

Schéma numérique pour la résolution de l'équation du transport des neutrons avec la méthode des caractéristiques



François FÉVOTTE
Commissariat à l'Énergie Atomique
Centre de Saclay
CEA/DEN/DANS/DM2S/SERMA/LTSD

Résumé

Ce travail vise à mettre au point un schéma numérique de calcul efficace pour la simulation numérique du transport des neutrons dans les réacteurs nucléaires. La simulation numérique est le seul moyen d'obtenir certaines données neutroniques qu'il est impossible de mesurer en ligne dans le cœur du réacteur. Nous nous focaliserons dans cette étude sur la méthode des caractéristiques, qui est l'une des techniques numériques les plus efficaces pour résoudre l'équation de Boltzmann modélisant le transport neutronique.

Nous avons développé une nouvelle variation de la méthode des caractéristiques, permettant de relâcher les contraintes de finesse du maillage spatial et ainsi de diminuer la quantité de ressources informatiques nécessaires pour le calcul. Cette méthode a été testée et validée sur des cas industriels et les résultats numériques montrent qu'il est possible de relâcher le maillage d'un facteur 5 environ, ce qui pourrait se traduire par des gains de l'ordre de 30% sur le temps de calcul.

2.1 Introduction

Depuis leur conception jusqu'à leur démantèlement, les réacteurs nucléaires nécessitent de nombreuses études permettant de garantir leur bon fonctionnement, leur sûreté, leur efficacité, etc. A cause de la difficulté (voire impossibilité dans certains cas) d'effectuer des mesures physiques à l'intérieur du cœur du réacteur, la plupart de ces études sont réalisées en simulation.

La simulation complète d'un réacteur nucléaire fait intervenir de nombreux domaines (thermo-hydraulique, mécanique, neutronique, ...) et nécessite donc l'utilisation de codes de calculs très variés. La simulation du comportement de la population neutronique est l'une des étapes fondamentales, puisqu'elle permet entre autres de calculer la densité de puissance ou les taux d'épuisement du combustible.

La simulation neutronique s'appuie sur l'équation de Boltzmann pour modéliser la population neutronique. Parmi les différentes techniques numériques permettant de résoudre l'équation de Boltzmann stationnaire, la méthode des caractéristiques présente l'avantage d'opérer en géométrie non structurée, et d'offrir un bon rapport précision / temps de calcul. L'objectif de ce travail est de proposer des améliorations du schéma de calcul basé sur la méthode des caractéristiques à deux dimensions, afin de diminuer la quantité de ressources qu'il

requiert.

Nous exposerons dans un premier temps les fondements de la neutronique permettant d'établir l'équation de Boltzmann. Nous présenterons ensuite la méthode des caractéristiques « classique », puis les améliorations que nous lui avons apportées. On conclura en exposant des résultats numériques comparant les versions classique et améliorée de la méthode des caractéristiques sur des cas industriels.

2.2 Équation de Boltzmann

Avant d'écrire l'équation de Boltzmann, il convient de définir les grandeurs permettant de caractériser une population de neutrons. Nous travaillons dans un espace des phases à 6 dimensions :

- \mathbf{r} (3 coordonnées) : position géométrique ;
- v (1 coordonnée) : vitesse ¹ ;
- $\boldsymbol{\Omega}$ (2 coordonnées) : direction de propagation ².

La variable t permettra en outre de repérer l'instant considéré.

La population neutronique est toujours traitée d'un point de vue statistique, et représentée par la densité neutronique $n(\mathbf{r}, v, \boldsymbol{\Omega}, t)$, telle que $n(\mathbf{r}, v, \boldsymbol{\Omega}, t) d^3r dv d^2\Omega$ soit le nombre de neutrons à l'instant t dans un volume élémentaire ($d^3r, dv, d^2\Omega$) entourant le point $(\mathbf{r}, v, \boldsymbol{\Omega})$ dans l'espace des phases.

