



Le chapitre « Principe des Réacteurs Nucléaires » est issu d'un cours préparé en commun par Fausto Malvagi, Cédric Jouanne et Eric Dumonteil. Il est basé essentiellement sur les références suivantes qui peuvent être lues pour plus d'informations:

[1] P. Reuss, « Précis de neutronique », EDP Sciences (2003)

[2] J.J. Duderstadt and W.R. Martin, « Transport Theory », Wiley-Interscience (1979)

[3] K.M. Case and P.F. Zweifel, « Linear Transport Theory », Addison-Wesley (1967)

[4] J.J. Duderstadt and L.J. Hamilton, « Nuclear Reactor Analysis », Wiley (1976)



« Principe des réacteurs nucléaires »

Introduction:

Ces notes de cours sont celles du chapitre « Principe des réacteurs nucléaires » (cours EN1700). L'idée est, après avoir rappelé certains éléments de physique nucléaire vus dans le chapitre précédent, de présenter le principe de fonctionnement des réacteurs à la lumière d'une discipline appelée « neutronique » (i.e. l'étude de la population des neutrons). Les équations fondamentales de la neutronique (l'équation exacte du transport, et l'approximation de la diffusion) seront finalement présentées et résolues dans des cas simples. On verra que l'équation de la diffusion, notamment, est un outil simple permettant de se forger une idée à la fois qualitative mais bien souvent aussi quantitative, du comportement d'un système nucléaire, comme le sont les cœurs des réacteurs nucléaires.

Plan:

- 1. Introduction à la neutronique
- 2. Equation de Boltzmann
- 3. Equation de la diffusion





I. Introduction à la neutronique

A) Les systèmes d'intérêt

Le but des réacteurs nucléaires est de mettre en œuvre une stratégie permettant de récupérer l'énergie produite par la fission des noyaux lourds induite par les neutrons. Elaborer une telle stratégie nécessite donc une connaissance approfondie des données de base de la physique nucléaire (interactions neutron/matière, sections efficaces, etc...), mais suppose aussi, préalablement à l'étude des équations gouvernant le transport des neutrons, de pouvoir définir les observables macroscopiques (densité, flux, taux de réaction) les caractérisant.



1) Définition de la neutronique

La neutronique est l'étude d'une population de neutrons. Elle s'inscrit entre la physique nucléaire (ou l'on étudie le comportement du noyau des atomes à l'aide, par exemple, d'interactions avec des neutrons) et la physique des réacteurs qui est plus complexe au sens où cette dernière prend en compte la modification du support de propagation des neutrons par ces derniers (et l'effet de rétroaction complexe qui en découle). Ainsi, de même que l'on a pu étudier dans le chapitre précédent l'équation gouvernant la stabilité des noyaux, c'est l'équation de Boltzmann linéaire qui décrit le comportement des populations de neutrons et leur transport (linéaire car on néglige les interactions neutrons/ neutrons, approximation plus délicate pour des particules chargées par exemple). Enfin ce sont les équations de Bateman qui décrivent les changements en concentrations isotopiques dues à la décroissance naturelle des isotopes mais également à l'irradiation sous flux.

Toutes ces équations ne peuvent malheureusement être résolues mathématiquement que dans des cas très simples, et à l'aide d'hypothèses forte concernant la géométrie ou les lois physiques (études multigroupes, approximation de la diffusion,...). Une étude qualitative fine nécessite la mise en œuvre de méthodes numériques comme par exemple les codes déterministes qui discrétisent l'espace, les angles et l'énergie (ex: Apollo2 et Apollo3 développés au CEA) ou les codes Monte Carlo qui transportent les neutrons un par un en reproduisant les différentes étapes de leur vie (ex: TRIPOLI-4).



La neutronique permet d'étudier les réacteurs nucléaires (ex: études de la fluence sur les cuves qui sont les pièces conditionnant la durée de vie du cœur, étude des pics de puissance) mais aussi différentes problématiques qui leur sont associées, comme celle du cycle du combustible (ex: études de sûreté-criticité ou d'accidents graves comme celui de Tokaï Mura en 1999).

Elle occupe par ailleurs une place importante pour R&D sur les réacteurs à fusion (ex: ITER à Cadarache) qui produisent des neutrons via la réaction de fusion suivante:

$$^{2}_{1}D + ^{1}_{3}T \rightarrow ^{4}_{2}He + n$$

Enfin, l'équation décrivant le transport des neutrons est applicable au transport d'autres particules neutres et est donc utilisée dans d'autres domaines que celui de la neutronique, comme le médical (traitement de tumeurs cancéreuses par gammathérapie), à l'astrophysique (description des étoiles à neutrons), à la biologie et à l'épidémiologie (propagation des virus via les mécanismes de branchement) etc...



2) Les systèmes d'intérêt

La France est dotée d'un parc nucléaire composé de 54 réacteurs à eau pressurisée (REP) en fonctionnement. Le combustible dans ces centrales est composé de dioxyde d'uranium (UO2) enrichi entre 3 et 5% en U5, l'eau pressurisée à 155 bars étant utilisée comme fluide modérateur (ralentissement des neutrons) et comme caloporteur. Sa température est d'environ 280°C en entrée de la cuve et de 320°C en sortie. Ce gain en température de l'eau du circuit primaire permet, via un mécanisme de détente dans le circuit secondaire de faire tourner des turbines qui transforment la chaleur en énergie électrique. Ce sont les fissions des noyaux lourds qui produisent l'énergie qui permet d'augmenter la température du caloporteur (l'eau). Sur 100 fissions dans le cœur, environ 250 neutrons sont produits (v \approx 2.5) et sont utilisés comme suit:

- 5 s' échappent du système
- 100 vont provoquer à leur tour des fissions
- 70 sont capturés par l'U8 pour produire des noyaux de Pu9
- 75 font des captures stériles



On remarque, sur cette image d'un cœur REP en cours de rechargement, une lumière bleue caractéristique de l'effet Tcherenkov. Cet effet est caractéristique de la propagation des particules chargée dans les milieux, qui peuvent avoir une vitesse supérieure à celle de la lumière (toujours dans un milieu). Elle représente l'équivalent, en théorie de l'électromagnétisme, du franchissement du mur du son en acoustique.



Les assemblages de l'image précédente sont dotés de barres de commande, l'une d'elles étant reproduite sur cette figure. La position des barres de contrôle est variable dans le cœur et permet, via un mécanisme de contrôle/commande, de piloter le cœur du réacteur en « étouffant » la réaction en chaine. Ces barres sont faites dans des alliages contenant des éléments chimiques dont les sections efficaces d'absorption de neutrons thermiques sont élevées (ex: bore, argent, indium, cadmium, cobalt etc...), et ont par conséquent des propriétés neutrophages permettant de diminuer le keff.



3) Les grandeurs d'intérêt

Quelles sont les grandeurs d'intérêt (les variables) permettant de caractériser les systèmes neutroniques que sont les cœurs? La population des neutrons est principalement décrite par 3 variables: sa densité en fonction de l'espace, en fonction du temps et en fonction de la criticité du système (le rapport entre le nombre de neutrons d'une génération et de celui de la précédente, dit keff). La criticité est importante puisqu'elle gouverne le démarrage de la réaction en chaine, mais conditionne également toute sa dynamique (par exemple les barres de commande ou l'utilisation de poisons consommables en pastille comme le bore ou le gadolinium, ainsi que la perte de réactivité qui altère la longueur des cycles sont décrits à l'aide de leur action sur le keff). L'étude de la dépendance spatiale est centrale également car la puissance dégagée ainsi que sa distribution sont reliées à la densité de neutrons (et donc au flux) via:

 $P \propto nb \ réactions = \sum_{f} \phi V$

Enfin, la dépendance temporelle de la densité de neutrons représente la cinétique du système et revêt une importance de premier ordre pour le pilotage du cœur (qui se fait essentiellement à l'aide des neutrons retardés comme on le verra plus tard).



Des calculs de cœurs plus complets requièrent la prise en compte de processus dépassant le cadre de la neutronique, comme la thermo-hydraulique ou la mécanique. Les codes simulant ces processus sont alors couplés avec les codes de neutronique pour réaliser des calculs multi-physiques, seuls capables de reproduire certains effets complexes. Ainsi, la rétroaction entre un code de neutronique et de thermo-hydraulique permet de trouver l'équilibre entre la carte de température et la distribution de la puissance (calcul de neutronique -> distribution de puissance -> calcul de thermo-hydraulique -> distribution de température -> nouvelles section efficaces -> calcul de neutronique -> ...). Ces calculs sont néanmoins très complexes (temps de calcul long, difficultés à mesurer la propagation des erreurs systématiques ou statistiques) et restent des enjeux forts pour les industriels, sur lesquels travaillent les principaux acteurs de la R&D en énergie comme le CEA.



4) Le calcul neutronique

Quelles sont les difficultés intrinsèques au calcul neutronique? Le principal problème est qu'il s'agit de calculer la densité neutronique (ou le flux) des neutrons dans un espace des phases de dimension 7 (position-vitesse-énergie-temps) et sur plusieurs ordres de grandeurs pour chacune des variables.



