



Interfaces en physique des réacteurs nucléaires

Romain Le Tellier

► To cite this version:

Romain Le Tellier. Interfaces en physique des réacteurs nucléaires : Contribution à la modélisation et au développement de méthodes numériques associées en neutronique et physique du corium. Sciences de l'ingénieur [physics]. Université Grenoble Alpes, 2019. tel-02138630

HAL Id: tel-02138630

<https://cea.hal.science/tel-02138630>

Submitted on 23 May 2019

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

See discussions, stats, and author profiles for this publication at: <https://www.researchgate.net/publication/330994370>

Interfaces en physique des réacteurs nucléaires – Contribution à la modélisation et au développement de méthodes numériques associées en neutronique et physique du corium

Thesis · January 2019

DOI: 10.13140/RG.2.2.27006.84801

CITATIONS

0

READS

75

1 author:



Romain Le Tellier

Atomic Energy and Alternative Energies Commission

52 PUBLICATIONS 330 CITATIONS

SEE PROFILE

Some of the authors of this publication are also working on these related projects:



In-Vessel Melt Retention strategy for high power nuclear reactors: the IVMR European Project [View project](#)



Corium propagation modeling for LWR [View project](#)

UNIVERSITÉ GRENOBLE ALPES
COMMISSARIAT À L'ÉNERGIE ATOMIQUE ET AUX ÉNERGIES ALTERNATIVES

École doctorale I-MEP2

Laboratoire de Modélisation des Accidents Graves

Habilitation à diriger les recherches présentée par **Romain LE TELLIER**

Soutenue le **9 janvier 2019**

Discipline **Ingénierie - Matériaux, Mécanique, Environnement, Energétique, Procédés, Production**

Spécialité **Mécanique des fluides, Energétique, Procédés**

Titre de l'habilitation à diriger les recherches

Interfaces en physique des réacteurs nucléaires

**Contribution à la modélisation et au développement de méthodes
numériques associées en neutronique et physique du corium**

Composition du jury

<i>Rapporteurs</i>	Jean C. RAGUSA	professeur, Texas A&M University
	Alexandre LEGRIS	professeur, Université Lille 1 (Polytech'Lille)
	Laurent DAVOUST	professeur, Grenoble-INP (ENSE3)
<i>Examineurs</i>	Pablo R. RUBIOLO	professeur, Grenoble-INP (PHELMA)
	Frank CARRÉ	expert international, CEA (DEN/DS)

président du jury

A nos filles, Angèle, Salomé et Juliette

A leur mère, Caroline

Il faut bien comprendre que les “véritables” scientifiques sont avant tout des êtres doués d’imagination. C’est-à-dire capables de faire “rupture” avec l’ordre informationnel qui les entoure. Il faut de l’imagination pour entrevoir les structures cachées qui sous-tendent l’univers, au-delà de ce que nous donnent à voir nos sens et nos instruments.

Maurice G. Dantec, *Les racines du mal*

Science is the ultimate pornography, analytic activity whose main aim is to isolate objects or events from their contexts in time and space. This obsession with the specific activity of quantified functions is what science shares with pornography

James G. Ballard, *The atrocity exhibition*

INTERFACES EN PHYSIQUE DES RÉACTEURS NUCLÉAIRES**Contribution à la modélisation et au développement de méthodes numériques associées en neutronique et physique du corium****Résumé**

Dans le cadre industriel des réacteurs nucléaires de fission électrogènes, cette synthèse d'une grande partie de mes activités de recherche est faite sous le thème de la modélisation et du développement de méthodes pour la simulation numérique de phénomènes associés aux *interfaces* entre différents matériaux. Ces travaux s'inscrivent dans deux domaines distincts de la physique des réacteurs nucléaires : d'une part, la neutronique qui s'intéresse à la caractérisation de la population des neutrons au sein d'un réacteur de fission, d'autre part, la physique du corium qui porte sur le comportement des matériaux fondus (combustible, structure, ...) du réacteur au cours d'un accident grave de fusion du cœur.

En neutronique, les besoins en simulation relatifs aux réacteurs à neutrons rapides refroidis au sodium m'ont amené à participer au développement d'un solveur 3D pour l'équation de transport des neutrons basé sur la méthode Galerkin discontinue. Dans ce cadre, j'ai contribué :

- à l'analyse et au développement de méthodes de raffinement adaptatif *hp* (en ordre et en espace) associées à ce schéma de discrétisation spatiale ;
- à l'extension de la théorie standard des perturbations (qui permet de relier les variations de réactivité aux variations locales des paramètres régissant l'état du système) à cette discrétisation adaptative ;
- à l'amélioration du traitement de l'interface entre le cœur et le réflecteur d'un réacteur à neutrons rapides vis-à-vis de l'homogénéisation énergétique.

Pour ce qui est de la physique du corium, en support à l'étude de la stratégie de rétention du corium en cuve pour les réacteurs à eau légère, mes travaux ont porté essentiellement sur la modélisation tant à une échelle macroscopique que mésoscopique de certains phénomènes associés au comportement du corium. En particulier, j'ai contribué :

- à l'amélioration de la modélisation thermohydraulique de la couche métallique supérieure du bain de corium ;
- au développement d'une modélisation mésoscopique de la diffusion multicomposant multiphasique associée à la cinétique de stratification des phases liquides du bain ;
- à l'analyse du couplage des modèles de thermohydraulique et thermochimie pour le corium vis-à-vis de la cohérence des données thermodynamiques mises en jeu.

Par-delà la diversité des "physiques", modèles et méthodes numériques mis en jeu dans les travaux rapportés ici, y est illustrée la position que j'ai essayé d'occuper dans ces processus de recherche à l'*interface* pluridisciplinaire entre application industrielle et recherche académique.

Mots clés : réacteurs nucléaires, neutronique, accidents graves, corium, modélisation, simulation numérique, interfaces

Remerciements

Si la rédaction d'un manuscrit d'HDR est une démarche personnelle et un travail plutôt "solitaire", ça n'est que la synthèse de recherches qui, elles, ont été un véritable travail d'équipe. Tout au long de ce document, j'ai tenté de rendre ce qui est dû à mes collègues, aux étudiants que j'ai encadrés et, plus généralement, aux personnes avec qui j'ai eu l'opportunité de collaborer. J'aimerais à ce stade citer ceux qui ont contribué directement à ces travaux : Fabio Alcaro, Pascal Archier, Sophie Bajard, Ansar Calloo, Nourdine Chikhi, Barbara Bigot, Clément Cardon, Jules Delacroix, Cyrille De Saint Jean, Adrien Drouillet, Damien Fournier, Laura Gastaldo, Pierre Gubernatis, Christine Guéneau, Maxime Guyot, Benoît Habert, Raphaële Herbin, Caroline Moulds, Laurent Naymeh, Pascal Piluso, Mathis Plapp, Mathieu Peybernes, Adrien Pivano, Giovanni Porcellana, Jean-Michel Ruggieri, Laurent Saas, Eleonora et Maciej Skrzypek, Bo Sundman, Christophe Suteau, Vaishnavi Tiwari, Jean Tommasi, Benjamin Turquais, Jean-François Vidal et Louis Viot.

Parmi eux, j'aimerais souligner l'apport particulier de deux d'entre eux, Christophe Suteau et Laurent Saas avec qui j'ai "démarré" les activités associées à SNATCH et PROCOR respectivement (*the beginning is a very delicate time* – Franck Herbert, Dune). En ce sens, je tiens aussi à remercier chaleureusement Jean-Michel Ruggieri qui, en tant que chef de laboratoire, a permis à ces deux projets de naître ; que ton enthousiasme et ta force de persuasion soient salués !

Je tiens à remercier, bien sûr, les membres du jury : Frank Carré, Laurent Davoust, Alexandre Legris, Jean C. Ragusa et Pablo R. Rubiolo d'avoir accepté d'évaluer ce manuscrit et la soutenance associée.

Pour finir, je remercie infiniment mon épouse, Caroline Paul, qui, en cette année 2018 où nous avons triplé le nombre de nos enfants, m'a permis de dégager le temps nécessaire à la rédaction de ce manuscrit.

Sommaire

Résumé	iv
Remerciements	v
Sommaire	vi
Introduction	1
1 Contributions en neutronique	3
1.1 Préambule, cadre applicatif et objectif général	3
1.2 Développement du solveur de neutronique SNATCH	5
1.3 Développement de méthodes de raffinement local <i>hp</i>	7
1.4 Extension de la théorie des perturbations	19
1.5 Amélioration du traitement numérique de l'interface cœur - réflecteur	23
1.6 Postambule	28
2 Contributions en physique du corium	33
2.1 Préambule, cadre applicatif et objectif général	33
2.2 Comportement transitoire du corium en fond de cuve	35
2.3 Thermohydraulique de la couche métallique supérieure	38
2.4 Cinétique de stratification d'un bain de corium en cuve	44
2.5 Consistance thermodynamique des modèles couplés	53
2.6 Postambule	59
3 Perspectives de recherche	65
A Vade-mecum pour le lecteur du Chapitre 1	69
A.1 L'équation de transport des neutrons	69
A.2 Discrétisation énergétique multigroupe	70
A.3 Résolution itérative de la dépendance des sources aux flux	71
A.4 Discrétisation angulaire S_N	72
A.5 Forme semi-discrète du système d'équations avant discrétisation spatiale	73
A.6 Discrétisation spatiale par la méthode Galerkin discontinue décentrée amont	73
A.7 Théorie des perturbations	77
A.8 Condensation énergétique	80

B	<i>Vade-mecum</i> pour le lecteur du Chapitre 2	84
B.1	Formulation générale des équations de conservation des modèles macroscopiques de PROCOR	84
B.2	Revue de la phénoménologie de stratification d'un bain de corium en cuve	87
B.3	Introduction à la méthode CALPHAD et aux bases thermodynamiques associées	92
B.4	Introduction à la méthode du champ de phase	94
C	Encadrement d'étudiants	99
D	Publications avec comité de lecture	102

Introduction

Ce manuscrit, réalisé en vue de l’obtention du diplôme d’Habilitation à Diriger les Recherches (HDR), se rapporte à des travaux scientifiques menés entre 2007 et 2018 au CEA Cadarache dans le cadre industriel des réacteurs nucléaires de fission électrogènes.

Ces travaux, réalisés au sein de deux départements différents, dans des contextes industriels différents, sont réunis sous le thème de la simulation numérique de phénomènes associés aux *interfaces* entre différents matériaux. Ils s’inscrivent dans deux domaines distincts de la physique des réacteurs nucléaires : d’une part, la neutronique qui s’intéresse à la caractérisation de la population des neutrons au sein d’un réacteur de fission, d’autre part, la physique du corium qui porte sur le comportement des matériaux fondus (combustible, structure, ...) du réacteur au cours d’un accident grave de fusion du cœur. Ces activités couvrent un spectre qui va de la modélisation physique au développement et l’analyse de méthodes numériques.

Ce manuscrit, qui réunit des contributions variées à la résolution numérique de problèmes d’interface, est organisé autour de travaux ordonnés selon le découpage thématique et chronologique suivant :

- de 2007 à 2011, en tant que chercheur au sein du DER/SPRC/LEPh¹, l’essentiel de ma recherche a porté sur la modélisation neutronique des réacteurs à neutrons rapides refroidis au sodium (RNR-Na). Plus particulièrement, le développement d’un schéma numérique pouvant être mis en œuvre sur des maillages 2D/3D non-conformes et adapté au développement de méthodes de raffinement *hp* a permis d’améliorer le traitement numérique des interfaces entre les différents matériaux du cœur, en particulier, l’interface entre le cœur et le réflecteur en acier ;
- depuis 2011, au sein du DTN/STRI/LMA puis DTN/SMTA/LPMA et finalement DTN/SMTA/LMAG², mes travaux se concentrent principalement sur la modélisation des phénomènes thermiques et thermochimiques aux interfaces d’un bain de corium en cuve d’un réacteur à eau légère (REL). En effet, ces phénomènes sont déterminants dans l’évaluation du flux de chaleur transmis à la paroi de la cuve et donc *in fine* la possibilité de retenir le corium en cuve par un renoyage externe du puits de cuve.

En conséquence, ce manuscrit ne s’apparente pas à une synthèse de recherche débouchant sur un état de l’art dans un domaine précis. Pour autant, si bien sûr les “physiques”, modèles et méthodes numériques mis en jeu dans ces divers travaux sont bien différents, ce manuscrit se veut être un peu plus qu’une simple juxtaposition de résumés d’activités de recherche disparates. En effet, par-delà des thématiques et des disciplines scientifiques différentes, reste comme dénominateur commun à ces travaux, la position que j’ai essayé d’occuper dans ces processus de

1. Laboratoire d’Etudes de Physique du Service de Physique des Réacteurs et du Cycle au sein du Département d’Etude des Réacteurs.

2. Laboratoire de Modélisation des Accidents graves du Service Mesures et modélisation des Transferts et des Accidents graves au sein du Département de Technologie Nucléaire.

recherche à l'*interface* entre application industrielle et recherche académique. Bien sûr, c'est le barycentre même du CEA (comme affiché avec sa devise "De la recherche à l'industrie") dans le paysage de la recherche française. Pourtant, en pratique, ce positionnement ne me semble pas tomber sous le sens, en particulier de par sa nature pluridisciplinaire. Ainsi, tant dans la construction que dans le déroulement de collaborations scientifiques, le rôle et le travail associés à cette interface me paraissent souvent sous-estimés voir négligés alors qu'ils sont cruciaux. J'ai cherché à œuvrer à ce niveau-là et ce manuscrit, je l'espère, en témoigne.

Ce manuscrit se structure selon ce découpage thématique. Le Chapitre 1 rassemble les travaux de neutronique tandis que le Chapitre 2 s'intéresse aux travaux relatifs à la physique du corium. Ce document se termine par le Chapitre 3 où mes perspectives de recherche sur les deux thématiques sont discutées.

Contributions à la simulation neutronique des réacteurs à neutrons rapides refroidis au sodium

Dans une volonté de compromis entre lisibilité et exhaustivité, cette synthèse de travaux en neutronique s'accompagne d'un *vade-mecum* à l'Annexe A auquel il est fait référence dans la marge du texte des paragraphes suivants. Cette annexe a pour vocation de permettre au lecteur d'aller trouver plus de détails, le plus souvent, sur les équations mises en jeu et leur manipulation amenant aux résultats discutés ici.

1.1 Préambule, cadre applicatif et objectif général

La neutronique est la discipline qui s'intéresse à caractériser la population de neutrons dans un réacteur nucléaire et les réactions qu'ils y induisent, en particulier la fission de noyaux d'atomes lourds qui produit la majeure partie de l'énergie dans ces réacteurs. La simulation numérique en neutronique passe invariablement par la résolution de l'équation de Boltzmann (issue de la théorie cinétique des gaz) dont l'inconnue est le flux neutronique $\phi(t, \vec{r}, \vec{\Omega}, E)$, produit de la densité de neutrons par leur vitesse qui est fonction du temps t , de la position dans l'espace $\vec{r} \in \mathcal{D}$, de la direction de déplacement des neutrons $\vec{\Omega} \in \mathcal{S}^2$ et de leur énergie $E \in \mathcal{E}$. Les paramètres de cette équation sont les sections efficaces macroscopiques des différents matériaux qui composent le réacteur et qui définissent les probabilités des différentes interactions possibles entre les neutrons et les noyaux des atomes qui composent ces matériaux. Dans sa forme la plus courante, cette équation est écrite de manière pseudo-stationnaire comme un problème de valeur propre principale ; il s'agit d'une équation linéaire hyperbolique du premier ordre que l'on peut écrire formellement comme : $\forall \vec{r} \in \mathcal{D}, \forall \vec{\Omega} \in \mathcal{S}^2, \forall E \in \mathcal{E}$,

Annexe A.1

$$\mathcal{H}\phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = \mathcal{S}\phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) + \frac{1}{k}\mathcal{F}\phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \quad (1.1)$$

où $\phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$ correspond alors au vecteur propre associé à k le facteur de multiplication effectif *i.e.* la valeur propre dominante de $(\mathcal{H} - \mathcal{S})^{-1}\mathcal{F}$. Une valeur de $k > 1$ (resp. $k < 1$) correspond

à un réacteur surcritique (resp. sous-critique) tandis que $k = 1$ représente un véritable état stationnaire (la réaction de fission est auto-entretenu et la population neutronique ne varie pas dans le temps). $\mathcal{H}$ est l'opérateur d'advection-réaction, $\mathcal{S}$ est l'opérateur associé à la source de diffusion et $\mathcal{F}$ est l'opérateur relatif à la source de fission.

Dans le cadre de la simulation neutronique par des méthodes dites déterministes (*i.e.* passant par la discrétisation de l'équation selon les variables $\vec{r}$, $\vec{\Omega}$ et E), un calcul direct sur la géométrie complète et détaillée du réacteur reste cher et inabordable pour les besoins pratiques de l'industrie nucléaire. Par conséquent, une méthodologie de calcul à deux niveaux est utilisée (voir, par exemple, [1]). La première étape est le calcul de réseau, détaillé en espace et en énergie, qui se fait sur une "partie représentative" du réacteur : une cellule, un assemblage de combustible, plusieurs assemblages. Ce calcul consiste à obtenir le flux neutronique et les différents taux de réactions sur le domaine (discrétisé) spatial et énergétique. Évidemment, ce calcul se fait sans la connaissance des conditions que rencontre l'assemblage considéré dans le cœur du réacteur ; des conditions aux frontières de réflexion ou translation sont alors appliquées de manière à simuler un milieu infini. Pour corriger cette procédure, un modèle dit "de fuites" est bien souvent ajouté au calcul de réseau et parfois, pour capturer des effets associés aux interfaces avec le milieu environnant, des calculs sur des motifs géométriques plus grands sont nécessaires.

La seconde étape est le calcul de réacteur entier. Le calcul de réseau en ce sens représente l'étape intermédiaire qui permet l'obtention des propriétés nucléaires requises par un calcul neutronique de réacteur entier. Ces sections efficaces macroscopiques moyennes en énergie (condensation) et en espace (homogénéisation) sont obtenues par pondération par le flux obtenu par le calcul de réseau. Elles sont tabulées en fonction des paramètres locaux et/ou globaux du réacteur tels que le burnup, les températures des différents composants, l'enrichissement du combustible, la concentration en "poison" neutronique. On notera aussi que souvent, pour des réacteurs à neutrons thermiques, les calculs de cœur sont réalisés avec une approximation de l'équation de transport neutronique (Eq. 1.1) dont la plus courante prend la forme d'une équation de diffusion (loi de Fick).

Dans le cadre d'un tel schéma de calcul à deux niveaux, les travaux rapportés ici s'intéressent au calcul de réacteur et à la procédure d'homogénéisation/condensation qui le précède.

Pour les réacteurs à neutrons rapides (RNR), l'approximation de la diffusion n'est pas adaptée de par l'anisotropie du flux et cette étape de calcul du cœur complet du réacteur requiert la résolution de l'équation de transport. En 2007, dans le cadre du développement des réacteurs de génération IV et plus particulièrement d'un réacteur à neutrons rapides refroidi au sodium (RNR-Na), il est apparu que la précision des outils utilisés au CEA (en l'occurrence, le système de codes ERANOS [2] avec les solveurs VARIANT [3] et BISTRO [4]) n'était pas suffisante pour traiter ces cœurs d'assemblages hexagonaux. Dans un spectre rapide, l'hétérogénéité axiale du cœur (e.g. tranche fertile, réflecteur ou couverture fertile axiale, plénum sodium) et les interfaces associées interdisent l'utilisation d'un calcul 2D avec un modèle de fuites axiales et requiert un calcul 3D qu'ERANOS ne permettait pas de réaliser. En effet, d'une part, la formulation en flux pair du code VARIANT en géométrie 3D hexagonale est problématique pour le calcul de la réactivité relative à la vidange du sodium ; d'autre part, la méthode des ordonnées discrètes du code BISTRO est limitée à des géométries 2D cartésienne ($x - y$) ou 2D cylindrique ($r - z$). Dans ces conditions, le développement d'un nouveau solveur (SNATCH) a démarré en 2008 avec comme ambition de disposer d'un solveur 3D basé sur la méthode des ordonnées discrètes pour la discrétisation angulaire et un schéma d'ordre élevé avec des possibilités de raffinement en ordre (p) et en espace (h) afin de satisfaire les objectifs de précision de simulation associés à ces réacteurs de 4^{ème} génération.

Dans ce Chapitre, après une présentation générale de ce solveur SNATCH (§ 1.2), nous nous intéressons plus particulièrement à trois ensembles de travaux de recherche réalisés dans ce

contexte. D’abord, le § 1.3 présente le développement de méthodes de raffinement adaptatif ; ensuite, le § 1.4 s’intéresse, dans le cadre de ces méthodes de raffinement local, à une extension de la théorie des perturbations qui permet de relier les variations d’une certaine quantité d’intérêt aux variations des paramètres régissant l’état du système. Puis, des travaux relatifs au traitement de l’interface entre le cœur et le réflecteur d’un réacteur à neutrons rapides vis-à-vis de la question de la condensation (homogénéisation vis-à-vis du maillage énergétique) sont discutés au § 1.5. Ce Chapitre se conclut au § 1.6 avec quelques considérations sur les “bénéfices” associés au développement du SNATCH par-delà les travaux synthétisés ici.

1.2 Développement du solveur de neutronique SNATCH

Le développement de ce solveur a été réalisé avec mon collègue Christophe Suteau et le concours d’une post-doctorante, Laura Gastaldo, docteure en mathématiques appliquées. Il a été réalisé hors du cadre informatique vieillissant d’ERANOS avec un soin particulier apporté au modèle de conception orientée-objet afin de faciliter le développement ultérieur de fonctionnalités avancées.

Du point de vue de la discrétisation des variables E et $\vec{\Omega}$, le solveur SNATCH se base sur les méthodes classiques dites multigroupe et aux ordonnées discrètes (dite S_N) respectivement de telle sorte que le problème semi-discret, avant discrétisation de la variable spatiale, peut s’écrire sous la forme matricielle suivante :

$$\underline{\underline{H}}\underline{\phi}(\vec{r}) = \underline{S}(\vec{r}) = \underline{S}\underline{\phi}(\vec{r}) + \frac{1}{k}\underline{F}\underline{\phi}(\vec{r}) \quad (1.2)$$

où le vecteur des inconnues $\underline{\phi} = \left[\phi_n^g(\vec{r}) = \int_g dE \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}_n, E) \right]_{(1 \leq g \leq G, 1 \leq n \leq N)}$ représente les flux intégrés par groupe d’énergie ($\mathcal{E} = \{]E_g, E_{g-1}[, 1 \leq g \leq G\}$) et évalués pour les directions discrètes $(\vec{\Omega}_n)_{1 \leq n \leq N}$ de la méthode S_N . Ce système d’équations couplées (par le biais de la dépendance de la source de neutrons au flux) est résolu par le biais d’une imbrication de méthodes itératives ; en particulier, au plus haut niveau, on trouve classiquement la méthode des puissances associée à la résolution du problème à valeur propre dominante.

Les travaux de recherche concernant ce solveur se sont concentrés au démarrage sur la discrétisation spatiale pour des maillages cartésiens 2D et 3D [5] puis son extension à des maillages hexagonaux 2D et 3D [6]. Cette discrétisation porte sur l’opérateur linéaire d’advection-réaction de $\underline{\underline{H}}$. Pour en discuter plus avant, nous nous concentrons sur l’Eq. 1.2 pour un groupe et une direction donnés et en omettant l’exposant g et l’indice n associés de telle sorte que l’on a :

$$\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \Sigma_t(\vec{r}) \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = S(\vec{r}, \vec{\Omega}) \quad (1.3)$$

où $\Sigma_t(\vec{r})$ est la section efficace macroscopique dite “totale” (*i.e.* comptabilisant toute interaction) et $S(\vec{r}, \vec{\Omega})$ est le terme source qui couple par diffusion et fission les flux des différents groupes et différentes directions.

Pour discrétiser l’Eq. 1.3, notre choix s’est porté sur la méthode Galerkin discontinue (DG, aussi appelée éléments finis discontinus) décentrée amont (“upwind”) proposée, pour la première fois, par Reed & Hill en 1973 dans [7]. Si cette méthode est bien connue en neutronique, elle avait été principalement utilisée jusque-là avec des éléments d’ordre 1 sur des maillages non-structurés conformes (voir, par exemple, [8]). Pour autant, dans le cadre de SNATCH, c’est pour sa facilité à gérer des maillages non-conformes et son potentiel d’extension à un ordre quelconque

Annexes A.2 à A.4

Annexe A.5

Annexe A.6

que notre attention s'est portée sur cette méthode. En effet, à la différence des éléments finis "classiques", les méthodes DG ne forcent pas la continuité entre les éléments de telle sorte que chaque élément à son propre développement polynomial ; la stabilité et la consistance du schéma sont alors conditionnés par le choix de la représentation aux interfaces. On notera qu'à la même période, Y. Wang et J. C. Ragusa [9, 10] ont menés des travaux de recherche similaires (mais pour des maillages 2D d'éléments triangulaires) qui ont débouchés sur des résultats intéressants et complémentaires tant du point de vue des performances que de l'analyse de cette méthode.

Le choix de cette discrétisation s'est accompagné d'un travail collaboratif avec Y. Y. Azmy, professeur au département de génie nucléaire de "North Carolina State University" avec lequel nous avons mené une comparaison entre ce schéma DG et trois autres schémas d'ordres élevés (en particulier, deux schémas appelés "arbitrarily high order transport" - AHOT introduits par Y. Y. Azmy). Ces schémas ont été testés numériquement vis-à-vis de leur convergence sur des benchmarks de type "solutions manufacturées" en faisant varier la régularité de la solution exacte (voir [11]). On a pu y conclure que les schémas AHOT n'améliorent la précision de la solution vis-à-vis de DG que dans le régime pré-asymptotique (maillages grossiers) au prix d'une complexité accrue et difficilement compatible avec notre objectif de développement de méthodes de raffinement automatique.

Considérant un maillage $\mathcal{M}_h = \{\kappa\}$ du domaine spatial $\mathcal{D}$ de telle sorte que les sections efficaces sont constantes par maille, e.g. $\forall \vec{r} \in \kappa, \Sigma_t(\vec{r}) = \Sigma_{t,\kappa}$, le schéma DG décentré amont permet d'écrire une formulation faible de l'Eq. 1.3 pour le flux "approché" ϕ_h sur chaque élément κ . La discrétisation sur chaque élément est alors obtenue sous la forme d'un système linéaire d'équations par une procédure de Galerkin où ϕ_h est développé sur une base polynomiale d'ordre p qui est aussi utilisée pour les fonctions test. L'espace discret associé à cette discrétisation de $\mathcal{D}$ est noté V_h^p .

Le caractère décentré amont offre un découplage partiel entre éléments : ϕ_h , dans l'élément κ , peut être calculé à partir de la connaissance des valeurs de ϕ_h en amont de $\partial\kappa$, la frontière de κ , selon la direction $\vec{\Omega}$. La discontinuité entre les éléments se traduit par une discontinuité de la trace $\phi_h^\pm(\vec{r} \in \partial\kappa) = \lim_{s \rightarrow 0^\pm} \phi_h(\vec{r} + s\vec{\Omega})$ de part et d'autre de l'interface que l'on quantifie par le "saut" $\llbracket \phi_h \rrbracket = (\phi_h^+ - \phi_h^-)$.

Dans SNATCH, nous avons considéré des maillages structurés basés sur des éléments quadrilatéraux en 2D (rectangles pour les maillages cartésiens, losanges pour les maillages hexagonaux) et leur extrusion en 3D. Pour ces maillages, la résolution explicite élément par élément est toujours possible car le graphe orienté des dépendances entre éléments (fonction de la direction $\vec{\Omega}$) est acyclique. Le raffinement local et le caractère non-conforme des maillages obtenus ne remettent pas en cause cette propriété dans la mesure où ces raffinement locaux correspondent à des sous-maillages eux-mêmes structurés. Des exemples de maillages associés à cette discrétisation dans SNATCH sont présentés à la Figure 1.1.

Comme dans cette méthode le développement polynomial du flux est fait par maille, cette discrétisation se prête bien au raffinement local que ce soit en ordre (*i.e.* augmentation de p) ou en espace (découpage des mailles) mais, pour être efficace, la base de polynômes doit être choisie avec soin. Partant du travail de [12], nous avons pu construire une telle famille de bases pour n'importe quel ordre p offrant les propriétés suivantes :

- cette famille de base est hiérarchique *i.e.* toutes les fonctions composant la base d'ordre p appartiennent à la base d'ordre $p + 1$, de manière à faciliter le raffinement en ordre ;
- les fonctions d'une telle base sont construites vis-à-vis de la topologie des entités du maillage (nœuds, arêtes, faces, mailles) de sorte que la restriction de ϕ_h à sa trace sur une entité de $\partial\kappa$ est obtenue directement ce qui simplifie *in fine* les opérations de projection de ces traces associées aux non-conformités du maillage.

Annexe A.6.1

Annexe A.6.2

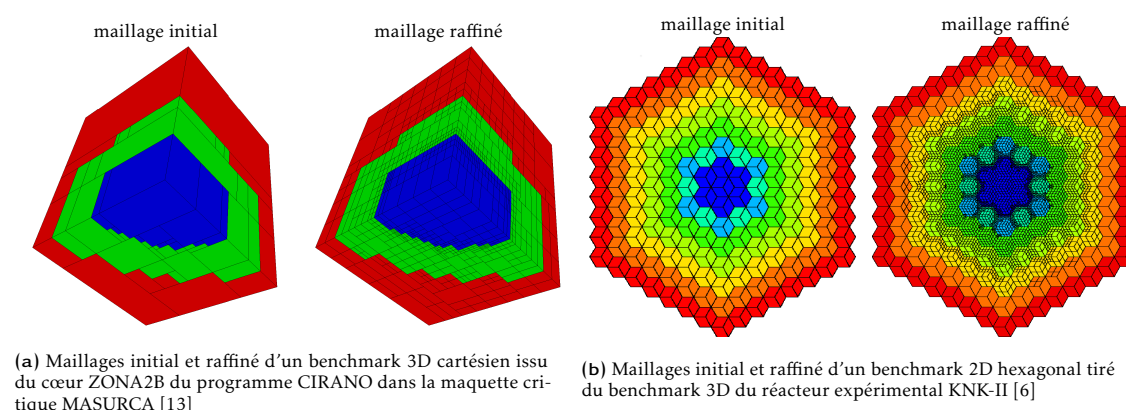


FIGURE 1.1 – Exemples de maillages avec le solveur SNATCH et ses méthodes de raffinement de maillage

Le développement de SNATCH a aussi bénéficié du travail du stage de Laurent Naymeh rapporté dans [14] concernant l'accélération des itérations sur la source de neutrons par un pré-conditionnement du système avec un opérateur de diffusion ("diffusion synthetic acceleration"). L'approche suivie s'apparente aux travaux de [15] (maillages triangulaires) pour des mailles quadrilatères.

1.3 Développement de méthodes de raffinement local hp

Sur la base de ces développements dans SNATCH, la thèse de Damien Fournier entre 2008 et 2011 a porté sur l'analyse et développement de méthodes de raffinement hp adaptatif [16]. L'objectif général de ces méthodes est d'améliorer, de manière optimale vis-à-vis du nombre de degrés de liberté associés à la discrétisation, la précision de la solution soit par un raffinement local (h -raffinement), consistant à subdiviser une maille en sous-mailles, soit par une augmentation locale de l'ordre de la base de polynômes utilisée (p -raffinement). Le principe général des méthodes de raffinement adaptatif est illustré à la Figure 1.2 avec le squelette de l'algorithme d'adaptation. Dans le cadre du transport de particules, le développement de méthodes d'adaptation de maillage spatial avait reçu jusque-là moins d'attention [17, 18, 19, 20, 21, 22] que dans d'autres disciplines telles que la mécanique des fluides [23]. Dans le contexte de la simulation neutronique des réacteurs nucléaires, c'est sûrement en partie du au fait qu'un pan important des travaux de recherches est tourné vers la simulation "directe" des cœurs complets sans homogénéisation qui impose, de par la description géométrique des matériaux, un maillage spatial déjà largement raffiné [24]. Pour autant, les besoins pratiques de l'industrie nucléaire requièrent et requerront encore longtemps un schéma de calcul avec une étape de calcul de cœurs partiellement homogénéisés et c'est dans ce cadre que nous nous sommes intéressés à ces méthodes. A nouveau, nos travaux portant sur ces méthodes dans le cadre de la méthode DG ont été concomitants à ceux de Wang et Ragusa [25, 26] pour des maillages 2D d'éléments triangulaires.

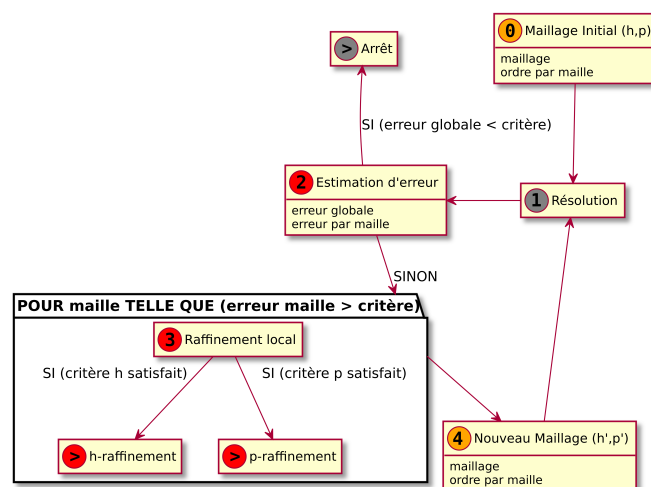


FIGURE 1.2 – Principe général du raffinement adaptatif

L'enjeu de ce travail de thèse était alors de mettre en place des méthodes permettant localement de choisir au mieux le type de raffinement à appliquer. Cette thèse a été encadrée avec Raphaële Herbin du Laboratoire d'Analyse, Topologie, Probabilités (LATP, maintenant intégré à l'Institut de Mathématiques de Marseille – I2M) qui a apporté son expertise en matière d'analyse d'erreur sur des schémas volumes finis.

Les performances des algorithmes adaptatifs sont directement liées à la qualité de l'estimateur d'erreur étant donné que c'est cette quantité qui va guider le processus de raffinement. En conséquence, le principal travail de cette thèse a consisté à construire des estimateurs d'erreur (rapides à évaluer et efficaces) et à définir un critère pour choisir entre le h - et le p -raffinement afin de faire décroître l'erreur le plus efficacement possible.

Dans tout ce travail, l'erreur considérée a invariablement été celle sur le flux qui, en norme L^2 , sur l'ensemble du domaine $\mathcal{D}$, est notée :

$$\|e\|_{L^2(\mathcal{D})} = \|\phi_h - \phi\|_{L^2(\mathcal{D})} \quad (1.4)$$

où ϕ_h est la solution numérique de l'Eq. 1.3 discrétisée par le schéma DG upwind tandis que ϕ représente la solution exacte de cette équation. Les stratégies de raffinement hp finalement proposées dans cette thèse se sont basées sur diverses analyses et estimations relatives à cette erreur. Nous n'avons pas étudié dans ce cadre les méthodes dites "goal-oriented" qui passent par la définition d'une quantité d'intérêt qui peut-être "localisée" en espace et en énergie. Nous sommes partis du constat que, dans le contexte de la physique neutronique d'un cœur de réacteur (par opposition à des applications de radio-protection, voir par exemple [27]), ce sont les taux de réactions sur l'ensemble des domaines spatial et énergétique qui sont d'intérêt. Nous reviendrons tout de même sur ce point au § 1.4 vis-à-vis du facteur de multiplication effectif qui peut être défini comme quantité d'intérêt "globale" dans ces approches. Dans tous les cas, ces méthodes requièrent une estimation de l'erreur sur le flux (ou son adjoint) de telle sorte que le travail synthétisé ici reste une étape nécessaire avant la mise en place de méthodes dites "goal-oriented".

1.3.1 Estimation d'erreur *a priori*

Tout d'abord, on s'est intéressé au comportement de cette erreur dans le cas d'un raffinement uniforme (ordre p , pas normalisé h) sur la base de :

- différents résultats théoriques relatifs à l'estimation de cette erreur *a priori* et sa convergence en h et p (en particulier, [28, 29, 30]);
- tests numériques réalisés sur deux cas analytiques simples (s'apparentant aux benchmarks de type "solutions manufacturées" de [11] discutés plutôt) représentatifs des situations rencontrées dans les cas réacteurs vis-à-vis de la régularité s de ϕ associée à l'espace de Hilbert H^s ; voir Figure 1.3a.

Dépendamment de la présence ou non de zones "vides" dans le cœur (Σ_t localement nulle), s est limitée à $\frac{1}{2}$ (cas test MMS0) ou $\frac{3}{2}$ (cas test MMS1). Cette perte de régularité est confinée aux abords de lignes caractéristiques de direction $\vec{\Omega}$ partant des nœuds du maillage au niveau des interfaces entre matériaux ou des "coins" du domaine.¹ Dans ces conditions, la convergence de l'erreur est caractérisée par :

$$\|e\|_{L^2(\mathcal{D})} = \epsilon_{p,h} = \mathcal{O}\left(\frac{h^{\min(p+1,s)}}{p^\alpha}\right) \quad (1.5)$$

où, dans le régime asymptotique, α est égal à $s - \frac{1}{2}$ tandis que dans un régime pré-asymptotique, α est proche de s tel qu'illustré à la Figure 1.3b. Cet ordre s de convergence dans le régime pré-asymptotique correspond à celui de la meilleure interpolation possible d'une fonction dans H^s par un polynôme de degré p [31].

En considérant à ce stade, le nombre de degrés de liberté *dof* comme indicateur de la "performance" des méthodes mises en œuvre, on peut définir deux fonctions relatives à la performance des raffinements en p ou en h respectivement sous la forme :

$$\begin{cases} J_{p \rightarrow p+1,h} = \frac{|\log(\epsilon_{p+1,h}) - \log(\epsilon_{p,h})|}{\log(dof_{p+1,h}) - \log(dof_{p,h})} & \text{en } p \\ J_{p,h \rightarrow h/2} = \frac{|\log(\epsilon_{p,h/2}) - \log(\epsilon_{p,h})|}{\log(dof_{p,h/2}) - \log(dof_{p,h})} & \text{en } h \end{cases} \quad (1.6)$$

où $dof_{p,h} = \sum_{\kappa \in \mathcal{M}_h} (p_\kappa + 1)^d = \left(\frac{p+1}{h}\right)^d$ avec d est la dimension de l'espace euclidien.

La comparaison entre $J_{p \rightarrow p+1,h}$ et $J_{p,h \rightarrow h/2}$ offre alors un critère d'évaluation de la "meilleure" stratégie que l'on peut exprimer sous la forme suivante :

$$\left(\text{le } p\text{-raffinement est meilleur si } \frac{\alpha}{s} \geq \frac{\log\left(\frac{p+2}{p+1}\right)}{\log\left(\frac{p+1}{p}\right)} \right) \quad (1.7)$$

et qui conduit à la conclusion simple suivante : dans le régime pré-asymptotique (resp. asymptotique), il faut favoriser le p -raffinement (resp. h -raffinement). Notons que c'est l'importance de ce régime pré-asymptotique qui a été souvent négligée de telle sorte que beaucoup d'implémentations de la méthode DG "upwind" se sont contentés de l'ordre $p = 1$.

1. Les calculs présentés sur les cas tests MMS0 et MMS1 sont réalisés avec une quadrature dite S_2 en angle de telle sorte que toutes les directions sont équivalentes par symétrie de la géométrie et que les lignes caractéristiques sont les deux diagonales de la géométrie.

Sur les cas tests analytiques utilisés, on a observé que le régime pré-asymptotique était au moins valable pour $p \leq 4$ (voir Figure 1.3b). En conséquence, une première stratégie de sélection entre les deux types de raffinement, notée hp^B , consiste à raffiner en ordre tant que $p \leq 4$ puis en espace (voir Tableau 1.1).

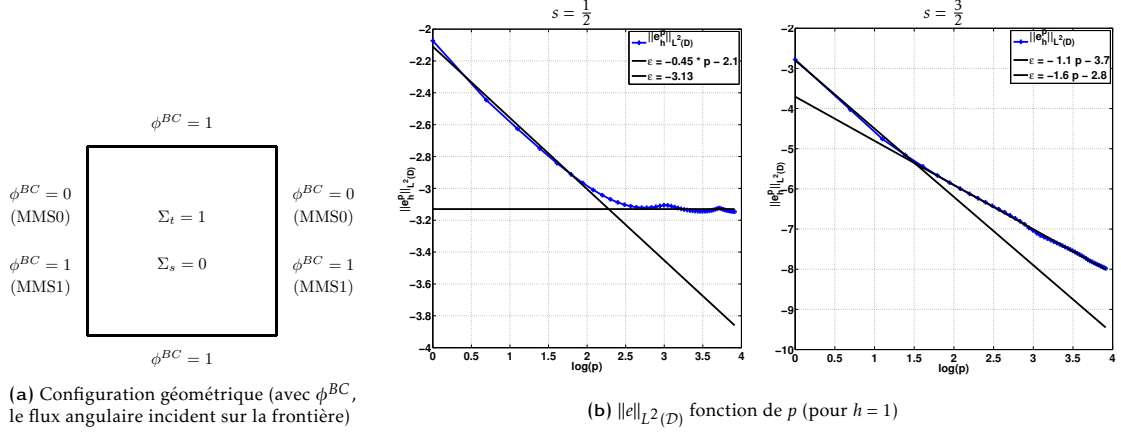


FIGURE 1.3 – Description et convergence en p pour les cas tests MMS0 ($s = \frac{1}{2}$) et MMS1 ($s = \frac{3}{2}$)

1.3.2 Estimation d'erreur *a posteriori*

Si les résultats précédents sur l'estimation d'erreur *a priori* donnent des informations précieuses pour le choix entre raffinement en h ou en p , ils ne permettent pas pour autant de définir à chaque cycle de raffinement quelles sont les mailles à raffiner. Pour ce faire, il faut avoir recours à un estimateur *a posteriori* qui permet d'évaluer cette erreur à chaque cycle à partir de la solution courante. Cette estimation de l'erreur pour chaque maille κ notée $E_n^s(\kappa)$ est faite pour chaque Eq. 1.3, c'est à dire pour chaque groupe g et direction $\vec{\Omega}_n$.

Deux estimateurs ont été étudiés au cours de cette thèse ; ils se distinguent par les hypothèses de régularité sous lesquelles ils sont obtenus. En effet, comme on l'a vu au § 1.3.1, la régularité est déterminante vis-à-vis de la convergence des raffinement en h ou en p . Alors que l'un d'eux est basé sur des hypothèses de régularité très fortes [32], l'autre utilise seulement les hypothèses minimales permettant de garantir que le problème est bien posé [33]. Cette recherche associée aux estimateurs nous a semblé importante, en particulier, vis-à-vis du raffinement hp . En particulier, il nous a semblé pertinent dans une logique de performance, d'aller au-delà de la méthode "classique" d'estimation de l'erreur utilisant deux maillages (comme par exemple dans [25] pour la méthode DG en transport de neutrons).