On pourra aussi caractériser une population neutronique grâce au flux, défini comme :

$$\phi(\mathbf{r}, v, \boldsymbol{\Omega}, t) = v n(\mathbf{r}, v, \boldsymbol{\Omega}, t).$$

Les taux de réaction $\tau(\mathbf{r}, v, \boldsymbol{\Omega}, t)$ sont définis de sorte que $\tau_i(\mathbf{r}, v, \boldsymbol{\Omega}, t) dt$ représente le nombre d'interactions de type i (par exemple : fission, absorption, ...) entre la population neutronique et le milieu qu'elle traverse, entre les instants t et $t+dt$. Un matériau est caractérisé par sa section efficace macroscopique Σ , de sorte que le taux de réaction pour une interaction i peut s'exprimer sous la forme :

$$\tau_i(\mathbf{r}, v, \boldsymbol{\Omega}, t) = \Sigma_i(\mathbf{r}, v, \boldsymbol{\Omega}, t) \phi(\mathbf{r}, v, \boldsymbol{\Omega}, t).$$

L'équation de Boltzmann est obtenue en établissant le bilan de variation du nombre de neutrons entre les

¹on pourrait aussi remplacer la vitesse v du neutron par son énergie E .

²on pourrait aussi remplacer les deux variables v et $\boldsymbol{\Omega}$ par un vecteur vitesse \mathbf{v} .

instants t et $t + dt$ dans un volume élémentaire de l'espace des phases. Les phénomènes physiques considérés sont :

- déplacement des neutrons (fuites) : le déplacement conduit à une disparition des neutrons traversant la surface sortante, et à une apparition de neutrons traversant la surface entrante du volume considéré ;
- disparitions par choc sur un noyau : le choc peut conduire à une absorption ou une diffusion (modification de la vitesse v et de la direction $\mathbf{\Omega}$). Ces interactions sont modélisées par la section efficace macroscopique totale du matériau Σ_t ;
- apparition par diffusion : si le choc n'est pas une absorption, un neutron de vitesse v et de direction $\mathbf{\Omega}$ est transféré vers $(v', \mathbf{\Omega}')$. Ce phénomène est modélisé par une section différentielle de diffusion $\Sigma_s(\mathbf{r}, v \rightarrow v', \mathbf{\Omega} \rightarrow \mathbf{\Omega}', t)$;
- sources de neutrons : si le choc donne lieu à la fission du noyau, des neutrons sont émis dans le système. Il est aussi possible qu'une source externe introduise des neutrons. Les sources de neutrons sont modélisées par une densité d'émission $S(\mathbf{r}, v, \mathbf{\Omega}, t)$

Ceci conduit à l'équation de Boltzmann suivante (dans laquelle les coordonnées $(\mathbf{r}, v, \mathbf{\Omega}, t)$ ont été omises dans un souci de simplification de l'écriture) :

$$\underbrace{\frac{1}{v} \frac{\partial \phi}{\partial t}}_{\text{variation temporelle}} = - \underbrace{\mathbf{\Omega} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \phi}_{\text{déplacement}} - \underbrace{\Sigma_t \phi}_{\text{chocs}} + \underbrace{Q \phi}_{\text{sources}} \quad (2.1)$$

Dans ce formalisme, l'opérateur Q comprend à la fois les sources de neutrons S (source externe et neutrons produits par fission), et les apparitions de neutron par diffusion. Son expression détaillée ne nous intéresse pas ici.

De plus amples informations à ce sujet sont disponibles dans [1] et [2].

2.3 Méthode des caractéristiques

La méthode des caractéristiques (*Method of Characteristics*, MOC) est très adaptée pour tous les problèmes de type transport. Nous récrivons l'équation de Boltzmann (2.1) en régime stationnaire :

$$(\mathbf{\Omega} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} + \Sigma)\phi = q, \quad (2.2)$$

où q représente le terme source.

En intégrant cette équation le long d'une trajectoire rectiligne t traversant une région i dans lequel on suppose Σ et q constants, on obtient les équations suivantes :

$$\phi_i^+(t, \mathbf{\Omega}) = \phi_i^-(t, \mathbf{\Omega}) e^{-\tau_i(t, \mathbf{\Omega})} + \frac{1 - e^{-\tau_i(t, \mathbf{\Omega})}}{\Sigma_i} q_i(\mathbf{\Omega}), \quad (2.3)$$

$$\phi_i(t, \mathbf{\Omega}) = \frac{q_i(\mathbf{\Omega})}{\Sigma_i} + \frac{\phi_i^-(t, \mathbf{\Omega}) - \phi_i^+(t, \mathbf{\Omega})}{\tau_i(t, \mathbf{\Omega})}, \quad (2.4)$$

avec les notations de la figure 2.1 : $\phi_i^\pm(t, \mathbf{\Omega})$ représente les flux sortant (+) et entrant (-) dans la région, $\phi_i(t, \mathbf{\Omega})$ est le flux moyen dans la région i le long de t , et $\tau_i(t, \mathbf{\Omega}) = \Sigma_i l_i(t, \mathbf{\Omega})$ représente la longueur optique de la région i sur la trajectoire t .

