^* &= \vec{S}^* \\ (\mathbf{A} - \lambda\mathbf{F}) \cdot \vec{\phi}_p &= (\delta\lambda\mathbf{F}_p + \lambda\delta\mathbf{F} - \delta\mathbf{A}) \cdot \vec{\phi}_p \end{aligned}$$

on obtient:

$$\delta G^e = \frac{\langle \delta\vec{\Sigma}_i, \vec{\phi}_p \rangle}{\langle \vec{\Sigma}_j, \vec{\phi}_p \rangle} + \frac{\langle \vec{\Sigma}_j, \vec{\phi} \rangle}{\langle \vec{\Sigma}_j, \vec{\phi}_p \rangle} \langle \vec{\Gamma}^* \cdot (\delta\lambda\mathbf{F}_p + \lambda\delta\mathbf{F} - \delta\mathbf{A}) \cdot \vec{\phi}_p \rangle \quad (3.13)$$

Encore une fois, on retrouve la formulation approximative (Eq. 3.12) si on remplace le flux de l'état perturbé par le flux de référence dans la formule exacte.

¹Lorsque G est associée aux propriétés homogénéisées $\vec{\Sigma}_j$ est un vecteur constant (section 5.2).

CHAPITRE 4

CALCUL DU FLUX DIRECT ET DES PROPRIÉTÉS HOMOGÉNÉISÉES

Avant de pouvoir mettre en place la théorie des perturbations décrite dans le chapitre précédent, il faut être à même de calculer le flux, le flux adjoint, les sources adjointes généralisées ainsi que les flux adjoints généralisés. Dans ce chapitre, nous décrirons comment le code de calcul DRAGON (Marleau et al., 2000) nous permet de calculer le flux direct et les propriétés homogénéisées. Dans le chapitre suivant, nous calculerons les sources adjointes généralisées et nous proposerons une méthode pour calculer les flux adjoints et adjoints généralisés.

4.1 Résolution de l'équation de transport à l'aide du code de calcul DRAGON

Le code de calcul DRAGON permet de résoudre l'équation de transport après discrétisation en espace et en énergie. Il est basé sur la méthode des probabilités de première collision.

Les calculs types qui sont d'intérêt dans notre cas sont:

- Calcul de k_{eff} : évaluation du flux et du k_{eff} pour un réacteur critique.
- Calcul avec source: évaluation du flux pour un réacteur avec source.
- Calcul de fuite homogène: évaluation du flux, des coefficients de diffusion et du laplacien homogènes.

En transport neutronique, les calculs de cellule ont pour but principal la production de sections efficaces et de coefficients de diffusion homogénéisés et condensés en énergie (sections 4.3 et 4.4). Pour un CANDU, la cellule comprend la description détaillée d'une grappe de combustible, des tubes de force et de calandre et du modérateur. À chaque zone est associé un mélange représentatif de la composition isotopique locale de la cellule. Les sections efficaces microscopiques associées à chacun des isotopes sont fournies par les bibliothèques de sections efficaces multigroupes (typiquement 50 à 100 groupes). La résolution de l'équation de transport permet alors de déterminer le flux de neutrons multigroupe sur la cellule pour en déduire les propriétés homogénéisées et condensées. En répétant ce calcul sur les différentes cellules représentatives du réacteur, les propriétés homogénéisées et condensées sont connues sur l'ensemble du réacteur. L'équation de diffusion traite le coeur dans son ensemble et utilise les données issues des calculs de cellule. Elle permet de déterminer le flux de neutrons (le plus souvent à deux groupes) en tout point du réacteur. De la connaissance de ce flux, on peut déduire diverses caractéristiques neutroniques telles que les puissances de chacune des grappes ou la réactivité.

Les principales étapes d'un calcul de cellule à l'aide du code DRAGON sont:

- Définition d'une géométrie représentative des caractéristiques (nature et positionnement des matériaux) de la cellule étudiée.
- Génération d'une bibliothèque de sections efficaces macroscopiques multigroupes à partir des données propres à la géométrie de la cellule et de bibliothèques de section efficaces microscopiques.
- Prise en compte des effets d'interférences entre les résonances des sections efficaces des éléments lourds par un calcul d'auto-protection.

- Calcul de la matrice des probabilités de collision.
- Calcul du flux par un processus itératif avec accélération de convergence.
- Calcul des propriétés homogénéisées.

4.2 Calcul du flux et du k_{eff} à l'aide du code DRAGON

Cette présentation est directement inspirée du cours de Marleau (Marleau, 1998).
Le code DRAGON permet le calcul du flux sous la forme (Eq. 1.14):

$$\vec{\phi} = \mathbf{P}_{VV} \cdot \mathbf{R} \cdot \vec{\phi} + \mathbf{P}_{VV} \cdot \vec{Q}_e$$

Cette équation peut se réécrire:

$$\vec{\phi} = \mathbf{W} \cdot (\mathbf{L} + \mathbf{U} + \chi\nu\Sigma_f^T) \cdot \vec{\phi} + \mathbf{W} \cdot \vec{Q}_e \quad (4.1)$$

\mathbf{W} est une matrice diagonale par blocs, constituée de G blocs avec:

$$\mathbf{W}^g = (\mathbf{I} - \mathbf{P}_{VV}^g \cdot \mathbf{D})^{-1} \cdot \mathbf{P}_{VV}^g$$

La matrice Σ_s se décompose comme suit: $\Sigma_s = \mathbf{D} + \mathbf{U} + \mathbf{L}$. la matrice $\mathbf{D} = \Sigma_s^{g \leftarrow g}$ est diagonale, tandis que les matrices \mathbf{U} et \mathbf{L} sont respectivement triangulaire supérieure et triangulaire inférieure au sens strict:

$$\mathbf{U} = \begin{cases} \Sigma_s^{g \leftarrow h} & \text{si } h > g \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad \text{et } \mathbf{L} = \begin{cases} \Sigma_s^{g \leftarrow h} & \text{si } h < g \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Dans le cas particulier d'un milieu non fissile, $\Sigma_f = 0$, sans remontée de neutrons¹, $\mathbf{U} = 0$, et en présence d'une source fixe, cette équation se résout directement.

De manière générale, nous considérons deux types d'itérations:

- Les itérations externes (ou itérations de puissance) permettent d'évaluer les sources de fission et le k_{eff} si le réacteur est critique.
- Les itérations internes (itérations multigroupes) permettent de prendre en compte la remontée de neutrons.

4.2.1 Itérations externes

En l'absence de fuites et dans le cas critique l'équation (4.1) s'écrit alors:

$$\vec{\phi} = \mathbf{W} \cdot (\mathbf{L} + \mathbf{U}) \cdot \vec{\phi} + \mathbf{W} \cdot \vec{Q}_f$$

avec:

$$\vec{Q}_f = \frac{\chi \nu \Sigma_f^T}{k_{eff}} \cdot \vec{\phi}$$

Les itérations externes (Fig. 4.1) permettent, pour un estimé du flux $\vec{\phi}(l)$ et du $k_{eff}(l)$ donnés, d'évaluer le terme source $\vec{Q}_f(l)$.

Initialisation du processus ($l = 0$):

1. Flux: $\vec{\phi}(0)$ est choisi plat.
2. k_{eff} : $k_{eff}(0) = 1$.

¹Par remontée de neutrons, on entend la diffusion des groupes de basse énergie vers des groupes de plus haute énergie ou *up-scattering*.

3. Source: $\vec{Q}_f(0) = \chi \nu \Sigma_f^T \cdot \vec{\phi}(0)$.
4. Réinitialisation du flux: $\vec{\phi}(0) = \vec{0}$.

Si le terme source $\vec{Q}_f(l-1)$ est connu, il est possible d'évaluer le flux $\vec{\phi}(l)$ à l'aide des itérations internes, en résolvant l'équation:

$$\vec{\phi}(l) = \mathbf{W} \cdot (\mathbf{L} + \mathbf{U}) \cdot \vec{\phi}(l) + \mathbf{W} \cdot \vec{Q}_f(l-1)$$

Une fois $\vec{\phi}(l)$ déterminé, on calculera $k_{eff}(l)$ et $\vec{Q}_f(l)$ à l'aide des relations:

$$k_{eff}(l) = \sum_{g=1}^G \sum_{i=1}^N V_i \chi_i^g \sum_{h=1}^G \nu^{\Sigma_{f,i}^h} \phi_i^h(l) \quad \text{et} \quad Q_{f,i}^g(l) = \frac{\chi_i^g}{k_{eff}(l)} \sum_{h=1}^G \nu^{\Sigma_{f,i}^h} \phi_i^h(l)$$

À chaque itération, nous renormaliserons les flux de façon à avoir:

$$\sum_{g=1}^G \sum_{i=1}^N V_i Q_{f,i}^g(l) = 1$$

Il ne reste plus qu'à réitérer le processus jusqu'à satisfaire les critères de convergence sur le k_{eff} (ξ_k) et sur le flux (ξ_ϕ) en vérifiant: $\varepsilon_k \leq \xi_k$ et $\varepsilon_\phi \leq \xi_\phi$.

Avec:

$$\varepsilon_k = \frac{|k_{eff}(l) - k_{eff}(l-1)|}{k_{eff}(l)} \quad \text{et} \quad \varepsilon_\phi = \max_g \left\{ \frac{\max_i |\phi_i^g(l) - \phi_i^g(l-1)|}{\max_i |\phi_i^g(l)|} \right\} \quad (4.2)$$

À l'externe, la norme considérée pour définir le critère de convergence sur le flux est la norme infinie.

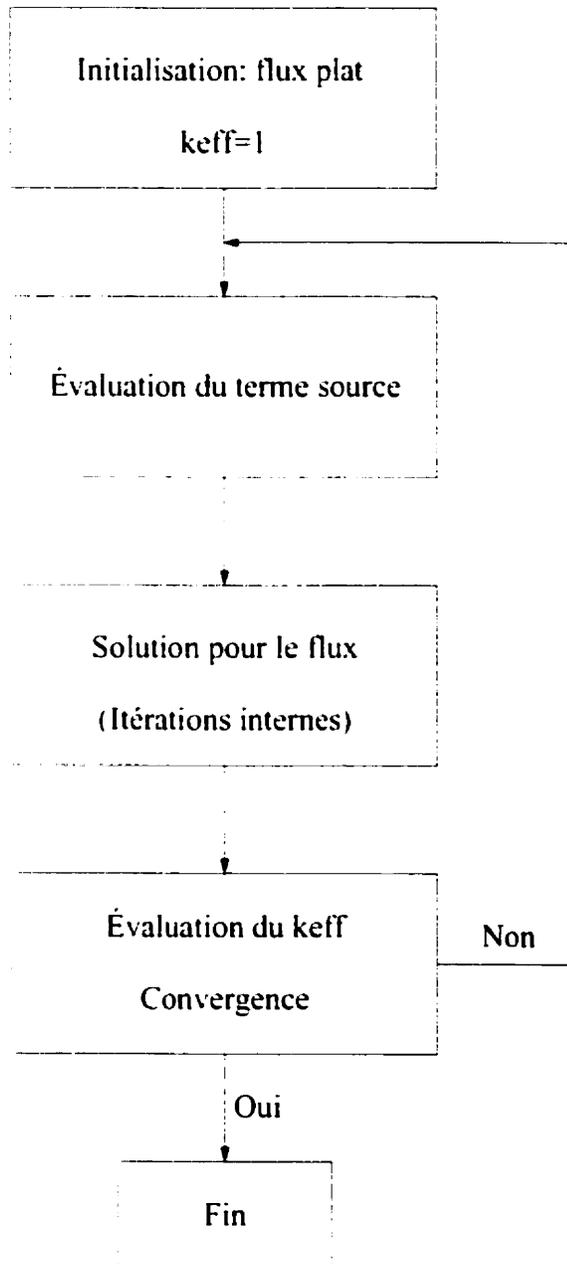


Figure 4.1 Itérations externes

Prise en compte d'une source fixe

En présence d'une source fixe \vec{Q}_e , l'algorithme précédent est légèrement simplifié. On ajoutera le terme de source à la source de fission et on fixera $k_{eff} = 1$. Le flux n'étant plus défini à une constante multiplicative près, le processus sera initialisé avec un flux nul et ne sera pas renormalisé.

4.2.2 Itérations internes

Considérons le cas où $\mathbf{U} = 0$. l'équation à résoudre, à l'itération externe l , s'écrit alors:

$$\vec{\phi}(l) = \mathbf{W} \cdot \mathbf{L} \cdot \vec{\phi}(l) + \vec{Q}_f(l-1)$$

ce qui revient à:

$$\vec{\phi}^g(l) = \mathbf{W}^g \cdot \left(\sum_{h < g} \sum_s^{g \leftarrow h} \vec{\phi}^h(l) + \vec{Q}_f^g(l-1) \right)$$

avec:

- $\vec{\phi}^g(l)$: flux du groupe g à l'itération externe l .
- $\vec{Q}_f^g(l-1)$: source de fission à l'itération externe $l-1$.

On pourra déterminer, sans itération, $\vec{\phi}(l)$ en procédant groupe par groupe:

$$\begin{aligned}\vec{\phi}^1(l) &= \mathbf{W}^1 \cdot \vec{Q}_f^1(l-1) \\ \vec{\phi}^2(l) &= \mathbf{W}^2 \cdot \left(\Sigma_s^{2 \leftarrow 1} \vec{\phi}^1(l) + \vec{Q}_f^2(l-1) \right) \\ &\vdots \\ \vec{\phi}^G(l) &= \mathbf{W}^G \cdot \left(\sum_{h < G} \Sigma_s^{G \leftarrow h} \vec{\phi}^h(l) + \vec{Q}_f^G(l-1) \right)\end{aligned}$$

$\vec{\phi}(l)$ étant connu, nous pouvons évaluer $\vec{Q}_f(l)$ (itération externe) et itérer jusqu'à converger sur le k_{eff} et le flux avec des critères définis précédemment.

Si on considère le cas plus général où la remontée de neutrons doit être prise en compte, l'équation à résoudre prend la forme:

$$\vec{\phi} = \mathbf{W} \cdot (\mathbf{L} + \mathbf{U}) \cdot \vec{\phi} + \mathbf{W} \cdot \vec{Q}_f \quad (4.3)$$

Lorsque le nombre de groupes est élevé, on observe que la remontée de neutrons ne concerne que les groupes de basse énergie ($UPS \leq g \leq G$). On ne fera donc pas d'itérations internes sur les premiers groupes qui sont déjà convergés comme le montre la figure (4.2).

À l'itération externe l , l'équation précédente s'écrit pour les groupes avec remontée de neutrons:

$$\vec{\phi}(l) = \mathbf{W} \cdot \left(\mathbf{L} \cdot \vec{\phi}(l) + \mathbf{U} \cdot \vec{\phi}(l) + \vec{Q}_f(l-1) \right)$$

ce qui naturellement se résout à l'aide d'une méthode itérative de type Gauss-Seidel (Press et al., 1986):

$$\vec{\phi}(l, n) = \mathbf{W} \cdot \mathbf{L} \cdot \vec{\phi}(l, n) + \mathbf{W} \cdot \mathbf{U} \cdot \vec{\phi}(l, n-1) + \mathbf{W} \cdot \vec{Q}_f(l-1) \quad (4.4)$$

Sous cette notation, l'indice l qui est associé aux itérations externes est fixé. On notera que la résolution se fait par groupes et que le terme $\mathbf{W} \cdot \mathbf{U} \cdot \vec{\phi}(l, n - 1)$ est mis à jour dès que possible. Après avoir convergé à l'interne, le flux $\vec{\phi}(l, n)$ est alors déterminé. La norme considérée pour définir le critère de convergence à l'interne est également la norme infinie, soit:

$$\varepsilon_{\phi} = \frac{\max_i |\phi_i^g(l, n) - \phi_i^g(l, n - 1)|}{\max_i |\phi_i^g(l, n)|} \leq \xi_{\phi} \quad (4.5)$$

Cependant, on impose de satisfaire le critère de convergence pour deux itérations successives avant de considérer un groupe g donné, convergé.

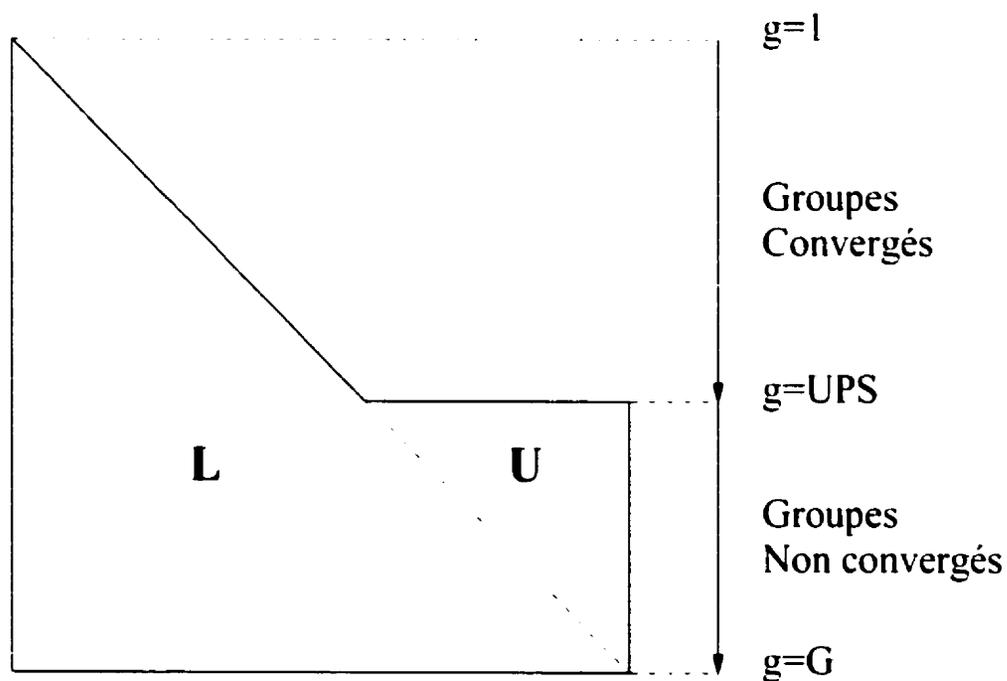


Figure 4.2 Structure de la matrice de diffusion: cas direct

On applique ensuite: $\vec{\phi}(l) = \vec{\phi}(l, n)$ pour évaluer $k_{eff}(l)$ et $\vec{Q}_f(l)$ jusqu'à converger à l'externe. L'algorithme des itérations internes tient compte de la structure de la matrice de diffusion et des méthodes d'accélération (Fig. 4.3).

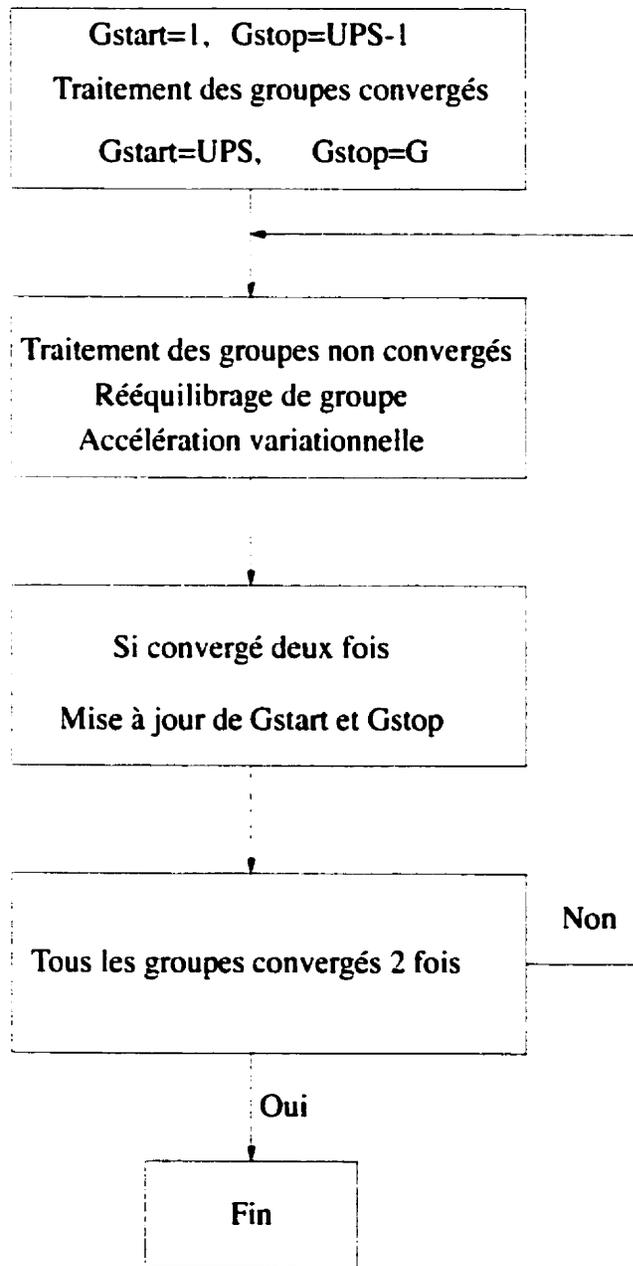


Figure 4.3 Itérations internes: cas direct

4.2.3 Méthodes d'accélération

Afin de réduire le nombre d'itérations internes, deux méthodes d'accélération ont été mises en place: le rééquilibrage multigroupe et l'accélération variationnelle (Stamm'ler et Abbate, 1983; Hébert, 1985; Marleau, 1998; Roy, 1998b). Les deux méthodes que nous allons décrire permettent d'accélérer la convergence à l'interne. Le rééquilibrage multigroupe aura un effet dans le domaine énergétique, tandis que l'accélération variationnelle sera d'autant plus efficace que le nombre de régions est élevé.

Rééquilibrage multigroupe

Si on considère l'équation (4.3):

$$\vec{\phi} = \mathbf{W} \cdot (\mathbf{L} + \mathbf{U}) \cdot \vec{\phi} + \mathbf{W} \cdot \vec{Q}_f$$

En l'absence de fuites et en intégrant cette équation sur l'espace, on obtient:

$$\sum_{i=1}^N \Sigma_i^g V_i \phi_i^g = \sum_{i=1}^N V_i \left(\sum_{h=1}^G \Sigma_i^{g \leftarrow h} \phi_i^h + Q_{f,i}^g \right) \quad (4.6)$$

Physiquement, cette équation n'exprime rien d'autre que la conservation des taux de réaction. Dans la pratique, cette relation n'est pas forcément satisfaite à chaque itération interne. Pour assurer la conservation des taux de réaction, il est possible de modifier les flux en définissant pour chaque groupe:

$$\tilde{\phi}_i^g = \alpha^g \phi_i^g$$

de sorte que l'équation (4.6) soit vérifiée pour $\vec{\phi}_i^g$. On obtient alors un système linéaire du type:

$$\sum_{h=1}^G B^{gh} \alpha^h = Q^g$$

avec:

$$B^{gh} = \sum_{i=1}^N V_i (\Sigma_i^h \delta_{gh} - \Sigma_i^{g \leftarrow h}) \phi_i^h$$

$$Q^g = \sum_{i=1}^N V_i Q_{f,i}^g$$

où δ_{gh} vérifie: $\delta_{gh} = 1$ si $g = h$, $\delta_{gh} = 0$ sinon.

Cette méthode permet en général d'accélérer la remontée des neutrons, et de diminuer le nombre d'itérations internes. Dans le cas où des fuites sont prises en compte, la méthode reste la même mais le système linéaire à résoudre tient compte de ces fuites.

Accélération variationnelle

Si on considère l'équation (4.4) sous une forme simplifiée, on se ramène à un schéma itératif du type:

$$\vec{\phi}(n) = \mathbf{W} \cdot \mathbf{L} \cdot \vec{\phi}(n) + \mathbf{W} \cdot \mathbf{U} \cdot \vec{\phi}(n-1) + \mathbf{W} \cdot \vec{Q}_f$$

Le schéma Gauss-Seidel peut être amélioré par une méthode de sur-relaxation qui minimise le résidu $\vec{R}(n)$ défini par $\vec{R}(n) = \vec{\phi}(n) - \vec{\phi}(n-1)$

Une fois $\vec{\sigma}(n)$ calculé, on effectuera la correction $\vec{\sigma}(n) \rightarrow \vec{\sigma}_c(n)$:

$$\vec{\sigma}_c(n) = \vec{\sigma}(n) + \mu_n \vec{R}(n) \quad (4.7)$$

On calculera μ_n dynamiquement (Marleau, 1998) de façon à minimiser le résidu R_{n+1} à l'itération suivante.

4.3 Calcul de fuite homogène

En l'absence de source fixe, l'équation de transport se met sous la forme (Eq. 1.13):

$$\vec{\sigma} = \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \mathbf{R}_\lambda \cdot \vec{\sigma}$$

La valeur propre $\lambda = 1/k_{eff}$ permet d'équilibrer cette équation. Une autre approche consiste à imposer $k_{eff} = 1$, et à balancer l'équation en introduisant un terme de fuite $\vec{d}B^2$. Ici B^2 est la valeur propre de l'équation, aussi appelé laplacien, et \vec{d} est le coefficient de fuite identifié, après homogénéisation, au coefficient de diffusion. Dans cette configuration, le terme de fuite s'ajoute à la section efficace totale. De ce fait, il affecte la matrice des probabilités de collision. L'équation à résoudre devient alors:

$$\vec{\sigma} = \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}(\vec{\Sigma} + \vec{d}B^2) \cdot \mathbf{R} \cdot \vec{\sigma} \quad (4.8)$$

4.3.1 Calcul du laplacien et du coefficient de fuite homogènes

Dans ce cas, \vec{d} est un vecteur indépendant de l'espace, défini pour chacun des groupes d'énergie (Bussac et Reuss, 1985; Petrovic et Benoist, 1996).

Dans le cas B_0 , le terme de fuite sera défini par une relation du type:

$$d_0^g(B) = \frac{1}{B} \left(\frac{1 - \frac{\Sigma^g}{B} \tan^{-1} \frac{B}{\Sigma^g}}{\tan^{-1} \frac{B}{\Sigma^g}} \right)$$

Ici, le terme Σ^g représente la section efficace totale homogénéisée sur l'espace, elle dépend donc du flux.

Dans le cas B_1 , le terme de fuite prendra en compte l'anisotropie de la section efficace de diffusion, au premier ordre:

$$d_1^g(B) = d_0^g(B) \left(1 + \sum_{g'} \frac{\Sigma_{s,1}^{g \leftarrow g'} \phi^{g'}}{\phi^g} d_1^{g'}(B) \right)$$

Les termes $\Sigma_{s,1}^{g \leftarrow g'}$ et $\phi^{g'}$ sont homogénéisés sur l'espace, la dépendance par rapport au flux est ici explicite. Le processus de résolution étant itératif, cela induit de nombreux calculs de la matrice $\mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}$ qui dépend du terme de fuite (Eq. 4.8):

$$\mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} = \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}(\vec{\Sigma} + \vec{d}B^2)$$

4.3.2 Prise en compte du terme de fuite

Afin d'accélérer la méthode, deux approximations permettant de conserver la matrice $\mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}$ sont couramment utilisées (Hébert et Benoist, 1991):

- Méthode SIGMA: il s'agit ici de considérer que le terme de fuite est équivalent à une source négative. Cela se traduit par l'équation:

$$\vec{\phi} = \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot (\mathbf{R} - \vec{d} \cdot B^2) \cdot \vec{\phi}$$

Cette méthode, par analogie avec la correction de transport (section 1.1.2),

fait l'hypothèse que la contribution du terme fondamental est très supérieure à la contribution des termes d'ordre plus élevé dans le développement en harmoniques sphériques du flux, soit:

$$(\Sigma^g + d^g B^2) \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{m=l} \xi_l^{g,m} Y_m^l(\vec{\Omega}) \gg d^g B^2 \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^{m=l} \psi_l^{g,m} Y_m^l(\vec{\Omega}) \quad (4.9)$$

Cela se justifie lorsque le terme de fuite est plus faible que la section efficace totale et que les termes de flux d'ordre supérieurs sont négligeables.

- Méthode PNL: dans ce cas, on écrit la matrice des probabilités de collision sous la forme:

$$\mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}(\vec{\Sigma} + \vec{d}B^2) = \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}(\vec{\Sigma}) \cdot \mathbf{P}_{NL}(\vec{\Sigma}, \vec{d}B^2)$$

Cela nous donne:

$$\vec{\phi} = \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \mathbf{P}_{NL} \cdot \mathbf{R} \cdot \vec{\phi}$$

\mathbf{P}_{NL} est une matrice diagonale de probabilité de non fuite et se calcule par groupe, on a:

$$\mathbf{P}_{NL}^g(\Sigma^g, d^g B^2) = \frac{\sum_{i=1}^N V_i \Sigma_i^g \phi_i^g}{\sum_{i=1}^N V_i (\Sigma_i^g + d^g B^2) \phi_i^g}$$

4.4 Calcul des propriétés homogénéisées

Un des principaux objectifs des calculs de cellule est de générer des sections efficaces homogénéisées à peu de groupes (typiquement 2 à 6) et peu de régions (en général une seule pour les cellules CANDU). Ces propriétés homogénéisées sont calculées à partir des sections efficaces macroscopiques (une centaine de groupes d'énergie),

de la géométrie considérée (entre 10 et 1000 régions) et du flux calculé avec ces données. La théorie des perturbations décrite au chapitre (3) permet d'évaluer la variation de taux de réactions pour un réacteur avec source ou de rapport de taux de réaction pour un réacteur critique. Nous allons donc présenter les propriétés homogénéisées sous la forme de ratio de taux de réaction.

Le flux est un vecteur de dimension $N \times G$ où N correspond au nombre de régions et G au nombre de groupes d'énergie. Le processus d'homogénéisation va nous faire passer d'une discrétisation $N \times G$ à une discrétisation $M \times K$, M étant le nombre de régions homogénéisées et K le nombre de groupe condensés.

Le vecteur $\vec{\phi}$: ϕ_i^g , $1 \leq g \leq G$ et $1 \leq i \leq N$ représente le micro-flux.

$$\vec{\phi} = [\phi_1^1 \dots \phi_N^1, \dots, \phi_1^G \dots \phi_N^G]^T$$

Le vecteur $\vec{\phi}_H$: $\phi_{H,m}^k$, $1 \leq k \leq K$ et $1 \leq m \leq M$ représente le macro-flux.

$$\vec{\phi}_H = [\phi_{H,1}^1 \dots \phi_{H,M}^1, \dots, \phi_{H,1}^K \dots \phi_{H,M}^K]^T$$

À chaque indice k , correspond un ensemble d'indices g : G_k .

À chaque indice m , correspond un ensemble d'indices i : N_m .

Les relations de conservation sont:

$$G = \bigoplus_{k=1}^K G_k \text{ et } N = \bigoplus_{m=1}^M N_m$$

Ces définitions vont nous permettre de calculer les différentes sections efficaces homogénéisées.

4.4.1 Homogénéisation standard

Les propriétés homogénéisées et/ou condensées sont définies de façon à conserver les taux de réaction.

- Homogénéisation des volumes:

On a naturellement:

$$V_{H,m} = \sum_{i \in N_m} V_i \text{ avec } 1 \leq m \leq M$$

- Homogénéisation des flux:

On a l'égalité:

$$V_{H,m} \phi_{H,m}^k = \sum_{g \in G_k} \sum_{i \in N_m} V_i \phi_i^g$$

Cela peut se réécrire sous la forme d'un produit scalaire:

$$\phi_{H,m}^k = \frac{1}{V_{H,m}} \langle \mathbf{I}_m^k \cdot \bar{\Gamma} \cdot \vec{\phi} \rangle$$

avec pour convention:

- $\bar{\Gamma}$ est un vecteur de dimension $N \times G$ dont les coordonnées sont égales à 1.
- \mathbf{I}_m^k est une matrice diagonale où: $\mathbf{I}_m^k(g, i) = 1$ si $g \in G_k$ et $i \in N_m$ et 0 sinon.
- Homogénéisation de la section efficace totale:

Le vecteur $\vec{\Sigma}: \Sigma_i^g, 1 \leq g \leq G$ et $1 \leq i \leq N$ représente la micro-section efficace.

Le vecteur $\vec{\Sigma}_H: \Sigma_{H,m}^k, 1 \leq k \leq K$ et $1 \leq m \leq M$ représente la macro-section efficace.

$\vec{\Sigma}$ et $\vec{\Sigma}_H$ se décomposent de la même façon que le micro et le macro-flux.

On aura:

$$\Sigma_{H,m}^k V_{H,m} \phi_{H,m}^k = \sum_{g \in G_k} \sum_{i \in N_m} \Sigma_i^g V_i \phi_i^g$$

Ce qui s'écrit:

$$\Sigma_{H,m}^k = \frac{1}{V_{H,m} \phi_{H,m}^k} \langle \mathbf{I}_m^k \cdot \vec{\Sigma} \cdot \vec{\phi} \rangle = \frac{\langle \mathbf{I}_m^k \cdot \vec{\Sigma} \cdot \vec{\phi} \rangle}{\langle \mathbf{I}_m^k \cdot \vec{1} \cdot \vec{\phi} \rangle} \quad (4.10)$$

- Homogénéisation de la correction de transport:

La correction de transport vient *corriger* la section efficace totale de façon à prendre en compte l'effet d'anisotropie linéaire de la section efficace de diffusion (section 1.1.2). Dans la pratique, la correction de transport est analogue à une section efficace que l'on ajouterait à la section efficace totale et au terme diagonal de la section efficace de diffusion. L'homogénéisation de la correction de transport se fera donc de la même façon que celle de la section efficace totale.

- Homogénéisation de matrice de diffusion:

On aura:

$$\Sigma_{H,s,m}^{k \leftarrow l} V_{H,m} \phi_{H,m}^l = \sum_{g \in G_k} \sum_{h \in G_l} \sum_{i \in N_m} \Sigma_{s,i}^{g \leftarrow h} V_i \phi_i^h$$

En définissant le vecteur $\vec{\Sigma}_s^g$ qui correspond à la section de diffusion dans le groupe g depuis tous les autres groupes, soit:

$$\vec{\Sigma}_s^g = \left[\Sigma_{s,1}^{g \leftarrow 1} \dots \Sigma_{s,N}^{g \leftarrow 1} \dots \Sigma_{s,1}^{g \leftarrow G} \dots \Sigma_{s,N}^{g \leftarrow G} \right]^T$$

la section efficace de diffusion homogénéisée s'écrit:

$$\Sigma_{H,s,m}^{k \leftarrow l} = \sum_{g \in G_k} \frac{\langle \mathbf{I}_m^l \cdot \vec{\Sigma}_s^g \cdot \vec{\phi} \rangle}{\langle \mathbf{I}_m^k \cdot \vec{1} \cdot \vec{\phi} \rangle}$$

- Homogénéisation de section efficace de fission:

On aura:

$$\nu^{\Sigma_{f,H,m}^k} V_{H,m} \phi_{H,m}^k = \sum_{g \in G_k} \sum_{i \in N_m} \nu^{\Sigma_{f,i}^g} V_i \phi_i^g$$

Selon la convention de la section (1.2.3), la section efficace de fission a la structure d'une matrice, on pourra lui associer un vecteur $\nu^{\vec{\Sigma}_f}$ qui prendra la forme:

$$\nu^{\vec{\Sigma}_f} = [\nu^{\Sigma_{f,1}^1} \dots \nu^{\Sigma_{f,N}^1} \dots \nu^{\Sigma_{f,1}^G} \dots \nu^{\Sigma_{f,N}^G}]^T$$

Après quoi on procédera à l'homogénéisation comme pour une section efficace standard, ce qui s'écrit:

$$\nu^{\Sigma_{f,H,m}^k} = \frac{\langle \mathbf{I}_m^k \cdot \nu^{\vec{\Sigma}_f} \cdot \vec{\phi} \rangle}{\langle \mathbf{I}_m^k \cdot \vec{1} \cdot \vec{\phi} \rangle}$$

Si on a plusieurs isotopes fissiles, le vecteur $\vec{\Sigma}_f$ contiendra la somme de chacune de sections efficaces:

$$\vec{\Sigma}_f = \sum_{l=1}^{N_f} \vec{\Sigma}_f^l$$

- Homogénéisation du spectre de fission:

En toute généralité, le spectre de fission est homogénéisé de la façon suivante:

$$\chi_{H,m}^k V_{H,m} \sum_{l=1}^{N_f} \sum_{h=1}^K \nu^{\Sigma_{f,H,m}^{h,l}} \phi_{H,m}^h = \sum_{i \in N_m} V_i \sum_{l=1}^{N_f} \sum_{g \in G_k} \chi_i^{g,l} \sum_{h=1}^G \nu^{\Sigma_{f,i}^{h,l}} \phi_i^h$$

Cela peut également s'écrire:

$$\chi_{H,m}^k = \frac{\left\langle \mathbf{I}_m^k \cdot \vec{1} \cdot \sum_{l=1}^{N_f} \chi^l \cdot \nu^{\Sigma_f^l T} \cdot \vec{\phi} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{I}_m^k \cdot \vec{1} \cdot \sum_{l=1}^{N_f} \nu^{\Sigma_f^l T} \cdot \vec{\phi} \right\rangle}$$

On suppose généralement que le spectre est identique pour chacun des isotopes fissiles (Macfarlane, 1992). Dans ce cas, il peut être factorisé dans la relation précédente et ne dépend plus de la forme du flux, ce qui donne:

$$\chi_H^k = \sum_{g \in G_k} \chi^g$$

Dans ce qui suit, pour ne pas alourdir la notation, nous n'utiliserons pas l'indice H .

4.4.2 Homogénéisation à l'aide du flux adjoint

Dans le cadre de la cinétique des réacteurs, l'homogénéisation se fait parfois à l'aide de fonctionnelles bilinéaires (Kim et Henry, 1989; Lee et al., 2000). La technique proposée revient à *symétriser* les formules dérivées précédemment en pondérant les taux de réaction par le flux adjoint. La méthode d'homogénéisation linéaire décrite précédemment conserve le k_{eff} et les taux de réaction pour la cellule. Tandis que la méthode d'homogénéisation bilinéaire conserve les paramètres de cinétique, mais pas les taux de réaction. Cette technique n'étant pas fréquemment utilisée, elle n'a pas été implantée dans le code DRAGON.

CHAPITRE 5

CALCUL DES FLUX ADJOINTS, DES SOURCES ET DES FLUX ADJOINTS GÉNÉRALISÉS

5.1 Calcul du flux adjoint

L'équation intégrale adjointe s'écrit sous sa forme matricielle (Eq. 2.3):

$$\vec{\phi}^* = \mathbf{R}_\lambda^T \cdot \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \vec{\phi}^*$$

Compte tenu de la structure matricielle de l'équation à résoudre, l'implantation du calcul du flux adjoint requiert des lourdes modifications dans le code DRAGON. Afin de simplifier les calculs, nous allons définir un flux pseudo-adjoint qui nécessitera un minimum de modifications dans le code pour être calculé (Courau et Marleau, 2000). Nous présenterons une relation simple qui permettra de passer du flux pseudo-adjoint au flux adjoint.

5.1.1 Réacteur critique: flux pseudo-adjoint

Pour un réacteur critique, les équations sur les flux directs et adjoints sont les suivantes (Eqs. 1.13, 2.3):

$$\begin{aligned}\vec{\phi} &= \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \mathbf{R}_\lambda \cdot \vec{\phi} \\ \vec{\phi}^* &= \mathbf{R}_\lambda^T \cdot \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \vec{\phi}^*\end{aligned}$$

En prémultipliant l'équation adjointe par la matrice des probabilités de collision $\mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}$, on obtient:

$$\mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \vec{\phi}^* = \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \mathbf{R}_{\lambda}^T \cdot \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \vec{\phi}^*$$

Si on définit $\vec{\phi}^+ = \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \vec{\phi}^*$, cette équation se ramène à:

$$\vec{\phi}^+ = \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \mathbf{R}_{\lambda}^T \cdot \vec{\phi}^+ \quad (5.1)$$

En remplaçant $\mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \vec{\phi}^*$ par $\vec{\phi}^+$ dans l'équation adjointe, on obtient:

$$\vec{\phi}^* = \mathbf{R}_{\lambda}^T \cdot \vec{\phi}^+ \quad (5.2)$$

L'équation pseudo-adjointe (Eq. 5.1) présente de fortes similarités avec l'équation sur le flux direct.