D'abord, un estimateur, valide seulement sous des hypothèses de régularité fortes $\phi \in C^\infty$, a été étudié. Il est basé sur le développement en série de Taylor de l'erreur et l'estimation d'erreur en tant que telle est obtenue en retenant l'ordre dominant $p + 1$ dans ce développement et en utilisant la relation d'orthogonalité satisfaite par l'erreur de par la consistance du schéma. Cet estimateur, noté E^R , permet un calcul maille-par-maille de l'erreur par la résolution d'un système linéaire de taille d , la dimension de l'espace, sur chaque maille ; pour les maillages de SNATCH, ce système linéaire est même diagonal. Sous les hypothèses fortes de régularité pour lesquelles il est valide, cet estimateur d'erreur converge bien vers la vraie erreur lorsque $h \rightarrow 0$ ou $p \rightarrow \infty$. Cet estimateur a été implémenté dans SNATCH en premier lieu pour sa simplicité afin de mettre en place tous les algorithmes associés au raffinement de maillage. Bien sûr, les hypothèses de

Annexe A.6.4

Théorème 1

régularité de cet estimateur ne sont pas vérifiées en pratique ; ceci est illustré à la Figure 1.4 avec les cas test MMS0 et MMS1. On y voit que l'indice d'efficacité de l'estimateur (rapport entre l'erreur estimée et l'erreur réelle) est mauvais aux abords de la ligne caractéristique issue du coin de la géométrie ; en effet, c'est autour de ces lignes que la perte de régularité est concentrée. Ce phénomène est plus marqué pour $s = \frac{1}{2}$ (MMS0) de telle sorte qu'un raffinement adaptatif de maillage conduit avec E^R sur ce cas MMS0 donne un maillage inadapté : les mailles sur les diagonales où l'erreur est concentrée (car le flux est discontinu au travers de ces diagonales) ne sont pas correctement raffinées (cf. Figure 1.4c). Sur MMS1 (non montré ici), le raffinement de la diagonale est bien assuré. Ainsi, cet estimateur, qui, par ailleurs, voit ses performances dégradées lorsque le maillage est non-conforme ou l'ordre non uniforme, n'est pas optimal pour comme indicateur d'erreur dans un processus de raffinement adaptatif. Par contre, on retiendra que sa "performance" en terme d'indice d'efficacité local est directement un indicateur de la régularité de la solution.

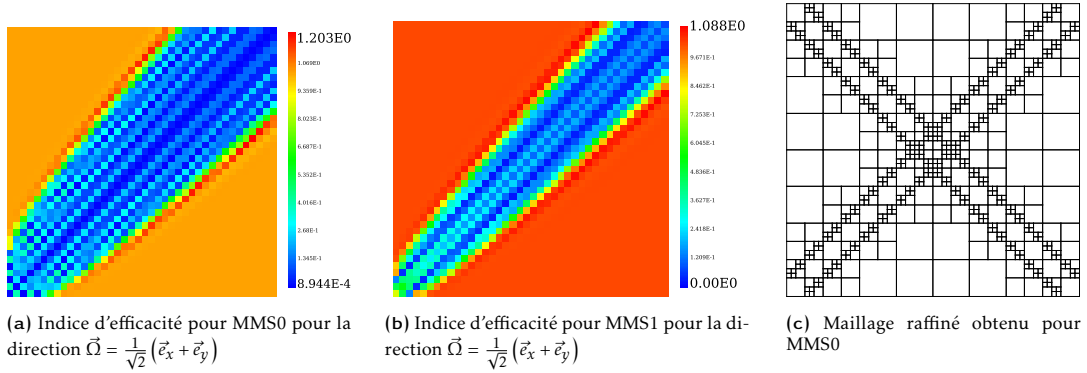


FIGURE 1.4 – Résultats associés à l'estimateur de Radau E^R sur les cas test MMS0 et MMS1

En conséquence, un second estimateur a été obtenu sous les hypothèses minimales de régularité permettant de garantir que le problème est bien posé c'est-à-dire que la solution appartient à l'intersection de l'espace de Sobolev $W^{1,1}$ et de l'espace de Lebesgue L^∞ . Les premiers estimateurs dans ce cadre ont été dérivés pour les schémas de type "volumes finis" (que l'on peut voir comme des schémas DG avec $p = 0$) [34] ; l'extension de cette preuve au cas DG a été faite dans [35] pour un problème de Cauchy et adaptée au contexte de l'équation de transport stationnaire dans le cadre de la thèse de D. Fournier. Nous nous contenterons ici d'en donner la forme générale, $\exists K_1, K_2$ tels que :

$$\|\phi_h - \phi\|_{L^1(\mathcal{D})} \leq \sqrt{K_1 \eta_1} + \sqrt{K_2 \eta_2}$$

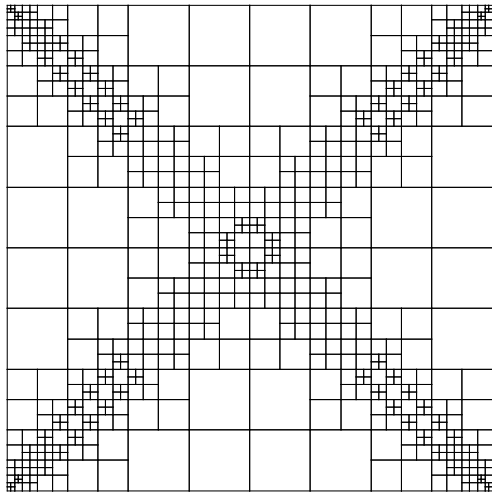
avec $\eta_i = \eta_i^1 + \eta_i^2$ que l'on peut décomposer maille par maille sous la forme $\eta_i^j = \sum_{\kappa \in \mathcal{M}_h} \eta_{i,\kappa}^j$. Les

termes $\eta_{i,\kappa}^1$ correspondent à des intégrales sur κ tandis que $\eta_{i,\kappa}^2$ sont des intégrales sur $\partial\kappa$. A partir de là, des tests numériques menés sur les benchmarks MMS0 et MMS1 ont montré que les deux termes d'erreur sur $\partial\kappa$ dominent les deux autres termes sur κ (typiquement, $\eta_i^1 \approx h^2 \eta_i^2$). Ainsi, dans un objectif d'évaluation de l'erreur pour le raffinement de maillage, on peut se contenter d'utiliser une estimation d'erreur basée sur $\eta_{1,\kappa}^2$ et $\eta_{2,\kappa}^2$. Ces tests numériques nous ont aussi montré que pour $s = \frac{3}{2}$ ces deux termes sont équivalents tandis que pour $s = \frac{1}{2}$, le terme $\eta_{2,\kappa}^2$ faisant intervenir $\|\phi_h - \phi\|_{L^\infty}$ domine car il ne tend pas vers 0 ; en effet, le schéma

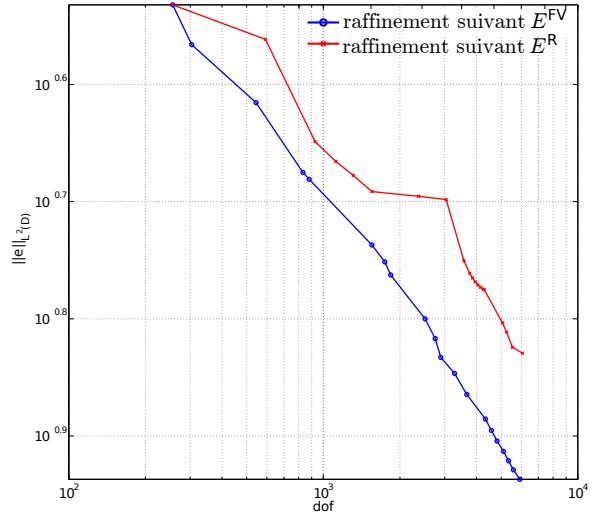
DG n'offre pas une convergence locale dans les zones où ϕ est discontinu. Ainsi, c'est le terme $\eta_{2,\kappa}^2$ qui apparaît comme le candidat naturel pour l'estimation d'erreur en vue du raffinement. Pour autant, qualitativement, $\eta_{2,\kappa}^2$ se comporte comme $\eta_{1,\kappa}^2$ vis-à-vis de la répartition spatiale et des tests de raffinement avec $\eta_{1,\kappa}^2$ et $\eta_{1,\kappa}^2 + \eta_{2,\kappa}^2$ dans le cas le plus défavorable du benchmark MMS0 n'ont pas montré de différence significative. Ainsi, pour limiter le coût d'évaluation de l'erreur en évitant le calcul coûteux de $\|\cdot\|_{L^\infty}$, un estimateur limité à $\eta_{1,\kappa}^2$ peut être utilisé pour le raffinement de maillage. Il est alors intéressant de noter que $\eta_{1,\kappa}^2$ correspond exactement à l'estimation d'erreur dans le cas du schéma "volumes finis" (*i.e.* DG avec $p = 0$) qui s'écrit :

$$E^{FV} = \sum_{b \in \mathcal{B}_h(\kappa)} S_b \int_b d^2 r \left| \vec{\Omega} \cdot \vec{n} \right| \left\| \phi_h \right\| \quad (1.8)$$

avec $\mathcal{B}_h(\kappa)$ l'ensemble des faces en 3D composant $\partial\kappa$ et délimitant κ et S_b la surface de la face b . Cette analyse donne ainsi des éléments de justification à l'utilisation parfois heuristique du saut entre les cellules comme estimateur de l'erreur pour raffiner (comme par exemple dans [15, 36] dans le cadre de l'équation de transport des neutrons). Bien sûr, avec ces simplifications, E^{FV} n'est plus une estimation de l'erreur mais simplement un indicateur pour le raffinement. Ses performances sont illustrées à la Figure 1.5 sur le cas test MMS0 ; on peut voir que les mailles diagonales qui concentrent l'erreur sont correctement identifiées par cet indicateur d'erreur (*cf.* Figure 1.5a) et qu'ainsi, la convergence de l'erreur est nettement améliorée pour un raffinement adaptatif mené avec E^{FV} plutôt qu'avec E^R (voir Figure 1.5b).



(a) Maillage raffiné obtenu avec E^{FV}



(b) Convergence de l'erreur en norme L^2 pour un raffinement mené avec E^{FV} ou E^R

FIGURE 1.5 – Résultats associés à l'estimateur E^{FV} et comparaison à E^R sur le cas test MMS0

1.3.3 Critère de choix entre h - ou p -raffinement

Si E^R n'est pas le meilleur indicateur d'erreur pour "conduire" le raffinement, son utilisation en complément de E^{FV} peut offrir un critère de sélection entre raffinements en h ou en p [37, 33]. En effet, la comparaison entre les deux estimateurs fournit une mesure qualitative de la

régularité de la solution : pour les mailles κ où E^R et E^{FV} indiquent tous les deux une erreur importante, on considérera que la solution est assez régulière pour que E^R ne soit pas en défaut et on privilégiera le raffinement en ordre ; à l'inverse si seul E^{FV} indique une erreur importante, un raffinement en h sera appliqué. Cette stratégie est notée hp^{2E} . Bien sûr, cette approche ne tient pas compte du fait que, comme nous l'avons vu par l'analyse de l'erreur *a priori*, dans le régime pré-asymptotique, le raffinement en p peut se montrer favorable même dans les zones où la solution n'est pas régulière. En conséquence, on peut marier les stratégies hp^B et hp^{2E} en favorisant le p -raffinement tant que $p \leq 4$ et en utilisant le critère associé à hp^{2E} au-delà ; cette autre stratégie, *a priori* meilleure, est notée hp_{mod}^{2E} .

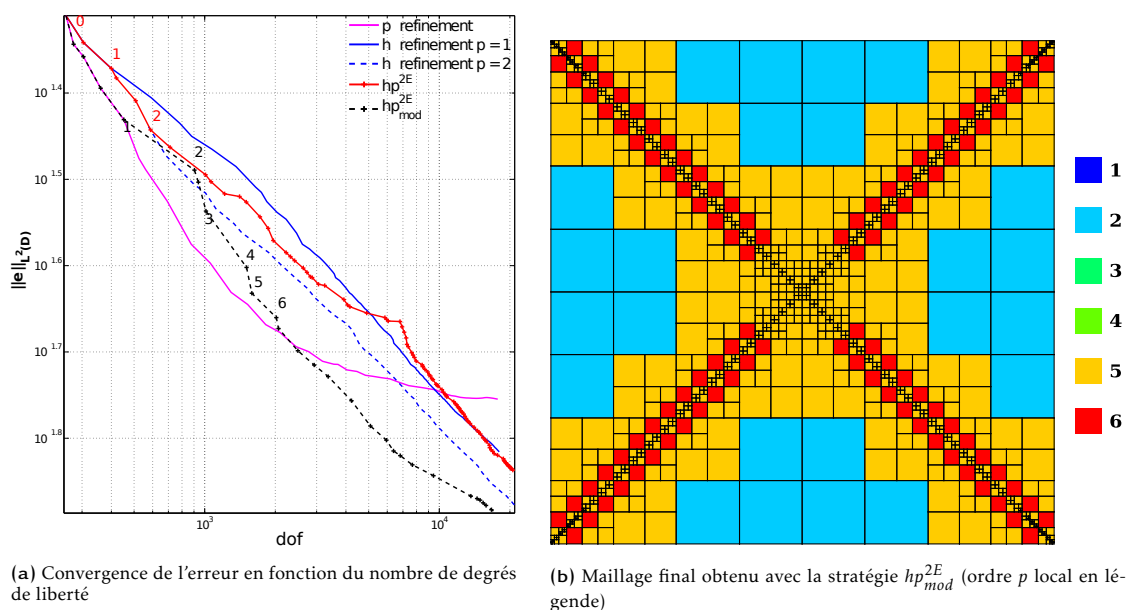
Le Tableau 1.1 résume les stratégies hp qui ont été testées au cours de cette thèse. On notera, qu'à titre de comparaison avec les stratégies proposées (en particulier à deux estimateurs), la méthode dite de "type parameter" a été aussi utilisée. Cette approche se base sur une mesure la régularité "perçue" de la solution [38, 39] ; à partir de n'importe quel estimateur d'erreur local à κ fonction de la solution ϕ_h , de la taille h_κ et de l'ordre p_κ , cette méthode se base sur la comparaison des erreurs locales à l'ordre p_κ et $p_\kappa - 1$ pour choisir entre le h - et le p -raffinement (cette sélection est pilotée par un paramètre "utilisateur" appelé "type parameter"). Si cet algorithme requiert deux calcul initiaux pour $p = 1$ et $p = 2$, il est ensuite peu coûteux.

notation	stratégie	critère de sélection du h -raffinement
hp^B	<i>a priori</i>	$p_\kappa > 4$
hp^{2E}	à deux estimateurs	$E^R(\kappa) \leq \alpha$
hp_{mod}^{2E}	à deux estimateurs, en favorisant p au début	$E^R(\kappa) \leq \alpha$ et $p_\kappa > 4$
hp^{TP}	"type-parameter"	$\frac{E_p^{FV}(\kappa)}{E_{p-1}^{FV}(\kappa)} \leq \alpha$

TABLEAU 1.1 – Stratégies de sélection entre raffinement en h ou en p associé au critère de raffinement $E^{FV}(\kappa) > \alpha$ ($0 \leq \alpha \leq 1$ est une constante qui détermine la "vitesse" du raffinement)

Les résultats associés aux stratégies hp^{2E} et hp_{mod}^{2E} sont comparés au raffinement adaptatif uniquement en h ou en p sur le cas test de régularité "minimale" MMS0 (cf. Figure 1.6) en termes de l'erreur sur le flux en norme L^2 fonction du nombre de degrés de liberté (Figure 1.6a).

On note tout d'abord l'intérêt du p -raffinement tant que p n'est pas trop important. Pour $dof \leq 2000$, le raffinement en p présente la meilleure convergence. On y voit l'intérêt d'augmenter l'ordre initialement mais aussi la limite de cette stratégie de p -raffinement. En ce qui concerne le h -raffinement seul, $p = 1$ donne les moins bons résultats tandis que $p = 2$ arrive à des vitesses de convergence très intéressantes. Si l'on utilise la stratégie hp^{2E} , on effectue toujours du h -raffinement le long des diagonales (comme par exemple entre les points 0 et 1 sur la Figure 1.6a) et rarement du p -raffinement (entre 1 et 2 sur la Figure 1.6a), uniquement sur des cellules entourant les caractéristiques. Ainsi, la convergence est très proche de ce que l'on observe si l'on effectue uniquement du h -raffinement. Avec hp_{mod}^{2E} , en forçant le p -raffinement tant que $p \leq 4$, on améliore la convergence de manière significative en tirant partie du régime pré-asymptotique vis-à-vis de la convergence en p même sur les lignes caractéristiques où la solution est peu régulière. Au delà, sur ces lignes, le h -raffinement est privilégié (entre 1 et 2, 3 et 4, 5 et 6 sur la Figure 1.6a) tandis que du p -raffinement continue d'être utilisé (entre 2 et 3, 4 et 5 sur la Figure 1.6a) là où la solution est plus régulière. Le maillage final obtenu avec cette stratégie est reproduit à la Figure 1.6b.

FIGURE 1.6 – Résultats associés au raffinement adaptatif hp sur le cas test MMS0

1.3.4 Application à un cœur à neutrons rapides

Ces différentes méthodes de raffinement adaptatif ont été testées sur plusieurs cas associés à des cœurs de réacteurs à neutrons rapides refroidis au sodium, en particulier dans le cadre de l'analyse de configurations du programme expérimental CIRANO [40] qui a été conduit entre 1994 et 1997 dans la maquette critique MASURCA au CEA Cadarache. Ce programme était dédié à l'étude de la performances de cœurs à neutrons rapides "plutonivores". Parmi toutes les configurations étudiées, le cœur ZONA2B se distingue par la présence d'un réflecteur en acier autour du cœur (en lieu et place de la couverture fertile des autres configurations). La présence de ce réflecteur induit des variations plus marquées du flux à l'interface avec un couplage énergie-espace très fort (dont nous discuterons plus avant au § 1.5) qui en font un bon cas test pour nos méthodes adaptatives. Ainsi, dans [13],² un benchmark 2D et un benchmark 3D ont été formulés à partir de cette configuration expérimentale ; ils représentent un cœur composé de trois matériaux homogenésés et condensés à $G = 33$ groupes d'énergie au préalable et notés **FUEL** (un mélange de sodium et de combustible U/PuO₂), **REFLECTOR** (le réflecteur avec 3/4 d'acier et 1/4 de sodium) et **SHIELD** (l'écran en acier) à la Figure 1.7. Afin d'améliorer les performances des méthodes d'adaptation mises en œuvre, une procédure de "déraffinement" de maillage est utilisée afin de décrire la géométrie du problème avec un maillage non-conforme et permettre ainsi de démarrer les calculs avec raffinement adaptatif avec un nombre réduit de mailles.

2. Ce travail valorisé dans le cadre de la thèse de Damien Fournier a été réalisé conjointement avec Pascal Archier alors thésard dans notre laboratoire.

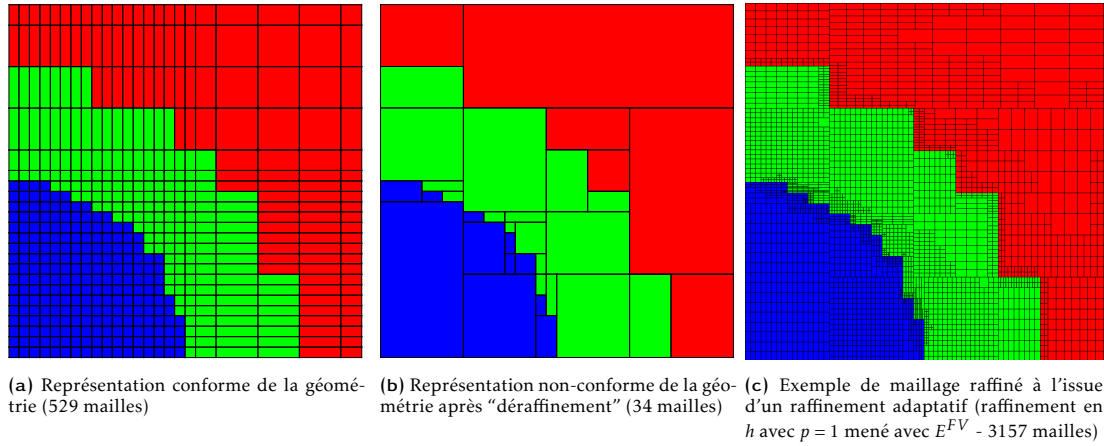


FIGURE 1.7 – Benchmark 2D issu du cœur ZONA2B (matériaux : FUEL, REFLECTOR, SHIELD)

Jusqu'ici, nous avons discuté de l'estimation d'erreur sur la base de l'équation mono-énergétique, uni-directionnelle à source (Eq. 1.3). Pour autant, c'est bien en pratique le système (Eq. 1.2) d'équations de ce type couplées au travers des termes de sources de diffusion et de fission qui nous intéresse. Du point de vue des directions n , nous avons considéré une discrétisation spatiale invariante selon la direction et l'erreur sur le flux scalaire (*i.e.* intégré angulairement) $\bar{E}^g(\kappa) = \sum_n w_n E_n^g(\kappa)$ (w_n sont les poids de la quadrature angulaire) comme indicateur d'erreur dans le raffinement adaptatif dans la mesure où les quantités physiques d'intérêt sont les taux de réactions qui s'expriment en fonction de ce flux intégré.³

Considérons d'abord les résultats présentés dans [33] où un seul et même maillage spatial est utilisé pour tous les groupes d'énergie afin de comparer les différentes stratégies hp du Tableau 1.1 sur le benchmark 2D. Dans ce cas, le raffinement spatial est mené selon le critère suivant :

$$\left(\begin{array}{l} \text{la cellule } \kappa^* \text{ du maillage spatial unique est raffinée ssi} \\ \max_{1 \leq g \leq G} \bar{E}^g(\kappa^*) \geq \alpha \max_{1 \leq g \leq G} \max_{\kappa \in \mathcal{M}_h} \bar{E}^g(\kappa) \end{array} \right) \quad (1.9)$$

où, comme précédemment au Tableau 1.1, $0 \leq \alpha \leq 1$ est une constante qui détermine la "vitesse" du raffinement.

La Figure 1.8 compare les différentes stratégies hp du Tableau 1.1 ainsi que le raffinement adaptatif en p en termes de l'erreur sur le flux définie par

$$\varepsilon_{L^2} = \max_g \sum_n w_n \|e_n^g\|_{L^2(\mathcal{D})}$$

et évaluée par rapport à une solution de référence obtenue sur un maillage fin et un ordre uniforme $p = 4$. La convergence de cette erreur est présentée vis-à-vis du nombre de degrés de liberté et du temps de calcul. A la Figure 1.8a, on distingue clairement deux zones : alors que toutes les méthodes amènent au même taux de convergence dans le régime asymptotique, elles se distinguent dans le régime pré-asymptotique. Comme précédemment dans les cas MMS, on voit clairement que favoriser le raffinement en p est la meilleure stratégie au début pour

3. Cette "réduction" de l'erreur vis-à-vis de la dépendance angulaire est sans approximation dans la limite où la source de diffusion est isotrope. Même si elle ne l'est pas strictement, dans le contexte de la physique neutronique d'un cœur de réacteur (par opposition à des applications de radio-protection par exemple), son anisotropie reste limitée et l'approximation associée vis-à-vis de l'estimation d'erreur n'apparaît pas dommageable.

traiter les interfaces qui concentrent l'erreur et ce malgré la faible régularité du flux dans ces zones. Ainsi, hp^{2E} est la stratégie la moins performante alors que la méthode hp^{TP} qui estime non pas la régularité de la solution mais directement l'efficacité du raffinement en p donne de bons résultats. La stratégie hp_{mod}^{2E} qui, par rapport à hp^{2E} , favorise le raffinement en p pour de faibles valeurs de p donne des résultats équivalents à hp^{TP} . Le résultat le plus surprenant est que la plus simple des stratégies hp^B donne elle aussi des résultats très proches. Ainsi sur ces benchmarks représentatifs d'un cœur de réacteurs à neutrons rapides, le critère dominant de sélection entre h - et p -raffinement est associé à l'importance du régime pré-asymptotique que l'on a pu estimer uniquement par des considérations vis-à-vis de l'erreur *a priori*. Pour ce qui est du temps de calcul montré à la Figure 1.8b, les conclusions sont similaires avec des écarts entre les méthodes plus marquées. En effet, si le surcoût associé au raffinement adaptatif (estimation de l'erreur, modification du maillage et projections) est faible (quelques %), l'évolution du temps de calculs en fonction du nombre de degrés de liberté dof dépend fortement du type de raffinement effectué. Si le temps de calcul varie de manière quasi-linéaire avec dof lorsque l'on raffine en h , il augmente plus vite lorsque l'ordre p augmente. En effet, chaque maille requiert l'inversion d'une matrice carré (de taille $(p+1)^d$) dont la complexité asymptotique est $(p+1)^{3d}$ de telle sorte que le raffinement uniquement en p devient trop coûteux pour de larges valeurs de p .

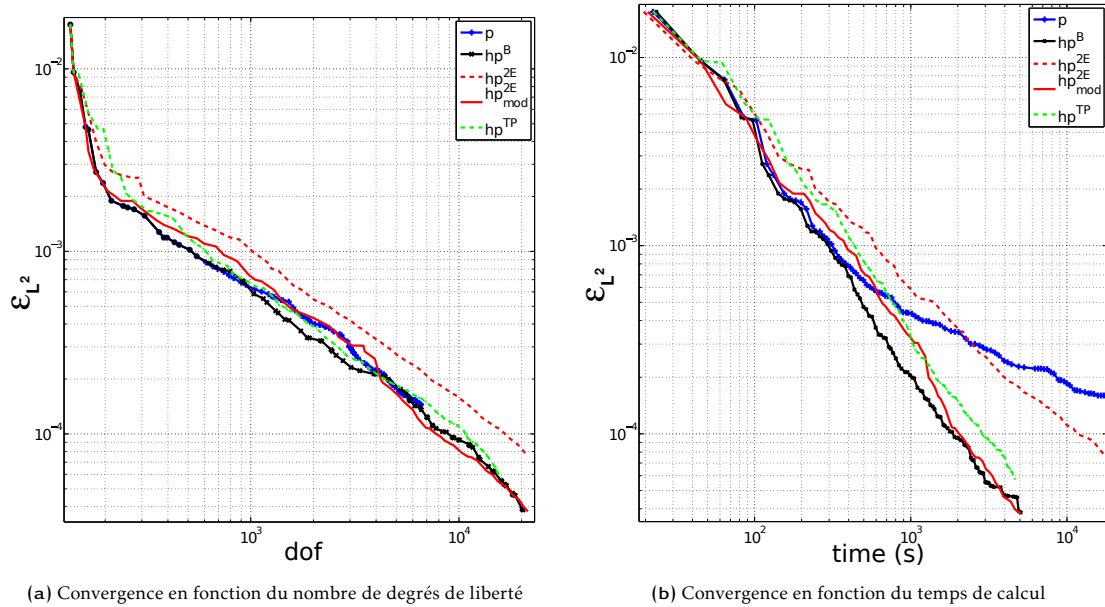


FIGURE 1.8 – Convergence de l'erreur sur le flux pour différentes stratégies de raffinement adaptatif hp sur le benchmark ZONA2B 2D

Nous n'avons jusqu'ici parlé que de l'erreur sur le flux mais pour ce problème à la valeur propre dominante, on peut aussi s'intéresser à la convergence du facteur de multiplication effectif. Ainsi, à la Figure 1.9, les raffinements adaptatifs en h pour $p = 1$ et $p = 2$ sont comparés à hp_{mod}^{2E} en termes de $|k - k_h|$. Hormis la convergence "chanceuse" du raffinement adaptatif en h pour $p = 2$ au premier point de calcul ($dof = 206$), on retrouve un comportement des différentes méthodes qualitativement cohérent avec ce que nous avons discuté jusque-là vis-à-vis de ϵ_{L^2} . La méthode de raffinement hp_{mod}^{2E} permet une convergence rapide en tirant partie, à nouveau, d'un raffinement en ordre dans la régime pré-asymptotique. Il faut bien garder à l'esprit que ces

bonnes performances (aussi obtenues dans le cas 3D avec les méthodes de raffinement adaptatif en h ou en p , voir [13]) sont relatives à un raffinement mené avec un indicateur d'erreur sur le flux et non pas sur le facteur de multiplication effectif. Nous reviendrons sur la possibilité d'améliorer cette convergence par le biais d'une méthode de raffinement avec comme quantité d'intérêt k au § 1.4.

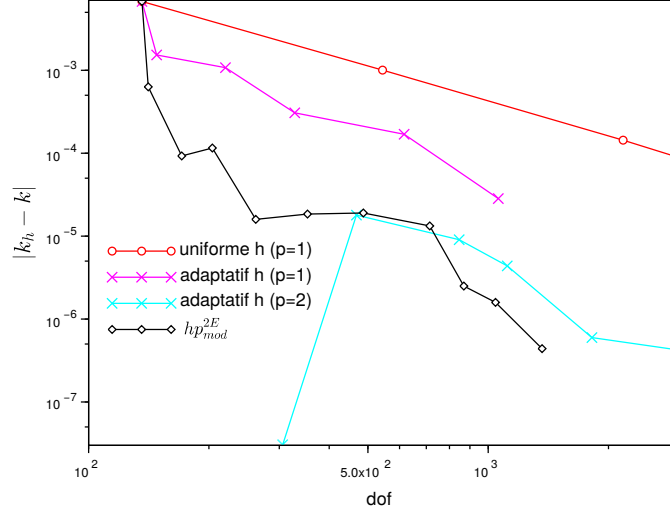


FIGURE 1.9 – Convergence de l'erreur sur le facteur de multiplication effectif pour différentes stratégies de raffinement sur le benchmark ZONA2B 2D

Nous nous sommes aussi intéressés à la possible dépendance énergétique de la discrétisation spatiale comme cela avait été fait dans le contexte de l'approximation de la diffusion [20, 21]. Une étude a été présentée dans [13, 33] ; nous la complétons partiellement ici. Dans le cadre de la méthode des ordonnées discrètes, on peut citer les travaux postérieurs aux nôtres rapportés dans [41, 36].

Comme la distribution spatiale du flux varie beaucoup en fonction du groupe d'énergie, il paraît en effet possible de tirer profit de maillages différents par zone d'énergie pour améliorer la convergence de l'erreur en fonction du nombre de degrés de liberté et *in fine* du temps de calcul. De manière générale, on considérera un ensemble de macro-groupes $1 \leq g \leq G$ (regroupement de groupes g consécutifs avec $\mathcal{C}(g)$ l'ensemble des groupes du maillage fin qui composent le macro-groupe g) pour lesquels des maillages spatiaux différents sont utilisés. Dans ce cas, le critère de raffinement utilisé peut être alors défini par : $\forall g, \forall \kappa^*$,

$$\left(\begin{array}{l} \text{la cellule } \kappa^* \text{ du maillage du macro-groupe } g \text{ est raffinée ssi} \\ \max_{g \in \mathcal{C}(g)} \bar{E}^g(\kappa^*) \geq \alpha \max_{1 \leq g \leq G} \max_{\kappa \in \mathcal{M}_h} \bar{E}^g(\kappa) \end{array} \right) \quad (1.10)$$

où $0 \leq \alpha \leq 1$ est une constante qui détermine la “vitesse” du raffinement. Le cas limite $G = 1$ correspond à un même maillage spatial pour tous les groupes d'énergie g .

Vis-à-vis du cas où l'on a un seul et même maillage spatial, cette approche nécessite dans la construction de la source multigroupe (diffusion et fission) l'introduction de projecteurs L_2 d'un maillage d'un groupe à un autre. Dans notre implémentation de cette méthode, ces projections d'un groupe à l'autre sont réalisées sur le maillage “intersection” entre le maillage du groupe de départ et celui d'arrivée sans restriction sur ces maillages de telle manière que la projection de

Galerkin employée est faite sans approximation.

Les résultats d'une telle approche où les 33 groupes d'énergie ont chacun leur maillage spatial sont présentés à la Figure 1.10 en comparaison du cas où un unique maillage est utilisé. Un raffinement adaptatif en h avec $p = 1$ a été utilisé pour cette comparaison⁴ et le raffinement est mené selon E^R ou bien E^{FV} . La Figure 1.10a (resp. Figure 1.10b) montre la convergence de ε_{L^2} (resp. $|k - k_h|$) par rapport au nombre total (*i.e.* sommé sur les groupes) de degrés de liberté associé à la discrétisation spatiale. Vis-à-vis de ε_{L^2} , E^R et E^{FV} donnent des résultats similaires pour $\mathbb{G} = 1$ tandis qu'ils se distinguent clairement avec $\mathbb{G} = G$; dans ce cas, un gain significatif est obtenu (une réduction supplémentaire de l'ordre de 2 à 3 sur dof pour une précision donnée) par rapport à $\mathbb{G} = 1$ lorsque E^{FV} est utilisé tandis qu'avec E^R , aucun gain n'est obtenu. L'utilisation de maillages spatiaux par groupe d'énergie rend les performances du raffinement adaptatif plus sensible à la qualité de l'indicateur d'erreur utilisé et les limitations intrinsèques à E^R deviennent pénalisantes. Si l'on s'intéresse maintenant à $|k - k_h|$, là encore, les comportements de E^{FV} et E^R se distinguent clairement pour $\mathbb{G} = G$ avec cette fois-ci une dégradation de la précision vis-à-vis du raffinement avec un unique maillage spatial. Cette dégradation est particulièrement marquée avec E^R qui conduit à un raffinement adaptatif en h aussi coûteux qu'un raffinement uniforme; elle est beaucoup plus limitée avec E^{FV} . Une telle "contre-performance" de l'adaptation de maillage vis-à-vis de la convergence de l'erreur sur k lorsque la discrétisation spatiale n'est plus uniforme en énergie a aussi été observée dans [41] sur des benchmarks avec $G = 2$ et ce, même avec un raffinement mené selon une approche "goal-oriented" avec comme quantité d'intérêt k . Les auteurs attribuent ce résultat à l'erreur d'interpolation associée au calcul de la source de fission pour lequel les flux doivent être projetés d'un maillage d'un groupe à un autre.

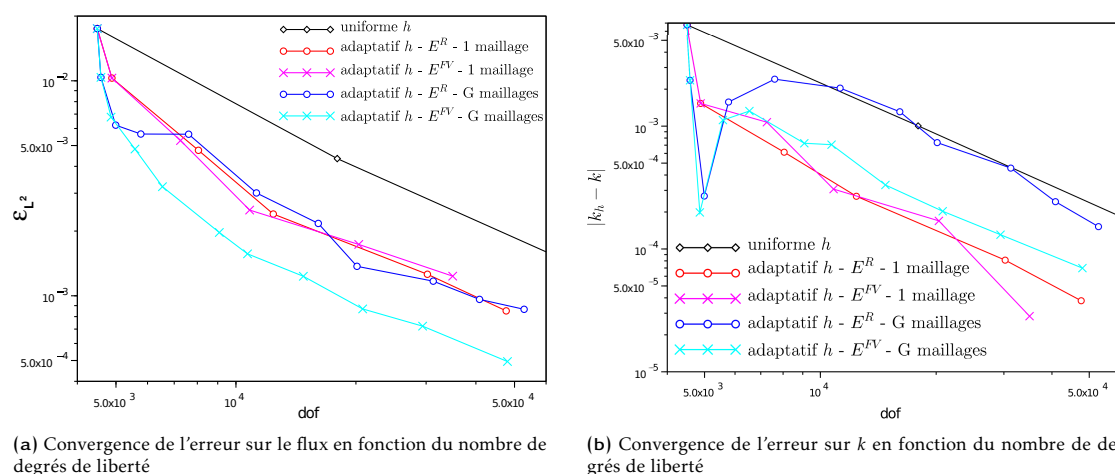


FIGURE 1.10 – Raffinement en h pour $p = 1$ sur le benchmark ZONA2B 2D avec ou sans différenciation du maillage par groupe d'énergie

■ **En conclusion**, ces résultats illustrent le gain en performances qu'une méthode de raffinement hp adaptative (en distinguant éventuellement des maillages différents par zones d'énergie) peut apporter pour la simulation des cœurs de réacteurs à neutrons rapides refroidis au sodium. Dans ce cadre, le critère dominant de sélection entre h - et p -raffinement est associé à l'importance du régime pré-asymptotique que l'on a pu estimer uniquement par des considérations vis-à-vis de l'erreur *a priori*. L'analyse de l'erreur *a posteriori* a, quant à elle, permis de clarifier l'utilisation

4. Ces travaux ont été menés en parallèle des travaux exposés précédemment sur le raffinement hp .

parfois heuristique du saut entre les cellules comme indicateur de l'erreur pour raffiner. ■

1.4 Extension de la théorie des perturbations

En neutronique, il est courant d'avoir recours à la théorie des perturbations [42] de manière à relier les variations d'une certaine quantité d'intérêt telle que la réactivité aux variations des paramètres régissant l'état du système (e.g. sections efficaces microscopiques). Ces méthodes se basent sur l'adjoint des opérateurs de l'Eq. 1.3. Lors du développement de tels outils dans SNATCH, une question s'est posée vis-à-vis de l'adaptation de maillage étant donné que cette théorie des perturbations est le plus souvent écrite dans un cadre semi-continu (avant discrétisation spatiale des opérateurs) de telle manière que les formules associées ne sont valides que lorsque les calculs directs et adjoints nécessaires sont réalisés avec la même discrétisation spatiale. A titre d'exception, on citera le travail rapporté dans [43] où une décomposition de l'effet en réactivité induit par une homogénéisation spatiale ou une condensation énergétique a été dérivée par une approche perturbative.

Dans [44], nous avons dérivé une formule perturbative de décomposition exacte d'un effet en réactivité qui distingue d'une part, la contribution due à la variation des paramètres "physiques" (concentrations isotopiques et données nucléaires) et, d'autre part, la contribution associée à une discrétisation différente des calculs direct et adjoint. Ainsi, dans l'étude d'un cœur de réacteur, si l'on considère une configuration initiale i avec son flux adjoint $\underline{\phi}_{i,h} \in (V_h^{\mathbf{P}})^{G \times N}$ et une configuration perturbée p avec son flux direct $\underline{\phi}_{p,h'} \in (V_{h'}^{\mathbf{P}'})^{G \times N}$, l'effet en réactivité

Annexe A.7

$\Delta\rho^{hh'} = \frac{1}{k_{i,h}} - \frac{1}{k_{p,h'}}$ peut être décomposé en deux contributions distinctes comme suit :

$$\Delta\rho^{hh'} = \Delta\rho_{\Sigma}^{hh'} + \Delta\rho_{\mathcal{M}}^{hh'} \quad (1.11)$$

Le terme $\Delta\rho_{\Sigma}^{hh'}$ est associé à la variation des paramètres "physiques" entre les configurations i et p et n'est rien d'autre que la formule standard de perturbation de la réactivité obtenue en faisant fi de la discrétisation spatiale. Le terme $\Delta\rho_{\mathcal{M}}^{hh'}$ quant à lui est relatif au passage d'une discrétisation dans $V_h^{\mathbf{P}}$ à une discrétisation dans $V_{h'}^{\mathbf{P}'}$.

Dans le contexte des méthodes adaptatives du solveur discutées plus tôt, cette formule a potentiellement deux utilités que nous allons maintenant illustrées.

1.4.1 Évaluation d'un effet en réactivité induit par les paramètres "physiques"

Tout d'abord, intéressons nous à l'utilisation de cette formule dans le cadre usuel d'utilisation des formules perturbations "exactes" *i.e.* l'analyse physique de la variation d'une quantité d'intérêt, en l'occurrence, la réactivité. Pour ce faire, nous considérerons le benchmark en géométrie cartésienne 2D de la Figure 1.11 adapté d'un benchmark en 3D proposé dans [45]. Ce cas test représente de manière très simplifiée un quart de cœur composés de 3×3 assemblages entourés d'un réflecteur et piloté par une barre de contrôle ("rod" à la Figure 1.11a) pour laquelle on distingue deux configurations suivant sa position : "barre insérée" ou "barre sortie". Les flux dans la configuration "barre insérée" sont présentés à la Figure 1.11b. Dans un tel cas, la décomposition perturbative est classiquement utilisée pour analyser les composantes du "poids"

en réactivité de la barre de contrôle, c'est-à-dire, $\Delta\rho$ avec la configuration i correspondant à la "barre sortie" tandis que la configuration p est associée à la "barre insérée".

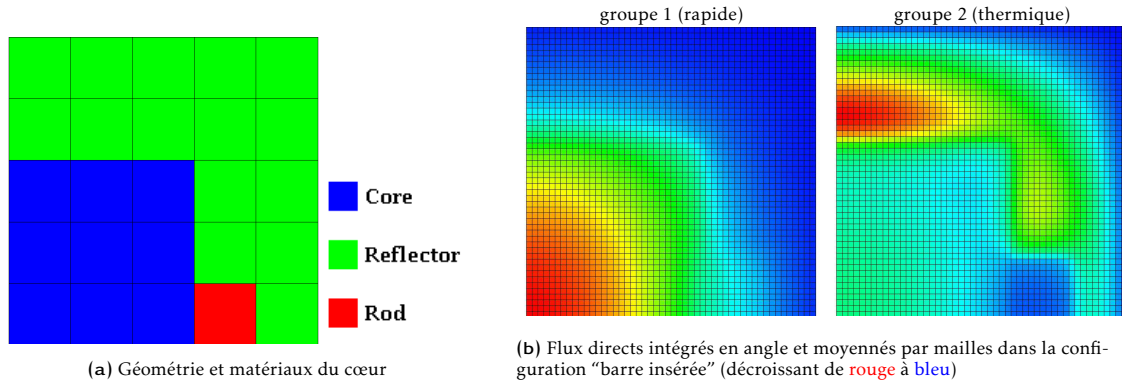


FIGURE 1.11 – Benchmark en quart de cœur pour le calcul du "poids" en réactivité d'une barre de contrôle

Tout d'abord, en considérant le raffinement uniforme de chacune des configurations, l'erreur commise sur le "poids" en réactivité de la barre est présentée au Tableau 1.2, à la fois, lorsqu'il est évalué directement par $\Delta\rho^{hh'} = \frac{1}{k_{i,h}} - \frac{1}{k_{p,h'}}$ mais aussi lorsque la décomposition offerte par $\Delta\rho_{\Sigma}^{hh'}$ est utilisée. Un maillage uniforme où chaque assemblage est divisé en $n \times n$ mailles est noté $\mathbb{M}_n$. La référence pour le calcul dans les deux configurations correspond à un maillage $\mathbb{M}_{14}$ avec un ordre polynomial uniforme $p = 3$. Les calculs présentés au Tableau 1.2 et dans la suite ont été menés avec un ordre uniforme $p = 1$.