*) Problème spatial

Ainsi, pour un cœur de 1300 MW de 4m que l'on découpe en 40 tranches axiales et fait de 193 assemblages de 20 cm chacun, eux mêmes composés de 17*17 crayons combustibles (que l'on découpent généralement en 6 couronnes), il faut être en mesure de calculer le flux de neutrons sur 193*264*6*40≈10^7 volumes.

(NB: la gaine des crayons combustibles apparaissant sur la figure ci dessus est en zircaloy. Portée à 830°C par le combustible, elle provoque la production de dihydrogène par la réaction 2 H20 -> 2H2+O2. C' est cette production de dihydrogène qui est responsable de l'explosion observée dans les réacteurs 1 et 3 de la centrale nucléaire de Fukushima le 11 septembre 2011)



*) Spectre

Le maillage énergétique se doit également d'être fin pour couvrir le domaine des résonances et reproduire finement les fortes variations dans les sections efficaces d'absorptions et de diffusion qu'il couvre. De plus les fichiers d'évaluation des sections efficaces permettent d'accéder à des données de 10⁻¹¹ MeV jusqu'à 20 MeV. Ainsi, un code déterministe utilisera typiquement un maillage d'environ 200 groupes. On notera que certains codes Monte Carlo permettent quand à eux de suivre les neutrons de manière très fine en énergie (en interpolant les sections efficaces des librairies de données aux énergies précises des neutrons). Ces codes dits « ponctuels » reproduisent très bien le spectre énergétique des neutrons dans des systèmes complexes tridimensionnels mais sont couteux en temps de calcul.



*) Aspects temporels/cinétique

Plusieurs échelles de temps caractérisent la vie d'un cœur: celles ci sont liées à des effets rapides (milliseconde) caractérisant le temps de vie des neutrons, des processus de cinétique de l'ordre de la seconde ou de la minute (les neutrons retardés de quelques secondes produits par interaction faible permettent le pilotage du cœur, le mouvement des barres de commande actionnées par les humains mettent également quelques secondes), et enfin a l'évolution des compositions isotopiques du combustible due à la décroissance sous flux des différents isotopes (modélisée par l'équation de Batemann). Aucun de ces effets n'est à négliger si l'on souhaite décrire finement la cinétique d'un cœur et il est par conséquent fréquent de calculer des flux sur des découpages temporels à pas variables d'une centaine de pas.

Finalement, il convient de pouvoir avoir accès, à l'issue d'une simulation, a environ $10^{7*}10^{2*}10^{2}\approx 10^{11}$ valeurs de flux! Outre les problèmes liés aux temps de calcul, on voit également à l'aide de ces ordres de grandeur que les simulations de neutronique s'avèrent exigeantes en espace mémoire.



B) Les interactions neutrons-matière

Afin de simuler le transport des neutrons, un certain nombre d'hypothèses doit être fait, relativement réalistes et ne pénalisant ipso facto pas la qualité des résultats. Ces hypothèses sont:

- stabilité du neutron (en fait il se désintègre en proton par l'interaction faible $n \rightarrow p + e^- + \overline{v}_e$ en 11 minutes, temps long devant sa durée de vie neutronique)
- pas de collisions neutron/neutron (équation de Boltzmann linéaire... heureusement!)
- pas d'effets relativistes/gravitationnels



Les interactions des neutrons avec la matière peuvent alors se classer en 2 catégories:

• les interactions conservant l'énergie cinétique, dites diffusions (potentielles) élastiques

• celles ne la conservant pas (le quadri-vecteur énergie-impulsion est tout de même conservé!) . En effet, l'énergie cinétique seule peut ne pas être conservée: par exemple, lors d'une déformation des corps, celle ci peut être transformée en énergie interne puis en chaleur, de même pour la production d'états excités des noyaux...



Du point de vue du neutronicien, c'est le bilan des neutrons qui caractérise une réaction: une diffusion conserve le nombre de neutrons, quand une absorption peut se transformer soit en capture (le nombre de neutrons sortant est nul), soit en fission ou en (n,2n) etc... (plusieurs neutrons en voie de sortie).

Une fois définit le nombre de neutrons sortant, il s'agit d'évaluer leurs propriétés cinématiques:

• l'énergie de sortie. Celle ci est généralement plus faible que l'énergie d'entrée, sauf dans le domaine thermique ou dans certaines régions des résonances sur les noyaux lourds, ou l'up-scattering n'est pas négligeable. Elle peut également être plus élevée dans le cas des fissions ou l'énergie du neutron est autour de 2 MeV pour une fission sur l'U5)

• l'angle de sortie, car la réaction n'est généralement pas isotrope. Les évaluations fournissent la description des angles de sortie via des sections efficaces doublement différentielles angles/énergie (car l'énergie de sortie et la distribution angulaire sont évidemment corrélées)



C) Quelques isotopes et... la réaction en chaîne

1) Les isotopes notables

L'étude des sections efficaces microscopiques de certains isotopes revêt un intérêt particulier en neutronique. Ainsi, celle de l'hydrogène ou du deutérium révèle des sections efficaces de diffusion élastique bien plus élevée que les sections efficaces d'absorption: ces deux éléments constituent donc de bons modérateurs. La section d'absorption du deutérium étant relativement à celle de l'hydrogène très faible, on comprend l'intérêt d'une modération par eau lourde (bien plus onéreuse) que par eau légère.



De même on constate que la section totale du Bore (qui présente une dépendance en 1/v presque exacte) est presque exclusivement faite d'absorption, ce qui fait de cet élément un très bon poison neutronique.



Comme le combustible des REP est de l'oxyde d'uranium UO_2 , et que le modérateur/ caloporteur est de l'eau H_2O , l'étude du noyau d' O_{16} est importante. Celle ci révèle que les réactions privilégiées sur ce noyau sont des diffusions élastiques (et ce à toutes les énergies) qui peuvent être résonnantes. La distribution des angles de diffusion pour ces réactions laisse apparaître une anisotropie (vers l'avant) assez marquée aux énergies élevées.



La structure énergétique des sections efficaces de l'U₈ et de l'U₅ est très similaire: relativement plates et dominées par les diffusions élastiques dans le domaine rapide, ces sections laissent apparaître de grandes résonances (résonances résolues entre 10^{-6} et quelques 10^{-2} MeV pour l'U8 puis non résolues). Ces résonances constituent des « pièges » à neutrons dans le sens où ceux ci peuvent être absorbés dans la phase dite de ralentissement. Dans le domaine thermique les sections efficaces retrouvent une dépendance en 1/v.



On constate également que dans le cas de l' U_5 la section d'absorption domine dans tout le domaine thermique, et que l'absorption est elle même dominée par la fission. Cette propriété très importante fait de l' U_5 un très bon combustible dans le domaine thermique.



2) La réaction en chaine dans l'uranium

Les neutrons produit par fission sur ce noyau ont un spectre dont la moyenne est piquée à 2 MeV. Cette énergie élevée impose la présence d'un bon modérateur de neutrons afin que ceux ci puissent rejoindre le domaine thermique pour provoquer d'autres fissions sur les noyaux d'U₅. Pendant cette phase de ralentissement, déjà évoquée, les neutrons peuvent être absorbés soit par le modérateur (de l'eau dans le cas des REP) soit par les noyaux lourds eux même.



Nous avons vu que dans le domaine thermique la section microscopique de fission de l'U5 est supérieure à sa section de capture, mais est elle également supérieure à la section de capture de l'U8? Pour répondre à cette question il s'agit de comparer non pas les sections microscopiques mais les sections macroscopiques qui tiennent compte de l'abondance relative des isotopes. Même dans une proportion 100 fois moindre de l'U5 par rapport à l'U8 (0.7% d'U5 contre 99.3 d'U8 à l'état naturel), dans le domaine thermique la section (macroscopique) de fission de l'U5 reste effectivement supérieure à celle de capture de l'U8. Cela n'est pas vrai dans le domaine rapide où il faut un enrichissement important en U5 pour ne pas être systématiquement capturé par l'U8.







D) La vie du neutron et... la formule des 4 facteurs

1) Le ralentissement

Un bon modérateur est un élément/une molécule/un matériau capable de ralentir (i.e. de faire baisser l'énergie) des neutrons sans les absorber. Cinématiquement, on sait exprimer le rapport entre l'énergie sortante et entrante d'une collision, qui peut aller jusqu'à s'annuler lorsque le neutron choque un noyau d'hydrogène, de même poids que lui (cas du « carreau » en pétanque).



Mais si l'hydrogène ralentit bien (d'où l'utilisation d'H₂O comme modérateur dans les REP), son absorption n'est pas négligeable, à la différence du deutérium (malheureusement onéreux, mais mis en œuvre dans les réacteurs canadiens de type CANDU) dont la section d'absorption est de surcroît très faible. Le graphite peut également constituer un bon compromis: si son pouvoir ralentisseur est faible, il absorbe très peu les neutrons et est très peu couteux. Ces considérations ont menées au développement de la filière graphite/gaz (UNGG).