Ainsi, par application répétée des équations (2.3) et (2.4) le long d'une trajectoire rectiligne traversant le domaine géométrique, nous pouvons calculer le flux moyen dans chaque segment d'intersection de la trajectoire avec les régions du domaine.

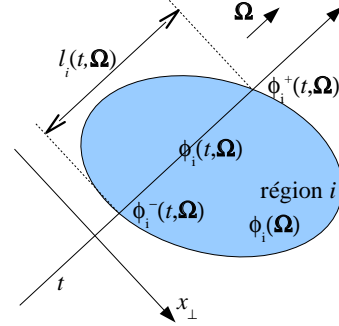


FIG. 2.1 – Transmission le long d'une trajectoire traversant une cellule.

En traçant un ensemble de trajectoires de direction $\mathbf{\Omega}$ régulièrement espacées d'un pas Δ , et recouvrant tout le domaine géométrique (cf. fig. 2.2), nous pouvons intégrer l'équation de bilan (2.4) le long de la direction transversale pour obtenir le flux moyen $\phi_i(\mathbf{\Omega})$ dans la région i :

$$\phi_i(\mathbf{\Omega}) = \frac{\sum_t \Delta l_i(t, \mathbf{\Omega}) \phi_i(t, \mathbf{\Omega})}{\sum_t \Delta l_i(t, \mathbf{\Omega})}. \quad (2.5)$$

La méthode des caractéristiques est présentée avec plus de détails dans [3], [4] et [5].

2.4 Méthode des macro-bandes

L'équation (2.5) est obtenue en considérant que la trajectoire t est représentative dans la bande de largeur Δ qui l'entoure. $\Delta l_i(t, \mathbf{\Omega})$ représente donc une approximation de la surface d'intersection entre cette bande et la région i .

Ceci conduit à de fortes approximations de la géométrie (fig. 2.2), qu'on peut regrouper en deux types de problèmes :

- discontinuités matérielles : les « extrémités » des régions ne sont pas forcément bien prises en compte. Par exemple, la première trajectoire de la figure 2.2 ne traverse pas le barreau de combustible central. La longueur d'intersection prise en compte dans l'équation (2.3) est donc nulle, alors que la bande associée à cette trajectoire traverse le barreau de combustible ;
- variations transversales des longueurs d'intersection : on considère que $l_i(t, \mathbf{\Omega})$ est constant par

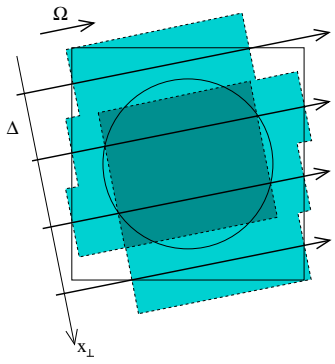


FIG. 2.2 – Approximation géométrique avec un traçage « classique » : exemple d’une cellule de type REP.

rapport à x_{\perp} sur toute la bande associée à t , ce qui n’est généralement pas le cas.

Le but de ce travail est d’éliminer ces approximations, en prenant en compte la variation transversale (suivant x_{\perp}) des longueurs d’intersection, ainsi que la position des discontinuités matérielles.

Afin de prendre en compte les discontinuités matérielles, nous utilisons la méthode suivante (fig. 2.3) :

1. pour chaque direction Ω considérée, on définit un maillage transversal de largeur de pas Δ (comme pour la méthode des caractéristiques classique) ;
2. chaque macro-bande définie par ce maillage est découpée en *sections* contenant les discontinuités matérielles³ ;
3. dans chaque section, les discontinuités matérielles sont projetées, ce qui permet de décomposer la section en sous-bandes homogènes⁴ ;
4. l’équation de transmission est utilisée dans chaque sous-bande ;
5. les flux ainsi calculés sont redistribués à chaque traversée d’une interface entre deux sections, de manière à garantir la conservation du bilan neutronique.

Lors de l’étape 4, nous modifions l’équation de transmission (2.3) pour prendre en compte les variations transversales de la longueur d’intersection l_i :

$$\phi_i^+(t, \Omega) = \phi_i^-(t, \Omega) T_i(t, \Omega) + \frac{1 - T_i(t, \Omega)}{\Sigma_i} q_i(\Omega). \quad (2.6)$$

T représente ici un coefficient de transmission moyen à travers la région i dans la bande associée à t :

$$T_i(t, \Omega) = \frac{1}{\Delta} \int_{I_t} e^{-\tau_i(x_{\perp}, \Omega)} dx_{\perp}, \quad (2.7)$$

où l’intégrale est calculée explicitement pour x_{\perp} variant dans la bande I_t de largeur Δ associée à la trajectoire t .