$\Delta\rho^{hh'} - \Delta\rho$ (pcm)					$\Delta\rho_{\Sigma}^{hh'} - \Delta\rho$ (pcm)				
$\mathcal{M}_{h'} \backslash \mathcal{M}_h$	$\mathbb{M}_1$	$\mathbb{M}_2$	$\mathbb{M}_4$	$\mathbb{M}_8$	$\mathcal{M}_{h'} \backslash \mathcal{M}_h$	$\mathbb{M}_1$	$\mathbb{M}_2$	$\mathbb{M}_4$	$\mathbb{M}_8$
$\mathbb{M}_1$	-278.1	286.8	439.1	470.5	$\mathbb{M}_1$	-278.1	-77.9	-33.4	-24.7
$\mathbb{M}_2$	-625.6	-60.7	91.6	123.0	$\mathbb{M}_2$	-242.2	-60.7	-16.9	-8.3
$\mathbb{M}_4$	-729.3	-164.3	-12.1	19.3	$\mathbb{M}_4$	-234.9	-53.7	-12.1	-3.7
$\mathbb{M}_8$	-750.8	-185.9	-33.6	-2.2	$\mathbb{M}_8$	-233.0	-51.8	-10.3	-2.1

TABLEAU 1.2 – Ecart de $\Delta\rho^{hh'}$ et $\Delta\rho_{\Sigma}^{hh'}$ à $\Delta\rho$ lorsque le maillage uniforme des deux configurations est raffiné (référence $\Delta\rho = 2910.4\text{pcm}$)

Ces tests numériques simples montrent clairement que l'utilisation de maillages différents pour le calcul des deux configurations a un impact significatif et négatif sur l'évaluation du "poids" de la barre par $\Delta\rho^{hh'}$. Ainsi, dans tous les cas, $\Delta\rho^{hh'}$ calculé avec un même maillage $\mathcal{M}_h = \mathcal{M}_{h'} = \mathbb{M}_n$ pour les deux configurations fournit une évaluation plus précise que $\Delta\rho^{hh'}$ calculé avec $\mathcal{M}_h = \mathbb{M}_n$ et $\mathcal{M}_{h'} = \mathbb{M}_{2n}$, ou encore avec $\mathcal{M}_{h'} = \mathbb{M}_n$ et $\mathcal{M}_h = \mathbb{M}_{2n}$. Autrement dit, le "gain" en précision sur l'une des configurations lorsque l'on passe d'un maillage $\mathbb{M}_n$ à $\mathbb{M}_{2n}$ est supplanté par le terme "parasite" $\Delta\rho_{\mathcal{M}}^{hh'}$ associé à l'utilisation de maillages différents entre les deux configurations. Bien sûr, *a fortiori*, $\Delta\rho_{\Sigma}^{hh'}$ fournit, dans tous les cas, une meilleure évaluation de la réactivité de la barre en comparaison de $\Delta\rho^{hh'}$ qui permet de tirer partie de maillages

différents sur les deux configurations. En l'occurrence, on observe que c'est le calcul adjoint sur la configuration initiale qui requiert un maillage plus fin.

Considérons maintenant l'évaluation de la réactivité de la barre en utilisant les capacités de raffinement adaptatif offerte par SNATCH. Pour ce faire, en partant d'un maillage $\mathbb{M}_1$, un raffinement en h est utilisé avec 10 cycles de raffinement. L'estimateur d'erreur utilisé est E^R (ce travail a été mené alors que E^{FV} était en cours d'analyse et d'implémentation) et chacun des groupes d'énergie a un maillage qui évolue indépendamment. On a alors testé trois stratégies de raffinement différentes vis-à-vis des deux configurations :

“direct-driven” (DD) où les maillages spatiaux relatifs au problème direct dans la configuration perturbée sont raffinés à chaque étape et utilisés pour la résolution du problème adjoint dans la configuration initiale ;

“adjoint-driven” (AD) où les maillages spatiaux relatifs au problème adjoint dans la configuration initiale sont raffinés à chaque étape et utilisés pour la résolution du problème direct dans la configuration perturbée ;

“configuration-dependent” (CD) où les maillages des deux configurations sont raffinés indépendamment à chaque étape.

Notons qu'à chaque étape du raffinement, le critère de raffinement utilisé diffère des critères définis par les Eqs. 1.9 et 1.10 introduits précédemment ; en effet, ici, chaque maillage est traité indépendamment et, à chaque étape, le quart de ses mailles présentant l'erreur maximale sont raffinées. Si cette stratégie n'est pas optimale (en particulier pour la stratégie CD), elle permet une comparaison simple de ces diverses stratégies en conservant le nombre de mailles. Ensuite, à chaque étape, $\Delta\rho^{hh'}$ mais aussi $\Delta\rho_{\Sigma}^{hh'}$ (décomposé selon les différentes sections efficaces) sont calculés ; bien sûr, ces deux valeurs ne diffèrent que lorsque la stratégie CD est utilisée.

La Figure 1.12a compare les trois stratégies en matière de convergence de la réactivité de la barre vis-à-vis du nombre de degrés de liberté total (*i.e.* sommés sur les deux groupes et les deux configurations) associés à la discrétisation spatiale. On voit que la stratégie AD permet d'améliorer la convergence tandis que la stratégie DD est inefficace. A nouveau, cela est du au fait que c'est le calcul adjoint sur la configuration initiale qui requiert un maillage plus fin.

Si l'on considère maintenant la stratégie CD, on peut observer en comparant $\Delta\rho^{hh'}$ à $\Delta\rho_{\Sigma}^{hh'}$ que le bénéfice potentiel de distinguer les maillages des deux configurations est supplanté par le biais $\Delta\rho_{\mathcal{M}}^{hh'}$ introduit. Lorsque l'on utilise $\Delta\rho_{\Sigma}^{hh'}$, une meilleure estimation du “poids” de la barre est obtenue de telle manière que la stratégie CD devient efficace. Ces résultats sont bien sûr en accord avec les tendances discutées vis-à-vis du raffinement uniforme.

Pour finir, une des composantes principales de cet effet en réactivité est associée à la variation de la section efficace macroscopique totale dans le groupe 2 *i.e.* $\Delta\Sigma_t^2$; la convergence de cette contribution à la réactivité telle qu'obtenue à partir de la décomposition offerte par $\Delta\rho_{\Sigma}^{hh'}$ est présentée à la Figure 1.12b. L'avantage offert par la stratégie CD est clairement illustrée *e.g.* pour une précision donnée de 100pcm, le nombre de degrés de liberté (et approximativement le temps de calcul) est divisé par deux avec cette stratégie vis-à-vis d'un raffinement uniforme.

■ **En conclusion**, ces résultats démontrent que, pour tirer partie des méthodes de raffinement adaptatif développées dans le cadre de SNATCH et discutées au § 1.3, l'évaluation d'un effet en réactivité ne doit pas se faire par le biais d'une évaluation “directe” (*i.e.* $\Delta\rho^{hh'}$) mais en utilisant la théorie des perturbations de manière à “filtrer” le biais introduit par la différence de discrétisation spatiale entre les deux configurations. ■

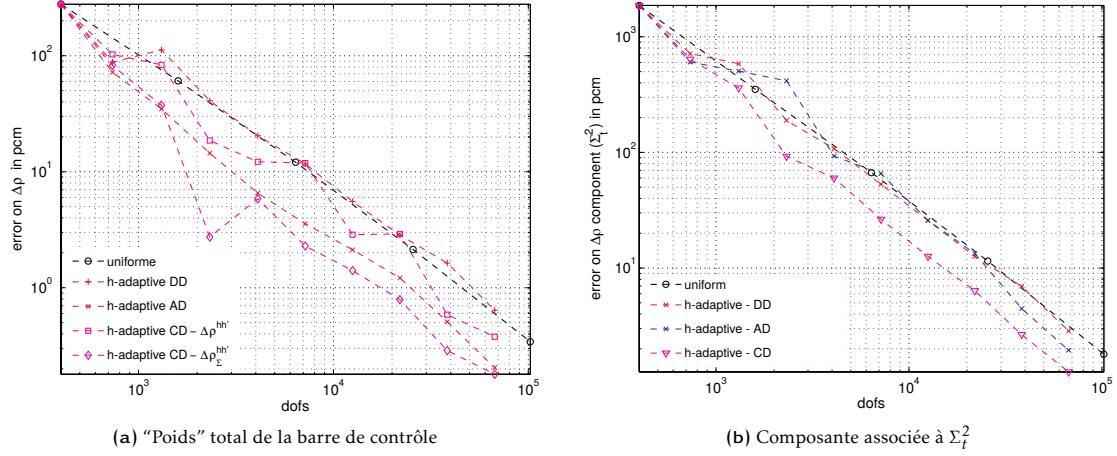


FIGURE 1.12 – Convergence de la réactivité en fonction du nombre total de degrés de liberté suivant différentes stratégies de raffinement adaptatif en h

1.4.2 Évaluation de l'effet en réactivité induit par un raffinement de maillage

Si l'on considère maintenant des configurations i et p pour lesquelles seule la discrétisation spatiale diffère, l'effet en réactivité associé se réduit à $\Delta\rho_{\mathcal{M}}^{hh'}$ qui peut être décomposé par groupe d'énergie et par maille spatiale. Si l'on considère un algorithme d'adaptation de maillage basé sur un estimateur d'erreur à deux maillages (cf. § 1.3.2), une telle décomposition peut servir à mettre en place une adaptation de maillage dite "goal-oriented" pour laquelle la quantité d'intérêt n'est plus le flux mais la réactivité.

Cette piste, évoquée dans [44], n'avait pas fait l'objet de tests numériques. Ici, pour compléter ce panorama sur l'adaptation de maillage en schéma DG, un tel algorithme d'adaptation de maillage a été testé. En reprenant le benchmark ZONA2B 2D introduit au § 1.3.4 à la Figure 1.8, l'adaptation de maillage en h menée avec les deux estimateurs introduits précédemment E^R et E^{FV} est comparée à deux stratégies d'adaptation de maillage basées sur une estimation d'erreur à deux maillages. L'approche "classique" où c'est l'écart sur le flux qui est utilisé est notée E^{2M} ; dans ce cas, le flux direct est évalué sur un maillage et un raffinement uniforme de ce maillage où chaque cellules est coupée en 2×2 . L'autre approche testée E_{ρ}^{2M} représente une stratégie à deux maillages où c'est la décomposition de $\Delta\rho_{\mathcal{M}}^{hh'}$ qui est utilisée comme indicateur d'erreur; ici, le flux adjoint est évalué sur le maillage grossier et c'est le flux direct qui est évalué sur le maillage raffiné.

Les résultats associés sont présentés à la Figure 1.13 vis-à-vis de la convergence du flux et de la réactivité fonction du nombre de degrés de liberté. On voit clairement ici qu'une approche "goal-oriented" vis-à-vis de la réactivité ne permet pas d'améliorer de manière significative cette convergence de l'erreur sur k .

Ce résultat, *a priori* décevant, peut être comparé à la littérature et les résultats obtenus par une autre approche "goal-oriented" (évoquée plus tôt au § 1.3.4). Cette méthode dite "Dual Weighted Residual", utilisée pour la première fois par D. Lathouwers [27] dans le contexte de la neutronique, requiert l'évaluation de l'erreur de la solution du problème dual; ainsi, en termes de coût de calcul, elle s'apparente aux méthodes à deux maillages puisqu'elle requiert à la fois la solution d'un problème direct mais aussi d'un problème adjoint. Si dans [27], une convergence de k nettement améliorée par rapport à un raffinement uniforme a été rapportée sur un benchmark mono-énergétique en géométrie cartésienne 2D, aucune comparaison avec

un autre estimateur n'était présentée. Plus récemment, dans [36], le même benchmark a été repris mais cette fois, cette méthode de raffinement a été comparée à un raffinement adaptatif mené avec un estimateur basé sur les sauts du flux scalaire (*i.e.* un estimateur s'apparentant à E^{FV}). De manière cohérente avec les résultats présentés ici à la Figure 1.13b, les résultats de [36] montrent qu'aucun gain significatif n'est apporté par cette approche "goal-oriented" vis-à-vis d'un estimateur associé à l'erreur sur le flux lui-même.

■ Ainsi, dans le cadre de la physique des cœurs de réacteurs, tous ces résultats amènent à conclure à un intérêt limité des méthodes "goal-oriented" avec pour quantité d'intérêt, la réactivité. ■

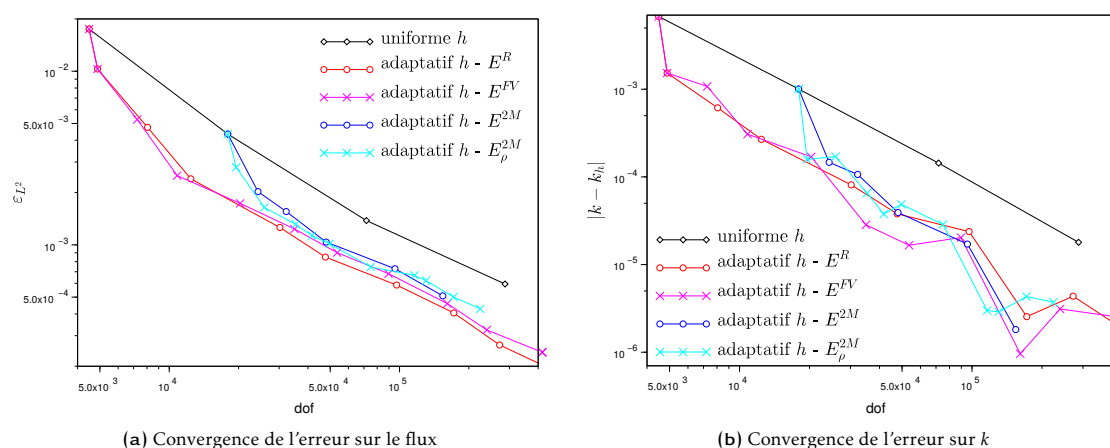


FIGURE 1.13 – Convergence du raffinement en h pour $p = 1$ en fonction du nombre de degrés de liberté sur le benchmark ZONA2B 2D pour différentes méthodes

1.5 Amélioration du traitement numérique de l'interface cœur - réflecteur

Pour terminer cette synthèse des activités relatives au solveur SNATCH, intéressons nous à la question du traitement de l'interface entre le cœur et le réflecteur d'un réacteur à neutrons rapides vis-à-vis de la question de la condensation (homogénéisation vis-à-vis du maillage énergétique). Dans ce cadre, les capacités du schéma de discrétisation spatial non-conforme discuté dans les paragraphes précédents ont permis de faire la preuve de principe d'un schéma de calcul basé sur une méthode de condensation par les moments angulaires du flux [46] ; ce travail a été mené avec mon collègue Jean-François Vidal. Ce schéma a été mis en œuvre pour simuler le cœur ZONA2B déjà introduit au § 1.3.4 pour montrer l'intérêt des méthodes de raffinement adaptatif hp . En effet, de par sa petite taille (rayon du cœur d'environ 45cm et hauteur d'environ 60cm) et son spectre rapide, l'interface entre le cœur et son réflecteur joue un rôle prépondérant dans le bilan neutronique global et nécessite une modélisation adéquate. Comme illustré à la Figure 1.7c, la discrétisation spatiale doit être suffisamment raffinée à l'interface pour assurer la convergence du flux. Par ailleurs, la modélisation précise de cette interface requiert un traitement spécifique car le schéma de calcul à deux niveaux "classique" s'avère insuffisant comme nous allons ici l'illustrer.

Dans le contexte des réacteurs à neutrons rapides et dans le cadre du système de codes ERANOS, le schéma de calcul "standard" passe par des calculs d'assemblages avec un maillage fin en énergie (1968 groupes) réalisés avec le code ECCO [47] afin d'obtenir des sections efficaces macroscopiques homogénéisées spatialement et condensées en énergie, classiquement à 33 groupes, pour les trois matériaux du cœur homogène (FUEL, REFLECTOR et SHIELD). Le Tableau 1.3 présente les résultats de calculs SNATCH menés sur le cœur présenté à la Figure 1.14⁵ à l'aide de sections efficaces générés selon ce schéma de calcul "standard". Ces calculs cœur ont été menés avec des sections efficaces condensées sur différents maillages énergétiques allant de 33g à 1968g ; le calcul à 1968g correspond à un calcul sans condensation et est utilisé comme référence. Les résultats sont présentés en termes d'erreur sur le facteur de multiplication effectif et d'erreur relative moyenne sur les flux intégrés en angle et en énergie pour les matériaux FUEL et REFLECTOR. On voit que l'erreur introduite par le schéma standard est très importante, en particulier sur la réactivité et qu'il faut un maillage d'au moins 600g pour que cette erreur passe sous la barre des 150 pcm, valeur que l'on considérera ici comme limite haute acceptable du biais en réactivité.

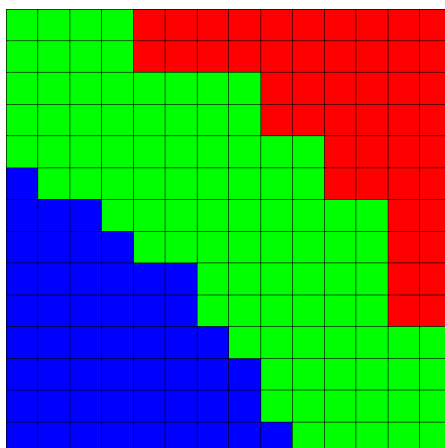


FIGURE 1.14 – Benchmark 2D issu du cœur ZONA2B (matériaux : FUEL, REFLECTOR, SHIELD)

	Sections condensées par ECCO à			
	33g	100g	393g	602g
k	1.202854	1.202692	1.205477	1.207379
$k - k^{\text{ref}}$ (pcm)	-589.6	-605.8	-327.3	-137.1
$\text{mean}_{\kappa \in \text{FUEL}}(\varepsilon_{\kappa})$	0.49	0.56	0.37	0.16
$\text{mean}_{\kappa \in \text{REFLECTOR}}(\varepsilon_{\kappa})$	1.14	0.51	0.33	0.16

ε_{κ} erreur relative sur le flux scalaire moyen sur la maille κ

TABLEAU 1.3 – Erreurs sur la réactivité et le flux associées à la condensation énergétique du schéma "standard" (le calcul à 1968g est la reference avec $k^{\text{ref}} = 1.208750$)

L'anisotropie importante du flux à l'interface entre le cœur et le réflecteur doit être prise

5. Ce cœur, bien qu'il soit aussi lui tiré du cœur ZONA2B, diffère légèrement de celui présenté à la Figure 1.7 de par la manière dont l'homogénéisation des assemblages a été faite.

en compte dans le processus de condensation des sections efficaces pour qu'un maillage à quelques dizaines de groupes d'énergie puisse donner des résultats satisfaisants. Pour ce faire, de manière classique,⁶ on introduit une géométrie 1D dite "traverse" qui permet de définir un motif géométrique "simple" mais représentatif de l'interface entre le cœur et le réflecteur. La condensation et l'homogénéisation des sections efficaces sur ce motif fournit alors les propriétés neutroniques pour le calcul de cœur. Pour mener à bien cette condensation, l'extension de la méthode 1D dite " P_n -consistante" à des géométries 2D et 3D proposées dans la thèse de P. Jacquet (voir [49]) est utilisée.⁷

A la Figure 1.15, sont représentées deux géométries traverses (Figures 1.15a et 1.15b) et les géométries des cœurs associées (Figures 1.15c et 1.15d). De par les fortes variations de la dépendance angulaire du flux de part et d'autre de l'interface cœur - réflecteur, la méthode de condensation utilisée requiert un maillage pour l'homogénéisation suffisamment fin autour de cette interface.⁸ On notera que l'on a tiré ici partie des fonctionnalités de maillages non-conformes de SNATCH pour discrétiser de manière cohérente (et par une procédure "automatique") cette interface dans les géométries de cœurs 2D.

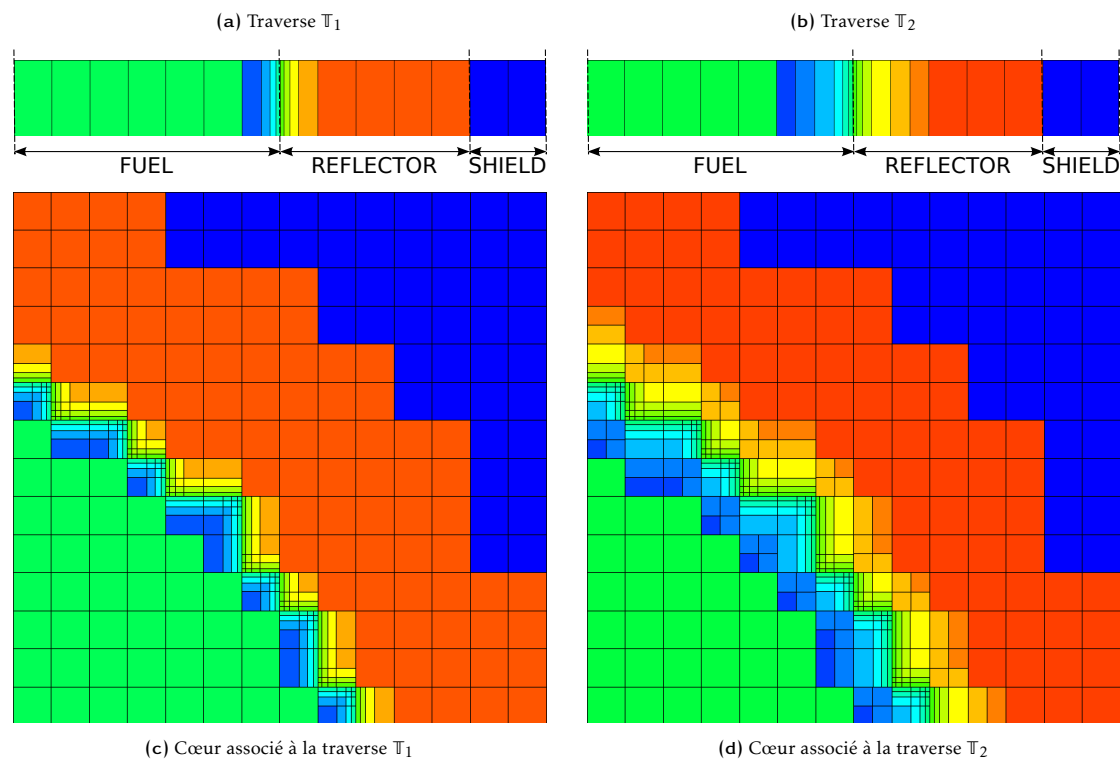


FIGURE 1.15 – Traverses et cœurs relatifs au benchmark 2D issu du cœur ZONA2B (les couleurs correspondent aux différents matériaux homogénéisés et condensés par le calcul traverse)

6. Comme pour les méthodes d'homogénéisation passant par les albédos [48].

7. Dans la thèse de P. Jacquet (voir [49]) réalisée dans le cadre logiciel du solveur SNATCH et encadrée par J. Tommasi, différentes méthodes relatives à cette condensation énergétique et à l'homogénéisation spatiale ont été testées pour les besoins dans réacteurs à neutrons rapides et, en particulier, le traitement de l'interface entre cœur et réflecteur en acier.

8. L'utilisation d'une méthode dite de "super-homogénéisation" [50] dans [49] pour permettre une homogénéisation plus "grossière" s'est montrée infructueuse.

Le Tableau 1.4 présentent les résultats des calculs menés sur les deux cœurs (Figures 1.15c et 1.15d) avec les sections condensées à 33 groupes obtenus à partir des calculs traverses associés. Différents résultats sont présentés suivant l'ordre retenu (P1, P2, P3) pour représenter l'anisotropie angulaire dans la méthode de condensation. On voit qu'en tous les cas, les erreurs sur le facteur de multiplication effectif et les flux, en particulier dans la zone combustible, sont largement réduites (au niveau de celles du à 602 groupes du Tableau 1.3).

	par ECCO	Sections condensées à 33g par le calcul sur une traverse			
		$\mathbb{T}_1 - P1$	$\mathbb{T}_1 - P2$	$\mathbb{T}_1 - P3$	$\mathbb{T}_2 - P3$
k	1.202854	1.209497	1.210771	1.210443	1.209568
$k - k^{\text{ref}}$ (pcm)	-589.6	74.7	202.1	169.3	81.8
$\text{mean}_{\kappa \in \text{FUEL}}(\varepsilon_{\kappa})$	0.49	0.10	0.22	0.19	0.13
$\text{mean}_{\kappa \in \text{REFLECTOR}}(\varepsilon_{\kappa})$	1.14	0.56	0.55	0.48	0.66

ε_{κ} erreur relative sur le flux scalaire moyen sur la maille κ

TABLEAU 1.4 – Erreurs sur la réactivité et le flux associées à la condensation énergétique avec le schéma “traverse” (le calcul à 1968g est la référence avec $k^{\text{ref}} = 1.208750$)

■ **En conclusion**, on soulignera que les résultats très satisfaisants obtenus avec SNATCH vis-à-vis de cette méthode de traitement de l'interface entre cœur et réflecteur en ont fait la méthode retenue dans le schéma de calcul de référence pour les RNR-Na au CEA [51]. ■

Pour finir sur le traitement de cette interface cœur - réflecteur, en guise d'ouverture, sont présentés ci-dessous quelques résultats de tests prospectifs menés dans le cadre du stage de Giovanni Porcellana [52] autour d'une méthode de décomposition de domaine [53]. Il s'agissait de tester une méthode de type “multi-domaine”/“multi-méthode”, dans la lignée des travaux de E. Girardi et J.M. Ruggieri [54] qui portaient sur les discrétisations spatiale et angulaire de l'équation de transport des neutrons. Ici, on s'est intéressé à la discrétisation énergétique avec une décomposition de domaine permettant de raffiner localement le maillage énergétique aux abords de l'interface cœur - réflecteur pour s'affranchir du problème de condensation dont nous venons de discuter. Pour ce faire, une méthode de Schwarz a été mise en œuvre pour des géométries cartésiennes simples de telle manière que chaque sous domaine est traité par une “instance” (au sens informatique) différente du solveur SNATCH. En particulier, les différents solveurs peuvent avoir des maillages énergétiques différents et sont couplés par le biais des flux aux frontières des sous-domaines auxquels sont associés un opérateur de projection (L_2 dans notre cas). La résolution itérative de ces couplages par le biais d'une méthode de Gauss-Seidel (resp. Jacobi) dans le cadre d'une méthode de Schwarz multiplicative (resp. additive) se fait en interne de la boucle itérative de solution du problème à valeur propre dominante.

Pour tester cette approche, un benchmark, construit à partir du précédent en “simplifiant” encore un peu plus la géométrie, a été utilisé ; à la Figure 1.16, deux décompositions du domaine en neuf sous-domaines sans recouvrement sont présentées : un maillage énergétique à 1968g est utilisé autour de l'interface tandis que le reste du domaine est traité à 33g. Les résultats de ces simulations sont présentés au Tableau 1.5 avec aussi un calcul à 33g avec la méthode de condensation précédente. On voit qu'une telle approche par décomposition de domaine avec le raffinement local du maillage énergétique qu'elle permet, améliore nettement les résultats. Pour autant, ces résultats sont moins bons que ceux obtenus par la méthode de condensation

précédente. Ceci s'explique par la projection "grossière" aux frontières d'un flux à 33 groupes vers un maillage énergétique à 1968 groupes ; en effet, cette projection est faite en considérant le flux constant par groupe. Pour améliorer cette projection, une perspective simple est d'introduire une représentation intra-groupe non constante basée sur un spectre neutronique, par exemple, issu des calculs ECCO ayant servis à l'homogénéisation/condensation initiale des assemblages. Dans le stage de G. Porcellana, afin de balayer différentes perspectives relatives à la décomposition de domaine, une méthode alternative a été testée avec l'utilisation d'une approche avec recouvrement entre sous-domaines ; si elle permet bien "d'atténuer" l'impact de l'erreur de projection, cette méthode ne peut-être utilisée directement avec la résolution itérative du problème à valeur propre dominante par la méthode des puissances car elle amène à une dégénérescence de la valeur propre principale. Cette question est restée ouverte.

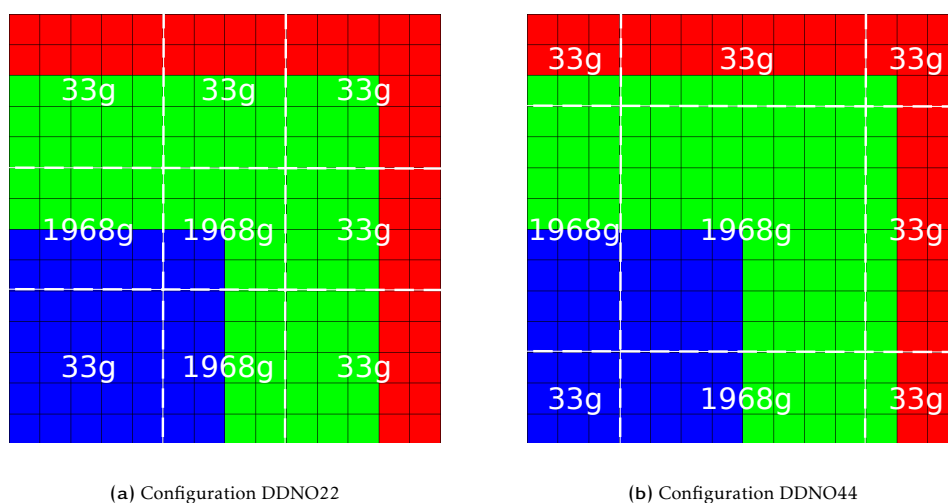


FIGURE 1.16 – Décompositions de domaine pour le benchmark 2D "simplifié" issu du cœur ZONA2B (matériaux : FUEL, REFLECTOR, SHIELD)

	ECCO 33g [†]	Décomposition 33g-1968g		Traverse 33g [‡]
		DDNO22	DDNO44	
k	1.184050	1.191505	1.193205	1.192197
$k - k^{\text{ref}}$ (pcm)	-730.3	15.2	185.2	84.4
$\text{mean}_{\kappa \in \text{FUEL}}(\varepsilon_{\kappa})$	0.51	0.66	0.51	0.13
$\text{mean}_{\kappa \in \text{REFLECTOR}}(\varepsilon_{\kappa})$	0.86	1.45	0.83	0.55

[†] Sections condensées à 33g par ECCO

[‡] Sections condensées à 33g par le calcul sur la traverse $\mathbb{T}_2$ - P3

ε_{κ} erreur relative sur le flux scalaire moyen sur la maille κ

TABLEAU 1.5 – Erreurs sur la réactivité et le flux associées aux décompositions de domaine et à la condensation énergétique avec le schéma "traverse" (le calcul à 1968g est la référence avec $k^{\text{ref}} = 1.191353$)

■ **Ainsi**, ces tests (très) préliminaires d’une approche par décomposition de domaine permettant d’avoir un maillage énergétique différencié en espace montrent son intérêt potentiel et illustrent les questions qui se poseront dans une étude approfondie ; c’est une perspective sur laquelle nous reviendrons brièvement au Chapitre 3. ■

1.6 Postambule

Par-delà les développements d’ordres méthodologique et numérique que je viens de synthétiser, rappelons que le développement du solveur SNATCH est intimement lié aux études de conception des réacteurs à neutrons rapides refroidis au sodium de quatrième génération menées au CEA. Dans ce cadre et plus particulièrement celui du projet ASTRID [55], SNATCH a été largement utilisé et a fourni un cadre privilégié pour des thèses directement associées à ces travaux de conception [56, 57, 58]. A l’heure actuelle, il n’est plus développé au CEA et a été “remplacé” par le code APOLLO3[®] pour les études de neutronique des RNR-Na. Dans ce cadre, une partie des “résultats” des travaux de recherche discutés ici a contribué aux méthodes implantées dans APOLLO3[®] [59] avec, en particulier, le solveur MINARET [60] basé sur une méthode DG et solveur “cœur” utilisé dans les schémas dédiés aux RNR-Na [51].

Par ailleurs, au delà de ces applications à la conception des RNR-Na, le développement du solveur SNATCH et de ses fonctionnalités a permis à d’autres travaux de recherche d’être menés avec ou sans ma participation directe. On peut citer le développement et l’analyse de méthodes de cinétique spatiale dites “quasi-statiques” en collaboration avec Politecnico di Torino [61], le développement d’une méthode de volumes finis pour la discrétisation de la variable angulaire dans le but d’étudier la représentation de l’anisotropie de diffusion [62], le développement d’une méthodologie d’optimisation multi-critères pour la conception de programmes expérimentaux [63], la modélisation de la phase initiale d’un accident grave dans un RNR-Na [64] par un couplage avec le code SIMMER de dégradation, l’étude des effets en réactivité induits par la déformation géométrique du cœur (e.g. gerbage) [65].

Références

- [1] A. Hébert, Applied Reactor Physics, Presses Internationales Polytechnique, 2009.
- [2] J. M. Ruggieri, J. Tommasi, J. F. Lebrat, C. Suteau, D. Plisson-Rieunier, C. De Saint Jean, G. Rimpault, J. C. Sublet, ERANOS-2.1 : The international code system for GEN-IV fast reactor analysis, in : Proc. of Int. Congress on Advances in Nuclear Power Plants ICAPP 2006, Reno, USA, 2006.
- [3] G. Palmiotti, E. E. Lewis, C. B. Carrico, VARIANT : VARIational Anisotropic Nodal Transport for multidimensional cartesian and hexagonal geometry calculation, Technical Report ANL-95/40, Argonne National Laboratory (1995).
- [4] G. Palmiotti, J. M. Rieunier, C. Gho, M. Salvatores, BISTRO optimized two dimensional Sn transport code, Nuclear Science and Engineering 104 (1990) 26.
- [5] L. Gastaldo, **R. Le Tellier**, C. Suteau, D. Fournier, J. M. Ruggieri, High-order discrete ordinate transport in non-conforming 2D Cartesian meshes, in : Proc. of Int. Conf. on Mathematics, Computational Methods & Reactor Physics M&C 2009, ANS, Saratoga Springs, USA, 2009.
- [6] **R. Le Tellier**, C. Suteau, D. Fournier, J. M. Ruggieri, High-order discrete ordinate transport in hexagonal geometry : a new capability in ERANOS, Il Nuovo Cimento 33 C (1) (2010) 121–128.

- [7] W. H. Reed, T. R. Hill, Triangular mesh methods for neutron transport equation, Technical Report LA-UR-73-479, Los Alamos National Laboratory (1973).
- [8] T. A. Wareing, J. M. McGhee, J. E. Morel, S. D. Pautz, Discontinuous finite element SN methods on three-dimensional unstructured grids, Nuclear Science and Engineering 138 (2001) 256–268.
- [9] Y. Wang, J. C. Ragusa, A high-order discontinuous Galerkin method for the SN transport equations on 2D unstructured triangular meshes, Annals of Nuclear Energy 36 (7) (2009) 931–939.
- [10] Y. Wang, J. C. Ragusa, On the convergence of DGFEM applied to the discrete ordinates transport equation for structured and unstructured triangular meshes, Nuclear Science and Engineering 163 (2009) 56–72.
- [11] S. Schunert, Y. Y. Azmy, D. Fournier, **R. Le Tellier**, Comparison of the accuracy of various spatial discretization schemes of the neutron transport equation, in : Proc. of Int. Conf. on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering M&C 2011, Rio de Janeiro, Brazil, 2011.
- [12] M. Shephard, S. Dey, J. Flaherty, A straightforward structure to construct shape functions for variable p -order meshes, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 147 (1997) 209–233.
- [13] D. Fournier, P. Archier, **R. Le Tellier**, C. Suteau, Improvement of neutronic calculations on a MASURCA core using adaptive mesh refinement capabilities, in : Proc. of Int. Conf. on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering M&C 2011, Rio de Janeiro, Brazil, 2011.
- [14] L. Naymeh, Accélération synthétique de l'équation de transport neutronique discrétisée par éléments finis discontinus, Master's thesis, PHELMMA, Grenoble (2010).
- [15] J. C. Ragusa, Y. Wang, Adaptive mesh refinement techniques for diffusion-synthetic-accelerated discrete-ordinates neutral particle transport, Nuovo Cimento C 33 (01) (2010) 215–222.
- [16] D. Fournier, Analyse et développement de méthodes de raffinement hp en espace pour l'équation de transport des neutrons, Ph.D. thesis, Université de Provence (2011).
- [17] R. S. Baker, A block adaptive mesh refinement algorithm for the neutral particle transport equation, Nuclear Science and Engineering 141 (2002) 1–12.
- [18] L. H. Howell, A parallel AMR implementation of the discrete ordinates method for radiation transport, in : Adaptive Mesh Refinement - Theory and Applications, Proceedings of the Chicago Workshop on Adaptive Mesh Refinement Methods, Vol. 41 of Lecture Notes in Computational Science and Engineering, Springer Berlin Heidelberg, 2003, pp. 255–270.
- [19] C. Ausourd, Styx : A multidimensional AMR S_n scheme, Nuclear Science and Engineering 143 (2003) 281–290.
- [20] J. C. Ragusa, A simple hessian-based 3d mesh adaptation technique with applications to the multigroup neutron diffusion equations, Annals of Nuclear Energy (2008) 2006–2018.
- [21] Y. Wang, W. Bangerth, J. Ragusa, Three-dimensional h-adaptivity for the multigroup neutron diffusion equations, Progress in Nuclear Energy 51 (2009) 543–555.
- [22] Y. Wang, W. Bangerth, J. Ragusa, Three-dimensional h-adaptivity for the multigroup SPN equations, Progress in Nuclear Energy 161 (2009) 22–48.
- [23] T. Plewa, T. Linde, V. G. Weirs (Eds.), Adaptive Mesh Refinement - Theory and Applications, Proceedings of the Chicago Workshop on Adaptive Mesh Refinement Methods, Vol. 41 of Lecture Notes in Computational Science and Engineering, 2005.

- [24] E. E. Lewis, Toward whole-core neutron transport without spatial homogenization, in : Proc. of Int. Conf. on Mathematics, Computational Methods & Reactor Physics M&C 2009, ANS, Saratoga Springs, USA, 2009.
- [25] J. C. Ragusa, Y. Wang, A two-mesh adaptive mesh refinement technique for S_n neutral-particle transport using a higher-order DGFEM, Journal of Computational and Applied Mathematics 233 (12) (2010) 3178–3188.
- [26] Y. Wang, J. C. Ragusa, Standard and goal-oriented adaptive mesh refinement applied to radiation transport on 2d unstructured triangular meshes, Journal of Computational Physics 230 (3) (2011) 763 – 788.
- [27] D. Lathouwers, Goal-oriented spatial adaptivity for the sn equations on unstructured triangular meshes, Annals of Nuclear Energy Article On press.
- [28] P. Lesaint, P. A. Raviart, On a Finite Element Method for Solving the Neutron Transport Equation, Mathematical Aspects of Finite Elements in Partial Differential Equations, C.A. deBoor, ed., Academic Press, New York, 1974.
- [29] P. Houston, C. Schwab, E. Süli, Discontinuous hp -finite element methods for advection-diffusion problems, Tech. Rep. NA-00/15, Oxford University Computing Laboratory (2000).
- [30] P. Houston, E. Süli, hp -adaptive discontinuous Galerkin finite element methods for first-order hyperbolic problems, SIAM Journal of Scientific Computing 23 (2001) 1226–1252.
- [31] I. Babuška, M. Suri, The optimal convergence rate of the p -version of the finite element method, SIAM J. Numer. Anal. 24 (4) (1987) 750–776.
- [32] D. Fournier, **R. Le Tellier**, C. Suteau, Analysis of an a posteriori error estimator for the transport equation with S_n and discontinuous Galerkin discretizations, Annals of Nuclear Energy 38 (2011) 221–231.
- [33] D. Fournier, R. Herbin, **R. Le Tellier**, Discontinuous Galerkin discretization and hp -refinement for the resolution of the neutron transport equation, SIAM J. Sci. Comput. 35 (2) (2013) A936–A956.
- [34] R. Eymard, T. Gallouët, M. Ghilani, R. Herbin, Error estimates for the approximate solutions of a nonlinear hyperbolic equation given by finite volume schemes, Journal of Numerical Analysis 18 (4) (1998) 563–594.
- [35] A. Dedner, M. Oehlberger, A New hp -Adaptive DG Scheme for Conservation Laws Based on Error Control, Hyperbolic Problems ; Theory, Numerics, Applications, 2008.
- [36] A. Owens, J. Kópházi, J. Welch, M. Eaton, Energy dependent mesh adaptivity of discontinuous isogeometric discrete ordinate methods with dual weighted residual error estimators, Journal of Computational Physics 335 (2017) 352 – 386.
- [37] D. Fournier, **R. Le Tellier**, C. Suteau, R. Herbin, Analysis of a hp -refinement method for solving the neutron transport equation using two error estimators, in : Proc. of Int. Conf. on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering M&C 2011, Rio de Janeiro, Brazil, 2011.
- [38] W. Gui, I. Babuška, The h , p and h - p versions of the finite element method in 1 dimension. part III. the adaptive h - p version, Numer. Math. 49 (1986) 659–683.
- [39] S. Adjerid, M. Aiffa, J. E. Flaherty, Computational Methods for Singularly Perturbed Systems, AMS, Providence, 1998.
- [40] P. Finck, J. Cabrilhat, M. Martini, R. Soule, G. Rimpault, R. Jacqmin, The CIRANO experimental program in support of advanced fast reactor physics, in : Proc. Int. Conf. PHYSOR96, Mito, Ibaraki, Japan, Vol. 2, Sept. 16-20, 1996, pp. E66–E75.