Les principales modifications à apporter au code seront donc:

- Transposer en énergie la matrice $\mathbf{R} = \Sigma_s + \chi \cdot \nu \Sigma_f^T$ qui est diagonale en espace. Cela revient à transposer la matrice des sections efficaces de diffusion Σ_s et à permuter les matrices χ et $\nu \Sigma_f$.
- La transposition de la matrice Σ_s implique l'inversion de l'ordre des itérations dans le calcul des flux de groupe. Pour le calcul du flux direct, on convergeait sur le flux en partant du flux de groupe associé au groupe 1 jusqu'au groupe G . En écrivant Σ_s sous la forme $\Sigma_s = \mathbf{D} + \mathbf{L} + \mathbf{U}$, on remarque que Σ_s^T se décomposera de façon analogue avec $\mathbf{L}^T \equiv \mathbf{U}$ et $\mathbf{U}^T \equiv \mathbf{L}$. On procédera dans l'ordre inverse, pour le flux pseudo-adjoint. Les itérations internes seront effectuées sur les groupes thermiques avec remontée de neutrons. Une fois que l'on aura convergé en remontant sur ces groupes, il n'y aura pas d'itérations

internes à effectuer sur les groupes suivants (groupes rapides).

- Les méthodes d'accélération variationnelle et de rééquilibrage de groupe ont été également modifiées de façon à conserver leur efficacité dans le cas adjoint.

Les figures (5.1) et (5.2) présentent la structure de la matrice de diffusion adjointe et l'algorithme des itérations internes dans le cas adjoint.

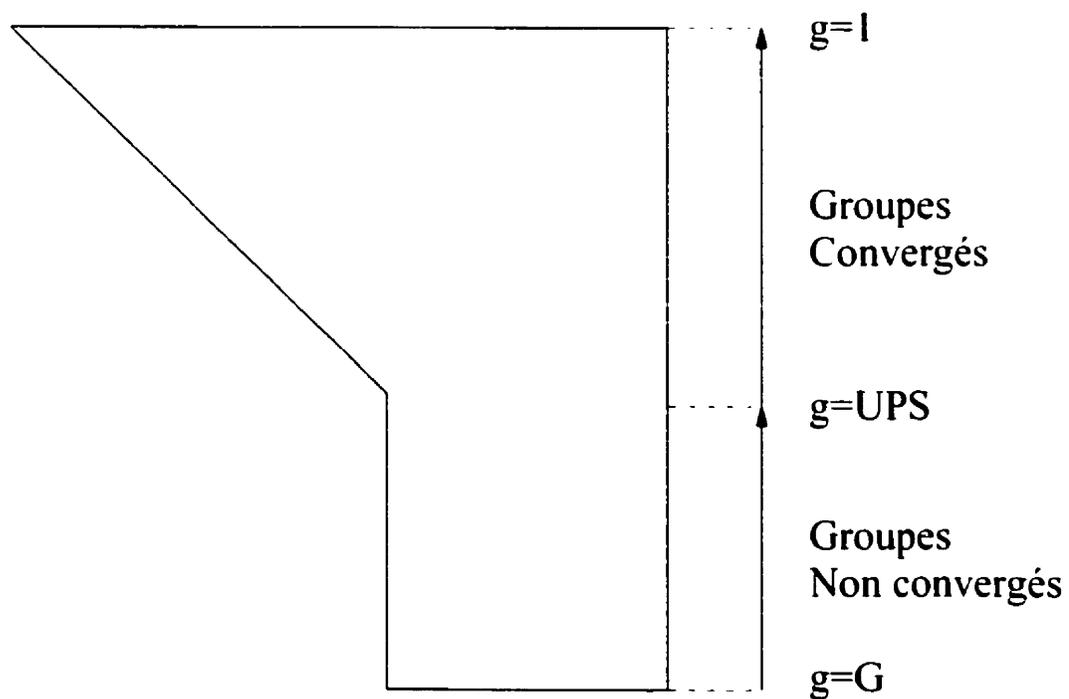


Figure 5.1 Structure de la matrice de diffusion: cas adjoint

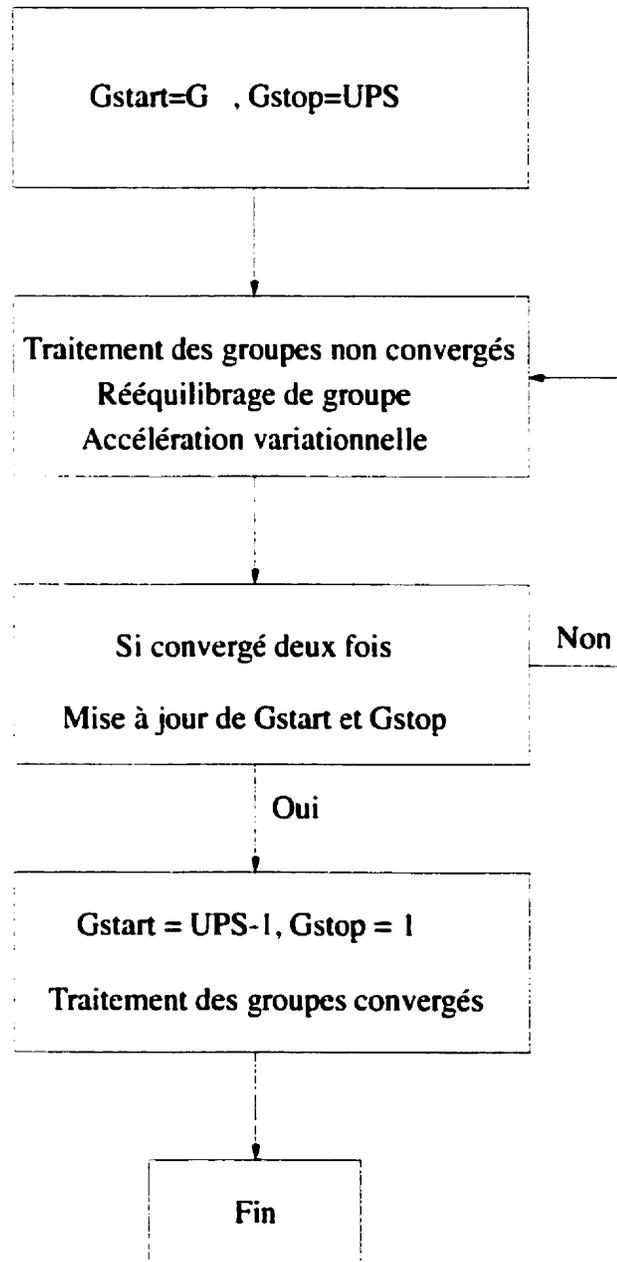


Figure 5.2 Itérations internes: cas adjoint

5.1.2 Réacteur avec source: flux pseudo-adjoint

Pour un réacteur avec source, les équations sur les flux directs et adjoints sont les suivantes (Eqs. 1.14, 2.4):

$$\begin{aligned}\vec{\phi} &= \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \mathbf{R} \cdot \vec{\phi} + \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \vec{Q}_e \\ \vec{\phi}^* &= \mathbf{R}^T \cdot \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \vec{\phi}^* + \vec{S}^*\end{aligned}$$

En définissant le flux pseudo-adjoint $\vec{\phi}^\dagger = \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \vec{\phi}^*$, on obtient:

$$\vec{\phi}^\dagger = \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \mathbf{R}^T \cdot \vec{\phi}^\dagger + \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \vec{S}^* \quad (5.3)$$

En remplaçant $\mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \vec{\phi}^*$ par $\vec{\phi}^\dagger$ dans l'équation adjointe, on obtient:

$$\vec{\phi}^* = \mathbf{R}^T \cdot \vec{\phi}^\dagger + \vec{S}^* \quad (5.4)$$

Sous cette forme, une fois la matrice \mathbf{R} transposée, le calcul du flux pseudo-adjoint sera très similaire à celui du flux direct en présence d'une source fixe.

5.2 Sources adjointes généralisées

Le calcul des sources adjointes généralisées se fait par *dérivation* par rapport au flux de la fonctionnelle considérée: ratio de taux réaction (Stacey, Jr., 1974). À chaque fonctionnelle correspond une source adjointe généralisée qui est le gradient de la fonctionnelle par rapport au flux. Le flux adjoint généralisé sera calculé à partir de la source adjointe et sera donc associé à la fonctionnelle considérée. On a vu

(section 3.4) que pour:

$$G = \frac{\langle \vec{\Sigma}_i, \vec{\phi} \rangle}{\langle \vec{\Sigma}_j, \vec{\phi} \rangle} \quad \text{on choisira} \quad \vec{S}^* = \frac{\vec{\Sigma}_i}{\langle \vec{\Sigma}_j, \vec{\phi} \rangle} - G \frac{\vec{\Sigma}_j}{\langle \vec{\Sigma}_j, \vec{\phi} \rangle}$$

Il est aisé de voir qu'une telle définition implique la relation d'orthogonalité suivante (Eq.2.9):

$$\langle \vec{S}^*, \vec{\phi} \rangle = 0$$

Comme nous l'avons vu au chapitre (4), la section efficace totale homogénéisée s'écrit (Eq. 4.10):

$$\Sigma_{H,m}^k = \frac{\langle \mathbf{I}_m^k \cdot \vec{\Sigma}, \vec{\phi} \rangle}{\langle \mathbf{I}_m^k \cdot \vec{\Gamma}, \vec{\phi} \rangle}$$

On identifie alors pour $G \equiv \Sigma_{H,m}^k$:

$$\begin{aligned} \vec{S}_m^{*,k} &= \frac{\vec{\Sigma}_i}{\langle \vec{\Sigma}_j, \vec{\phi} \rangle} - \Sigma_{H,m}^k \frac{\vec{\Sigma}_j}{\langle \vec{\Sigma}_j, \vec{\phi} \rangle} \\ \vec{\Sigma}_i &= \mathbf{I}_m^k \cdot \vec{\Sigma} \quad \text{et} \quad \vec{\Sigma}_j = \mathbf{I}_m^k \cdot \vec{\Gamma} \end{aligned} \quad (5.5)$$

Compte tenu de cette identité, le calcul des sources adjointes pour chacune des macro-régions, ($1 \leq m \leq M$), et des macro-groupes, ($1 \leq k \leq K$) est immédiat.

Pour une fonctionnelle G associée aux propriétés homogénéisées, l'identification $\vec{\Sigma}_j = \mathbf{I}_m^k \cdot \vec{\Gamma}$ permet d'affirmer que $\delta \vec{\Sigma}_j = 0$ indépendamment du type de perturbation envisagée.

Si les sections efficaces étaient homogénéisées à l'aide du flux adjoint (section 4.4.2), les sources adjointes associées seraient de deux types (Stacey, Jr., 1974):

- Les sources obtenues par dérivation relativement au flux.

- Les sources obtenues par dérivation relativement au flux adjoint.

La mise en place de formules de perturbation, à partir de cette méthode d'homogénéisation, requièrerait donc le calcul de 2 fois plus de flux adjoints généralisés que pour la méthode précédente.

5.3 Flux pseudo-adjoint généralisé

Pour un calcul d'adjoint généralisé, les équations directes et adjointes sont les suivantes (Eqs. 1.13 et 2.8):

$$\begin{aligned}\vec{\phi} &= \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \mathbf{R}_{\lambda} \cdot \vec{\phi} \\ \vec{\Gamma}^* &= \mathbf{R}_{\lambda}^T \cdot \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \vec{\Gamma}^* + \vec{S}^*\end{aligned}$$

En définissant le flux pseudo-adjoint généralisé $\vec{\Gamma}^+ = \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \vec{\Gamma}^*$, on obtient:

$$\vec{\Gamma}^+ = \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \mathbf{R}_{\lambda}^T \cdot \vec{\Gamma}^+ + \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \vec{S}^* \quad (5.6)$$

En remplaçant $\mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \vec{\Gamma}^*$ par $\vec{\Gamma}^+$ dans l'équation adjointe, on obtient:

$$\vec{\Gamma}^* = \mathbf{R}_{\lambda}^T \cdot \vec{\Gamma}^+ + \vec{S}^* \quad (5.7)$$

avec \vec{S}^* , la source adjointe, orthogonale au flux.

L'équation sur les flux pseudo-adjoints généralisés (Eq. 5.6) est très proche du calcul de pseudo-adjoint avec source. Les modifications additionnelles à apporter au code sont les suivantes:

- Le terme de source de fission $\nu \Sigma_f \cdot \chi^T$ sera multiplié par la valeur propre λ , issue du calcul direct critique.
- La solution n'étant pas unique: $\vec{\Gamma}^+ \equiv \vec{\Gamma}^+ + \alpha \vec{\phi}^+$ est solution pour toute valeur de α . Par analogie avec l'équation (2.10), on décontaminera la solution en utilisant:

$$\vec{\Gamma}^+ = \vec{\Gamma}^+ - \frac{\langle \vec{\Gamma}^+ \cdot \chi \cdot \nu \Sigma_f^T \cdot \vec{\phi}^+ \rangle}{\langle \vec{\phi}^+ \cdot \chi \cdot \nu \Sigma_f^T \cdot \vec{\phi}^+ \rangle} \vec{\phi}^+ \quad (5.8)$$

La méthode convergera vers l'unique flux adjoint généralisé orthogonal au terme de fission: $\langle \vec{\Gamma}^+ \cdot \chi \cdot \nu \Sigma_f^T \cdot \vec{\phi}^+ \rangle = 0$ (Stacey, Jr., 1972a).

5.4 Calcul de fuites

Si on considère l'équation (4.8):

$$\vec{\phi} = \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}(\vec{\Sigma} + \vec{d}B^2) \cdot \mathbf{R} \cdot \vec{\phi}$$

l'équation adjointe associée sera:

$$\vec{\phi}^* = \mathbf{R}^T \cdot \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}(\vec{\Sigma} + \vec{d}^*B^{*2}) \cdot \vec{\phi}^*$$

De même que $\lambda^* = \lambda$, on aura: $B^* = B$. Le coefficient de diffusion \vec{d} étant considéré comme une propriété du réacteur, on imposera: $\vec{d}^* = \vec{d}$. En définitive, on résoudra l'équation adjointe:

$$\vec{\phi}^* = \mathbf{R}^T \cdot \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}(\vec{\Sigma} + \vec{d}B^2) \cdot \vec{\phi}^*$$

Une telle approche revient à considérer et à traiter le terme de fuite $\vec{d}B^2$ comme une section efficace standard. Dans la pratique, seule la méthode SIGMA a été mise en place (section 4.3.2).

5.5 Aspects numériques

Afin d'analyser l'efficacité des algorithmes mis en place pour les calculs adjoints nous avons traité trois cas type:

- Un assemblage carré à 2 groupes d'énergie et contenant 2 régions annulaires "Small Cell" (Petrovic et al., 1996).
- Un assemblage REP 17x17 (Marleau et al., 2000)¹.
- Une cellule CANDU en 2D (Marleau et al., 2000)².

Le tableau (5.1) présente les propriétés de l'assemblage "Small Cell":

Tableau 5.1 "Small Cell": sections efficaces

	Combustible		Modérateur		Structure	
	$g = 1$	$g = 2$	$g = 1$	$g = 2$	$g = 1$	$g = 2$
Σ	0.392175	0.622581	0.276383	0.278610	0.439812	1.35565
$\nu\Sigma_f$	0.022141	0.496970	0.0	0.0	0.0	0.0
χ	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
Σ_s^1	0.361893	0.001451	0.274505	0.000774	0.41998	0.002672
Σ_s^2	0.000715	0.358282	0.000288	0.273807	0.02128	1.335170
S	1.0	2.0	0.0	0.0	0.0	0.0
S^*	1.0	2.0	0.0	0.0	0.0	0.0

Pour chaque matériau et pour les groupes d'énergie $g = \{1, 2\}$, la section efficace de diffusion est présentée pour les groupes d'arrivée $h = \{1, 2\}$: $\Sigma_s^h = [\Sigma_s^{h-1}, \Sigma_s^{h-2}]^T$

Les calculs de la cellule CANDU et de l'assemblage REP ont été réalisés en utilisant des sections efficaces à 69 groupes d'énergie provenant de la bibliothèque Winfrith

¹Cas test TCWW02 du guide usager DRAGON.

²Cas test TCWW05 sans auto-protection ni évolution, du guide usager DRAGON.

de WIMS-AECL (Donnelly, 1986). Les fichiers d'entrée de DRAGON associés à ces cas tests sont donnés à l'annexe (III.1). Les figures (5.3) à (5.5) présentent les géométries, définies dans DRAGON, des cas étudiés.

Niveau de gris par mélange

1 2 3

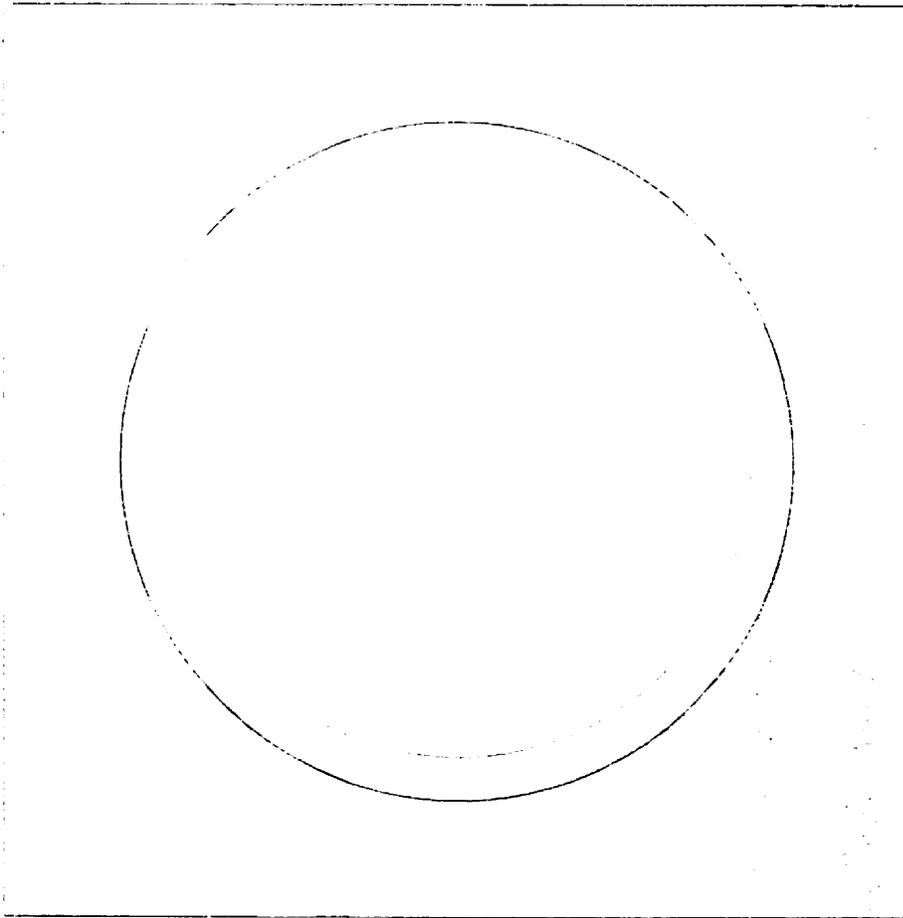


Figure 5.3 Assemblage "Small Cell"

Niveau de gris par mélange

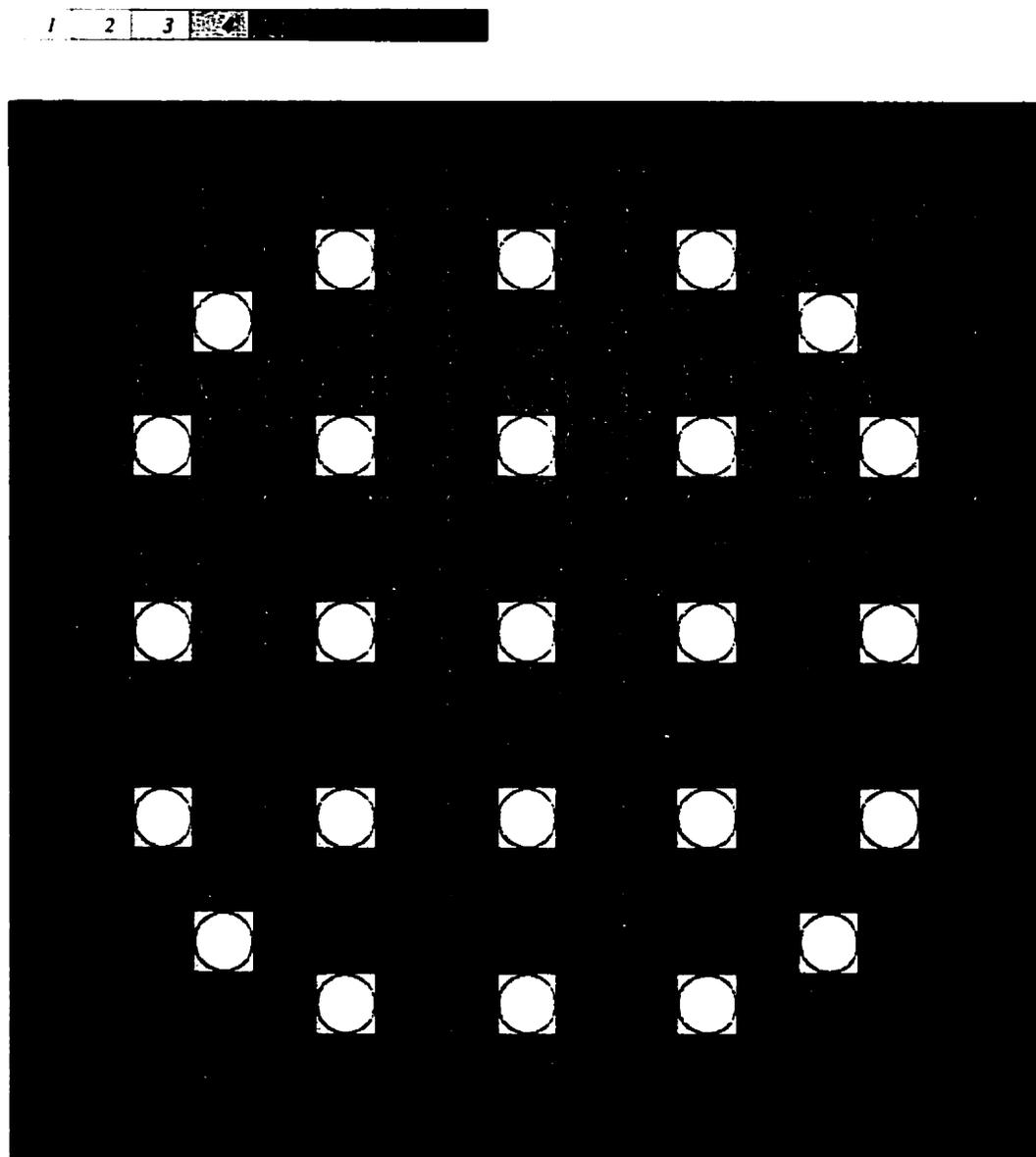


Figure 5.4 Assemblage REP 17x17

Niveau de gris par mélange

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
---	---	---	---	---	---	---	---	---	----

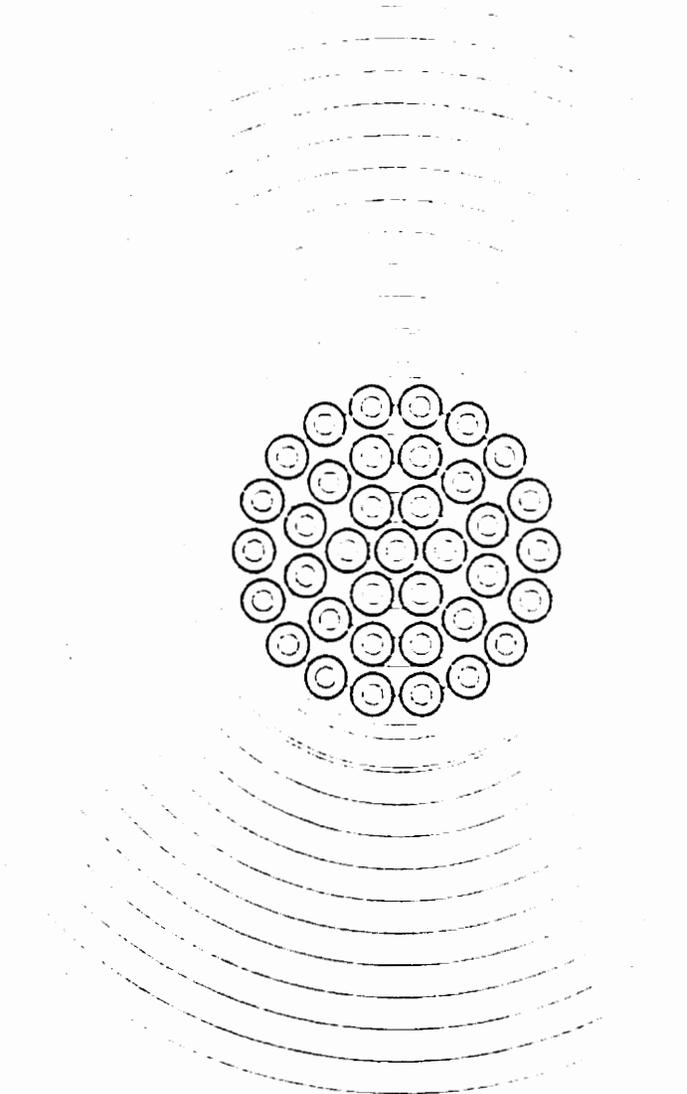


Figure 5.5 Cellule CANDU

5.5.1 Calculs direct et adjoint

Assemblage "Small Cell"

À partir des données de "Small Cell" nous avons effectué divers types de calcul:

- Type K PAF: calcul du flux et du k_{eff} direct ainsi que du flux et du k_{eff} pseudo-adjoint.
- Type S PAF: calcul du flux direct avec une source fixe ainsi que du flux pseudo-adjoint avec une source adjointe fixe.

Pour les calculs de type K, les données précédentes ont directement été utilisées en imposant des sources directes et adjointes nulles. Pour les calculs avec source (type S), afin d'assurer la convergence en rendant la cellule sous-critique, le troisième milieu a été remplacé par du vide. Les sources directes et adjointes ont été choisies de façon arbitraire.

Le tableau (5.2) indique les valeurs du k_{eff} obtenues, les erreurs relatives ε_k et ε_ϕ le nombre d'itérations externes N_{EXT} et totales N_{TOT} pour les calculs précédents:

Tableau 5.2 "Small Cell": résultats et erreurs

Type	k_{eff}	ε_k	ε_ϕ	N_{EXT}	N_{TOT}
K DIR	1.064796	2.552E-08	2.291E-06	2	8
K ADJ	1.064795	6.220E-08	1.209E-06	2	8
S DIR	x	x	4.396E-05	34	134
S ADJ	x	x	4.483E-05	34	136

- Calculs de type K: le nombre d'itérations est identique pour le calcul direct et adjoint, la vitesse de convergence est la même dans ce cas. Les erreurs ε_k et ε_ϕ

correspondent respectivement aux écarts relatifs sur le k_{eff} et sur le flux entre deux itérations externes. Elles sont du même ordre de grandeur dans les cas direct et adjoint. L'écart relatif entre les k_{eff} direct et adjoint est de $9.4E-7$, ce qui est supérieur à ε_k , mais reste inférieur à l'erreur sur les flux: ε_ϕ . Le k_{eff} est un bilan de neutrons, il dépend directement du flux et il demeure difficile de lui attribuer une incertitude inférieure au critère de convergence fixé sur le flux: $\varepsilon_k \sim \varepsilon_\phi \leq \xi_\phi$.

- Calculs de type S: là encore, le nombre d'itérations externes est identique pour les calculs direct et adjoint (le nombre d'itérations totales est très légèrement supérieur dans le cas adjoint), il est nettement plus élevé que dans le cas critique car la présence simultanée d'une source fixe et d'une source de fission ralentit la convergence. Les erreurs sur les flux sont également du même ordre de grandeur.

Assemblage REP et Cellule CANDU

Les tableaux qui suivent présentent les résultats obtenus pour l'assemblage REP et la cellule CANDU pour des calculs de k_{eff} . Par *Calculs de flux*, on entend le nombre total de calculs de flux de groupes. En effet, à chaque itération interne plusieurs groupes sont traités: $UPS \leq g \leq G$.

Tableau 5.3 REP 17x17: calcul des flux direct et adjoint

	Direct			Adjoint		
	R & A ON	R OFF	A OFF	R & A ON	R OFF	A OFF
k_{eff}	1.25955	1.25955	1.25955	1.25955	1.25955	1.25955
Iter. externes	4	4	4	3	3	3
Iter. internes	14	20	19	12	14	15
Calculs de flux	644	782	728	594	680	723

³C'est l'absence d'auto-protection qui donne pour les cas test TCWW05 un k_{eff} sous-critique.

Tableau 5.4 CANDU: calcul des flux direct et adjoint

	Direct			Adjoint		
	R & A ON	R OFF	A OFF	R & A ON	R OFF	A OFF
k_{eff}^3	0.97571	0.97571	0.97571	0.97573	0.97568	0.97573
Iter. externes	5	6	5	4	10	4
Iter. internes	18	231	25	21	238	39
Calculs de flux	859	5861	1001	1007	10494	1781

Dans les deux cas de figure, on note que l'écart relatif sur le k_{eff} entre les calculs direct et adjoint est cohérent avec la précision des calculs sur le flux: $\xi_o = 5.10^{-5}$ et que le nombre d'itérations est du même ordre de grandeur.

L'effet du rééquilibrage de groupe (R ON / R OFF) est très apparent dans le cas de la cellule CANDU, le nombre d'itérations internes est alors divisé par un facteur supérieur à 10. Dans le cas de l'assemblage REP, le gain est de l'ordre de 25%. Cela peut s'expliquer par le fait que l'eau lourde est un matériau beaucoup plus diffusant que l'eau légère. L'accélération variationnelle (A ON / A OFF) est d'autant plus efficace que le nombre de régions est important. Dans le cas de la cellule CANDU l'effet énergétique est prépondérant. Pour ce qui est de l'assemblage REP, les effets spatiaux et énergétiques sont du même ordre de grandeur. La modification de l'algorithme (inversion des groupes) dans le cas adjoint aura permis de réduire le nombre de calculs de flux de 30% environ. En effet, on est passé de 828 (12x69) à 594 calculs de flux pour le REP et de 1449 (21x69) à 1007 calculs pour le CANDU.

On peut noter que la structure de la matrice de diffusion Σ_o aura un impact sur les itérations internes, tandis que la structure de la source de fission $\chi\nu\Sigma_f^T$ jouera un rôle à l'externe. Dans notre cas, on peut voir que la structure de la matrice de source R_λ favorise le cas direct pour l'assemblage CANDU et le cas adjoint pour le REP.

5.5.2 Calcul des sources adjointes généralisées

Comme nous l'avons vu à la section (5.2), chacune des sources adjointes généralisées a une dimension de $N \times G$ qui correspond à la discrétisation des micro-sections efficaces N régions par G groupes, elles sont calculées directement à l'aide de la relation:

$$\bar{S}_m^{*,k} = \frac{\bar{\Sigma}_i}{\langle \bar{\Sigma}_j, \vec{\phi} \rangle} - \Sigma_{H,m}^k \frac{\bar{\Sigma}_j}{\langle \bar{\Sigma}_j, \vec{\phi} \rangle}$$

avec:

$$\bar{\Sigma}_i = \mathbf{I}_m^k \cdot \bar{\Sigma} \quad \text{et} \quad \bar{\Sigma}_j = \mathbf{I}_m^k \cdot \bar{\Gamma}$$

Cependant, pour un couple (k, m) donné, tous les éléments qui ne correspondent pas à G_k ou N_m seront nuls. Il en résulte que les sources adjointes peuvent être compressées de façon à occuper, pour une section efficace donnée, un espace de $N \times G$ éléments, et ce indépendamment des paramètres d'homogénéisation. Le module SAD: permet de calculer de façon systématique les sources adjointes généralisées. Il est alors possible de calculer les flux adjoints généralisés associés à ces sources. La structure de ce module est présentée à l'annexe (II).

5.5.3 Flux adjoints généralisés

Pour un certain nombre de propriétés homogénéisées et pour chaque macro-groupe et macro-région, des sources adjointes généralisées vont être définies. À chacune de ces sources est associé un flux adjoint généralisé. Selon les paramètres de condensation choisis, il se peut que la source adjointe généralisée soit non nulle seulement pour les groupes rapides. Dans ce cas, à la première itération interne, le flux sera identiquement nul pour les groupes thermiques. Les critères de convergence définis par les relations (4.5) et (4.2) sont des critères relatifs qui ne sont pas définis pour un flux nul. L'algorithme des itérations internes a donc été modifié de façon à ne

pas itérer quand la source est nulle pour tous les groupes thermiques.

L'orthogonalité de la source adjointe avec le flux (qui est positif partout), implique que cette dernière change de signe, en fonction des indices de groupe ou de région. Le flux adjoint généralisé sera donc, lui aussi, partiellement négatif et positif. Pour certains types de calculs on a observé que le rééquilibrage de groupe (section 4.2.3) au lieu d'accélérer la méthode l'empêchait de converger. Cela est dû au fait que, dans certains cas, le flux adjoint généralisé change de signe pour des régions adjacentes. Le rééquilibrage de groupe est un bilan global et ne tient pas nécessairement compte de ces changements de signe de façon adéquate. Cela peut induire des oscillations en corrigeant le flux dans la mauvaise direction. Ce phénomène est principalement spatial et sera d'autant plus apparent que le nombre de régions dans le réacteur est élevé.

Afin de pallier cette difficulté, au lieu de commencer le processus itératif avec un flux adjoint généralisé nul, nous avons choisi de *contaminer* le flux par le flux adjoint de façon à obtenir un flux adjoint généralisé positif partout. En quelques itérations, on converge alors vers une solution très contaminée. Dans un deuxième temps, on décontamine la solution obtenue en utilisant la relation (5.8), ce qui nous donne un très bon estimé du flux adjoint généralisé. Cela permet, dans une troisième phase, de converger rapidement vers une solution décontaminée en coupant le rééquilibrage de groupe. Le critère de contamination a été choisi de façon à avoir un flux adjoint généralisé initial proportionnel au flux adjoint:

$$\vec{\Gamma}_0^+ = \alpha \vec{\phi}^+ \text{ avec } \alpha = \alpha_0 \frac{|\vec{S}^+|}{|\vec{\phi}^+|}$$

La norme considérée est la norme 2 et α_0 est un paramètre sur lequel l'utilisateur peut jouer, par défaut on a fixé $\alpha_0 = 10^2$ pour un calcul de k_{eff} .

Il est important de noter que le calcul des adjoints généralisés présente une grande sensibilité numérique. En effet, le flux adjoint généralisé peut varier très fortement selon les groupes et les régions. On a typiquement:

$$\frac{\max_{i,g} |\Gamma_i^{+g}|}{\min_{i,g} |\Gamma_i^{+g}|} \sim 10^6$$

Afin de développer un algorithme suffisamment stable nous avons dû relaxer les critères de convergence. La précision sur le calcul des flux adjoints généralisés est affectée par celle de la source qui dépend du flux direct. En conséquence nous avons assoupli les critères de convergence sur les flux adjoints généralisés en multipliant par un facteur β les critères de convergence sur le flux direct ou adjoint. L'utilisateur peut jouer sur ce paramètre, mais par défaut, on a choisi $\beta = 10$.

Dans ce qui suit, nous avons considéré une condensation à 2 groupes et une homogénéisation à 2 régions, la fonctionnelle d'intérêt est la section efficace de fission (homogénéisée et condensée). Les fichiers d'entrée de DRAGON associés à ces cas tests sont donnés à l'annexe (III.1). Les tableaux (5.5) à (5.8) présentent les calculs d'adjoints généralisés avec ou sans *contamination* pour l'assemblage REP et la cellule CANDU.

On note que:

- Le cas avec *contamination* est présenté avec ou sans rééquilibrage de groupe, le flux est renormalisé une première fois en utilisant (Eq. 5.8) après avoir convergé sur la solution contaminée. Après quoi, on converge vers la solution en coupant le rééquilibrage de groupe. Afin de limiter la contamination numérique, on renormalisera une deuxième fois le flux à la fin du calcul.

- Le cas sans *contamination* est présenté avec ou sans rééquilibrage de groupe. le flux est renormalisé après avoir convergé.

Tableau 5.5 REP 17x17: flux adjoint généralisé associé à $\nu\Sigma_{f,H,1}^1$

	Flux initial contaminé		Flux initial non contaminé	
	R ON	R OFF	R ON	R OFF
Iter. externes	6	6	∞	2
Iter. internes	16	21	∞	11
Calculs de flux	775	1059	∞	525

Tableau 5.6 REP 17x17: flux adjoint généralisé associé à $\nu\Sigma_{f,H,1}^2$

	Flux initial contaminé		Flux initial non contaminé	
	R ON	R OFF	R ON	R OFF
Iter. externes	6	6	7	2
Iter. internes	14	18	17	11
Calculs de flux	758	930	913	525

On observe une grande sensibilité du rééquilibrage de groupe au choix de la source. l'algorithme est simplement ralenti pour $\nu\Sigma_{f,H,2}^2$ tandis que dans le cas de $\nu\Sigma_{f,H,2}^1$ l'algorithme ne converge plus. Dans les cas les plus simples (homogénéisation à une région et un groupe), la méthode que nous avons implantée peut s'avérer moins efficace que le cas *Flux initial non contaminé - rééquilibrage de groupe actif*, cependant nous l'avons développée car elle est plus générale. La structure générale du module FLU: ainsi modifié est présentée à l'annexe (II). On peut noter que le comportement est de même nature pour la cellule CANDU (tableaux 5.7 et 5.8).

Tableau 5.7 CANDU: flux adjoint généralisé associé à $\nu\Sigma_{f,H,2}^1$

	Flux initial contaminé		Flux initial non contaminé	
	R ON	R OFF	R ON	R OFF
Iter. externes	7	7	∞	4
Iter. internes	25	114	∞	101
Calculs de flux	1218	5025	∞	4447

Tableau 5.8 CANDU: flux adjoint généralisé associé à $\nu\Sigma_{f,H,2}^2$

	Flux initial contaminé		Flux initial non contaminé	
	R ON	R OFF	R ON	R OFF
Iter. externes	5	6	6	3
Iter. internes	16	26	50	16
Calculs de flux	818	1272	2239	766

Les modifications apportées au module FLU: en vue de calculer les adjoints généralisés se résument comme suit:

- Prise en compte des sources nulles dans les groupes thermiques.
- Précontamination.
- Relaxation du critère de convergence.

On pourrait penser que ces modifications ont un impact important sur la précision du calcul des flux adjoints généralisés et, en conséquence, sur la précision des calculs de perturbation. Ces dernières n'affectent pas trop la précision des calculs car ce sont généralement les flux très faibles qui posent des problèmes de convergence. Ils n'auront donc que très peu d'impact sur les perturbations.

CHAPITRE 6

PERTURBATIONS ET ANALYSE D'ERREURS

Les formules de perturbation sont des formules approximatives. Avant de s'intéresser aux applications, il nous faut tout d'abord définir un critère de validité de la théorie des perturbations. Ce qui revient à déterminer l'erreur maximum acceptable sur l'évaluation des fonctionnelles perturbées (valeur propre, taux de réaction ou rapports de taux de réaction). Une fois ce seuil déterminé, nous pourrons conduire une analyse systématique des erreurs dans le but de définir une plage de validité de la théorie mise en place.

6.1 Erreur et seuil d'acceptabilité

Comme nous l'avons vu dans les résultats présentés dans les tableaux (5.2) à (5.4), l'écart relatif entre le k_{eff} direct et adjoint est généralement supérieur à l'erreur sur le k_{eff} entre deux itérations externes: ε_k . Cependant, cet écart relatif est sensiblement du même ordre de grandeur que l'erreur sur les flux: ε_ϕ . Plus le nombre de régions et groupes est élevé, plus l'erreur sur les paramètres intégraux est susceptible de croître. Cependant, la précision sur les flux aura également tendance à diminuer à mesure que le nombre d'inconnues augmente. Il est donc raisonnable d'affirmer que les paramètres intégraux sont calculés avec une précision ε_F du même ordre que celle qui a été fixée pour le calcul du flux: ξ_ϕ ($\varepsilon_F \sim \varepsilon_\phi \leq \xi_\phi$).