Les considérations sur les section efficaces ainsi que celles sur le ralentissement désignent bien deux filières de production d'énergie nucléaire différentes: dans les réacteurs rapides, les neutrons de ~2MeV issus de la fission peuvent provoquer eux même des fissions sur l'U5 sans être ralentis, et donc sans modérateur, au prix d'un enrichissement de la teneur en U5. La filière thermique quand à elle suppose de ralentir les neutrons mais utilise des combustibles faiblement enrichis en U5.



2) Les systèmes critiques

Le facteur de multiplication, noté k_{eff} , est une grandeur clé en neutronique. En effet ce facteur donne le nombre moyen de neutrons produit par un neutron initial. Ainsi, le nombre de neutrons à la génération n issu de ce neutron initial est de kⁿ: le nombre de neutrons fils est donné par une série géométrique, et quand n devient grand, ce nombre à la génération n tend vers 0 pour les systèmes sous-critiques (k_{eff} <1), vers l'infini pour les systèmes sur-critiques (k_{eff} >1) et se stabilise pour les systèmes exactement critiques.





Le k_{eff} peut être vu de plusieurs manières: si il est vrai qu'on peut l'écrire comme le rapport du nombre de neutrons à la génération n et le nombre de neutrons à la génération n+1, on peut également le définir comme le rapport entre les neutrons produits dans une générations et les neutrons ayant disparus dans cette même génération (par fuite et par absorption).



Si l'on imagine un système infini (i.e. dont aucun neutron ne peut fuir), le k_{eff} est alors appelé k_{∞} . On a trivialement $k_{eff} < k_{\infty}$.


On peut construire un système exactement critique à partir d'un système sans fuite présentant un $k_{\infty}>1$. La recherche de configurations très exactement critique est au centre des enjeux de la production d'énergie civile. Ces configurations peuvent être trouvées soit en ajustant la/les dimension(s) d'un système dont les compositions sont données (et de $k_{\infty}>1$) soit en jouant sur les compositions (enrichissement en U5 par exemple) d'un système ayant une géométrie donnée.



3) La formule des 4 facteurs

La formule des 4 facteurs a été mise au point par Enrico Fermi dans les années 50, lors de l'optimisation de la pile de Chicago (CP-1 était faite de 30 tonnes d'oxyde d'uranium, de 400 tonnes de graphite et divergea pour la première fois le 2 décembre 1942). Elle permet d'approximer le k_∞ en reprenant les différentes étapes de la vie d'un neutron, de sa naissance à une éventuelle réaction de fission dans le domaine thermique:

- * naissance à 2 MeV (éventuelles fissions rapides)
- * ralentissement (éventuelle absorption résonnante)
- * absorption dans le combustible (éventuelle capture)
- * fissions thermique



L'idée consiste à calculer le k_{∞} en mesurant pour chacune de ces étapes la probabilité qu'a le neutron de survivre pour faire finalement une réaction de fission dans le domaine thermique. A l'issue de ces étapes on multiplie le résultat par le nombre de moyens de neutrons issues de la fission. Les quatres facteurs sont:

•le facteur de fission rapide, qui corrige le calcul (fait pour un neutron induisant une fission dans le domaine thermique) afin de prendre en compte les fissions rapides

•le facteur anti-trappe qui donne la probabilité qu'un neutron survive au ralentissement et échappe aux « trappes » que sont les résonances des noyaux lourds du combustible

•le facteur d'utilisation thermique qui, sachant que le neutron a déjà été thermalisé, donne la probabilité que celui soit capturé par le combustible, et non par le modérateur ou les structures

•le facteur de reproduction qui donne le nombre moyen de neutrons de fission pour un neutron ayant été absorbé dans le combustible







II) L'équation de Boltzmann

Ludwig Boltzmann (1844-1906) est un physicien autrichien considéré comme le père de la physique statistique. L'équation qui porte son nom a été établie en 1872. C'est une équation intégro-différentielle (intégrale en angle et en énergie, différentielle en espace et en temps) qui régit l'évolution d'un gaz de particules peu dense et hors de l'équilibre. Cette équation est essentiellement une équation de transport (description de la variation spatio-temporelle de la masse) moyenne (elle permet d'établir des prédictions pour des grandeurs moyennes, et non pas des fluctuations). Dans le cas de particules neutres, cette équation est de plus linéaire (car on néglige les interactions n-n). C'est donc à cette forme de l'équation que nous allons nous intéresser par la suite.





A) Grandeurs neutroniques

Les hypothèses nécessaires à l'établissement de l 'équation du transport concernent à la fois les particules (définies par leur position dans l'espace à 6 dimensions des positions et des vitesses), mais aussi leur propagation dans les milieux (ligne droite entre 2 collisions) et les milieux eux même (isotropes).







Deux grandeurs sont centrales en neutronique:

•la densité neutronique de particules, qui est un nombre de particules par unité de volume (de volume d'espace des phases, à 6 dimensions)

•le flux angulaire de particules, qui est le produit de cette densité par la vitesse

Cette dernière grandeur est particulièrement importante car elle permet de construire presque toutes les autres grandeurs d'intérêt, et particulièrement:

•le flux scalaire qui est l'intégrale du flux angulaire sur les angles

•les taux de réactions, qui recensent le nombre de collisions de neutrons ayant donné lieu à une réaction donnée, et qui s'écrit comme le produit d'une section efficace macroscopique et d'un flux scalaire





La densité de courant angulaire est le flux angulaire porté par le vecteur direction. La densité de courant est l'intégrale sur les angles de la densité de courant angulaire.





B) L'équation de Boltzmann

L'équation de Boltzmann consiste à recenser le nombre de neutrons dans un volume élémentaire de l'espace des phases, et égaler la variation temporelle à la variation causée par:

•le « streaming » des neutrons (déplacement)

•les collisions subies par les neutrons (qui font entrer ou sortir des neutrons du volume d'intérêt)

•les sources de neutrons (attention: celle ci peuvent être extérieures, comme par exemple des sources fixes, ou peuvent être dues aux fissions induites par les neutrons, on parle alors de problème critique)



Le terme de changement est une dérivée temporelle du nombre de neutron dans un volume V donné (on intègre sur l'espace des phases la densité neutronique de particules):

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_{V}d^{3}rn(\vec{r},\vec{v},t)d^{3}v$$

Le terme de source externe est une donnée du problème et s'écrit, de la même manière, comme:

$$\int_V d^3 r s(\vec{r}, \vec{v}, t) d^3 v$$



Le terme de streaming recense les neutrons sortant (signe -) de la surface enveloppant le volume considéré, et s'écrit par conséquent:

$$-\int_{\partial V} d^2 S \, \bar{j}(\bar{r},\bar{v},t) \cdot \, \hat{n}_S \, d^3 v$$

Le théorème de la divergence (ou d'Ostrogradski) permet alors de ré-écrire cette expression à l'aide de la densité neutronique:

$$\int_{V} d^{3}r \overline{\nabla} \cdot \overline{j}(\overline{r}, \overline{v}, t) d^{3}v = \int_{V} d^{3}r \overline{v} \cdot \overline{\nabla}n(\overline{r}, \overline{v}, t) d^{3}v$$



Deux types de collisions doivent être considérés:

•les collisions faisant sortir les neutrons du domaine d'intérêt (neutrons qui par conséquent se trouvaient dans le domaine en question): ce terme est affecté d'un signe –

$$-\int_{V} d^{3}r v \Sigma(\vec{r}, v) n(\vec{r}, \vec{v}, t) d^{3}v$$

•les collisions faisant entrer des neutrons dans le domaine d'intérêt (signe +)

$$+ \int_{V} d^{3}r \int d^{3}v' v' \Sigma_{s}(\vec{r}, \vec{v}' \rightarrow \vec{v}) n(\vec{r}, \vec{v}', t) d^{3}v$$



Comme le volume d'intégration est quelconque, on obtient après simplification l'équation du transport (pour la densité):

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} n + v \Sigma(\vec{r}, v) n(\vec{r}, \vec{v}, t) = \int d^3 v' v' \Sigma_s(\vec{r}, \vec{v}' \rightarrow \vec{v}) n(\vec{r}, \vec{v}', t) + s(\vec{r}, \vec{v}, t)$$

qui peut être ré-écrite comme une équation de transport pour le flux de la manière suivante:

$$\frac{1}{v}\frac{\partial\psi}{\partial t} + \hat{\Omega}\cdot\vec{\nabla}\psi + \Sigma(\vec{r},E)\psi(\vec{r},E,\hat{\Omega},t) = \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d^2\Omega' \Sigma_s(\vec{r},E'\to E,\hat{\Omega}'\to\hat{\Omega})\psi(\vec{r},E',\hat{\Omega}',t) + s(\vec{r},E,\hat{\Omega},t)$$



Cette équation intégro-différentielle contient des intégrales en énergie et en angle (et par conséquent les grandeurs résultantes sont éventuellement discontinues selon ces variables) et des différentielles en espace et en temps (d'ou la continuité spatiale, par exemple, du flux). De plus l'équation est linéaire par rapport aux sources puisqu'on considère que les sections efficaces ne dépendent pas du flux. Ceci n'est pas vrai en général puisque les sections macroscopiques dépendent de la température et de la densité du système qui, à leur tour, dépendent de taux de fission (le produit de la section macroscopique de fission et du flux) dans le système.