- [41] M. A. Goffin, C. M. Baker, A. G. Buchan, C. C. Pain, M. D. Eaton, P. N. Smith, Minimising the error in eigenvalue calculations involving the boltzmann transport equation using goal-based adaptivity on unstructured meshes, *Journal of Computational Physics* 242 (2013) 726 – 752.
- [42] A. M. Weinberg, E. P. Wigner, *The Physical Theory of Neutron Chain Reactors*, University of Chicago Press, 1958.
- [43] A. Sargeni, A. Santamarina, A formulation of a reactivity variation for taking into account spatial and energy collapsing, *Annals of Nuclear Energy* 32 (2005) 89–99.
- [44] **R. Le Tellier**, D. Fournier, C. Suteau, Reactivity perturbation formulation for a discontinuous Galerkin based transport solver and its use with adaptive mesh refinement, *Nuclear Science and Engineering* 167 (2011) 209–220.
- [45] T. Takeda, H. Ikeda, 3-D neutron transport benchmarks, Technical Report NEACRP-L-330, OECD/NEA Committee on Reactor Physics (1991).
- [46] J. F. Vidal, P. Archier, A. Calloo, J. Jacquet, J. Tommasi, **R. Le Tellier**, An improved energy-collapsing method for core-reflector modelization in SFR core calculations using the Paris platform, in : *Proc. of Int. Conf. on Advances in Reactor Physics and Linking Research, Industry, and Education PHYSOR 2012*, Knoxville, USA, 2012.
- [47] G. Rimpault, Algorithmic features of the ECCO cell code for treating heterogeneous fast reactor subassemblies, in : *Proc. of the Int. Conf. on Mathematics and Computations, Reactor Physics, and Environmental Analyses M&C 1995*, Portland, USA, 1995.
- [48] J. C. Ragusa, S. Santandrea, R. Sanchez, A technique for reflector homogenization, in : *Proc. of Int. Mtg. in Mathematics and Computations, Supercomputing, Reactor Physics and Nuclear and Biological Applications M&C 2005*, ANS, Avignon, 2005.
- [49] P. Jacquet, Nouvelles méthodes de modélisation neutronique des réacteurs rapides de quatrième génération, Ph.D. thesis, Université de Grenoble (2011).
- [50] A. Hébert, G. Mathonnière, Development of a third-generation *Superhomogénéisation* method for the homogenization of a pressurized water reactor assembly, *Nuclear Science and Engineering* 115 (1993) 129–141.
- [51] J.-F. Vidal, P. Archier, B. Faure, V. Jouault, J.-M. Palau, V. Pascal, G. Rimpault, F. Auffret, L. Graziano, E. Masiello, S. Santandrea, Apollo3 homogenization techniques for transport core calculations - application to the astrid cfv core, *Nuclear Engineering and Technology* 49 (7) (2017) 1379 – 1387.
- [52] G. B. Porcellana, Domain decomposition techniques for core/steel reflector interface of generation IV sodium cooled fast reactors, Master's thesis, Politecnico di Torino (2011).
- [53] <http://www.ddm.org/>, The official page of domain decomposition methods.
- [54] E. Girardi, Couplage de méthodes et décomposition de domaine pour la résolution de l'équation du transport des neutrons, Ph.D. thesis, Université d'Evry Val d'Essonne (2004).
- [55] A. Vatile, The ASTRID project : Advanced sodium technological reactor for industrial demonstration, in : *50th Meeting of the Technical Working Group on Fast Reactors (TWG-FR)*, IAEA, 2017.
- [56] C. Bouret, Etudes des contre-réactions dans un réacteur à neutrons rapides à caloporteur sodium : impact de la conception et de la neutronique sur les incertitudes, Ph.D. thesis, Université Blaise Pascal de Clermont-Ferrand (2014).
- [57] M. Maillot, Caractérisation des effets spatiaux dans les grands cœurs RNR : Méthodes, outils et études, Ph.D. thesis, Université d'Aix-Marseille (2016).

- [58] M. Andersson, Control rod homogenization in heterogeneous sodium-cooled fast reactors, Ph.D. thesis, Chalmers University of Technology (2016).
- [59] D. Schneider, F. Dolci, F. Gabriel, J.-M. Palau, et. al., APOLLO3[®] : CEA/DEN deterministic multipurpose platform for core physics analysis, in : Proc. of Int. Mtg. on the Physics of Fuel Cycles and Advanced Nuclear Systems PHYSOR 2016, Sun Valley, USA, 2016.
- [60] J. Y. Moller, J. J. Lautard, MINARET, a deterministic neutron transport solver for nuclear core calculations, in : Proc. of Int. Conf. on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering M&C 2011, Rio de Janeiro, Brazil, 2011.
- [61] F. Alcaro, S. Dulla, P. Ravetto, **R. Le Tellier**, C. Suteau, Implementation of the quasi-static method for neutron transport, in : Proc. of Int. Conf. on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering M&C 2011, Rio de Janeiro, Brazil, 2011.
- [62] A. Calloo, J. F. Vidal, **R. Le Tellier**, G. Rimpault, Validation of the legendre expansion of the collision law for light water reactor calculations, Nuclear Science and Engineering 180 (2015) 182–198.
- [63] N. Dos Santos, Optimisation de l’approche de représentativité et de transposition pour la conception neutronique de programmes expérimentaux dans les maquettes critiques, Ph.D. thesis, Université de Grenoble (2013).
- [64] M. Guyot, P. Gubernatis, **R. Le Tellier**, Space-time effects in the initiating phase of sodium fast reactors and their evaluation using a three-dimensional neutron kinetics model, Annals of Nuclear Energy 85 (2015) 115–126.
- [65] M. Gentili, B. Fontaine, G. Rimpault, Deformed core reactivity evaluation with mesh projection-based method, Nuclear Technology 192 (1) (2015) 11–24.

Contributions à la modélisation du comportement du corium en cuve d'un réacteur à eau pressurisée lors d'un accident grave

Comme au Chapitre précédent, dans une volonté de compromis entre lisibilité et exhaustivité, cette synthèse s'accompagne d'un *vade-mecum* à l'Annexe B auquel il est fait référence dans la marge du texte des paragraphes suivants. Cette annexe a pour vocation de permettre au lecteur d'aller trouver plus de détails sur la phénoménologie ou les modèles discutés ici.

2.1 Préambule, cadre applicatif et objectif général

Ces travaux s'inscrivent dans le contexte de l'étude des accidents graves des REL [1] dans le but d'améliorer les moyens de prévention et mitigation associés. Au cours d'un accident grave, la perte de refroidissement du cœur du réacteur est susceptible de conduire à sa dégradation et une fusion partielle ou complète qui produit un bain fondu : le corium. La phénoménologie relative au corium est un élément clé dans l'évaluation des conséquences d'un tel accident et de l'efficacité de dispositifs ou mesures de mitigation. Ce matériau liquide à haute température (supérieure à 2700 K) est formé suite à la fusion/dissolution du combustible nucléaire, des gaines en alliage de zirconium partiellement oxydées et des structures métalliques environnantes en acier. La propagation de ce bain de corium au sein du cœur peut l'amener au contact des structures métalliques qui environnent le cœur (baffle ou réflecteur autour, plaque support en-dessous) et conduire à leur fusion ou leur ruine mécanique. Le corium peut alors se relocaliser vers le fond de la cuve qui peut elle-même finir par perdre son intégrité et relâcher le corium dans le puits de cuve où il se retrouve en contact avec le béton de l'enceinte, dernière barrière de confinement.

Les phénomènes relatifs à la propagation du corium sont nombreux, complexes et mettent en jeu des échelles temporelles et spatiales qui peuvent être très différentes. De plus, tous les phénomènes ne sont pas forcément clairement identifiés et, pour nombre d'entre eux, on ne dispose que d'une description qualitative (par exemple, car les "propriétés physiques" qui les régissent sont mal connues). Dans ces conditions, une approche basée sur des analyses de

sensibilité/incertitude est nécessaire pour mener à bien les études de sûreté et prioriser les activités de R&D associées de telle sorte qu'elles participent au mieux à l'amélioration de la connaissance. Une telle méthodologie de travail, par nature cyclique, a été mise en place au CEA. Elle met en œuvre des analyses dites "phénoménologiques" ou encore "de scénarios" [2] qui, pour un concept de réacteur donné et une stratégie de gestion d'un accident grave donnée, cherchent à évaluer les ordres de grandeur et les temps caractéristiques relatifs aux différents phénomènes identifiés *a priori* comme possibles pour un ensemble de "scénarios" de progression du corium *a priori* plausibles. Pour ce faire, ces analyses s'appuient sur la connaissance acquise par le passé (en particulier, aux travers de programmes expérimentaux) et des modèles physiques "simples" (*i.e.* peu coûteux à mettre en œuvre). Elles permettent d'identifier les scénarios de progression les plus probables et les phénomènes de "premier ordre" associés. Ces résultats peuvent être formalisés par un logigramme qui sert alors de "guide" dans la construction d'un code dédié aux calculs statistiques des transitoires de propagation du corium. Le premier code issu d'une telle approche est le code LEONAR [3] développé entre 2006 et 2013 au CEA Grenoble pour EDF afin d'évaluer le risque de percement du radier sur les réacteurs à eau pressurisée (REP) de 1300MWé du parc français. A partir de 2013, afin d'étendre au mieux l'utilisation de cette approche à d'autres réacteurs et d'autres stratégies de gestion accidentelle, le développement de la plateforme logicielle dédiée (PROCOR) a démarré avec les travaux de mon collègue Laurent Saas et moi-même [4]. Le cycle de travail est illustré à la Figure 2.1. Cet outil se veut complémentaire des codes tels que MAAP [5] dont le calcul va de la dégradation du cœur jusqu'au relâchement d'isotopes radioactifs hors de l'enceinte (*i.e.* le "terme source") et des approches dites "enveloppes" (voir par exemple [6]) basées sur des calculs stationnaires pour des configurations postulées (*a priori* pénalisantes). On notera aussi qu'une approche similaire a été mise en œuvre à la même époque pour les besoins de conception des RNR-Na par une autre équipe du CEA [7].

Dans tous les cas, les modèles mis en place sont le plus souvent de nature intégrale¹ avec des équations de bilan écrites de manière macroscopique (*i.e.* les variables dépendantes sont des grandeurs moyennes en espace, par exemple, une température pour chaque phase liquide d'un bain de corium) fermées par des "corrélations" issues, le plus souvent, des résultats de programmes expérimentaux.

Les travaux de recherche rapportés ici s'inscrivent dans ce cadre et portent plus particulièrement sur la modélisation d'un bain de corium dans la cuve d'un REL. En effet, le développement de PROCOR a démarré dans un contexte où l'intérêt industriel (EDF & Framatome) vis-à-vis de la conception de nouveaux réacteurs se portait sur une approche de sûreté de type "rétention en cuve" (IVR – où l'on cherche à maintenir le corium à l'intérieur de la cuve) appliquée à des réacteurs d'une puissance supérieure ou égale 1000MWé. Dans ce cadre, c'est le flux de chaleur transmis par le bain de corium en fond de cuve à la paroi de la cuve qui conditionne le succès d'une telle approche où l'on cherche à extraire la puissance du bain par un renoyage du puits de cuve [8].

Dans ce contexte, mes travaux ont porté essentiellement sur la modélisation tant à une échelle macroscopique (l'échelle des modèles de PROCOR) que mésoscopique (l'échelle d'une modélisation basée sur une approche de type "Computational Fluid Dynamics" – CFD – de la thermohydraulique) de certains phénomènes associés au comportement du corium en cuve. Dans cette démarche, telle qu'illustrée à la Figure 2.1, la simulation à une échelle mésoscopique se veut complémentaire des expériences et vise à améliorer la compréhension des phénomènes mis en jeu et construire, via une remontée d'échelle, des lois de fermetures adéquates pour des modèles macroscopiques intégraux.

1. Ces modèles, appelés le plus souvent "lumped parameter models" en anglais sont parfois appelées en français "modèles 0D" ou encore "modèles à zones".

Dans ce Chapitre, après une présentation synthétique de la “physique” du corium en cuve et des axes de R&D associés (§ 2.2), nous nous intéressons plus particulièrement à trois ensembles de travaux de recherche réalisés dans ce contexte. D’abord, le § 2.3 traite de développements relatifs à la thermohydraulique de la couche métallique supérieure du bain de corium ; ensuite, le § 2.4 s’intéresse à la question de la cinétique de stratification des phases liquides du bain et la modélisation mésoscopique de la diffusion multicomposant multiphasique associée. Puis, des travaux se rapportant au couplage de modèles de thermohydraulique et thermochimie pour le corium vis-à-vis de la consistance des données thermodynamiques mises en jeu sont discutés au § 2.5. Ce Chapitre se conclut au § 2.6 avec un panorama rapide de travaux connexes relatifs au comportement du corium en cuve.

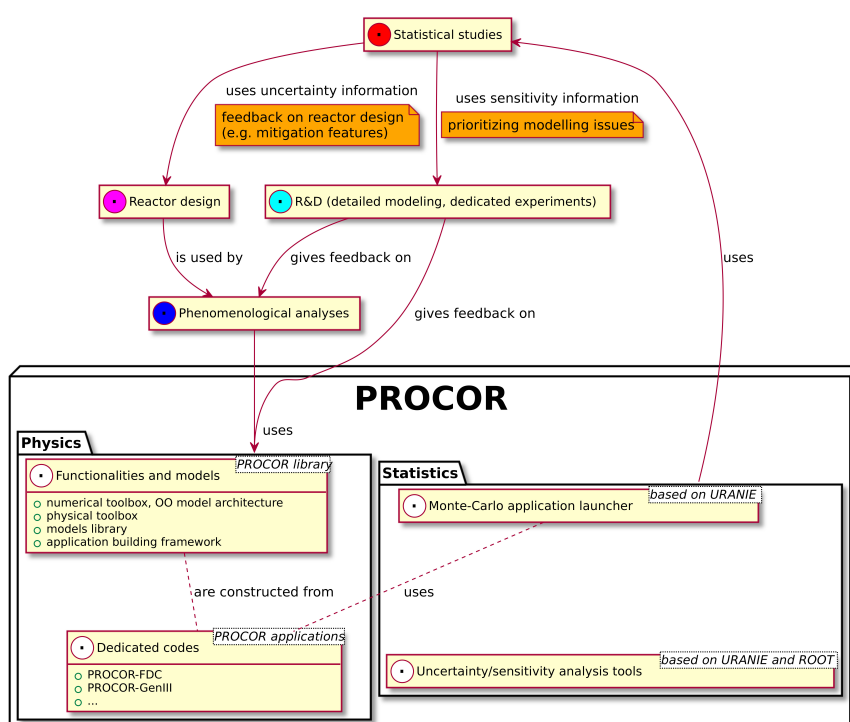


FIGURE 2.1 – Cycle de travail associé à la plateforme PROCOR

2.2 Comportement transitoire du corium en fond de cuve

Le comportement d’un bain de corium en fond de cuve résulte du couplage entre deux grands types de phénomènes : alors que la thermochimie du bain conditionne sa séparation en plusieurs phases liquides (immiscibles) et solides, son comportement thermohydraulique au travers de la convection naturelle qui s’y installe détermine *in fine* le flux de chaleur à son interface. La Figure 2.2 montre une vision “idéalisée” de la répartition des phases typique des modélisations mises en œuvre pour le corium en fond de cuve (il s’agit, en l’occurrence du modèle macroscopique de PROCOR). On y distingue plusieurs phases liquides (une oxyde et plusieurs métalliques) qui, en fonction de leur densité, ont tendance à se stratifier gravitairement

ainsi qu’une phase solide (appelée “croûte”) à la frontière d’une partie de ces “couches” liquides.

En se restreignant au bain de corium en tant que tel, la modélisation associée peut être décomposée de manière schématique en distinguant les phases liquides du bain, la croûte et les différentes interfaces comme proposé à la Figure 2.3. Dans cette vision partielle du problème, les interfaces incluent aussi la frontière du bain de corium avec l’atmosphère gazeuse ou l’eau dans la cuve.² Dans ce cadre, un modèle à l’échelle macroscopique se compose d’un modèle de transfert de masse inter-couches qui décrit le transitoire de stratification, d’un modèle traitant les croûtes d’interfaces en termes de solidification/fusion/dissolution et d’un bilan de masse et d’énergie pour chacune des couches liquides permettant de décrire, par le biais de fermetures de type “corrélations”, les échanges de chaleur.

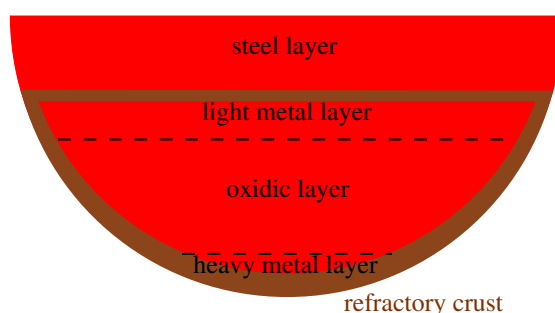


FIGURE 2.2 – Représentation idéalisée des phases ségrégées d’un bain de corium pour les modèles macroscopiques intégraux [4]

Le risque principal de percement “thermique” de la cuve (*i.e.* d’avoir un flux de chaleur suffisamment important pendant suffisamment longtemps pour qu’il y ait assèchement en paroi externe de la cuve et donc perte du refroidissement) est associé à l’existence d’une couche métallique au-dessus du bain de corium en contact direct avec la cuve (sans croûte réfractaire à l’interface ; “steel layer” à la Figure 2.2). En effet, dans ce cas, la géométrie de la couche (de par un rapport entre surface latérale et surface axiale faible) et la conductivité élevée de cette phase métallique concourent à un phénomène de concentration du flux de chaleur (“focusing effect”) au niveau de la surface latérale de cette couche métal. Si bien sûr ce phénomène dépend au premier ordre de la convection naturelle dans cette configuration d’une couche métallique chauffée par le dessous, il est compliqué par les spécificités du système thermodynamique du corium qui, en plus des éléments des matériaux du cœur (gainés fondus partiellement oxydés et combustibles fondus) fait intervenir les composants de l’acier fondu des structures internes et de la paroi de la cuve. *A minima*, une description qualitativement correcte des phénomènes thermochimiques mis en jeu requiert de considérer le système U-O-Zr-Fe-(Ni-Cr).³

Dans ce cadre, l’approche traditionnellement mise en œuvre s’appuie sur des calculs stationnaires pour des configurations postulées des différentes phases en présence. C’est, par exemple, le cas de la démonstration de sûreté du réacteur VVER440 de la centrale de Loviisa [10] ou encore du réacteur AP1000 en construction de par le monde [6]. Les configurations du bain postulées sont obtenues à partir de considérations vis-à-vis de l’équilibre thermodynamique

2. En revanche, l’interface avec la paroi de la cuve n’est pas incluse et le lecteur est référé à [9] pour la question des phénomènes thermochimiques associés.

3. Les espèces associées aux matériaux des barres de commande (e.g. B₄C) ou à l’usure du combustible (e.g. Pu, produits de fission) qui peuvent se retrouver dans le bain de corium peuvent influencer sur ces phénomènes mais *a priori*, ne changent pas leur nature.

du système en se plaçant dans des conditions jugées pénalisantes ou “enveloppes” vis-à-vis du “focusing effect”. Une telle approche est limitée par :

- le choix de l’inventaire des matériaux fondus mis en présence dans le fond de cuve. En effet, cet inventaire est largement dépendant du déroulement de l’accident (dégradation du cœur et relocalisation en fond de cuve) et le découplage que requiert une telle méthodologie n’est pas toujours justifiable, en particulier, vis-à-vis de la masse d’acier qui dépend directement du transitoire en fond de cuve [2];
- l’exclusion qui est faite de situations transitoires qui peuvent être plus pénalisantes que la configuration stationnaire, en particulier, vis-à-vis de la formation de la couche métallique supérieure responsable du “focusing effect” [11].

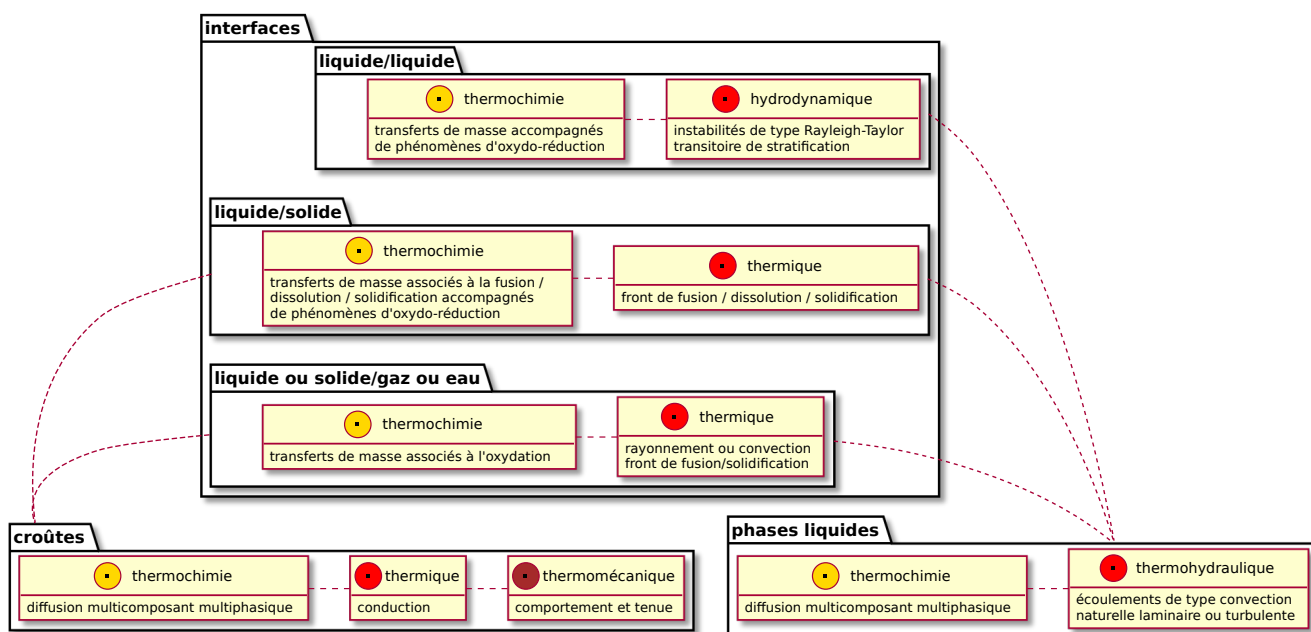


FIGURE 2.3 – Représentation schématique et partielle de la modélisation du bain de corium en cuve

C’est dans l’objectif de pallier aux manques de cette approche que les premières études avec PROCOR sur l’IVR ont été menées en suivant le cycle de travail discuté plus tôt (Figure 2.1). Ainsi, en 2013, à partir de l’état de l’art sur la connaissance du comportement du corium en fond de cuve et sur la base d’analyses phénoménologiques menées antérieurement au CEA de Grenoble par G. Ratel, J.M. Seiler et B. Spindler, une première application PROCOR dédiée au comportement du corium en fond de cuve a été construite et a servi à réaliser des études de sensibilité [12] qui ont participé à la définition d’un programme conjoint CEA-EDF-Framatome de R&D sur l’IVR. Les grands axes de ce programme ont été inscrits dans le projet Européen H2020 IVMR⁴ (In-Vessel Melt Retention) débuté en 2015, coordonné par l’IRSN et qui s’achèvera en 2019. Dans le cadre de ce projet, un exercice de type “PIRT” (Phenomena Identification Ranking Table) [13] ainsi qu’une série de benchmarks portant sur les bains de corium en fond de cuve [14] ont été réalisés

4. https://cordis.europa.eu/project/rcn/196923_fr.html

afin d'identifier plus précisément et de partager de manière consensuelle ces axes de R&D et le besoin en modélisation associé.⁵

Si l'on considère plus particulièrement l'évaluation du risque de percement "thermique" (*i.e.* le refroidissement externe avec la question du flux critique ou encore la tenue mécanique de la cuve ne sont pas traités ici) sur lequel mon effort de recherche s'est porté, les grands axes d'amélioration de la modélisation pour la réduction des biais et incertitudes peuvent être classés comme suit [18, 12, 19] :

thermohydraulique d'un bain stratifié avec en premier lieu, les transferts thermiques relatifs à la couche métallique supérieure et la question des conditions aux limites associées ; c'est l'objet des travaux rapportés au § 2.3 ;

cinétique de stratification avec les transferts de masse inter-couches et les instabilités de Rayleigh-Taylor découlant des changements de densités induits par cette cinétique de "partitionnement" des espèces ; cette thématique de recherche est discutée au § 2.4 ;

relocalisation de l'acier fondu dans le bain avec, en particulier, le devenir de l'acier fondu de la cuve vis-à-vis des différentes couches du bain ;

croûtes aux interfaces pour leur influence sur les trois points précédents : résistance thermique si elle se trouve à l'interface entre les phases métalliques du bain de corium et la paroi de la cuve, "barrière" aux échanges de masse inter-couches, "barrière" au transfert de l'acier fondu de la paroi de la cuve vers le bain ; nous reviendrons en partie sur ce point aux § 2.5 et 2.6.

Par ailleurs, dans ce contexte où, globalement, la modélisation thermochimique mise en œuvre doit évoluer vers une description plus fine et plus complète des phénomènes [20], une question méthodologique devient prégnante : celle de la cohérence de la représentation thermodynamique du système multicomposant sous-jacent dans le couplage entre modèles thermohydrauliques et thermochimiques. C'est en partie l'objet des travaux rapportés au § 2.5.

2.3 Thermohydraulique de la couche métallique supérieure et modélisation du "focusing effect"

Comme nous venons de le dire, améliorer l'évaluation des chances de succès d'une stratégie IVR passe nécessairement par l'amélioration de la connaissance et de la modélisation relatives à la thermohydraulique de la couche métallique supérieure, en particulier pour une couche d'épaisseur "faible" (inférieure à 20cm). En effet, en l'état de la modélisation macroscopique mise en œuvre, les études de sensibilité menées avec PROCOR ont montré un premier risque (très important statistiquement) de percement précoce lorsque cette couche métallique se forme. Un transitoire "typique" en fond de cuve associé à ce "mode" de percement est présenté à la Figure 2.4. On peut y voir que le percement (marqué par l'arrêt du calcul à $t = 24702.9s$) survient quelques centaines de seconde après que la couche métallique soit devenue complètement liquide suite à l'évaporation complète de l'eau présente en fond de cuve lors de la relocalisation du corium. En effet, à la disparition de l'eau, on passe, du point de vue de la condition en limite supérieure de la couche métallique, d'un échange convectif par ébullition nucléée à un transfert par rayonnement vers les structures environnantes qui est beaucoup moins "efficace".

5. On notera que ces benchmarks sont dans la continuité des benchmarks initiés entre PROCOR et les versions propriétaires de MAAP4 [15] et MAAP5 [5] développées par EDF (voir [16]) et repris ensuite avec l'IRSN et le code ASTEC [17].

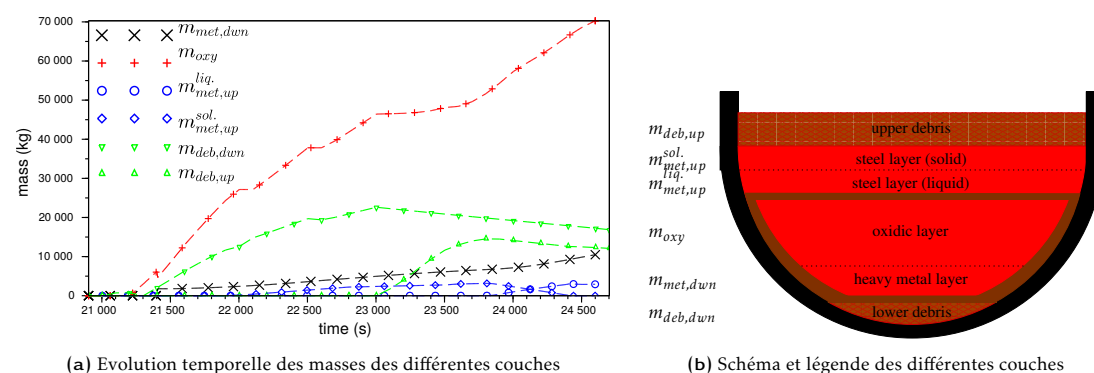


FIGURE 2.4 – Exemple d’un transitoire en fond de cuve avec fusion de la couche métallique supérieure initialement solide

Ce premier “mode” de rupture par “focusing effect” dépend au premier ordre du bilan thermique associée à cette couche métallique (telle que schématiquement représentée à la Figure 2.5) au travers

- des corrélations d’échanges de chaleur utilisées pour le calcul des flux convectifs ;
- des conditions aux limites avec, en particulier, la condition en surface supérieure et la prise en compte des transitoires de fusion/solidification qui peuvent résulter du changement de cette condition.

Or, en l’état des codes de comportement du corium en cuve, ces différents aspects de la modélisation présentent des biais ou des manques qui conduisent *a priori* à une surestimation du risque de percement. C’est en particulier trois d’entre eux qui ont retenu notre attention et ont fait ou font l’objet de travaux de recherche dans le but d’améliorer le modèle macroscopique de la couche métallique supérieure dans PROCOR.

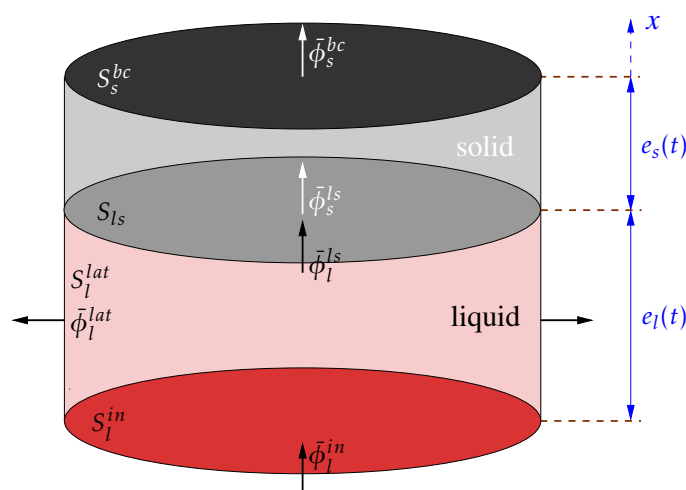


FIGURE 2.5 – Configuration géométrique schématique de la couche métallique supérieure chauffée par le dessous (cas d’une couche partiellement solide)

D’abord, en ce qui concerne les corrélations, la campagne d’essais BALI-Métal du programme

expérimentale BALI a montré que le “focusing effect” est surestimé pour des couches liquides d’épaisseur faible [21] lorsque les corrélations usuelles (Globe & Dropkin [22] pour les échanges axiaux, Churchill & Chu [23] pour l’échange en paroi latérale) sont utilisées, dans ce cas, hors de leur domaine strict de validité. En effet, ces corrélations ont été établies séparément pour des configurations “unidimensionnelles” (l’échange axial d’un liquide chauffé par le dessous et confinés entre deux plaques pour Globe & Dropkin, l’échange d’une paroi verticale immergée dans un fluide pour Churchill & Chu) ; elles ne rendent donc pas compte de l’interaction entre refroidissement en surfaces haute et latérale responsable d’un écoulement. De plus, ces corrélations (comme l’ensemble des corrélations utilisées pour fermer les bilans thermiques des différentes couches du bain) ont été établies en régime permanent et ne peuvent pas capturer l’évolution transitoire du régime d’écoulement dans le cas d’un changement soudain de conditions aux limites par exemple.

Ensuite, la corrélation de Globe & Dropkin s’applique à une surface refroidie “rigide” de telle manière que l’instabilité de type Rayleigh-Bénard (associée à la dépendance de la densité à la température) est le seul moteur de la convection naturelle. Pour autant dans le cas d’une couche métallique complètement liquide (la situation “critique” vis-à-vis du flux de chaleur transmis à la paroi de la cuve), on est en présence d’une surface libre pour laquelle un effet Marangoni (associé à la dépendance de la tension de surface à la température ou à la composition) peut aussi participer à l’écoulement convectif [24].

Finalement, pour ce qui est du transitoire de fusion de la couche métallique, comme illustré à la Figure 2.4, il joue un rôle important puisqu’il tend à retarder le phénomène de concentration de flux mais, pour autant, il est souvent “négligé” ou très grossièrement calculé dans les codes de par l’utilisation de modèles ou de fermetures stationnaires.

2.3.1 Simulations CFD de la couche métallique complètement liquide

Pour ce qui est de la thermohydraulique d’une couche complètement liquide et de l’effet Marangoni, c’est par des simulations CFD que l’on a cherché à améliorer l’état des connaissances et permettre *in fine* l’amélioration du modèle thermique macroscopique de cette couche métallique liquide. Si j’ai participé au démarrage de cette activité, je n’en suis pas le principal acteur et je me contenterai ici d’un résumé succinct et d’un état d’avancement des travaux associés.

Ce travail a débuté dans le cadre de la thèse d’Eleonora Skrzypek⁶ encadré par Laurent Saas et moi-même avec une analyse préliminaire basée sur l’adimensionnement des équations et des résultats de stabilité (analyse spectrale perturbative) [25] qui a permis de montrer qu’*a priori* :

- l’effet Marangoni thermique (associé à la dépendance de la tension de surface à la température) doit être pris en compte pour une épaisseur de la couche métallique inférieure à 5cm environ ;
- la déformation de la surface libre induite par cet effet Marangoni reste dans tous les cas limitée de telle manière que l’écoulement associé peut être simulé en conservant une surface supérieure non déformée mais avec des conditions aux limites modifiées (le gradient axial de la vitesse tangentielle est proportionnelle au gradient radial de la température) ;
- l’approximation de Boussinesq est valide pour décrire ces écoulements en convection naturelle.

Des calculs CFD ont ensuite été initiés par mon collègue Laurent Saas dans le cadre d’un work package (WP) dédié du projet Européen H2020 IVMR avec le code TrioCFD [26].⁷ Ils

6. Cette thèse a débuté en 2014 et, dans la mesure où elle s’effectue à temps partiel, devrait s’achever en 2019.

7. Ces travaux sont menés en partie en collaboration avec EDF R&D à Chatou qui, en la personne de Clémentine Le Guennic, s’occupe du WP relatif à la CFD du projet IVMR et utilise le code NEPTUNE_CFD pour ses calculs.

ont été poursuivis par mon collègue Mathieu Peybernes [27] avec un travail de validation plus approfondie pour diverses configurations d'écoulements de type Rayleigh-Bénard ou Bénard-Marangoni de la littérature afin, en particulier, de s'assurer de la validité de l'approche en "Direct Numerical Simulation" (DNS) (*i.e.* sans modèle de turbulence et en s'assurant de la convergence en maillage) retenue pour ces écoulements à faible Reynolds. A partir de là, toujours dans le cadre du projet IVMR, une étude paramétrique sur la configuration d'intérêt de la couche métallique a été entamée (par mes collègues Mathieu Peybernes et Barbara Bigot). Ce travail a déjà permis de montrer, vis-à-vis du régime pseudo-stationnaire de cet écoulement, que :

- si l'on considère seulement un écoulement de type Rayleigh-Bénard, c'est l'inhomogénéité de la température de la surface supérieure non prise en compte dans le modèle macroscopique qui, via la non-linéarité de la condition radiative imposée à cette frontière, est l'explication principale du biais important (surestimation du focusing effect) de ce modèle pour une épaisseur de la couche métallique inférieure à 5cm ;
- la prise en compte de l'effet Marangoni pour de faibles épaisseurs (que l'on considère un nombre de Marangoni positif ou négatif suivant la composition de cette couche métallique qui est "alimentée" par la fusion d'aciers différents) tend à aggraver le phénomène de "focusing effect".

L'analyse de ces simulations CFD dans l'objectif de "corriger" le modèle macroscopique en fournissant de nouvelles fermetures est en cours.

2.3.2 Modélisation intégrale d'un front de fusion

Dans le cadre de la thèse d'Eleonora Skrzypek, la modélisation thermique associée au front de fusion/solidification de la couche métallique supérieure du bain de corium a aussi été abordée. Comme nous l'avons déjà souligné, ce changement de phase est induit par la modification en particulier de la condition en limite haute de cette couche (présence d'eau et échange convectif ou bien transfert radiatif) et a un impact au premier ordre sur le flux de chaleur transmis latéralement par la phase métallique liquide à la cuve.

Equations de bilan et fermetures

Les équations de conservation du modèle macroscopique associé à la configuration de la Figure 2.5 mis en jeu pour traiter ce problème de Stefan à deux phases sont les suivantes :⁸

$$\frac{dm_l(t)}{dt} = -\frac{dm_s(t)}{dt} = \dot{m}^{ls}(t) = \frac{S_{ls}}{\Delta h^{fus.}} (\bar{\phi}_l^{ls}(t) - \bar{\phi}_s^{ls}(t)) \quad (2.1) \quad \text{B.1}$$

$$Cp_l \left(m_l(t) \frac{d\bar{T}_l}{dt}(t) + \dot{m}^{ls}(t) (\bar{T}_l(t) - T^{fus.}) \right) = -\bar{\phi}_l^{lat}(t) S_l^{lat} - \bar{\phi}_l^{ls}(t) S_{ls} + \bar{\phi}_l^{in}(t) S_l^{in} \quad (2.2) \quad \text{Annexe B.1}$$

$$Cp_s \left(m_s(t) \frac{d\bar{T}_s}{dt}(t) + \dot{m}^{ls}(t) (T^{fus.} - \bar{T}_s(t)) \right) = -\bar{\phi}_s^{bc}(t) S_s^{bc} + \bar{\phi}_s^{ls}(t) S_{ls} \quad (2.3) \quad \text{B.2}$$

où

- m_l (resp. m_s) est la masse de la phase liquide (resp. solide) de capacité calorifique Cp_l (resp. Cp_s);

8. Vis-à-vis de la formulation générale des équations de conservation de l'Annexe B.1, ce système d'équations correspond à un modèle à deux zones avec une composition supposée homogène sur les deux phases à tout instant et des enthalpies spécifiques exprimées en fonction de la température sous la forme explicite suivante : $h_s = h^o - Cp_s (T^{fus.} - T_s)$ et $h_l = Cp_l (T_l - T^{fus.}) + \Delta h^{fus.} + h^o$.

- $\dot{m}^{ls}$ est le débit de masse associé au front de fusion et donné par la condition de Stefan avec Δh^{fus} la chaleur latente spécifique de fusion et T^{fus} la température de fusion ;
- les différentes surfaces $S_l^{in}, S_{ls}, S_l^{lat}, S_s^{bc}$ et les flux de chaleurs moyens sur ces surfaces $\bar{\phi}_l^{in}, \bar{\phi}_l^{ls}, \bar{\phi}_s^{ls}, \bar{\phi}_l^{lat}, \bar{\phi}_s^{bc}$ sont définis conformément aux notations introduites à la Figure 2.5.

On notera que dans ce modèle le caractère multicomposant du métal de cette couche métallique n'est pas décrit ; on considère que la composition est homogène. Nous reviendrons sur ce point au § 2.5. La fermeture de ce système des Eqs. 2.1, 2.2 et 2.3 vis-à-vis des flux de chaleurs de la phase liquide est associée aux corrélations discutées au paragraphe précédent.

Dans cette partie de la thèse de Eleonora Skrzypek, c'est la question de la fermeture pour les flux conductifs dans la phase solide qui a été traitée. De par le rapport d'aspect de la couche métallique, la conduction dans la phase solide est considérée comme unidirectionnelle (axiale). A partir de là, tel que rapporté dans [28], nous avons comparé différentes approximations des flux conductifs dans le cadre de ce modèle intégral qui sont utilisées dans les codes accidents graves. Un aspect important de ce travail est que ces approximations ont été comparées systématiquement à une solution de référence obtenue par ce même modèle intégral couplé avec une résolution par éléments finis de l'équation de la chaleur dans la phase solide. Cette approche permet une validation "numérique" rigoureuse des fermetures pour la phase solide toutes choses égales par ailleurs. Les différents modèles utilisés pour traiter la conduction dans le solide sont introduits au Tableau 2.1.

notation	description du modèle
$\mathcal{R}(\Delta x)$	modèle de référence avec une résolution par éléments finis (Lagrange d'ordre 1) de la conduction avec un pas de maillage de $\Delta x = 10^{-4}\text{m}$
$\mathcal{Q}$	modèle basé sur l'hypothèse d'un profil quadratique de température (strictement équivalent à l'approche discutée dans [29] basée sur des approximations d'Hermite à deux points des intégrales sur l'espace de la température du solide et de sa dérivée)
$\mathcal{P}(\omega)$	modèle paramétrique tel que proposé dans [4] où $\omega \in [0, \dots, 1]$ contrôle la partition de puissance à l'interface entre ce qui sert à faire avancer le front de fusion et ce qui sert à chauffer le solide : lorsque $\omega = 0$, la température $\bar{T}_s$ reste constante et toute la puissance sert à faire avancer le front (cette hypothèse, qui permet de simplifier le système d'équations est souvent utilisée pour des calculs d'ordre de grandeur comme dans [2])
$\mathcal{L}$	hypothèse de régime permanent (profil linéaire de température établi à tout instant)

TABLEAU 2.1 – Notations et descriptions relatives aux différents modèles d'évaluation des flux conductifs de l'Eq. 2.3

Résultats numériques

Pour mener à bien cette validation "numérique", le cas test nominal considéré correspond à la configuration de la Figure 2.5 (géométrie cylindrique) où le métal est assimilé à du fer pur pour l'évaluation de ces propriétés physiques et où :

- le cylindre a un rayon de 1.4m et la masse total de métal est fixée de telle manière à ce que l'épaisseur d'une couche complètement solide soit $e_s^{max} = 0.3\text{m}$;

- à $t = 0^-$, le système est à l'équilibre pour un flux entrant donné $\bar{\phi}_l^{in,0} = 0.4\text{MW/m}^2$ et la condition en limite haute correspond à un échange convectif avec de l'eau de telle manière que la couche métallique est partiellement solide ;
- at $t = 0^+$, la condition en limite inférieure est modifiée comme suit : $\bar{\phi}_l^{in} = 3 \times \bar{\phi}_l^{in,0}$ tandis que l'échange convectif en limite haute est remplacé par un échange radiatif.

Le transitoire qui suit est caractéristique de celui d'intérêt vis-à-vis du risque de "focusing effect" tel qu'illustrée à la Figure 2.4a. Il amène à la fusion complète du métal (à $t = t_f$) et à une couche métallique totalement liquide. L'écart sur le temps de fusion ainsi que les erreurs relatives en norme L_1 , ε_{L_1} , pour les diverses quantités d'intérêts relatives au front et au solide sont présentées au Tableau 2.2 avec comme référence le calcul mené avec $\mathcal{R}(10^{-4})$.

Ce cas test nominal donne une vue générale des performances des modèles approchés sur cette configuration typique de celle de fusion de la couche métallique supérieure à la disparition de l'eau en fond de cuve. On peut y voir que les biais du modèle $\mathcal{Q}$ sont limités, particulièrement vis-à-vis de la principale quantité d'intérêt t_f (évalué par $\mathcal{R}(10^{-4})$ à 1371s). Pour ce qui est du modèle paramétrique $\mathcal{P}$, ses performances dépendent largement de ω ; dans ce cas, l'optimum est proche de $\omega = 0.3$, valeur pour laquelle les biais sur t_f et e_s sont comparables à ceux du modèle $\mathcal{Q}$ tandis que l'erreur sur les flux à la frontière du solide est significativement plus grande. Finalement, l'approximation quasi-statique du modèle $\mathcal{L}$ se montre mauvaise avec un temps t_f sous-estimée de près de 50%.