En définissant l'erreur maximale sur l'estimé d'une fonctionnelle F perturbée: ε_F^r ,

on considérera comme acceptable la plage de perturbations vérifiant le critère:

$$\varepsilon_P^r \leq 10 \xi_\phi$$

Un tel critère est, bien sûr, qualitatif et pourrait être adapté en fonction du type de perturbations effectuées ou de la précision requise. Il permet cependant de déterminer le domaine d'étude et de validation de la théorie des perturbations.

6.2 Étude d'un cas particulier: matrice $\mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}$ constante

L'une des principales difficultés dans l'application de la théorie des perturbations est l'évaluation des variations sur les opérateurs \mathbf{A} et \mathbf{F} (Eq. 1.16), qui dépendent directement de la matrice $\mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}$. En effet, $\mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}$ dépend de façon non linéaire des sections efficaces totales, on ne pourra donc pas évaluer sa variation simplement.

Si une perturbation donnée n'affecte pas les sections efficaces totales, la matrice des probabilités de collision ne sera pas perturbée. D'une manière générale, lorsque la matrice $\mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}$ n'est pas sollicitée par la perturbation, nous pouvons obtenir (après factorisation et pour un opérateur $\mathbf{M} = \{\mathbf{A}, \mathbf{F}\}$ donné) une relation du type:

$$\delta\mathbf{M} = \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \delta\mathbf{M}'$$

En utilisant la relation (1.11) pour un produit scalaire donné, on en déduit:

$$\langle \vec{\phi}^*, \delta\mathbf{M} \cdot \vec{\phi} \rangle = \langle \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \vec{\phi}^*, \delta\mathbf{M}' \cdot \vec{\phi} \rangle = \langle \vec{\phi}^+, \delta\mathbf{M}' \cdot \vec{\phi} \rangle$$

Il faut donc noter que, lorsque la perturbation n'affecte pas la section efficace totale, seul le calcul du flux pseudo-adjoint $\vec{\phi}^+$ est requis. De plus, les variations des opérateurs perturbés auront une expression simplifiée. Le cas où la matrice des

probabilités de collision est invariante demeure un cas exceptionnel. on a alors:

$$\delta\Sigma_a + \delta\Sigma_s = 0$$

6.2.1 Réacteur avec source

Pour un réacteur avec source, on a (Eq. 3.10):

$$\delta R^c = \langle \delta\vec{\Sigma}, \vec{\phi}_p \rangle + \langle \vec{\phi}^+, \delta\vec{S} - \delta\mathbf{A} \cdot \vec{\phi}_p \rangle$$

avec:

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \mathbf{I} - \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot [\boldsymbol{\Sigma}_s + \boldsymbol{\chi} \cdot \nu \boldsymbol{\Sigma}_f^T] \\ \vec{S} &= \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \vec{Q}_e \end{aligned}$$

Si $\mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}$ est constante, on obtient:

$$\delta R^c = \langle \delta\vec{\Sigma}, \vec{\phi}_p \rangle + \langle \vec{\phi}^+, \delta\vec{S}' - \delta\mathbf{A}' \cdot \vec{\phi}_p \rangle \quad (6.1)$$

avec:

$$\begin{aligned} \delta\mathbf{A}' &= \delta [\boldsymbol{\Sigma}_s + \boldsymbol{\chi} \cdot \nu \boldsymbol{\Sigma}_f^T] \\ \delta\vec{S}' &= \delta\vec{Q}_e \end{aligned}$$

6.2.2 Réacteur critique

Pour un réacteur critique, on a (Eq. 3.11):

$$\delta\lambda^c = \frac{\langle \vec{\phi}^+, \delta\mathbf{A} \cdot \vec{\phi}_p \rangle - \lambda \langle \vec{\phi}^+, \delta\mathbf{F} \cdot \vec{\phi}_p \rangle}{\langle \vec{\phi}^+, \mathbf{F}_p \cdot \vec{\phi}_p \rangle}$$

avec:

$$\begin{aligned}\mathbf{A} &= \mathbf{I} - \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \Sigma_s \\ \mathbf{F} &= \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \chi \cdot \nu \Sigma_f^T\end{aligned}$$

Si $\mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}$ est constante, on obtient:

$$\delta\lambda^c = \frac{\langle \vec{\phi}^+, \delta\mathbf{A}' \cdot \vec{\phi}_p \rangle - \lambda \langle \vec{\phi}^+, \delta\mathbf{F}' \cdot \vec{\phi}_p \rangle}{\langle \vec{\phi}^+, \mathbf{F}'_p \cdot \vec{\phi}_p \rangle} \quad (6.2)$$

avec:

$$\begin{aligned}\delta\mathbf{A}' &= -\delta\Sigma_s \\ \delta\mathbf{F}' &= \delta(\chi \cdot \nu \Sigma_f^T) \\ \mathbf{F}'_p &= \chi_p \cdot \nu \Sigma_{f_p}^T\end{aligned}$$

Lorsque $\vec{\Sigma}_j$ est constant¹, on a pour un rapport de taux de réaction (Eq. 3.13):

$$\delta G^c = \frac{\langle \delta\vec{\Sigma}_i, \vec{\phi}_p \rangle}{\langle \vec{\Sigma}_j, \vec{\phi}_p \rangle} + \frac{\langle \delta\vec{\Sigma}_j, \vec{\phi} \rangle}{\langle \vec{\Sigma}_j, \vec{\phi}_p \rangle} \langle \vec{\Gamma}^s, (\delta\lambda\mathbf{F}_p + \lambda\delta\mathbf{F} - \delta\mathbf{A}) \cdot \vec{\phi}_p \rangle$$

¹Lorsque G est associé aux propriétés homogénéisées, $\vec{\Sigma}_j$ est un vecteur constant (section 5.2).

avec:

$$(\mathbf{A}^* - \lambda \mathbf{F}^*) \cdot \vec{\Gamma}^* = \vec{S}^* \text{ et } \vec{S}^* = \frac{\vec{\Sigma}_i}{\langle \vec{\Sigma}_j, \vec{\phi} \rangle} - G \cdot \frac{\vec{\Sigma}_j}{\langle \vec{\Sigma}_j, \vec{\phi} \rangle}$$

Ce qui nous donne, si $\mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}$ est constante:

$$\delta G^r = \frac{\langle \delta \vec{\Sigma}_i, \vec{\phi}_p \rangle}{\langle \vec{\Sigma}_j, \vec{\phi}_p \rangle} + \frac{\langle \vec{\Sigma}_j, \vec{\phi} \rangle}{\langle \vec{\Sigma}_j, \vec{\phi}_p \rangle} \langle \vec{\Gamma}^*, (\delta \lambda \mathbf{F}'_p + \lambda \delta \mathbf{F}' - \delta \mathbf{A}') \cdot \vec{\phi}_p \rangle \quad (6.3)$$

Dans le cas où la section efficace totale n'est pas affectée par la perturbation, seuls les flux pseudo-adjoint et pseudo-adjoints généralisés sont requis pour établir les relations (6.1) à (6.3).

6.2.3 Perturbation exacte et erreur numérique

Comme nous l'avons vu à la section (3.6.3), les formulations décrites à la section précédente sont exactes. En remplaçant dans les formules (6.1), (6.2) et (6.3) le flux perturbé par le flux de l'état de référence, nous retrouvons les formulations approximatives standards. Il est donc possible, en utilisant ces formulations, d'évaluer les erreurs numériques imputables aux calculs des flux adjoints généralisés et des produits scalaires.

Le module PER: dont la structure est présentée à l'annexe (II), permet de calculer les propriétés perturbées pour une fonctionnelle $F = \{R, \lambda, G\}$. Selon les cas nous utiliserons:

- Formules de perturbation avec le flux de l'état de référence: $F \rightarrow F_r$.
- Formules de perturbation avec le flux de l'état perturbé: $F \rightarrow F_p$.
- Calcul direct des propriétés homogénéisées perturbées: $F \rightarrow F_c$.

Il va de soi que seule la première méthode présente un intérêt quant à son utilisation systématique. Les deux autres méthodes permettent d'effectuer des tests en vue de valider la première formulation. En comparant les résultats issus des deux dernières méthodes, nous pouvons immédiatement évaluer l'impact des erreurs numériques associées aux calculs des flux adjoints généralisés et des produits scalaires pour une perturbation donnée.

Suite à une perturbation donnée, la variation relative d'une fonctionnelle F est définie par:

$$\delta \bar{F}_i = \frac{F_i - F}{F}$$

où, dans le cas critique, F représente une des fonctionnelles d'intérêt (k_{eff} , ν_{Σ_f} , Σ ou Σ_s) à l'état de référence et F_i correspond à l'estimé de la fonctionnelle dans son état perturbé. Le type de perturbation considéré est caractérisé par $i = \{r, p, c\}$. À cette variation, on peut associer une erreur définie par:

$$\varepsilon_F^r = \delta \bar{F}_c - \delta \bar{F}_r$$

où $\delta \bar{F}_c$ correspond à la variation relative de la fonctionnelle calculée directement. On définira l'erreur associée au flux perturbé:

$$\varepsilon_F^p = \delta \bar{F}_c - \delta \bar{F}_p$$

où $\delta \bar{F}_p$ correspond à la variation relative de la fonctionnelle calculée en utilisant une formule de perturbation exacte. Enfin, on définira l'erreur numérique ε_F^n comme l'erreur associée à l'imprécision des calculs de flux directs et adjoints, ainsi que des produits scalaires. Dans le cas où la perturbation considérée laisse la matrice des probabilités de collision $\mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}$ invariante, on a l'identité: $\varepsilon_F^n = \varepsilon_F^p$.

Définition des perturbations tests

Afin d'analyser et de valider la méthode de perturbation implantée dans le code DRAGON nous avons effectués un certains nombre de perturbations tests. Selon les cas, nous avons perturbé divers paramètres par un facteur α :

$$\frac{\delta X}{X} = \alpha \quad \text{avec} \quad X = \{\nu\Sigma_f, \Sigma, \Sigma_s, T_{comb}, T_{mod}, \dots\}$$

Cela nous a permis de générer des bibliothèques de sections efficaces macroscopiques perturbées et d'évaluer l'impact de ces perturbations sur les propriétés homogénéisées à un groupe et une région. Les propriétés perturbées ont été générées à partir du module PER: en utilisant les flux de référence et perturbé, selon les trois méthodes précédemment décrites.

Nous avons considéré les assemblages "Small Cell" et REP 17x17 ainsi que la cellule CANDU déjà décrits à la section (5.5). Le tableau (6.1) nous donne pour les 3 cas étudiés le k_{eff} et les propriétés homogénéisées sur la cellule et condensées à un groupe d'énergie.

Tableau 6.1 Propriétés intégrales à l'état de référence

Type	k_{eff}	$\nu\Sigma_f$	Σ	Σ_s
"Small Cell"	1.064796	2.420016E-02	4.770873E-01	4.543597E-01
REP 17x17	1.259546	2.781917E-02	6.600780E-01	6.379914E-01
CANDU	0.975708	3.326338E-03	3.936781E-01	3.902689E-01

Les fichiers d'entrée de DRAGON (annexe III.2) permettent de générer des perturbations pour ces trois types d'assemblage. Pour l'assemblage "Small Cell", les paramètres α_1 , α_2 et α_3 permettent de perturber les sections efficaces de fission, de diffusion et totale (tableau 6.2).

Tableau 6.2 "Small Cell": scénario de perturbation

Section efficace	Matériau	Valeur	Variation relative
$\nu\Sigma_f^1$	Combustible	0.022141	$+\alpha_1$
$\nu\Sigma_f^2$	Combustible	0.496970	$-\alpha_2$
$\Sigma_s^{2\leftarrow 2}$	Combustible	0.358282	$-\alpha_1$
$\Sigma_s^{2\leftarrow 2}$	Modérateur	1.335170	$+\alpha_2$
Σ^1	Structure	0.276383	$+\alpha_3$
Σ^2	Structure	0.278610	$+\alpha_3$

Pour analyser les effets de température sur un assemblage REP, nous avons perturbé d'un facteur α la température du combustible et du modérateur (tableau 6.3).

Tableau 6.3 REP 17x17: scénario de perturbation

Matériau	Température (K)	Variation relative
Combustible	933.6	$+\alpha$
Modérateur	579.9	$-\alpha$

Afin d'étudier les effets de vide pour une cellule CANDU, nous avons perturbé les densités des matériaux en fonction d'un paramètre α (tableau 6.4).

Tableau 6.4 CANDU: scénario de perturbation

Matériau	Densité	Variation relative
Combustible	10.43750	$-\alpha$
Caloporteur	0.812120	$+\alpha$
Modérateur	1.082885	$-\alpha$

Analyse des erreurs numériques

Nous avons effectué des perturbations sur les assemblages "Small Cell", REP 17x17 et sur la cellule CANDU selon les scénarios décrits précédemment. Afin d'analyser le comportement des erreurs numériques, nous avons considéré des perturbations où la matrice des probabilités de collision était invariante. Pour ce faire, nous avons modifié la correction de transport de l'état perturbé pour l'assemblage REP 17x17 et la cellule CANDU. Le détail de la méthode employée est explicité à l'annexe (I.3).

Si de telles perturbations ne sont pas vraiment physiques, elles permettent toutefois d'évaluer l'impact des erreurs numériques. Dans la section suivante, nous prendrons en compte la variation de la matrice des probabilités de collision.

- Assemblage "Small Cell":

Pour évaluer la composante numérique de l'erreur, nous avons effectué une perturbation *arbitraire* qui n'affectait pas la section efficace totale sur l'assemblage "Small Cell". Pour cela, nous avons imposé: $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$ et $\alpha_3 = 0$. Les tableaux (6.5) et (6.6) présentent en fonction de α , l'erreur relative imputable à la formule de perturbation ainsi que les erreurs numériques (écart relatif entre la formulation *exacte* et le calcul direct).

Tableau 6.5 "Small Cell": erreur ε_F^r

α	k_{eff}	$\nu\Sigma_f$	Σ	Σ_s
1.00E-03	-8.28E-06	-2.36E-05	-6.18E-06	-6.75E-06
2.00E-03	-3.40E-05	-9.50E-05	-2.48E-05	-2.72E-05
5.00E-03	-2.22E-04	-6.06E-04	-1.58E-04	-1.74E-04
1.00E-02	-9.56E-04	-2.51E-03	-6.54E-04	-7.18E-04

Tableau 6.6 "Small Cell": erreur $\varepsilon_F^p = \varepsilon_F^n$

α	k_{eff}	$\nu\Sigma_f$	Σ	Σ_s
1.00E-03	1.13E-07	< 1.0E-09	< 1.0E-09	< 1.0E-09
2.00E-03	< 1.0E-09	< 1.0E-09	< 1.0E-09	< 1.0E-09
5.00E-03	1.13E-07	1.53E-07	< 1.0E-09	< 1.0E-09
1.00E-02	1.13E-07	< 1.0E-09	< 1.0E-09	-6.60E-08

- Assemblage REP 17x17:

Les tableaux (6.7) et (6.8) présentent en fonction de α , l'erreur relative imputable à la formule de perturbation ainsi que les erreurs numériques (écart relatif entre la formulation *exacte* et le calcul direct).

Tableau 6.7 REP 17x17: erreur ε_F^r

α	k_{eff}	$\nu\Sigma_f$	Σ	Σ_s
5.00E-02	-5.96E-06	-4.47E-05	1.44E-05	1.63E-05
1.00E-01	-2.30E-05	-1.70E-04	5.96E-05	6.69E-05
2.00E-01	-9.82E-05	-6.73E-04	2.24E-04	2.53E-04
5.00E-01	-6.17E-04	-3.76E-03	1.17E-03	1.32E-03

Tableau 6.8 REP 17x17: erreur $\varepsilon_F^p = \varepsilon_F^n$

α	k_{eff}	$\nu\Sigma_f$	Σ	Σ_s
5.00E-02	-9.53E-08	-6.83E-08	< 1.0E-09	< 1.0E-09
1.00E-01	< 1.0E-09	-6.83E-08	< 1.0E-09	-9.40E-08
2.00E-01	-1.91E-07	< 1.0E-09	8.94E-08	< 1.0E-09
5.00E-01	-2.86E-07	1.37E-07	9.09E-08	9.25E-08

- Cellule CANDU:

Les tableaux (6.9) et (6.10) présentent en fonction de α , l'erreur relative imputable à la formule de perturbation ainsi que les erreurs numériques (écart relatif entre la formulation *exacte* et le calcul direct).

Tableau 6.9 CANDU: erreur ε_F^r

α	k_{eff}	$\nu\Sigma_f$	Σ	Σ_s
1.00E-02	-1.28E-06	2.01E-05	-2.19E-06	-2.37E-06
2.00E-02	-4.77E-06	8.09E-05	-8.56E-06	-9.32E-06
5.00E-02	-3.04E-05	5.11E-04	-5.43E-05	-5.83E-05
1.00E-01	-1.32E-04	2.08E-03	-2.22E-04	-2.38E-04

Tableau 6.10 CANDU: erreur $\varepsilon_F^p = \varepsilon_F^n$

α	k_{eff}	$\nu\Sigma_f$	Σ	Σ_s
1.00E-02	-1.82E-07	-7.22E-08	-7.62E-08	-7.43E-08
2.00E-02	-3.05E-07	-6.91E-08	< 1.0E-09	-7.69E-08
5.00E-02	-8.56E-07	-4.18E-07	< 1.0E-09	-7.69E-08
1.00E-01	-1.83E-06	-8.39E-07	-1.52E-07	-1.54E-07

Les tableaux (6.5), (6.7) et (6.9) montrent clairement la convergence de la méthode de perturbation. En effet, l'erreur diminue à mesure que α décroît. Par ailleurs, les tableaux (6.6), (6.8) et (6.10) ne montrent aucune tendance de l'erreur en fonction de α . Ceci illustre que la précision de la formulation exacte des perturbations est analogue à celle des flux. Dans toutes les configurations, l'erreur numérique ε_F^n est inférieure à l'erreur ε_F^r et de plus, reste très faible relativement à l'incertitude sur les flux: $\xi_\phi = 5.10^{-5}$. D'une manière générale, cela nous permettra de négliger l'erreur numérique comparativement à l'erreur globale.

6.2.4 Ordre de l'erreur

Comme nous l'avons vu à la section (3.2), si on considère une perturbation pour un réacteur avec source on a:

$$\begin{aligned} \mathbf{A} \cdot \vec{\phi} &= \vec{S} \quad \text{et} \quad R = \langle \vec{\Sigma}, \vec{\phi} \rangle \\ \mathbf{A}_p \cdot \vec{\phi}_p &= \vec{S}_p \quad \text{et} \quad R_p = \langle \vec{\Sigma}_p, \vec{\phi}_p \rangle \end{aligned}$$

Il s'en suit:

$$\delta R = \langle \delta \vec{\Sigma}, \vec{\phi} \rangle + \langle \vec{\Sigma}, \delta \vec{\phi} \rangle + \langle \delta \vec{\Sigma}, \delta \vec{\phi} \rangle$$

Comme la théorie des perturbations que nous avons implantée est dite de premier ordre, le terme: $\langle \delta \vec{\Sigma}, \delta \vec{\phi} \rangle$ est négligé. Il en est de même pour un réacteur critique et pour l'évaluation des rapports de taux de réaction (Stacey, Jr., 1974).

Si on considère une fonctionnelle F , on a pour une perturbation donnée une dépendance de δF par rapport à α : $\delta F = \delta F(\alpha)$.

En effectuant un développement de Taylor à l'ordre 2, on obtient:

$$\delta F(\alpha) = \frac{\partial \delta F}{\partial \alpha} \alpha + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \delta F}{\partial \alpha^2} \alpha^2$$

Sous cette approche, le premier terme qui est linéaire en α correspond à la variation évaluée par la théorie des perturbations, tandis que le deuxième terme qui est quadratique correspond à l'erreur.

Si on considère le même scénario de perturbation pour l'assemblage "Small Cell" (tableau 6.2), le tableau (6.11) présente la variation relative $\delta \bar{F}_r$ des paramètres homogénéisés et la figure (6.1) montre bien la dépendance linéaire relativement à

α . Tandis que le tableau (6.5) présente les erreurs relatives ε_F^r imputables à la formule de perturbation.

Tableau 6.11 "Small Cell": variation relative $\delta\tilde{F}_r$

α	k_{eff}	$\nu\Sigma_f$	Σ	Σ_s
1.00E-03	4.84E-03	3.91E-03	9.46E-04	1.04E-03
2.00E-03	9.73E-03	7.82E-03	1.89E-03	2.08E-03
5.00E-03	2.47E-02	1.95E-02	4.73E-03	5.19E-03
1.00E-02	5.08E-02	3.91E-02	9.46E-03	1.04E-02

Nous avons représenté (Fig. 6.2) la racine carrée de la valeur absolue de l'erreur relative en fonction de α . L'aspect linéaire des graphes obtenus montre que l'erreur est à peu près quadratique en α .

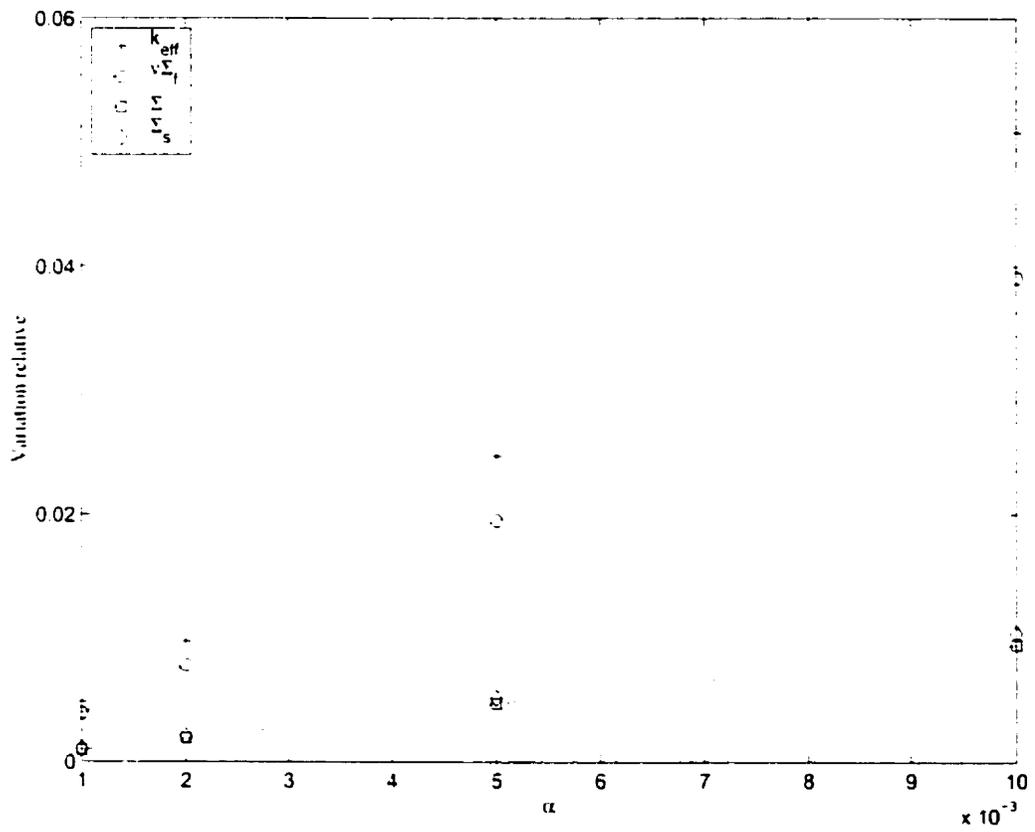


Figure 6.1 "Small Cell": variation relative $\delta \bar{F}_r$

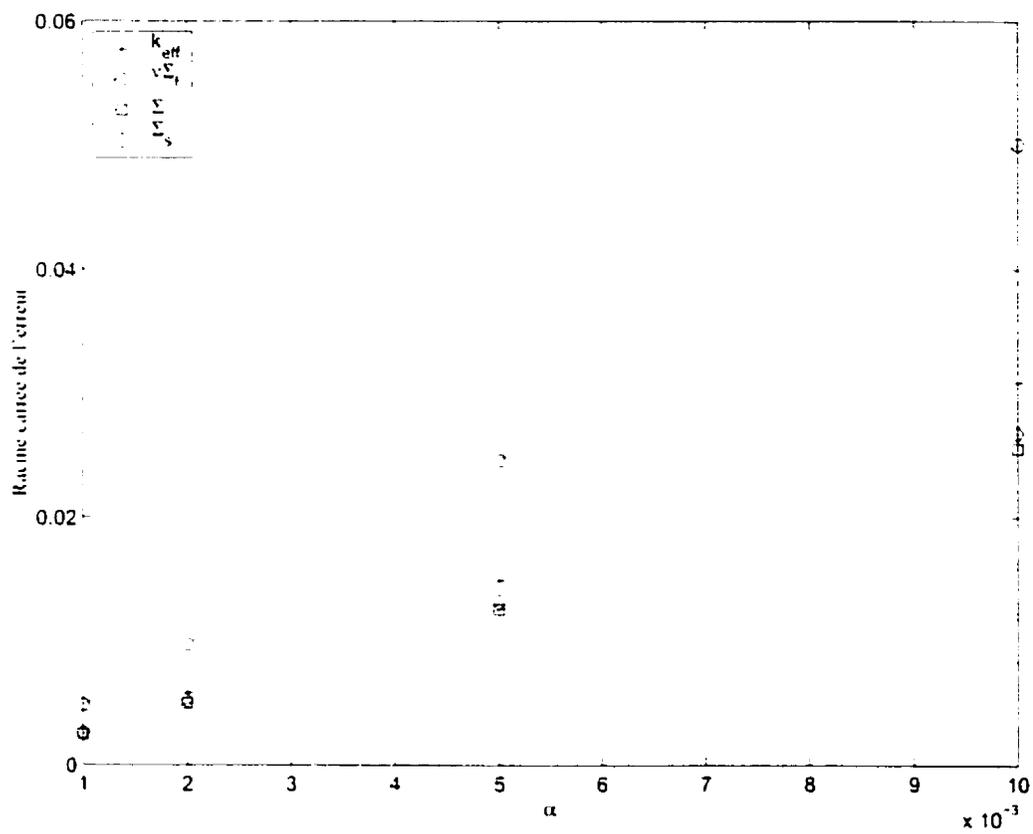


Figure 6.2 "Small Cell": aspect quadratique de l'erreur $|\varepsilon_F^r|^{1/2}$

6.2.5 Additivité des perturbations

La théorie des perturbations au premier ordre que nous avons implantée est linéaire pour ce qui est de l'estimé de la variation des fonctionnelles et quadratique en ce qui concerne l'erreur. Lorsque nous combinons deux perturbations distinctes, il est clair que la perturbation résultante sera caractérisée par une variation linéaire égale à la somme des variations de chacune des perturbations et une erreur quadratique dont nous allons discuter.

Considérons deux perturbations caractérisées par $\delta F_1(\alpha_1)$ et $\delta F_2(\alpha_2)$ que l'on combine. La perturbation résultante δF , nous donne une relation du type:

$$\delta F(\alpha_1, \alpha_2) = \frac{\partial \delta F}{\partial \alpha_1} \alpha_1 + \frac{\partial \delta F}{\partial \alpha_2} \alpha_2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \delta F}{\partial \alpha_1^2} \alpha_1^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \delta F}{\partial \alpha_2^2} \alpha_2^2 + \frac{\partial^2 \delta F}{\partial \alpha_1 \partial \alpha_2} \alpha_1 \alpha_2 \quad (6.4)$$

Il est possible de réécrire l'équation (6.4) sous la forme:

$$\delta F(\alpha_1, \alpha_2) = \delta F_1(\alpha_1) + \delta F_2(\alpha_2) + \delta F_C(\alpha_1, \alpha_2) \quad (6.5)$$

avec:

$$\delta F_C(\alpha_1, \alpha_2) = \frac{\partial^2 \delta F}{\partial \alpha_1 \partial \alpha_2} \alpha_1 \alpha_2$$

Ici $\delta F_C(\alpha_1, \alpha_2)$ représente le couplage entre les deux perturbations. C'est la non-linéarité de l'équation de transport qui induit ce couplage.

Considérons deux perturbations pour lesquelles les erreurs sont: $\varepsilon_{F,1}^r$ et $\varepsilon_{F,2}^r$.

Compte tenu de l'équation (6.5), l'erreur associée à la somme de ces deux perturbations sera:

$$\varepsilon_F^r = \varepsilon_{F,1}^r + \varepsilon_{F,2}^r + C \left(\left| \varepsilon_{F,1}^r \varepsilon_{F,2}^r \right| \right)^{1/2} \quad (6.6)$$

Il est impossible d'évaluer, à priori, la valeur de ce coefficient de couplage C , car

ce dernier dépend des deux scénarios de perturbation considérés. Cependant, il est raisonnable de penser que les termes de deuxième dérivée dans l'équation (6.4) sont du même ordre de grandeur

$$\frac{\partial^2 \delta F}{\partial \alpha_1^2} \sim \frac{\partial^2 \delta F}{\partial \alpha_2^2} \sim \frac{\partial^2 \delta F}{\partial \alpha_1 \partial \alpha_2} \text{ soit } |C| \sim 2$$

Pour l'assemblage "Small Cell", le tableau (6.12) présente la variation du k_{eff} pour diverses valeurs prises par α_1 et α_2 (tableau 6.2). Les indices p et r font respectivement référence aux formules de perturbation *exactes* (avec le flux perturbé) et *standards* (avec le flux de référence). Les indices 1 et 2 font référence aux paramètres α_1 et α_2 et l'indice C évalue le terme de couplage défini par:

$$\delta k_{eff}^C = \delta k_{eff}^{1,2} - \delta k_{eff}^1 - \delta k_{eff}^2$$

Tableau 6.12 "Small Cell": variation $\delta \bar{F}_r$ sur le k_{eff}

α	0.001	0.002	0.005	0.010
$\delta k_{eff}^{p,1}$	-6.10E-04	-1.22E-03	-3.03E-03	-6.00E-03
$\delta k_{eff}^{p,2}$	5.47E-03	1.10E-02	2.83E-02	5.93E-02
$\delta k_{eff}^{p,1,2}$	4.85E-03	9.77E-03	2.50E-02	5.18E-02
$\delta k_{eff}^{p,C}$	-1.32E-05	-5.35E-05	-3.46E-04	1.46E-03
$\delta k_{eff}^{r,1}$	-6.10E-04	-1.22E-03	-3.04E-03	-6.06E-03
$\delta k_{eff}^{r,2}$	5.46E-03	1.10E-02	2.80E-02	5.78E-02
$\delta k_{eff}^{r,1,2}$	4.84E-03	9.73E-03	2.47E-02	5.08E-02
$\delta k_{eff}^{r,C}$	-8.62E-06	-3.47E-05	-2.23E-04	-9.32E-04

Dans le cas *exact* on note que $\delta k_{eff}^{p,C}$ est différent de 0, ce qui traduit que l'équation de transport n'est pas linéaire relativement aux paramètres α_1 et α_2 . Le cas *perturbatif* présente un terme de couplage $\delta k_{eff}^{r,C}$ qui provient de la non linéarité des formules de perturbation que nous avons employées. Pour l'évaluation de δk_{eff} ,

l'équation (6.2) s'exprime en fonction de l'opérateur \mathbf{F}'_p ce qui induit une composante non linéaire.

Le tableau (6.13) présente l'erreur relative ε_F^r obtenue sur le k_{eff} pour divers valeurs prises par α_1 et α_2 . Dans le cas où $\alpha_1 = \alpha_2$, il est possible d'évaluer le coefficient de couplage C de la relation (6.6) en utilisant:

$$C = \frac{\varepsilon_F^r - \varepsilon_{F,1}^r - \varepsilon_{F,2}^r}{(|\varepsilon_{F,1}^r \varepsilon_{F,2}^r|)^{1/2}}$$

Tableau 6.13 "Small Cell": erreur ε_F^r sur le k_{eff} et valeur de C

α	0.001	0.002	0.005	0.010
$\varepsilon_{F,1}^r$	-4.51E-07	-2.01E-06	-1.29E-05	-5.12E-05
$\varepsilon_{F,2}^r$	-1.24E-05	-5.08E-05	-3.32E-04	-1.44E-03
$\varepsilon_{F,1,2}^r$	-8.28E-06	-3.40E-05	-2.22E-04	-9.56E-04
C	1.94	1.86	1.88	1.96

On note que dans ce cas le coefficient de couplage C est proche de 2 et reste assez stable. Sa variation d'environ 5% en fonction des différentes valeurs prises par α provient des composantes non quadratiques (d'ordre plus élevé) de l'erreur.

6.3 Prise en compte de la variation de la matrice \mathbf{P}_{VV}

Dans le cas général, il faut évaluer la variation de la matrice des probabilités de collision lorsque la section efficace totale est perturbée. Un calcul complet de la matrice \mathbf{P}_{VV} pour chacune des perturbations serait très lourd.

6.3.1 Approximation d'ordre 0

En s'inspirant de Takahashi (Takahashi, 1966), il est possible d'évaluer la variation de la matrice $\mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}$ à partir des composantes d'ordre élevé dans le développement du flux dans la base des harmoniques sphériques. Nous avons:

$$\vec{\phi} = \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}(\vec{\Sigma}) \cdot \mathbf{R}_\lambda \cdot \vec{\phi}$$

Considérons une variation $-\delta\vec{\Sigma}$ de la section efficace totale. Pour conserver le flux, le terme source doit être modifié. Nous pouvons écrire (Eq. 1.12):

$$\vec{\phi} = \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}(\vec{\Sigma} - \delta\vec{\Sigma}) \cdot (\mathbf{R}_\lambda - \delta\mathbf{\Sigma}) \cdot \vec{\phi} - \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}^{0 \leftarrow m}_{0 \leftarrow l}(\vec{\Sigma} - \delta\vec{\Sigma}) \cdot \delta\mathbf{\Sigma} \cdot \vec{\psi}_l^m \quad (6.7)$$

Les termes $\vec{\psi}_l^m$ sont obtenus par:

$$\vec{\psi}_l^m = \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}^{m \leftarrow 0}_{l \leftarrow 0}(\vec{\Sigma}) \cdot \mathbf{R}_\lambda \cdot \vec{\phi}$$

Si on ne considère que la composante d'ordre 0 dans la relation (6.7), cette dernière se simplifie pour donner:

$$\vec{\phi} = \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}(\vec{\Sigma} - \delta\vec{\Sigma}) \cdot (\mathbf{R}_\lambda - \delta\mathbf{\Sigma}) \cdot \vec{\phi}$$

Cela revient à transférer la perturbation sur la section efficace totale sur le terme diagonal de la matrice des sections efficaces de diffusion:

$$\delta\vec{\Sigma} \equiv -\delta\mathbf{\Sigma}^{g \leftarrow g} \quad (6.8)$$

En appliquant ce transfert (Eq. 6.8) sur le flux dans l'état perturbé $\vec{\phi}_p$, on se ramène

à une perturbation où la matrice $\mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}$ est constante. Cette méthode présente une forte analogie avec la méthode SIGMA qui est utilisée pour prendre en compte le terme de fuite homogène $\vec{d}B^2$ (section 4.3.2). Une telle approximation est valable si, dans le développement en harmoniques sphériques du flux, le terme fondamental est très supérieur aux autres termes (Eq. 4.9).

On obtient les formules de perturbation approximatives suivantes:

$$\delta R = \langle \delta \vec{\Sigma}, \vec{\phi} \rangle + \langle \vec{\phi}^+, \delta \vec{S}' - (\delta \mathbf{A}' + \delta \mathbf{\Sigma}) \cdot \vec{\phi} \rangle \quad (6.9)$$

$$\delta \lambda = \frac{\langle \vec{\phi}^+, (\delta \mathbf{A}' + \delta \mathbf{\Sigma}) \cdot \vec{\phi} \rangle - \lambda \langle \vec{\phi}^+, \delta \mathbf{F}' \cdot \vec{\phi} \rangle}{\langle \vec{\phi}^+, \mathbf{F}'_p \cdot \vec{\phi} \rangle} \quad (6.10)$$

$$\delta G = \frac{\langle \delta \vec{\Sigma}_i, \vec{\phi} \rangle}{\langle \vec{\Sigma}_j, \vec{\phi} \rangle} + \langle \vec{\Gamma}^+, (\delta \lambda \mathbf{F}'_p + \lambda \delta \mathbf{F}' - (\delta \mathbf{A}' + \delta \mathbf{\Sigma})) \cdot \vec{\phi} \rangle \quad (6.11)$$

Considérons une perturbation caractérisée par un état de référence ϕ et un état perturbé ϕ_p . Il est possible de définir un état *équivalent* à l'état perturbé (auquel on associe l'indice e) ϕ_e . Cet état est caractérisé par des sections efficaces identiques à celles de l'état perturbé, à l'exception de

On peut associer à la théorie des perturbations une erreur quadratique si la variation des opérateurs ($\delta\mathbf{A}$, $\delta\mathbf{F}$ et $\delta\vec{S}$) utilisés dans les formules (3.1), (3.2) et (3.3) est connue de façon exacte. Dans le cas où nous considérons le transfert de la perturbation sur Σ vers la section $\Sigma^{g \leftarrow g}$, les formules précédentes se ramènent aux relations: (6.1), (6.2) et (6.3). L'erreur associée au transfert ε_F^{tr} proviendra du terme:

$$\varepsilon_F^{tr} \propto \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}_0}^{0 \leftarrow m} (\vec{\Sigma} - \delta\vec{\Sigma}) \cdot \delta\mathbf{\Sigma} \cdot \vec{\psi}_{p,l}^m$$

Sous cette forme, il apparaît clairement que les formules de perturbation mises en place induisent une erreur linéaire. En effet, elles sont directement proportionnelles aux composantes d'ordre élevé ($l \geq 1$) du flux. On s'attend donc à avoir une faible composante linéaire qui, nous l'espérons, ne changera pas l'ordre de grandeur des erreurs obtenues dans la plage de validité de la méthode. Des calculs de perturbation sur les sections efficaces de fission, diffusion et totale de l'assemblage "Small Cell" (tableau 6.2 avec $\alpha = \alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3$) ont permis d'évaluer la composante de l'erreur associée au transfert, ε_F^{tr} , en fonction du paramètre α . En effectuant une perturbation *exacte* (en utilisant le flux perturbé), l'erreur ε_F^p prend en compte l'erreur imputable au transfert de section efficace ainsi que les erreurs numériques, on a alors: $\varepsilon_F^p = \varepsilon_F^{tr} + \varepsilon_F^n$.

Dans le cas de l'assemblage "Small Cell", les tableaux (6.14) et (6.15) permettent d'affirmer que l'erreur due au transfert de section efficace ainsi que l'erreur numérique sont très faibles devant l'erreur de perturbation.

Tableau 6.14 "Small Cell": erreur ε_F^r

α	k_{eff}	$\nu\Sigma_f$	Σ	Σ_s
1.00E-03	-1.53E-05	-2.62E-05	-6.31E-06	-7.02E-06
2.00E-03	-6.19E-05	-1.05E-04	-2.60E-05	-2.88E-05
5.00E-03	-4.00E-04	-6.65E-04	-1.68E-04	-1.85E-04
1.00E-02	-1.69E-03	-2.75E-03	-6.96E-04	-7.70E-04

Tableau 6.15 "Small Cell": erreur $\varepsilon_F^p = \varepsilon_F^{tr} + \varepsilon_F^n$

α	k_{eff}	$\nu\Sigma_f$	Σ	Σ_s
1.00E-03	-1.13E-07	-3.84E-07	2.49E-07	2.62E-07
2.00E-03	-3.38E-07	-6.94E-07	4.99E-07	4.58E-07
5.00E-03	-1.00E-06	-2.16E-06	1.06E-06	1.18E-06
1.00E-02	-1.57E-06	-3.16E-06	2.62E-06	2.75E-06

Comme nous l'avons vu au tableau (6.6), la composante numérique de l'erreur est très faible. En la négligeant, il nous sera possible d'identifier les données du tableau (6.15) à l'erreur due au transfert de section efficace: ε_F^{tr} .