La résolution de cette équation suppose de connaître les conditions initiales du problème, ainsi que les conditions aux bords. Ainsi, pour l'équation de Boltzmann pour le flux il s'agit de présupposer la connaissance, respectivement, du flux initial:

$$\psi(\bar{r}, E, \Omega, t = 0) = \Lambda(\bar{r}, E, \Omega)$$

ainsi que celle du flux entrant, quelque soit t:

$$\psi(\vec{r}_{s} \in \partial V, E, \hat{\Omega}, t) = \Gamma(\vec{r}_{s}, E, \hat{\Omega}, t); \quad \hat{n} \cdot \hat{\Omega} < 0$$



C) Le calcul critique

Dans les calculs critiques, la source de neutrons apparaissant de l'équation de Boltzmann n'est pas une source externe fixée, mais est donnée par les neutrons issus des fissions provoquées par les neutrons eux mêmes. Le terme source de fission en un point de l'espace des phases est donc proportionnel au flux de neutrons en ce point, et la constante de proportionnalité est le produit du nombre moyen de neutrons émis par fission v par la section macroscopique de fission Σ_f (on a justement légitimé l'introduction du flux neutronique comme étant la grandeur qui, multipliée par la section macroscopique d'une réaction, permettait de construire justement un taux de réaction...). En tenant compte du spectre énergétique des neutrons émis X(E) et en postulant une émission isotrope des neutrons de fission on obtient une source de la forme:

$$F\psi = \sum_{i} \frac{\chi^{i}(E)}{4\pi} \int_{0}^{\infty} dE' v_{i}(E') \Sigma_{f}^{i}(\vec{r}, E') \int_{4\pi} d^{2}\Omega' \psi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}')$$



Si on note L l'opérateur de streaming: $L\psi = \hat{\Omega} \cdot \nabla \psi + \Sigma(\vec{r}, E)\psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t)$

et H celui de collisions: $H\psi = \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d^2 \Omega' \Sigma_s(\vec{r}, E' \to E, \hat{\Omega}' \to \hat{\Omega}) \psi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t)$

alors l'équation de Boltzmann avec source de fissions peut être mise sous la forme:

$$\frac{1}{v}\frac{\partial\psi}{\partial t} + L\psi = H\psi + F\psi + s$$



Ainsi, l'étude des solutions stationnaires (d/dt=0) et sans source externe s de cette équation donne trivialement un flux nul. En effet, on comprend « physiquement » que le nombre de neutrons diverge ou tend vers 0 mais n'a pas de raison a priori d'être stable. Or, dans le cadre de méthodes numériques ou analytiques, il peut être intéressant d'étudier des systèmes au keff différent de 1 (cellule seule ou assemblage seul ou réfléchi). La solution spatiale pour le flux dans ces systèmes peut être trouvée moyennant l'introduction d'une constante (qui se trouve être le keff défini auparavant, pour des raisons que l'on comprendra par le suite): l'équation peut alors prendre la forme d'une équation aux valeurs propres et peut ainsi avoir une solution pour le flux non triviale: $L\psi = H\psi + \frac{1}{k_{eff}}F\psi$



Le keff, vu de cette manière, se trouve être la valeur par laquelle il convient de diviser le terme de sources de fissions pour avoir une solution non triviale pour le flux (cette solution est alors vue comme la solution de l'équation aux valeurs propres ci dessus). Pour reprendre le raisonnement « physique » précédent, un système donné n'a a priori aucune chance d'être exactement critique (critique \Leftrightarrow keff=1 \Leftrightarrow un neutron père donne en moyenne un neutron fils au cours de sa vie), et donc stable. Ainsi, pour assurer sa stabilité (puisque dans le cadre du nucléaire civil il s'agit a priori de trouver des solutions stationnaires...) on divise les sources par le keff, ce qui revient à s'assurer que le keff effectif du problème est bien de 1. Evidement, in fine, le keff des réacteurs nucléaires est strictement égal à 1 car les réacteurs sont stables. Il existe plusieurs paramètres d'ajustement puisque les coeurs peuvent être « pilotés » géométriquement (barres de contrôle) mais aussi au niveau des compositions des matériaux (utilisation de bore soluble comme poison neutronique etc...).



D) Discrétisation

Afin de se rendre compte de la difficulté inhérente aux calculs de neutronique, il est possible de dégager un ordre de grandeur concernant le volume de données à gérer lors des calculs de cœur. Typiquement, il s'agit de connaître les résultats d'un calcul sur aproximativement:

- •(10³)³ cellules (ou mailles) spatiales
- •10⁶ mailles énergétiques
- •10³ mailles angulaires

Ainsi, un calcul numérique fin ainsi qu'une solution précise supposent de pouvoir gérer 10¹⁸ mailles, sachant que l'ordre de grandeur pour le temps de calcul d'un cœur stationnaire est la minute et que la précision recherchée sur, par exemple, les taux de fissions est de l'ordre du pourcent. La mise en perspective de ces contraintes et de ces attentes donne tout de suite une idée des enjeux de la simulation neutronique.



Cette simulation repose principalement sur deux types de méthodes, complémentaires sous bien des aspects.

D'une part les simulations déterministes sont réellement basées sur une discrétisation des grandeurs évoquées ci dessous, et résolvent l'équation de Boltzmann sur des maillages adaptables (en espace/angle/énergie). Les codes déterministes (par exemple APOLLO2 ou APOLLO3, développés à la direction de l'énergie nucléaire du CEA (SERMA)) reposent sur des modèles/approximations physiques (traitement multigroupe de l'énergie par exemple) et sont relativement rapides: ils sont utilisés de manière routinière par les industriels pour faire des calculs de cœur.

D'autre part les simulations Monte Carlo consistent à suivre les neutrons en échantillonnant aléatoirement les grandeurs qui caractérisent leur histoire, comme l'angle de sortie d'une collision, la distance à la prochaine collision, le prochain noyau rencontré etc... Ces simulations plus « microscopiques » (on se place en amont du continuum sous tendu par l'équation de Boltzmann) permettent de faire très peu d'hypothèses et d'approximations mais se révèlent éventuellement très couteuses en temps de calcul. C'est pourquoi elles sont très souvent utilisées comme voie de « référence » (permettant par exemple d'établir un calcul de référence pour des simulations déterministes). TRIPOLI-4 est le code Monte Carlo de neutronique développé au CEA.





E) Quelques solutions dans des cas particuliers...

S'il n'existe pas de solution générale à l'équation de Boltzmann, il reste néanmoins possible d'établir des résultats analytiques ou pseudo-analytiques dans certains cas spécifiques.

1) Cas des milieux absorbants

Quand les particules ne peuvent être qu'absorbées, on a $\Sigma_T = \Sigma_a$ et $\Sigma_s = 0$. Ainsi, l'équation du transport se ré-écrit:

$$\hat{\Omega} \cdot \bar{\nabla} \psi + \Sigma(\vec{r}, E) \psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}) = s(\vec{r}, E, \hat{\Omega})$$

Un raisonnement physique permet de construire la solution de cette équation lorsque le milieu est de plus homogène: $|\vec{r} - \vec{r}|$

$$\psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}) = \Gamma(\vec{r}_s, E, \hat{\Omega})e^{-\Sigma|\vec{r}-\vec{r}_s|} + \int_0^{s} dus(\vec{r} - u\hat{\Omega}, E, \hat{\Omega})e^{-\Sigma u}$$



La solution dans un milieux non-homogène nécessite l'introduction de la notion de distance optique entre deux points:

$$\tau_{E}(\vec{r}_{0},\vec{r}) = \int_{0}^{|\vec{r}-\vec{r}_{0}|} du \Sigma \left(\vec{r}-u\hat{\Omega}_{0},E\right) = \tau_{E}(\vec{r},\vec{r}_{0}) \qquad \hat{\Omega}_{0} = \frac{\vec{r}-\vec{r}_{0}}{|\vec{r}-\vec{r}_{0}|}$$

Cette distance optique permet d'écrire la solution générale de l'équation du transport dans les milieux purement absorbants:

$$\psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}) = \Gamma(\vec{r}_s, E, \hat{\Omega})e^{-\tau(\vec{r}_s, \vec{r})} + \int_0^{|\vec{r} - \vec{r}_s|} du \, s(\vec{r} - u\hat{\Omega}, E, \hat{\Omega})e^{-\tau(\vec{r}, \vec{r} - u\hat{\Omega})}$$



2) Cas d'un noyau ponctuel

Si l'on considère une source isotrope à l'origine ainsi qu'un milieu vide de matière, l'équation du transport se ré-écrit:

$$\hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}) = \frac{S_0}{4\pi} \delta(\vec{r})$$

De même un raisonnement physique permet de trouver le flux angulaire:

$$\psi(\vec{r},\hat{\Omega}) = \frac{S_0}{4\pi r^2} \delta(\hat{\Omega} - \hat{\Omega}_{\vec{r}}) \qquad \hat{\Omega}_{\vec{r}} = \frac{\vec{r}}{|\vec{r}|}$$

ainsi que le flux scalaire, qui n'est qu'une application directe du théorème de Gauss:

$$\phi(\vec{r}) = \int_{4\pi} d^2 \Omega \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}) = \frac{S_0}{4\pi r^2}$$