³les interfaces entre sections vérifient les conditions suivantes : (a) traverser la bande de part en part, (b) suivre les contours de régions de la bande, (c) être représentable par une fonction univaluee de x_{\perp} .

⁴ dans le sens où toutes les trajectoires de direction Ω dans une sous bande traversent les mêmes régions dans le même ordre.

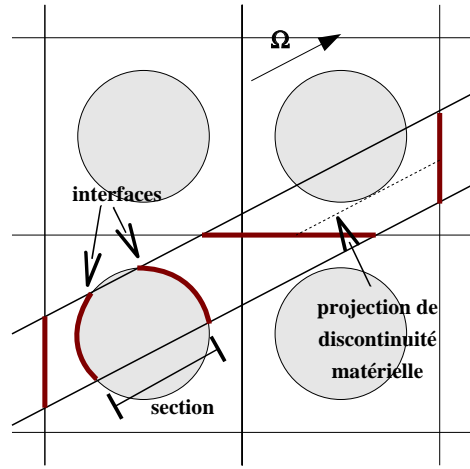


FIG. 2.3 – Exemple de macro-bande dans un réseau de cellules.

2.5 Résultats

2.5.1 Convergence

Si l’on considère le simple cas d’une cellule combustible REP (comme celle de la figure 2.2), nous pouvons remarquer que la méthode des caractéristiques classique présente une convergence non-uniforme en fonction du pas de traçage Δ (fig. 2.4). Ceci est dû à la mauvaise prise en compte des discontinuités matérielles. En revanche, la méthode des macro-bandes converge de manière monotone, même pour de grandes valeurs de Δ .

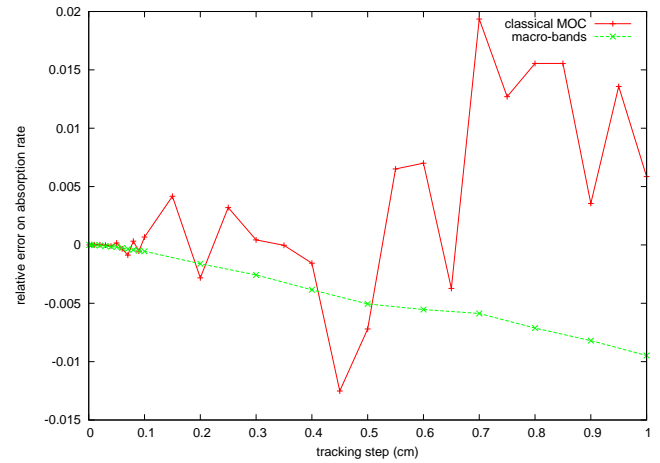


FIG. 2.4 – Erreur relative sur le taux d’absorption total en fonction du pas de traçage. Comparaison des résultats des deux méthodes sur une cellule REP.

2.5.2 Précision

Nous pouvons observer sur la figure 2.4 que la méthode des macro-bandes est également plus précise : pour le même pas de traçage, les erreurs obtenues avec les macro-bandes sont jusqu’à six fois moins impor-

tantes que pour la méthode classique⁵.

Ces résultats restent valables pour des géométries plus complexes et plus proches des cas industriels. Les figures 2.5, 2.6 et 2.7 montrent les mêmes données pour une cellule RBMK et un assemblage REP. Dans cet exemple, des compensations entre les erreurs dans différentes régions rendent la convergence de la méthode classique plus lisse. En revanche, le gain en précision avec la méthode des macro-bandes reste significatif.

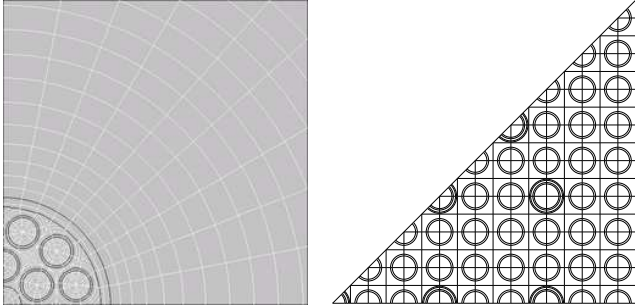


FIG. 2.5 – Géométrie d'une cellule RBMK et d'un assemblage REP.