Nous avons effectué le même type de calcul pour un assemblage REP, en perturbant d'un facteur α la température de divers matériaux (tableau 6.3). Les tableaux (6.17) et (6.18) permettent d'affirmer que l'assemblage REP et l'assemblage "Small Cell" ont un comportement de même nature: l'erreur due au transfert de section efficace ainsi que l'erreur numérique sont très faibles devant l'erreur globale.

Tableau 6.16 REP 17x17: variation relative $\delta \bar{F}_r$

α	k_{eff}	$\nu \Sigma_f$	Σ	Σ_s
5.00E-02	8.39E-04	-1.88E-03	6.15E-04	7.30E-04
1.00E-01	1.70E-03	-3.81E-03	1.18E-03	1.41E-03
2.00E-01	3.54E-03	-7.70E-03	2.57E-03	3.05E-03
5.00E-01	1.02E-02	-1.88E-02	7.13E-03	8.38E-03

Tableau 6.17 REP 17x17: erreur ε_F^r

α	k_{eff}	$\nu \Sigma_f$	Σ	Σ_s
5.00E-02	3.81E-07	-3.47E-05	8.04E-06	9.53E-06
1.00E-01	-1.10E-05	-1.51E-04	4.73E-05	5.39E-05
2.00E-01	-7.74E-05	-6.41E-04	2.05E-04	2.32E-04
5.00E-01	-5.81E-04	-3.71E-03	1.14E-03	1.29E-03

Tableau 6.18 REP 17x17: erreur $\varepsilon_F^p = \varepsilon_F^r + \varepsilon_F^n$

α	k_{eff}	$\nu \Sigma_f$	Σ	Σ_s
5.00E-02	6.25E-06	9.85E-06	-6.41E-06	-6.82E-06
1.00E-01	1.20E-05	1.86E-05	-1.23E-05	-1.30E-05
2.00E-01	2.08E-05	3.17E-05	-1.95E-05	-2.06E-05
5.00E-01	3.61E-05	5.10E-05	-2.51E-05	-2.65E-05

Enfin nous avons répété le même type de calcul pour une cellule CANDU: nous avons perturbé les densités des matériaux en fonction de α (tableau 6.4).

Les tableaux (6.20) et (6.21) permettent de comparer les erreurs associées à la méthode et celles qui sont imputables au transfert.

Tableau 6.19 CANDU: variation relative $\delta \bar{F}_r$

α	k_{eff}	$\nu \Sigma_f$	Σ	Σ_s
1.00E-02	-1.91E-03	-7.34E-03	-9.49E-03	-9.52E-03
2.00E-02	-3.85E-03	-1.47E-02	-1.90E-02	-1.90E-02
5.00E-02	-9.87E-03	-3.67E-02	-4.74E-02	-4.76E-02
1.00E-01	-2.06E-02	-7.34E-02	-9.49E-02	-9.52E-02

Tableau 6.20 CANDU: erreur ε_F^r

α	k_{eff}	$\nu \Sigma_f$	Σ	Σ_s
1.00E-02	1.04E-04	-1.19E-03	1.50E-04	1.62E-04
2.00E-02	2.19E-04	-2.31E-03	2.92E-04	3.17E-04
5.00E-02	6.31E-04	-5.21E-03	6.71E-04	7.29E-04
1.00E-01	1.54E-03	-8.52E-03	1.14E-03	1.24E-03

Tableau 6.21 CANDU: erreur $\varepsilon_F^p = \varepsilon_F^{tr} + \varepsilon_F^n$

α	k_{eff}	$\nu \Sigma_f$	Σ	Σ_s
1.00E-02	1.03E-04	-1.22E-03	1.53E-04	1.66E-04
2.00E-02	2.16E-04	-2.43E-03	3.06E-04	3.31E-04
5.00E-02	6.18E-04	-5.97E-03	7.57E-04	8.21E-04
1.00E-01	1.50E-03	-1.16E-02	1.49E-03	1.61E-03

Dans ce cas, il est clair que la composante associée aux composantes d'ordre élevé n'est pas négligeable. On note que l'erreur associée au transfert représente l'essentiel de l'erreur globale. Pour une cellule CANDU, les composantes d'ordre élevé dans le développement du flux ($l \geq 1$) ne sont pas négligeables, la composante associée au courant est nettement plus élevée dans le cas du CANDU que dans celui du REP. Physiquement, cette différence provient des effets d'anisotropie géométrique, le combustible étant localisé au centre de la cellule et entouré d'un modérateur fortement diffusif.

6.3.2 Prise en compte des ordres élevés

Dans le cas de la cellule CANDU que nous avons étudiée, les composantes d'ordre élevé ($l \geq 1$) ne peuvent être négligées sans affecter lourdement la méthode.

Une première approche consisterait à développer la relation (6.7) jusqu'au premier ordre, soit:

$$\vec{\phi} \sim \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \left(\vec{\Sigma} - \delta\vec{\Sigma} \right) \cdot (\mathbf{R}_\lambda - \delta\mathbf{\Sigma}) \cdot \vec{\phi} - \sum_{m=-1}^1 \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}^{0 \leftarrow m} \left(\vec{\Sigma} - \delta\vec{\Sigma} \right) \cdot \delta\mathbf{\Sigma} \cdot \vec{\psi}_1^m$$

Le calcul des $\mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}^{m \leftarrow m'} \left(\vec{\Sigma} \right)$ au premier ordre ($l, l' \leq 1$) a été mis en place dans DRAGON pour des calculs avec des conditions aux frontières particulières (Roy, 1991). L'utilisation de ces matrices n'a pas été envisagée car leur calcul reste lourd à mettre en place (compte tenu des intégrations en trois dimensions). Nous avons plutôt réécrit l'équation (6.7) sous la forme:

$$\vec{\phi} = \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \left(\vec{\Sigma} - \delta\vec{\Sigma} \right) \cdot (\mathbf{R}_\lambda - \delta\mathbf{\Sigma}) \cdot \vec{\phi} - \mathbf{M}_\phi \cdot \delta\vec{\Sigma} \quad (6.12)$$

En supposant la matrice \mathbf{M}_ϕ connue, il ne serait pas nécessaire de calculer la variation de la matrice $\mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}$ pour chacune des perturbations considérées.

Calcul de la matrice \mathbf{M}_ϕ

La matrice \mathbf{M}_ϕ est calculée pour une petite perturbation de la section efficace totale au voisinage de l'état de référence:

$$\begin{aligned}\vec{\phi} &= \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}(\vec{\Sigma}) \cdot \mathbf{R}_\lambda \vec{\phi} \\ \vec{\phi} &= \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}(\vec{\Sigma} - \delta\vec{\Sigma}) \cdot (\mathbf{R}_\lambda - \delta\mathbf{\Sigma}) \cdot \vec{\phi} - \mathbf{M}_\phi \cdot \delta\vec{\Sigma}\end{aligned}$$

En écrivant $\mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}(\vec{\Sigma} - \delta\vec{\Sigma}) = \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}(\vec{\Sigma}) - \delta\mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}$, on obtient:

$$\mathbf{M}_\phi \cdot \delta\vec{\Sigma} = - \left[\mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}(\vec{\Sigma} - \delta\vec{\Sigma}) \cdot \delta\mathbf{\Sigma} + \delta\mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \mathbf{R} \right] \cdot \vec{\phi} \quad (6.13)$$

La matrice \mathbf{M}_ϕ est une matrice diagonale par blocs, elle comporte un bloc par groupe d'énergie. Chacun de ces G blocs est de taille $N \times M$, où N représente le nombre de régions et M celui des matériaux.

Perturbons pour chacun des groupes et pour un mélange j donné ($1 \leq j \leq M$) la section efficace totale:

$$\forall g : \delta\Sigma_j^g = \alpha \Sigma_j^g$$

La composante $m_{i,j}^g$ de la matrice \mathbf{M}_ϕ est obtenue à partir d'une évaluation numérique de l'équation (6.13):

$$\forall g, i : m_{i,j}^g = \left[\lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{- \left[\mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}(\vec{\Sigma} - \delta\vec{\Sigma}) \cdot \delta\mathbf{\Sigma} + \delta\mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \mathbf{R}_\lambda \right] \cdot \vec{\phi}}{\alpha \Sigma_j^g} \right],$$

Nous avons choisi $\alpha = 10^{-3}$ de façon à ce que le terme $\delta\mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}$ (qui est linéaire en $\delta\vec{\Sigma}$) soit suffisamment excité.

Les composantes de la matrice \mathbf{M}_ϕ sont évaluées colonne par colonne, en effectuant

une perturbation élémentaire de chacun des mélanges.

Formules de perturbation *corrigées*

Les formules de perturbation (6.9) à (6.11) doivent être alors *corrigées* de façon à prendre en compte la composante associée au courant. on obtient alors:

$$\delta R^r = \langle \delta \bar{\Sigma} \cdot \bar{\sigma}_p \rangle + \langle \bar{\sigma}^+ \cdot \delta \bar{S}' - (\delta \mathbf{A}' + \delta \mathbf{\Sigma}) \cdot \bar{\sigma}_p \rangle - \langle \bar{\sigma}^+ \cdot \mathbf{M}_{\sigma_p} \cdot \delta \bar{\Sigma} \rangle \quad (6.14)$$

$$\delta \lambda^r = \frac{\langle \bar{\sigma}^+ \cdot (\delta \mathbf{A}' + \delta \mathbf{\Sigma}) \cdot \bar{\sigma}_p \rangle - \lambda \langle \bar{\sigma}^+ \cdot \delta \mathbf{F}' \cdot \bar{\sigma}_p \rangle + \langle \bar{\sigma}^+ \cdot \mathbf{M}_{\sigma_p} \cdot \delta \bar{\Sigma} \rangle}{\langle \bar{\sigma}^+ \cdot \mathbf{F}'_p \cdot \bar{\sigma}_p \rangle} \quad (6.15)$$

$$\delta G^r = \frac{\langle \delta \bar{\Sigma}_1 \cdot \bar{\sigma}_p \rangle}{\langle \bar{\Sigma}_j \cdot \bar{\sigma}_p \rangle} + \frac{\langle \bar{\Sigma}_j \cdot \bar{\sigma} \rangle}{\langle \bar{\Sigma}_j \cdot \bar{\sigma}_p \rangle} \langle \bar{\Gamma}^+ \cdot (\delta \lambda \mathbf{F}'_p + \lambda \delta \mathbf{F}' - (\delta \mathbf{A}' + \delta \mathbf{\Sigma}) \cdot \bar{\sigma}_p) \rangle \quad (6.16)$$

$$- \frac{\langle \bar{\Sigma}_j \cdot \bar{\sigma} \rangle}{\langle \bar{\Sigma}_j \cdot \bar{\sigma}_p \rangle} \langle \bar{\Gamma}^+ \cdot \mathbf{M}_{\sigma_p} \cdot \delta \bar{\Sigma} \rangle$$

Ici la matrice \mathbf{M}_{σ_p} correspond à la matrice de *correction* calculée pour le flux de l'état perturbé. En remplaçant le flux perturbé $\bar{\sigma}_p$ et la matrice \mathbf{M}_{σ_p} par le flux de l'état de référence $\bar{\sigma}$ et la matrice \mathbf{M}_{σ} , on retrouve une formulation standard.

Pour les assemblages "Small Cell" et REP 17x17, nous avons vu que la composante associée au courant pouvait être négligée. Il s'en suit que l'utilisation des formules de perturbation *corrigées* a peu d'effet sur le calcul de la variation des paramètres intégraux. Les variations et les erreurs associées aux calculs *corrigés* sont présentées dans les tableaux (6.22) à (6.25)

Tableau 6.22 "Small Cell": variation relative $\delta \bar{F}_r$ avec correction

α	k_{eff}	$\nu \Sigma_f$	Σ	Σ_s
1.00E-03	3.94E-03	4.10E-03	1.03E-03	1.07E-03
2.00E-03	7.91E-03	8.20E-03	2.06E-03	2.14E-03
5.00E-03	2.01E-02	2.05E-02	5.15E-03	5.36E-03
1.00E-02	4.11E-02	4.10E-02	1.03E-02	1.07E-02

Tableau 6.23 "Small Cell": erreur ε_r^f avec correction

α	k_{eff}	$\nu \Sigma_f$	Σ	Σ_s
1.00E-03	-1.74E-05	-2.63E-05	-6.68E-06	-7.35E-06
2.00E-03	-6.59E-05	-1.05E-04	-2.67E-05	-2.95E-05
5.00E-03	-4.10E-04	-6.66E-04	-1.69E-04	-1.87E-04
1.00E-02	-1.71E-03	-2.75E-03	-7.00E-04	-7.74E-04

Tableau 6.24 REP 17x17: variation relative $\delta \bar{F}_r$ avec correction

α	k_{eff}	$\nu \Sigma_f$	Σ	Σ_s
5.00E-02	8.33E-04	-1.89E-03	6.22E-04	7.38E-04
1.00E-01	1.69E-03	-3.83E-03	1.20E-03	1.43E-03
2.00E-01	3.52E-03	-7.74E-03	2.60E-03	3.08E-03
5.00E-01	1.01E-02	-1.89E-02	7.19E-03	8.44E-03

Tableau 6.25 REP 17x17: erreur ε_F^r avec correction

α	k_{eff}	$\nu\Sigma_f$	Σ	Σ_s
5.00E-02	-5.87E-06	-4.49E-05	1.51E-05	1.69E-05
1.00E-01	-2.33E-05	-1.71E-04	6.19E-05	6.92E-05
2.00E-01	-1.03E-04	-6.81E-04	2.32E-04	2.61E-04
5.00E-01	-6.50E-04	-3.81E-03	1.20E-03	1.36E-03

Pour l'assemblage "Small Cell", on note que la *correction* n'a pratiquement aucun effet. Cela s'observe en comparant les tableaux (6.14) et (6.23).

Dans le cas de l'assemblage REP 17x17, la *correction* a tendance à nuire à la méthode (tableaux 6.17 et 6.25). Cela correspond au cas où les erreurs associées aux composantes d'ordre élevé et à la variation des flux sont de signe contraire. Ce qui implique que, si on réduit l'erreur associée aux composantes d'ordre élevé, l'erreur globale va croître.

Enfin, pour la cellule CANDU, la composante associée aux courants est nettement plus importante. On s'attend donc à ce que le formules de perturbation *corrigées* améliorent sensiblement la méthode. Les tableaux (6.26) et (6.27) présentent les variations des paramètres intégraux ainsi que les erreurs des formules de perturbation pour la cellule CANDU avec *correction*.

Tableau 6.26 CANDU: variation relative $\delta\bar{F}_r$ avec correction

α	k_{eff}	$\nu\Sigma_f$	Σ	Σ_s
1.00E-02	-2.01E-03	-6.11E-03	-9.64E-03	-9.69E-03
2.00E-02	-4.05E-03	-1.22E-02	-1.93E-02	-1.94E-02
5.00E-02	-1.04E-02	-3.05E-02	-4.82E-02	-4.85E-02
1.00E-01	-2.17E-02	-6.11E-02	-9.64E-02	-9.69E-02

Tableau 6.27 CANDU: erreur ε_F^r avec correction

α	k_{eff}	$\nu\Sigma_f$	Σ	Σ_s
1.00E-02	4.34E-06	3.54E-05	-4.24E-06	-4.50E-06
2.00E-02	1.89E-05	1.44E-04	-1.60E-05	-1.70E-05
5.00E-02	1.22E-04	9.18E-04	-9.91E-05	-1.05E-04
1.00E-01	4.89E-04	3.74E-03	-4.00E-04	-4.25E-04

Les relations (6.14), (6.15) et (6.16) ainsi *corrigées* permettent de prendre en compte approximativement la composante d'ordre 1 dans le développement en harmonique du flux. En comparant les erreurs ε_F^r avec ou sans correction présentées dans les tableaux (6.20) et (6.27), on note que le gain en précision est appréciable (un facteur de l'ordre de 50 pour $\alpha = 10^{-2}$). Toutefois, la méthode conserve une composante linéaire associée à l'erreur sur le calcul de la matrice \mathbf{M} . Dans ce qui suit, nous utiliserons les formules de perturbation *corrigées* uniquement pour l'assemblage CANDU.

Afin de pouvoir qualifier la méthode, les graphiques (6.3), (6.4) et (6.5) présentent les ratios erreur-variation pour les fonctionnelles d'intérêt.

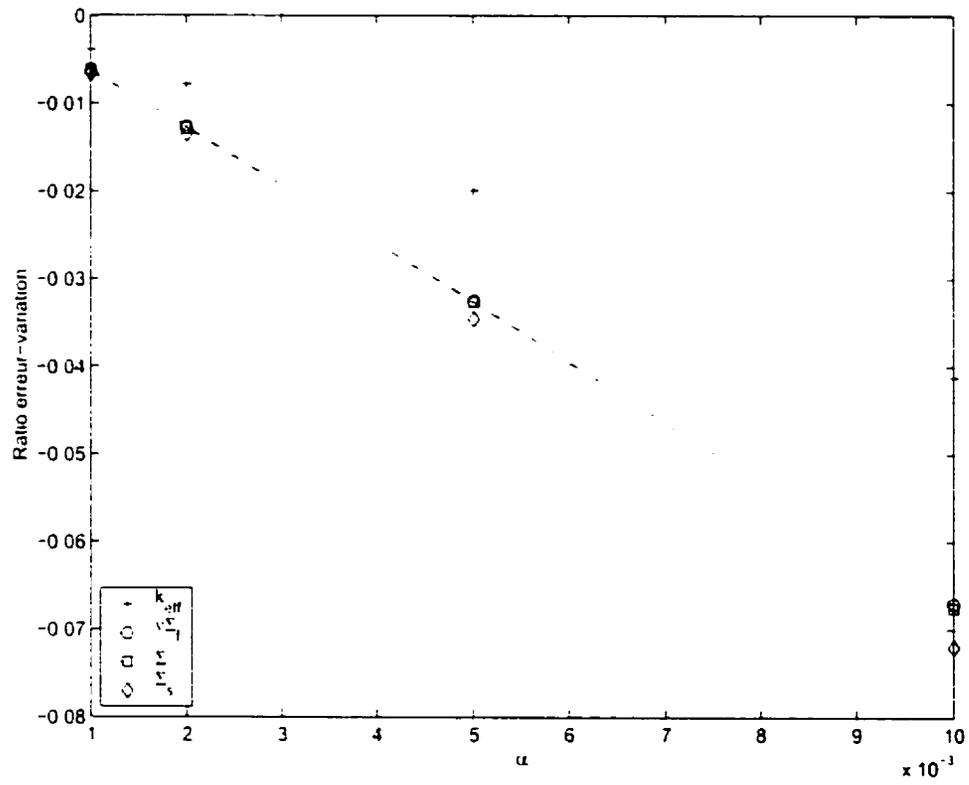


Figure 6.3 "Small Cell": ratio erreur-variation

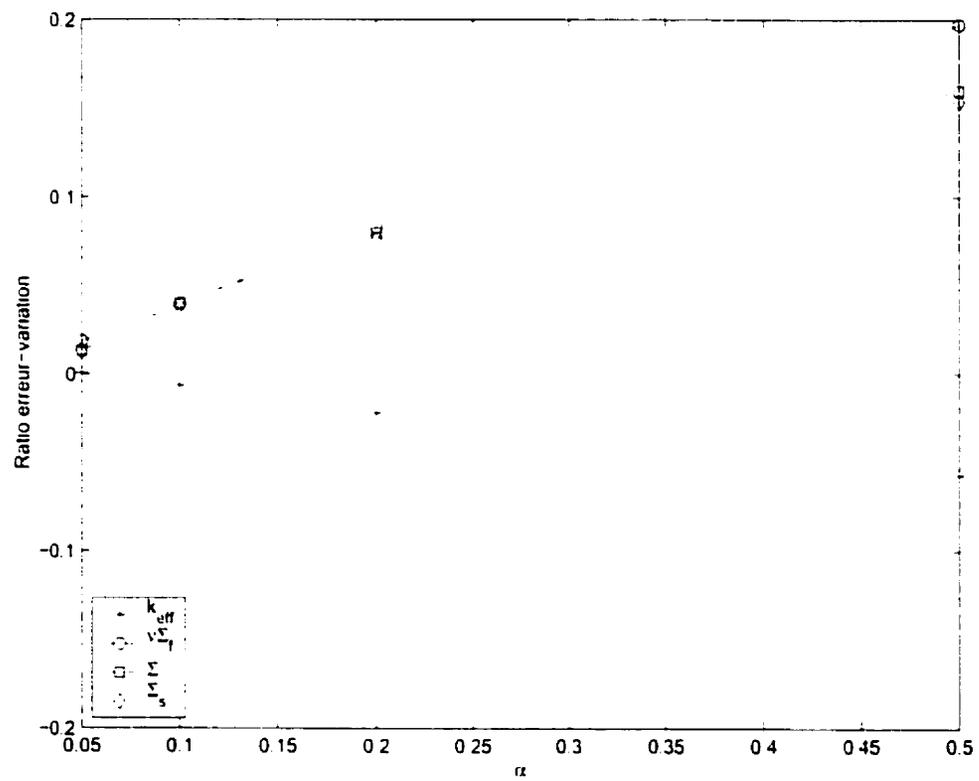


Figure 6.4 REP 17x17: ratio erreur-variation

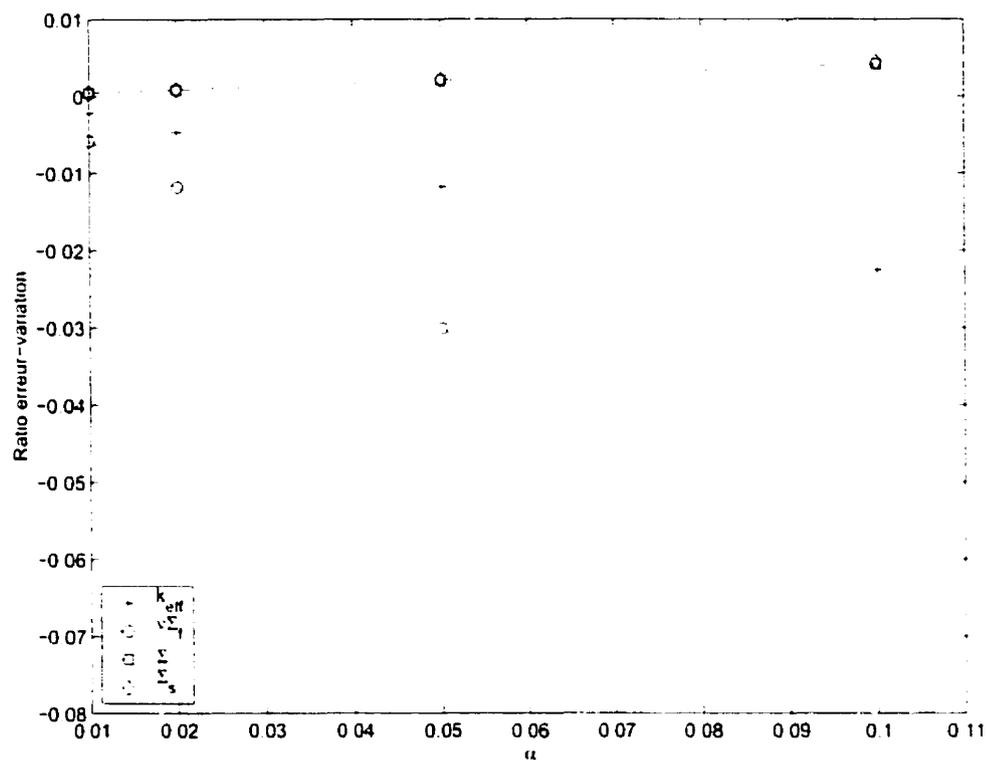


Figure 6.5 CANDU: ratio erreur-variation

On note que dans le cas de l'assemblage "Small Cell" et de la cellule CANDU, le type de comportement est analogue. Lorsqu'on arrive près de l'erreur maximale, le ratio erreur-variation reste inférieur à 10%, tandis que dans le cas de l'assemblage REP 17x17, ce ratio atteint les 20%. La perturbation effectuée sur l'assemblage REP 17x17 est une perturbation en température qui a un effet nettement plus marqué sur les groupes thermiques. Cette perturbation étant plus *locale*, au sens énergétique, on s'attend à ce que la variation sur les termes intégraux soit, pour une erreur donnée, plus faible. Si pour une perturbation donnée, la variation des paramètres intégraux reste faible, il faut s'assurer que l'erreur elle aussi soit inférieure à la variation. Un critère sur le ratio erreur-variation pourrait être

également appliqué pour déterminer la limite de validité de la méthode. On aurait par exemple:

$$\varepsilon_F^r \leq 10\xi_\phi \quad \text{et} \quad \frac{\varepsilon_F^r}{\delta\bar{F}} \leq 10\%$$

6.4 Analyse stochastique des erreurs

Afin de valider la méthode, il serait intéressant, dans le cas de l'assemblage "Small Cell", de perturber toutes les sections efficaces possibles² et d'analyser pour chacune des fonctionnelles l'erreur obtenue.

Le nombre de propriétés à perturber pour une discrétisation à 2 groupes et 3 régions est de 20 (6 pour la section efficace totale, 2 pour la section de fission et 12 pour la matrice de diffusion). Si, pour chacune de ces propriétés, on envisage 5 perturbations ($\alpha(\%) = \{0.0, 0.1, 0.2, 0.5, 1.0\}$), le nombre total de calculs N sera:

$$N = 5^{20} \sim 9.53.10^{13}$$

Si on estime le temps d'un calcul à une seconde environ, il faudrait de l'ordre de 3 millions d'années pour mener à bien ces tests.

Une autre approche consiste à perturber indépendamment chacune des sections efficaces pour ensuite perturber simultanément toutes les sections efficaces de façon aléatoire. Les figures (6.6) à (6.9) présentent pour les différentes fonctionnelles (k_{eff} , $\nu\Sigma_f$, Σ et Σ_s) les résultats obtenus pour l'ensemble des perturbations indépendantes ainsi que 1000 perturbations aléatoires couplées. Pour les perturbations couplées, le paramètre α correspond à la somme quadratique des α_i associés à chacune des

²Les données à perturber sont présentées dans le fichier d'entrée de DRAGON associé à l'assemblage "Small Cell" (annexe III.2).

perturbations:

$$\alpha^2 = \sum_{i=1}^{20} \alpha_i^2$$

On note que dans tous les cas, le couplage entre les perturbation ne conduit pas à des erreurs très élevées. En effet, l'erreur maximale obtenue dans le cas des perturbations indépendantes n'est pas fréquemment dépassée. Dans le cas de l'assemblage "Small Cell", l'analyse des perturbations indépendantes semble être suffisante pour valider la méthode.

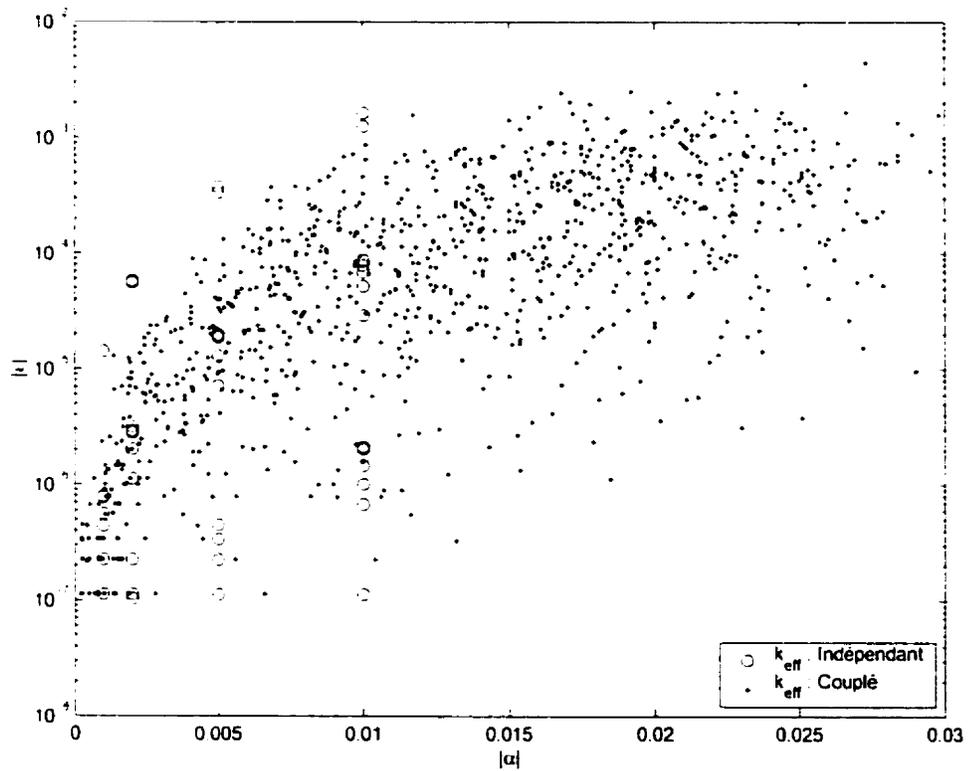


Figure 6.6 "Small Cell": erreur sur le k_{eff} en fonction de α

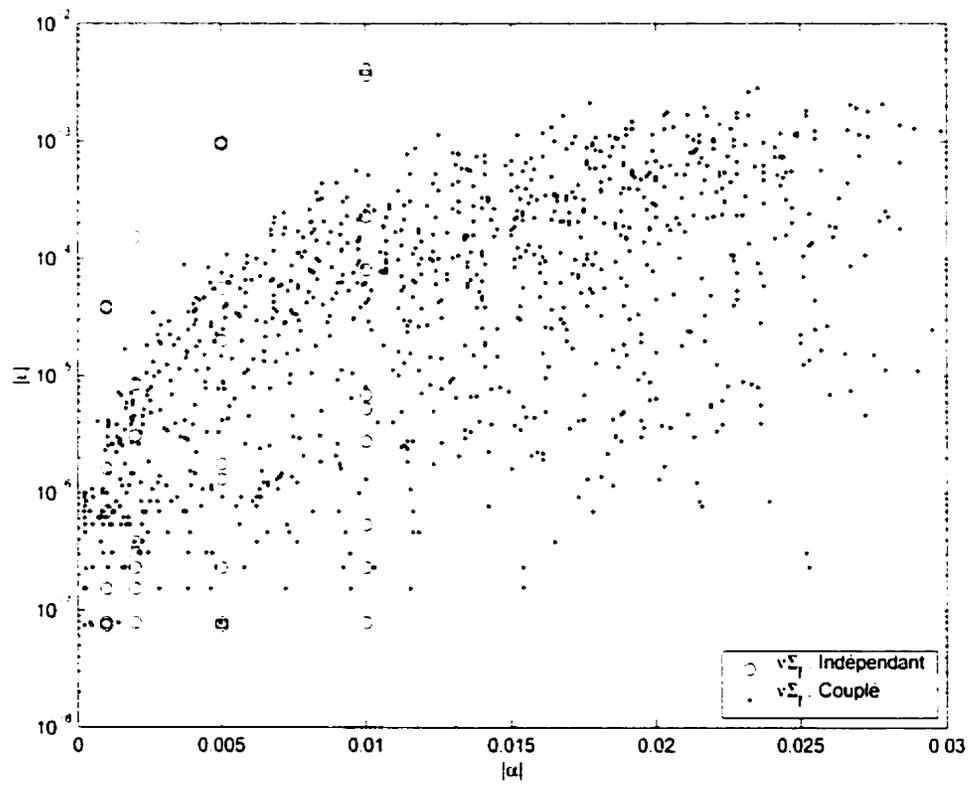


Figure 6.7 "Small Cell": erreur sur $\nu\Sigma_f$ en fonction de α

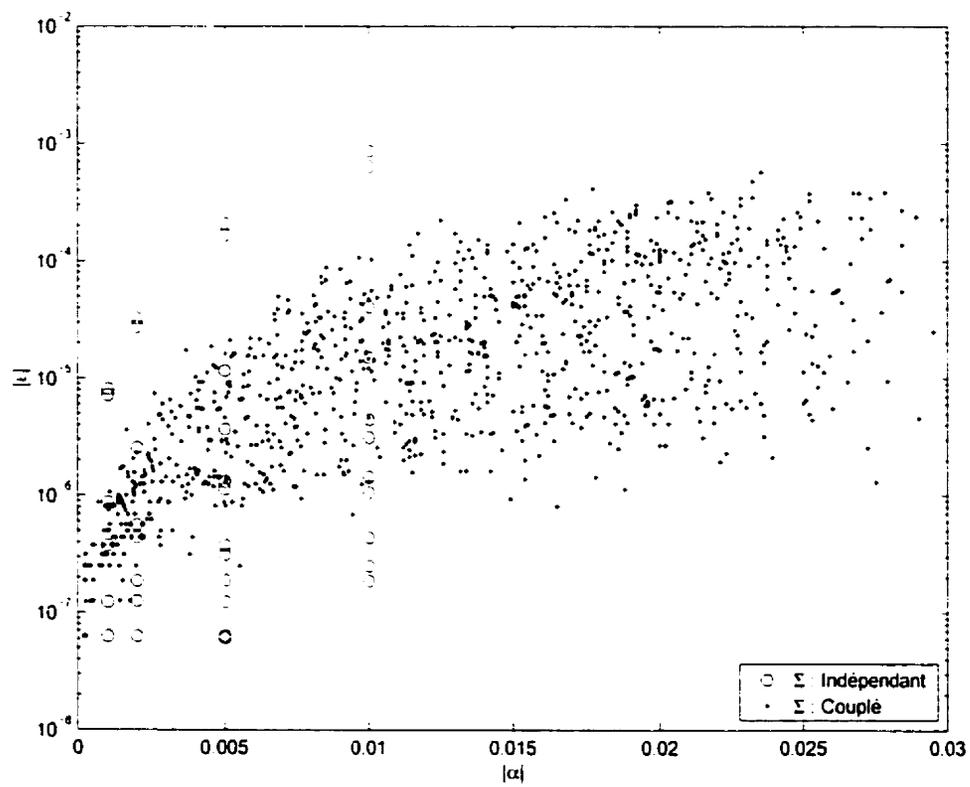


Figure 6.8 "Small Cell": erreur sur Σ en fonction de α

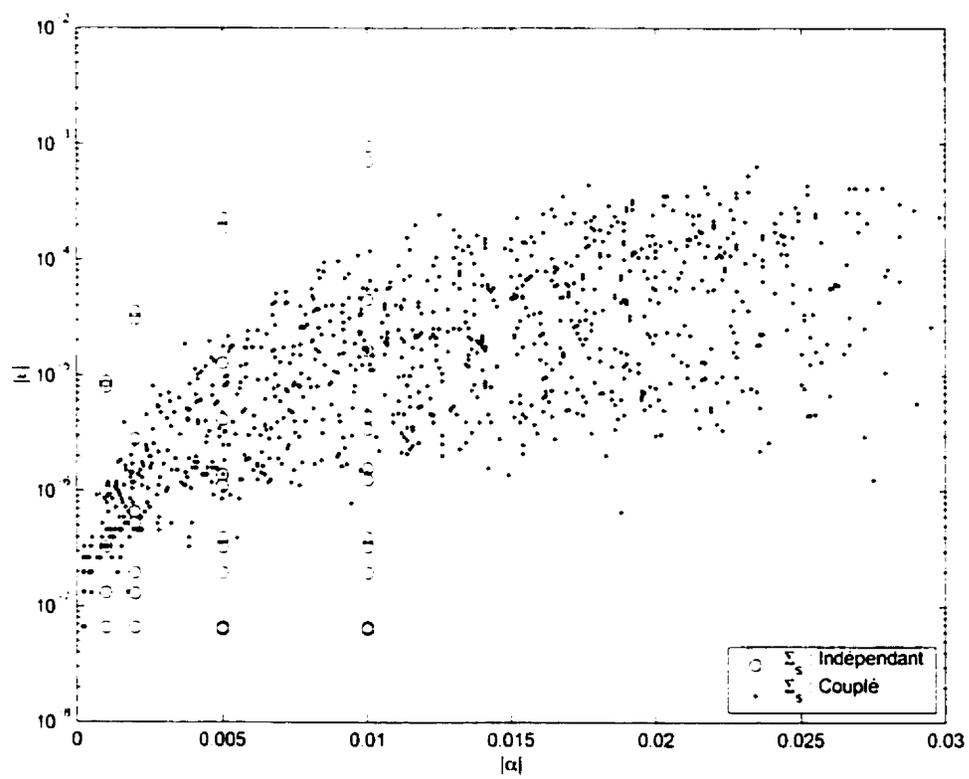


Figure 6.9 "Small Cell": erreur sur Σ_s , en fonction de α

Dans chacun des cas (6.6) à (6.9), les perturbations qui induisent les erreurs les plus élevées sont celles de la région 3 (modérateur) et du groupe thermique, soit respectivement Σ_f^{2+2} et Σ^2 . Pour les mêmes perturbations indépendantes et aléatoires, les figures (6.10) à (6.13) représentent l'erreur en fonction de la variation relative. Il apparaît que les erreurs associées aux fonctionnelles k_{eff} et $\nu\Sigma_f$ sont 5 fois plus élevées que les erreurs associées à Σ et Σ_f . On observe que l'erreur reste en général très inférieure à la variation, le critère $\frac{\varepsilon_F}{\delta F} \leq 10\%$ étant toujours vérifié.