	Δt_f (s)	ε_{L_1} (%)				
		$\bar{\phi}_s^{ls}$	$\bar{\phi}_s^{bc}$	$\bar{T}_s$	$\bar{\phi}_l^{ls}$	e_s
$\mathcal{Q}$	-5.1	4.36	9.24	1.91	0.58	2.74
$\mathcal{P}(0.0)$	-173.1	20.66	79.95	29.62	5.80	17.12
$\mathcal{P}(0.3)$	-5.1	6.46	30.62	2.59	0.86	3.39
$\mathcal{P}(1.0)$	473.4	65.82	311.19	62.82	15.43	75.71
$\mathcal{L}$	-698.1	80.44	175.67	206.02	20.42	56.47

TABLEAU 2.2 – Erreurs des différents modèles de conduction dans le solide vis-à-vis des diverses quantités d'intérêts relatives au front et au solide (référence $\mathcal{R}(10^{-4})$)

Pour aller plus loin dans cette analyse, nous avons procédé à l'adimensionnement partiel des équations (celles ayant trait au solide et au front) de telle manière à faire ressortir les deux nombres adimensionnels associés, le nombre de Biot $Bi = \frac{\phi_\star x_\star}{\lambda_s T_\star}$ (λ_s étant la conductivité thermique du solide) et le nombre de Stefan $St = \frac{Cp_s T_\star}{\Delta h^{fus}}$. La vitesse adimensionnée de déplacement du front est directement proportionnelle à $Bi \times St$ tandis que les flux de chaleur adimensionnés sont inversement proportionnels à Bi . L'évaluation de ces deux nombres en considérant $x_\star = e_s^{max}$, $T_\star = T^{fus} - 1000$ (1000K étant une estimation de $\bar{T}_s(t = 0)$) en présence d'eau et $\phi_\star = \bar{\phi}_l^{in,0}$ donne $Bi = 4.115$ et $St = 2.105$. En particulier, on voit que le nombre de Stefan n'est pas petit alors que la validité du modèle $\mathcal{L}$ n'est garantie que pour un nombre de Stefan suffisamment petit devant 1 [30]. A partir de là, des tests supplémentaires ont été définis en faisant varier Bi ou bien St pour permettre l'analyse des propriétés des différents modèles.

■ **En particulier**, ces tests ont montré que l'approximation $\mathcal{Q}$ est valide sur une large gamme de paramètres ce qui nous a conduit à retenir ce modèle pour la modélisation du bain dans

PROCOR. Pour autant, ils ont aussi souligné que ce modèle ne peut être considéré comme une fermeture générique utilisable dans tous les cas. ■

En effet, mise en lumière sur le cas à grand St , la limite principale de ce modèle est qu'il ne garantit pas la propagation du front dans la "bonne" direction (fusion/solidification) à tout instant. En effet, de par l'hypothèse de profil quadratique défini à tout instant à partir de la température moyenne et des deux conditions aux limites du solide, la discontinuité à $t = 0$ de la condition en limite haute induit une discontinuité non-physique du flux $\bar{\phi}_s^{ls}$ à l'interface solide-liquide qui, dans certains cas, peut amener à une propagation faussée du front au début du transitoire. Ainsi, dans le cas à grand St , le modèle $\mathcal{Q}$ amène à une solidification limitée pendant les 16 premières secondes du transitoire. Comme discuté dans [31], cette propagation instantanée de "l'information" (en l'occurrence, d'un bord à l'autre du domaine) est une caractéristique fréquente des modèles intégraux de par les fermetures utilisées et requiert une attention particulière vis-à-vis des schémas numériques de couplage des modèles et d'intégration en temps.⁹

Plus récemment, dans [32], avec mes collègues Mathieu Peybernes et Louis Viot, nous avons proposé, pour la simulation de l'ablation 2D de la cuve (par le bain de corium), un modèle hybride s'appuyant sur un maillage 1D axial de la cuve et combinant un schéma en différences finies des flux axiaux et cette même fermeture $\mathcal{Q}$ pour l'évaluation des flux radiaux. La comparaison sur des cas de pure conduction avec une solution par éléments finis en 2D a montré que si ce modèle permet de calculer assez précisément ($\sim 5\%$ sur l'erreur relative en norme L_2) l'évolution du profil axial de température dans la cuve, l'erreur sur les flux en frontière externe de la cuve est plus significative ($\sim 30\%$) et induite par l'utilisation du modèle $\mathcal{Q}$ qui peut conduire à des changements non physiques de la convexité du profil radial de température.

2.4 Cinétique de stratification d'un bain de corium en cuve

Comme nous l'avons évoqué au § 2.2, l'amélioration de la connaissance et de la modélisation relatives à la cinétique de stratification d'un bain de corium en cuve est un des axes majeurs de la R&D relative à la stratégie IVR.

D'une part, peu de modèles de cette cinétique existent [12, 33] et l'incertitude associée est grande de par le manque de données expérimentales, à la fois pour évaluer les paramètres de ces modèles (e.g. coefficients de diffusion) mais aussi pour les valider. En effet, la connaissance relative à cette cinétique de stratification est limitée. Ainsi, même dans la configuration la plus "simple" (atmosphère neutre et pas de croûte à l'interface oxyde-métal), en mettant de côté les aspects relatifs à la convection naturelle des phases, le problème physique considéré fait intervenir deux "phénomènes" couplés complexes : la diffusion multicomposant et multiphasique associée au système thermodynamique du corium en cuve et l'hydraulique multiphasique en termes des instabilités de Rayleigh-Taylor à l'interface oxyde-métal. En effet, les transferts de masse aux interfaces entre les phases liquides oxyde et métalliques sont à l'origine de changements de masses volumiques qui, lorsqu'ils sont suffisamment importants pour vaincre la tension interfaciale, conduisent à un détachement de gouttelettes métalliques qui traversent la phase oxyde.

Dans une configuration isotherme, l'état stationnaire correspond à l'équilibre thermodynamique du système U-O-Zr-acier qui présente une lacune de miscibilité à l'état liquide et conduit à deux phases liquides non miscibles ségrégées gravitairement. Suivant l'inventaire des éléments

9. Les méthodes de couplage de modèles hétérogènes et l'architecture logicielle associée dans PROCOR sont l'objet des travaux de la thèse de Louis Viot encadrée par mon collègue Laurent Saas qui s'est achevée en octobre 2018.



en présence, la phase à l'équilibre la plus lourde est soit la phase oxyde, soit la phase métallique de telle sorte que l'on peut avoir deux transitoires différents de stratification (tels que schématisés à la Figure 2.6a) : la formation de la couche métallique lourde par enrichissement en U et Zr de la couche métallique supérieure à son interface avec la phase oxyde ou bien la disparition de cette couche métallique inférieure par transfert d'U et Zr vers la phase oxyde. Le premier transitoire est illustré par une photographie (cf. Figure 2.6b) d'une coupe du lingot post-mortem solidifié de l'expérience MASCA-RCW visant à étudier la stratification. Arrêtée après environ 20 minutes, cette expérience donne un état final qui peut être considéré comme un instantané du transitoire de formation de la couche métallique lourde. On peut y observer des gouttelettes de métal enrichies en U et Zr formées par instabilités de Rayleigh-Taylor entrain de traverser l'oxyde. Cet essai a été réalisé par chauffage inductif en creuset froid (diamètre interne d'environ 18cm) dans le cadre d'un projet OCDE appelé MASCA [34] ; il constitue l'un des rares essais de taille suffisante pour permettre de caractériser cette cinétique de manière *a priori* pertinente vis-à-vis de la configuration en réacteur.

Annexe B.2.2

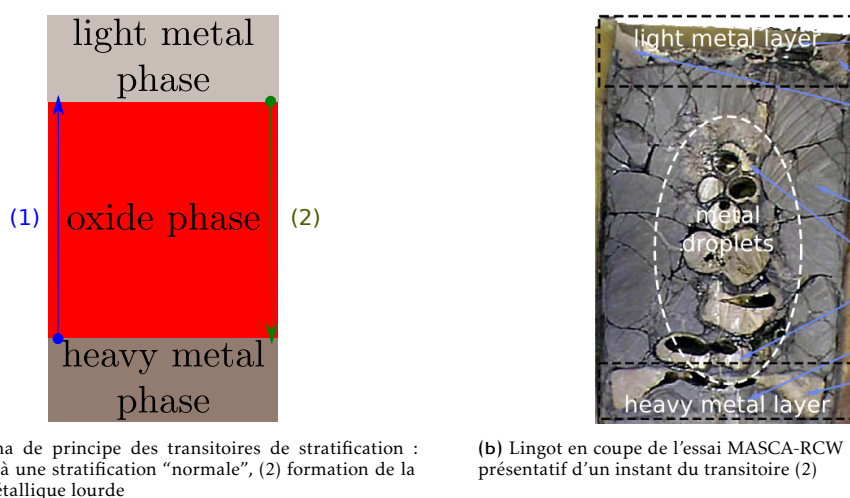


FIGURE 2.6 – Transitoire de stratification : schéma de principe et post-mortem d'un essai

D'autre part, l'impact de cette cinétique sur le risque de percement de la cuve est important. Ainsi, en l'état de la modélisation macroscopique mise en œuvre dans PROCOR, les études de sensibilité menées en 2013-2014 ont montré un deuxième risque de percement par "focusing effect" associé à l'amincissement de la couche métallique supérieure par effet thermochimique. Il est illustré à la Figure 2.7a par un transitoire "typique" de ce second "mode" de percement où l'on peut voir, à partir d'environ 187000s, la masse de la couche métallique supérieure décroître lentement jusqu'au percement (marqué par l'arrêt du calcul à $t = 190700s$). De manière statistique, la Figure 2.7b illustre, sous forme d'un histogramme, l'impact de la cinétique de stratification sur le risque de percement. Ainsi, dans ce cas extrait d'une étude de sensibilité rapportée dans [12], les percements "tardifs" de la cuve (*i.e.* qui ne sont pas associés au premier "mode" de percement à la formation de la couche métallique supérieure discuté au § 2.3) sont tous obtenus lorsque la cinétique de formation de la couche métallique lourde (et donc d'amincissement de la couche métallique supérieure) est suffisamment rapide. A la Figure 2.7b, l'impact de cette cinétique de stratification est représentée au travers du paramètre D_U , coefficient de diffusion "effectif" de l'Uranium dans la phase oxyde qui conditionne directement la vitesse du transfert de masse inter-couches dans le modèle de PROCOR. On peut y observer que, pour une valeur

suffisamment grande du paramètre D_U , la rupture devient certaine.

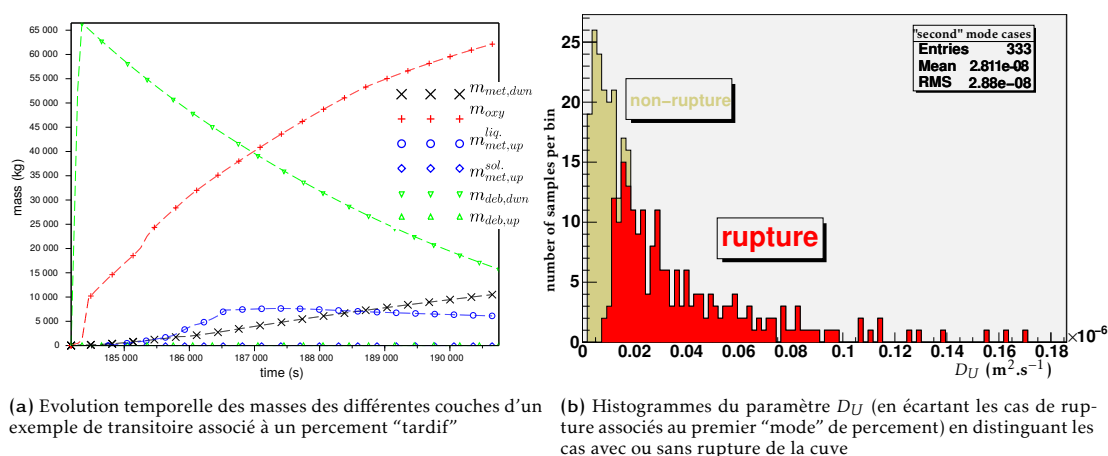


FIGURE 2.7 – Illustrations du deuxième risque de percement par "focusing effect" par effet thermochimique

Dans le cadre de cette thématique de la stratification, j'ai initié et encadré des travaux de recherche, qui ont débuté avec la thèse de Clément Cardon [35] entre 2013 et 2016, portant sur la modélisation, à une échelle mésoscopique, de la diffusion multicomposant multiphasique dans le but de disposer d'un modèle compatible avec une approche CFD de la thermohydraulique. Comme discuté plus tôt, cette approche de simulation à une échelle mésoscopique se veut complémentaire des expériences dans la compréhension des phénomènes mis en jeu et leur modélisation intégrale.

Dans cette investigation, mon choix *a priori* s'est porté sur la famille des méthodes de champ de phase construites à partir d'une fonctionnelle d'énergie [36]. En conséquence, cette thèse a été encadrée avec Mathis Plapp du Laboratoire de Physique de la Matière Condensée (LPMC) de l'Ecole Polytechnique qui a apporté son expertise sur les méthodes d'interface diffuse et de champ de phase.

Ces méthodes permettent d'utiliser la représentation thermodynamique d'un système fourni par une base CALPHAD (qui décrit l'énergie de Gibbs des différentes phases possibles en fonction de la température et de leurs compositions, voir [37]), forme sous laquelle la connaissance du système U-O-Zr-acier relatif au corium en cuve a été "capitalisée". Par ailleurs, ces méthodes d'interface diffuse se prêtent bien au couplage avec l'équation de Navier-Stokes dans un cadre eulérien dans la perspective de simulation CFD en 2D ou 3D.¹⁰

Dans une première partie, le système binaire U-O a été étudié ce qui a permis de mettre en place le couplage entre une équation de Cahn-Hilliard et une base de données thermodynamiques CALPHAD et de proposer un paramétrage avec, en particulier, une procédure d'élargissement de l'interface compatible avec l'échelle visée (centimétrique ou millimétrique *i.e.* l'ordre de grandeur de la taille des mailles en CFD pour traiter la convection naturelle dans les phases d'un bain de corium) [39]. Pour ce faire, un interfaçage avec le code Open-Calphad a été réalisé en collaboration avec Bo Sundman, professeur retraité de KTH Royal Institute of Technology, expert de la méthode CALPHAD [40]. Ensuite, dans le cadre d'une modélisation sur le système ternaire

10. On notera que, si le champ d'application de ces méthodes est vaste, la seule utilisation rapportée dans la littérature en amont de cette thèse pour décrire un système liquide présentant une lacune de miscibilité est limitée à un système binaire simple (Bi-Zn) [38].

U-O-Zr puis sur le système quaternaire U-O-Zr-Fe, une généralisation du modèle à interface diffuse par le biais d'une hypothèse d'équilibre local des mécanismes d'oxydo-réduction a été proposée et analysée par le biais de simulations numériques 1D en s'intéressant notamment à l'état stationnaire et aux profils de composition obtenus [41].

Nous présentons ici succinctement la construction du modèle proposé *in fine* dans cette thèse ainsi que quelques résultats de simulation numérique en illustrant les propriétés.

2.4.1 Description du modèle mésoscopique proposé

En considérant une température uniforme et constante T , le modèle proposé par C. Cardon s'apparente à un modèle de Cahn-Hilliard de la famille des modèles de champ de phase. En tant que tel, il décrit la diffusion multiphasique pour les systèmes multicomposants associés au corium en cuve par une méthode d'interface diffuse basée sur une fonctionnelle de l'énergie libre de Gibbs (le potentiel thermodynamique adéquat pour des matériaux pour lesquels la dépendance de la densité à la pression peut être négligée, voir [42]). Dans ce modèle, l'hypothèse est faite que le volume molaire (noté V_m) est constant.

Pour un système à n éléments, les variables dépendantes du modèle $\underline{\phi} = \{\phi_i\}_i$ sont $(n-1)$ fractions molaires des éléments $\{x_i\}_{i \in \mathcal{E}}$. Pour le système quaternaire U-O-Zr-Fe, $\mathcal{E} = \{U, Zr, Fe\}$ a été utilisé dans cette thèse. Pour un système fermé, ces fractions molaires obéissent à des lois de conservation locale de telle manière que, dans le contexte d'une méthode d'interface diffuse, l'équation cinétique associée est l'équation de Cahn-Hilliard (C-H). Ainsi, le système d'équations aux dérivées partielles (du 4^{ème} ordre) à résoudre prend la forme suivante, $\forall i \in \mathcal{E}, \forall \vec{r} \in \Omega$:

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot \left(\sum_{j \in \mathcal{E}} \mathcal{M}_{i,j}[\underline{\phi}] \nabla \tilde{\mu}_j[\underline{\phi}] \right) \quad (2.4)$$

$$\tilde{\mu}_i[\underline{\phi}] = \frac{a}{V_m} \frac{\partial \bar{g}^{liq}}{\partial \phi_i}[\underline{\phi}] - \sum_{j \in \mathcal{E}} \kappa_{i,j} \Delta \phi_j \quad (2.5)$$

auquel s'ajoute des conditions de Neumann homogènes pour ϕ_i et $\tilde{\mu}_i$ sur $\partial\Omega$.

Les coefficients de mobilités $\mathcal{M}_{i,j}[\underline{\phi}]$ dépendent des paramètres d'ordre (et sont souvent appelés "mobilités dégénérées") sous la forme, $\forall i, j \in \mathcal{E}$:

$$\mathcal{M}_{i,j}[\underline{\phi}] = \frac{V_m}{a} \sum_{k \in \{U, Zr, Fe, O\}} [\delta_{j,k} - \phi_j] [\delta_{i,k} - \phi_i] x_k M_k \quad (2.6)$$

Ces coefficients s'expriment à partir des mobilités atomiques M_k qui sont obtenues, en pratique, à partir de données sur les coefficients d'auto-diffusion D_k par la relation d'Einstein $D_k = RTM_k$. Une telle formulation de ces coefficients est cohérente avec la théorie linéaire flux-force postulée par L. Onsager (voir [43]) et garantit que $\underline{\phi} = \{\phi_i\}_{i \in \mathcal{E}}$ restent toujours dans $[0, 1]^{n-1}$ et que $1 - \sum_{i \in \mathcal{E}} \phi_i \in [0, 1]$ à tout instant du transitoire dans la mesure où l'état initial du système vérifie ces contraintes. *A fortiori*, la consistance avec les sous-systèmes ternaires et binaires est aussi assurée.

Les potentiels de diffusion $\tilde{\mu}_i[\underline{\phi}]$ sont obtenus par dérivation fonctionnelle à partir de la

fonctionnelle d'énergie libre de Gibbs suivante :

$$\mathcal{F}[\underline{\phi}] = \int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} \sum_{i \in \mathcal{E}} \sum_{j \in \mathcal{E}} \kappa_{i,j} \vec{\nabla} \phi_i \cdot \vec{\nabla} \phi_j + a \tilde{g}^{liq}[\underline{\phi}] \right) dV \quad (2.7)$$

où

- $\tilde{g}^{liq}[\underline{\phi}]$ est la densité d'énergie libre du système homogène ;
- a est un paramètre de mise à l'échelle de l'épaisseur d'interface. En effet, dans ce modèle, on veut que l'épaisseur de l'interface soit un paramètre "numérique" qui puisse être réglé selon l'échelle visée qui sera *in fine* dictée par la taille des mailles de la CFD. On notera que cet "épaississement" de l'interface nécessite aussi de modifier les coefficients cinétiques (facteur $\frac{1}{a}$ dans l'Eq. 2.6) afin de conserver le temps macroscopique d'atteinte du régime stationnaire dans les phases ;
- $\kappa_{i,j}$ est le coefficient d'énergie associé au terme de gradient d'interface $\vec{\nabla} \phi_i \cdot \vec{\nabla} \phi_j$.

Un premier point important dans cette modélisation concerne la densité d'énergie libre $\tilde{g}^{liq}[\underline{\phi}]$ (en J/m³) que l'on cherche à relier à la connaissance que l'on a de ces systèmes sous la forme de bases de données thermodynamiques obtenues par l'approche CALPHAD. La difficulté est que pour ces systèmes complexes, ces bases font appel à des modèles de l'énergie de Gibbs qui mettent en jeu, du point de vue de la description de la composition d'une phase, des variables qui ne sont pas directement les fractions des éléments. En particulier, dans la base NUCLEA [44] utilisée ici, $\mathcal{G}_m^{liq}$, l'énergie libre de Gibbs par mole d'éléments pour la phase liquide (en J/mol) est décrite par un modèle associé et est fonction des fractions molaires des espèces $\{y_i\}_{i \in \mathcal{S}}$ avec $\mathcal{S} = \{U, Zr, Fe, O, UO_2, ZrO_2, FeO, Fe_2O_3\}$. Ainsi, en tant que tel, la connaissance des fractions molaires des éléments n'est pas suffisante pour décrire le système puisqu'il est aussi nécessaire de connaître le devenir de l'oxygène vis-à-vis de la formation de composés oxydes. Dans le travail de C. Cardon, il a été montré formellement que l'on peut fermer ce système en couplant les Eqs. 2.4 et 2.5 avec des équations de cinétiques chimiques locales décrivant les réactions redox. En l'absence de données sur les constantes des réactions mises en jeu et en accord avec les observations faites sur des essais d'oxydation des bains de corium, l'hypothèse d'un équilibre local instantané de ces réactions redox a été faite. Cette hypothèse est tout à fait justifiée par les temps caractéristiques associés au mécanisme d'échange de l'oxygène entre atomes métalliques, et à la diffusion des espèces. Sous cette hypothèse, passer de $\mathcal{G}_m^{liq}$ à $\tilde{g}^{liq}$ se réduit à un problème de minimisation sous contraintes que l'on peut écrire formellement :

$$\tilde{g}^{liq}[\underline{\phi}] = \frac{1}{V_m} \mathcal{G}_m^{liq} \left(\left\{ y_i^{loc,eq} \right\}_{i \in \mathcal{S}} [\underline{\phi}] \right) \quad (2.8)$$

où

$$\left\{ \begin{array}{l} \left\{ y_i^{loc,eq} \right\}_{i \in \mathcal{S}} [\underline{\phi}] = \arg \min_{\{y_i\}_{i \in \mathcal{S}} \in \mathcal{Y}} \left(\mathcal{G}_m^{liq} \right) \\ \text{avec } \mathcal{Y} = \left\{ \{y_i\}_{i \in \mathcal{S}} \in [0, 1]^{\dim(\mathcal{S})} : \sum_{i \in \mathcal{S}} y_i = 1 \text{ et } x_i(\{y_i\}_{i \in \mathcal{S}}) = \phi_i \right\} \end{array} \right. \quad (2.9)$$

La dernière contrainte dans ce problème d'optimisation locale traduit simplement la conservation de l'inventaire des éléments tel que donné par $[\underline{\phi}]$;

Pour le cas du système ternaire U-O-Zr (limité au domaine $0 \leq x_O \leq \frac{2}{3}$), la seule réaction

redox en jeu est :



L'équilibre associé est illustré à la Figure 2.8 où la fraction d'équilibre $y_{\text{ZrO}_2}^{\text{loc},eq}$ de l'espèce ZrO_2 est tracée en fonction de ϕ_U et de ϕ_{Zr} .

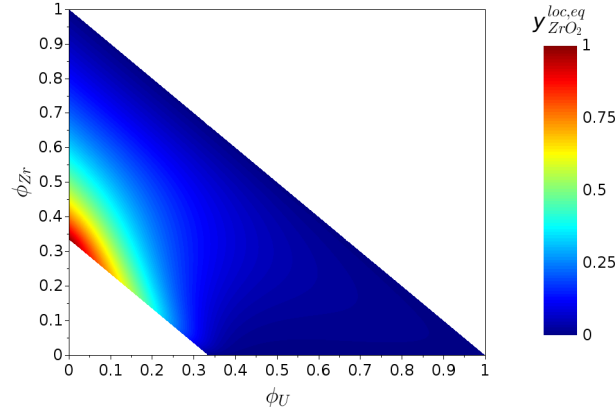


FIGURE 2.8 – Cartographie de la fraction d'équilibre $y_{\text{ZrO}_2}^{\text{loc},eq}$ en fonction des valeurs de ϕ_U et de ϕ_{Zr} pour le cas du système ternaire U-O-Zr

Dans le travail de C. Cardon, un maquetage informatique de ce modèle a été réalisé et testé sur des géométries 1D cartésiennes à l'aide de certaines fonctionnalités de la plateforme logicielle PROCOR. En particulier, le calcul de potentiels chimiques $\frac{\partial \bar{g}^{liq}}{\partial \phi_i}$ sous l'hypothèse d'équilibre local est réalisé grâce à l'interface avec le code Open-Calphad (voir [45, 40]).

2.4.2 Paramétrage et profil de compositions dans l'interface

En ce qui concerne l'interface, les paramètres associés sont a et $\kappa_{i,j}$. D'abord, pour garantir la cohérence avec la modélisation du système binaire U-O qui présente une lacune de miscibilité, les valeurs du pré-facteur a et du coefficient de gradient $\kappa_{U,U}$ sont obtenues à partir des relations analytiques que l'on peut obtenir dans le cas binaire (voir [39]) :

$$\kappa_{U,U} = C_\kappa \sigma \varepsilon \quad (2.11)$$

$$a = C_a \frac{\kappa_{U,U}}{\varepsilon^2} \quad (2.12)$$

où

- σ est la tension interfaciale, une grandeur physique “mesurable” représentant l'excès d'énergie libre pour créer une interface ;
- ε est l'épaisseur de l'interface, paramètre numérique du modèle fixé par rapport à la résolution du maillage spatial ;
- C_κ et C_a sont des constantes ne dépendant que de V_m , $\mathcal{G}_m^{liq}$ restreinte au binaire U-O et des fractions molaires d'oxygène et d'uranium d'équilibre associées.

Ensuite, comme les autres systèmes binaires ne présentent pas de lacune de miscibilité à l'état liquide¹¹, il n'y a pas de contrainte à assurer sur des valeurs de tension interfaciale de telle sorte que les autres $\kappa_{i,j}$ sont des degrés de liberté supplémentaires qui peuvent servir *a priori* au calage de notre modèle à interface diffuse sur des données de tension interfaciale.

En pratique, il a été observé que l'épaississement de l'interface et l'utilisation de $\mathcal{G}_m^{liq}$ issue d'une base CALPHAD peut conduire à un comportement non-monotone des profils de composition dans l'interface en régime stationnaire qui dépend du choix des coefficients $\kappa_{i,j}$. Ceci est illustré pour un cas d'étude dans la lacune du système ternaire U-O-Zr décrit à la Figure 2.9 pour laquelle les profils de ϕ_{Zr} en régime stationnaire sont présentés à la Figure 2.10. Ces résultats correspondent à différentes valeurs de l'épaisseur d'interface ($\varepsilon_1 = 2$ mm, $\varepsilon_2 = 5$ mm, $\varepsilon_3 = 1$ cm) et deux valeurs différentes de $\kappa_{Zr,Zr}$ (dans tous les cas, $\kappa_{U,Zr} = \kappa_{Zr,U} = 0$). Dans ce cas, la non-monotonie est associée à un "enrichissement" de l'interface en zirconium du côté de la phase supérieure. L'augmentation (ε_3) ou la diminution (ε_1) de l'épaisseur interface conduisent à l'étalement ou l'accentuation de cet enrichissement tandis que doubler la valeur de $\kappa_{Zr,Zr}$, dans ce cas, permet d'obtenir un profil de composition monotone.

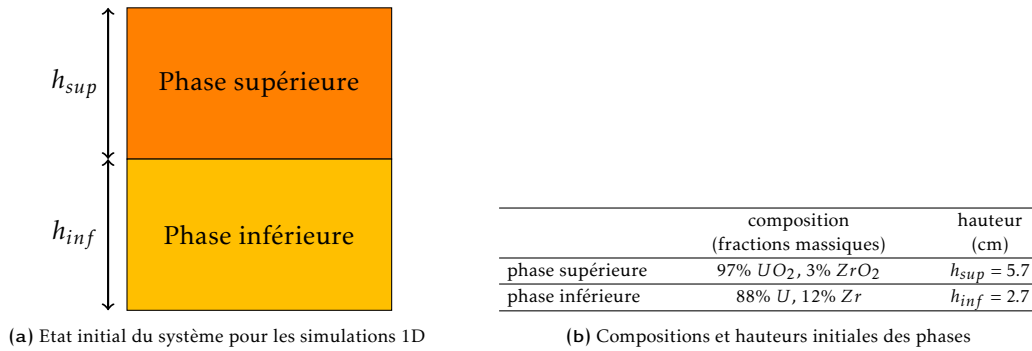


FIGURE 2.9 – Description de la “configuration n°2” de [35] pour l’étude du système U-O-Zr dans la lacune de miscibilité

De manière plus générale, si l’on note $\Delta\phi_i^{eq} = \phi_i(L) - \phi_i(0)$, le choix de $\kappa_{Zr,Zr} = \kappa_{U,U} \frac{\Delta\phi_U^{eq}}{\Delta\phi_{Zr}^{eq}}$ qui, dans ce cas, donne un facteur environ 2 entre $\kappa_{Zr,Zr}$ et $\kappa_{U,U}$ revient à imposer $\mathbb{M}_1^{\phi_U} = \mathbb{M}_1^{\phi_{Zr}}$ où

$$\mathbb{M}_1^{\phi_i} = \int_0^L z \kappa_{i,i} \left(\frac{d^2 \phi_i}{dz^2}(z) \right) dz \quad (2.13)$$

est le moment d’ordre 1 associé à l’équation stationnaire vérifié par ϕ_i avec L , la longueur du domaine spatial. Les différents tests sur le cas ternaire U-O-Zr et le cas quaternaire U-O-Zr-Fe ont montré que cette approche de sélection des $\kappa_{i,j}$, si elle permet de réduire des effets d’enrichissement ou d’appauvrissement locaux, n’est pas toujours suffisante pour garantir la monotonie des profils dans tous les cas. Par ailleurs, ces simulations ont aussi montré que la dépendance formelle des valeurs stationnaires loin de l’interface à $\frac{\varepsilon}{L}$ pouvait être très marquée pour nos systèmes si, en ordre de grandeur, $\frac{\varepsilon}{L} > 0.01$. Ces effets de “taille finie” inhérents à la simulation de systèmes n-aires ($n > 2$) ne sont bien sûr pas indépendants du comportement dans l’interface puisque les variables ϕ_i sont conservées.

11. En réalité, le système Fe-O présente une lacune de miscibilité liquide-liquide dans un domaine de température jusqu’à environ 2800-2900 K mais que nous négligeons en considérant que l’on se place à des températures supérieures.

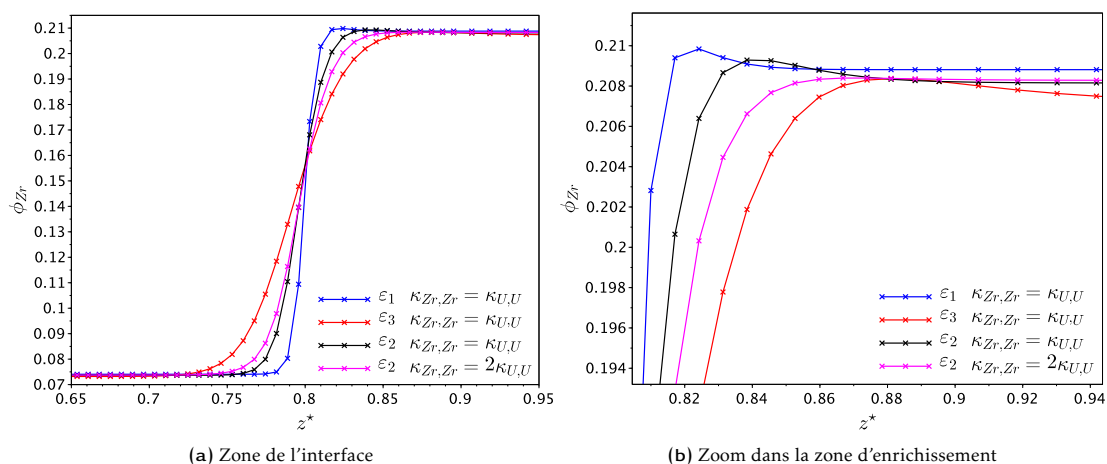


FIGURE 2.10 – Profils de composition en zirconium dans l'interface - “configuration n°2” de [35] pour l'étude du système U-O-Zr dans la lacune de miscibilité

2.4.3 Application au système U-O-Zr-Fe

Si cette thèse a laissé certaines questions ouvertes sur le choix “général” des paramètres associés à l'énergie des interfaces, ce travail a démontré la viabilité d'une telle approche et donné une perspective concrète pour prendre en compte ce phénomène de stratification dans un code CFD sur laquelle nous reviendrons au Chapitre 3.

Par ailleurs, le modèle appliqué au système U-O-Zr-Fe a pu être utilisé pour simuler une configuration représentative des protocoles d'essais expérimentaux à “petite échelle” relatifs à l'étude de la stratification d'un bain oxyde-métal. Le transitoire considéré consiste en deux ajouts successifs d'acier au-dessus d'un bain de corium sous-oxydé de masse $m_{ox}^{t_0}$ défini par le degré d'oxydation du zirconium $C_n^0 = 60\%$ et le rapport molaire $R_{U/Zr}^0 = 1.2$. Cette configuration s'apparente au protocole expérimental des essais CORDEB CD1 (voir [46] et Annexe B.2.3) mais sans croûte sous-oxydée à l'interface acier-oxyde. On procède alors en deux étapes :

1. à t_0 , une première masse d'acier $m_{steel}^{t_0} = x_{steel}^{t_0} m_{ox}^{t_0}$ est ajoutée ;
2. une fois le régime stationnaire atteint, une seconde masse d'acier $m_{steel}^{t_1} = x_{steel}^{t_1} m_{ox}^{t_0}$ est ajoutée au bain oxyde-métal à t_1 .

Ces deux étapes sont représentées schématiquement à la Figure 2.11a avec l'ensemble des paramètres physiques de chacune des phases. La Figure 2.11b présente l'évolution des densités des phases oxyde et métallique à l'équilibre thermodynamique en fonction de la quantité d'acier x_{steel} présente. On peut voir que le premier ajout d'acier à t_0 place le système, à l'équilibre thermochimique, sous le seuil d'inversion de stratification : l'état stratifié correspond à une phase métallique plus dense que la phase oxyde. Le second ajout d'acier à t_1 porte le système, à l'équilibre thermodynamique, au-dessus du seuil d'inversion : l'état stratifié du bain est une phase métallique légère au-dessus d'une phase oxyde.

Si l'on se concentre sur le second transitoire ($t \geq t_1$), la Figure 2.12 présente le profil de composition ϕ_U pour différents temps (adimensionnés t^*). Si l'on s'intéresse d'abord au régime permanent à la Figure 2.12a, on observe qu'en fin de simulation, deux interfaces oxyde-métal sont toujours présentes et que le système a atteint les mêmes compositions dans les phases métalliques supérieure et inférieure. Il s'agit en réalité de la même phase métallique correspondant à la composition d'équilibre que la stratification gravitaire amènerait en position supérieure du bain

puisque l'on a dépassé le seuil d'inversion de stratification. Sans couplage avec l'hydrodynamique, notre modèle ne peut représenter ce mouvement de la phase métallique inférieure mais il peut tout de même donner des informations pertinentes sur les transferts de masse qui ont lieu aux deux interfaces dans la première partie de ce transitoire. En particulier, à la Figure 2.12b, l'évolution en composition des phases métalliques supérieure et inférieure peut être comparée à la valeur de la fraction molaire en uranium $\tilde{\phi}_U^{met}$ dans la phase métallique au seuil d'inversion de stratification (*i.e.* pour une proportion d'acier $\tilde{x}_{steel} \approx 0.39$ telle que mise en évidence par le tracé des densités des phases oxyde et métallique à la Figure 2.11b). On voit que pour la phase métallique supérieure, la fraction en uranium est toujours inférieure à la valeur seuil $\tilde{\phi}_U^{met}$ tandis que pour la phase métallique inférieure, la fraction molaire en uranium devient localement inférieure à cette valeur seuil pour $t^* \geq t_4^*$. Ainsi, le transfert d'uranium vers cette phase métallique supérieure ne permet pas à cette phase de devenir plus lourde que la phase oxyde car la composition en uranium est toujours inférieure à la valeur seuil. En conséquence, à aucun moment durant ce second transitoire, il ne peut y avoir relocalisation d'une partie du métal supérieur sous l'oxyde. Par contre, l'appauvrissement de la phase métallique inférieure en uranium conduit bien à une phase plus légère que l'oxyde et à partir de $t^* \geq t_4^*$, des instabilités de Rayleigh-Taylor peuvent se développer.

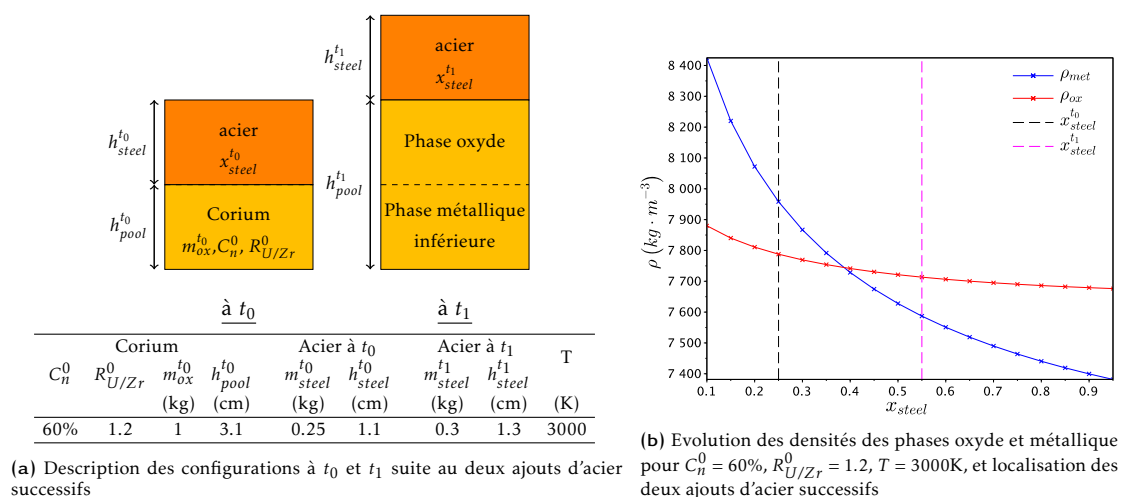


FIGURE 2.11 – Description du cas test représentatif du protocole expérimental des essais CORDEB CD1

Même si notre modèle n'est pas couplé avec un modèle d'hydrodynamique décrivant le mouvement des phases, cette analyse permet de discuter des hypothèses faites sur la remontée de la phase métallique lourde (pour laquelle aucune caractérisation expérimentale n'existe à l'heure actuelle) dans les modèles macroscopiques. En particulier dans [33], il est fait l'hypothèse que le système "passe" par le seuil d'inversion de stratification avant la remontée de la phase métallique inférieure par effet de densité. Dans notre simulation, cette hypothèse conduirait, au cours du transitoire consécutif au deuxième ajout d'acier, à une coulée partielle de l'acier enrichi en uranium dans une première phase avant la remontée de l'ensemble de la phase métallique inférieure. On voit que cette hypothèse est invalidée au sens de notre modèle pour le système de petite échelle considéré.

■ Ainsi, même si la modélisation discutée ici est incomplète, son application au système qua-

ternaire U-O-Zr-Fe peut déjà potentiellement apporter des informations pour améliorer la compréhension du transitoire d'inversion de stratification des phases oxyde et métallique. Bien sûr, ce travail n'est qu'une étape vers des simulations CFD d'un bain stratifié tenant compte de la cinétique de stratification des phases liquides ; nous y reviendrons au Chapitre 3. ■

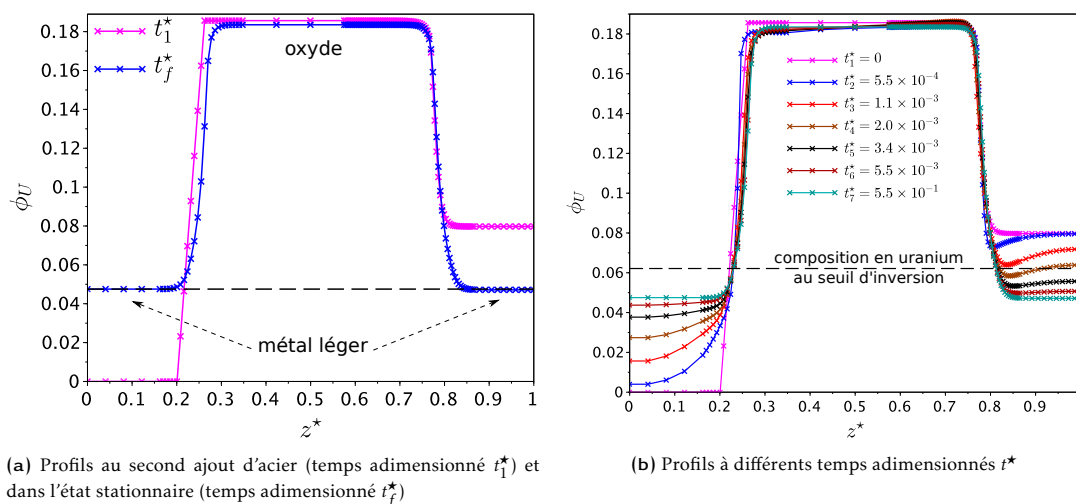


FIGURE 2.12 – Profils de composition en uranium dans la seconde partie du transitoire

2.5 Consistance thermodynamique des modèles couplés de thermohydraulique et thermochimie

Comme nous l'avons évoqué au § 2.2, la description du comportement du corium en cuve requiert la mise en œuvre de modèles relatifs à la thermohydraulique (comme illustré au § 2.3) et à la thermochimie (e.g. la modélisation discutée au § 2.4) d'un système multicomposant et multiphasique. En conséquence, se pose la question de la cohérence du couplage entre modèles thermohydrauliques et thermochimiques vis-à-vis de la représentation thermodynamique. En effet, en l'état des modèles thermohydrauliques, qu'ils soient intégraux comme dans PROCOR ou à l'échelle mésoscopique de la CFD (avec, par exemple, le travail de [47] sur un bain stratifié), le couplage avec les modèles thermochimiques (stratification du bain liquide, ségrégation des phases solides à l'interface) est soit très partiel, soit non consistant du point de vue des grandeurs thermodynamiques mises en jeu.

Cette question générale s'est posée à moi à deux reprises.