Si, à la place d'un milieu vide nous avions considéré un milieu purement absorbant et homogène, la solution serait la même avec en plus un terme d'absorption:

$$\phi(\vec{r}) = \frac{S_0 e^{-\Sigma r}}{4\pi r^2}$$

Cette solution se généralise également au cas des milieux non-homogènes à l'aide de la distance optique:

$$\phi(\vec{r}) = \frac{S_0}{4\pi r^2} e^{-\tau(\vec{r}, \vec{r}_0)}$$



A partir de la solution du problème du noyau ponctuel dans les milieux purement absorbants, on peut construire la solution pour une source quelconque (toujours dans les milieux absorbants). L'idée consiste à voir la solution pour une source ponctuelle comme une fonction de Green: celle ci calcule la contribution d'un point A à un point B (ou probabilité d'aller de A vers B). En convoluant cette fonction de Green par les sources en A quelconque (donc pour une source quelconque) on obtient le résultat recherché:

$$\phi(\vec{r}) = \int d^3 r' G(\vec{r}' \to \vec{r}) S_0(\vec{r}') = \int d^3 r' \frac{e^{-\tau(\vec{r},\vec{r}')}}{4\pi |\vec{r} - \vec{r}'|^2} S_0(\vec{r}')$$



Dans la continuité des raisonnements précédents, il est possible de proposer une formulation alternative (de manière intégrale cependant...) à l'équation du transport avec collisions isotropes dans le cas général. Pour ce faire, on imagine que les collisions sont des sources, et par conséquent le terme de source Q qui apparaît dans l'équation de Boltzmann:

$$\hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi + \Sigma(\vec{r}, E) \psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}) = Q(\vec{r}, E, \hat{\Omega})$$

est exprimé de la sorte:

$$Q(\vec{r}, E, \hat{\Omega}) = \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d^2 \Omega' \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega}') \psi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}') + s(\vec{r}, E, \hat{\Omega})$$

En faisant intervenir l'hypothèse d'isotropie des collisions et des sources Q se ré-écrit sous forme intégrale de cette manière:

$$Q(\vec{r},E) = \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty dE' \Sigma_s(\vec{r},E' \to E) \phi(\vec{r},E') + \frac{1}{4\pi} S(\vec{r},E)$$



A partir de cette « source » virtuelle de collisions, on construit la « solution » générale comme dans le cas ou le milieu est purement absorbant:

$$\phi(\vec{r}, E) = \int_{V} d^{3}r' \frac{Q(\vec{r}', E)}{\left|\vec{r} - \vec{r}'\right|^{2}} e^{-\tau(\vec{r}, \vec{r}')}$$



En conclusion, l'équation du transport linéaire permet de modéliser le transport des particules neutres, et donc des neutrons, dans la matière. Cette équation fait très peu d'hypothèses (elle est néanmoins valable dans la limite d'un très grand nombre de particules et ne s'intéresse qu'à des grandeurs moyennes) mais sa forme intégrodifférentielle la rend très complexe à résoudre dans le cas général. On a cependant montré ici quelques résultats analytiques pour des cas particuliers (milieux purement absorbants ou vides par exemple). Dans un cas général, il existe un modèle simplifié de transport qui permet d'obtenir des solutions analytiques/numériques, et qui se trouve être très robuste pour la classe des problèmes qui nous intéresse ici (transport des neutrons dans les réacteurs). Ce modèle s'appelle le modèle de la diffusion, et est l'objet de la section suivante.


III) L'équation de la diffusion

L'équation de la diffusion remonte originellement au médecin et physiologiste allemand Adolf Eugene Fick, qui la postula en 1855 sous la forme de deux lois phénoménologiques distinctes: la première loi, qui indique que le courant est dirigé dans le sens opposé au gradient de la concentration, et la deuxième loi qui utilise la première pour expliciter ce que l'on connaît à présent comme l'équation de la diffusion, dite aussi équation de la chaleur. Albert Einstein en donnera une preuve théorique en 1905, à l'aide d'un outil mathématique connu sous le nom de mouvement Brownien. Au delà de son existence mathématique, l'existence réelle du mouvement Brownien (comme description du transport de particules dans la matière) sera confirmée par des travaux expérimentaux de Jean Perrin en 1908.



Dans ce chapitre, nous allons successivement dériver l'équation de la diffusion (à partir de l'équation du transport, en faisant certaines hypothèses, la discuter, analyser les conditions aux limites nécessaires à sa résolution, puis faire le distinguo entre 2 types de systèmes à la dynamique et aux solutions très différentes:

- •les systèmes à source fixe
- •les systèmes critiques



A) Introduction

Avant d'entrer dans le détail de la dérivation de l'équation de la diffusion, il s'agit de comprendre son lien avec l'équation du transport. Cette dernière équation possède plusieurs variables: l'espace et l'angle, l'énergie et le temps. Les équations analysant uniquement l'aspect temporel de l'équation de Boltzmann sont les équations de la cinétique (dite aussi cinétique « point » pour indiquer qu'elles ne dépendent pas de l'espace). L'étude du comportement énergétique des neutrons est l'objet de la théorie du ralentissement, de l'absorption résonnante et de la thermalisation. Enfin, l'équation de la diffusion est une approximation de l'équation du transport qui ne fait apparaître qu'une dépendance spatiale. A partir de la théorie énergétique et de l'équation de la diffusion il est possible de construire une théorie multigroupe permettant de prendre en compte la dépendance spatiale et énergétique au sein d'un même système d'équations.



L'équation du transport peut se ré-écrire, pour une énergie donnée, de la sorte:

$$\hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi + \Sigma(\vec{r}) \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}) = \int_{4\pi} d^2 \Omega' \Sigma_s(\vec{r}, \hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega}') \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}') + s(\vec{r}, \hat{\Omega})$$

Dans cette dernière équation, il est possible de séparer la dépendance spatiale de la dépendance angulaire en utilisant la représentation en polynômes de Legendre (pour l'angle de déviation μ_0 dans le système du laboratoire) de la section efficace macroscopique de diffusion:

$$\Sigma_{s}(\vec{r},\hat{\Omega}\cdot\hat{\Omega}') = \frac{\Sigma_{s}(\vec{r})}{4\pi}\sum_{n}f_{n}P_{n}(\mu_{0})$$

Si le choc est isotrope, on a finalement:

$$\Sigma_{s}(\vec{r},\hat{\Omega}\cdot\hat{\Omega}')=\frac{\Sigma_{s}(\vec{r})}{4\pi}$$



De plus, concernant la solution de l'équation $\psi(\mathbf{r}, \mathbf{E}, \boldsymbol{\Omega})$, la dépendance angulaire elle même n'est pas forcément intéressante: le flux est intéressant car il permet de calculer des taux de réaction via la connaissance des sections efficaces macroscopiques. Mais ce calcul ne nécessite pas de connaître le flux angulaire: le flux scalaire est suffisant.

Ainsi, les 2 remarques précédentes, à savoir:

•le fait que seul le flux scalaire soit d'intérêt

•la séparabilité, au niveau des données du problème (comme la section efficace macroscopique de diffusion) de la dépendance spatiale et énergétique

permettent d'imaginer une version simplifiée de l'équation du transport où le flux angulaire serait remplacé par le flux scalaire. Cette nouvelle équation s'appelle l'équation de la diffusion et représente une très bonne approximation de l'équation du transport (utilisée par exemple par les industriels dans une version à 2 groupes d'énergie pour les calculs de cœur REP) dans les milieux diffusifs (où les neutrons subissent beaucoup de collisions) et loin des hétérogénéités.



B) Dérivation

Il existe différentes dérivations de l'équation de la diffusion à partir de l'équation du transport. Celle présentée dans la suite s'appelle la méthode P_N et consiste à construire différents moments de l'équation intégro-différentielle du transport et à assurer une relation de fermeture en supposant une faible dépendance du flux à l'angle.