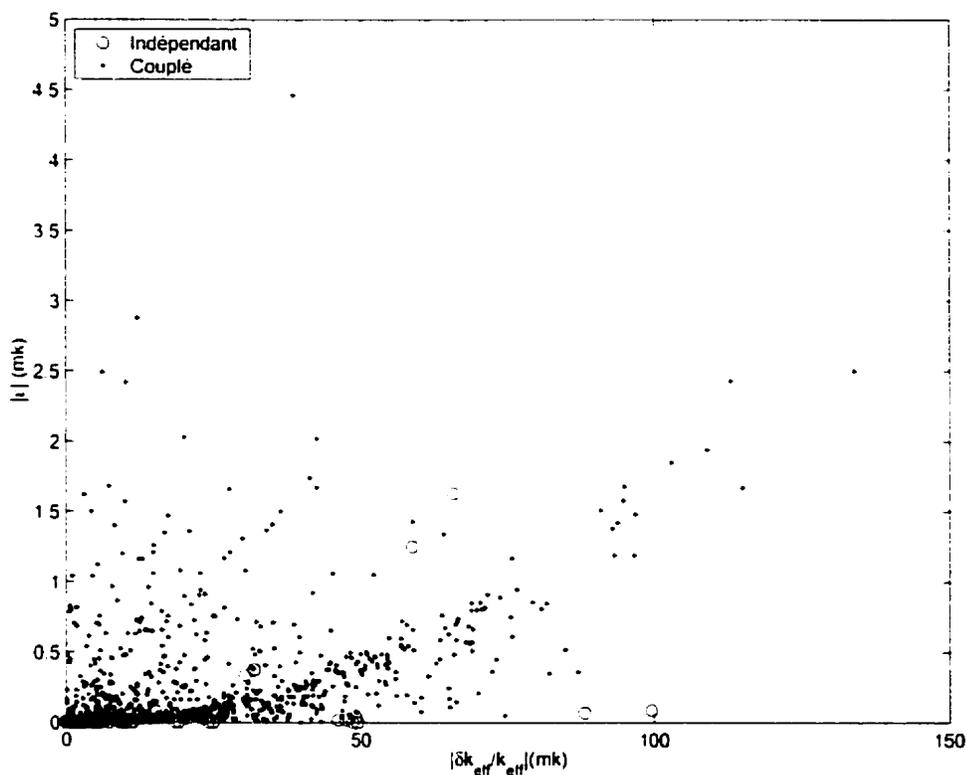


Figure 6.10 "Small Cell": variation stochastique - k_{eff}

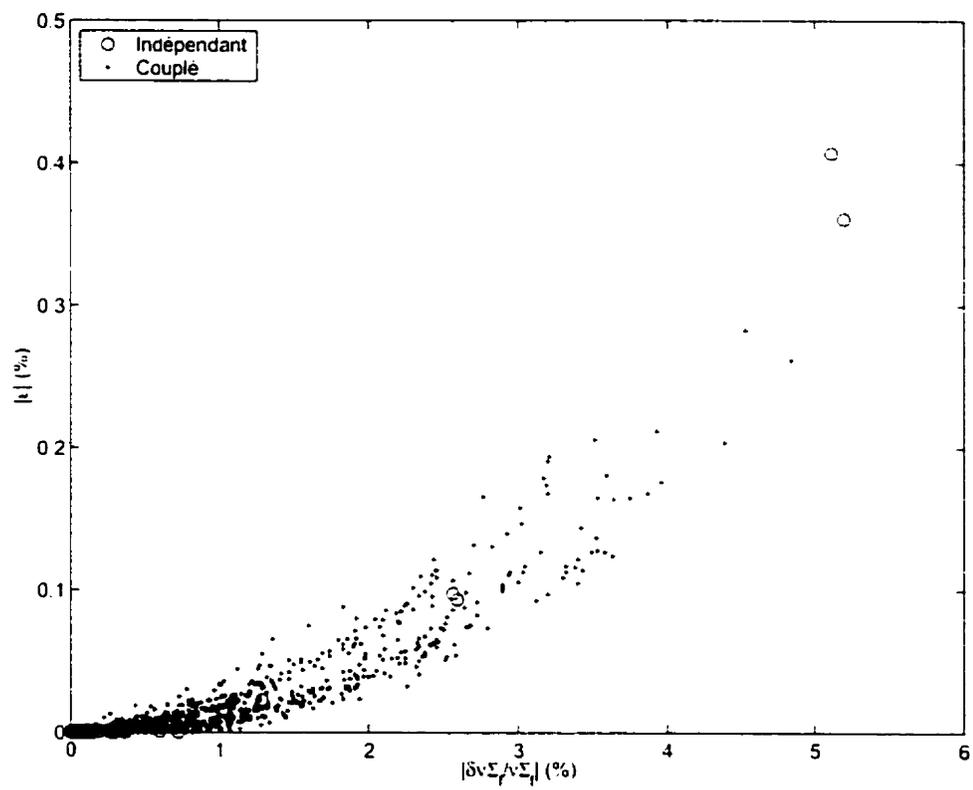


Figure 6.11 "Small Cell": variation stochastique - $\nu\Sigma_f$

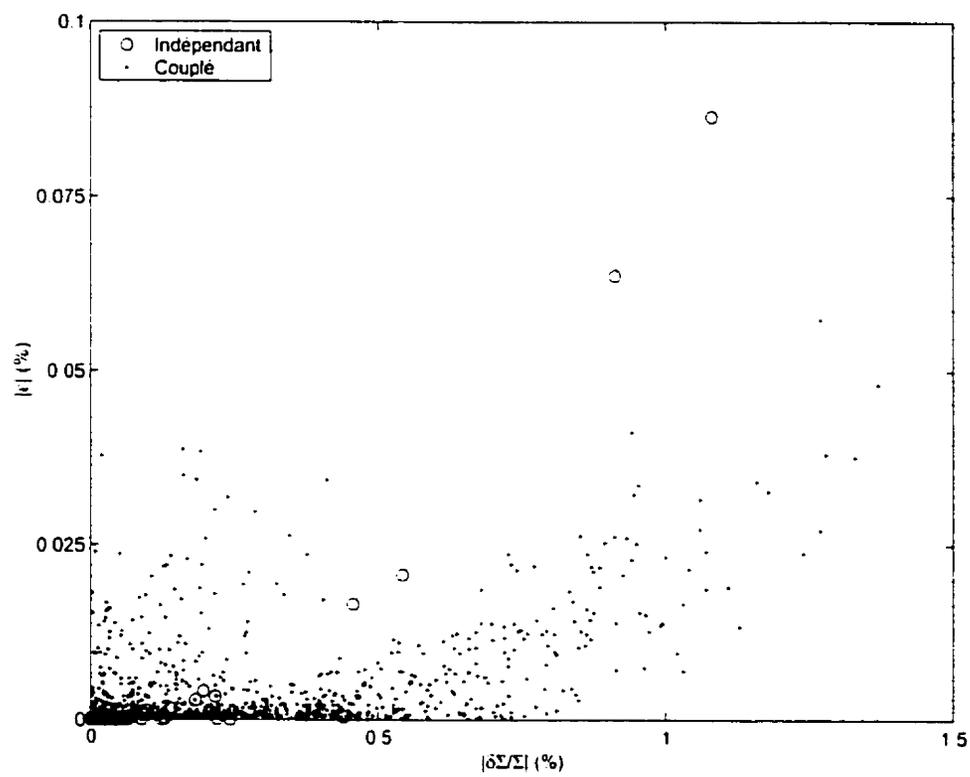


Figure 6.12 "Small Cell": variation stochastique - Σ

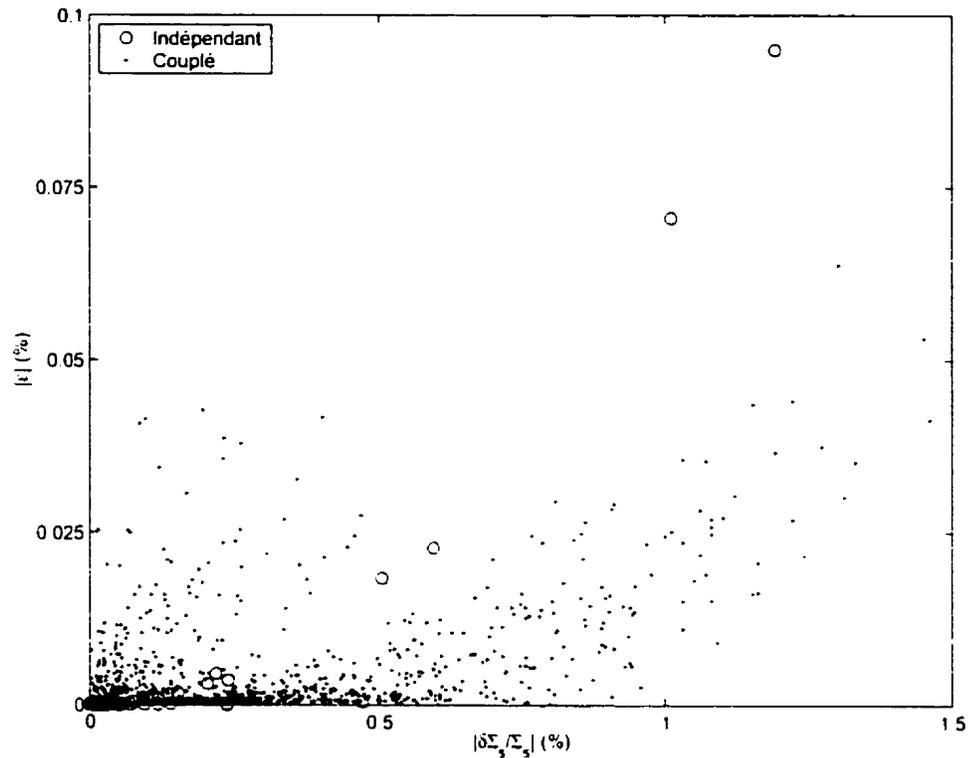


Figure 6.13 "Small Cell": variation stochastique - Σ_s

Pour l'assemblage REP 17x17, nous avons perturbé la densité de l'eau pour chacun des mélanges qui en contenait³. De plus, nous avons perturbé la densité de U^{235} dans le mélange correspondant au combustible. Cela nous a permis de considérer 6 perturbations indépendantes avec $(\alpha(\%) = \{0, 1, 2, 5, 10\})$. Les figures (6.14) à (6.17) présentent pour les différentes fonctionnelles (k_{eff} , $\nu\Sigma_f$, Σ et Σ_s) les résultats obtenus pour l'ensemble des perturbations indépendantes ainsi que 400 perturbations aléatoires couplées. Là encore, on note que le couplage entre les perturbations ne conduit pas à des erreurs très élevées. L'erreur maximale obtenue dans le cas

³Les données à perturber sont présentées dans le fichier d'entrée de DRAGON associé à l'assemblage REP 17x17 (annexe III.2).

des perturbations indépendantes n'est pas fréquemment dépassée. Ici, on note que l'erreur associée à $\nu\Sigma_f$ est trois fois plus grande que l'erreur associée aux autres fonctionnelles. Là encore, le critère $\frac{\varepsilon_F}{\delta F} \leq 10\%$ est toujours vérifié.

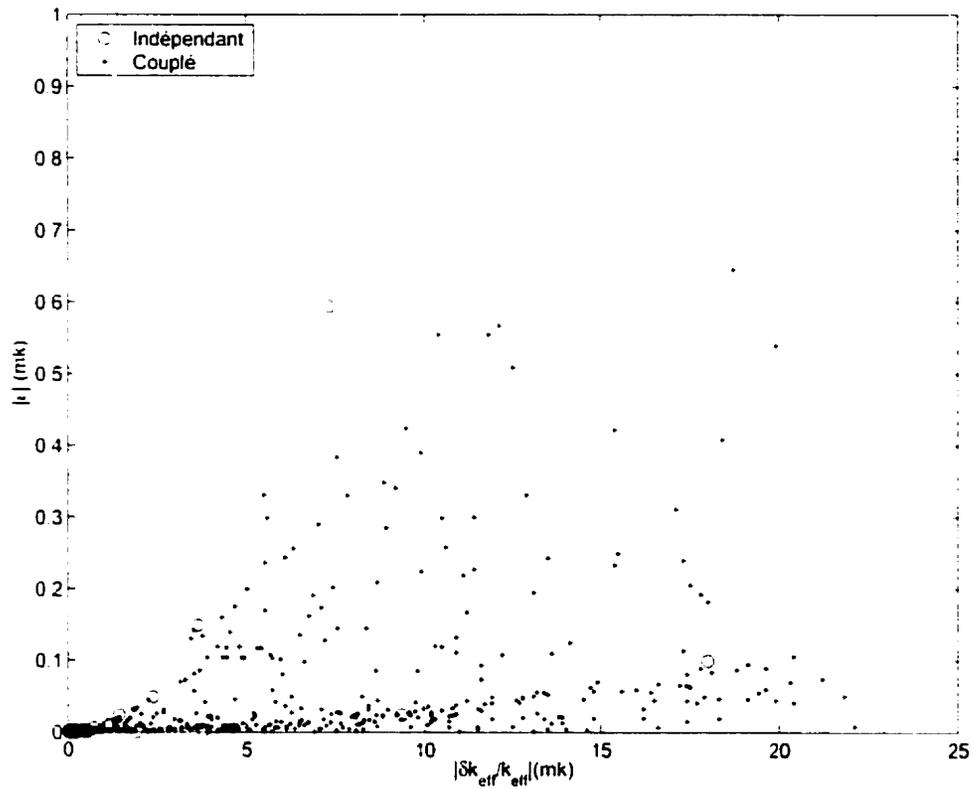


Figure 6.14 REP 17x17: variation stochastique - k_{eff}

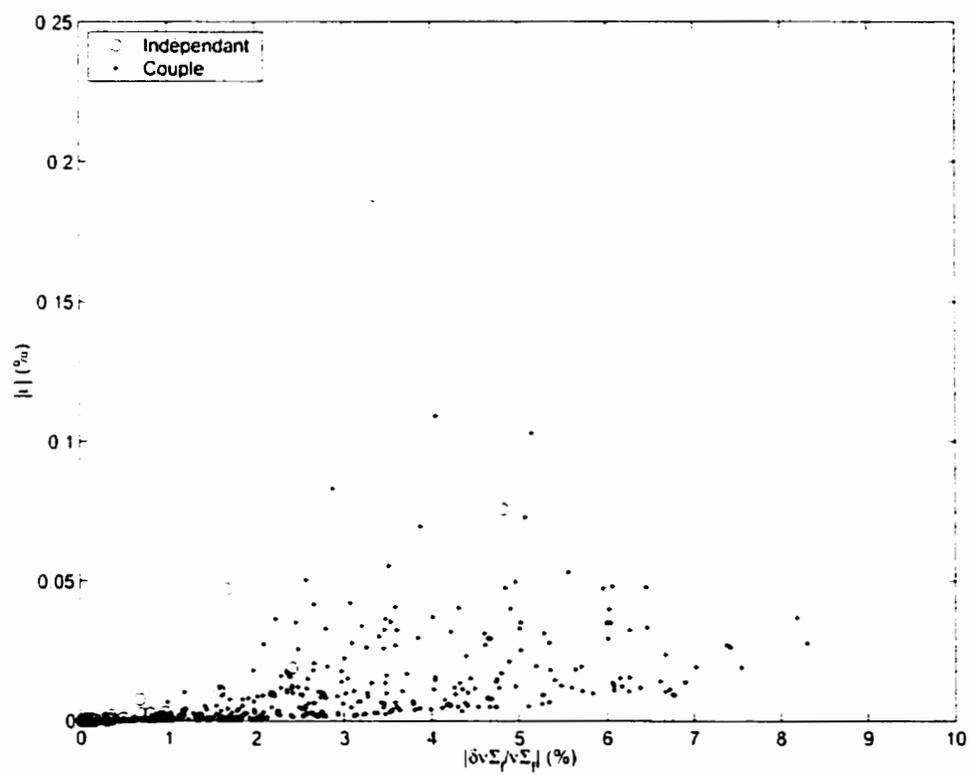


Figure 6.15 REP 17x17: variation stochastique - $\nu\Sigma_f$

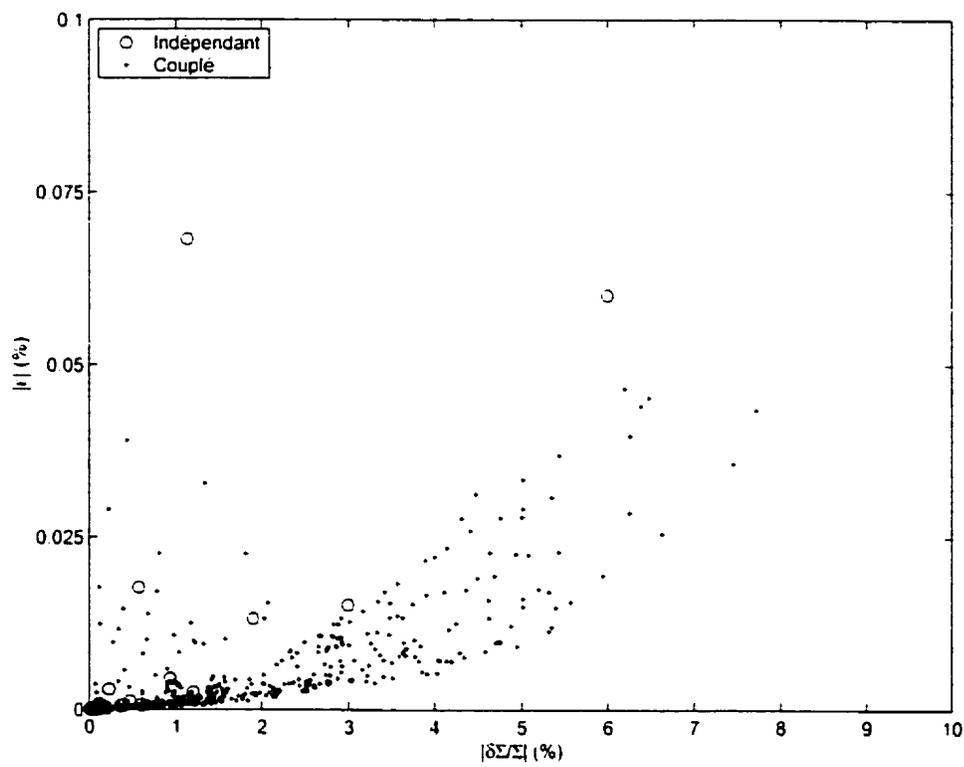


Figure 6.16 REP 17x17: variation stochastique - Σ

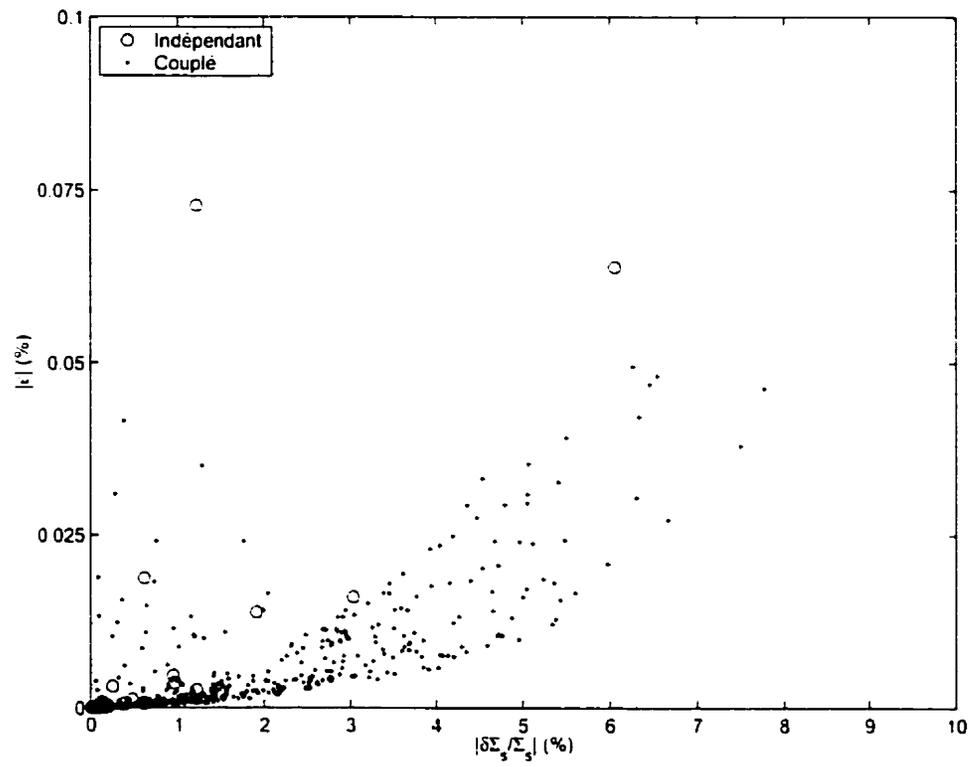


Figure 6.17 REP 17x17: variation stochastique - Σ_s

Enfin, dans le cas de la cellule CANDU, nous avons perturbé l'enrichissement en U^{235} pour des valeurs comprises entre 0.4%(WT) et 0.8%(WT), pour les 4 mélanges associés au combustible⁴. Les graphes (6.18) à (6.21) présentent les erreurs en fonction de la variation obtenue pour des perturbations (avec correction) indépendantes et 400 perturbations aléatoires couplées. Les erreurs associées à $\nu\Sigma_f$ et k_{eff} sont respectivement 50 et 5 fois plus élevées que les erreurs associées aux sections efficaces homogénéisées Σ et Σ_s . De plus, le critère $\frac{\varepsilon_F^r}{\delta F} \leq 10\%$ est toujours vérifié.

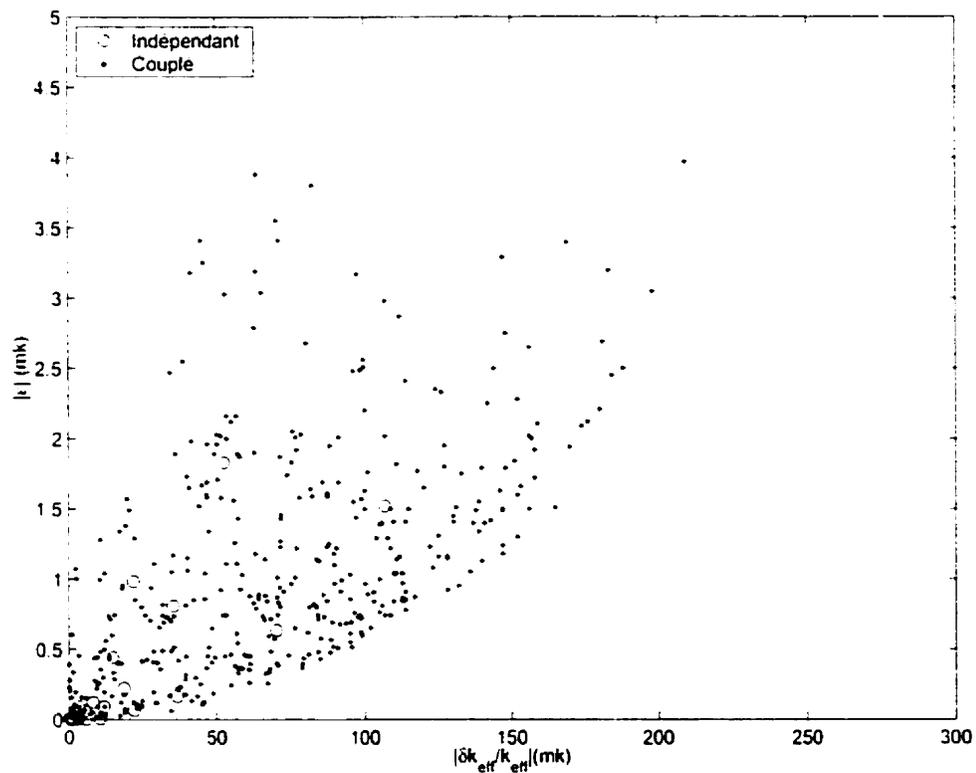


Figure 6.18 CANDU: variation stochastique - k_{eff}

⁴Les données à perturber sont présentées dans le fichier d'entrée de DRAGON associé à la cellule CANDU (annexe III.2).

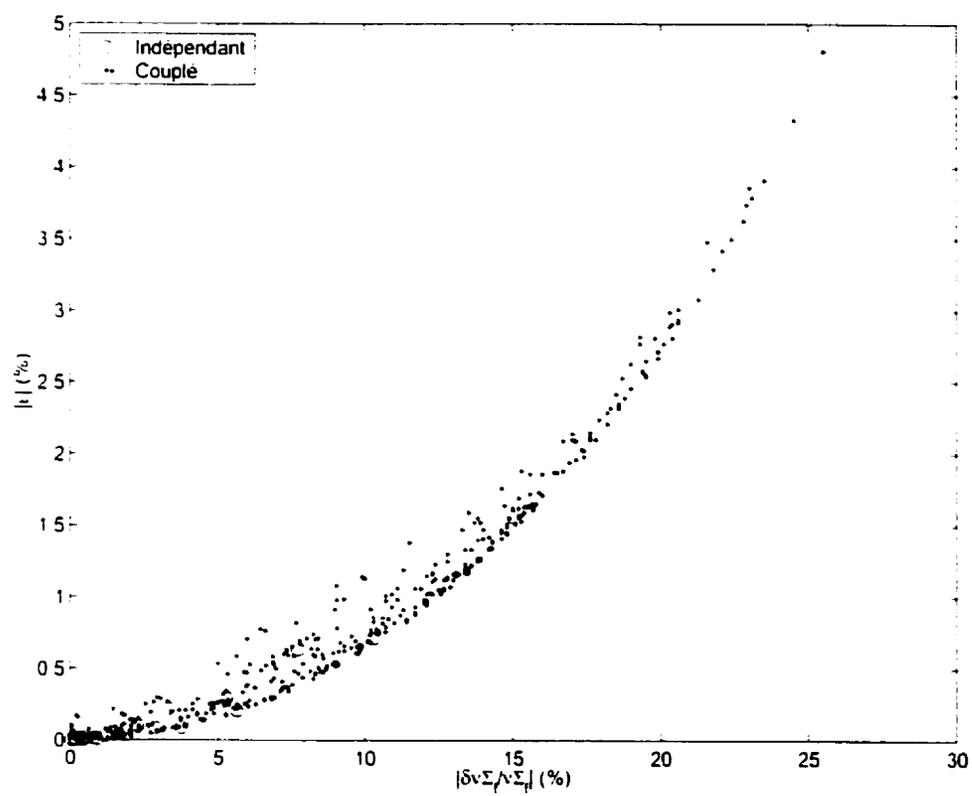


Figure 6.19 CANDU: variation stochastique - $\nu\Sigma_f$

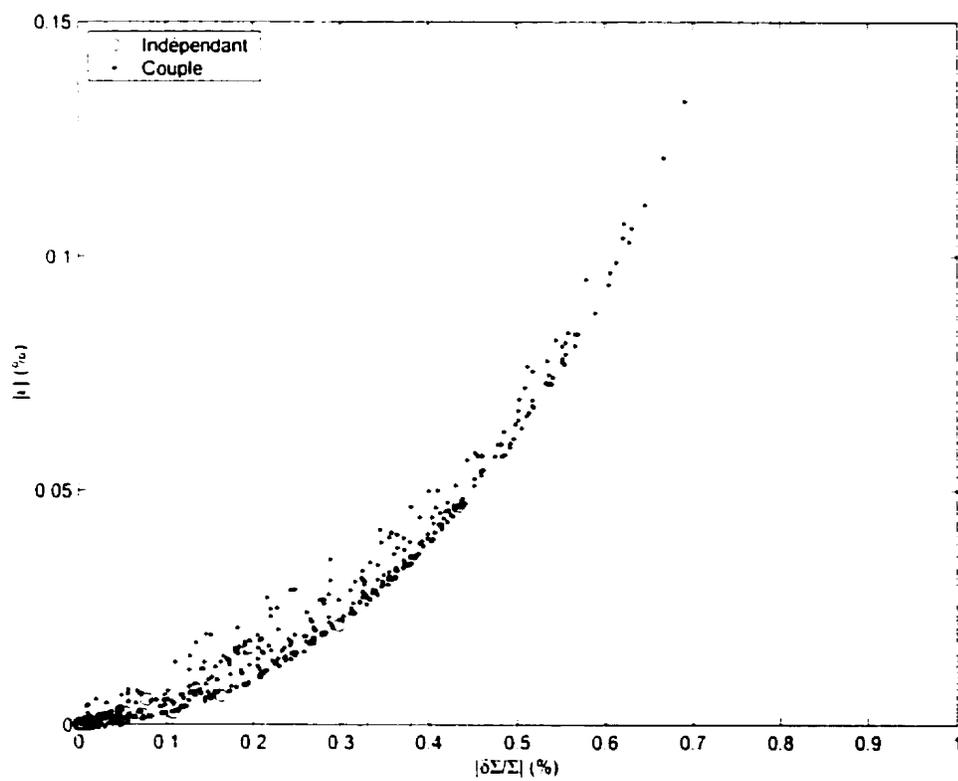


Figure 6.20 CANDU: variation stochastique - Σ

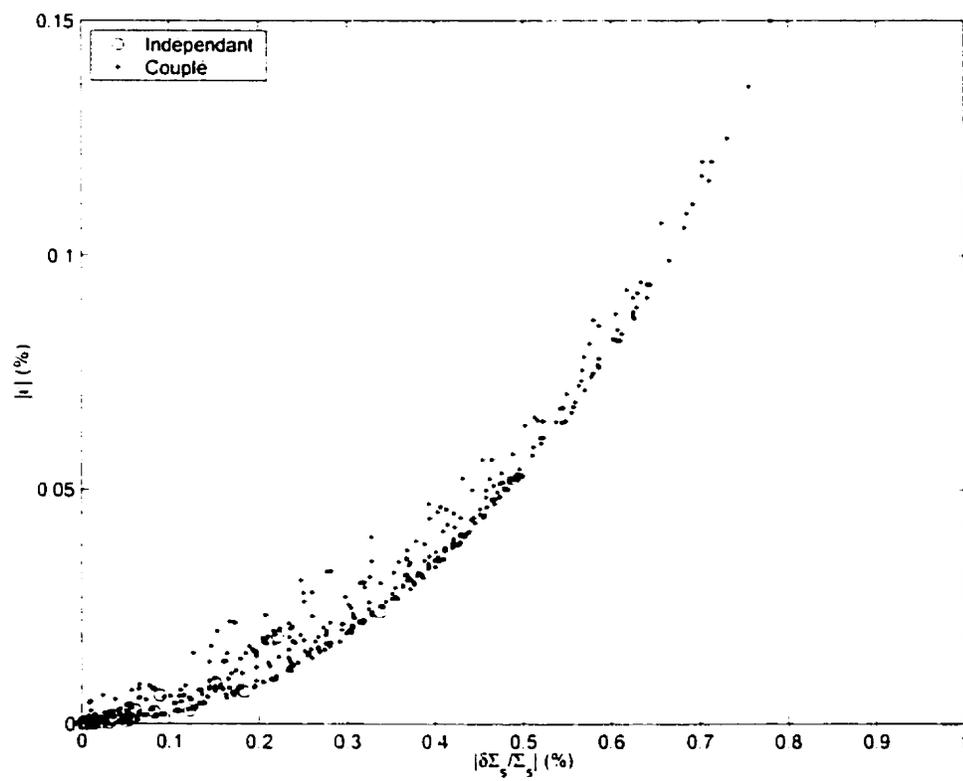


Figure 6.21 CANDU: variation stochastique - Σ_s

6.5 Coefficients de sensibilité

Comme nous l'avons vu à la section (3.5), les analyses de sensibilité offrent de larges possibilités quant à leurs applications.

La sensibilité de la valeur propre λ est régie par les équations (3.6) et (3.7), soient:

$$\frac{\delta\lambda}{\lambda} = \sum_{q=1}^n S_{\lambda}^q \frac{\delta N_q}{N_q} \text{ avec } S_{\lambda}^q = \frac{N_q}{\lambda} \frac{\langle \vec{\phi}^+ \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial N_q} - \lambda \cdot \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial N_q} \right) \cdot \vec{\phi}^- \rangle}{\langle \vec{\phi}^+ \cdot \mathbf{F} \cdot \vec{\phi}^- \rangle}$$

On a remplacé ici F par λ et α_q par N_q qui fait référence à la densité de l'isotope fissile d'indice q . Les sections efficaces macroscopiques sont proportionnelles à la densité. On a par exemple, pour la section efficace totale: $\Sigma_q = N_q \sigma_q$. En utilisant la formule de transfert (6.8), $\delta \vec{\Sigma} \equiv -\delta \Sigma^{g \leftarrow g}$, on peut réécrire les termes:

$$\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial N_q} \equiv \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \chi \cdot \nu \sigma_{f,q}^T$$

et

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial N_q} \equiv \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot (\sigma_q - \sigma_{s,q})$$

Le calcul du coefficient S_{λ}^q s'écrit alors:

$$S_{\lambda}^q = \frac{1}{\lambda} \frac{\langle \vec{\phi}^+ \cdot (\Sigma_q - \Sigma_{s,q}) \cdot \vec{\phi}^- \rangle - \lambda \langle \vec{\phi}^+ \cdot \chi \cdot \nu \Sigma_{f,q}^T \cdot \vec{\phi}^- \rangle}{\langle \vec{\phi}^+ \cdot \mathbf{F}' \cdot \vec{\phi}^- \rangle}$$

Ici Σ_q , $\Sigma_{s,q}$ et $\nu \Sigma_{f,q}$ font respectivement référence aux sections efficaces totale, de diffusion et de fission de l'isotope fissile d'indice q . le spectre de fission χ est supposé identique pour tous les isotopes. L'opérateur \mathbf{F}' est, quant à lui, l'opérateur de fission associé à l'ensemble du réacteur.

Il est possible de calculer les coefficients de sensibilité associés à la valeur propre λ et aux sections efficaces homogénéisées (Eqs. 3.7 et 3.8) à partir des formules de perturbation non *corrigées* (6.10) et (6.11) ou avec les relations *corrigées* (6.15) et (6.16) selon le cas considéré. Pour cela, on perturbera la densité de l'isotope d'indice q de 100%, le coefficient de sensibilité sera alors identique à la variation relative $\delta\lambda/\lambda$ ou $\delta G/G$ issue du calcul de perturbation. Il faut remplacer, dans les formules précédentes, l'opérateur \mathbf{F}'_p par \mathbf{F}' afin d'obtenir des formules de perturbation explicitement *linéaires* et, de ce fait, compatibles avec un calcul de dérivée.

6.5.1 Assemblage REP 17x17

Afin d'étudier la sensibilité de la valeur propre λ à la densité des isotopes: U^{235} , U^{236} , U^{238} , Pu^{239} , Pu^{240} et Pu^{241} , nous avons considéré un assemblage REP 17x17 (Rozon et Shen, 2001). Après 813 jours d'évolution, pour un taux de combustion de 32500 MWj/Tonne, on avait: $k_{eff} = 0.972076$. Le fichier d'entrée de DRAGON associé se trouve à l'annexe (III.2.4). La connaissance des sections efficaces microscopiques et des densités nous a permis de calculer les coefficients de sensibilité de chacun de ces isotopes, pour le mélange associé au combustible. Le tableau (6.28) présente pour chacun des isotopes la densité ($10^{-24}cm^{-3}$) et le coefficient de sensibilité S_λ^q . Le calcul des coefficients de sensibilité a été effectué à l'aide des formules de perturbation non *corrigées* (Eqs. 6.10 et 6.11) et *linéarisées*. On a également calculé un coefficient de sensibilité global correspondant au cas où tous les isotopes seraient perturbés en même temps et dans la même proportion. Ce coefficient est, à la précision numérique près, identique à la somme des coefficients de sensibilité. Cela reflète l'additivité des coefficients de sensibilité. Les coefficients de sensibilité prédominants (U^{235} , U^{238} et Pu^{239}) étant du même ordre de grandeur et pas tous de même signe, on s'attend à ce que le coefficient de sensibilité global soit faible.

Tableau 6.28 REP 17x17: coefficients de sensibilité

Isotope	Densité	S_{λ}^q
U ²³⁵	2.0567E-04	-9.90004510E-02
U ²³⁶	9.1611E-05	6.11564045E-03
U ²³⁸	2.1541E-02	2.21362767E-01
Pu ²³⁹	1.3236E-04	-1.31187972E-01
Pu ²⁴⁰	5.2276E-05	5.81815903E-02
Pu ²⁴¹	3.0314E-05	-4.98206348E-02
Somme	XX	5.65093995E-03
Global	XX	5.65101928E-03

Pour qualifier les résultats obtenus, nous avons perturbé de 0.1 et 1% les densités isotopiques. Pour chacun des scénarios de perturbation (0.1 et 1%), un calcul de flux associé à l'état perturbé a permis de calculer la variation explicite de λ . Il est alors possible de comparer les variations explicites de λ et les estimés provenant des coefficients de sensibilité (tableau 6.29).

Tableau 6.29 REP 17x17: $\delta\lambda/\lambda$

Isotope	0.1 %		1 %	
	S_{λ}^q	Explicite	S_{λ}^q	Explicite
U ²³⁵	-9.90004510E-05	-9.89557805E-05	-9.90004510E-04	-9.86901104E-04
U ²³⁶	6.11564045E-06	5.94813363E-06	6.11564045E-05	6.08302572E-05
U ²³⁸	2.21362767E-04	2.19501311E-04	2.21362767E-03	2.19517019E-03
Pu ²³⁹	-1.31187972E-04	-1.30832812E-04	-1.31187972E-03	-1.30238868E-03
Pu ²⁴⁰	5.81815903E-05	5.58629847E-05	5.81815903E-04	5.57989110E-04
Pu ²⁴¹	-4.98206348E-05	-4.97251511E-05	-4.98206348E-04	-4.97338417E-04
Somme	5.65093995E-06	1.79868573E-06	5.65093995E-05	2.73613562E-05
Global	5.65101928E-06	1.96281455E-06	5.65101928E-05	3.00469259E-05

On a utilisé pour cela la relation:

$$\frac{\delta\lambda}{\lambda} = S_{\lambda}^q \frac{\delta N_q}{N_q}$$

L'écart entre les perturbations explicites et celles qui sont estimées à partir des coefficients de sensibilité est relativement faible: inférieur à 6%. Pour les perturbations explicitement calculées, l'écart entre la somme des variations et la variation globale reflète la non linéarité des perturbations. Relativement aux autres coefficients, le coefficient de sensibilité global semble imprécis. La valeur numérique de ce dernier met en évidence le fait qu'une perturbation identique pour tous les isotopes considérés a un impact relativement faible sur la valeur propre.

6.5.2 Cellule CANDU

Les mêmes résultats sont présentés pour la cellule CANDU déjà étudiée (Marleau et al., 2000)⁵. Après une évolution de 150 j. pour un taux de combustion de 4800 MWj/Tonne, on avait $k_{eff} = 1.031852$. Le calcul des coefficients de sensibilité (tableau 6.30) a été effectué à l'aide des formules de perturbation *corrigées* (Eqs. 6.15 et 6.16) et *linéarisées*. Nous avons considéré, pour le calcul des coefficients de sensibilité, le mélange correspondant au combustible de l'anneau externe qui contient 18 crayons (Fig 5.5). Là encore, le coefficient de sensibilité global est très proche de la somme des coefficients de sensibilité. Cela montre l'additivité des coefficients de sensibilité. Comme dans le cas précédent, les coefficients de sensibilité prédominants (U^{235} , U^{238} et Pu^{239}) sont du même ordre de grandeur et pas tous du même signe. Le coefficient de sensibilité global est donc relativement faible.

⁵Cas test TCWW05 du guide usager DRAGON.

Tableau 6.30 CANDU: coefficients de sensibilité

Isotope	Densité	S_{λ}^q
U ²³⁵	7.0939E-05	-8.78882857E-02
U ²³⁶	1.4166E-05	5.27203833E-04
U ²³⁸	2.2989E-02	1.84529878E-01
Pu ²³⁹	5.1886E-05	-1.18024164E-01
Pu ²⁴⁰	1.4932E-05	1.55292869E-02
Pu ²⁴¹	2.7874E-06	-9.40207877E-03
Somme	XX	-1.47281597E-02
Global	XX	-1.47281843E-02

Encore une fois, nous avons perturbé de 0.1 et 1% les densités isotopiques pour comparer les variations explicites de λ à l'issue des perturbations et les estimés provenant des coefficients de sensibilité (tableau 6.31).

Tableau 6.31 CANDU: $\delta\lambda/\lambda$

Isotope	0.1 %		1 %	
	S_{λ}^q	Explicite	S_{λ}^q	Explicite
U ²³⁵	-8.78882857E-05	-8.79118051E-05	-8.78882857E-04	-8.77029938E-04
U ²³⁶	5.27203833E-07	5.71787421E-07	5.27203833E-06	5.31086427E-06
U ²³⁸	1.84529878E-04	1.84420806E-04	1.84529878E-03	1.84353893E-03
Pu ²³⁹	-1.18024164E-04	-1.17948671E-04	-1.18024164E-03	-1.17666968E-03
Pu ²⁴⁰	1.55292869E-05	1.55935556E-05	1.55292869E-04	1.55181898E-04
Pu ²⁴¹	-9.40207877E-06	-9.36171462E-06	-9.40207877E-05	-9.40355965E-05
Somme	-1.47281597E-05	-1.46360416E-05	-1.47281597E-04	-1.43703522E-04
Global	-1.47281843E-05	-1.47887153E-05	-1.47281843E-04	-1.46821119E-04

À l'exception de l'isotope U²³⁶, l'écart entre les perturbations exactes et celles qui sont estimées à partir des coefficient de sensibilité est faible: inférieur à 1%. On note également que pour les perturbations explicitement calculées, l'écart entre la somme des variations et la variation globale reflète la non linéarité des perturbations.

Le coefficient global est évalué avec plus de précision pour le CANDU car il est relativement plus élevé.

D'une manière générale, les coefficients de sensibilité ainsi calculés rendent bien compte de l'impact de la variation des densités isotopiques sur la valeur propre λ .

La présente analyse pourrait s'étendre aux propriétés homogénéisées, il suffirait pour cela d'utiliser les formules de perturbation généralisées (Eq. 6.16) sous leur forme *linéarisée*. Selon le cas, l'utilisation des formules de perturbation *corrigée* (cellule CANDU) ou non *corrigée* (assemblage REP) semble bien adaptée aux analyses de sensibilité.

CHAPITRE 7

APPLICATIONS DE LA THÉORIE DES PERTURBATIONS GÉNÉRALISÉES

Si les possibilités d'applications de la théorie des perturbations sont nombreuses, elles seront d'autant plus intéressantes que le nombre de calculs perturbatifs à effectuer sera élevé.

La théorie des perturbations sera notamment préconisée pour:

- Les études de type paramétriques qui sont de grande importance dans les phases d'avant projets.
- Les analyses d'incertitudes.
- La mise en place de processus d'optimisation notamment dédiés au plan de chargement et à la gestion du cycle du combustible.

Dans le cadre du présent travail, nous avons étudié deux types de problèmes:

- Étude paramétrique des propriétés homogénéisées pour un assemblage REP 17x17 en fonction de la position dans le coeur.
- Analyse d'incertitudes sur le k_{eff} et le coefficient de vide pour une cellule CANFLEX.