D'abord, les benchmarks rapportés dans [16] ont montré que l'introduction du modèle de cinétique de stratification de [12] dans la version propriétaire de MAAP développée par EDF amenait à une incohérence vis-à-vis des fermetures des bilans thermiques du bain stratifié employées dans ce code. En effet, dans ce code, ces bilans sont écrits en enthalpie à l'aide d'une tabulation (en composition et température) des enthalpies spécifiques, des températures de liquidus et solidus et des fractions solides. Cette tabulation implémentée dans le code MAAP a été obtenue sous des hypothèses de non-interaction entre acier fondu et espèces du système ternaire U-Zr-O qui sont incohérentes avec celles du modèle de cinétique de stratification des phases liquides (basé sur des hypothèses de macroségrégation [48]). En particulier, si l'on considère un

corium sous-oxydé interagissant avec de l'acier fondu, la température de liquidus calculée par MAAP n'est pas du tout cohérente avec la température que l'on peut évaluer par le biais d'une base thermodynamique CALPHAD. Si le modèle actuel de bain de la plateforme PROCOR ne pose pas ce problème de cohérence, c'est parce que des hypothèses simplificatrices sont faites en amont et conduisent à ne pas représenter explicitement la croûte à l'interface du bain de telle manière que les bilans thermiques des couches du bain sont écrits en température. Pour autant, un modèle de thermique transitoire de cette croûte est nécessaire afin d'améliorer la description du comportement du corium en fond de cuve comme discuté au § 2.2 ; ce développement en cours dans PROCOR nous ramène à la même problématique de couplage.

Ensuite, le modèle diffusif proposé dans la thèse de C. Cardon (cf. § 2.4.1) a été dérivé pour une configuration isotherme. Un préalable à son utilisation pour une simulation CFD de la thermohydraulique d'un bain stratifié est son extension au cas anisotherme. Cela requiert un changement de fonctionnelle thermodynamique [49] et pose la même question de couplage entre cette fois, les équations de Cahn-Hilliard, Allen-Cahn qui régissent l'évolution des paramètres d'ordre du modèle et l'équation de conservation de l'énergie.

La thèse de Vaishnvi Tiwari, débuté en 2016 en collaboration avec Mathis Plapp, s'intéresse à cette question méthodologique relative au couplage entre modèles thermohydrauliques et modèles thermochimiques. Ce travail part du constat que les divers modèles thermochimiques qui interviennent dans la description du comportement du corium se basent d'une manière ou d'une autre sur une description thermodynamique faite au travers des bases obtenues par l'approche CALPHAD. En conséquence, une idée directrice de cette thèse est d'utiliser de manière exhaustive et consistante l'information contenue dans ces bases pour l'ensemble des fermetures thermodynamiques des modèles mis en jeu. Pour préciser les conditions d'utilisation de ces données, un même "problème physique", la solidification de la croûte à l'interface d'un bain de corium sous-oxydé ($\mathcal{E} = \{U, O, Zr\}$), est abordé aux deux échelles de modélisation. Ces travaux sont limités à une représentation 1D plane de ce front de solidification sans perte de généralité vis-à-vis des questions relatives à la consistance thermodynamique du couplage. Nous nous contenterons ici de rapporter le travail réalisé sur le modèle intégral dans la première partie de cette thèse.

2.5.1 Bilans thermiques intégraux en enthalpie et "équation d'état" associée

Dans le cadre de ces modèles intégraux, la formulation des bilans thermiques en enthalpie semble pertinente et la question de la consistance thermodynamique est alors associée de ce point de vue à la construction des relations enthalpie-température qui servent de fermetures au système d'équations. Dans le cadre d'un système multicomposant, la dépendance de ces relations à la composition est primordiale [50] et doit être prise en compte de manière adéquate. Pour ce faire, de manière générale, pour une "zone" d'un modèle intégral de température $\bar{T}$ et de composition moyenne $(\bar{w}^j)_{j \in \mathcal{S}}$ définie en termes des fractions massiques $\bar{w}^j$ des espèces $j \in \mathcal{S}$, ces relations peuvent s'écrire sous la forme d'une équation d'état définie par :

$$\mathcal{H} : \bar{T}, (\bar{w}^j)_{j \in \mathcal{S}} \rightarrow \left(\omega_\gamma, \bar{h}_\gamma, \left(w_\gamma^j \right)_{j \in \mathcal{S}} \right)_{\gamma \in \mathcal{P}} \quad (2.14)$$

où $\mathcal{P}$ est l'ensemble des phases en présence dans la "zone" et pour chaque phase $\gamma \in \mathcal{P}$, ω_γ est la fraction massique, $\bar{h}_\gamma$ l'enthalpie spécifique (en J/kg) associée tandis que $(w_\gamma^j)_{j \in \mathcal{S}}$ donne la

composition de cette phase. L'enthalpie spécifique moyenne est alors donnée par $\bar{h} = \sum_{\gamma \in \mathcal{P}} \omega_{\gamma} \bar{h}_{\gamma}$.

L'idée poursuivie dans le travail de Vaishnvi Tiwari est de construire une telle équation d'état (en vue de son utilisation à une échelle "macroscopique") à partir de la description thermodynamique "microscopique" des différentes phases associées au système multicomposant considéré. Cette donnée est ici obtenue par le biais d'une base CALPHAD ; en particulier, pour chaque phase γ décrite, on accède à l'enthalpie spécifique associée $\mathcal{H}'$ fonction de la température et de la composition.

A partir de là, deux "questions" de modélisation se posent.

D'abord, quelles hypothèses de ségrégation des phases doivent être considérées suivant le domaine visé d'application de cette équation d'état ? Par exemple, lorsque la température $\bar{T}$ est inférieure à la température de liquidus $T_{liq}(w^j)_{j \in \mathcal{S}}$ associée à la composition moyenne, des hypothèses relatives au chemin de solidification doivent être faites [51] et, suivant la gamme de vitesse de solidification envisagée, la "règle du bras de levier" (équilibre) ou bien le modèle de Scheil-Gulliver est à privilégier. Des tests relatifs à ces hypothèses de ségrégation pour le corium en cuve rapportés dans [52] ont été réalisés ; ils ne sont pas discutés plus avant ici.

Ensuite, comme discuté dans [50], la fonction d'état thermodynamique $\mathcal{H}'$ n'est, en soi, valable qu'à l'échelle microscopique. Ainsi, si l'on considère une région spatiale "macroscopique", utiliser $\mathcal{H}'$ n'est strictement valide que si le domaine spatial est homogène ou bien que la fonction $\mathcal{H}'$ linéaire. Dans [53], nous nous sommes intéressés à une formulation intégrale consistante de ce problème de solidification en suivant cette approche. Ce travail s'apparente à une "étude de faisabilité" qui cherchait, entre autres, à répondre à cette seconde question.

2.5.2 Fermetures thermodynamiques d'un modèle intégral de front de solidification plan

La Figure 2.13 représente la configuration à deux zones considérée avec les principales notations associées. Il s'agit d'un "bain" de corium (Ω_p) séparé de sa croûte (Ω_s) par une interface (notée β) décrite par un front de solidification plan. Une condition adiabatique (resp. isotherme) est à la surface externe de la phase liquide (resp. solide).

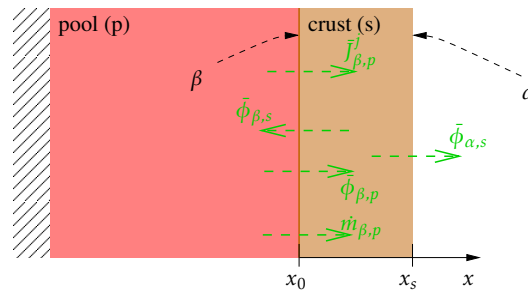


FIGURE 2.13 – Configuration du front plan de solidification

Pour ce qui est de la masse et de l'énergie, les équations de conservation associées à cette configuration sont similaires aux Eqs. 2.1, 2.2 et 2.3 du § 2.3.2 mais en conservant une formulation

en enthalpie spécifique sous la forme :

$$\frac{dm_s}{dt} = -\frac{dm_p}{dt} = \dot{m}_{\beta,p} = -\frac{S_\beta}{\bar{h}_{\beta,p} - \bar{h}_{\beta,s} + \Delta h} (\bar{\phi}_{\beta,p} + \bar{\phi}_{\beta,s}) \quad (2.15)$$

$$\frac{d}{dt} (\bar{h}_p m_p) + \bar{h}_{\beta,p} \dot{m}_{\beta,p} = -\bar{\phi}_{\beta,p} S_\beta + \dot{q}_p^{\text{mass}} m_p \quad (2.16)$$

$$\frac{d}{dt} (\bar{h}_s m_s) - \bar{h}_{\beta,s} \dot{m}_{\beta,p} = -\bar{\phi}_{\beta,s} S_\beta - \bar{\phi}_{\alpha,s} S_\alpha + \dot{q}_s^{\text{mass}} m_s \quad (2.17)$$

où

- m_p (resp. m_s) est la masse de la phase liquide (resp. solide) d'enthalpie spécifique moyenne $\bar{h}_p$ (resp. $\bar{h}_s$) et d'enthalpie spécifique à l'interface côté liquide (resp. solide) $\bar{h}_{\beta,p}$ (resp. $\bar{h}_{\beta,s}$) ; Δh est un terme singulier d'enthalpie spécifique qui sera discuté par la suite ;
- $\dot{m}_{\beta,p}$ est le débit de masse associé au front de solidification ;
- les surfaces $S_\beta = S_\alpha = S$ et les flux de chaleurs moyens sur ces surfaces $\bar{\phi}_{\beta,p}$, $\bar{\phi}_{\beta,s}$, $\bar{\phi}_{\alpha,s}$ sont définis conformément aux notations introduites à la Figure 2.13 ;
- $\dot{q}_p^{\text{mass}}$ (resp. $\dot{q}_s^{\text{mass}}$) est la densité massique de puissance pour la phase liquide (resp. solide).

Ces équations sont fermées de la même manière qu'au § 2.3.2 pour ce qui est des flux de chaleur.

Par contre, nous considérons ici le caractère multicomposant de ce système de telle sorte que s'ajoute à ces équations, la conservation de la masse des espèces sous la forme :

$$\frac{d}{dt} (\bar{w}_p^j m_p) + \bar{w}_{\beta,p}^j \dot{m}_{\beta,p} = -\bar{J}_{\beta,p}^j S_\beta \quad (2.18)$$

$$\frac{d}{dt} (\bar{w}_s^j m_s) - \bar{w}_{\beta,s}^j \dot{m}_{\beta,p} = 0 \quad (2.19)$$

$$(\bar{w}_{\beta,p}^j - \bar{w}_{\beta,s}^j) \dot{m}_{\beta,p} = -\Delta w_\beta^j \dot{m}_{\beta,p} - \bar{J}_{\beta,p}^j S_\beta \quad (2.20)$$

où

- $\bar{w}_p^j$ (resp. $\bar{w}_s^j$) est la fraction massique moyenne de l'espèce j dans la phase liquide (resp. solide) et $\bar{w}_{\beta,p}^j$ (resp. $\bar{w}_{\beta,s}^j$) la fraction massique à l'interface côté liquide (resp. solide) ; Δw_β^j est un terme singulier qui sera discuté par la suite ;
- $\bar{J}_{\beta,p}^j$ est le flux de masse de l'espèce j à l'interface côté liquide et la diffusion dans la phase solide a été négligée.

En première approche, la diffusion dans le liquide est considérée infiniment rapide de telle sorte que le liquide interfacial est à la composition moyenne *i.e.* $\bar{w}_{\beta,p}^j = \bar{w}_p^j$.¹²

Hormis les termes singuliers Δh de l'Eq. 2.15 et Δw_β^j de l'Eq. 2.20 qui seront discutés par la suite, ce système d'équations, qui sert ici à l'étude des fermetures thermodynamiques, s'apparente à un modèle "classique" de front de solidification (voir, par exemple, [55] pour des solutions analytiques dans un cas binaire avec un diagramme de phase linéarisé).

Comme au § 2.4.1, du point de vue des données CALPHAD, la représentation du système U-O-Zr est tirée de la base NUCLEA'09 et l'outil Open-Calphad tel qu'interfacé dans PROCOR est

12. Tenir compte d'une diffusion finie avec un formalisme de couche limite comme dans [54] a été investigué dans le cadre de la thèse de V. Tiwari ; du point de vue des données thermodynamiques et de la consistance, s'ajoute la question de l'évaluation de la matrice des coefficient de diffusion.

utilisé pour accéder à ces données et réaliser des calculs d'équilibre. Dans la plage de température considérée ici [1800, 3100]K et pour les compositions mises en jeu, seules la phase liquide (notée LIQUID) et la phase solide cubique face centrée (U,Zr)O_{2-x} (notée C1_FCC) décrites dans la base par un modèle associé sont utilisées. Leurs constituants sont les espèces stœchiométriques $\mathcal{S} = \{U, UO_2, Zr, ZrO_2, O\}$.

Par le biais d'un calcul Open-Calphad de température de transition de phase (apparition de la phase C1_FCC), l'hypothèse "classique" d'équilibre local à l'interface liquide/solide permet d'obtenir à chaque instant du transitoire la température d'interface, égale à la température de liquidus $T_{liq}(\bar{w}_{\beta,p}^j)_{j \in \mathcal{S}}$ associée à la composition locale du liquide ainsi que $(\bar{w}_{\beta,s}^j)_{j \in \mathcal{S}}$, la composition du solide qui se forme.

Pour ce qui est l'équation d'état (Eq. 2.14) pour l'évaluation des enthalpies spécifiques, ce modèle permet d'utiliser une formulation simplifiée. En effet, pour un système fermé et sous l'hypothèse $\bar{w}_{\beta,p}^j = \bar{w}_p^j$, Ω_p reste monophasique liquide à tout instant de telle sorte que l'évaluation de $\bar{h}_p$ et $\bar{h}_{\beta,p}$ peut directement se faire à partir de $\mathcal{H}^{LIQUID}$ telle que fournie par la base CALPHAD. En ce qui concerne le solide Ω_s , l'hypothèse d'équilibre local prédit la formation d'une phase C1_FCC. Si l'on considère alors que le solide initial est aussi une phase C1_FCC, on a alors un domaine Ω_s lui aussi monophasique et l'on peut calculer $\bar{h}_s$ et $\bar{h}_{\beta,s}$ à l'aide de $\mathcal{H}^{C1_FCC}$.

Précisons maintenant le sens des termes interfaciaux Δh et Δw_{β}^j introduits dans les Eqs. 2.15 et 2.20. Ces termes, que l'on ne retrouve pas dans la littérature classique discutant de ce modèle de front de solidification plan, sont nécessaires pour traduire l'éventuelle "redistribution" à l'interface des éléments en termes de constituants étant donné que $\text{card}(\mathcal{S}) > \text{card}(\mathcal{E})$ pour ce système oxyde.

Ainsi, dans notre cas, la phase solide (U,Zr)O_{2-x} associée à cet équilibre local prédit est légèrement sous-stœchiométrique (*i.e.* $x > 0$) ce qui, vis-à-vis du modèle associé de cette phase C1_FCC, se traduit par une fraction massique non nulle (quelques %) pour le constituant U.

On peut interpréter cela comme un déplacement de la réaction redox $UO_2 + Zr \xrightleftharpoons[(2)]{(1)} ZrO_2 + U$

dans la direction (1) dans le liquide interfacial. Les termes singuliers Δh et Δw_{β}^j sont là pour tenir compte dans les bilans des Eqs. 2.15 et 2.20 de ce processus redox qui coïncide avec la solidification. Plus précisément, pour $\bar{w}_{\beta,p}^j$ et $\bar{w}_{\beta,s}^j$ donnés, le variation de masse des espèces à l'interface permet de définir Δw_{β}^j par :

$$\Delta w_{\beta}^j = \bar{w}_{\beta,s}^j + (\alpha - 1) \bar{w}_{\beta,p'}^j - \alpha \bar{w}_{\beta,p}^j \quad (j \in \mathcal{S}) \quad (2.21)$$

où α est la masse de liquide interfacial de composition $(\bar{w}_{\beta,p}^j)_{j \in \mathcal{S}}$ nécessaire à la solidification d'une unité de masse de solide de composition $(\bar{w}_{\beta,s}^j)_{j \in \mathcal{S}}$. $(\bar{w}_{\beta,p'}^j)_{j \in \mathcal{S}}$ est alors la composition de la masse $(\alpha - 1)$ du liquide "restant". Afin de clore le système et permettre le calcul de $(\bar{w}_{\beta,p'}^j)_{j \in \mathcal{S}}$, de manière consistante avec l'hypothèse d'équilibre local à l'interface, nous ajoutons l'hypothèse que la réaction redox $UO_2 + Zr \xrightleftharpoons[(2)]{(1)} ZrO_2 + U$ est à l'équilibre dans ce liquide "restant".¹³ A partir

13. On notera que cette hypothèse (et le type de calcul associé) est identique à celle faite dans le modèle de Cahn-Hilliard discuté au § 2.4.1.

de là, Δh est interprété comme l'enthalpie spécifique de réaction associée à la redistribution de l'oxygène dans le liquide interfacial et est évalué à l'aide de $\mathcal{H}^{\text{LIQUID}}$.

Ce modèle, formulé de manière consistante vis-à-vis des données thermodynamiques fournies par un base CALPHAD, a été testé sur des transitoires de solidification pour un corium de composition définie par $R_{U/Zr}^0 = 1.2$ et divers degrés d'oxydation $C_n^0 \in \{30\%, 70\%, 100\%\}$. Les conditions initiales de ses trois cas sont les mêmes hormis la température initiale du liquide qui est ajustée de manière à avoir à peu près le même écart de température $\bar{T}_p - T_{liq}(\bar{w}_{\beta,p}^j)_{j \in \mathcal{S}}$ initial (c'est lui qui conditionne au premier ordre le flux de chaleur $\bar{\phi}_{\beta,p}$).

D'abord, on a pu vérifier *a posteriori* sur ces transitoires que l'utilisation de $\mathcal{H}^{\text{LIQUID}}$ et $\mathcal{H}^{\text{C1_FCC}}$ à l'échelle macroscopique était bien justifiée par le fait que ces fonctions soient quasiment linéaires dans la gamme de température et de composition couverte. A titre d'exemple, la variation de $\bar{h}_s$ en fonction de la température pour la composition initiale (resp. à l'état stationnaire) notée $\bar{w}_0^j$ (resp. $\bar{w}_\infty^j$) est présentée à la Figure 2.14a ; la droite de régression pour chacune des courbes est tracée en pontillés. C'est sur cette enthalpie spécifique du solide fonction de la température que l'écart-type des résidus (associé à la régression linéaire) est maximum (pour le transitoire $C_n^0 = 70\%$) de l'ordre de 0.2% (*i.e.* la capacité calorifique du solide dépend légèrement de la température).

Ensuite, pour ce qui est du processus redox coïncidant avec la solidification pour les transitoires $C_n^0 \in \{30\%, 70\%\}$, on a pu observé qu'il est renforcé au cours du transitoire (*i.e.* α augmente) à mesure que la fraction massique en élément U décroît. Par contre, l'enthalpie spécifique associée Δh est, dans tous les cas, petite par rapport à la chaleur latente de solidification $\bar{h}_{\beta,p} - \bar{h}_{\beta,s}$ comme en atteste la Figure 2.14b avec l'évolution temporelle des différences d'enthalpies spécifiques. Ainsi, à $t = 0$, $|\Delta h|$ ne représente au plus qu'environ 2% de $(\bar{h}_{\beta,p} - \bar{h}_{\beta,s})$ dans le cas $C_n^0 = 30\%$.

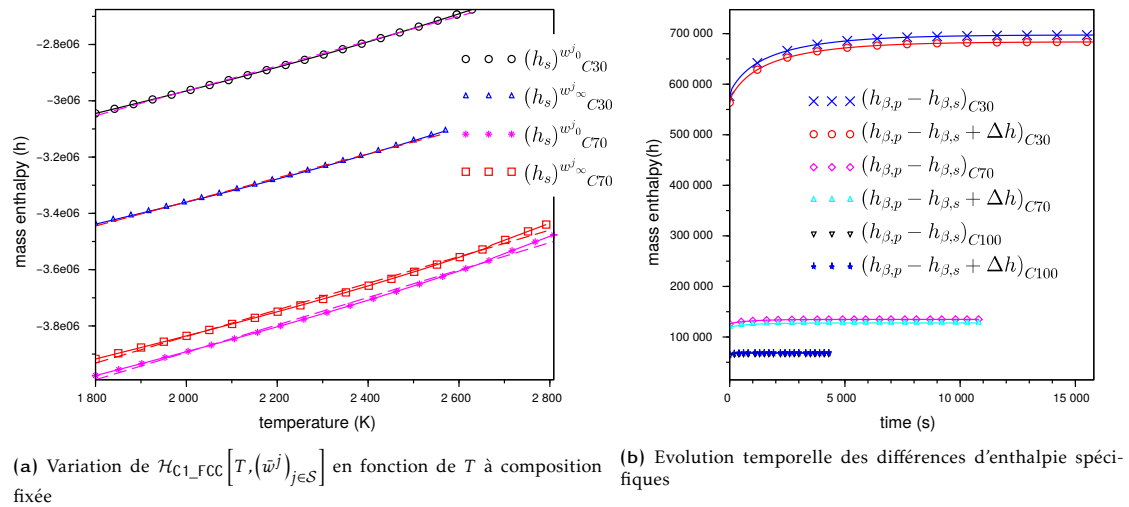


FIGURE 2.14 – Enthalpies spécifiques sur les trois transitoires $C_n^0 \in \{30\%, 70\%, 100\%\}$ (notés ici C30, C70, C100)

Par contre, cette même Figure 2.14b montre une large différence de chaleur latente de solidification suivant le degré d'oxydation. A $t = 0$, la chaleur latente pour $C_n^0 = 30\%$ est environ 5 (resp. 9) fois plus élevée que celle pour $C_n^0 = 70\%$ (resp. $C_n^0 = 100\%$). Une telle variation a bien sûr un impact majeur sur le transitoire (vis-à-vis du temps pour atteindre le régime stationnaire).

Par ailleurs, cette variation importante n'est pas du tout reproduite lorsque cette chaleur latente est évaluée à la manière de ce qui est fait, par exemple, dans le code d'interaction corium-béton TOLBIAC-ICB [56] *i.e.* par une loi de mélange (pondération par les fractions massiques) des valeurs des chaleurs latentes pour les espèces "pures" (UO_2 , ZrO_2 , ...). Si cette loi de mélange est *a priori* non justifiée physiquement, cette variation importante calculée par la base CALPHAD reste à prendre avec précaution. En effet, elle est principalement due à la variation de l'enthalpie spécifique du liquide qui dépend fortement de la teneur en oxygène ; à $t = 0$, $\bar{h}_{\beta,p}$ pour $C_n^0 = 30\%$ est environ 21% (resp. 32%) plus élevée que pour $C_n^0 = 70\%$ (resp. $C_n^0 = 100\%$) tandis que la différence sur $\bar{h}_{\beta,s}$ est limitée à environ 7% (resp. 14%). Or, ces valeurs d'enthalpies pour le liquide sont largement incertaines car les mesures de calorimétrie pour ces liquides à très haute température sont quasiment inexistantes.¹⁴

■ Ainsi, les travaux relatifs à ce modèle de solidification ont montré que l'utilisation exhaustive des données d'une base CALPHAD permet d'assurer la cohérence thermodynamique du modèle. Ils ont aussi montré qu'une telle approche nécessite pour des simulations "fiables" que ces bases soient consolidées avec des mesures thermodynamiques "directes" (capacité calorifique, enthalpie de changement de phase). Notons que, dans la démarche associée à PROCOR discutée au § 2.1, cette formulation des modèles vis-à-vis de ces données CALPHAD ouvre la porte à des études de sensibilités structurées qui permettront de bien définir ce besoin de consolidation pour la simulation du comportement du corium. Nous reviendrons sur ce point au Chapitre 3. ■

2.6 Postambule

Pour terminer ce chapitre, sont présentés succinctement ici des travaux de recherche connexes aux travaux de modélisation du comportement du corium en cuve que je viens d'aborder.

D'abord, pour ce qui est de la cinétique de stratification discutée au § 2.4, en complément du travail de modélisation présenté au § 2.4.1, j'ai participé à la définition du besoin et la construction d'un programme d'études de faisabilité relatif à un nouveau dispositif expérimental consacré à cette thématique. Ce dispositif est associé au projet d'une nouvelle plateforme expérimentale (PLINIUS2 [58]) au CEA de Cadarache. Les essais à moyenne échelle visés s'apparentent à l'essai MASCA-RCW discuté plus tôt mais avec un suivi "en ligne" de la position des phases métalliques au cours des transitoires de stratification. C'est sur le développement de techniques de mesure associées que l'effort de R&D porte principalement. Pour ce faire, trois techniques ont été retenues dans cette phase d'étude de faisabilité démarrée en 2016 et qui s'achèvera en 2019 [59, 60] : une mesure ultrasonore axiale par échos impulsions à l'aide d'un guide d'onde en matériau réfractaire, une caractérisation électromagnétique du bain de corium grâce à des bobines et des capteurs placés autour du dispositif de chauffage et une imagerie 2D par rayons X.

Ensuite, toujours sur cette même thématique, au § 2.4, nous n'avons pas discuté du rôle d'une éventuelle croûte à l'interface oxyde-métal sur la stratification du corium en cuve. En effet, dans tous les essais du programme MASCA, les interactions entre l'acier et un bain oxyde ont été étudiées dans des configurations sans croûte à l'interface. Pour autant, dans la situation réacteur (voir Figure 2.3), une croûte réfractaire à l'interface peut *a priori* être présente et d'épaisseur faible (millimétrique au sens du bilan thermique stationnaire des modèles intégraux d'un bain stratifié). Dans le cas (incertain mais possible [61]) où cette croûte est stable mécaniquement,



Annexe B.2.3

14. L'adaptation de technique de mesure éprouvée telle que la calorimétrie à chute [57] pour une application au corium est un véritable axe de recherche à part entière pour mes collègues Christine Guéneau et Stéphane Gossé du DPC/SCCME/LM2T du CEA Saclay.



les deux essais à petite échelle CORDEB CD1 [46] (menés dans l'installation RASPLAV-3 du NITI en Russie) se sont intéressés à l'impact de cette croûte sur la cinétique de stratification. Ils ont démontré que cette croûte ne forme pas une barrière "imperméable" à l'acier fondu et que la cinétique de stratification est significativement ralentie. Afin d'aller plus loin, des essais complémentaires de deux types sont en cours de réalisation dans le cadre du projet H2020 IVMR pour permettre d'avancer *in fine* sur la modélisation des phénomènes mis en jeu :

- les essais du programme CORDEB2 qui reprennent le protocole des essais CD1 pour une analyse de sensibilité à la masse initiale d'acier mis en présence, le degré d'oxydation initial du corium, la température de l'acier ;
- des essais "analytiques" (CORMET) dans l'installation VITI de la plateforme PLINIUS au CEA de Cadarache à plus petite échelle dans une configuration "quasi isotherme" et qui se concentre sur l'interaction (dissolution, imprégnation) d'un corium solide sous-oxydé (représentatif de la croûte) avec de l'acier fondu [62].

En particulier, ces derniers essais sont menés dans le cadre du stage post-doctoral d'Adrien Pivano démarré en octobre 2017. Je participe au suivi de ce travail dont l'encadrant principal est mon collègue Pascal Piluso et, plus généralement, en interface avec mon activité de modélisation, je participe à la définition et à l'interprétation de ces essais.

Pour finir, un autre aspect relatif à la thermochimie du corium non discuté au § 2.4 est l'oxydation à son interface avec une phase gazeuse oxydante (vapeur d'eau en particulier). Si ce phénomène peut avoir un impact sur la cinétique de stratification du corium en cuve, c'est d'abord dans le contexte de l'interaction corium-eau et du risque d'explosion vapeur associé [63] que je m'y suis intéressé au travers d'une collaboration avec mes collègues Jules Delacroix et Pascal Piluso. Dans ce cadre, en suivant une approche similaire à celle des thèses de C. Cardon et V. Tiwari vis-à-vis de l'utilisation des données thermodynamiques issues d'une base CALPHAD, un premier travail de modélisation de la diffusion de l'oxygène dans une goutte de corium (sur)stœchiométrique en atmosphère oxydante [64] a été réalisé.

Annexe B.2.4

Références

- [1] H. Alsmeyer, E. Altstadt, M. Barrachin, A. Bentaib, J. Birchley, M. Burger, C. Caroli, M. Cranga, T. N. Dinh, J.-P. V. Dorsselaere, G. Ducros, P. Eisert, F. Fichot, M. Fischer, J. J. Foit, S. Guentay, T. Haste, L. Herranz, Z. Hozer, C. Housiadis, I. Ivanov, T. Jordan, C. Journeau, M. Kissane, I. Kljenak, M. Koch, J.-S. Lamy, J.-C. Latche, T. Lind, W. Ma, D. Magallon, M. Mathews, L. Meyer, C. Mueller, P. Piluso, H. Schnadt, A. Schumm, B. R. Sehgal, J.-M. Seiler, J. Sievers, C. Spengler, B. Spindler, B. Tourniaire, K. Trambauer, G. Vayssier, J.-M. Veteau, Nuclear Safety in Light Water Reactors, Academic Press, Boston, 2012.
- [2] J. Seiler, B. Tourniaire, A phenomenological analysis of melt progression in the lower head of a pressurized water reactor, Nuclear Engineering and Design 268 (2014) 87 – 95.
- [3] B. Tourniaire, B. Spindler, G. Ratel, J. M. Seiler, B. Iooss, M. Marquès, F. Gaudier, G. Greffier, "the LEONAR code : a new tool for PSA level 2 analyses", in : Proc. of Joint OECD/NEA - EC/SARNET2 Workshop on In-Vessel Coolability, Vol. NEA/CSNI/R(2010)11, p. 105-121, 2009.
- [4] **R. Le Tellier**, L. Saas, F. Payot, Phenomenological analyses of corium propagation in LWRs : the PROCOR software platform, in : Proc. of the 7th European Review Meeting on Severe Accident Research ERMSAR-2015, Marseille, France, 2015.

- [5] Fauske & Associates Inc., MAAP5 - modular accident analysis program for LWR power plants, in : Code Structure and Theory, Vol. 2, Electric Power Research Institute, 2008, Ch. 3.
- [6] H. Esmaili, M. Khatib-Rahbar, Analysis of in-vessel retention and ex-vessel fuel coolant interaction for AP1000, Tech. Rep. NUREG/CR-6849 ERI/NRC 04-201, U.S. Nuclear Regulatory Commission, Office of Nuclear Regulatory Research (2004).
- [7] N. Marie, A. Bachrata, J. Seiler, F. Barjot, A. Marrel, S. Gossé, F. Bertrand, A physical tool for severe accident mitigation studies, Nuclear Engineering and Design 309 (2016) 224 – 235.
- [8] T. G. Theofanous, C. Liu, S. Addition, S. Angelini, O. Kymalainen, T. Salimassi, In-vessel coolability and retention of a core melt, Nuclear Engineering and Design 169 (1997) 1–48.
- [9] S. V. Bechta, V. B. Khabensky, V. S. Granovsky, E. V. Krushinov, S. A. Vitol, V. V. Gusarov, V. I. Almiashhev, D. B. Lopukh, W. Tromm, D. Bottomley, F. Fischer, P. Piluso, A. Miassoedov, E. Altstadt, H. G. Willschütz, F. Fichot, Experimental study of interactions between suboxidized corium and reactor vessel steel, in : Proc. of Int. Congress on Advances in Nuclear Power Plants ICAPP 2006, ANS, Reno, USA, 2006.
- [10] O. Kymäläinen, H. Tuomisto, T. G. Theofanous, In-vessel retention of corium at the Loviisa plant, Nuclear Engineering and Design 169 (1997) 109–130.
- [11] J. L. Rempe, D. L. Knudson, M. Cebull, C. L. Atwood, Potential for in-vessel retention through ex- vessel flooding, in : Proc. of the OECD/CSNI Workshop on In-Vessel Core Debris Retention and Coolability, 1998.
- [12] **R. Le Tellier**, L. Saas, S. Bajard, Transient stratification modelling of a corium pool in a LWR vessel lower head, Nuclear Engineering and Design 287 (2015) 68–77.
- [13] F. Fichot, L. Carénini, N. Bakouta, H. Esmaili, L. Humphries, T. Laato, **R. Le Tellier**, L. Saas, I. Melnikov, P. Pandazis, R. J. Park, A. Philippov, V. Strizhov, Elaboration of a PIRT for the modelling of in-vessel retention, in : Proc. of the 9th European Review Meeting on Severe Accident Research ERMSAR2019, Prague, Czech Republic, 2019.
- [14] L. Carénini, F. Fichot, N. Bakouta, **R. Le Tellier**, L. Viot, I. Melnikov, P. Pandazis, A. Filippov, Main outcomes from the ivr code benchmark performed in the IVMR project, in : Proc. of the 9th European Review Meeting on Severe Accident Research ERMSAR2019, Prague, Czech Republic, 2019.
- [15] Fauske & Associates Inc., MAAP4 - modular accident analysis program for LWR power plants, in : Code Structure and Theory, Vol. 2, Electric Power Research Institute, 1994, Ch. 1.
- [16] N. Bakouta, **R. Le Tellier**, L. Saas, Assessment of advanced corium-in-lower-head models in MAAP and PROCOR codes, in : Proc. of the 7th European Review Meeting on Severe Accident Research ERMSAR, Marseille, France, 2015.
- [17] L. Carénini, J. Fleurot, F. Fichot, Validation of ASTEC V2 models for the behaviour of corium in the vessel lower head, Nuclear Engineering and Design 272 (2014) 152 – 162.
- [18] M. Fischer, P. Levi, G. Langrock, A. A. Sulatsky, E. V. Krushinov, The impact of thermal chemical phenomena on the heat fluxes into the RPV during in-vessel melt retention, in : Proc. of Int. Congress on Advances in Nuclear Power Plants ICAPP 2011, ANS, Nice, France, 2011.
- [19] F. Fichot, L. Carénini, M. Sangiorgi, S. Hermsmeyer, A. Miassoedov, S. Bechta, J. Zdarek, D. Guenadou, Some considerations to improve the methodology to assess in-vessel retention strategy for high-power reactors, Annals of Nuclear Energy 119 (2018) 36 – 45.

- [20] F. Fichot, L. Carénini, Some consequences of material interactions for in-vessel melt retention, in : Proc of International Congress on Advances in Nuclear Power Plants. ICAPP 2015, Nice, France, 2015.
- [21] C. Villermaux, Modélisation physique et numérique de la convection naturelle dans une couche de fluide de faible rapport d'aspect dans le cadre des études d'accidents graves de réacteurs à eau sous pression, Ph.D. thesis, Institut National Polytechnique de Grenoble (1999).
- [22] S. Globe, D. Dropkin, Natural convection heat transfer in liquids confined by two horizontal plates and heated from below, *Journal of Heat Transfer* 81 (1959) 24–28.
- [23] S. W. Churchill, H. H. S. Chu, Correlating equations of laminar and turbulent free convection from a vertical plate, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 18 (1975) 1323–1329.
- [24] D. A. Nield, Surface tension and buoyancy effects in cellular convection, *Journal of Fluid Mechanics* 19 (3) (1964) 341–352.
- [25] L. Saas, **R. Le Tellier**, E. Skrzypek, Rayleigh-Bénard and Bénard-Marangoni convection in a thin metallic layer on top of corium pool, in : Proc. of the 8th European Review Meeting on Severe Accident Research ERMSAR-2017, Warsaw, Poland, 2017.
- [26] C. Le Guennic, L. Saas, **R. Le Tellier**, Y. Wu, M. Guingo, L. J., Contribution of CFD studies to ivr assessment, in : Proc. of the 8th European Review Meeting on Severe Accident Research ERMSAR-2017, Warsaw, Poland, 2017.
- [27] M. Peybernes, L. Saas, **R. Le Tellier**, C. Dang, Thermalhydraulic DNS of a thin metallic layer : application to the evaluation of nuclear reactor severe accident mitigation strategy, in : Proc. of the 9th European Review Meeting on Severe Accident Research ERMSAR2019, Prague, Czech Republic, 2019.
- [28] **R. Le Tellier**, E. Skrzypek, L. Saas, On the treatment of plane fusion front in lumped parameter thermal models with convection, *Applied Thermal Engineering* 120 (2017) 314–326.
- [29] C. An, J. Su, Lumped parameter model for one-dimensional melting in a slab with volumetric heat generation, *Applied Thermal Engineering* 60 (1-2) (2013) 387–396.
- [30] J. Crepeau, A. Siahpush, Approximate solutions to the Stefan problem with internal heat generation, *Heat and Mass Transfer* 44 (7) (2008) 787–794.
- [31] L. Viot, Coupling and synchronisation of models in a code for severe accidents in nuclear reactors, Theses, Université Paris-Saclay (Oct. 2018).
URL <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01905094>
- [32] M. Peybernes, **R. Le Tellier**, L. Viot, A. Drouillet, L. Saas, Hybrid lumped/distributed parameter model for treating the vessel lower head ablation by corium during a LWR severe accident, in : Proc. of the 27th Int. Conf. Nuclear Energy for New Europe NENE 2018, Portoróz, Slovenia, 2018.
- [33] L. Carénini, F. Fichot, The impact of transient behaviour of corium in the lower head of a reactor vessel for in-vessel melt retention strategies, in : Proc. of ICONE 24, Charlotte, North Carolina, 2016.
- [34] D. F. Tsurikov, V. F. Strizhov, S. V. Bechta, V. N. Zagriazkin, N. P. Kiselev, Main results of MASCA1 and 2 projects, Tech. rep., RRC Kurchatov Institute (2007).
- [35] C. Cardon, Modélisation de la diffusion multi-composants dans un bain de corium diphasique oxyde-métal par une méthode d'interface diffuse, Ph.D. thesis, Université Paris-Saclay (2016).

- [36] N. Moelans, B. Blanpain, P. Wollants, An introduction to phase-field modeling in microstructure evolution, *Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry* 32 (2008) 268–294.
- [37] H. Lukas, S. G. Fries, B. Sundman, *Computational Thermodynamics : The Calphad Method*, Cambridge University Press, 2007.
- [38] M. H. Braga, J. C. R. E. Oliveira, L. F. Malheiros, J. A. Ferreira, Phase field simulations in miscibility gaps, *Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry* 33 (2009) 237–243.
- [39] C. Cardon, **R. Le Tellier**, M. Plapp, Modelling of liquid phase segregation in the uranium-oxygen binary system, *CALPHAD : Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry* 52 (2016) 47–56.
- [40] B. Sundman, U. R. Kattner, C. Sigli, M. Stratmann, **R. Le Tellier**, M. Palumbo, S. G. Fries, The OpenCalphad thermodynamic software interface, *Computational Materials Science* 125 (2016) 188–196.
- [41] C. Cardon, **R. Le Tellier**, M. Plapp, T. Philippe, Diffuse-interface modelling of multi-component diffusion and phase separation in the U-O-Zr ternary system, *Computational Materials Science* (in preparation).
- [42] R. N. Hills, P. H. Roberts, On the motion of a fluid that is incompressible in a generalized sense and its relationship to the boussinesq approximation, *Stability and Applied Analysis of Continuous Media* 1 (3) (1991) 205–212.
- [43] J. O. Andersson, J. Agren, Models for numerical treatment of multicomponent diffusion in simple phases, *Journal of Applied Physics* 72 (4).
- [44] B. Cheynet, P. Chevalier, E. Fischer, Thermosuite, *Calphad* 26 (2) (2002) 167–174.
- [45] B. Sundman, U. R. Kattner, M. Palumbo, S. G. Fries, OpenCalphad - a free thermodynamic software, *Integrating Materials and Manufacturing Innovation* 4 (1).
- [46] V. I. Almjashev, V. S. Granovsky, V. B. Khabensky, S. Y. Kotova, E. V. Krushinov, A. A. Sulatsky, S. A. Vitol, V. V. Gusarov, F. Fichot, B. Michel, P. Piluso, **R. Le Tellier**, M. Fischer, C. Le Guennic, N. Bakouta, Experimental study of transient phenomena in the three-liquid oxidic-metallic corium pool, *Nuclear Engineering and Design* 332 (2018) 31 – 37.
- [47] M. Fukasawa, S. Hayakawa, M. Saito, Thermal-hydraulic analysis for inversely stratified molten corium in lower vessel, *Journal of Nuclear Science and Technology* 45 (9) (2008) 873–888.
- [48] J. M. Seiler, A. Fouquet, K. Froment, F. Defoort, Theoretical analysis for corium pool with miscibility gap, *Nuclear Technology* 141 (2003) 233–243.
- [49] O. Penrose, P. C. Fife, Thermodynamically consistent models of phase-field type for the kinetics of phase transitions, *Physica D* 43 (1990) 44–62.
- [50] M. Schneider, C. Beckermann, Effects of simplified enthalpy relations on the prediction of heat transfer during solidification of a lead-tin alloy, *Applied Mathematical Modelling* 15 (11-12) (1991) 596–605.
- [51] Q. Du, D. G. Eskin, L. Katgerman, Modeling macrosegregation during direct-chill casting of multicomponent aluminum alloys, *Metallurgical and Materials Transactions A* 38 (2007) 180–189.
- [52] **R. Le Tellier**, B. Habert, V. Tiwari, N. Bakouta, Consistent use of CALPHAD data for in-vessel corium pool modeling : some analytical and practical considerations, in : *Proc. of the 9th European Review Meeting on Severe Accident Research ERMSAR2019*, Prague, Czech Republic, 2019.