Comme on veut calculer le flux scalaire:

$$\phi(\vec{r}) = \int_{4\pi} d^2 \Omega \psi(\vec{r}, \vec{\Omega})$$

on intègre l'équation du transport sur les angles (ce qui revient donc à calculer le moment d'ordre 0 en angle de cette équation):

$$\int_{4\pi} d^2 \vec{\Omega} \left(\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi + \Sigma(\vec{r}) \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \int_{4\pi} d^2 \vec{\Omega}' \Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}') + s(\vec{r}, \vec{\Omega}) \right)$$

١



En utilisant les relations suivantes: $\int_{4\pi} d^2 \Omega \hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}) = \vec{\nabla} \cdot \vec{J}(\vec{r})$ $\int_{4\pi} d^2 \Omega \Sigma(\vec{r}) \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}) = \Sigma(\vec{r}) \phi(\vec{r})$ $\int_{4\pi} d^2 \Omega \int_{4\pi} d^2 \Omega' \Sigma_s(\vec{r}, \hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega}') \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}')$ $= \int_{4\pi} d^2 \Omega \Sigma_s(\vec{r}, \hat{\Omega}') \int_{4\pi} d^2 \Omega \Sigma_s(\vec{r}, \hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega}')$ $= \int_{4\pi} d^2 \Omega \nabla_s(\vec{r}, \hat{\Omega}') \int_{4\pi} d^2 \Omega \Sigma_s(\vec{r}, \hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega}')$ $= \sum_s(\vec{r}) \phi(\vec{r})$ on obtient finalement:

$$\bar{\nabla} \cdot \bar{J} + \Sigma_a(\bar{r})\phi(\bar{r}) = S(\bar{r})$$





Cette nouvelle équation du transport fait apparaître une inconnue supplémentaire (le courant) que l'on peut essayer de calculer en multipliant l'équation du transport par l'angle et en intégrant sur les angles (on obtient alors une équation pour le moment d'ordre 1 en angle):

$$\int_{4\pi} d^2 \Omega \hat{\Omega} \left(\hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi + \Sigma(\vec{r}) \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}) = \int_{4\pi} d^2 \Omega' \Sigma_s(\vec{r}, \hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega}') \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}') + s(\vec{r}, \hat{\Omega}) \right)$$

Le problème est que le 1^{er} terme de cette équation:

$$\int_{4\pi} d^2 \Omega \hat{\Omega} \hat{\Omega} \cdot \nabla \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}) = \nabla \cdot \Pi(\vec{r})$$

fait apparaître à nouveau une nouvelle inconnue:

$$\Pi(\vec{r}) = \int_{4\pi} d^2 \Omega \hat{\Omega} \hat{\Omega} \psi(\vec{r}, \hat{\Omega})$$





Les 2èmes et quatrièmes termes de l'équation s'écrivent simplement:

$$\int_{4\pi} d^2 \Omega \hat{\Omega} \Sigma(\vec{r}) \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}) = \Sigma(\vec{r}) \vec{J}(\vec{r})$$
$$\int_{4\pi} d^2 \Omega \hat{\Omega} s(\vec{r}, \hat{\Omega}) = \vec{S}_1(\vec{r})$$

Pour le 3^{ème} terme, on pose l'égalité:

$$\int_{4\pi} d^2 \Omega \, \hat{\Omega} \Sigma_s(\vec{r}, \hat{\Omega}' \cdot \hat{\Omega}) = \overline{\mu}_0 \Sigma_s(\vec{r}) \hat{\Omega}'$$

qui donne le développement suivant:
$$\int_{4\pi} d^2 \Omega \,\hat{\Omega} \int_{4\pi} d^2 \Omega' \Sigma_s(\vec{r}, \hat{\Omega}' \cdot \hat{\Omega}) \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}')$$
$$= \int_{4\pi} d^2 \Omega' \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}') \int_{4\pi} d^2 \Omega \,\hat{\Omega} \Sigma_s(\vec{r}, \hat{\Omega}' \cdot \hat{\Omega})$$
$$= \int_{4\pi} d^2 \Omega' \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}') \overline{\mu}_0 \Sigma_s(\vec{r}) \hat{\Omega}'$$
$$= \overline{\mu}_0 \Sigma_s(\vec{r}) \vec{J}(\vec{r})$$



On obtient donc, pour le moment d'ordre 1:

$$\vec{\nabla} \cdot \mathbf{\Pi} + \Sigma(\vec{r})\vec{J}(\vec{r}) = \overline{\mu}_0 \Sigma_s(\vec{r})\vec{J}(\vec{r}) + \vec{S}_1(\vec{r})$$

Ainsi, à chaque nouveau moment de l'équation il apparaît une nouvelle variable. Il s'agit donc de trouver une relation de fermeture, qui doit forcément concerner les angles. Si l'on fait l'hypothèse d'une faible dépendance en angle du flux angulaire:

$$\psi(\vec{r},\hat{\Omega}) \approx A(\vec{r}) + \vec{B}(\vec{r}) \cdot \hat{\Omega}$$

et que l'on utilise les 3 relations ci dessous:

$$\int_{4\pi} d^2 \Omega = 4\pi \qquad \qquad \int_{4\pi} d^2 \Omega \,\hat{\Omega} = \overline{0} \qquad \qquad \int_{4\pi} d^2 \Omega \,\hat{\Omega} \hat{\Omega} = \frac{4\pi}{3} \operatorname{Id}_3$$

alors on montre que:

$$\psi(\vec{r},\hat{\Omega}) \approx \frac{1}{4\pi} \phi(\vec{r}) + \frac{3}{4\pi} \vec{J}(\vec{r}) \cdot \hat{\Omega}$$

$$\bar{\nabla} \cdot \mathbf{\Pi}(\bar{r}) \approx \frac{1}{3} \bar{\nabla} \phi(\bar{r})$$





En utilisant la définition de la section macroscopique de transport: $\Sigma_{tr} = \Sigma - \overline{\mu}_0 \Sigma_s$

on obtient le système de 2 équations à 2 inconnues (le flux scalaire et le courant scalaire) suivant:

$$\overline{\nabla} \cdot \overline{J} + \Sigma_a \phi(\overline{r}) = S(\overline{r})$$
$$\frac{1}{3} \overline{\nabla} \phi + \Sigma_{tr} \overline{J}(\overline{r}) = \overline{S}_1(\overline{r})$$

Ce système se résout trivialement en faisant l'hypothèse d'une source isotrope ($S_1=0$) et permet d'obtenir la première loi de Fick, qui porte sur l'expression du courant:

$$\vec{J} = -\frac{1}{3\Sigma_{tr}}\vec{\nabla}\phi = -D\vec{\nabla}\phi$$



C) Equation de la diffusion

La 1^{ère} loi de Fick indique que le courant est dirigé selon le gradient du flux (dans le sens des flux élevés vers les flux plus faibles). Une représentation bidimensionnelle explique relativement bien cette loi vectorielle: si l'on imagine un champ de flux avec des zones plus ou mois hautes représentant les valeurs plus ou moins élevées du flux, alors le vecteur courant est dirigé des zones les plus élevées vers les moins élevées (il « dévale » les pentes de flux). En injectant cette loi pour le courant dans l'équation d'ordre 0, on obtient la 2^{ème} loi de Fick:

$$-\vec{\nabla} \cdot D(\vec{r})\vec{\nabla}\phi + \Sigma_a(\vec{r})\phi(\vec{r}) = S(\vec{r})$$

où apparaît le coefficient de diffusion D:

$$D = \frac{1}{3\Sigma_{\rm tr}} = \frac{1}{3(\Sigma_t - \overline{\mu}_0 \Sigma_s)}$$

La 2^{ème} loi de Fick, connue sous le nom d'équation de la diffusion, est une équation différentielle du 2d degré, dont la résolution analytique et numérique est aisée.



Il est néanmoins bon de garder à l'esprit que cette loi est une approximation du transport, dans le sens où le flux doit être faiblement anisotrope. Afin que cette condition soit satisfaite, il faut que:

- la source soit isotrope
- •les neutrons aient fait plusieurs collisions

•la section efficace d'absorption soit très faible devant la section efficace totale (les deux dernières conditions s'assurent que l'on a bien perdu la mémoire des conditions initiales)

•être loin des hétérogénéités marquées (sources localisées, hétérogénéités fortes des matériaux)



D) Conditions aux limites

La résolution de l'équation de la diffusion suppose de connaître:

les sources du problèmesd'appliquer la condition de continuité spatiale du flux

$$\phi^+(\vec{r}_s) = \phi^-(\vec{r}_s)$$

•d'appliquer la condition de continuité spatiale du courant

$$J^{+}(\vec{r}_{s}) = J^{-}(\vec{r}_{s})$$
$$D^{+}\nabla\phi\Big|_{\vec{r}_{s}^{+}} = D^{-}\nabla\phi\Big|_{\vec{r}_{s}^{-}}$$

•une dernière condition, aux limites cette fois, peut s'avérer nécessaire pour construire la solution: la condition de vide (à l'interface entre un milieu et le vide). Cette condition s'écrit comme: $\psi(\vec{r_s}, \hat{\Omega}) = 0$ $\hat{n} \cdot \hat{\Omega} < 0$

et peut se ré-écrire comme une condition sur le courant partiel entrant:

$$J^{-}(x_{s}) = \int_{\hat{n}\cdot\hat{\Omega}<0} d^{2}\Omega \left| \hat{n}\cdot\hat{\Omega} \right| \psi(x_{s},\hat{\Omega}) \cong \frac{\phi(x_{s})}{4} + \frac{D}{2} \frac{d\phi}{dx} \Big|_{x_{s}} = 0$$

(où on a utilisé $\psi(\vec{r}, \hat{\Omega}) \approx \frac{1}{4\pi} \phi(\vec{r}) + \frac{3}{4\pi} \vec{J}(\vec{r}) \cdot \hat{\Omega}$)



Cette dernière relation indique par conséquent que:

$$\frac{\frac{d\phi}{dx}}{\phi}\bigg|_{x_s} = -\frac{1}{2D}$$

ce qui équivaut à trouver la distance à laquelle le flux s'annule puisque: $\phi(x_s + 2D) \approx 0$ Cette distance s'appelle la distance d'extrapolation, et vaut donc:

$$\widetilde{x}_s = x_s + \frac{2}{3\Sigma_{tr}}$$





E) Problèmes à sources fixes

Les problèmes à source sont ceux pour lesquels la géométrie et les matériaux sont donnés, mais aussi les sources. Ces problèmes revêtent, dans le cas des milieux homogènes, une forme simple puisqu'ils s'écrivent sous la forme d'une équation différentielle du 2d ordre, avec 2d membre. En effet, comme le coefficient de diffusion est constant, l'équation:

$$-\bar{\nabla} \cdot D(\bar{r})\bar{\nabla}\phi(\bar{r}) + \Sigma_a(\bar{r})\phi(\bar{r}) = S(\bar{r})$$

se simplifie:

$$-D\nabla^2 \phi + \Sigma_a \phi(\vec{r}) = S(\vec{r})$$

La connaissance des conditions aux limites, et les conditions de continuité spatiale sur le flux et le courant permettent de résoudre ces systèmes.