7.1 Étude paramétrique pour un assemblage REP 17x17

Les propriétés du réacteur REP 17x17 précédemment utilisé (annexe III.2.4), sont caractérisées par un assemblage NOMINAL représentatif de l'ensemble du réacteur. Dans la pratique, la température du combustible (T_{comb}) et du modérateur (T_{mod}) ainsi que la densité du modérateur (d_{mod}) dépendent de la position dans le réacteur. Afin d'avoir une description plus fine du réacteur, on considérera 3 assemblages associés aux positions HAUT, CENTRE et BAS. Le tableau (7.1) présente, pour un réacteur neuf (sans évolution), les différentes données qui varient selon la position:

Tableau 7.1 REP 17x17: propriétés en fonction de la position

Position	T_{comb} (K)	T_{mod} (K)	d_{mod}
NOMINAL	944.77	584.88	0.70304
HAUT	920.00	599.00	0.66404
CENTRE	1042.00	584.88	0.70304
BAS	876.00	566.00	0.74089

La connaissance du flux permet de calculer les propriétés homogénéisées sur l'assemblage et condensées à deux groupes d'énergie. Pour les groupes d'énergie $g = 1$ et $g = 2$, les propriétés homogénéisées et condensées sont: le k_{eff} , la section efficace totale (Σ), la section efficace de production ($\nu\Sigma_f$) ainsi que la section efficace de diffusion dans les groupes d'arrivée $h = 1$ (Σ_1^h) et $h = 2$ (Σ_2^h). Le tableau (7.2) présente les résultats obtenus pour l'état NOMINAL.

Tableau 7.2 REP 17x17: état NOMINAL

Groupe	$g = 1$	$g = 2$
k_{eff}	1.198278	1.198278
Σ	5.106871E-01	1.183099E+00
$\nu\Sigma_f$	6.132105E-03	1.070628E-01
Σ_s^1	4.831946E-01	7.922370E-05
Σ_s^2	1.814434E-02	1.110582E+00

À partir des propriétés du tableau (7.1), nous avons pu générer les bibliothèques de sections efficaces associées aux différentes positions. En répétant le calcul pour chacune des positions (HAUT, CENTRE et BAS), on a déterminé les propriétés homogénéisées pour chaque configuration. Une autre approche consiste à utiliser la théorie des perturbations généralisées pour générer les propriétés homogénéisées en considérant les positions HAUT, CENTRE et BAS comme des états perturbés relativement à l'état NOMINAL considérée comme référence. Le fichier d'entrée de DRAGON associé à ce calcul se trouve à l'annexe (III.3.1). Le tableau (7.3) présente les propriétés homogénéisées de l'assemblage et condensées à deux groupes d'énergie obtenues par un calcul direct ou perturbatif pour les positions: HAUT, CENTRE et BAS.

Par la méthode directe, le nombre de calcul de flux à effectuer est de 4: un pour chaque configuration. Si on utilise l'approche perturbative, il nous faut calculer le flux et le flux adjoint de l'état NOMINAL, ainsi que 8 adjoints généralisés associés à chacune des fonctionnelles. Cependant, un seul calcul de la matrice des probabilités de collision est requis dans le cas perturbatif. Il s'en suit que le temps de calcul dans le cas perturbatif (26 min et 40 s) est à peine plus élevé que le temps de calcul associé à un des cas directs (26 min et 29 s). Cette considération nous montre l'efficacité, en terme de temps calcul, de l'approche perturbative dans le formalisme des probabilités de collision.

Tableau 7.3 REP 17x17: propriétés de l'assemblage

HAUT				
Groupe	Direct		Perturbatif	
	$g = 1$	$g = 2$	$g = 1$	$g = 2$
k_{eff}	1.205701	1.205701	1.205711	1.205711
Σ	5.106589E-01	1.181532E+00	5.106589E-01	1.181516E+00
$\nu\Sigma_f$	6.132419E-03	1.067349E-01	6.132400E-03	1.067316E-01
Σ_1^1	4.831701E-01	7.833890E-05	4.831701E-01	7.833297E-05
Σ_2^2	1.816035E-02	1.109707E+00	1.816044E-02	1.109695E+00
CENTRE				
k_{eff}	1.195155	1.195155	1.195175	1.195175
Σ	5.107850E-01	1.182964E+00	5.107852E-01	1.182961E+00
$\nu\Sigma_f$	6.131928E-03	1.069636E-01	6.132005E-03	1.069646E-01
Σ_1^1	4.832807E-01	8.350583E-05	4.832809E-01	8.350773E-05
Σ_2^2	1.809969E-02	1.110497E+00	1.809911E-02	1.110493E+00
BAS				
k_{eff}	1.194230	1.194230	1.194221	1.194221
Σ	5.106182E-01	1.185584E+00	5.106183E-01	1.185564E+00
$\nu\Sigma_f$	6.131917E-03	1.076960E-01	6.131866E-03	1.076830E-01
Σ_1^1	4.831339E-01	7.563185E-05	4.831340E-01	7.567110E-05
Σ_2^2	1.817239E-02	1.112197E+00	1.817261E-02	1.112189E+00

Le tableau (7.4) présente la variation et l'erreur relatives associées aux propriétés homogénéisées entre les positions HAUT, CENTRE et BAS et l'état NOMINAL.

Tableau 7.4 REP 17x17: variation et erreur relatives

HAUT				
Groupe	Variation relative		Erreur relative	
	$g = 1$	$g = 2$	$g = 1$	$g = 2$
k_{eff}	6.19E-03	6.19E-03	8.26E-06	8.26E-06
Σ	-5.53E-05	-1.32E-03	0.00E-00	-1.37E-05
$\nu\Sigma_f$	5.13E-05	-3.06E-03	-3.19E-06	-3.08E-05
Σ_y^1	-5.08E-05	-1.12E-02	0.00E-00	-7.48E-05
Σ_y^2	8.82E-04	-7.88E-04	4.93E-06	-1.07E-05
CENTRE				
k_{eff}	-2.59E-03	-2.59E-03	-1.66E-05	-1.66E-05
Σ	1.92E-04	-1.14E-04	4.66E-07	-2.81E-06
$\nu\Sigma_f$	-2.88E-05	-9.27E-04	1.25E-05	9.26E-06
Σ_y^1	1.78E-04	5.41E-02	4.33E-07	2.40E-05
Σ_y^2	-2.46E-03	-7.66E-05	-3.22E-05	-3.33E-06
BAS				
k_{eff}	-3.38E-03	-3.38E-03	-7.26E-06	-7.26E-06
Σ	-1.35E-04	2.10E-03	1.16E-07	-1.63E-05
$\nu\Sigma_f$	-3.06E-05	5.91E-03	-8.43E-06	-1.22E-04
Σ_y^1	-1.26E-04	-4.53E-02	1.84E-07	4.95E-04
Σ_y^2	1.55E-03	1.45E-03	1.23E-05	-7.51E-06

Le critère de convergence sur le flux ξ_ϕ est de $5 \cdot 10^{-5}$. on supposera donc que la précision sur les données homogénéisées est du même ordre de grandeur. En analysant le tableau précédent, on note que pour des variations relatives allant jusqu'à 5% (Σ_y^1), les erreurs restent inférieures à $10\xi_\phi$. Il s'en suit que l'approche perturbative donne des résultats tout à fait satisfaisants. Selon les critères définis à la section (6.1), la précision sur les données homogénéisées reste dans la zone de validité de l'approche perturbative.

Cette étude paramétrique ne comportait qu'un seul paramètre: la position. Si

on avait considéré d'autres paramètres (enrichissement, concentration de bore, ...) le gain de temps de calcul aurait été d'autant plus appréciable. Dans ce cas, le nombre de calculs d'adjoints généralisés serait resté le même pour un nombre de calculs directs fortement croissant.

7.2 Analyse d'incertitudes sur le k_{eff} et le coefficient de vide pour une cellule CANFLEX

La cellule CANFLEX est une cellule CANDU expérimentale dont la géométrie (Fig. 7.1) diffère de la cellule CANDU usuelle. Cette cellule se caractérise par une performance accrue tant au niveau de la neutronique (combustible) que thermo-hydraulique (transfert de chaleur). Notre analyse porte sur l'utilisation du combustible DUPIC (Direct Use of PWR fuel In CANDU Reactors) dans la cellule CANFLEX. Nous utiliserons ici les données provenant de l'étude de Rozon et Shen (Rozon et Shen, 2001).

Cellule CANFLEX et cycle DUPIC

Le combustible DUPIC est généré à partir d'un calcul d'évolution sur un assemblage REP 17x17. Partant d'un enrichissement initial de 3.2 à 4.5%(WT) et pour un taux de combustion à la sortie du réacteur allant de 30000 à 45000 MWj/Tonne, on a supposé que le combustible était stocké en piscine pendant une période de 10 années avant la fabrication du combustible CANFLEX.

Lors de la fabrication du combustible CANFLEX, la densité des isotopes U^{235} , U^{236} , U^{238} , Pu^{239} , Pu^{240} et Pu^{241} varie en fonction de l'enrichissement initial et du taux de combustion à la sortie du coeur. Il s'en suit que la teneur isotopique du

combustible CANFLEX est susceptible de varier selon l'historique du combustible DUPIC. Le tableau (7.5) présente les taux de combustion (MWj/Tonne) atteints à la sortie du réacteur pour les différents enrichissement initiaux (%WT).

Tableau 7.5 REP 17x17: enrichissement et taux de combustion

Enrichissement	Taux de combustion		
3.2	30000	32500	35000
3.5	33000	36500	40000
3.8	36000	40000	44000
4.2	42000	45000	48000
4.5	45000	48000	52000

Les calculs d'évolution effectués par Rozon et Shen ont permis de calculer la densité des isotopes d'intérêts pour chacune de ces configurations. Il était alors possible d'associer à chaque isotope d'indice q une densité moyenne \bar{N}_q ainsi qu'un écart-type σ_q . Ces paramètres statistiques seraient représentatifs d'une distribution aléatoire des différents types de combustible DUPIC dans le processus de fabrication du combustible CANFLEX. Le tableau (7.6) présente les densités isotopiques (10^{-24}cm^{-3}) associés aux différents scénarios décrits dans le tableau (7.5)

Niveau de gris par mélange

1 2 3 4 5 6 7 8 9 10

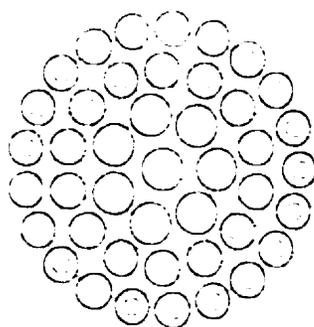


Figure 7.1 Cellule CANFLEX

Tableau 7.6 REP 17x17: densités isotopiques après évolution

Enrichissement	Taux de combustion	U ²³⁵	U ²³⁶	U ²³⁸	Pu ²³⁹	Pu ²⁴⁰	Pu ²⁴¹
3.2	30000	2.3191E-04	8.7670E-05	2.1588E-02	1.3351E-04	4.8394E-05	1.7747E-05
	32500	2.0798E-04	9.0901E-05	2.1538E-02	1.3529E-04	5.1985E-05	1.9131E-05
	35000	1.8946E-04	9.3264E-05	2.1496E-02	1.3644E-04	5.4759E-05	2.0245E-05
3.5	33000	2.3607E-04	9.8834E-05	2.1464E-02	1.3939E-04	5.2117E-05	1.9578E-05
	36500	2.1169E-04	1.0199E-04	2.1413E-02	1.4076E-04	5.5598E-05	2.0873E-05
	40000	1.9099E-04	1.0449E-04	2.1365E-02	1.4168E-04	5.8583E-05	2.1979E-05
3.8	36000	2.4462E-04	1.0939E-04	2.1350E-02	1.4454E-04	5.4977E-05	2.1034E-05
	40000	2.1669E-04	1.1287E-04	2.1292E-02	1.4573E-04	5.8730E-05	2.2421E-05
	44000	1.9454E-04	1.1542E-04	2.1241E-02	1.4640E-04	6.1780E-05	2.3488E-05
4.2	42000	2.5360E-04	1.2383E-04	2.1197E-02	1.5105E-04	5.8686E-05	2.2990E-05
	45000	2.2230E-04	1.2754E-04	2.1132E-02	1.5187E-04	6.2739E-05	2.4332E-05
	48000	1.9799E-04	1.3015E-04	2.1075E-02	1.5219E-04	6.5957E-05	2.5339E-05
4.5	45000	2.6192E-04	1.3450E-04	2.1087E-02	1.5557E-04	6.1101E-05	2.4251E-05
	48000	2.2880E-04	1.3830E-04	2.1019E-02	1.5612E-04	6.5154E-05	2.5586E-05
	52000	2.0287E-04	1.4097E-04	2.0959E-02	1.5621E-04	6.8389E-05	2.6587E-05
N_q		2.1943E-04	1.1401E-04	2.1281E-02	1.4578E-04	5.8597E-05	2.2372E-05
σ_q		2.2204E-05	1.7175E-05	1.9194E-04	7.5281E-06	5.4971E-06	2.5076E-06
σ_q/\bar{N}_q (%)		1.0119E+01	1.5065E+01	9.0194E-01	5.1639E+00	9.3812E+00	1.1208E+01

Dans la pratique, on peut supposer que le processus de fabrication du combustible CANFLEX utilisera des combustibles relativement homogènes. L'incertitude statistique ε_q^* sur la densité N_q de l'isotope fissile d'indice q sera nettement plus faible. À partir des données moyennes, il a été possible de conduire un calcul de référence pour les cas réfrigéré et vide auxquels on associe les facteurs de multiplication effectifs k_{eff}^r et k_{eff}^v . Pour un calcul de cellule, le coefficient de vide ρ est défini par:

$$\rho = k_{eff}^v - k_{eff}^r$$

Ces coefficients ont été calculés pour une cellule CANDU usuelle (Marleau et al., 2000)¹ et pour une cellule CANFLEX en prenant pour le combustible les densités moyennes du tableau (7.6). Les résultats obtenus sont présentés dans le tableau (7.7).

Tableau 7.7 CANDU et CANFLEX: coefficients de vide

Cellule	k_{eff}^r	k_{eff}^v	ρ (mK)
CANDU ²	1.117651	1.137905	20.25
CANFLEX	1.061399	1.092479	31.08

L'enrichissement équivalent du combustible CANFLEX est nettement plus élevé que celui de l'uranium naturel. L'introduction de bore dans le modérateur et dans les structures a permis de réduire les facteurs de multiplication effectifs dans le cas de la cellule CANFLEX. Si pour les deux types de cellule, les coefficients de vide sont positifs, on note qu'il est nettement plus élevé dans le cas du CANFLEX. En effet, le volume du caloporteur est alors plus élevé que pour la cellule CANDU.

¹Cas test TCWW05 sans évolution du guide usager de DRAGON.

²À la section (5.5), le k_{eff} obtenu pour la cellule CANDU TCWW05 est nettement plus faible. L'auto-protection induit un accroissement du k_{eff} de l'ordre de 140 mK.

Calculs des coefficients de sensibilité pour λ et ρ

À partir des états réfrigéré et vide, nous avons fait des calculs de sensibilité associés à la valeur propre et pour des perturbations de densité. Le calcul a été mené pour les isotopes U^{235} , U^{236} , U^{238} , Pu^{239} , Pu^{240} et Pu^{241} ainsi que O^{16} de façon à considérer les isotopes dans leur état oxydé (XO_2).

Le coefficient de sensibilité associé à la réactivité S_ρ^q est défini par (Eq. 3.4):

$$S_\rho^q = \frac{\alpha_q}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial \alpha_q} \quad \text{avec} \quad \rho = k_{eff}^v - k_{eff}^r$$

On en déduit:

$$S_\rho^q = \frac{\alpha_q}{\rho} \left[\frac{\partial k_{eff}^v}{\partial \alpha_q} - \frac{\partial k_{eff}^r}{\partial \alpha_q} \right] \quad \text{soit} \quad S_\rho^q = \frac{1}{k_{eff}^v - k_{eff}^r} \left[k_{eff}^v S_{k_{eff}^v}^q - k_{eff}^r S_{k_{eff}^r}^q \right]$$

Sachant que $\lambda = \frac{1}{k_{eff}}$, il vient immédiatement (Eq. 3.5): $S_{k_{eff}}^q = -S_\lambda^q$.

On a pu exprimer S_ρ^q en fonction des paramètres calculés $S_{\lambda_r}^q$ et $S_{\lambda_v}^q$:

$$S_\rho^q = \frac{1}{k_{eff}^v - k_{eff}^r} \left[k_{eff}^r S_{\lambda_r}^q - k_{eff}^v S_{\lambda_v}^q \right] \quad (7.1)$$

Le tableau (7.3) présente les coefficients de sensibilité obtenus pour λ dans les cas réfrigéré ($S_{\lambda_r}^q$) et vide ($S_{\lambda_v}^q$) ainsi que le coefficient de sensibilité associé au coefficient de vide (S_ρ^q).

Tableau 7.8 CANFLEX: coefficients de sensibilité

Isotope	$S_{\lambda_r}^q$ (Réfrigéré)	$S_{\lambda_v}^q$ (Vide)	S_{ρ}^q
U ²³⁵	-9.939878E-02	-9.888339E-02	8.128235E-02
U ²³⁶	3.904478E-03	3.648419E-03	5.096208E-03
U ²³⁸	1.729291E-01	1.658743E-01	7.505136E-02
Pu ²³⁹	-1.153682E-01	-1.139953E-01	6.710837E-02
Pu ²⁴⁰	4.412133E-02	4.291361E-02	-1.669112E-03
Pu ²⁴¹	-3.122831E-02	-3.077154E-02	1.517235E-02

Afin de qualifier les résultats obtenus, nous avons effectué une perturbation des densités isotopiques de 1%. Les fonctionnelles d'intérêt sont: λ_r , λ_v et ρ . Pour ces fonctionnelles, le tableau (7.9) présente les variations explicites à l'issue de la perturbation et les estimés provenant des coefficients de sensibilité. Enfin, l'écart relatif entre les deux approches est donné en %.

Pour $S_{\lambda_r}^q$ et $S_{\lambda_v}^q$, les écarts relatifs entre les deux approches sont faibles: inférieurs à 0.6%. Dans le cas de S_{ρ}^q on s'attend à ce que l'écart soit plus élevé car S_{ρ}^q est évalué en faisant la différence de deux termes du même ordre de grandeur. On note que, pour S_{ρ}^q , l'écart relatif est en général inférieur à 10%, sauf pour l'isotope U²³⁸. L'imprécision sur le calcul de S_{ρ}^q pour l'isotope U²³⁸ n'est pas vraiment pénalisante car on s'attend à ce que son incertitude soit très faible, relativement à l'incertitude que l'on a sur les autres isotopes.

Tableau 7.9 CANFLEX: $\delta\lambda_r/\lambda_r$, $\delta\lambda_r/\lambda_r$, et $\delta\rho/\rho$

Isotope	$S_{\lambda_r}^q$ (Réfrigéré)	$S_{\lambda_r}^q$ (Vide)	S_{ρ}^q
Sensibilité			
U ²³⁵	-9.939878E-04	-9.888339E-04	8.128235E-04
U ²³⁶	3.904478E-05	3.648419E-05	5.096208E-05
U ²³⁸	1.729291E-03	1.658743E-03	7.505136E-04
Pu ²³⁹	-1.153682E-03	-1.139953E-03	6.710837E-04
Pu ²⁴⁰	-4.412133E-04	-4.291361E-04	-1.669112E-05
Pu ²⁴¹	-3.122831E-04	-3.077154E-04	1.517235E-04
Explicite			
U ²³⁵	-9.897404E-04	-9.858931E-04	8.552187E-04
U ²³⁶	3.908203E-05	3.655125E-05	4.987167E-05
U ²³⁸	1.729122E-03	1.653683E-03	9.166735E-04
Pu ²³⁹	-1.147092E-03	-1.135071E-03	7.249088E-04
Pu ²⁴⁰	-4.409052E-04	-4.287963E-04	-1.544413E-05
Pu ²⁴¹	-3.118025E-04	-3.075087E-04	1.608764E-04
Écart relatif (%)			
U ²³⁵	0.43	0.30	-4.96
U ²³⁶	-0.10	-0.18	2.19
U ²³⁸	0.01	0.31	-18.13
Pu ²³⁹	0.57	0.43	-7.43
Pu ²⁴⁰	0.07	0.08	8.07
Pu ²⁴¹	0.15	0.07	-5.69

Analyse d'incertitude sur le k_{eff} et le coefficient de vide ρ

Comme nous l'avons vu précédemment, si on considère un processus de fabrication relativement homogène, les incertitudes ε_q^s sur les densités isotopiques N_q seront plus faibles que l'écart type présenté dans le tableau (7.6). On aura par exemple:

$$\varepsilon_q^s = \frac{1}{10} \frac{\sigma_q}{N_q}$$

Le tableau (7.10) rappelle les données statistiques que nous avons pour notre cellule CANFLEX.

Tableau 7.10 CANFLEX: densités isotopiques et incertitudes

Isotope	U ²³⁵	U ²³⁶	U ²³⁸	Pu ²³⁹	Pu ²⁴⁰	Pu ²⁴¹
N_q	2.194E-04	1.140E-04	2.128E-02	1.458E-04	5.860E-05	2.237E-05
σ_q	2.220E-05	1.717E-05	1.919E-04	7.528E-06	5.497E-06	2.508E-06
σ_q/N_q (%)	10.12	15.06	0.90	5.16	9.38	11.21
ε_q^s (%)	1.01	1.51	0.09	0.52	0.94	1.12

À partir de ces données, il est aisé de calculer l'incertitude statistique sur le k_{eff} pour les cas réfrigéré $\varepsilon_{k_{eff}}^s$ ou vide $\varepsilon_{k_{eff}}^s$, ainsi que l'incertitude sur le coefficient de vide ε_ρ^s . On utilisera l'équation (3.9), qui pour une fonctionnelle F et les coefficients de sensibilité S_F^q associés aux variables α_q nous donne l'incertitude sur F : ε_F^s .

$$(\varepsilon_F^s)^2 = \sum_{q=1}^n (\varepsilon_q^s)^2 (S_F^q)^2$$

Le tableau (7.11) présente les résultats obtenus:

Tableau 7.11 CANFLEX: incertitudes sur k_{eff}^r , k_{eff}^v et ρ

F	k_{eff}^r	k_{eff}^v	ρ
F	1.061399	1.092479	31.08 (mK)
ε_F^s (%)	0.129931	0.128614	0.091446

Pour une incertitude sur les densités des isotopes sous forme d'oxyde (XO_2) allant jusqu'à 1%, on obtient une incertitude sur k_{eff}^r , k_{eff}^v et ρ de l'ordre de 1 mk. À l'issue d'un calcul de flux, la précision numérique sur ces fonctionnelles ε_F est de l'ordre de $\xi_\phi = 5 \cdot 10^{-5}$. L'incertitude statistique ε_F^s est donc tout à fait significative relativement à la précision des calculs. Comme nous l'avons vu précédemment (tableau 7.9), la précision du calcul de $\varepsilon_{k_{eff}^r}^s$ et $\varepsilon_{k_{eff}^v}^s$ est de l'ordre 0.5%, tandis que ε_ρ^s est calculé avec une précision de l'ordre de 10%.

La présente analyse pourrait être étendue aux sections efficaces homogénéisées et condensées sur la cellule, il suffirait pour cela de calculer les coefficients de sensibilité associés aux propriétés homogénéisées.

CONCLUSION

Synthèse du travail effectué

L'objet du présent travail était d'implanter dans le code de cellule DRAGON:

- Un algorithme systématique pour le calcul des flux adjoints et adjoints généralisés.
- Un module de perturbation permettant d'évaluer l'impact d'une perturbation des sections efficaces macroscopiques sur le k_{eff} et les propriétés homogénéisées et condensées. De plus, ce module permet également de calculer des coefficients de sensibilité pour des paramètres dont les sections efficaces dépendent linéairement.

Le calcul des flux adjoints et adjoints généralisés a nécessité:

- Une étude théorique détaillée afin de définir un algorithme efficace et stable.
- Une modification profonde du module FLU: où les principales routines ont été modifiées de manière à *transposer* le terme source.
- L'implantation du module SAD: dans le code DRAGON. Ce dernier calcule les flux direct et adjoint ainsi que les sources et les flux adjoints généralisés associés à ces sources.

La mise en place du module de perturbation a également nécessité:

- La définition de formules de perturbation exactes afin de valider le code implanté dans DRAGON.

- L'analyse et la mise en place d'un modèle permettant d'éviter un calcul systématique de la matrice $\mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}$ à chacun des états perturbés.
- L'implantation du module PER: dans le code DRAGON. Ce dernier calcule les propriétés homogénéisées et condensées, à l'état perturbé.

Résultats obtenus

Les diverses simulations déterministes (section 6.3) et stochastiques (section 6.4) ont montré que la méthode mise en place donnait dans l'ensemble de bons résultats et que son domaine de validité dépassait le cadre des petites perturbations dans de nombreux cas. Conformément à la théorie, les variations obtenues sont linéaires et les erreurs quadratiques. S'il n'est pas possible à priori d'évaluer l'erreur imputable à une perturbation donnée, il semble que la combinaison de plusieurs perturbations se traduise par une erreur globale du même ordre de grandeur que la perturbation la plus forte (section 6.2.5).

Le calcul des coefficients de sensibilité (section 6.5) a montré que l'on pouvait estimer avec une assez bonne précision l'impact de la variation des densités isotopiques sur la valeur propre.

Les applications effectuées (section 7.1) nous permettent d'affirmer que la méthode de perturbation implantée offre un gain de temps substantiel et une précision tout à fait acceptable pour le calcul des sections efficaces homogénéisées sur la cellule et condensées à deux groupes d'énergie.

Dans une approche statistique (section 7.2), nous avons pu évaluer avec un bon degré de confiance l'incertitude sur le k_{eff} et le coefficient de vide d'une cellule CAN-FLEX. Cette incertitude étant associée aux incertitudes sur les densités isotopiques

d'un combustible DUPIC.

Pour conclure, il nous reste à nous intéresser aux améliorations et avenues de recherche qui permettraient d'étendre le domaine d'applicabilité du travail effectué.

Améliorations de la méthode implantée dans DRAGON

Parmi les divers points à étudier nous citerons:

- Auto-protection: cet aspect n'a pas été pris en compte. Il en résulte que pour chacune des perturbations sur les sections efficaces microscopiques, un calcul complet d'auto-protection doit être effectué. La mise en place d'une méthode perturbative (donc plus rapide) de calcul d'auto-protection devrait être étudiée.
- Calcul de fuites: seuls les calculs de type k_{eff} ont été traités, la prise en compte d'un terme de fuite homogène devrait être analysée car la majorité des calculs de cellules se font à l'aide d'un modèle de fuite homogène.
- Variation de la matrice \mathbf{P}_{VV} : la section (6.3.2) propose une méthode pour prendre en compte indirectement les variations de la matrice \mathbf{P}_{VV} sans avoir à la recalculer. Les méthodes basées sur le calcul des matrices $\mathbf{P}_{VV}^{m \leftarrow m'}$ au premier ordre ($l, l' \leq 1$) (Roy, 1991) ou \mathbf{P}_{VV}^k (Petrovic et al., 1996) devraient être investiguées plus avant. L'applicabilité aux problèmes de fuites hétérogènes reste à étudier.
- Précontamination: pour les calculs de flux adjoints généralisés, nous avons choisi de commencer le processus itératif en contaminant le flux adjoint généralisé par le flux adjoint (section 5.5.3). Le choix du facteur de con-

tamination est pour l'instant fixé empiriquement à 10^2 , un critère de choix plus optimal devrait être défini.

Avenues de recherche

Parmi les axes de recherche qui pourraient être développés en continuité avec le travail déjà effectué, nous citons:

- Analyse de sensibilité: le calcul systématique des coefficients de sensibilité devrait être étendu aux paramètres dont les sections efficaces ne dépendent pas linéairement (effets de température par exemple). Cela devrait nous permettre de mieux connaître les paramètres nucléaires de base jouant un rôle clé sur le k_{eff} , le coefficient de vide et les propriétés homogénéisées.
- Calculs d'incertitudes: comme nous l'avons vu aux sections (3.5.2) et (7.2), la théorie des perturbations nous donne des informations sur la propagation des incertitudes sur les propriétés nucléaires de base (section efficace microscopique, densité isotopique, température) à travers tout le cycle de calcul (calcul de cellule, calcul de cœur). Une telle approche permettrait de mieux qualifier les résultats issus d'un calcul de diffusion. Une fois les flux adjoints et adjoints généralisés calculés, cette méthode d'analyse est relativement peu coûteuse à mettre en place tout en offrant un gain substantiel sur la connaissance physique du réacteur étudié.
- Mise en place d'un module de perturbation couplé au champ des noyaux (évolution). La prise en compte du champ des noyaux permettrait de s'intéresser aux plans de chargements que ce soit pour un assemblage REP (prise en compte des poisons consommables) ou une cellule CANDU. Couplée à un processus d'optimisation, cette approche offre des possibilités prometteuses.

RÉFÉRENCES

- BEAUDET, M. (1991). *Application de la programmation non linéaire aux calculs de design et de gestion du combustible d'un réacteur CANDU*. Thèse de Ph.D., Institut de Génie Nucléaire, École Polytechnique de Montréal.
- BELL et GLASSTONE (1970). *Nuclear Reactor Theory*. Van Nostrand Reinhold Company, New York.
- BEVINGTON, P. R. (1969). *Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences*. McGraw-Hill Book Company, New York.
- BLAISE, P., FOUGERAS, P., et CATHALAU, S. (2000). New Developments in Representativity Approach to Study Advanced Concepts in the EOLE Critical Facility. In *Proceedings of the ANS International Conference on Reactor Physics and Reactor Computation*, Pittsburgh, PA.
- BLANCO, A., GHO, C. J., ANDRADE LIMA, F. R., et GANDINI, A. (2000). Higher Order HGPT Methodology Applications for BNCT Dosimetry Related Sensitivity Analysis. In *Proceedings of the ANS International Conference on Reactor Physics and Reactor Computation*, Pittsburgh, PA.
- BUSSAC, J. et REUSS, P. (1985). *Traité de neutronique*. Hermann, Paris.
- CACUCI, D. G., WEBER, C. F., OBLOW, E. M., et MARABLE, J. H. (1980). Sensitivity Theory for General Systems of Nonlinear Equations. *Nuclear Science and Engineering*, **75**, 88-110.
- CARLSON, B. G. et LATHROP, K. D. (1968). *Computing Methods in Reactor Physics*, chapter 3. Edited by Gordon and Breach, published by Greenspan H., Kelber C. N. and Okrent D., U.S.A.

- CHAVENT. G., HEMMERICH. P., JAFFRE. J., et PLANCHARD. J. (1990). Ajustement des données neutroniques et perturbations inverses. *EDF.- Bulletin de la direction des études et recherches - Série A*, **2**, 19-23.
- COURANT. R. et HILBERT. D. (1989). *Methods of Mathematical Physics*. John Wiley and Sons. New York.
- COURAU. T. et MARLEAU. G. (2000). Calculating Adjoint Fluxes in the Code DRAGON Using the Collision Probability Method. In *Proceedings of the ANS International Conference on Reactor Physics and Reactor Computation*. Pittsburgh, PA.
- DAVISON. B. (1957). *Neutron Transport Theory*. Oxford University Press. London.
- DONNELLY. J. V. (1986). WIMS-CRNL: A User's Manual for the Chalk River Version of WIMS. Technical Report AECL-8955. Atomic Energy of Canada Limited.
- GANDINI. A. (1967). A Generalized Perturbation Method for Bi-linear Functionals of the Real and Adjoint Fluxes. *Journal of Nuclear Energy*, **21**, 755-765.
- GANDINI. A., SALVATORES. M., et TONDINELLI. L. (1977). New developments in Generalized Perturbation Methods in the Nuclide Field. *Nuclear Science and Engineering*, **62**, 339-345.
- GANDINI. A. (1985). La théorie des perturbations généralisées. *EDF.- Bulletin de la direction des études et recherches - Série A*, **1**, 11-15.
- GANDINI. A. (1988). Méthodologie perturbative pour l'analyse de l'évolution des réacteurs. *EDF.- Bulletin de la direction des études et recherches - Série A*, **1**, 13-20.

- GANDINI, A. (1994). Advances in Heuristically Based Generalized Perturbation Theory. In *Proceedings of the international Conference on Reactor Physics and Reactor Computation*. Tel-Aviv.
- HALSALL, M. J. (1980). A Characteristics Solution to the Neutron Transport Equation in Complicated Geometries. Technical Report Report AEEW-R 1291. Atomic Energy Establishment. Winfrith.
- HÉBERT, A. (1985). Variational Principles and Convergence Acceleration Strategies for the Neutron Diffusion Equation. *Nuclear Science and Engineering*, **91**, 414-427.
- HÉBERT, A. et BENOIST, P. (1991). A Consistent Technique for the Global Homogenization of a Pressurized Water Reactor Assembly. *Nuclear Science and Engineering*, **109**, 360-372.
- HENRY, A. F. (1975). *Nuclear Reactor Analysis*. MIT Press. U.S.A.
- KIM, M. H. et HENRY, A. F. (1989). Flux-Adjoint Weighted Few-Group Cross Sections Used for Reactor Transient Analysis. *Nuclear Science and Engineering*, **103**, 276-282.
- LEE, C., DOWNAR, T. J., OTT, K. O., et JOO, H. G. (2000). An Assessment of Consistent Bilinear Weighted Two-Group Spatial Kinetics for MOX Fuel Applications. In *Proceedings of the ANS International Conference on Reactor Physics and Reactor Computation*. Pittsburgh, PA.
- LEWIS, E. E. et MILLER, Jr., W. F. (1984). *Computational Methods of Neutron Transport*. John Wiley and Sons, Inc. New York.
- LOSEY, D. C., LEE, J. C., MARTIN, W. R., et ADAMSON, Jr., T. C. (1996). Singular Perturbation Solutions of the Neutron Transport Equation. *Nuclear Science and Engineering*, **123**, 68-85.

LOSEY, D. C. et LEE, J. C. (1997). Singular Perturbation Analysis of the Neutron Transport Equation. *Transaction of the American Nuclear Society*, **76**, 217-219.

MACFARLANE, R. E. (1992). TRANSX-2: A Code for Interfacing MATXS Cross-Section Libraries to Nuclear Transport Code. Technical Report LA-12312-MS. Los Alamos Scientific Laboratory. N.M.

MARLEAU, G. (1998). CANDU Lattice Physics Course. Canadian Nuclear Society.

MARLEAU, G., HÉBERT, A., et ROY, R. (2000). A User's Guide for DRAGON. Technical Report IGE-174 Rev.4. Institut de Génie Nucléaire, École Polytechnique de Montréal.

OBLOW, E. M. (1983). Sensitivity Theory from a Differential Viewpoint. *Nuclear Science and Engineering*, **85**, 188-191.

PETROVIC, I. et BENOIST, P. (1996). B_n Theory: Advances and New Model for Neutron Leakage Calculation. In *Advances in Nuclear Science and Technology*, volume 24. New York. Edited by J. Lewins and M. Becker, published by Plenum Publishing Corporation.

PETROVIC, I., BENOIST, P., et MARLEAU, G. (1996). A Quasi Isotropic Reflecting Boundary Condition for the TIBERE Heterogeneous Leakage Model. *Nuclear Science and Engineering*, **122**, 151-166.

PLANCHARD, J. (1988). Perturbations inverses en physique des réacteur. *EDF-Bulletin de la direction des études et recherches - Série A*, **1**, 73-79.

POMRANING, G. C. (1976). Boundary Perturbation Theory for Nonanalytic Perturbations. *Nuclear Science and Engineering*, **59**, 187-189.

- PRESS, W. H., FLANNERY, B. P., TEUKOLSKY, S. A., et VETTERLING, W. T. (1986). *Numerical Recipes*. Cambridge University Press. London.
- RAHNEMAI, F. (1996). Boundary Condition Perturbations in Transport Theory. *Nuclear Science and Engineering*. **124**. 320-326.
- RONEN, Y. (1988). The Inverse Uncertainty Analysis. *Annals of Nuclear Energy*. **15**. 511-512.
- ROY, R. (1991). Anisotropic Scattering for Integral Transport Codes. Part 2. Cyclic Tracking and its Application to XY Lattices. *Annals of Nuclear Energy*. **18**. 511-524.
- ROY, R. (1998a). The Cyclic Characteristic Method. In *Proceedings of the ANS International Conference on the Physics of Nuclear Science and Technology*. Long Island, NY.
- ROY, R. (1998b). Théorie des probabilités de collision. Technical Report IGE-235. Institut de Génie Nucléaire, École Polytechnique de Montréal.
- ROZON, D., HÉBERT, A., et McNABB, D. (1981). The Application of Generalized Perturbation Theory and Mathematical Programming to Equilibrium Refueling Studies of a CANDU Reactor. *Nuclear Science and Engineering*. **78**. 211-226.
- ROZON, D. (1992). *Introduction à la cinétique des réacteurs nucléaires*. Éditions de l'École Polytechnique de Montréal, Montréal.
- ROZON, D. et BEAUDET, M. (1992). Canadian Deuterium Uranium Reactor Design Optimization Using Three-Dimensional Generalized Perturbation Theory. *Nuclear Science and Engineering*. **111**. 1-20.
- ROZON, D. et SHEN, W. (2001). A Parametric Study of the DUPIC Fuel Cycle to Reflect Pressurized Water Reactor Fuel Management Strategy. *Nuclear Science and Engineering*. **138**. 1-25.

- SALVATORES, M. (1988). La théorie des perturbations et les analyses de sensibilité. *EDF.- Bulletin de la direction des études et recherches - Série A*, **1**, 33-44.
- SEKIMOTO, H. et NEMOTO, A. (2000). Nuclide Importance and the Steady-State Burnup Equation. *Nuclear Science and Engineering*, **135**, 84-102.
- STACEY, Jr., W. M. (1970). Calculation of Heterogeneous Fluxes and Reactivity Worth. *Nuclear Science and Engineering*, **42**, 233-235.
- STACEY, Jr., W. M. (1972a). Variational Estimates and Generalized Perturbation Theory for the Ratios of Linear and Bilinear Functionals. *Journal of Mathematical Physics*, **13**(8), 1119-25.
- STACEY, Jr., W. M. (1972b). Variational Estimates of Reactivity Worths and Reaction Rates Ratios in Critical Nuclear Reactors. *Nuclear Science and Engineering*, **48**, 444-458.
- STACEY, Jr., W. M. (1974). *Variational Methods in Nuclear Reactor Physics*. Academic Press, New York.
- STAMM'LER, R. J. J. et ABBATE, M. J. (1983). *Methods of Steady-State Reactor Physics in Nuclear Design*. Academic Press, London.
- TAKAHASHI, H. (1966). Approximation for the Calculation of the Generalized First-Flight Collision Probability. *Nuclear Science and Engineering*, **26**, 254-261.
- USACHEV, L. N. (1964). Perturbation Theory for the Breeding Ratio and for Other Number Ratios Pertaining to Various Reactor Processes. *Journal of Nuclear Energy*, **18**, 571-583.
- WHITE, J. R. et Swanbon, G. A. (1990). Development of a Technique for the Practical Implementation of Higher Order Perturbation Methods. *Nuclear Science and Engineering*, **105**, 160-173.

WILLIAMS, M. L. (1979). Developments of Depletion Perturbation Theory for Coupled Neutron/Nuclide Field. *Nuclear Science and Engineering*, **70**, 20-36.

WILLIAMS, M. L. (1986). *Perturbation Theory for Nuclear Reactor Analysis*. CRC Handbook of Nuclear Reactor Calculations, Vol 3, Y. Ronen Ed., U.S.A.

YAMAMOTO, T. (1997). Perturbation of General Boundary Condition for an Eigenvalue Change in the Neutron Boltzmann Transport Equation. *Nuclear Science and Engineering*, **125**, 19-23.

YANG, W. S. et KHALIL, H. (1994). A Perturbation Method for Spatially Detailed Nuclide Depletion Calculation. *Transaction of the American Nuclear Society*, **70**, 172-173.