- [53] V. Tiwari, **R. Le Tellier**, On the use of CALPHAD-based enthalpy-temperature relations in suboxidized corium plane front solidification modelling, *Annals of Nuclear Energy* 117 (2018) 175–182.
- [54] J. M. Seiler, H. Combeau, Transient interface temperature on a vertical surface in multi-component solid-liquid systems with volume heating. application to various severe accident situations, *Nuclear Engineering and Design* 278 (2014) 199–208.
- [55] H. E. Huppert, M. G. Worster, Dynamic solidification of a binary melt, *Nature* 314 (6013) (1985) 703–707.
- [56] B. Spindler, B. Tourniaire, J. M. Seiler, Simulation of MCCI with the TOLBIAC-ICB code based on the phase segregation model, *Nuclear Engineering and Design* 236 (2006) 2264–2270.
- [57] B. Legendre, D. de Girolamo, P. Le Parlouër, B. Hay, Détermination des capacités thermiques en fonction de la température par calorimétrie de chute, *Revue française de métrologie* 5 (2006) 23–30.
- [58] C. Journeau, L. Buffe, J. F. Haquet, P. Piluso, G. Willermoz, Needs for large mass prototypic corium experiments : the PLINIUS-2 platform, in : *Proc. of 16th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics NURETH-16*, Chicago, USA, 2015.
- [59] L. Berge, N. Estre, D. Tisseur, E. Payan, D. Eck, V. Bouyer, N. Cassiaut-Louis, C. Journeau, **R. Le Tellier**, S. Singh, E. Pluyette, Fast high-energy x-ray imaging for severe accidents experiments on the future plinius-2 platform, *IEEE Transactions on Nuclear Science* (2018) 1–1.
- [60] D. Tisseur, M. Cavaro, F. Rey, K. Paumel, N. Chikhi, J. Delacroix, P. Fouquart, **R. Le Tellier**, V. Bouyer, Study of online measurements techniques of metallic phases spatial distribution into a corium pool, in : *Proc. of Int. Conf. on Advancements in Nuclear Instrumentation Measurement Methods and their Applications. ANIMMA 2019*, Portoróz, Slovenia, 2019.
- [61] P. Gu, C. K., W. J., Research on the mechanism of debris bed stratification in vessel lower plenum, in : *Proc of 6th European Review Meeting on Severe Accident Research (ERMSAR-2013)*, Avignon, France, 2013.
- [62] A. Pivano, P. Piluso, N. Chikhi, P. Fouquart, J. Delacroix, **R. Le Tellier**, Experimental studies of molten steel - suboxidized corium crust interaction for IVR application, in : *Proc. of the 9th European Review Meeting on Severe Accident Research ERMSAR2019*, Prague, Czech Republic, 2019.
- [63] G. Berthoud, Vapor explosions, *Annual Review of Fluid Mechanics* 32 (1) (2000) 573–611.
- [64] J. Delacroix, **R. Le Tellier**, P. Piluso, Oxygen diffusion in liquid (over)stoichiometric corium, *Nuclear Engineering and Design* 337 (2018) 148 – 160.

Perspectives de recherche

Après la synthèse de travaux des Chapitres 1 et 2, je vais ici aborder mes perspectives de recherche à court et plus long termes.

En physique du corium

Bien sûr, une majeure partie de ces activités à venir sont dans la continuité directe de ce qui a été présenté au Chapitre 2 sur la thématique du comportement du corium et plus particulièrement de la modélisation aux échelles macroscopique et mésoscopique des phénomènes d'interface.

D'abord, sur la base des résultats encourageants de la thèse de Clément Cardon, le travail relatif à la modélisation de la cinétique de stratification par une méthode de champ de phase se poursuit au travers :

- de la seconde partie de la thèse de Vaishnvi Tiwari qui devrait répondre à la question de la formulation thermodynamique consistante de telles méthodes dans le cadre anisotherme qui nous intéresse *in fine* pour le corium ;
- du stage post-doctoral de Raphaël Zanella (hébergé au laboratoire PMC de l'Ecole Polytechnique et encadré avec Hervé Henry et Mathis Plapp) qui démarre en octobre 2018 sur le couplage entre le modèle par champ de phase proposé dans la thèse de Clément Cardon et l'hydrodynamique telle que décrite par l'équation de Navier-Stokes sous l'approximation de Boussinesq.

Ces travaux complémentaires ont pour but *in fine* de permettre des simulations CFD d'un bain stratifié en tenant compte de la cinétique de stratification des phases liquides. Ces travaux sont soutenus par EDF Lab dans la perspective d'implanter un tel modèle par champ de phase dans le code NEPTUNE_CFD principalement développé au département MFEE d'EDF Lab à Chatou. Bien sûr, ces travaux de modélisation vont de pair avec le développement d'un dispositif expérimental d'essais dédié à cette thématique de la stratification sur la nouvelle plateforme expérimentale PLINIUS-2 (*cf.* § 2.6). Dans ce cadre, la conception de la grille expérimentale et l'interprétation de ces expériences, en lien avec le développement des modélisations associées est une perspective claire dans mon travail.

Un autre axe important a trait à la modélisation des croûtes à l'interface des phases liquides. Nous nous sommes limités jusqu'ici (au travers des travaux de la thèse Vaishnvi Tiwari et du

modèle développé dans PROCOR) à la représentation d'un front de solidification à l'interface latérale du bain oxyde de manière à tenir compte de cette "résistance thermique" à l'interface avec la paroi de la cuve. Il va nous falloir maintenant aborder la modélisation des phénomènes (dissolution, imprégnation) relatifs à l'interaction entre cette croûte et une phase métallique liquide tels qu'étudiés dans le cadre du stage post-doctoral d'Adrien Pivano par les expériences CORMET. Sur la base d'une interprétation croisée du programme expérimental CORDEB2 et de ces essais CORMET, l'enjeu à court terme est de disposer d'un modèle intégral permettant de rendre compte des échanges de masse inter-couches en présence d'une croûte axiale et reproduisant ainsi son impact sur le transitoire de stratification du bain. A plus long terme, l'évaluation du comportement de cette croûte à l'échelle réacteur doit faire intervenir la thermomécanique ; sur ce sujet, un véritable programme de travail reste à construire puisqu'il n'existe quasiment aucune donnée relative à la caractérisation des propriétés mécaniques d'une croûte de corium. Par ailleurs, à l'échelle mésoscopique de la CFD du bain, simuler cette phase solide requiert le choix d'une méthode numérique pour le suivi de l'interface associée. Pour les interfaces liquide-liquide mises en jeu dans le transitoire de stratification, nous avons privilégié la méthode de champ de phase et par là-même une capture "implicite" des interfaces. Pour cette interface à la topologie plus "simple", des méthodes de type "Arbitrary Lagrangian Eulerian" (ALE) ou de "Front Tracking" vont être étudiées dans le cadre de la thèse d'Adrien Drouillet qui démarre en novembre 2018 à la suite d'un stage préparatoire sur le sujet. L'encadrant principal de cette thèse est mon collègue Mathieu Peybernes et elle est dirigée par Raphaël Loubère de l'Institut de Mathématiques de Bordeaux.

Ensuite, le travail initié avec mes collègues Jules Delacroix et Pascal Piluso sur la modélisation des phénomènes d'oxydation du corium à son interface avec une phase gazeuse oxydante va se poursuivre au travers d'une thèse démarrant en octobre 2018 (qui combinera expérimentation et modélisation). Du point de vue de la modélisation d'une goutte de corium dans le cadre de l'interaction corium-eau, les premiers axes de travail portent sur :

- le couplage entre le transport intra-goutte et les phénomènes associés à l'apport d'oxygène à l'interface soit, au premier ordre, le transport de H_2O au travers du film de gaz (majoritairement H_2) qui entoure la goutte ;
- la prise en compte de la thermique et la possible solidification de la goutte à l'interface corium-gaz.

Là encore, modélisations "intégrale" et détaillée seront mises en jeu avec l'objectif de disposer d'un modèle intégrable dans un code traitant de l'interaction corium-eau.

Tous ces travaux de modélisation à venir s'appuieront *a priori* sur l'approche étudiée dans le cadre de la thèse de Vaishnvi Tiwari pour ce qui est de la fermeture des modèles vis-à-vis des données thermodynamiques : une utilisation exhaustive et consistante de la représentation offerte par une base CALPHAD. Comme discuté au § 2.5, dans la démarche associée à PROCOR, cette formulation des modèles vis-à-vis de ces données CALPHAD ouvre la porte à des études de sensibilités structurées qui doivent permettre de définir quantitativement le besoin de consolidation de ces bases pour la simulation du comportement du corium. Pour ce faire, encore faut-il que, dans le processus d'assimilation de données de la méthode CALPHAD, les incertitudes soient correctement traitées afin de permettre *in fine* la propagation des incertitudes dans le calcul d'un équilibre thermodynamique ou bien dans l'évaluation de l'énergie de Gibbs et de ses dérivées pour chacune des phases. C'est dans la poursuite de cet objectif que la thèse d'Eva Lawrence dirigée par Fabrice Gamboa à l'Institut de Mathématiques de Toulouse a démarré en octobre 2017 sous l'impulsion de ma collègue Christine Guéneau, de Bo Sundman et de moi-même. Je participe au suivi de cette thèse qui devrait s'achever par une démonstration de principe de la propagation des incertitudes des données thermodynamiques au travers d'un modèle couplant thermique et thermochimie issu de PROCOR.

Pour finir, notons que les perspectives à court ou moyen termes de la plateforme logicielle PROCOR dépassent le cadre de la rétention du corium en cuve avec un projet relatif à l'interaction corium-béton pour les REL (porté par mes collègues Anne Boulin, Benoît Habert et Mathieu Peybernes) et un autre consacré aux accidents graves des RNR-Na (porté par mon collègue Rémi Clavier) avec, en premier lieu, l'interaction corium-récupérateur. Il s'agit là clairement de perspectives vis-à-vis de mes travaux de modélisation (en particulier, pour ce qui est de la thermochimie du corium).

En neutronique (dans le cadre de la simulation des accidents graves des RNR-Na)

Je me limite ici en neutronique à une perspective rattachée aux activités de mon laboratoire actuel de modélisation des accidents graves.

Dans la sélection des travaux présentés aux Chapitres 1 et 2, j'ai fait le choix de centrer mon discours sur la modélisation et la simulation numérique de problèmes d'interface. En conséquence, je n'ai fait qu'évoquer au § 1.6 sans le détailler, le travail de thèse de Maxime Guyot¹ qui m'a permis de m'intéresser à la cinétique neutronique dans le cadre des accidents graves des RNR-Na. Plus spécifiquement, pour la phase primaire de l'accident (*i.e.* avant la rupture des boîtiers hexagonaux des assemblages), une approche dite multi-canal a été mise en place par un couplage entre le code SIMMER de dégradation et le solveur de neutronique SNATCH afin de réduire drastiquement le coût de calcul associé aux modèles de thermohydraulique et de dégradation. Dans ces conditions, c'est la résolution de la neutronique qui domine le temps de calcul. Dans ce cadre, de manière cohérente avec les travaux présentés au Chapitre 1 (en particulier la thèse de Damien Fournier), un axe de recherche que j'aimerais explorer est le développement d'un schéma de discrétisation spatiale de l'équation de transport des neutrons "optimisé" pour les maillages hexagonaux des cœurs de ces réacteurs. Avec comme perspective l'utilisation du solveur MINARET d'APOLLO3[®] pour ces simulations couplées avec SIMMER, j'ai construit avec mon collègue Ansar Calloo du DM2S/SERMA/LLPR du CEA Saclay une proposition de thèse pour 2019 qui va dans ce sens. Plus particulièrement, dans le cadre d'un schéma Galerkin discontinu, on propose l'analyse et le développement de bases d'éléments finis d'ordre élevé écrites directement sur l'hexagone conjointement à un algorithme de raffinement adaptatif en ordre.

Au-delà

Dans mes travaux sur la modélisation thermochimique du corium, de par l'utilisation commune du code Open-Calphad, j'ai été amené à travailler avec des collègues du DEC/SESC/LSC du CEA Cadarache (en particulier, Clément Introïni) dont les activités portent sur la modélisation du comportement du combustible d'un réacteur nucléaire. Ces échanges m'ont convaincu des fortes "synergies" entre nos activités qui mériteraient l'élaboration de sujets de recherche commun en matière de modélisation. En particulier, comme pour la modélisation du corium, l'amélioration des codes de thermomécanique associés à la simulation du combustible passe par la prise en compte de "plus" de thermochimie (*e.g.* la chimie des produits de fission générés par la fission de l'uranium). Dans le futur, j'espère pouvoir initier et contribuer au rapprochement

1. L'encadrant principal de cette thèse était mon collègue Pierre Gubernatis et elle a été dirigée par Guillaume Chiavassa de l'Ecole Centrale de Marseille.

de ces deux thématiques avec des travaux de modélisation conjoints par le biais, par exemple, du formalisme des méthodes de champ de phase.

Pour finir, revenons à la neutronique et à l'étude préliminaire rapportée au § 1.5 d'une discrétisation énergétique dépendant de l'espace par le biais d'une méthode de type "multi-domaine"/"multi-méthode". Ces premiers "tests" m'avaient incité à l'époque à aller plus loin dans cette direction en proposant un sujet de thèse portant sur le couplage de méthodes déterministes et Monte Carlo (qui permet un traitement "continu" de la variable énergie) par décomposition de domaine. Mon changement de thématique en 2011 m'a "écarté" de cette piste ; la thèse ne s'est pas concrétisée et, à ma connaissance, ce genre d'approches n'a pas fait l'objet de travaux depuis. Si cet axe de recherche est éloigné de mes travaux actuels (et n'en constitue pas vraiment une "perspective"), il reste, me semble-t-il, pertinent et je le mentionne ici en ce sens.

Vade-mecum pour le lecteur du Chapitre 1

Cette annexe est là en support à la lecture de la synthèse de mes travaux de recherche du Chapitre 1 relatifs au développement du solveur neutronique SNATCH. Partant de la forme classique de l'équation de Boltzmann appliquée aux transports des neutrons, cette annexe présente de manière synthétique les principaux traitements et méthodes numériques mis en œuvre dans SNATCH afin de permettre une lecture plus approfondie du Chapitre 1. La présentation faite ici est restreinte aux éléments pertinents vis-à-vis de SNATCH et des travaux de recherche associés ; il ne s'agit en aucun cas d'un *vade-mecum* de la neutronique.

Pour tous les éléments généraux discutés dans les paragraphes qui suivent, le lecteur est invité à consulter des ouvrages tels que [1], [2], [3] pour plus de détails tandis que pour les développements spécifiques à SNATCH, les références données au Chapitre 1 ne sont pas systématiquement répétées ici.

A.1 L'équation de transport des neutrons

Dans sa forme pseudo-stationnaire d'un problème de valeur propre principale, l'équation linéaire hyperbolique du premier ordre associé au transport des neutrons dans un domaine $\vec{r} \in \mathcal{D}$, $\vec{\Omega} \in \mathcal{S}^2$, $E \in \mathcal{E}$ s'écrit :

$$\mathcal{T}\phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = \mathcal{H}\phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) - \mathcal{S}\phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) - \frac{1}{k}\mathcal{F}\phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = 0 \quad (\text{A.1})$$

où les différents termes de cette équation bilan sont :

- $\phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$, le flux de neutrons, produit de la densité neutronique $n(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$ par la norme de la vitesse $v(E)$,
- $\mathcal{H}$ est l'opérateur d'advection-réaction défini par :

$$\mathcal{H}\phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla}\phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) + \Sigma_t(\vec{r}, E)\phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \quad (\text{A.2})$$

avec $\Sigma_t(\vec{r}, E)$ la section efficace macroscopique "totale" (*i.e.* comptabilisant toutes les interactions) pour un neutron incident d'énergie E ;

- $\mathcal{S}\phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$, la densité de source de diffusion écrite comme :

$$\mathcal{S}\phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = \int_{S^2} d^2\Omega' \int dE' \frac{1}{2\pi} \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E') \quad (\text{A.3})$$

avec la section efficace macroscopique $\Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega})$ de transfert par diffusion faisant passer le neutron de l'énergie E' à l'énergie E et de la direction $\vec{\Omega}'$ à la direction $\vec{\Omega}$. Cette section est le plus souvent modélisée par le biais d'un développement sur une base de polynômes de Legendre $(P_l)_{0 \leq l \leq L}$ qui, à l'ordre L , prend la forme de :

$$\Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \Sigma_{s,l}(\vec{r}, E' \rightarrow E) P_l(\vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) \quad (\text{A.4})$$

En utilisant le théorème d'addition des harmoniques sphériques réelles $(\mathcal{R}_{l,m})_{0 \leq l \leq L, -l \leq m \leq l}$, la densité de source de diffusion peut alors s'écrire :

$$\mathcal{S}\phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = \sum_{l=0}^L \frac{(2l+1)}{4\pi} \sum_{m=-l}^l \mathcal{R}_{l,m}(\vec{\Omega}) \int dE' \Sigma_{s,l}(\vec{r}, E' \rightarrow E) \Phi_{l,m}(\vec{r}, E') \quad (\text{A.5})$$

où les moments du flux sont définis par :

$$\Phi_{l,m}(\vec{r}, E) = \int d^2\Omega \mathcal{R}_{l,m}(\vec{\Omega}) \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \quad (\text{A.6})$$

- $\mathcal{F}\phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$, la densité de source de fission exprimée sous la forme suivante :

$$\mathcal{F}\phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = \frac{\chi(\vec{r}, E)}{4\pi} \int dE' \nu \Sigma_f(\vec{r}, E') \Phi_{0,0}(\vec{r}, E') \quad (\text{A.7})$$

où $\Sigma_f(\vec{r}, E')$ est la section efficace macroscopique de fission pour un neutron incident d'énergie E' ; $\nu(\vec{r}, E')$ est le nombre moyen de neutrons (prompts et retardés) émis à la suite d'une fission induite par un neutron incident d'énergie E' et $\chi(\vec{r}, E)$ est le spectre en énergie des neutrons émis à l'énergie E de manière isotrope à la suite d'une fission induite.

- k , le facteur de multiplication effectif *i.e.* la valeur propre dominante de $(\mathcal{H} - \mathcal{S})^{-1} \mathcal{F}$.

Cette équation est complétée par des conditions aux limites définies sur $\mathcal{E} \times \{\vec{\Omega} \in S^2, \vec{r} \in \Gamma_-(\vec{\Omega})\}$; e.g. des conditions de "vide" s'écrivent : $\forall \vec{\Omega} \in S^2, \forall \vec{r} \in \Gamma_-(\vec{\Omega})$,

$$\phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = 0 \quad (\text{A.8})$$

où la frontière entrante $\Gamma_-(\vec{\Omega})$ de $\mathcal{D}$ est définie par $\Gamma_-(\vec{\Omega}) = \{\vec{r} \in \Gamma : \vec{\Omega} \cdot \vec{n}(\vec{r}) < 0\}$ et $\vec{n}(\vec{r})$ est la normale sortante à Γ en $\vec{r} \in \Gamma$.

A.2 Discrétisation énergétique multigroupe

La discrétisation de la variable énergétique passe par une approximation multigroupe où les données nucléaires (sections efficaces et spectres) ainsi que le flux de neutrons sont représentés par des fonctions constantes par morceaux. Il s'agit là d'un problème d'homogénéisation

(que l'on appelle ici condensation). Si l'on considère un maillage énergétique à G groupes $\mathcal{E} = \bigcup_{1 \leq g \leq G} ([E_g, E_{g-1}])$, l'intégration de l'Eq. A.1 sur un groupe g pour $1 \leq g \leq G$ conduit à définir formellement les quantités multigroupes suivantes :

$$\Sigma_t^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{\int_g dE \Sigma_t(\vec{r}, E) \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)}{\phi^g(\vec{r}, \vec{\Omega})} \quad (\text{A.9})$$

$$\Sigma_{s,l,m}^{g \leftarrow g'}(\vec{r}) = \frac{\int_{g'} dE' \int_g dE \Sigma_{s,l}(\vec{r}, E' \rightarrow E) \Phi_{l,m}(\vec{r}, E')}{\Phi_{l,m}^{g'}(\vec{r})} \quad (\text{A.10})$$

$$\nu \Sigma_f^{g'}(\vec{r}) = \frac{\int_{g'} dE' \nu \Sigma_f(\vec{r}, E') \Phi_{0,0}(\vec{r}, E')}{\Phi_{0,0}^{g'}(\vec{r})} \quad (\text{A.11})$$

$$\chi^g(\vec{r}) = \int_g dE \chi(\vec{r}, E) \quad (\text{A.12})$$

en notant $\phi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \int_g dE \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$, $\forall g \in \llbracket 1, G \rrbracket$ (et de même pour les moments angulaires du flux).

Ainsi, *a priori*, le système d'équations multigroupes est plus complexe que l'équation initiale à cause de dépendances angulaires supplémentaires dans la définition des sections efficaces multigroupes $\Sigma_t^g(\vec{r}, \vec{\Omega})$ et $\Sigma_{s,l,m}^{g \leftarrow g'}(\vec{r})$. Le plus souvent en pratique, diverses approximations sont utilisées afin de s'affranchir de cette complexité supplémentaire et se ramener à des sections efficaces multigroupes $\bar{\Sigma}_t^g(\vec{r})$ et $\bar{\Sigma}_{s,l}^{g \leftarrow g'}(\vec{r})$. Nous nous placerons dans ce cadre pour la suite et reviendrons sur ces approximations dans le cadre du § 1.5 et de la condensation énergétique d'un maillage multigroupe fin vers un plus grossier.

A.3 Résolution itérative de la dépendance des sources aux flux

Sous cette approximation multigroupe pour la variable énergétique, l'Eq. A.1 peut être réécrite sous la forme :

$$\begin{aligned} \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \Sigma_t^g(\vec{r}) \phi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) &= S^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) \\ &= \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \Sigma_{s,l}^{g \leftarrow g}(\vec{r}) \sum_{m=-l}^l \mathcal{R}_{l,m}(\vec{\Omega}) \Phi_{l,m}^g(\vec{r}) \\ &+ \sum_{g' \neq g} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \Sigma_{s,l}^{g \leftarrow g'}(\vec{r}) \sum_{m=-l}^l \mathcal{R}_{l,m}(\vec{\Omega}) \Phi_{l,m}^{g'}(\vec{r}) \\ &+ \frac{1}{k} \frac{\chi^g(\vec{r})}{4\pi} \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_f^{g'}(\vec{r}) \Phi_{0,0}^{g'}(\vec{r}) \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

où la source de neutrons $S^g(\vec{r}, \vec{\Omega})$ a été séparée en trois termes afin de distinguer la diffusion d'un groupe dans lui-même, la diffusion depuis un autre groupe et la fission. Clairement, ces différents termes dépendent du flux neutronique lui-même. Cette dépendance est classiquement résolue par le biais de trois méthodes itératives imbriquées. Au niveau externe, c'est la source de fission qui est traitée et la méthode itérative la plus couramment associée à la résolution de ce problème de valeur propre dominante est la méthode des puissances. Ensuite, le système linéaire multigroupe relatif à la diffusion depuis les autres groupes est classiquement résolu par le biais d'une méthode de Gauss-Seidel. Finalement, au niveau le plus interne, le système linéaire associé à la diffusion à l'intérieur d'un groupe est le plus souvent inversé par le biais d'une méthode de Richardson. Des méthodes d'accélération de la convergence sont fréquemment mises en œuvre pour pallier à la convergence souvent lente de ces méthodes itératives basiques. Pour les problèmes linéaires, les méthodes utilisées s'apparentent souvent à un préconditionnement à gauche du système.

A.4 Discrétisation angulaire S_N

La méthode aux ordonnées discrètes (dite S_N) passe par la discrétisation de la sphère unité S^2 à l'aide d'une formule de quadrature $(w_n, \vec{\Omega}_n)_{1 \leq n \leq N}$ de sorte que, pour toute fonction f , on a :

$$\int_{(4\pi)} d^2\Omega f(\vec{\Omega}) = \sum_n w_n f(\vec{\Omega}_n) \quad (\text{A.14})$$

En particulier, les moments du flux angulaire sur une base d'harmoniques sphériques $\Phi_{l,m}^g(\vec{r})$ sont calculés par le biais de

$$\Phi_{l,m}^g(\vec{r}) = \int_{S^2} d^2\Omega \mathcal{R}_{l,m}(\vec{\Omega}) \phi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \sum_{n=1}^N w_n \mathcal{R}_{l,m}(\vec{\Omega}_n) \phi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}_n) \quad (\text{A.15})$$

Avec cette méthode, l'Eq. A.13 amène à un système de $G \times N$ équations couplées : $\forall g \in \llbracket 1, G \rrbracket, \forall n \in \llbracket 1, N \rrbracket, \forall \vec{r} \in \mathcal{D}$,

$$\vec{\Omega}_n \cdot \vec{\nabla} \phi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}_n) + \Sigma_t(\vec{r}) \phi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}_n) = S^g(\vec{r}, \vec{\Omega}_n) \quad (\text{A.16})$$

Les quadratures standards en neutronique telles que les quadratures "level-symmetric" (voir [4]) sont définies sur un octant de S^2 i.e. pour $\{\varphi \in]0, \pi/2[\} \times \{\mu \in]0, 1[\}$ où φ est l'azimut et μ est le cosinus de l'angle polaire. De telles quadratures ne respectent pas les symétries que l'on peut rencontrer dans des géométries d'assemblages hexagonaux de réacteurs ; en conséquence, pour des ordres de quadratures faibles, des asymétries artificielles du flux angulaire peuvent être introduites et les conditions aux frontières de rotation (représentant des symétries de $\frac{1}{6}, \frac{1}{3}$ de cœur) ne peuvent pas être traitées de manière exacte.

Ainsi, pour traiter au mieux les cœurs d'assemblages hexagonaux, nous avons introduit une famille de quadratures construites par symétrie à partir d'un produit entre :

- une quadrature de Gauss-Tchebychev sur $]0, \pi/3[$ à N_a points pour l'azimut,
- une quadrature de Gauss-Legendre sur $]0, 1[$ à N_p points pour le cosinus de l'angle polaire.

Cette quadrature notée HQ_{N_a, N_p} représente une discrétisation de S^2 en $12 \times N_a \times N_p$ directions et, par construction, respecte les symétries naturelles de l'hexagone. De plus, en suivant la démarche

de [5], on peut facilement montré que cette quadrature assure l'intégration exacte des propriétés d'orthogonalité des harmoniques sphériques jusqu'à l'ordre $L = \min\left(\frac{3}{2}(2N_a - 1), (N_p + 1)\right)$ garantissant ainsi une intégration correcte des termes de diffusion anisotrope jusqu'à cet ordre.

A.5 Forme semi-discrète du système d'équations avant discrétisation spatiale

Ainsi discrétisée énergétiquement et angulairement, l'équation de transport (Eq. A.1) se présente sous la forme d'un ensemble d'équations linéaires hyperboliques du premier ordre couplées qui peut être formellement écrit de manière semi-discrète sous la forme matricielle (de dimension $G \times N$) :

$$\underline{T}\phi(\vec{r}) = \underline{H}\phi(\vec{r}) - \underline{S} = \underline{H}\phi(\vec{r}) - \underline{S}\phi(\vec{r}) - \frac{1}{k}\underline{F}\phi(\vec{r}) = 0 \quad (\text{A.17})$$

où

$$\underline{H} = \text{diag}\left[\vec{\Omega}_n \cdot \vec{\nabla} + \bar{\Sigma}_t^g(\vec{r})\right]_{(g,n)} \quad (\text{A.18})$$

$$\underline{S} = \left[\frac{w_{n'}}{4\pi} \sum_{l=0}^L (2l+1) \sum_{m=-l}^l \mathcal{R}_{l,m}(\vec{\Omega}_n) \bar{\Sigma}_{s,l}^{g \leftarrow g'}(\vec{r}) \mathcal{R}_{l,m}(\vec{\Omega}_{n'}) \right]_{(g,n),(g',n')} \quad (\text{A.19})$$

$$\underline{F} = \left[\frac{w_{n'}}{4\pi} \chi^g(\vec{r}) \nu \Sigma_f^{g'}(\vec{r}) \right]_{(g,n),(g',n')} \quad (\text{A.20})$$

$$\underline{S} = \left[S_n^g(\vec{r}) = S^g(\vec{r}, \vec{\Omega}_n) \right]_{(g,n)} \quad (\text{A.21})$$

$$\underline{\phi} = \left[\phi_n^g(\vec{r}) = \phi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}_n) \right]_{(g,n)} \quad (\text{A.22})$$

Le produit scalaire semi-discret associé est noté $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{D}^{G \times N}}$ et est défini par : $\forall \underline{\phi}, \underline{\psi} \in (L^2(\mathcal{D}))^{G \times N}$,

$$\langle \underline{\phi}, \underline{\psi} \rangle_{\mathcal{D}^{G \times N}} = \sum_{g=1}^G \sum_{n=1}^N w_n \langle \phi_n^g, \psi_n^g \rangle_{\mathcal{D}} \quad (\text{A.23})$$

où $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{D}}$ est le produit scalaire sur $L^2(\mathcal{D})$.

A.6 Discrétisation spatiale par la méthode Galerkin discontinue décentrée amont

On s'attache ici à décrire la discrétisation spatiale de $\underline{H}$ et, pour expliciter cette discrétisation, on se concentre sur un groupe d'énergie g et une direction $\vec{\Omega}_n$ donnés et omettons l'exposant g et l'indice n .

Tout d'abord, considérons un maillage $\mathcal{M}_h = \{\kappa\}$ du domaine $\mathcal{D}$ de telle sorte que les sections efficaces sont constantes par maille, e.g. $\forall \vec{r} \in \kappa, \Sigma_t(\vec{r}) = \Sigma_{t,\kappa}$. De plus, on note $Q_p(\kappa)$ l'espace des polynômes de degré inférieur ou égal à p sur κ et $\mathcal{M}_h^p$ le maillage en éléments finis de $\mathcal{M}_h$ avec un ordre polynomial p_κ éventuellement variable par maille κ . La méthode Galerkin discontinue (DG) décentrée amont ("upwind") [6] conduit à la formulation faible de l'Eq. A.1 sur chaque

élément de telle sorte que le flux “approché”

$$\phi_h \in V_h^{\mathbf{P}} = \left\{ v \in L^2(\mathcal{D}) : \forall \kappa \in \mathcal{M}_h^{\mathbf{P}}, v|_{\kappa} \in Q_{p_{\kappa}}(\kappa) \right\} \quad (\text{A.24})$$

est la solution sur un élément κ de : $\forall \phi_h \in V_h^{\mathbf{P}}$,

$$\left\langle \phi_h, (\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla}_h + \Sigma_{t,\kappa}) \phi_h \right\rangle_{\kappa} + \left\langle \phi_h^+, \llbracket \phi_h \rrbracket \right\rangle_{\partial\kappa_-} = \left\langle \phi_h, S \right\rangle_{\kappa} \quad (\text{A.25})$$

où

- $\left\langle f, g \right\rangle_{\kappa} = \int_{\kappa} d^3r f g$ est le produit scalaire $L^2(\kappa)$,
- $\vec{\nabla}_h$ est l’opérateur de gradient défini élément-par-élément sur $\mathcal{M}_h$,
- $\left\langle f, g \right\rangle_{\partial\kappa_-} = \int_{\partial\kappa_-} d^2r \left| \vec{\Omega} \cdot \vec{n}(\vec{r}) \right| f g$,
- les frontières entrante (–) et sortante (+) de κ sont données par

$$\partial\kappa_{\pm} = \left\{ \vec{r} \in \partial\kappa : \vec{\Omega} \cdot \vec{n}(\vec{r}) \gtrless 0 \right\} \quad (\text{A.26})$$

- les traces “amont” (–) et “aval” (+) de ϕ_h sur $\partial\kappa$ sont définies par :

$$\phi_h|_{\partial\kappa}^{\pm}(\vec{r} \in \partial\kappa) = \lim_{s \rightarrow 0^{\pm}} \phi_h(\vec{r} + s\vec{\Omega})$$

avec la convention que $\forall \vec{r} \in \Gamma_-$, $\phi_h|_{\partial\kappa}^-(\vec{r})$ prend la valeur imposée par les conditions aux limites (e.g. 0 pour une condition de vide),

- le saut entre éléments de ϕ_h sur $\partial\kappa$ est noté $\llbracket \phi_h \rrbracket = (\phi_h^+ - \phi_h^-)$.

Comme montré dans [7, 8], ce schéma décentré amont est stable (dans une norme plus forte que la norme $L^2(\mathcal{D})$) et peut être vu comme un cas particulier des mécanismes de stabilisation par pénalisation des sauts. Ce schéma peut, par contre, souffrir du phénomène de “locking” : dans la limite d’un matériau “épais” et diffusif (i.e. $\Sigma_t \rightarrow \infty$ et $\frac{\Sigma_s}{\Sigma_t} \rightarrow 1$), la solution DG ne converge plus correctement vers la solution (voir [9] pour une solution passant par une modification de la stabilisation “upwind”). Notons que ce phénomène n’a jamais été rencontré dans les applications “réacteurs” avec le solveur SNATCH.

A.6.1 Intégration par balayage élément-par-élément

Ce schéma décentré amont offre un découplage partiel entre éléments : ϕ_h , dans l’élément κ , peut être calculé à partir de la connaissance des valeurs de ϕ_h en amont de $\partial\kappa$ selon la direction caractéristique $\vec{\Omega}$. Dans le cas général de maillages non structurés, la résolution explicite élément-par-élément n’est pour autant pas toujours possible : le graphe orienté des dépendances entre éléments peut présenter des circuits. Par contre, pour les maillages structurés de SNATCH (cartésiens 2D et 3D, hexagonaux 2D et 3D discrétisés en losanges), ce graphe orienté est acyclique et il est toujours possible de trouver, pour une direction $\vec{\Omega}$, une numérotation des mailles qui permet de résoudre élément-par-élément de manière explicite l’Eq. A.25. En particulier, pour les géométries d’assemblages hexagonaux, six différents parcours des mailles doivent être considérés en fonction du sextant $\{\varphi \in [k\pi/3, (k+1)\pi/3[\}$ auquel $\vec{\Omega}_n(\varphi, \mu)$ appartient.

Lorsque l'on considère un maillage non-conforme associé à un (dé)raffinement local, cette résolution par balayage du maillage est toujours possible dans la mesure où les raffinement locaux correspondent à des sous-maillages ; par contre, dans ces conditions, le passage des traces sortantes $\phi_h|_{\partial\kappa}^+(\vec{r})$ aux traces entrantes $\phi_h|_{\partial\kappa}^-(\vec{r})$ requièrent, dans le cas général, une projection de type L_2 .

A.6.2 Base polynomiale hiérarchique

La forme discrète (matricielle) de l'Eq. A.25 est obtenue en développant ϕ_h et φ_h sur chaque élément κ sur une même base polynomiale de $Q_p(\hat{\kappa})$ notée $\Xi_p(\hat{\kappa}) = \{f_i\}_{i \in [1, \dim(Q_p(\hat{\kappa}))]}$ définie vis-à-vis d'un élément de référence $\hat{\kappa}$.

Dans notre implémentation de cette méthode DG, nous avons utilisé une base polynomiale hiérarchique *i.e.* $\forall p \in \mathbb{N}^*$,

$$\Xi_p(\hat{\kappa}) \subset \Xi_{p+1}(\hat{\kappa}). \quad (\text{A.27})$$

La base utilisée est inspirée de [10] et s'appuie sur une décomposition hiérarchique de la fermeture $\hat{\kappa}$ de κ en entités topologiques (nœuds, arêtes, faces, cellules). La $j^{\text{ème}}$ entité de dimension d appartenant à $\hat{\kappa}$ est noté $M_{\hat{\kappa},j}^d$. A partir de là, la base polynomiale pour n'importe quel ordre p est obtenue par l'association de fonctions à chacune de ces entités de telle manière que n'importe quelle fonction de la base associée à $M_{\hat{\kappa},j}^d \in \hat{\kappa}$ s'annule sur toutes les entités d'ordre inférieur ou égal *i.e.* $M_{\hat{\kappa},j'}^{d' \leq d}$ à l'exception de $M_{\hat{\kappa},j}^d$. Par exemple, les fonctions associées à une arête sont nulles aux nœuds et sur toutes les autres arêtes de l'élément. Cette propriété de "localisation" des fonctions de la base est particulièrement intéressante dans une résolution par balayage des mailles car elle permet d'obtenir, de manière directe, la décomposition polynomiale de la trace au bord d'un élément $\phi_h|_{\partial\kappa}^+$ à partir de sa décomposition polynomiale sur l'élément $\phi_h|_{\kappa}$. A titre d'exemple, certaines de ces fonctions de base sont tracées à la Figure A.1 pour le cas du quadrilatère.

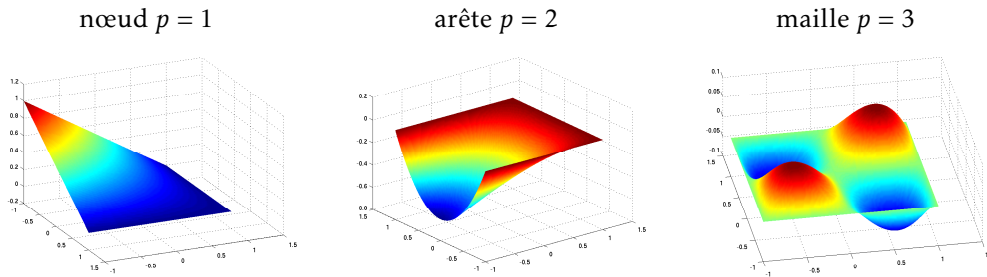


FIGURE A.1 – Exemple de fonctions de $\Xi_p(\hat{\kappa})$ pour l'élément 2D quadrilatère de référence $[-1, 1] \times [-1, 1]$

A.6.3 Forme discrète du système d'équations après discrétisation spatiale

De manière formelle, la formulation faible de l'Eq. A.17 associée à la méthode DG peut s'écrire comme :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{trouver } \underline{\phi}_h \in (V_h^{\mathbf{p}})^{G \times N} \text{ et } k_h \text{ la valeur propre principale tels que :} \\ \forall \underline{\varphi}_h \in (V_h^{\mathbf{p}})^{G \times N}, \left\langle \underline{\varphi}_h, \underline{H}_h \underline{\phi}_h - \underline{S}_h \underline{\phi}_h - \frac{1}{k_h} \underline{F}_h \underline{\phi}_h \right\rangle_{\mathcal{M}_h^{G \times N}} = 0 \end{array} \right. \quad (\text{A.28})$$

où

- $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{M}_h^{G \times N}}$ est défini par : $\forall \underline{\phi}_h, \underline{\varphi}_h \in (V_h^{\mathbf{p}})^{G \times N}$,

$$\langle \underline{\varphi}_h, \underline{\phi}_h \rangle_{\mathcal{M}_h^{G \times N}} = \sum_{g=1}^G \sum_{n=1}^N w_n \langle \varphi_{h,n}^g, \phi_{h,n}^g \rangle_{\mathcal{M}_h} = \sum_{g=1}^G \sum_{n=1}^N w_n \sum_{\kappa \in \mathcal{M}_h} \langle \varphi_{h,n}^g, \phi_{h,n}^g \rangle_{\kappa}$$

- les différentes formes bilinéaires associées à $\underline{O}_h \in \{\underline{H}_h, \underline{S}_h, \underline{F}_h\}$ se décomposent comme suit selon les groupes d'énergie et directions de la quadrature angulaire, $\forall \underline{\varphi}_h, \underline{\phi}_h \in (V_h^{\mathbf{p}})^{G \times N}$:

$$\langle \underline{\varphi}_h, \underline{O}_h \underline{\phi}_h \rangle_{\mathcal{M}_h^{G \times N}} = \sum_{g=1}^G \sum_{n=1}^N w_n \sum_{g'=1}^G \sum_{n'=1}^N \langle \varphi_{h,n}^g, O_{h,(g,n),(g',n')} \phi_{h,n'}^{g'} \rangle_{\mathcal{M}_h}$$

avec, $\forall g, g' \in \llbracket 1, G \rrbracket, \forall n, n' \in \llbracket 1, N \rrbracket$,

$$\langle \varphi_{h,n}^g, H_{h,(g,n),(g',n')} \phi_{h,n'}^{g'} \rangle_{\mathcal{M}_h} = \delta_{g,g'} \delta_{n,n'} \left(\langle \varphi_{h,n}^g, (\vec{\Omega}_n \cdot \vec{\nabla}_h + \Sigma_{t,\kappa}^g) \phi_{h,n'}^{g'} \rangle_{\mathcal{M}_h} + \sum_{\kappa \in \mathcal{M}_h} \langle \varphi_{h,n}^{g+}, \llbracket \phi_{h,n}^g \rrbracket \rangle_{\partial \kappa_-} \right) \quad (\text{A.29})$$

$$\langle \varphi_{h,n}^g, S_{h,(g,n),(g',n')} \phi_{h,n'}^{g'} \rangle_{\mathcal{M}_h} = \langle \varphi_{h,n}^g, \frac{w_{n'}}{4\pi} \sum_{l=0}^L (2l+1) \sum_{m=-l}^l \mathcal{R}_{l,m}(\vec{\Omega}_n) \bar{\Sigma}_{s,l,\kappa}^{g \leftarrow g'} \mathcal{R}_{l,m}(\vec{\Omega}_{n'}) \phi_{h,n'}^{g'} \rangle_{\mathcal{M}_h} \quad (\text{A.30})$$

$$\langle \varphi_{h,n}^g, F_{h,(g,n),(g',n')} \phi_{h,n'}^{g'} \rangle_{\mathcal{M}_h} = \langle \varphi_{h,n}^g, \frac{w_{n'}}{4\pi} \chi_{\kappa}^g \nu \Sigma_{f,\kappa}^{g'} \phi_{h,n'}^{g'} \rangle_{\mathcal{M}_h} \quad (\text{A.31})$$

A.6.4 Estimateur d'erreur *a posteriori*

Deux résultats théoriques d'estimation d'erreur ont été démontrés pour la construction d'estimateurs *a posteriori* dans le cadre des méthodes de raffinement adaptatif de maillage développées dans la thèse de D. Fournier. Ces deux résultats, obtenus sous des hypothèses de régularité différentes, sont rappelés ici et discutés plus avant au § 1.3 pour leur utilisation pour le raffinement adaptatif.