Considérons l'exemple simple suivant. On cherche à traiter le cas d'une plaque homogène (infinie en y et z) caractérisée par son épaisseur 2a (a étant la distance extrapolée), son coefficient de diffusion constant D ([cm]), sa section efficace macroscopique d'absorption Σ_a ([cm⁻¹]) et dotée d'une source externe uniforme S ([cm⁻³]) en espace. La figure ci dessous illustre cette situation:



On cherche à calculer le flux dans cette configuration. On a vu que l'équation de la diffusion dans un milieu homogène s'écrit simplement:

$$-D\nabla^2 \phi + \Sigma_a \phi(\vec{r}) = S(\vec{r})$$



De plus, a est la distance extrapolée: cela signifie que le flux s'y annule (ce qui est évidemment une approximation puisque la distance d'extrapolation suppose une interface avec le vide). On considère donc que les conditions aux limites sont données par:

$$\phi(a) = \phi(-a) = 0$$

La solution d'une équation différentielle du 2d ordre suppose que l'on connaisse une solution particulière de l'équation inhomogène (avec 2d membre), qui dans notre cas s'obtient en prenant un flux constant:

$$\phi_p(x) = \frac{S}{\Sigma_a}$$

La solution générale de l'équation homogène (sans 2d membre) pour une équation de la forme: I_2 / I_2 / I_2 / I_3

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} - \frac{1}{L^2}\phi = 0, \qquad L^2 = \frac{D}{\Sigma_a}$$

est:

$$\phi_h(x) = Ae^{x/L} + Be^{-x/L} = A' \cosh(x/L) + B' \sinh(x/L)$$



Comme, pour des raisons de symétrie par rapport à x=0, on a B'=0, et comme on souhaite annuler le flux en +a et -a, on peut finalement écrire le flux résultant (la somme de la solution particulière de l'équation inhomogène et de la solution générale de l'équation homogène) de la sorte:

$$\phi(x) = \frac{S}{\Sigma_a} \left[1 - \frac{\cosh(x/L)}{\cosh(a/L)} \right]$$

Le flux est alors donné par la figure suivante:





Nous avons traité, dans l'exemple précédent le cas d'une géométrie cartésienne en 1 dimension. L'expression du Laplacien dans les différents systèmes de coordonnées par les expressions suivantes (pour des géométries respectivement cartésiennes, cylindriques et sphériques):

$$\nabla^{2} f = \frac{\partial^{2} f}{\partial x^{2}} + \frac{\partial^{2} f}{\partial y^{2}} + \frac{\partial^{2} f}{\partial z^{2}}$$
$$\nabla^{2} f = \frac{\partial^{2} f}{\partial \rho^{2}} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial f}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^{2}} \frac{\partial^{2} f}{\partial \phi^{2}} + \frac{\partial^{2} f}{\partial z^{2}}$$
$$\nabla^{2} f = \frac{\partial^{2} f}{\partial r^{2}} + \frac{2}{r} \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{1}{r^{2} \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial f}{\partial \theta} \right)$$
$$+ \frac{1}{r^{2} \sin^{2} \theta} \frac{\partial^{2} f}{\partial \phi^{2}}$$

Les 1ers termes de ces expressions sont très utiles dans le cas de systèmes possédant suffisamment de symétries pour être unidimensionnels, et permettent la plupart du temps de calculer des solutions analytiques à des problèmes simples.



Ainsi, les solutions simples de ces systèmes unidimensionnels sont résumées par le tableau ci dessous.

Géométrie	B ² <0	B ² >0
	(1/L ² =-B ²⁾	(χ²= B²)
Cartésienne	sinh(x/L) cosh(x/L)	sin(χx) cos(χx)
Cylindrique	Ι ₀ (ρ/L) Κ ₀ (ρ/L)	J ₀ (χ ρ) Υ ₀ (χ ρ)
Sphérique	sinh(r/L)/r cosh(r/L)/r	sin(χr)/r cos(χr)/r

Les fonctions I_0 , K_0 , J_0 et Y_0 sont les fonctions de Bessel de première espèce (I,K) et de deuxième espèce (J,Y). On notera au passage que les fonctions sinh et cosh admettent une représentation exponentielle, de la même manière que les fonctions sin et cos admettent une représentation à l'aide d'exponentielles complexes.





F) Problèmes de criticité

Si la formulation des problèmes critiques est proche de celle des problèmes à source en ce qu'ils ne diffèrent que du terme source, l'étude de leurs solutions s'avère bien plus délicate.

Rappelons les trois définitions possibles du keff. Celui ci peut être vu soit:

• (définition 1) comme le rapport du nombre des neutrons d'une génération au nombre des neutrons de la génération précédente

• (définition 2) comme le rapport entre les productions et les disparitions (par fuite ou par absorption)

• (définition 3) comme le terme par lequel il convient de diviser les productions pour avoir un système stable

On définit alors comme problème critique un problème dont les sources sont données par le terme de fission, et pour lequel on cherche à calculer le keff sachant qu'on connaît la géométrie et les compositions (formulation 1) ou à calculer la taille critique (keff=1) sachant qu'on connaît la forme et les compositions (formulation 2).



La deuxième formulation est très naturelle, mais on pourrait objecter à la première formulation qu'un système dont le keff est différent de 1 n'est pas stable, et que par conséquent la dérivation temporelle ne peut être négligée (et l'équation de la diffusion n'est donc pas satisfaisante). Cette remarque serait pertinente, mais il suffit alors de se représenter le keff comme le terme qui permet de rendre l'équation du transport stable (définition n°3 ci dessus). Dans ce cadre on peut alors ré-écrire l'équation de la diffusion comme:

$$-\bar{\nabla} \cdot D\,\bar{\nabla}\phi + \Sigma_a\phi(\bar{r}) = \frac{\nu\Sigma_f}{k_{\rm eff}}\phi(\bar{r})$$

Si on isole le keff dans cette équation, et qu'on intègre sur le volume on trouve:

$$k_{\rm eff} = \frac{\int_{V} d^{3}r v \Sigma_{f} \phi(\vec{r})}{\int_{V} d^{3}r \left[\Sigma_{a} \phi(\vec{r}) - \vec{\nabla} \cdot D \, \vec{\nabla} \phi \right]}$$

expression qui est très exactement la définition 2 du keff...





Pour illustrer toutes ces considérations, reprenons l'exemple de la plaque homogène, mais supposons qu'elle soit (très exactement) critique. L'équation de la diffusion pour ce système s'écrit:

$$-D\frac{d^2\phi}{dx^2} + \Sigma_a\phi = v\Sigma_f\phi$$

et admet pour conditions aux limites l'annulation du flux à la distance extrapolée, semblablement au cas de la plaque à source fixe:

$$\phi(a) = \phi(-a) = 0$$



Mise sous la forme d'une équation homogène, et en utilisant la notation suivante:

$$\chi^2 = \frac{\nu \Sigma_f - \Sigma_a}{D} = \frac{k_\infty - 1}{L^2}$$

l'équation se ré-écrit:

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} + \chi^2\phi = 0$$

et admet, si kinf>1, la solution générale suivante:

$$\phi(x) = A\cos(\chi x) + B\sin(\chi x)$$

La symétrie en x=0 permet d'écrire B=0 et donc d'obtenir la forme du flux:

$$\phi(x) = A\cos(\chi x)$$





De manière surprenante, l'application de la condition de flux nul donne une relation supplémentaire:

$$\phi(x=a) = 0 = A\cos(\chi a)$$

qui admet une racine physique:

$$\chi a = \frac{\pi}{2}$$

Cette relation s'interprète comme la condition critique. En effet, nous avons fait l'hypothèse d'un système critique, mais cette hypothèse n'est pas gratuite: elle ne peut être réalisée que pour certains systèmes, vérifiant la condition critique que l'on vient de calculer. Avant de revenir sur l'interprétation physique de cette condition, il est important de remarquer une chose: la condition aux limite (flux nul en a) qui permet, pour les problèmes à sources, de fixer la constante de normalisation A vient d'être absorbée pour produire une condition critique. D'où la question: quid de A, la constante de normalisation, dans les problèmes critiques? En fait, dans ces problèmes le flux est définit à une constante multiplicative près. Ainsi, un réacteur nucléaire peut être opéré à différents niveaux de puissance, sans pour autant changer la forme du flux, qu'on écrit donc finalement sans préciser A:

$$\phi(x) = A\cos\left(\frac{\pi x}{2a}\right)$$



A partir de la forme du flux, il est possible de construire le facteur de forme, donnant le rapport entre la valeur maximum de la puissance, et sa valeur moyenne. On remarque tout d'abord que le rapport de ces deux puissances est égal au rapport des deux flux équivalents (le flux maximum et le flux moyen). On sait que le flux maximum vaut A, et il convient alors de calculer le flux moyen de la sorte:

$$P_{\text{moy}} = \frac{A}{2a} \int_{-a}^{a} dx \cos\left(\frac{\pi x}{2a}\right) = A \frac{2}{\pi}$$

Le facteur de forme vaut donc $\pi/2^{-1.57}$



Pour montrer l'excellent accord entre l'approximation de la diffusion et l'équation du transport à proprement parler, la figure ci dessous donne une comparaison entre le flux de neutrons à 1 groupe calculé en théorie de la diffusion dans l'exemple de la plaque critique, et le flux calculé par un code Monte Carlo de neutronique (TRIPOLI-4). La comparaison est probante et laisse apparaître de très faible différences uniquement sur les bords (approximation de la distance extrapolée).