ANNEXE I

COMPLÉMENTS THÉORIQUES

I.1 Structure matricielle des opérateurs

$$\vec{\sigma} = \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} \cdot \mathbf{R}_{\lambda} \cdot \vec{\sigma}$$

Le vecteur $\vec{\sigma}$, de dimension $N \times G$, est défini par:

$$\vec{\sigma} = [\sigma_1^1 \dots \sigma_N^1 \dots \sigma_1^G \dots \sigma_N^G]^T$$

La matrice $\mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}$ est de dimension $(N \times G)^2$, elle est diagonale par blocs et prend la forme suivante:

$$\mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}} = \begin{bmatrix} [P_{\mathbf{V}\mathbf{V}}^1] & & & \\ & [P_{\mathbf{V}\mathbf{V}}^2] & & \\ & & \dots & \\ & & & [P_{\mathbf{V}\mathbf{V}}^G] \end{bmatrix}$$

avec $[P_{\mathbf{V}\mathbf{V}}^g]$, une matrice $N \times N$ telle que: $[P_{\mathbf{V}\mathbf{V}}^g]_{i,j} = p_{ij}^g$

La matrice \mathbf{R}_{λ} , de dimension $(N \times G)^2$, a la forme suivante:

$$\mathbf{R}_{\lambda} = \Sigma_s + \lambda \chi \cdot \nu \Sigma_f^T = \Sigma_s + \frac{1}{k_{eff}} \chi \cdot \nu \Sigma_f^T$$

La matrice Σ_s est de dimension $(N \times G)^2$, elle est constituée de G^2 blocs et prend

et:

$$[\nu^{\Sigma_f^g}] = \begin{bmatrix} \nu_{f,1}^{\Sigma_f^g} & & & \\ & \nu_{f,2}^{\Sigma_f^g} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \nu_{f,N}^{\Sigma_f^g} \end{bmatrix}$$

I.2 Dérivation des opérateurs adjoints

- Opérateur scalaire: $\mathbf{A} = K(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$

$$\begin{aligned} & \langle F(\vec{r}, \vec{\Omega}, E), K(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) D(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \rangle \\ &= \int d^3 r' \int dE' \int d^2 \Omega F(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) K(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \cdot D(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \\ &= \int d^3 r' \int dE' \int d^2 \Omega K(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) F(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \cdot D(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \\ &= \langle K(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) F(\vec{r}, \vec{\Omega}, E), D(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \rangle \end{aligned}$$

$$\mathbf{A} = K(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \longrightarrow \mathbf{A}^* = K(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$$

- Opérateur de fuite: $\mathbf{A} = \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla}$

Pour traiter le terme de fuite nous allons utiliser les propriétés suivantes:

$$\begin{aligned} & \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} (F(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) D(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)) \\ &= F(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} D(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) + D(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} F(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \end{aligned}$$

et

$$\int d^3 r \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} (F(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) D(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)) = \int d^2 r_s (\vec{\Omega} F(\vec{r}_s, \vec{\Omega}, E) D(\vec{r}_s, \vec{\Omega}, E)) \cdot \vec{N}$$

Si on choisit des conditions aux limites sur $F(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$ et $D(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$ telles que, à la frontière ($\vec{r} = \vec{r}_s$), $\vec{N} \cdot \left(\vec{\Omega} F(\vec{r}_s, \vec{\Omega}, E) D(\vec{r}_s, \vec{\Omega}, E) \right) = 0$, on a alors:

$$\begin{aligned} & \left\langle F(\vec{r}, \vec{\Omega}, E), \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} D(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \right\rangle \\ &= \int d^3 r' \int dE' \int d^2 \Omega F(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} D(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \\ &= - \int d^3 r' \int dE' \int d^2 \Omega \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} F(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) D(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \\ &= \left\langle -\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} F(\vec{r}, \vec{\Omega}, E), D(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \right\rangle \end{aligned}$$

$$\mathbf{A} = \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \longrightarrow \mathbf{A}^* = -\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla}$$

- Opérateur laplacien (de diffusion): $\mathbf{A} = \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

On a les propriétés suivantes:

$$\begin{aligned} \int d^3 r F(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \nabla^2 D(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) &= - \int d^3 r \vec{\nabla} F(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \cdot \vec{\nabla} D(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \\ &\quad - \int d^2 r_s F(\vec{r}_s, \vec{\Omega}, E) \vec{N} \cdot \vec{\nabla} D(\vec{r}_s, \vec{\Omega}, E) \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} \int d^3 r D(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \nabla^2 F(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) &= - \int d^3 r \vec{\nabla} D(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \cdot \vec{\nabla} F(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \\ &\quad - \int d^2 r_s D(\vec{r}_s, \vec{\Omega}, E) \vec{N} \cdot \vec{\nabla} F(\vec{r}_s, \vec{\Omega}, E) \end{aligned}$$

Si on choisit des conditions aux limites telles que à la frontière ($\vec{r} = \vec{r}_s$):

$$\vec{N} \cdot \left(F(\vec{r}_s, \vec{\Omega}, E) \vec{\nabla} D(\vec{r}_s, \vec{\Omega}, E) - D(\vec{r}_s, \vec{\Omega}, E) \vec{\nabla} F(\vec{r}_s, \vec{\Omega}, E) \right) = 0$$

on aura: $\langle F(\vec{r}, \vec{\Omega}, E), \nabla^2 D(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \rangle = \langle \nabla^2 F(\vec{r}, \vec{\Omega}, E), D(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \rangle$

$$\mathbf{A} = \nabla^2 \longrightarrow \mathbf{A}^* = \nabla^2$$

• Opérateur intégral: $\mathbf{A} = \int K(E \leftarrow E')$

Pour simplifier ce calcul nous raisonnons uniquement sur la variable énergie.

$$\begin{aligned} \left\langle F(E), \int dE' K(E \leftarrow E') D(E') \right\rangle &= \int dE \int dE' F(E) K(E \leftarrow E') D(E') \\ &= \int dE' \int dE F(E') K(E' \leftarrow E) D(E) \\ &= \int dE \int dE' K(E' \leftarrow E) F(E') D(E) \\ &= \left\langle \int dE' K(E' \leftarrow E) F(E'), D(E) \right\rangle \end{aligned}$$

$$\mathbf{A} = \int K(E \leftarrow E') \longrightarrow \mathbf{A}^* = \int K(E' \leftarrow E)$$

D'une manière générale, l'opérateur intégral adjoint est déduit de l'opérateur direct par permutation des variables primées et non primées: $\vec{r} \leftrightarrow \vec{r}'$, $\vec{\Omega} \leftrightarrow \vec{\Omega}'$ et $E \leftrightarrow E'$

I.3 Transfert de section efficace et correction de transport

Considérons un réacteur dans un état de référence, on a:

$$\vec{\phi} = \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}(\vec{\Sigma}) \cdot \mathbf{R}_{\lambda} \cdot \vec{\phi}$$

Suite à une perturbation on a:

$$\vec{\phi}_p = \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}(\vec{\Sigma}_p) \cdot \mathbf{R}_{\lambda,p} \cdot \vec{\phi}_p$$

avec: $\vec{\Sigma}_p = \vec{\Sigma} + \delta\vec{\Sigma}$, ici $\vec{\Sigma}$ et $\vec{\Sigma}_p$ sont des sections efficaces corrigées transport.

On définit alors un état *équivalent* à l'état perturbé caractérisé par $\vec{\phi}_e$. Cela revient à ajouter $\delta\vec{\Sigma}$ au terme de correction de transport, on obtient alors:

$$\vec{\phi}_e = \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}(\vec{\Sigma}_p - \delta\vec{\Sigma}) \cdot (\mathbf{R}_{\lambda,p} - \delta\mathbf{\Sigma}) \cdot \vec{\phi}_e$$

ce qui se réécrit:

$$\vec{\phi}_e = \mathbf{P}_{\mathbf{V}\mathbf{V}}(\vec{\Sigma}) \cdot (\mathbf{R}_{\lambda,p} - \delta\mathbf{\Sigma}) \cdot \vec{\phi}_e$$

L'état perturbé et l'état *équivalent* sont caractérisés par des sections efficaces identiques, à l'exception de la correction de transport. Cette dernière est augmentée de $\delta\vec{\Sigma}$ lorsque l'on passe de l'état perturbé à l'état *équivalent*.

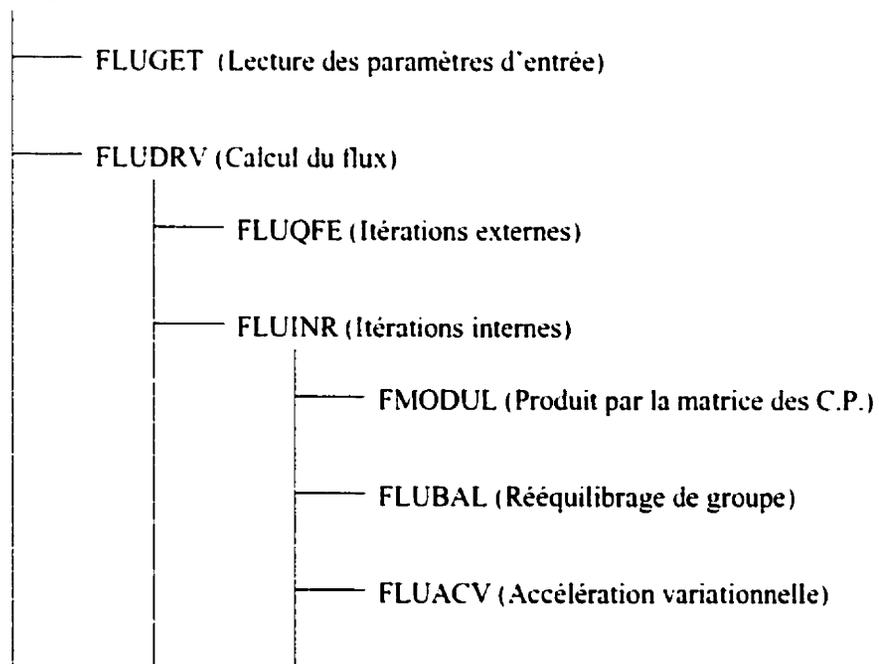
En supposant que la correction de transport a peu d'effet sur le calcul du flux, on note que, pour de petites perturbations, les réacteurs perturbés et *équivalents* seront caractérisés par des flux très similaires.

ANNEXE II

STRUCTURE DES MODULES DE DRAGON CRÉÉS OU
MODIFIÉS

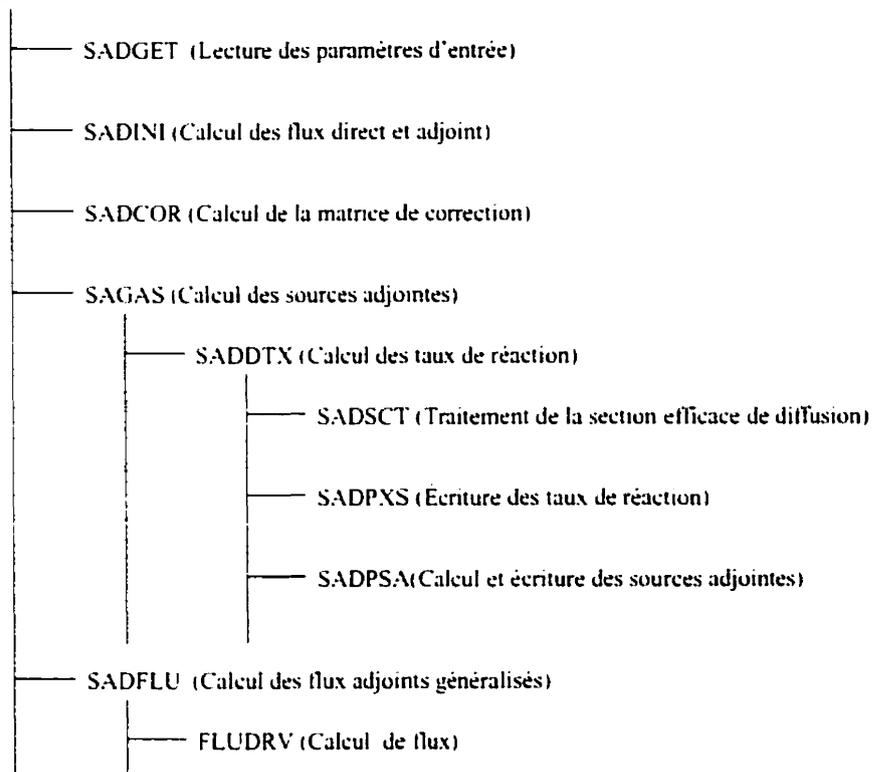
II.1 Module FLU:

FLU:



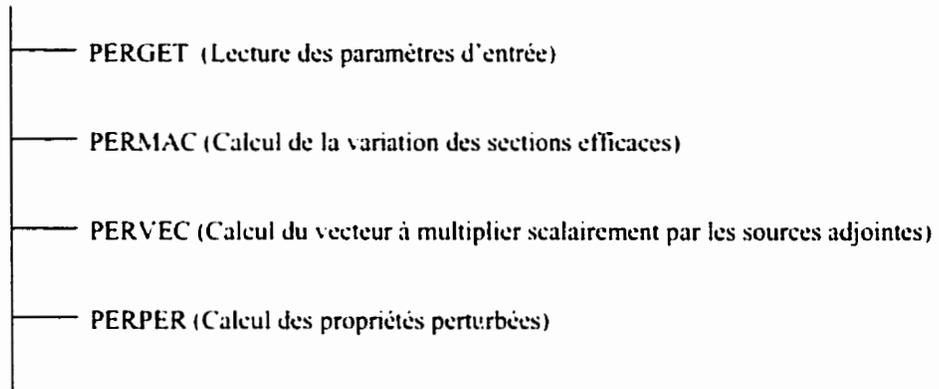
II.2 Module SAD:

SAD:



II.3 Module PER:

PER:



ANNEXE III

FICHIERS D'ENTRÉE DE DRAGON

III.1 Calcul des flux adjoints et adjoints généralisés

III.1.1 "Small Cell"

- DATE: 2000/09/01
- OBJECT: TEST CASE TO VALIDATE ADJOINT FLUX COMPUTATION
- SMALL CELL MODIFIED

*-----

- FILES AND LISTS

*-----

LINKED_LIST

 MOSTELC TRACK MACRO SYS FLUX ;

 SEQ_BINARY INTLIN ;

*-----

- MODULES

*-----

MODULE

 GEO: EXCELT: MAC: ASM: FLU: EDI: DELETE: END: ;

*-----

- * CROSS SECTIONS

*-----

MACRO := MAC: ::

 NGRO 2 ANIS 1 NMIX 3 NIFI 1

READ INPUT

MIX 1	TOTAL		0.392175	0.622581
	NUSIGF		0.022141	0.496970
	CHI		1.0	0.0
*	SCAT	2 2	SIG 2->1	SIG 1->1
*			SIG 2->2	SIG 1->2
	SCAT	2 2	0.001451	0.361893
		2 2	0.358282	0.000715
	FIXE		1.0	2.0
	FIXA		1.0	2.0
MIX 2	TOTAL		0.276383	0.278610
	SCAT	2 2	0.000774	0.274505
		2 2	0.273807	0.000288
MIX 3	TOTAL		0.439812	1.355650
	SCAT	2 2	0.002672	0.411998
		2 2	1.335170	0.021280 ;

*-----

* GEOMETRIES

*-----

MOSTELC := GEO: :: CARCEL 2

X- REFL X+ REFL

Y- REFL Y+ REFL

MESHX 0.0 1.2647

MESHY 0.0 1.2647

RADIUS 0.0 0.41 0.47

MIX 1 2 3 ;

*-----

* TRANSPORT CALCULATION FOR KEFF

```
*-----  
TRACK INTLIN := EXCELT: MOSTELC ::  
  TITLE 'SMALL CELL COOLED'  
  MAXR 3  
  ANIS 1  
  TRAK TISO 12 20.0 ;  
SYS := ASM: MACRO TRACK INTLIN ;  
*-----  
* FLUX COMPUTATION  
*-----  
FLUX := FLU: SYS TRACK MACRO :: TYPE K PAF EDIT 2 ;  
*-----  
* MEMORY RELEASE  
*-----  
MOSTELC FLUX SYS TRACK INTLIN := DELETE:  
MOSTELC FLUX SYS TRACK INTLIN ;  
*-----  
* MODIFIED REACTOR  
*-----  
MOSTELC := GEO: :: CARCEL 2  
  X- REFL X+ REFL  
  Y- REFL Y+ REFL  
  MESHX 0.0 1.2647  
  MESHY 0.0 1.2647  
  RADIUS 0.0 0.41 0.47  
  MIX 1 2 0 ;  
*-----  
* TRANSPORT CALCULATION FOR KEFF  
*-----  
TRACK INTLIN := EXCELT: MOSTELC ::
```

```
TITLE 'SMALL CELL COOLED'  
MAXR 3  
ANIS 1  
TRAK TISO 12 20.0 ;  
SYS := ASM: MACRO TRACK INTLIN ;  
*-----  
• FLUX COMPUTATION  
*-----  
FLUX := FLU: SYS TRACK MACRO :: TYPE S PAF EDIT 2 EXTE 35 ;  
*-----  
* MEMORY RELEASE  
*-----  
INTLIN := DELETE: INTLIN ;  
END: ;
```

III.1.2 REP 17x17

- DATE: 2000/09/01
- OBJECT: TEST-CASE TO VALIDATE ADJOINT
- AND GENERALIZED ADJOINT COMPUTATION
- *-----
- MODIFIED TEST CASE TCWW02
- 17 X 17 PWR ASSEMBLY WITHOUT POISON
- WIMS-AECL 69 GROUPS LIBRARY FILE WIMSLIB

*-----

- Define STRUCTURES and MODULES used

*-----

LINKED_LIST

ASSMB DISCR LIBRARY PIJ FLX EDITION ;

MODULE

LIB: GEO: SYBILT: SHI: ASM: FLU:

DELETE: SAD: END: ;

*-----

- Microscopic cross sections from file WIMSLIB format WIMS-AECL

*-----

LIBRARY := LIB: ::

NMIX 8 CTRA WIMS

MIXS LIB: WIMS FIL: WIMSLIB

MIX 1 579.9

H1H20	= H1H20	4.76690E-2	O16H20	= O16H20	2.38345E-2
-------	---------	------------	--------	----------	------------

BNat	= B-NAT	2.38103E-5			
------	---------	------------	--	--	--

MIX 2 579.9

			O16	= O16	3.06711E-4
--	--	--	-----	-------	------------

Cr52	= CR52	7.54987E-5	Fe56	= FE56A	1.47624E-4
------	--------	------------	------	---------	------------

Zr91	= ZR91	4.18621E-2			
------	--------	------------	--	--	--

MIX 3 579.9

H1H20	= H1H20	4.65292E-2	O16H20	= O16H20	2.32646E-2
Nb93	= NB93	7.07082E-6	Cr52	= CR52	4.79927E-5
Fe56	= FE56A	4.45845E-5	Ni58	= NI58	1.13521E-4
Co59	= CO59	1.07714E-7	Mo95	= MO95	4.03755E-6
Ti48	= TI48	2.33305E-6	Al27	= AL27	2.35231E-6
Mn55	= MN55	4.15901E-7			
BNat	= B-NAT	2.32761E-5			
Zr91	= ZR91	8.92427E-4			

MIX 4 579.9

			O16	= O16	2.87335E-4
Cr52	= CR52	7.07291E-5	Fe56	= FE56A	1.38298E-4
Zr91	= ZR91	3.92175E-2			

MIX 5 579.9

H1H20	= H1H20	4.71346E-2	O16H20	= O16H20	2.35673E-2
Nb93	= NB93	3.31482E-6	Cr52	= CR52	2.24991E-5
Fe56	= FE56A	2.09013E-5	Ni58	= NI58	5.32188E-5
Co59	= CO59	5.04968E-8	Mo95	= MO95	1.89281E-6
Ti48	= TI48	1.09374E-6	Al27	= AL27	1.10277E-6
Mn55	= MN55	1.94976E-7			
BNat	= B-NAT	2.35598E-5			
Zr91	= ZR91	4.18372E-4			

MIX 6 579.9

H1H20	= H1H20	4.71676E-2	O16H20	= O16H20	2.35838E-2
Nb93	= NB93	3.11049E-6	Cr52	= CR52	2.11122E-5
Fe56	= FE56A	1.96130E-5	Ni58	= NI58	4.99383E-5
Co59	= CO59	4.73842E-8	Mo95	= MO95	1.77614E-6
Ti48	= TI48	1.02632E-6	Al27	= AL27	1.03479E-6
Mn55	= MN55	1.82957E-7			
BNat	= B-NAT	2.35753E-5			
Zr91	= ZR91	3.92583E-4			

MIX 7 579.9

H1H20	= H1H20	4.72020E-2	O16H20	= O16H20	2.36010E-2
Nb93	= NB93	2.89640E-6	Cr52	= CR52	1.96591E-5
Fe56	= FE56A	1.82630E-5	Ni58	= NI58	4.65011E-5
Co59	= C059	4.41227E-8	Mo95	= M095	1.65389E-6
Ti48	= TI48	9.55682E-7	Al27	= AL27	9.63569E-7
Mn55	= MN55	1.70365E-7			
BNat	= B-NAT	2.35914E-5			
Zr91	= ZR91	3.65562E-4			

MIX 8 933.6			O16	= O16	4.49355E-2
-------------	--	--	-----	-------	------------

U235	= U235	7.39237E-4	1
------	--------	------------	---

U238	= U238	2.17285E-2	1 ;
------	--------	------------	-----

*-----

- Geometry ASSMB : a 17 X 17 normal PWR assembly

- contains C1 : cell without fuel

- C2 : normal fuel cell

- C3 : peripheral cell

- C4 : corner cell

*-----

ASSMB := GEO: :: CAR2D 9 9

X- DIAG X+ REFL Y- SYME Y+ DIAG

CELL C1 C2 C2 C1 C2 C2 C1 C2 C3

C2 C2 C2 C2 C2 C2 C2 C3

C2 C2 C2 C2 C2 C2 C3

C1 C2 C2 C1 C2 C3

C2 C2 C2 C2 C3

C1 C2 C2 C3

C2 C2 C3

C2 C3

C4

```

MERGE 1 3 12 11 12 12 11 12 15
      4 6 5 6 6 5 6 8
      13 5 6 6 5 6 8
      2 5 5 10 5 8
      13 5 5 6 8
      2 5 7 8
      13 7 8
      14 8
      9

```

```

TURN H H B H H B H H A
      H G G H G G H A
      A E E F E E A
      H H F H H A
      H E G H A
      H H A A
      H A A
      A A
      A

```

```
::: C1 := GEO: CARCEL 2
```

```
  MESHX 0.0 1.26472 MESHY 0.0 1.26472
```

```
  RADIUS 0.0 0.572435 0.613142 MIX 1 2 3 ;
```

```
::: C2 := GEO: C1 RADIUS 0.0 0.412660 0.474364 MIX 8 4 5 ;
```

```
::: C3 := GEO: C2 MESHX 0.0 1.31472 MIX 8 4 6 ;
```

```
::: C4 := GEO: C3 MESHY 0.0 1.31472 MIX 8 4 7 ;
```

```
;
```

```
*-----
```

```
* Self-Shielding calculation SHI
```

```
* Transport calculation SYBILT
```

```
*-----
```

```
DISCR := SYBILT: ASSMB ::
```

```
TITLE 'TCW02: 17 X 17 MULTICELL PWR BENCHMARK WITHOUT POISON'  
MAXR 400 ;  
  
LIBRARY := SHI: LIBRARY DISCR :: ;  
PIJ := ASM: LIBRARY DISCR :: ;  
  
*---  
  
* FLUX Computation  
  
*--  
  
***  
  
* --Direct and adjoint critical computation--  
  
***  
  
***  
  
* Default  
  
***  
  
ECHO "TYPE K PAF default computation" ;  
  
FLX := FLU: LIBRARY DISCR PIJ :: EDIT 2 TYPE K PAF ;  
  
FLX := DELETE: FLX ;  
  
***  
  
* Rebalancing cut off  
  
***  
  
ECHO "TYPE K PAF REBA OFF" ;  
  
FLX := FLU: LIBRARY DISCR PIJ :: EDIT 2 TYPE K PAF  
THER 300 REBA OFF ;  
  
FLX := DELETE: FLX ;  
  
***  
  
* Variational acceleration cut off  
  
***  
  
ECHO "TYPE K PAF ACCE OFF" ;  
  
FLX := FLU: LIBRARY DISCR PIJ :: EDIT 2 TYPE K PAF  
THER 300 ACCE 1 0 ;
```

```

FLX := DELETE: FLX ;

***

* --Generalized adjoint computation
***

**

* Default
**

ECHO "GAF DEFAULT COMPUTATION" ;

FLX EDITION := SAD: LIBRARY DISCR PIJ :: EDIT 2 TYPE K
COND 10 69 MERGE MIX 1 2 2 2 1 1 1 1 SELE NUSIGF ;
FLX EDITION := DELETE: FLX EDITION ;

**

* Relancing cut off & contamination
**

ECHO "GAF REBA OFF INAD ON" ;

FLX EDITION := SAD: LIBRARY DISCR PIJ :: EDIT 2 TYPE K
COND 10 69 MERGE MIX 1 2 2 2 1 1 1 1 SELE NUSIGF
EXTE 12 THER 300 REBA OFF INAD ON ;
FLX EDITION := DELETE: FLX EDITION ;

**

* Relancing cut off & no contamination
**

ECHO "GAF REBA OFF INAD OFF" ;

FLX EDITION := SAD: LIBRARY DISCR PIJ :: EDIT 2 TYPE K
COND 10 69 MERGE MIX 1 2 2 2 1 1 1 1 SELE NUSIGF
INAD OFF EXTE 12 THER 300 REBA OFF ;
FLX EDITION := DELETE: FLX EDITION ;

**

```

• Rebalancing on & no contamination

**

ECHO "GAF REBA ON NO CONTAMINATION" ;

FLX EDITION := SAD: LIBRARY DISCR PIJ :: EDIT 2 TYPE K

COND 10 69 MERGE MIX 1 2 2 2 1 1 1 1 SELE NUSIGF

EXTE 12 THER 300 REBA ON CGPA 0.0 ;

*---

* MEMORY RELEASE

*---

END: ;

III.1.3 CANDU

* DATE: 2000/09/01

* OBJECT: TEST-CASE TO VALIDATE ADJOINT
* AND GENERALIZED ADJOINT COMPUTATION

*-----

* MODIFIED TEST CASE TCW05

* CANDU-6 ANNULAR CELL

* WIMS-AECL 69 GROUPS LIBRARY FILE WIMSLIB

* POWER (KW) = 615.00000

* BURN POWER (KW/KG) = 31.97130

* URANIUM MASS = 19.23600

* UO2 REAL DENSITY = 10.59300

* UO2 EFF DENSITY = 10.43750

* UO2 TEMPERATURE = 941.28998

* ENRICHMENT = 0.71140

* COOLANT D2 AT % = 99.222

* MODERATOR D2 AT % = 99.911

* NUMBER OF DAYS = 50

*

* REF: R. Roy et al. Ann. Nucl. Energy 21, 115 (1994)

*-----

*

*-----

* Define STRUCTURES and MODULES used

*-----

LINKED_LIST

LIBRARY CANDU6F CANDU6S VOLMATF PIJ FLUXD EDITION ;

SEQ_BINARY

INTLINS INTLINF ;

MODULE

GEO: EXCELT: LIB: ASM: FLU:

DELETE: END: UTL: SAD: ;

*-----

* Microscopic cross sections from file WIMSLIB format WIMS-AECL

*-----

LIBRARY := LIB: ::

NMIX 10 CTRA WIMS

DEPL LIB: WIMS FIL: WIMSLIB

MIXS LIB: WIMS FIL: WIMSLIB

MIX 1	560.66	0.81212		O16	= O16	7.99449E-1
	D2D20	= D2D20	1.99768E-1	H1H20	= H1H20	7.83774E-4
MIX 2	560.66	6.57		Nb93	= NB93	2.50000
	BNat	= B-NAT	2.10000E-4			
	Zr91	= ZR91	9.75000E+1			
MIX 3	345.66	0.0014		He4	= HE4	1.00000E+2
MIX 4	345.66	6.44		Fe56	= FE56A	1.60000E-1
	Ni58	= NI58	6.00000E-2	Cr52	= CR52	1.10000E-1
	BNat	= B-NAT	3.10000E-4			
	Zr91	= ZR91	9.97100E+1			
MIX 5	345.66	1.082885		O16	= O16	7.98895E-1
	D2D20	= D2D20	2.01016E-1	H1H20	= H1H20	8.96000E-5
MIX 6	941.29	10.4375010		O16	= O16	1.18473E+1
	Xe135	= XE135	0.0			
	U235	= U235	6.27118E-1			1
	U238	= U238	8.75256E+1			1
	U236	= U236	0.0			1
	Pu239	= PU239	0.0			1
MIX 7	COMB 6	1.0				

```

MIX 8 COMB 6 1.0
MIX 9 COMB 6 1.0
MIX 10 560.66 6.44 Fe56 = FE56A 1.60000E-1
Ni58 = NI58 6.00000E-2 Cr52 = CR52 1.10000E-1
BNat = B-NAT 3.10000E-4
Zr91 = ZR91 9.97100E+1 ;

*-----
• Geometry CANDU6S : 13 regions annular cluster for self-shielding
• CANDU6F : 31 regions annular cluster for transport
*-----

CANDU6S := GEO: :: TUBE 5
R+ REFL RADIUS 0.00000 5.16890 5.60320 6.44780 6.58750 16.12171
MIX 1 2 3 4 5
CLUSTER ROD1 ROD2 ROD3 ROD4
::: ROD1 := GEO: TUBE 2 MIX 6 10 NPIN 1 RPIN 0.0000 APIN 0.0000
RADIUS 0.00000 0.6122 0.6540 ;
::: ROD2 := GEO: ROD1 MIX 7 10 NPIN 6 RPIN 1.4885 APIN 0.0000 ;
::: ROD3 := GEO: ROD1 MIX 8 10 NPIN 12 RPIN 2.8755 APIN 0.261799 ;
::: ROD4 := GEO: ROD1 MIX 9 10 NPIN 18 RPIN 4.3305 APIN 0.0 ; ;

CANDU6F := GEO: CANDU6S :: SPLITR 6 1 1 1 10
::: ROD1 := GEO: ROD1 SPLITR 2 1 ;
::: ROD2 := GEO: ROD2 SPLITR 2 1 ;
::: ROD3 := GEO: ROD3 SPLITR 2 1 ;
::: ROD4 := GEO: ROD4 SPLITR 2 1 ; ;

*----
• C.P. matrix computation
*----

VOLMATF INTLINF := EXCELT: CANDU6F ::
TITLE 'TCWW05: CANDU-6 ANNULAR POWER= 31.971 FUEL TEMP= 941.29'
```

```
EDIT 0 MAXR 31 TRAK TISO 5 10.0 SYMM 12 ;
PIJ := ASM: LIBRARY VOLMATF INTLINF ;
*---
* Flux Computation
*---
***
* --Direct and adjoint critical computation--
***
***
* Default
***
ECHO "TYPE K PAF default computation" ;
FLUXD := FLU: LIBRARY VOLMATF PIJ :: EDIT 2 TYPE K PAF ;
FLUXD := DELETE: FLUXD ;
***
* Rebalancing cut off
***
ECHO "TYPE K PAF REBA OFF" ;
FLUXD := FLU: LIBRARY VOLMATF PIJ :: EDIT 2 TYPE K PAF
THER 300 REBA OFF ;
FLUXD := DELETE: FLUXD ;
***
* Variational acceleration cut off
***
ECHO "TYPE K PAF ACCE OFF" ;
FLUXD := FLU: LIBRARY VOLMATF PIJ :: EDIT 2 TYPE K PAF
THER 300 ACCE 1 0 ;
FLUXD := DELETE: FLUXD ;
***
```

```

* --Generalized adjoint computation
***
**
* Default
**
ECHO "GAF  DEFAULT COMPUTATION" ;
FLUXD EDITION := SAD: LIBRARY VOLMATF PIJ  :: EDIT 2 TYPE K
COND  20 69 MERGE MIX 1 1 1 1 1 2 2 2 2 1 SELE  NUSIGF  ;
FLUXD EDITION := DELETE: FLUXD EDITION ;
**
* Relancing cut off & contamination
**
ECHO "GAF  REBA OFF INAD ON" ;
FLUXD EDITION := SAD: LIBRARY VOLMATF PIJ  :: EDIT 2 TYPE K THER 300
COND  20 69 MERGE MIX 1 1 1 1 1 2 2 2 2 1
SELE  NUSIGF REBA OFF INAD ON ;
FLUXD EDITION := DELETE: FLUXD EDITION ;
**
* Relancing cut off & no contamination
**
ECHO "GAF REBA OFF INAD OFF" ;
FLUXD EDITION := SAD: LIBRARY VOLMATF PIJ  :: EDIT 2 TYPE K
COND  20 69 MERGE MIX      1 1 1 1 1 2 2 2 2 1
SELE  NUSIGF INAD OFF EXTE 12 THER 300 REBA OFF  ;
FLUXD EDITION := DELETE: FLUXD EDITION ;
**
* Rebalancing on & no contamination
**
ECHO "GAF REBA ON  NO CONTAMINATION " ;

```

```
FLUXD EDITION := SAD: LIBRARY VOLMATF PIJ :: EDIT 2 TYPE K
COND 20 69 MERGE MIX 1 1 1 1 1 2 2 2 2 1
SELE NUSIGF EXTE 12 THER 300 REBA ON CGPA 0.0 ;
*---
* MEMORY RELEASE
*---
INTLINF := DELETE: INTLINF ;
END: ;
```

III.2 Théorie des perturbations : tests et validation

III.2.1 "Small Cell"

- DATE: 2000/09/01
- OBJECT: TEST CASE TO VALIDATE PERTURBATION & LINEAR COMBINATIONS
- WITH OR WITHOUT TOTAL XS PERTURBATION (alfa3)
- SMALL CELL MODIFIED

*-----

- FILES AND LISTS

*-----

REAL

```
NSF1      NSF2      SIG122      SIG322      SIGT1      SIGT2 :=
0.022141  0.496970  0.358282   1.335170   0.276383  0.278610 ;
```

REAL

```
alfa1 alfa2 alfa3 :=
0.05  0.05  0.0 ;
```

```
EVALUATE NSF1 := NSF1 1.0 alfa1 + * ;
```

```
EVALUATE NSF2 := NSF2 1.0 alfa2 - * ;
```

```
EVALUATE SIG122 := SIG122 1.0 alfa1 - * ;
```

```
EVALUATE SIG322 := SIG322 1.0 alfa2 + * ;
```

```
EVALUATE SIGT1 := SIGT1 1.0 alfa3 + * ;
```

```
EVALUATE SIGT2 := SIGT2 1.0 alfa3 - * ;
```

LINKED_LIST

```
MOSTELC TRACK MACRO MACROP SYS SYSP FLUX
FLUP EDITION ;
```

```

SEQ_ASCII
  TMP TMP1 ;
SEQ_BINARY
  INTLIN ;
*-----
*  MODULES
*-----
MODULE
  GEO: EXCELT: MAC: ASM: FLU: EDI: DELETE: END: SAD: PER:  ;
*-----
*  CROSS SECTIONS
*-----
*
MACRO := MAC: ::
  NGRO 2 ANIS 1 NMIX 3 NIFI 1
  READ INPUT
MIX 1  TOTAL      0.392175  0.622581
      NUSIGF      0.022141  0.496970
      CHI         1.0      0.0
*      SCAT  2 2   SIG 2->1    SIG 1->1
*              SIG 2->2    SIG 1->2
      SCAT  2 2   0.001451  0.361893
              2 2   0.358282  0.000715

MIX 2  TOTAL      0.276383  0.278610
      SCAT  2 2   0.000774  0.274505
              2 2   0.273807  0.000288

MIX 3  TOTAL      0.439812  1.355650
      SCAT  2 2   0.002672  0.411998

```

2 2 1.335170 0.021280 ;

*-----

* PERTURBED MACROLIB

*-----

MACROP := MAC: ::

NGRO 2 ANIS 1 NMIX 3 NIFI 1

READ INPUT

MIX 1	TOTAL		0.392175	0.622581
	NUSIGF		<<NSF1>>	<<NSF2>>
	CHI		1.0	0.0
*	SCAT	2 2	SIG 2->1	SIG 1->1
*			SIG 2->2	SIG 1->2
	SCAT	2 2	0.001451	0.361893
		2 2	<<SIG122>>	0.000715
MIX 2	TOTAL		<<SIGT1>>	<<SIGT2>>
	SCAT	2 2	0.000774	0.274505
		2 2	0.273807	0.000288
MIX 3	TOTAL		0.439812	1.355650
	SCAT	2 2	0.002672	0.411998
		2 2	<<SIG322>>	0.021280 ;

*-----

* GEOMETRIES

*-----

MOSTELC := GEO: :: CARCEL 2

```

X- REFL X+ REFL
Y- REFL Y+ REFL
MESHX 0.0 1.2647
MESHY 0.0 1.2647
RADIUS 0.0 0.41 0.47
MIX 1 2 3 ;

*-----
* TRANSPORT CALCULATION FOR KEFF
*-----
TRACK INTLIN := EXCELT: MOSTELC ::
TITLE 'SMALL CELL COOLED'
MAXR 3
ANIS 1
TRAK TISO 12 20.0 ;

SYS := ASM: MACRO TRACK INTLIN ;
SYSP := ASM: MACROP TRACK INTLIN ;

*-----
* FLUX COMPUTATION
*-----
FLUX EDITION := SAD: MACRO TRACK SYS INTLIN :: EDIT 2 TYPE K
COND 2 MERGE MIX 1 1 1 EXTE 10 ;

• NB: OPTION NCOR SHOULD BE USED IF CORRECTION DUE TO
• FLUX1 IS TO BE REMOVED:
*NCOR COND 2 MERGE MIX 1 1 1 EXTE 10 ;

*----
* PERTURBED FLUX
*----
FLUP := FLU: SYSP TRACK MACROP :: TYPE K PAF EDIT 2 ;

*-----

```

* PERTURBATIONS

*-----

*-----

* PERTURBED HOMOGENIZED DATA CALCULATION

*----

EDITION := PER: EDITION MACRO TRACK FLUX MACROP FLUP ::
SAVE ON MACROPCAL TYPE CALC ;

*-----

* EXACT PERTURBATION

*----

EDITION := PER: EDITION MACRO TRACK FLUX MACROP FLUP ::
SAVE ON MACROPEX TYPE PER ;

*-----

* STANDARD PERTURBATION

*----

EDITION := PER: EDITION MACRO TRACK FLUX MACROP ::
SAVE ON MACROPAP TYPE DIR ;

*-----

* OTUPUT

*-----

TMP := EDITION ;

*-----

* MEMORY RELEASE

*-----

INTLIN := DELETE: INTLIN ;

END: ;

III.2.2 REP 17x17

```

* DATE: 2000/09/01
* OBJECT: TEST-CASE TO VALIDATE ADJOINT
* AND GENERALIZED ADJOINT COMPUTATION
*-----
* MODIFIED TEST CASE TCWW02
* 17 X 17 PWR ASSEMBLY WITHOUT POISON
* WIMS-AECL 69 GROUPS LIBRARY FILE WIMSLIB
*-----
* Define STRUCTURES and MODULES used
*-----
REAL TEMP1 TEMP2 :=
579.9 933.6 ;
REAL alfa :=
0.001 ;
EVALUATE TEMP1 := TEMP1 1.0 alfa + * ;
EVALUATE TEMP2 := TEMP2 1.0 alfa - * ;
LINKED_LIST
  ASSMB DISCR LIBRARY PIJ PIJP FLX FLP EDITION MACRO MACROP ;
SEQ_ASCII
  TMP ;
MODULE
  LIB: GEO: SYBILT: SHI: ASM: FLU:
  DELETE: SAD: END: UTL: PER: MAC: ;
*-----
* Microscopic cross sections from file WIMSLIB format WIMS-AECL
*-----
LIBRARY := LIB: ::