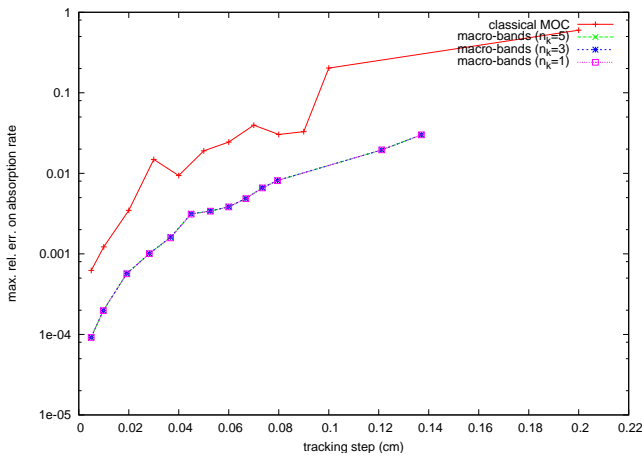


FIG. 2.6 – Erreur relative maximale sur les taux d'absorption par région, en fonction du pas de traçage. Comparaison des résultats des deux méthodes sur une cellule RBMK.

2.6 Conclusion

Nous avons développé une nouvelle variation de la méthode des caractéristiques, permettant de prendre en compte les discontinuités matérielles et d'améliorer la précision de l'intégration transversale du flux. Les gains en précision observés permettent de confirmer que la précision de la méthode des caractéristiques classique est sévèrement limitée par les approximations géométriques imposées par le traçage.

⁵sauf en certains points dans la zone de convergence non uniforme de la méthode classique.

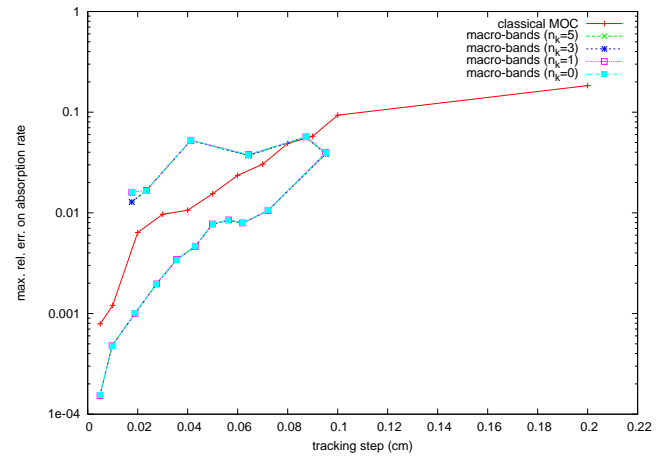


FIG. 2.7 – Erreur relative maximale sur les taux d'absorption par région, en fonction du pas de traçage. Comparaison des résultats des deux méthodes sur un assemblage REP.

Nos résultats numériques montrent que la méthode des macro-bandes donne une précision équivalente à la méthode classique, tout en permettant d'élargir le pas de traçage d'un facteur 5. Bien que des comparaisons directes soient inenvisageables pour le moment (l'implémentation de la méthode des macro-bandes n'est pas aussi optimisée que celle de la méthode traditionnelle), des calculs de complexité théoriques permettent de penser que la méthode des macro-bandes pourrait présenter des gains de l'ordre de 30%, à la fois en termes de temps de calcul et de mémoire nécessaire.

Remerciements

Ces travaux n'auraient pas pu être réalisés sans les idées, remarques et conseils éclairés de Simone SANTANDREA et Richard SANCHEZ, qui encadrent ma thèse au CEA.

Références

- [1] P. REUSS et J. BUSSAC. *Traité de neutronique*. Hermann, Paris, 1985.
- [2] P. REUSS. *Précis de neutronique*. EDP Sciences, 2003.
- [3] M. J. HALSALL. « CACTUS, a Characteristics Solution to the Neutron Transport Equations in Complicated Geometries ». AEEW-R 1291, Atomic Energy Establishment, UK, 1980.
- [4] N. Z. CHO. « Fundamentals and Recent Developments of Reactor Physics Methods ». *Nuclear Science and Technology*, 37 :25–78, 2005.
- [5] R. SANCHEZ, L. MAO et S. SANTANDREA. « Treatment of Boundary Conditions in Trajectory-Based Deterministic Transport Methods ». *Nuclear Science and Engineering*, 140 :23–50, 2002.