Il s'agit à présent de revenir sur la condition de criticité. Quelles informations (physiques) contient elle? La condition cr<u>it</u>ique suivante:

$$\chi a = \frac{\pi}{2}$$

peut s'écrire de manière à faire apparaître les propriétés de la matière dans le membre de gauche de l'équation, et les propriétés de la géométrie dans celui de droite:

$$\frac{k_{\infty}-1}{L^2} = \left(\frac{\pi}{2a}\right)^2$$

Par conséquent, il est heureux d'introduire la notation suivante: •le laplacien matière est le terme contenant les propriétés de la matière

$$B_m^2 = \frac{k_\infty - 1}{L^2}$$

•le laplacien géométrie contient celles de la géométrie:

$$B_g^2 = \left(\frac{\pi}{2a}\right)^2$$

La condition critique prend alors la forme très simple:

$$B_m^2 = B_g^2$$


A partir du Laplacien géométrie, il est possible de construire une 4^{ème} définition du keff. Pour cela, on part de l'expression du Laplacien que nous venons de calculer:

$$\frac{k_{\infty}-1}{L^2} = B_g^2$$

et l'on cherche à modifier cette expression pour faire apparaître un terme de production, un terme d'absorption et un terme de fuite:

$$1 = \frac{k_{\infty}}{1 + L^2 B_g^2}$$
$$= \frac{v \Sigma_f}{\Sigma_a + D B_g^2} = \frac{\text{Productions}}{\text{Absorptions + Leakage}}$$

On remarque alors qu'à la criticité le keff vaut 1 mais que dans le cas général on a:

$$k_{eff} = \frac{v \Sigma_f}{\Sigma_a + DB_g^2}$$

Cette 4^{ème} définition est très proche de la 2^{ème}, mais utilise le Laplacien géométrie (attention: seulement en théorie à un groupe). Comme les expressions de ce Laplacien sont connues pour différentes géométries, on dispose rapidement d'une expression du keff.



A ce propos, on résume dans le tableau ci dessous les différentes expressions de ce Laplacien géométrie, et on « rappelle » la forme du flux:





Comparons, dans les 3 systèmes de coordonnées possibles la forme du flux critique:



On observe que le flux est le plus élevé dans la plaque, puis dans le cylindr, puis dans la sphère. Au delà des expressions analytiques, cela s'interprète en comprenant que le terme de fuite des neutrons est contrôlé par le rapport surface/volume du système qui est le plus élevé dans une géométrie sphérique, puis cylindrique puis cartésienne.



G) Etude de l'intérêt d'un réflecteur

L'équation de la diffusion permet de modéliser également des problèmes simples. Ainsi, il est possible de comprendre et de quantifier le rôle des réflecteurs en neutronique. Les réflecteurs sont des structures placées en périphérie du cœur (à proximité des assemblages extérieurs) et qui jouent un quadruple rôle puisqu'en réfléchissant les neutrons vers le cœur ils permettent:

- d'augmenter le keff (en diminuant le terme de fuite)
- d'économiser de la matière fissile (en augmentant le flux dans la zone ou ce dernier devient très faible, près du bord)
- d'améliorer le facteur de forme (les minima en flux sont relevés, et donc le rapport flux max sur flux moyen est plus faible, il y a moins d'hétérogénéités de puissance)

• de protéger la cuve (qui se trouve être une pièce stratégique du réacteur puisque c'est elle qui conditionne sa durée de vie)

Cette situation est schématisée par la figure ci-contre, issue d'une simulation Monte Carlo d'un cœur sans réflecteur (bleu) et avec réflecteur (rouge):





Le calcul de l'action du réflecteur se fait en considérant deux régions spatiales: le cœur est considéré comme une plaque critique (et se traite donc comme un problème de criticité) et le réflécteur est positionné de part et d'autre du cœur et ne contient pas de matériaux fissiles, ni de sources (seuls les neutrons issus du cœur le parcourent, et sont donc traités comme des conditions aux limites). On indexe les paramètres du milieu « cœur » par l'indice I et ceux du milieu « réflecteur » par l'indice II. Les équations de la diffusion prennent donc, dans ces 2 milieux, la forme suivante:

$$\frac{d^2 \phi_I}{dx^2} + \chi_I^2 \phi_I = 0$$
$$\frac{d^2 \phi_{II}}{dx^2} - \frac{1}{L_{II}^2} \phi_{II} = 0$$

	$D^{II} \sum_{a}^{II}$	D ^I , Σ_{a}^{I} , Σ_{f}^{I}	D^{II} Σ_{a}^{II}	
-a-b	-a	0	а	a+b x



Ce système de 2 équations à 2 inconnues nécessite 4 conditions aux limites afin d'être caractérisé. Ces conditions sont énumérées et écrites ci dessous:

• flux nul à la distance extrapolée (dans la partie « réflecteur »):

$$\phi_{II}(x=a+b)=0$$

• symétrie du problème par rapport à x=0 (dans la partie « cœur »):

$$\left.\frac{d\phi_I}{dx}\right|_{x=0} = 0$$

.

• continuité du flux en x=a (à l'interface « cœur/réflecteur »):

$$\phi_I(x=a) = \phi_{II}(x=a)$$

• continuité du courant en x=a (à l'interface « cœur/réflecteur »):

$$D_{I} \frac{d\phi_{I}}{dx}\Big|_{x=a} = D_{II} \frac{d\phi_{II}}{dx}\Big|_{x=a}$$



On a donc, dans la région « cœur », un flux de la forme:

$$\phi_I(x) = A\cos(\chi_I x)$$

et dans la région « réflecteur », en prenant en compte les conditions aux limites, un flux de la forme:

$$\phi_{II}(x) = B \sinh\left(\frac{a+b-|x|}{L_{II}}\right)$$

L'écriture des 2 conditions de continuité permet de dégager 2 relations:

$$A\cos(\chi_{I}a) = B\sinh(b/L_{II})$$
$$A\chi_{I}D_{I}\sin(\chi_{I}a) = B\frac{D_{II}}{L_{II}}\cosh(b/L_{II})$$

Ces relations traduisent la condition de criticité dans le système couplé « cœur/ réflecteur ». A ce titre elles peuvent être ré-écrites de manière plus compacte, en divisant l'une par l'autre.



On obtient alors une seule et unique expression qui lie les propriétés géométriques aux propriétés des matériaux pour avoir un système précisément critique:

$$\tan \chi_I a = \frac{D_{II}}{D_I} \frac{\coth(b/L_{II})}{\chi_I L_{II}}$$

L'expression de a ci dessus est l'épaisseur de notre « cœur » modélisé qui permet d'être critique en présence d'un réflecteur d'épaisseur b. On peut donc comparer cette taille critique du cœur à la taille critique d'un cœur sans réflecteur, et s'assurer (graphiquement par exemple) qu'on vérifie bien la relation:

$$\chi_I a_{\rm avec} < \frac{\pi}{2} = \chi_I a_{\rm sans}$$

qui traduit que l'on peut se permettre d'avoir une taille de cœur inférieure lorsque l'on dispose d'un réflecteur. Le flux est donné quant à lui par les 2 expressions suivantes pour les parties respectivement cœur et réflecteur:

$$\phi_{I}(x) = A\cos(\chi_{I}x)$$
$$\phi_{II}(x) = A \frac{\cos\chi_{I}a}{\sinh(b/L_{II})} \sinh\left(\frac{a+b-|x|}{L_{II}}\right)$$



Pour quantifier plus précisément l'économie du réflecteur (la quantité de matière fissile que l'on gagne/économise en utilisant le réflecteur, mesurée en unité de longueur/taille de cœur) on écrit:

$$\Delta a = a_{\rm nu} - a_{\rm ref} = \frac{1}{\chi} \left\{ \frac{\pi}{2} - \tan^{-1} \left[\frac{D_{II}}{\chi L D_I} \coth(b/L) \right] \right\}$$
$$= \frac{1}{\chi} \tan^{-1} \left[\frac{\chi L D_I}{D_{II}} \tanh(b/L) \right]$$