```

NMIX 8 CTRA WIMS

MIXS LIB: WIMS FIL: WIMSLIB

MIX 1 579.9

H1H20	= H1H20	4.76690E-2	O16H20	= O16H20	2.38345E-2
BNat	= B-NAT	2.38103E-5			

MIX 2 579.9

Cr52	= CR52	7.54987E-5	Fe56	= FE56A	1.47624E-4
Zr91	= ZR91	4.18621E-2			

MIX 3 579.9

H1H20	= H1H20	4.65292E-2	O16H20	= O16H20	2.32646E-2
Nb93	= NB93	7.07082E-6	Cr52	= CR52	4.79927E-5
Fe56	= FE56A	4.45845E-5	Ni58	= NI58	1.13521E-4
Co59	= C059	1.07714E-7	Mo95	= M095	4.03755E-6
Ti48	= TI48	2.33305E-6	Al27	= AL27	2.35231E-6
Mn55	= MN55	4.15901E-7			
BNat	= B-NAT	2.32761E-5			
Zr91	= ZR91	8.92427E-4			

MIX 4 579.9

Cr52	= CR52	7.07291E-5	Fe56	= FE56A	1.38298E-4
Zr91	= ZR91	3.92175E-2			

MIX 5 579.9

H1H20	= H1H20	4.71346E-2	O16H20	= O16H20	2.35673E-2
Nb93	= NB93	3.31482E-6	Cr52	= CR52	2.24991E-5
Fe56	= FE56A	2.09013E-5	Ni58	= NI58	5.32188E-5
Co59	= C059	5.04968E-8	Mo95	= M095	1.89281E-6
Ti48	= TI48	1.09374E-6	Al27	= AL27	1.10277E-6
Mn55	= MN55	1.94976E-7			
BNat	= B-NAT	2.35598E-5			
Zr91	= ZR91	4.18372E-4			

MIX 6 579.9

H1H20	= H1H20	4.71676E-2	O16H20	= O16H20	2.35838E-2
Nb93	= NB93	3.11049E-6	Cr52	= CR52	2.11122E-5
Fe56	= FE56A	1.96130E-5	Ni58	= NI58	4.99383E-5
Co59	= CO59	4.73842E-8	Mo95	= MO95	1.77614E-6
Ti48	= TI48	1.02632E-6	Al27	= AL27	1.03479E-6
Mn55	= MN55	1.82957E-7			
BNat	= B-NAT	2.35753E-5			
Zr91	= ZR91	3.92583E-4			

MIX 7 579.9

H1H20	= H1H20	4.72020E-2	O16H20	= O16H20	2.36010E-2
Nb93	= NB93	2.89640E-6	Cr52	= CR52	1.96591E-5
Fe56	= FE56A	1.82630E-5	Ni58	= NI58	4.65011E-5
Co59	= CO59	4.41227E-8	Mo95	= MO95	1.65389E-6
Ti48	= TI48	9.55682E-7	Al27	= AL27	9.63569E-7
Mn55	= MN55	1.70365E-7			
BNat	= B-NAT	2.35914E-5			
Zr91	= ZR91	3.65562E-4			

MIX 8 933.6

			O16	= O16	4.49355E-2
U235	= U235	7.39237E-4			
U238	= U238	2.17285E-2			

*-----

- * Geometry ASSMB : a 17 X 17 normal PWR assembly
- * contains C1 : cell without fuel
- * C2 : normal fuel cell
- * C3 : peripheral cell
- * C4 : corner cell

*-----

ASSMB := GEO: :: CAR2D 9 9

X- DIAG X+ REFL Y- SYME Y+ DIAG

CELL C1 C2 C2 C1 C2 C2 C1 C2 C3

```

C2 C2 C2 C2 C2 C2 C2 C3
  C2 C2 C2 C2 C2 C2 C3
    C1 C2 C2 C1 C2 C3
      C2 C2 C2 C2 C3
        C1 C2 C2 C3
          C2 C2 C3
            C2 C3
              C4
MERGE 1  3 12 11 12 12 11 12 15
        4  6  5  6  6  5  6  8
          13 5  6  6  5  6  8
            2  5  5 10  5  8
              13 5  5  6  8
                2  5  7  8
                  13 7  8
                    14 8
                      9
TURN  H  H  B  H  H  B  H  H  A
      H  G  G  H  G  G  H  A
        A  E  E  F  E  E  A
          H  H  F  H  H  A
            H  E  G  H  A
              H  H  A  A
                H  A  A
                  A  A
                    A
::: C1 := GEO: CARCEL 2
      MESHX 0.0 1.26472 MESHY 0.0 1.26472
      RADIUS 0.0 0.572435 0.613142 MIX 1 2 3 ;
::: C2 := GEO: C1 RADIUS 0.0 0.412660 0.474364 MIX 8 4 5 ;

```

```

::: C3 := GEO: C2 MESHX 0.0 1.31472 MIX 8 4 6 ;
::: C4 := GEO: C3 MESHY 0.0 1.31472 MIX 8 4 7 ;
;
*-----
• Self-Shielding calculation SHI
• Transport calculation SYBILT
*-----
DISCR := SYBILT: ASSMB ::
  TITLE 'TCW02: 17 X 17 MULTICELL PWR BENCHMARK WITHOUT POISON'
  MAXR 400 ;
LIBRARY := SHI: LIBRARY DISCR :: ;
LIBRARY := UTL: LIBRARY :: STEP UP MACROLIB ;
MACRO := LIBRARY ;
LIBRARY := DELETE: LIBRARY ;

LIBRARY := LIB: ::
  NMIX 8 CTRA WIMS
  MIXS LIB: WIMS FIL: WIMSLIB
  MIX 1 <<TEMP1>>
    H1H20 = H1H20 4.76690E-2 016H20 = 016H20 2.38345E-2
    BNat = B-NAT 2.38103E-5
  MIX 2 <<TEMP1>>
    Cr52 = CR52 7.54987E-5 Fe56 = FE56A 1.47624E-4
    Zr91 = ZR91 4.18621E-2
  MIX 3 <<TEMP1>>
    H1H20 = H1H20 4.65292E-2 016H20 = 016H20 2.32646E-2
    Nb93 = NB93 7.07082E-6 Cr52 = CR52 4.79927E-5
    Fe56 = FE56A 4.45845E-5 Ni58 = NI58 1.13521E-4
    Co59 = CO59 1.07714E-7 Mo95 = MO95 4.03755E-6
    Ti48 = TI48 2.33305E-6 Al27 = AL27 2.35231E-6

```

Mn55	= MN55	4.15901E-7			
BNat	= B-NAT	2.32761E-5			
Zr91	= ZR91	8.92427E-4			
MIX 4 <<TEMP1>>			O16	= O16	2.87335E-4
Cr52	= CR52	7.07291E-5	Fe56	= FE56A	1.38298E-4
Zr91	= ZR91	3.92175E-2			
MIX 5 <<TEMP1>>					
H1H20	= H1H20	4.71346E-2	O16H20	= O16H20	2.35673E-2
Nb93	= NB93	3.31482E-6	Cr52	= CR52	2.24991E-5
Fe56	= FE56A	2.09013E-5	Ni58	= NI58	5.32188E-5
Co59	= CO59	5.04968E-8	Mo95	= MO95	1.89281E-6
Ti48	= TI48	1.09374E-6	Al27	= AL27	1.10277E-6
Mn55	= MN55	1.94976E-7			
BNat	= B-NAT	2.35598E-5			
Zr91	= ZR91	4.18372E-4			
MIX 6 <<TEMP1>>					
H1H20	= H1H20	4.71676E-2	O16H20	= O16H20	2.35838E-2
Nb93	= NB93	3.11049E-6	Cr52	= CR52	2.11122E-5
Fe56	= FE56A	1.96130E-5	Ni58	= NI58	4.99383E-5
Co59	= CO59	4.73842E-8	Mo95	= MO95	1.77614E-6
Ti48	= TI48	1.02632E-6	Al27	= AL27	1.03479E-6
Mn55	= MN55	1.82957E-7			
BNat	= B-NAT	2.35753E-5			
Zr91	= ZR91	3.92583E-4			
MIX 7 <<TEMP1>>					
H1H20	= H1H20	4.72020E-2	O16H20	= O16H20	2.36010E-2
Nb93	= NB93	2.89640E-6	Cr52	= CR52	1.96591E-5
Fe56	= FE56A	1.82630E-5	Ni58	= NI58	4.65011E-5
Co59	= CO59	4.41227E-8	Mo95	= MO95	1.65389E-6
Ti48	= TI48	9.55682E-7	Al27	= AL27	9.63569E-7

```

Mn55      = MN55      1.70365E-7
BNat      = B-NAT    2.35914E-5
Zr91      = ZR91     3.65562E-4
MIX 8 <<TEMP2>>          016      = 016      4.49355E-2
U235      = U235     7.39237E-4 1
U238      = U238     2.17285E-2 1 ;

```

```

LIBRARY := SHI: LIBRARY DISCR :: ;
LIBRARY := UTL: LIBRARY :: STEP UP MACROLIB ;
MACROP := LIBRARY ;
PIJ := ASM: MACRO DISCR :: ;
PIJP := ASM: MACROP DISCR :: ;
ECHO "PERTURBED COMPUTATION" ;
FLP := FLU: MACROP DISCR PIJP :: EDIT 2 TYPE K ;
ECHO "GAF DEFAULT COMPUTATION" ;
FLX EDITION := SAD: MACRO DISCR PIJ :: EDIT 2 TYPE K
COND 69 MERGE MIX 1 1 1 1 1 1 1 1 ;
* NB: OPTION NCOR SHOULD BE USED IF CORRECTION DUE TO
* FLUX1 IS TO BE REMOVED:
* NCOR COND 69 MERGE MIX 1 1 1 1 1 1 1 1 ;
*-----
* PERTURBATIONS
*-----
*-----
* PERTURBED HOMOGENIZED DATA CALCULATION
*-----
EDITION := PER: EDITION MACRO DISCR FLX MACROP FLP ::
SAVE ON MACROPCAL TYPE CALC ;
*-----

```

* EXACT PERTURBATION

*----

EDITION := PER: EDITION MACRO DISCR FLX MACROP FLP ::

SAVE ON MACROPEX TYPE PER ;

*-----

* STANDARD PERTURBATION

*----

EDITION := PER: EDITION MACRO DISCR FLX MACROP ::

SAVE ON MACROPAP TYPE DIR ;

*-----

* OTUPUT

*-----

TMP := EDITION ;

END: ;

III.2.3 CANDU

- DATE: 2000/09/01
- OBJECT: TEST-CASE TO VALIDATE ADJOINT
- AND GENERALIZED ADJOINT COMPUTATION

*-----

- MODIFIED TEST CASE TCWW05
- CANDU-6 ANNULAR CELL
- WIMS-AECL 69 GROUPS LIBRARY FILE WIMSLIB
- POWER (KW) = 615.00000
- BURN POWER (KW/KG) = 31.97130
- URANIUM MASS = 19.23600
- UO2 REAL DENSITY = 10.59300
- UO2 EFF DENSITY = 10.43750
- UO2 TEMPERATURE = 941.28998
- ENRICHMENT = 0.71140
- COOLANT D2 AT % = 99.222
- MODERATOR D2 AT % = 99.911
- NUMBER OF DAYS = 50

*

- REF: R. Roy et al. Ann. Nucl. Energy 21, 115 (1994)

*-----

*

*-----

- Define STRUCTURES and MODULES used

*-----

REAL DENS1 DENS5 DENS6 :=
0.81212 1.082885 10.4375010 ;

REAL alfa :=

```

0.001 ;
EVALUATE DENS1 := DENS1 1.0 alfa + • ;
EVALUATE DENS5 := DENS5 1.0 alfa - • ;
EVALUATE DENS6 := DENS6 1.0 alfa - • ;

LINKED_LIST
  LIBRARY CANDU6F CANDU6S VOLMATF PIJ FLUXD EDITION
  FLUP MACRO MACROP PIJP DELTAMAC ;

SEQ_BINARY
  INTLINS INTLINF ;

SEQ_ASCII
  TMP ;

MODULE
  GEO: EXCELT: LIB: ASM: FLU:
  DELETE: END: UTL: SAD: PER: MAC: ;

*-----
• Microscopic cross sections from file WIMSLIB format WIMS-AECL
*-----

LIBRARY := LIB: ::
  NMIX 10 CTRA WIMS
  DEPL LIB: WIMS FIL: WIMSLIB
  MIXS LIB: WIMS FIL: WIMSLIB

MIX 1 560.66 0.81212          O16      = O16      7.99449E-1
      D2D20      = D2D20      1.99768E-1 H1H20    = H1H20    7.83774E-4
MIX 2 560.66 6.57           Nb93     = NB93     2.50000
      BNat       = B-NAT      2.10000E-4
      Zr91       = ZR91      9.75000E+1
MIX 3 345.66 0.0014         He4      = HE4      1.00000E+2
MIX 4 345.66 6.44          Fe56     = FE56A    1.60000E-1
      Ni58       = NI58      6.00000E-2 Cr52     = CR52     1.10000E-1

```

```

BNat      = B-NAT      3.10000E-4
Zr91      = ZR91      9.97100E+1

MIX 5 345.66  1.082885          016      = 016      7.98895E-1
      D2D20    = D2D20    2.01016E-1  H1H20    = H1H20    8.96000E-5
MIX 6 941.29 10.4375010          016      = 016      1.18473E+1
      Xe135    = XE135    0.0
      U235     = U235     6.27118E-1  1
      U238     = U238     8.75256E+1  1
      U236     = U236     0.0          1
      Pu239    = PU239    0.0          1

MIX 7 COMB 6 1.0
MIX 8 COMB 6 1.0
MIX 9 COMB 6 1.0

MIX 10 560.66  6.44          Fe56     = FE56A    1.60000E-1
      Ni58     = NI58     6.00000E-2  Cr52     = CR52     1.10000E-1
      BNat     = B-NAT     3.10000E-4
      Zr91     = ZR91     9.97100E+1 ;

```

```
LIBRARY := UTL: LIBRARY :: STEP UP MACROLIB ;
```

```
MACRO := LIBRARY ;
```

```
LIBRARY := DELETE: LIBRARY ;
```

```
LIBRARY := LIB: ::
```

```
NMIX 10 CTRA WIMS
```

```
DEPL LIB: WIMS FIL: WIMSLIB
```

```
MIXS LIB: WIMS FIL: WIMSLIB
```

```

MIX 1 560.66  <<DENS1>>          016      = 016      7.99449E-1
      D2D20    = D2D20    1.99768E-1  H1H20    = H1H20    7.83774E-4
MIX 2 560.66  6.57          Nb93     = NB93     2.50000
      BNat     = B-NAT     2.10000E-4

```

Zr91	=	ZR91	9.75000E+1			
MIX 3	345.66	0.0014		He4	=	HE4 1.00000E+2
MIX 4	345.66	6.44		Fe56	=	FE56A 1.60000E-1
Ni58	=	NI58	6.00000E-2	Cr52	=	CR52 1.10000E-1
BNat	=	B-NAT	3.10000E-4			
Zr91	=	ZR91	9.97100E+1			
MIX 5	345.66	<<DENS5>>		O16	=	O16 7.98895E-1
D2D20	=	D2D20	2.01016E-1	H1H20	=	H1H20 8.96000E-5
MIX 6	941.29	<<DENS6>>		O16	=	O16 1.18473E+1
Xe135	=	XE135	0.0			
U235	=	U235	6.27118E-1			1
U238	=	U238	8.75256E+1			1
U236	=	U236	0.0			1
Pu239	=	PU239	0.0			1
MIX 7	COMB	6	1.0			
MIX 8	COMB	6	1.0			
MIX 9	COMB	6	1.0			
MIX 10	560.66	6.44		Fe56	=	FE56A 1.60000E-1
Ni58	=	NI58	6.00000E-2	Cr52	=	CR52 1.10000E-1
BNat	=	B-NAT	3.10000E-4			
Zr91	=	ZR91	9.97100E+1 ;			

LIBRARY := UTL: LIBRARY :: STEP UP MACROLIB ;

MACROP := LIBRARY ;

LIBRARY := DELETE: LIBRARY ;

*-----

* Geometry CANDU6S : 13 regions annular cluster for self-shielding

* CANDU6F : 31 regions annular cluster for transport

*-----

CANDU6S := GEO: :: TUBE 5

```

R+ REFL RADIUS  0.00000 5.16890 5.60320  6.44780 6.58750 16.12171
MIX  1 2 3 4 5
CLUSTER ROD1 ROD2 ROD3 ROD4
::: ROD1 := GEO: TUBE 2 MIX 6 10 NPIN  1 RPIN 0.0000 APIN 0.0000
      RADIUS 0.00000 0.6122 0.6540 ;
::: ROD2 := GEO: ROD1 MIX 7 10 NPIN  6 RPIN 1.4885 APIN 0.0000 ;
::: ROD3 := GEO: ROD1 MIX 8 10 NPIN 12 RPIN 2.8755 APIN 0.261799 ;
::: ROD4 := GEO: ROD1 MIX 9 10 NPIN 18 RPIN 4.3305 APIN 0.0 ; ;
CANDU6F := GEO: CANDU6S :: SPLITR  6 1 1 1 10
::: ROD1 := GEO: ROD1 SPLITR 2 1 ;
::: ROD2 := GEO: ROD2 SPLITR 2 1 ;
::: ROD3 := GEO: ROD3 SPLITR 2 1 ;
::: ROD4 := GEO: ROD4 SPLITR 2 1 ; ;

*---
• C.P. matrix computation
*---
VOLMATF INTLINF := EXCELT: CANDU6F ::
      TITLE 'TCWW05: CANDU-6 ANNULAR POWER= 31.971 FUEL TEMP= 941.29'
      EDIT 0 MAXR 31 TRAK TISO 5 10.0 SYMM 12 ;
PIJ := ASM: MACRO VOLMATF INTLINF  ;
PIJP := ASM: MACROP VOLMATF INTLINF  ;

*---
• Flux Computation
*---
**
• Default
**
ECHO "PERTURBED  COMPUTATION" ;

```

FLUP := FLU: MACROP VOLMATF PIJP :: EDIT 2 TYPE K ;

ECHO "GAF DEFAULT COMPUTATION" ;

FLUXD EDITION := SAD: MACRO VOLMATF PIJ INTLINF :: EDIT 2 TYPE K

COND 69 MERGE MIX 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 ;

• NB: OPTION NCOR SHOULD BE USED IF CORRECTION DUE TO

• FLUX1 IS TO BE REMOVED:

* NCOR COND 69 MERGE MIX 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 ;

*-----

* PERTURBATIONS

*-----

*-----

• PERTURBED HOMOGENIZED DATA CALCULATION

*-----

EDITION := PER: EDITION MACRO VOLMATF FLUXD MACROP FLUP ::

SAVE ON MACROPCAL TYPE CALC ;

*-----

• EXACT PERTURBATION

*-----

EDITION := PER: EDITION MACRO VOLMATF FLUXD MACROP FLUP ::

SAVE ON MACROPEX TYPE PER ;

*-----

• STANDARD PERTURBATION

*-----

EDITION := PER: EDITION MACRO VOLMATF FLUXD MACROP ::

SAVE ON MACROPAP TYPE DIR ;

*-----

* OTUPUT

*-----

TMP := EDITION ;

*--

• MEMORY RELEASE

*---

INTLINF := DELETE: INTLINF ;

FLUXD EDITION := DELETE: FLUXD EDITION ;

END: ;

III.2.4 REP 17x17 et évolution

- DATE: 20001/03/01
- OBJECT: EVOLUTION ON A PWR ASSEMBLY
- PWR Assembly without BP Nomial/top/center/bottom /Wei SHEN
- ENDF/B-VI Library added
- * JPM/SYBIL MODULE
- IMPLICIT WATER GAP/ NO SPACER GRID
- Generated 97.08.02
- Modified 98.07.26
- Modified 01.02.05 (T. Courau: Updrage version 304)
- *-----
- modules and data structures
- *-----
- LINKED_LIST
- ASSMB DISCR1 DISCR2 LIBRARY CP CALC OUTFUEL OUTCOMP
- COMPO BURN CPO1 CPO2 EDIOUT COOL LIBCOOL ;
- MODULE
- GEO: JPMT: SYBILT: LIB: SHI: ASM: FLU: EDI: CPO: END:
- EVO: FREE: DELETE: INFO: ;
- SEQ_ASCII
- SEQ1 SEQ2 BU ;
- *-----
- local variables
- * a) burnup
- power = burnup power
- 39.95 kw/kg
- * evobeg = initial time for burnup interval 0

```

*           0.0 day
*   evoend = final time for burnup interval 0
*           0.0 day
*   evolim = final time for burnup loop (input unit: MWD/T)
*           876.0951189 day ( equal to 35,000 MWD/T(U) )
*           813.5168961 day ( equal to 32,500 MWD/T(U) )
*           750.9386733 day ( equal to 30,000 MWD/T(U) )
*   coollim = final time for cooling loop (input unit: year)
*           3650.0 day
*   rstep  = burnup interval
*           5.0 day
• b) library
*   LIBRARY = hot library name
*           E5WLIB • WIMSLIB • E6WLIB
*   LIBCOOL = hot library name
*           E5WLIB • WIMSLIB • E6WLIB
*   nam1H   = H1 isotope name
*           H-H2O • H1H2O • H1H2O
*   namB11  = Boron-11 isotope name
*           B11 • B-NAT • B11
*   namZr   = Zr isotope name
*           ZR-NAT • ZR91 • ZR91
*   namFe   = Fe isotope name
*           FE • FE56A • FE56
*   namCr   = Cr isotope name
*           CR • CR52 • CR52
*   namNi   = Ni isotope name

```

```
*          NI      • NI58      * NI58
*   namU8   = U238 isotope name
*          U238    • U238      • U238EC
* c) mixture properties
*   enrich  = fuel enrichment
*          3.2 weight %
*   Tfuel   = fuel temperature
*          944.77
*   Tcool   = coolant temperature
*          583.86
*   Tmode   = moderator temperature
*          583.86
*   Dfuel   = fuel density
*          10.2426
*   Dcool   = coolant density
*          0.70304
*   Dmode   = moderator density
*          0.70304
*   ppmB    = boron concentration
*          1000.0 ppm
*   wgtU8   = weight % U238 in UO2
*           computed using INFO:
*   wgtOX   = weight % O    in UO2
*           computed using INFO:
*   wgtU5   = weight % U235 in UO2
*           computed using INFO:
*   wgtB10  = weight % B-10 in moderator and coolant
```

```

*          wgtB10 := Dmode 1.102415E-08 * ppmB *y
*          wgtB11 = weight % B-10 in moderator and coolant
*          wgtB11 := wgtB10 4.050505 *
*-----
STRING TYPE := "NOMINAL" ;
! • TOP • BOTTOM * CENTER ;
STRING library := "ESWLIB" ;
! • WIMSLIB • ESWLIB ;

REAL
    enrich evolim :=
        3.2 32500. ;
*-----

REAL
    power Tfuel Tcool Tmode Dfuel Dcool Dmode ppmB ;

IF TYPE "NOMINAL" = THEN
    EVALUATE
        power Tfuel Tcool Tmode Dfuel Dcool Dmode ppmB :=
        39.95 944.77 584.88 584.88 10.2426 0.70304 0.70304 1072.0 ;

ELSEIF TYPE "TOP" = THEN
    EVALUATE
        power Tfuel Tcool Tmode Dfuel Dcool Dmode ppmB :=
        35.955 920. 599. 599. 10.2426 0.66404 0.66404 1072.0 ;

ELSEIF TYPE "BOTTOM" = THEN
    EVALUATE
        power Tfuel Tcool Tmode Dfuel Dcool Dmode ppmB :=
        35.955 876. 566. 566. 10.2426 0.74089 0.74089 1072.0 ;

ELSEIF TYPE "CENTER" = THEN
    EVALUATE

```

```

power   Tfuel  Tcool   Tmode    Dfuel   Dcool   Dmode   ppmB :=
47.94   1042.  584.88  584.88   10.2426 0.70304 0.70304 1072.0 ;

ENDIF ;

*-----
REAL
    evobeg evoend   coollim  rstep :=
    0.0    0.0      10.0    5.0 ;

EVALUATE
    evolim := evolim power / ;

INTEGER
    ngroup ngtrcor ngminsh ngmaxsh ngout ;

STRING
    nam1H namB11 namZr namFe namCr namNi namU8 ;

IF library "WIMSLIB" = THEN

    EVALUATE
        nam1H namB11 namZr namFe namCr namNi namU8 :=
        "H1"   "B-NAT" "ZR91" "FE56A" "CR52" "NI58" "U238" ;

ELSEIF library "E5WLIB" = THEN

    EVALUATE
        nam1H namB11 namZr  namFe namCr namNi namU8 :=
        "H-H2O" "B11"  "ZR-NAT" "FE"  "CR"  "NI"  "U238" ;

ELSEIF library "E6WLIB" = THEN

    EVALUATE
        nam1H namB11 namZr      namFe namCr namNi namU8 :=
        "H1"   "B11"   "ZR-NATE5" "FE56" "CR52" "NI58" "U238EC" ;

ENDIF ;

REAL
    wgtOX wgtU5 wgtU8 wgtB10 wgtB11 ;

```

```

*-----
• compute wgt% for fuel using INFO:
*-----
INFO: ::
      ENR: <<enrich>> WGT%
      LIB: WIMS FIL: <<library>>
      ISO: 3    U238 016 U235
      CALC WGT% UO2 >>wgtU8<< >>wgtOX<< >>wgtU5<<  ;

EVALUATE
      wgtB10 := Dmode 1.102415E-08 • ppmB • ;

EVALUATE
      wgtB11 := wgtB10 4.050505 • ;

*-----
• define mixtures of hot library
*-----
LIBRARY := LIB: ::
      MMIX      3
•MAXIMUM NUMBER OF MATERIAL MIXTURES•
      CTRA WIMS
•WIMS TYPE TRANSPORT CORRECTION•
      DEPL LIB: WIMS FIL: <<library>>
      MIXS LIB: WIMS FIL: <<library>>
      MIX 1 <<Tfuel>> <<Dfuel>>
• FUEL
      016 <<wgtOX>> INF
      U235 <<wgtU5>> INF 1
      U236 0.0      INF 1
      U238 = <<namU8>> <<wgtU8>> INF 1

```

```

    PU239 0.0      INF 1
    PU240 0.0      INF 1
    PU241 0.0      INF 1
    PU242 0.0      INF 1
    AM241 0.0      INF 1
    MIX 2 <<Tmode>> 5.7548
  • CLAD
    ZR = <<namZr>> 98.24 INF
    FE = <<namFe>> 0.21 INF
    CR = <<namCr>> 0.10 INF
    NI = <<namNi>> 1.45 INF
    MIX 3 <<Tcool>>
  • COOLANT OR MODERATOR
    H-H2O = <<nam1H>> 0.0470058 INF
    O16      0.0235029 INF
    B10      <<wgtB10>> INF
    B11 = <<namB11>> <<wgtB11>> INF
    ;
  *-----
  • define mixtures of cool library
  *-----
  LIBCOOL := LIB: ::
    NMIX      3
  *MAXIMUM NUMBER OF MATERIAL MIXTURES
    CTRA WIMS
  *WIMS TYPE TRANSPORT CORRECTION
    DEPL LIB: WIMS FIL: <<library>>
    MIXS LIB: WIMS FIL: <<library>>
    MIX 1 293.16 <<Dfuel>>
  • FUEL

```

```

016  <<wgtOX>>  INF
U235  <<wgtU5>>  INF 1
U236  0.0        INF 1
U238  = <<namU8>> <<wgtU8>>  INF 1
PU239 0.0        INF 1
PU240 0.0        INF 1
PU241 0.0        INF 1
PU242 0.0        INF 1
AM241 0.0        INF 1
MIX 2 293.16 5.7548
* CLAD
  ZR = <<namZr>> 98.24 INF
  FE = <<namFe>> 0.21 INF
  CR = <<namCr>> 0.10 INF
  NI = <<namNi>> 1.45 INF
MIX 3 293.16
* COOLANT OR MODERATOR
  H-H2O = <<namH>> 0.0667526  INF
  O16    0.0333763  INF
  B10    0.0        INF
  B11 = <<namB11>> 0.0        INF
;
ECHO "PROC(LibC6): LIBRARY object generated." ;
*-----
* define geometry
* 17 X 17 PWR ASSMBLY WITHOUT BP
*-----
ASSMB := GEO: :: CAR2D 9 9
  X- DIAG X+ REFL
  Y- SYME Y+ DIAG

```

```

CELL C3 C2 C2 C1 C2 C2 C1 C2 C4
      C2 C2 C2 C2 C2 C2 C2 C4
        C2 C2 C2 C2 C2 C2 C4
          C1 C2 C2 C1 C2 C4
            C2 C2 C2 C2 C4
              C1 C2 C2 C4
                C2 C2 C4
                  C2 C4
                    C5

```

- GUIDE TUBE

```

::: C1 := GEO: CARCEL 2
      MESHX 0.0 1.26 MESHY 0.0 1.26
      RADIUS 0.0 0.5625 0.6025 MIX 3 2 3
      ;

```

- NORMAL CELL

```

::: C2 := GEO: CARCEL 2
      MESHX 0.0 1.26 MESHY 0.0 1.26
      RADIUS 0.0 0.40950 0.475 MIX 1 2 3
      ;

```

- INSTRUMENT CELL

```

::: C3 := GEO: CARCEL 2
      MESHX 0.0 1.26 MESHY 0.0 1.26
      RADIUS 0.0 0.5625 0.6025 MIX 3 2 3
      ;

```

- NORMAL CELL + WATER GAP

```

::: C4 := GEO: CARCEL 2
      MESHX 0.0 1.302 MESHY 0.0 1.26
      RADIUS 0.0 0.40950 0.475 MIX 1 2 3
      ;

```

```

* NORMAL CELL + WATER GAP
  ::: C5 := GEO: CARCEL 2
    MESHX 0.0 1.302 MESHY 0.0 1.302
    RADIUS 0.0 0.40950 0.475 MIX 1 2 3
  ;
  ;
*-----
* Tracking PWR cell
* self shielding - JPMT:
* transport      - SYBIL:
*-----
DISCR1 := JPMT: ASSMB ::
  TITLE ' PWR FUEL ASSMBLYL - SHIELDING'
  MAXR 400 OLD ;
DISCR2 := SYBILT: ASSMB ::
  TITLE ' PWR FUEL ASSMBLY - TRANSPORT'
  MAXR 400 ;
*-----
* shield library
* compute collision probabilities
* solve transport equation
* edit
*-----
LIBRARY := SHI: LIBRARY DISCR1 :: ;
CP := ASM: LIBRARY DISCR2 :: ;
CALC := FLU: CP LIBRARY DISCR2 ::
  TYPE B B1 PNL ;
OUTFUEL := EDI: CALC LIBRARY DISCR2 ::
  EDIT 4 COND 4.0 MERGE MIX 1 0 0

```

MICR ALL SAVE ;

OUTCOMP := EDI: CALC LIBRARY DISCR2 ::

EDIT 4

COND 4.0 MERGE COMP MICR ALL

SAVE ;

*----

- burnup loop
- end loop when evobeg = 1000.0 days
- evoend = final time
- evobeg + rstep
- change rstep at various time to new step
- at evoend = 5.0 days -> rstep = 10.0 days
- at evoend = 15.0 days -> rstep = 15.0 days
- at evoend = 120.0 days -> rstep = 30.0 days
- * at evoend = 240.0 days -> rstep = 60.0 days
- at evoend = 420.0 days -> rstep = 90.0 days

WHILE evobeg evolim < DO

EVALUATE

evoend := evobeg rstep + ;

LIBRARY CALC := FREE: LIBRARY CALC ;

IF evobeg 0.0 = THEN

BURN LIBRARY := EVO: LIBRARY CALC DISCR2 ::

EDIT 2 EXPM 1.OE7

DEPL <<evobeg>> <<evoend>> DAY POWR <<power>> ;

ELSE

BURN LIBRARY := EVO: BURN LIBRARY CALC DISCR2 ::

```
EDIT 2 EXPM 1.0E7
DEPL <<evobeg>> <<evoend>> DAY POWR <<power>> ;

ENDIF ;

LIBRARY CALC := FREE: LIBRARY CALC ;

EVALUATE
    evobeg := evoend ;

*----
* SB letdown curve
*----
IF evoend 5.0 = THEN EVALUATE ppmB := 958.33 ;

ENDIF ;

IF evoend 15.0 = THEN EVALUATE ppmB := 875. ;

ENDIF ;

IF evoend 30.0 = THEN EVALUATE ppmB := 750. ;

ENDIF ;

IF evoend 45.0 = THEN EVALUATE ppmB := 625. ;

ENDIF ;

IF evoend 60.0 = THEN EVALUATE ppmB := 500. ;

ENDIF ;

IF evoend evolim = THEN EVALUATE ppmB := 0. ;

ENDIF ;

EVALUATE
    wgtB10 := Dmode 1.102415E-08 * ppmB * ;

EVALUATE
    wgtB11 := wgtB10 4.050505 * ;

LIBRARY := LIB: LIBRARY ::

MAXS

MIX 3
```

```

* COOLANT OR MODERATOR
      B10      <<wgtB10>>
      B11      <<wgtB11>>
;
*-----
• shield library
• compute collision probabilities
• solve transport equation
• edit
*-----
LIBRARY := SHI: LIBRARY DISCR1 :: ;
CP := FREE: CP ;
CP := DELETE: CP ;
CP := ASM: LIBRARY DISCR2 :: ;
CALC := FLU: CALC CP LIBRARY DISCR2 :: TYPE B B1 PNL ;
OUTFUEL := EDI: OUTFUEL CALC LIBRARY DISCR2 ::
      EDIT 4 COND 4.0 MERGE MIX 1 0 0
      MICR ALL SAVE ;

OUTCOMP := EDI: OUTCOMP CALC LIBRARY DISCR2 ::
      EDIT 4 COND 4.0 MERGE COMP MICR ALL
      SAVE ;
*-----
* update rstep if required
*-----
      IF evolim evoend - 90.0 <= THEN
          EVALUATE rstep := evolim evoend - ;
      ENDIF ;
      IF evoend 420.0 = THEN

```

```

        EVALUATE rstep := 90.0 ;
    ENDIF ;
    IF evoend 240.0 = THEN
        EVALUATE rstep := 60.0 ;
    ENDIF ;
    IF evoend 120.0 = THEN
        EVALUATE rstep := 30.0 ;
    ENDIF ;
    IF evoend 15.0 = THEN
        EVALUATE rstep := 15.0 ;
    ENDIF ;
    IF evoend 5.0 = THEN
        EVALUATE rstep := 10.0 ;
    ENDIF ;
ENDWHILE ;
*-----
* cooling for 10 years, time step is 0.5 year
*-----
    EVALUATE evobeg evoend rstep :=
        0.0 0.0 0.5 ;
    WHILE evobeg coollim < DO
        EVALUATE
            evoend := evobeg rstep + ;
        LIBRARY LIBCOOL CALC := FREE: LIBRARY LIBCOOL CALC ;
        IF evobeg 0.0 = THEN
            LIBCOOL := LIB: LIBCOOL LIBRARY ::
            MAXS
            MIX 1 1

```

```
      ;
      COOL LIBCOOL := EVO: LIBCOOL CALC DISCR2 ::
      EDIT 2 EXPM 1.0E7
      DEPL <<evobeg>> <<evoend>> YEAR COOL ;

ELSE
      COOL LIBCOOL := EVO: COOL LIBCOOL CALC DISCR2 ::
      EDIT 2 EXPM 1.0E7
      DEPL <<evobeg>> <<evoend>> YEAR COOL ;

ENDIF ;

EVALUATE
      evobeg := evoend ;

ENDWHILE ;

*-----
• extract cool library
*-----
      BU := LIBCOOL ;
*-----
• extract information
*-----
      SEQ1 := OUTFUEL ;
      SEQ2 := OUTCOMP ;
*-----
• finish execution
*-----
END: ;
```

III.3 Théorie des perturbations : applications

III.3.1 REP 17x17: propriétés homogénéisées sur l'assemblage et condensées à deux groupes d'énergie

- DATE: 20001/03/01
- OBJECT: EVALUATE TOP BOTTOM AND CENTER HOMOGENIZED PROPERTIES
- * USING PERTURBATION THEORY
- pwr Assembly without BP Nomial/top/center/bottom /Wei SHEN
- * ENDF/B-VI Library added
- JPM/SYBIL MODULE
- IMPLICIT WATER GAP/ NO SPACER GRID
-
- Generated 97.08.02
- Modified 98.07.26
- Modified 01.02.05 (T. Courau: Updrage version 304)
- Homogenized cross section production using perturbation theory
- *
 - *-----
 - modules and data structures
 - *-----
- LINKED_LIST
 - ASSMB DISCR LIBRARY CP CALC EDITION LIBPER ;
- MODULE
 - GEO: LIB: ASM: FLU: EDI: END:
 - DELETE: INFO: EXCELT: SAD: UTL: PER: ;
- SEQ_BINARY
 - TRACK ;

SEQ_ASCII

NOMINAL TOP BOTTOM CENTER EDIT1 ;

*-----

- library
- LIBRARY = library name WIMSLIB
- reference library: NOMINAL
- 3 cases: TOP BOTTOM CENTER

*-----

LIBRARY := NOMINAL ;

*-----

- define geometry
- 17 X 17 PWR ASSMBLY WITHOUT BP

*-----

ASSMB := GEO: :: CAR2D 9 9

X- DIAG X+ REFL

Y- SYME Y+ DIAG

CELL C3 C2 C2 C1 C2 C2 C1 C2 C4

C2 C2 C2 C2 C2 C2 C2 C4

C2 C2 C2 C2 C2 C2 C4

C1 C2 C2 C1 C2 C4

C2 C2 C2 C2 C4

C1 C2 C2 C4

C2 C2 C4

C2 C4

C5

- GUIDE TUBE

```

::: C1 := GEO: CARCEL 2
  MESHX 0.0 1.26 MESHY 0.0 1.26
  RADIUS 0.0 0.5625 0.6025  MIX 3 2 3
;

```

* NORMAL CELL

```

::: C2 := GEO: CARCEL 2
  MESHX 0.0 1.26 MESHY 0.0 1.26
  RADIUS 0.0 0.40950 0.475 MIX 1 2 3
;

```

* INSTRUMENT CELL

```

::: C3 := GEO: CARCEL 2
  MESHX 0.0 1.26 MESHY 0.0 1.26
  RADIUS 0.0 0.5625 0.6025  MIX 3 2 3
;

```

* NORMAL CELL + WATER GAP

```

::: C4 := GEO: CARCEL 2
  MESHX 0.0 1.302 MESHY 0.0 1.26
  RADIUS 0.0 0.40950 0.475 MIX 1 2 3
;

```

* NORMAL CELL + WATER GAP

```

::: C5 := GEO: CARCEL 2
  MESHX 0.0 1.302 MESHY 0.0 1.302
  RADIUS 0.0 0.40950 0.475 MIX 1 2 3
;
;

```

*-----

* Tracking PWR cell

* transport - EXCELT:

*-----

```

DISCR TRACK := EXCELT: ASSMB ::
  TITLE ' PWR FUEL ASSMBLYL - SHIELDING'
  MAXR 400 TRAK TISO 49 40.0 ;
*-----
• shield library
• compute collision probabilities
• solve transport equation
• edit
*-----
CP := ASM: LIBRARY DISCR TRACK :: ;
*----
• homogenized properties computation
• adjoint and generalized adjoint fluxes computation
*-----
CALC EDITION := SAD: CP LIBRARY DISCR TRACK ::
  TYPE K COND 4.0 MERGE MIX 1 1 1 NCOR SELE
  NUSIGF TOTAL SCAD ;
*-----
• perturbation : case TOP
*-----
LIBPER := TOP ;
EDITION := PER: EDITION CP DISCR TRACK CALC LIBRARY LIBPER ::
SAVE ON TOP ;
LIBPER := DELETE: LIBPER ;
*-----
* perturbation : case BOTTOM
*-----
LIBPER := BOTTOM ;
EDITION := PER: EDITION CP DISCR TRACK CALC LIBRARY LIBPER ::

```

```
SAVE ON BOTTOM ;
LIBPER := DELETE: LIBPER ;
*-----
• perturbation : case CENTER
*-----
LIBPER := CENTER ;
EDITION := PER: EDITION CP DISCR TRACK CALC LIBRARY LIBPER ::
SAVE ON CENTER ;
LIBPER := DELETE: LIBPER ;
*-----
• extract information
*-----
    EDIT1 := EDITION ;
*-----
• finish execution
*-----
    TRACK := DELETE: TRACK ;
END: ;
```