Theorème 1 (Estimation d'erreur pour $\phi \in C^\infty(\mathcal{D})$ [11, 12]) Soit ϕ solution de l'Eq. A.16 et ϕ_h^p solution de l'Eq. A.24. Considérant un maillage cartésien conforme uniforme (pas de maillage h) avec un ordre DG uniforme p , l'erreur locale en $\vec{r} \in \kappa$, exprimée dans les coordonnées de l'élément de référence $\vec{\xi} \in \hat{\kappa}$, s'écrit :

$$\phi_h(\vec{r}) - \phi(\vec{r}) = \hat{e}_h^p(\vec{\xi}) = \sum_{k=p+1}^{\infty} h^k Q_k(\vec{\xi}) \quad \text{avec} \quad Q_{p+1}(\vec{\xi}) = \sum_i \beta_{\xi_i} R_{p+1}^i(\xi_i) \quad (\text{A.32})$$

où R_{p+1}^i est un polynôme de Radau à droite (resp. à gauche) pour la coordonnée ξ_i si $\vec{\Omega} \cdot \vec{e}_i > 0$ (resp. $\vec{\Omega} \cdot \vec{e}_i < 0$). De plus, à la frontière sortante de κ , on a superconvergence de l'erreur :

$$\int_{\partial \kappa^+} d^2 r (\vec{n} \cdot \vec{\Omega}) \hat{e}_h^p = \mathcal{O}(h^{2p+2}) \quad (\text{A.33})$$

Theorème 2 (Estimation d'erreur pour $\phi \in W^{1,1}(\mathcal{D}) \cap L^\infty(\mathcal{D})$ [13, 12]) Soit ϕ solution de l'Eq. A.16 et ϕ_h de l'Eq. A.24. Alors, $\exists K_1, K_2$ tels que :

$$\|\phi_h - \phi\|_{L^1(\mathcal{D})} \leq \sqrt{K_1 \eta_1} + \sqrt{K_2 \eta_2}$$

avec $\eta_i = \eta_i^1 + \eta_i^2$ que l'on peut décomposer maille par maille sous la forme $\eta_i^j = \sum_{\kappa \in \mathcal{M}_h} \eta_{i,\kappa}^j$ avec

$$\begin{aligned} \eta_{1,\kappa}^1 &= V_\kappa R_\kappa(\phi_h) \\ \eta_{1,\kappa}^2 &= \sum_{b \in \mathcal{B}_h(\kappa)} S_b J_b(\phi_h) \\ \eta_{2,\kappa}^1 &= \|\overline{\phi_h} - \phi_h\|_{L^\infty(\kappa)} R_\kappa(\phi_h) \\ \eta_{2,\kappa}^2 &= \sum_{b \in \mathcal{B}_h(\kappa)} \|\overline{\phi_h} - \phi_h\|_{L^\infty(b)} J_b(\phi_h) \end{aligned}$$

où $\mathcal{B}_h(\kappa)$ désigne l'ensemble des faces en 3D qui composent $\partial\kappa$, V_κ (resp. S_b) le volume (resp. la surface) de κ (resp. b) et

$$\begin{aligned} R_\kappa(\phi_h) &= \int_\kappa d^3r \left| \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi_h + \Sigma_{t,\kappa} \phi_h - S \right| \\ J_b(\phi_h) &= \int_b d^2r \left| \vec{\Omega} \cdot \vec{n} \right| \llbracket \phi_h \rrbracket \\ \overline{\phi_h} &= \frac{1}{V_\kappa} \int_\kappa d^3r \phi_h \end{aligned}$$

A.7 Théorie des perturbations

Dans le cadre de l'analyse neutronique d'un cœur de réacteur, il est fréquent d'avoir recours à la théorie des perturbations [14] de manière à relier les variations d'une quantité d'intérêt donnée Q telle que la réactivité aux variations des paramètres définissant l'état du système (e.g. les sections efficaces). Par exemple, une telle approche est fréquemment utilisée pour calculer :

- la décomposition exacte de la perturbation de Q en termes des effets des variations des paramètres qui peut servir à l'analyse physique du système (e.g. la décomposition de l'effet en réactivité associée à la vidange du sodium dans un réacteur à neutrons rapides refroidi au sodium) ou la comparaison de différentes "évaluations" des sections efficaces ;
- la dérivée partielle de Q par rapport à certains paramètres dans une logique d'étude de sensibilité ou incertitude.

A maillage énergétique et quadrature angulaire fixés, les paramètres $\{\mathbb{P}\}$ de l'Eq. 1.1 sont les données nucléaires (sections efficaces, spectres et multiplicités associés à la fission) et la distribution spatiale des concentrations des différents isotopes. Les perturbations "physiques" qui nous intéressent ici sont des perturbations de ces paramètres et l'on appellera *configuration* un ensemble de ces paramètres associé à l'Eq. 1.1.

Ainsi à partir d'une configuration initiale (indice i) , deux types d'analyses perturbatives peuvent être distinguées :

- la décomposition de la perturbation induite sur Q lorsque l'on passe de la configuration initiale à une configuration "perturbée" (indice p) identifiée ; cette décomposition peut formellement être écrite comme $\Delta Q = \sum_{\mathbb{P}} \Delta Q|_{\mathbb{P}}$ où $\Delta Q|_{\mathbb{P}}$, la contribution liée au paramètre $\mathbb{P}$, se réduit à $\frac{\partial Q}{\partial \mathbb{P}} \cdot \Delta \mathbb{P}$ si l'on considère une perturbation au premier ordre ;
- le calcul des coefficients de sensibilité de Q vis-à-vis de certains paramètres $\{\mathbb{P}\}$ définis par $S_{\mathbb{P}}^Q = \frac{1}{Q} \frac{\partial Q}{\partial \mathbb{P}} \cdot \mathbb{P}$ et évalués sur la configuration initiale.

Dans le cadre de la théorie des perturbations, le calcul de $\Delta Q|_{\mathbb{P}}$ est réduit, par dualité, au calcul de quantités $\propto \left\langle \underline{\psi}^{\star}, \Delta \underline{Q}|_{\mathbb{P}} \underline{\psi} \right\rangle_{\mathcal{D}^{G \times N}} \forall \underline{Q} \in \{\underline{H}, \underline{S}, \underline{F}\}$ où $\underline{\psi}$ et $\underline{\psi}^{\star}$ sont, soit directement le flux direct $\underline{\phi}$ solution de l'Eq. A.17 et le flux adjoint $\underline{\phi}^{\star}$ solution de l'adjoint de l'Eq. A.17 ou bien des "fonctions d'importance" solutions de problèmes directs ou adjoints dépendant de Q sous la forme $\underline{T}\underline{\psi} = \underline{S}_Q$ et $\underline{T}^{\star}\underline{\psi}^{\star} = \underline{S}_Q^{\star}$.

A.7.1 Théorie standard sur la réactivité

Dans le cas où Q est la réactivité $\rho = 1 - \frac{1}{k}$, la formule de perturbation dite "standard" associée au passage de la configuration i à la configuration p s'écrit :

$$\Delta \rho^{hh'} = - \frac{\left\langle \underline{\phi}_i^{\star}, \left(\underline{\Delta H} - \underline{\Delta S} - \frac{1}{k_p} \underline{\Delta F} \right) \underline{\phi}_p \right\rangle_{\mathcal{D}^{G \times N}}}{\left\langle \underline{F}_i^{\star} \underline{\phi}_i^{\star}, \underline{\phi}_p \right\rangle_{\mathcal{D}^{G \times N}}} \quad (\text{A.34})$$

où $\underline{\phi}_i^{\star}$ est la solution de l'équation adjointe de l'Eq. A.17 qui s'écrit :

$$\underline{T}^{\star} \underline{\phi}^{\star}(\vec{r}) = \underline{H}^{\star} \underline{\phi}^{\star}(\vec{r}) - \underline{S}^{\star} \underline{\phi}^{\star}(\vec{r}) - \frac{1}{k} \underline{F}^{\star} \underline{\phi}^{\star}(\vec{r}) = 0 \quad (\text{A.35})$$

Les différents opérateurs adjoint sont :

$$\underline{H}^{\star} = \text{diag} \left[-\vec{\Omega}_n \cdot \vec{\nabla} + \bar{\Sigma}_t^g(\vec{r}) \right]_{(g,n)} \quad (\text{A.36})$$

$$\underline{S}^{\star} = \left[\frac{w_{n'}}{4\pi} \sum_{l=0}^L (2l+1) \sum_{m=-l}^l \mathcal{R}_{l,m}(\vec{\Omega}_n) \bar{\Sigma}_{s,l}^{g' \leftarrow g}(\vec{r}) \mathcal{R}_{l,m}(\vec{\Omega}_{n'}) \right]_{(g,n),(g',n')} \quad (\text{A.37})$$

$$\underline{F}^{\star} = \left[\frac{w_{n'}}{4\pi} \chi^{g'}(\vec{r}) \nu \Sigma_f^g(\vec{r}) \right]_{(g,n),(g',n')} \quad (\text{A.38})$$

avec des conditions aux limites définies sur $\mathcal{E} \times \{\vec{\Omega} \in \mathcal{S}^2, \vec{r} \in \Gamma_+(\vec{\Omega})\}$. Par exemple, si les conditions aux limites du problème direct sont des conditions de vide (Eq. A.8), les conditions aux limites pour le problème adjoint sont : $\forall \vec{\Omega} \in \mathcal{S}^2, \forall \vec{r} \in \Gamma_+(\vec{\Omega})$,

$$\phi^{\star}(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = 0 \quad (\text{A.39})$$

Par ailleurs, dans le cadre de l'équation multigroupe discrétisée angulairement par la méthode S_N , les variations des opérateurs semi-discrets sont reliés aux variations des sections efficaces

macroscopiques sous la forme :

$$\begin{aligned}
 \Delta \underline{H} &= \text{diag} \left[\Delta \bar{\Sigma}_t^g(\vec{r}) \right]_{(g,n)} \\
 \Delta \underline{S} &= \left[\frac{w_{n'}}{4\pi} \sum_{l=0}^L (2l+1) \sum_{m=-l}^l \mathcal{R}_{l,m}(\vec{\Omega}_n) \Delta \bar{\Sigma}_{s,l}^{g \leftarrow g'}(\vec{r}) \mathcal{R}_{l,m}(\vec{\Omega}_{n'}) \right]_{(g,n),(g',n')} \\
 \Delta \underline{F} &= \left[\frac{w_{n'}}{4\pi} \Delta \left(\chi^g(\vec{r}) \nu \Sigma_f^{g'}(\vec{r}) \right) \right]_{(g,n),(g',n')}
 \end{aligned} \tag{A.40}$$

A.7.2 Extension à la perturbation de la discrétisation spatiale en schéma DG

L'Eq. A.39 n'est applicable en pratique que lorsque la résolution des problèmes directs et adjoints associés est faite avec une même discrétisation spatiale. Ainsi, dans [15], nous nous sommes posés la question de l'extension de cette formulation au cas où les discrétisations spatiales du problème direct et adjoint diffèrent. Nous rappelons ici le résultat obtenu qui est discuté plus avant et illustré au § 1.4.

Pour prendre en compte la discrétisation spatiale, revenons à la définition de la réactivité. Pour une configuration c discrétisée sur un maillage $\mathcal{M}_h^{\mathbf{P}}$, la réactivité peut être exprimée comme, $\forall \underline{\varphi}_h^* \in (V_h^{\mathbf{P}})^{G \times N}$,

$$\rho_c^h = 1 - \frac{1}{k_{c,h}} = \frac{\left\langle \underline{\varphi}_h^*, \left(\underline{F}_{c,h} - \underline{H}_{c,h} + \underline{S}_{c,h} \right) \underline{\phi}_{c,h} \right\rangle_{\mathcal{M}_h^{G \times N}}}{\left\langle \underline{\varphi}_h^*, \underline{F}_{c,h} \underline{\phi}_{c,h} \right\rangle_{\mathcal{M}_h^{G \times N}}} \tag{A.41}$$

en considérant que $\underline{\phi}_{c,h}$ et $k_{c,h}$ sont les solutions de l'Eq. A.28 dans cette configuration c . Une expression similaire peut-être obtenue en considérant le problème adjoint.

A partir de là, en considérant le flux adjoint $\underline{\phi}_{i,h} \in (V_h^{\mathbf{P}})^{G \times N}$ défini pour une configuration initiale i et le flux direct $\underline{\phi}_{p,h'} \in (V_{h'}^{\mathbf{P}})^{G \times N}$ associé à une configuration perturbée p , l'effet en réactivité $\Delta \rho^{hh'} = \rho_p^{h'} - \rho_i^h$ s'écrit, $\forall \underline{\varphi}_{h'}^* \in (V_{h'}^{\mathbf{P}})^{G \times N}$, $\forall \underline{\varphi}_h \in (V_h^{\mathbf{P}})^{G \times N}$,

$$\Delta \rho^{hh'} = \frac{\left\langle \underline{\varphi}_{h'}^*, \left(\underline{F}_{p,h'} - \underline{H}_{p,h'} + \underline{S}_{p,h'} \right) \underline{\phi}_{p,h'} \right\rangle_{\mathcal{M}_{h'}^{G \times N}}}{\left\langle \underline{\varphi}_{h'}^*, \underline{F}_{p,h'} \underline{\phi}_{p,h'} \right\rangle_{\mathcal{M}_{h'}^{G \times N}}} - \frac{\left\langle \underline{\varphi}_h^*, \left(\underline{F}_{i,h}^* - \underline{H}_{i,h}^* + \underline{S}_{i,h}^* \right) \underline{\phi}_{i,h}^* \right\rangle_{\mathcal{M}_h^{G \times N}}}{\left\langle \underline{\varphi}_h^*, \underline{F}_{i,h}^* \underline{\phi}_{i,h}^* \right\rangle_{\mathcal{M}_h^{G \times N}}}. \tag{A.42}$$

Comme montré dans [15], l'Eq. A.42 peut être utilisée pour décomposer l'effet en réactivité sous la forme suivante :

$$\Delta \rho^{hh'} = \Delta \rho_{\Sigma}^{hh'} + \Delta \rho_{\mathcal{M}}^{hh'} \tag{A.43}$$

où l'on a pu distinguer deux contributions associées respectivement à :

- la variation des paramètres “physiques” entre les configurations i et p :

$$\Delta \rho_{\Sigma}^{hh'} = - \frac{\left\langle \underline{\phi}_{i,h'}^*, \left(\Delta \underline{H} - \Delta \underline{S} - \frac{1}{k_{p,h'}} \Delta \underline{F} \right) \underline{\phi}_{p,h'} \right\rangle_{\mathcal{D}^{G \times N}}}{\left\langle \underline{F}_{i,h}^* \underline{\phi}_{i,h}^*, \underline{\phi}_{p,h'} \right\rangle_{\mathcal{D}^{G \times N}}} \tag{A.44}$$

- le passage d'une discrétisation dans $V_h^{\mathbf{p}}$ à une discrétisation dans $V_{h'}^{\mathbf{p}'}$:

$$\Delta\rho_{\mathcal{M}}^{hh'} = \Delta\rho_{\nabla}^{hh'} + \Delta\rho_{[\cdot]}^{hh'} \quad (\text{A.45})$$

avec

$$\begin{aligned} \Delta\rho_{\nabla}^{hh'} &= - \frac{\left\langle \underline{\phi}_{i,h}^*, \vec{\Omega}_n \cdot \vec{\nabla}_{hh'} (\underline{\phi}_{p,h'} - \pi_h \underline{\phi}_{p,h'}) \right\rangle_{\mathcal{D}^{G \times N}}}{\left\langle \underline{F}_{i,h}^*, \underline{\phi}_{i,h}^*, \underline{\phi}_{p,h'} \right\rangle_{\mathcal{D}^{G \times N}}} \\ \Delta\rho_{[\cdot]}^{hh'} &= - \frac{\left\langle \pi_{h'} \underline{\phi}_{i,h}^*, \underline{\phi}_{p,h'} \right\rangle_{\mathcal{B}_{h'}^{G \times N}} - \left\langle \underline{\phi}_{i,h}^*, \pi_h \underline{\phi}_{p,h'} \right\rangle_{\mathcal{B}_h^{G \times N}}}{\left\langle \underline{F}_{i,h}^*, \underline{\phi}_{i,h}^*, \underline{\phi}_{p,h'} \right\rangle_{\mathcal{D}^{G \times N}}} \end{aligned}$$

et où

- π_h (resp. $\pi_{h'}$) désigne la projection L^2 dans $V_h^{\mathbf{p}}$ (resp. $V_{h'}^{\mathbf{p}'}$),
- $\vec{\nabla}_{hh'}$ est l'opérateur de gradient défini élément-par-élément sur le maillage union entre $\mathcal{M}_h$ et $\mathcal{M}_{h'}$,
- $\forall \underline{\phi}_h, \underline{\varphi}_h \in (V_h^{\mathbf{p}})^{G \times N}, \left\langle \underline{\varphi}_h, \underline{\phi}_h \right\rangle_{\mathcal{B}_h^{G \times N}} = \sum_{g=1}^G \sum_{n=1}^N w_n \sum_{\kappa \in \mathcal{M}_h} \left\langle \varphi_{h,n}^{g+}, [\phi_{h,n}^g] \right\rangle_{\partial\kappa_-}$.

L'Eq. A.43 peut être vue comme une généralisation de l'Eq. A.34 dans le cas où l'on considère, en plus des perturbations des paramètres physiques (données nucléaires ou concentrations isotopiques), l'effet associé à la modification de la discrétisation spatiale. Le premier terme $\Delta\rho_{\Sigma}^{hh'}$ est le pendant de l'Eq. A.34 dans le cadre discret et n'est rien d'autre que la formule standard de perturbation appliquée au schéma DG lorsque la discrétisation spatiale est la même dans la configuration initiale et la configurations perturbée *i.e.* $\mathcal{M}_h^{\mathbf{p}} = \mathcal{M}_{h'}^{\mathbf{p}'}$. L'autre terme $\Delta\rho_{\mathcal{M}}^{hh'}$ est une contribution qui n'apparaît que lorsque la discrétisation diffère entre configurations initiale et perturbée. Notons tout de même que $\Delta\rho_{\nabla}^{hh'}$ s'annule quand $\mathcal{M}_h^{\mathbf{p}}$ est un raffinement de $\mathcal{M}_{h'}^{\mathbf{p}'}$, *i.e.* $\forall \kappa \in \mathcal{M}_h, \exists N_{\kappa} = \{\kappa' \in \mathcal{M}_{h'}\}$ tel que $\kappa = \bigcup_{\kappa' \in N_{\kappa}} \kappa'$ et $\forall \kappa' \in N_{\kappa}, p_{\kappa'} \leq p_{\kappa}$. Par ailleurs, lorsque la discrétisation des deux configurations est raffinée, $\Delta\rho_{\Sigma}^{hh'}$ tend vers l'écart en réactivité "exact" tandis que $\Delta\rho_{\mathcal{M}}^{hh'}$ tend vers zéro.

A.8 Condensation énergétique

Dans le cadre des schémas de calculs à plusieurs étapes (en particulier, avec une étape "assemblage" et une étape "cœur" comme discutées au § 1.1), des méthodes d'homogénéisation sont mises en œuvre vis-à-vis du domaine spatial et énergétique. Comme nous l'avons déjà précisé au § A.2 lors de la description du traitement multigroupe de la variable énergétique, cette homogénéisation vis-à-vis de l'énergie est appelée condensation. Nous allons ici revenir sur une telle méthode lorsque l'on veut passer d'un maillage multigroupe fin $\mathcal{E} = \bigcup_{1 \leq g \leq G} (]E_g, E_{g-1}])$ à

un plus grossier $\mathcal{E}' = \bigcup_{1 \leq g \leq G} (]E_g, E_{g-1}])$. Par souci de simplicité dans la présentation des équations

(et sans que ce soit une limitation intrinsèque de la méthode présentée), nous considérerons

que le maillage fin est un raffinement du maillage grossier et nous noterons $\mathcal{C}(\mathfrak{g})$ l'ensemble des groupes du maillage fin qui composent le macro-groupe $\mathfrak{g}$.

Formellement, comme dans le cas du passage de la variable continue d'énergie, à un maillage multigroupe, la conservation du bilan neutronique lors du passage de g à $\mathfrak{g}$ conduit à définir les quantités suivantes par macro-groupe $1 \leq \mathfrak{g} \leq \mathbb{G}$:

$$\Sigma_t^{\mathfrak{g}}(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{\sum_{g \in \mathcal{C}(\mathfrak{g})} \bar{\Sigma}_t^g(\vec{r}) \phi^g(\vec{r}, \vec{\Omega})}{\phi^{\mathfrak{g}}(\vec{r}, \vec{\Omega})} \quad (\text{A.46})$$

$$\Sigma_{s,l,m}^{\mathfrak{g} \leftarrow \mathfrak{g}'}(\vec{r}) = \frac{\sum_{g' \in \mathcal{C}(\mathfrak{g}')} \sum_{g \in \mathcal{C}(\mathfrak{g})} \bar{\Sigma}_{s,l}^{g \leftarrow g'}(\vec{r}) \Phi_{l,m}^{g'}(\vec{r})}{\Phi_{l,m}^{\mathfrak{g}'}(\vec{r})} \quad (\text{A.47})$$

$$\nu \Sigma_f^{\mathfrak{g}'}(\vec{r}) = \frac{\sum_{g' \in \mathcal{C}(\mathfrak{g}')} \nu \Sigma_f^{g'}(\vec{r}) \Phi_{0,0}^{g'}(\vec{r})}{\Phi_{0,0}^{\mathfrak{g}'}(\vec{r})} \quad (\text{A.48})$$

$$\chi^{\mathfrak{g}}(\vec{r}) = \sum_{g \in \mathcal{C}(\mathfrak{g})} \chi^g(\vec{r}) \quad (\text{A.49})$$

en notant $\phi^{\mathfrak{g}}(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \sum_{g \in \mathcal{C}(\mathfrak{g})} \phi^g(\vec{r}, \vec{\Omega})$ (et de même pour les moments angulaires du flux).

Ainsi, le caractère conservatif d'une telle procédure introduit comme précédemment des dépendances angulaires supplémentaires dans la définition des sections efficaces multigroupes $\Sigma_t^{\mathfrak{g}}(\vec{r}, \vec{\Omega})$ et $\Sigma_{s,l,m}^{\mathfrak{g} \leftarrow \mathfrak{g}'}(\vec{r})$ dont on cherche le plus souvent à se “débarrasser” pour se ramener à des sections efficaces multigroupes $\bar{\Sigma}_t^{\mathfrak{g}}(\vec{r})$ et $\bar{\Sigma}_{s,l}^{\mathfrak{g} \leftarrow \mathfrak{g}'}(\vec{r})$. La motivation principale pour ne pas conserver ces sections “orientées” angulairement est leur difficulté de mise en œuvre dans un schéma de calcul où, par exemple, le calcul du flux sur le maillage énergétique fin est mené sur une géométrie 1D (typiquement représentant l'interface entre deux matériaux pour lesquels les effets d'anisotropie du flux sont prépondérants) pour obtenir des sections efficaces condensées pour des calculs ultérieurs en 2D ou 3D sur le cœur complet. En effet, la transformation par rotation à effectuer pour utiliser ces sections efficaces dans la géométrie multi-dimensionnelle suivant la position spatiale n'est pas univoque [16].

Grand nombre des approximations qui permettent de se ramener à $\bar{\Sigma}_t^{\mathfrak{g}}(\vec{r})$ et $\bar{\Sigma}_{s,l}^{\mathfrak{g} \leftarrow \mathfrak{g}'}(\vec{r})$ procèdent comme suit :

1. d'abord, le terme d'interaction “totale” est développé sur la base d'harmoniques sphériques

$(\mathcal{R}_{l,m})_{0 \leq l \leq L', -l \leq m \leq l}$ à l'ordre $L' \geq L$ en termes de $\Sigma_{t,l,m}^{\mathfrak{g}}(\vec{r}) = \frac{\sum_{g \in \mathcal{C}(\mathfrak{g})} \bar{\Sigma}_t^g(\vec{r}) \Phi_{l,m}^g(\vec{r})}{\Phi_{l,m}^{\mathfrak{g}}(\vec{r})}$ et regroupé avec le terme associé à la diffusion ;

2. ensuite une section efficace totale “arbitraire” $\bar{\Sigma}_t^{\mathfrak{g}}$ est introduite et la conservation globale est assurée en définissant de manière cohérente la section efficace de diffusion multigroupe par $\bar{\Sigma}_{s,l,m}^{\mathfrak{g} \leftarrow \mathfrak{g}'} = \Sigma_{s,l,m}^{\mathfrak{g} \leftarrow \mathfrak{g}'} + \delta_{\mathfrak{g}\mathfrak{g}'} (\bar{\Sigma}_t^{\mathfrak{g}} - \Sigma_{t,l,m}^{\mathfrak{g}})$ avec la convention $\Sigma_{s,l,m}^{\mathfrak{g} \leftarrow \mathfrak{g}'} = 0$ pour $l > L$.

En géométrie 1D, de par les symétries, $\{\mathcal{R}_{l,m}, m \in [-l, l]\}$ se réduit à $\{\mathcal{R}_{l,0} = P_l\}$, le polynôme de Legendre d'ordre l et parmi les différentes méthodes associées au choix de $\bar{\Sigma}_t^{\mathfrak{g}}$, on peut citer l'approximation dite P_L consistante ($\bar{\Sigma}_t^{\mathfrak{g}} = \Sigma_{t,L}^{\mathfrak{g}}$) ou encore l'approximation de Bell-Hansen-

Sandmeier (où $\bar{\Sigma}_i^g$ est choisie de telle sorte que le terme d'ordre $(L + 1)$ est approximativement 0).

En géométrie 2D ou 3D, les sections $\bar{\Sigma}_{s,l,m}^{g \leftarrow g'}$ dépendent de l'indice d'azimut et restent “orientées”. Afin de se débarrasser de cette dépendance angulaire, l'approche retenue dans [16] passe par la définition de problèmes de minimisation (aux sens des moindres carrés) formulés vis-à-vis des différents termes qui composent la source de diffusion : $\forall l \in \llbracket 0, L' \rrbracket, \forall g, g' \in \llbracket 1, G' \rrbracket$,

$$\bar{\Sigma}_{s,l}^{g \leftarrow g'}(\vec{r}) = \arg \min_{\Sigma(\vec{r})} \left(\int_{S^2} d^2\Omega \sum_{m=-l}^l \left[\left(\bar{\Sigma}_{s,l,m}^{g \leftarrow g'}(\vec{r}) - \Sigma(\vec{r}) \right) \Phi_{l,m}^{g'}(\vec{r}) \mathcal{R}_{l,m}(\vec{\Omega}) \right]^2 \right) \quad (\text{A.50})$$

La solution de ces problèmes donnent : $\forall l \in \llbracket 0, L' \rrbracket, \forall g, g' \in \llbracket 1, G' \rrbracket$,

$$\bar{\Sigma}_{s,l}^{g \leftarrow g'}(\vec{r}) = \frac{\sum_{m=-l}^l \bar{\Sigma}_{s,l,m}^{g \leftarrow g'}(\vec{r}) \left[\Phi_{l,m}^{g'}(\vec{r}) \right]^2}{\sum_{m=-l}^l \left[\Phi_{l,m}^{g'}(\vec{r}) \right]^2} \quad (\text{A.51})$$

Cette méthode a été implantée dans la cadre logiciel du solveur SNATCH et est discutée au § 1.5 dans le cadre du traitement de l'interface cœur-réfecteur dans un réacteur à neutrons rapides. Notons que, pour garantir la convergence des itérations de source (cf. § A.3), on doit vérifier que $\forall l \in \llbracket 0, L' \rrbracket, \left| \bar{\Sigma}_{s,l}^{g \leftarrow g'}(\vec{r}) \right| \leq \bar{\Sigma}_{s,0}^{g \leftarrow g'}(\vec{r})$. En pratique, quand cette inégalité n'est pas vérifiée, $\bar{\Sigma}_{s,l}^{g \leftarrow g'}(\vec{r})$ est remplacée par $\text{sign} \left(\bar{\Sigma}_{s,l}^{g \leftarrow g'}(\vec{r}) \right) \bar{\Sigma}_{s,0}^{g \leftarrow g'}(\vec{r})$.

Références

- [1] B. Davison, Neutron Transport Theory, The International Series of Monographs on Physics, Clarendon Press, Oxford, 1957.
- [2] E. E. Lewis, W. F. J. Miller, Computational Methods of Neutron Transport, ANS, La Grange Park, 1993.
- [3] A. Hébert, Applied Reactor Physics, Presses Internationales Polytechnique, 2009.
- [4] K. D. Lathrop, B. G. Carlson, Discrete ordinates angular quadrature of the neutron transport equation, Report LA-3186, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos (1964).
- [5] R. Le Tellier, A. Hébert, Anisotropy and particle conservation for trajectory-based deterministic methods, Nuclear Science and Engineering 158 (1) (2008) 28–39.
- [6] W. H. Reed, T. R. Hill, Triangular mesh methods for neutron transport equation, Technical Report LA-UR-73-479, Los Alamos National Laboratory (1973).
- [7] F. Brezzi, L. Marini, E. Süli, Discontinuous Galerkin methods for first-order hyperbolic problems, Mathematical Models and Methods in Applied Sciences 14 (2004) 1893–1903.
- [8] F. Brezzi, B. Cockburn, L. Marini, E. Süli, Stabilization mechanisms in discontinuous Galerkin finite element methods, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 195 (2006) 3293–3310.
- [9] J. Ragusa, J.-L. Guermond, G. Kanschat, A robust SN-DG-approximation for radiation transport in optically thick and diffusive regimes, Journal of Computational Physics 231 (4) (2012) 1947 – 1962.

- [10] M. Shephard, S. Dey, J. Flaherty, A straightforward structure to construct shape functions for variable p -order meshes, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 147 (1997) 209–233.
- [11] D. Fournier, **R. Le Tellier**, C. Suteau, Analysis of an a posteriori error estimator for the transport equation with S_n and discontinuous Galerkin discretizations, *Annals of Nuclear Energy* 38 (2011) 221–231.
- [12] D. Fournier, R. Herbin, **R. Le Tellier**, Discontinuous Galerkin discretization and hp-refinement for the resolution of the neutron transport equation, *SIAM J. Sci. Comput.* 35 (2) (2013) A936–A956.
- [13] D. Fournier, Analyse et développement de méthodes de raffinement hp en espace pour l'équation de transport des neutrons, Ph.D. thesis, Université de Provence (2011).
- [14] A. M. Weinberg, E. P. Wigner, *The Physical Theory of Neutron Chain Reactors*, University of Chicago Press, 1958.
- [15] **R. Le Tellier**, D. Fournier, C. Suteau, Reactivity perturbation formulation for a discontinuous Galerkin based transport solver and its use with adaptive mesh refinement, *Nuclear Science and Engineering* 167 (2011) 209–220.
- [16] P. Jacquet, Nouvelles méthodes de modélisation neutronique des réacteurs rapides de quatrième génération, Ph.D. thesis, Université de Grenoble (2011).

Vade-mecum pour le lecteur du Chapitre 2

Les différents paragraphes indépendants de cette annexe sont là en support à la lecture de la synthèse de mes travaux de recherche du Chapitre 2.

B.1 Formulation générale des équations de conservation des modèles macroscopiques de PROCOR

Nous donnons ici la forme générale des équations de conservation des divers modèles macroscopiques mis en œuvre dans PROCOR en partant des équations de conservation locales. Le lecteur est renvoyé à des ouvrages généraux (e.g. Annexes A&B de [1]) pour plus de détails.

Le domaine spatial est décomposé en différents régions Ω_n et la frontière de toute région Ω_n , notée $\partial\Omega_n$, est décomposée selon $\partial\Omega_n = \bigcup_{m \in \mathcal{N}(n)} \Gamma_{n,m} \cup \Gamma_{n,\text{ext}}$ où $\Gamma_{n,m} = \Gamma_{m,n}$ représente l'interface entre les régions n et m tandis que $\Gamma_{n,\text{ext}}$ correspond à la partie de $\partial\Omega_n$ appartenant à la frontière du domaine. $\mathcal{N}(n)$ est l'ensemble des indices des régions qui sont voisines de Ω_n .

L'équation de conservation locale pour n'importe quelle propriété intensive (en masse) p (unités $[\text{p}].\text{kg}^{-1}$) s'écrit dans le région Ω_n comme :

$$\frac{\partial \rho_n p_n}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \rho_n \vec{v}_n p_n + \vec{\nabla} \cdot \vec{\varphi}_n^p = \rho_n s_n^p \quad (\text{B.1})$$

où ρ_n est masse volumique, $\vec{v}_n$ la vitesse du fluide, $\vec{\varphi}_n^p$ le flux associé à la propriété p (unités $[\text{p}].\text{m}^{-2}.\text{s}^{-1}$) et s_n^p la densité massique du terme source pour cette propriété p (unités $[\text{p}].\text{kg}^{-1}.\text{s}^{-1}$).

En intégrant sur Ω_n et en utilisant les théorèmes de Reynolds et Gauss, l'équation de conservation macroscopique sur Ω_n s'écrit :

$$\frac{d}{dt} \left(\int_{\Omega_n} \rho_n p_n dV \right) + \int_{\partial\Omega_n} \left(\vec{\varphi}_n^p + \rho_n p_n (\vec{v}_n - \vec{u}_{\partial\Omega_n}) \right) \cdot \vec{dS} = \int_{\Omega_n} \rho_n s_n^p dV \quad (\text{B.2})$$

où $\vec{u}_{\partial\Omega_n}$ est la vitesse de déplacement de la frontière $\partial\Omega_n$.

Si l'on définit alors $\bar{p}_n$ et $\bar{S}_n^p$ par :

$$\bar{p}_n m_n \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\Omega_n} \rho_n p_n dV \quad (\text{B.3})$$

$$\bar{S}_n^p m_n \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\Omega_n} \rho_n s_n^p dV \quad (\text{B.4})$$

où $m_n = \int_{\Omega_n} \rho_n dV$ est la masse de la région n , l'Eq. B.2 peut être réécrite comme :

$$\frac{d}{dt} (\bar{p}_n m_n) + \int_{\partial\Omega_n} (\vec{\varphi}_n^p + \rho_n p_n (\vec{v}_n - \vec{u}_{\partial\Omega_n})) \cdot d\vec{S}_n = \bar{S}_n^p m_n \quad (\text{B.5})$$

où $d\vec{S}_n = \vec{n}_n dS$ avec $\vec{n}_n$ le vecteur normal de $\Gamma_{n,m}$ sortant de Ω_n .

Pour une interface $\Gamma_{n,m}$, les équations associées sont obtenues par intégration de l'Eq. B.1 sur un volume de contrôle à cheval sur l'interface et qui, à la limite, tend vers l'interface comme illustré à la Figure B.1. Dans ce processus d'intégration, similaire au précédent pour obtenir l'Eq. B.2, comme les volumes de part et d'autre de l'interface tendent vers zéro ($\epsilon \rightarrow 0$), les termes volumiques s'annulent tandis que les termes surfaciques sont restreints à des termes évalués de part et d'autre de $\Gamma_{n,m}$ i.e.

$$\int_{\Gamma_{n,m}} (\vec{\varphi}_n^p + (\rho_n p_n (\vec{v}_n - \vec{u}_{\partial\Omega_n}))) \cdot d\vec{S}_n + \int_{\Gamma_{n,m}} (\vec{\varphi}_m^p + (\rho_m p_m (\vec{v}_m - \vec{u}_{\partial\Omega_m}))) \cdot d\vec{S}_m = 0 \quad (\text{B.6})$$

Cette Eq. B.6, parfois appelée théorème de Kottchine, n'est valide que lorsqu'il n'y a pas d'accumulation, production ou transport de la propriété p au niveau de l'interface (voir, par exemple, [2] pour une généralisation de ces conditions d'interface avec de tels termes singuliers pour un système liquide-vapeur) ; en particulier, la tension de surface n'est pas prise en compte ici.

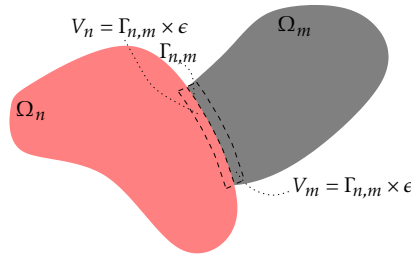


FIGURE B.1 – Volume de contrôle pour les équations à l'interface

Pour $p = 1$, l'équation de conservation de la masse est obtenue. En particulier, si l'on note :

$$\dot{m}_{\Gamma_{n,m},n} = \int_{\Gamma_{n,m}} \rho_n (\vec{v}_n - \vec{u}_{\partial\Omega_n}) \cdot d\vec{S}_n \quad (\text{B.7})$$

$$\dot{m}_{n,\text{ext}} = \int_{\Gamma_{n,\text{ext}}} \rho_n (\vec{v}_n - \vec{u}_{\partial\Omega_n}) \cdot d\vec{S}_n \quad (\text{B.8})$$

les flux massiques au travers de $\Gamma_{n,m}$ et $\Gamma_{n,\text{ext}}$ respectivement,¹ l'équation de conservation de la

1. $\dot{m}_{\Gamma_{n,m},n}$ (resp. $\dot{m}_{n,\text{ext}}$) est positif lorsque la masse va de Ω_n vers Ω_m (resp. de Ω_n vers l'extérieur).

masse pour Ω_n s'écrit à partir de l'Eq. B.5 comme :

$$\frac{dm_n}{dt} + \sum_{m \in \mathcal{N}(n)} \dot{m}_{\Gamma_{n,m},n} + \dot{m}_{n,\text{ext}} = 0 \quad (\text{B.9})$$

Les conditions d'interface associées pour $\Gamma_{n,m}$ (obtenues par l'Eq. B.6) sont données par :

$$\dot{m}_{\Gamma_{n,m},n} + \dot{m}_{\Gamma_{n,m},m} = 0 \quad (\text{B.10})$$

Ensuite, si l'on définit $\bar{p}_{\Gamma_{n,m},n}$, $\bar{p}_{n,\text{ext}}$, $\bar{\varphi}_{\Gamma_{n,m},n}^p$ et $\bar{\varphi}_{n,\text{ext}}^p$ par :

$$\bar{p}_{\Gamma_{n,m},n} \dot{m}_{\Gamma_{n,m},n} \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\Gamma_{n,m}} \rho_n p_n (\vec{v}_n - \vec{u}_{\partial\Omega_n}) \cdot \vec{dS}_n \quad (\text{B.11})$$

$$\bar{p}_{n,\text{ext}} \dot{m}_{n,\text{ext}} \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\Gamma_{n,\text{ext}}} \rho_n p_n (\vec{v}_n - \vec{u}_{\partial\Omega_n}) \cdot \vec{dS}_n \quad (\text{B.12})$$

$$\bar{\varphi}_{\Gamma_{n,m},n}^p S_{\Gamma_{n,m}} \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\Gamma_{n,m}} \bar{\varphi}_n^p \cdot \vec{dS}_n \quad (\text{B.13})$$

$$\bar{\varphi}_{n,\text{ext}}^p S_{\Gamma_{n,\text{ext}}} \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\Gamma_{n,\text{ext}}} \bar{\varphi}_n^p \cdot \vec{dS}_n \quad (\text{B.14})$$

où $S_{\Gamma_{n,m}}$ (resp. $S_{\Gamma_{n,\text{ext}}}$) est la surface de $\Gamma_{n,m}$ (resp. $\Gamma_{n,\text{ext}}$), l'Eq. B.5 peut s'écrire :

$$\frac{d}{dt} (\bar{p}_n m_n) + \sum_{m \in \mathcal{N}(n)} (\bar{\varphi}_{\Gamma_{n,m},n}^p S_{\Gamma_{n,m}} + \bar{p}_{\Gamma_{n,m},n} \dot{m}_{\Gamma_{n,m},n}) + \bar{\varphi}_{n,\text{ext}}^p S_{\Gamma_{n,\text{ext}}} + \bar{p}_{n,\text{ext}} \dot{m}_{n,\text{ext}} = \bar{S}_n^p m_n \quad (\text{B.15})$$

Les conditions d'interface de l'Eq. B.6 peuvent être formulées comme :

$$\bar{p}_{\Gamma_{n,m},n} \dot{m}_{\Gamma_{n,m},n} + \bar{p}_{\Gamma_{n,m},m} \dot{m}_{\Gamma_{n,m},m} + (\bar{\varphi}_{\Gamma_{n,m},n}^p + \bar{\varphi}_{\Gamma_{n,m},m}^p) S_{\Gamma_{n,m}} = 0 \quad (\text{B.16})$$

Pour $p = w^j$, la fraction massique de l'espèce j , la conservation de la masse de l'espèce j sur Ω_n est obtenue à partir de l'Eq. B.15 sous la forme :

$$\frac{d}{dt} (\bar{w}_n^j m_n) + \sum_{m \in \mathcal{N}(n)} (\bar{J}_{\Gamma_{n,m},n}^j S_{\Gamma_{n,m}} + \bar{w}_{\Gamma_{n,m},n}^j \dot{m}_{\Gamma_{n,m},n}) + \bar{w}_{n,\text{ext}}^j \dot{m}_{n,\text{ext}} = 0 \quad (\text{B.17})$$

où la notation $\bar{J}^j$ est utilisée pour les flux diffusifs relatifs à l'espèce j . Les conditions d'interface pour $\Gamma_{n,m}$ données par l'Eq. B.16 s'écrivent :

$$\bar{w}_{\Gamma_{n,m},n}^j \dot{m}_{\Gamma_{n,m},n} + \bar{w}_{\Gamma_{n,m},m}^j \dot{m}_{\Gamma_{n,m},m} + (\bar{J}_{\Gamma_{n,m},n}^j + \bar{J}_{\Gamma_{n,m},m}^j) S_{\Gamma_{n,m}} = 0 \quad (\text{B.18})$$

Pour $p = h$, l'enthalpie spécifique, en négligeant la dissipation visqueuse et le terme associé à la dérivée particulaire de la pression,² l'équation de conservation de l'énergie est obtenue à

2. Ces approximations sont cohérentes avec l'approximation de Boussinesq couramment utilisée pour traiter les écoulements en convection naturelle qui nous intéressent ici.

partir de l'Eq. B.15 sous la forme :

$$\frac{d}{dt}(\bar{h}_n m_n) + \sum_{m \in \mathcal{N}(n)} (\bar{\phi}_{\Gamma_{n,m},n} S_{\Gamma_{n,m}} + \bar{h}_{\Gamma_{n,m},n} \dot{m}_{\Gamma_{n,m},n}) + \bar{\phi}_{n,\text{ext}} S_{\Gamma_{n,\text{ext}}} + \bar{h}_{n,\text{ext}} \dot{m}_{n,\text{ext}} = \dot{q}_n^{\text{mass}} m_n \quad (\text{B.19})$$

où la notation $\bar{\phi}$ est utilisée pour les flux de chaleur et $\dot{q}_n^{\text{mass}}$ est la densité massique de puissance. Les conditions d'interface pour $\Gamma_{n,m}$ sont données par l'Eq. B.16 qui prend la forme :

$$\bar{h}_{\Gamma_{n,m},n} \dot{m}_{\Gamma_{n,m},n} + \bar{h}_{\Gamma_{n,m},m} \dot{m}_{\Gamma_{n,m},m} + (\bar{\phi}_{\Gamma_{n,m},n} + \bar{\phi}_{\Gamma_{n,m},m}) S_{\Gamma_{n,m}} = 0 \quad (\text{B.20})$$

B.2 Revue de la phénoménologie de stratification d'un bain de corium en cuve

Nous présentons ici une revue des phénomènes associés à la stratification d'un bain de corium (principalement sous le prisme des programmes expérimentaux passés qui ont servi à en appréhender les mécanismes). Nous ne couvrons que les aspects directement en lien avec la stratification et d'autres aspects thermochimiques qui entrent en jeu indirectement (la répartition des produits de fission entre phases, l'interaction du bain avec la cuve) ne sont pas abordés. Par ailleurs, nous ne traiterons pas non plus les effets des matériaux absorbants tels que le B₄C sur la stratification. Pour ces aspects complémentaires, le lecteur est référé à [3].

B.2.1 Equilibre thermodynamique à deux couches

En premier lieu, la lacune de miscibilité du mélange d'éléments (U, O, Zr, Fe, Ni, Cr) du corium conduit, à l'équilibre thermodynamique, à un phénomène de ségrégation gravitaire en deux phases liquides non miscibles, une "oxyde" et une "métal".³ Le programme expérimental OCDE-MASCA (voir [4]) a permis, entre autres, d'étudier dans des conditions d'interactions thermochimiques le mécanisme de transfert d'espèces (U, Zr) d'un corium oxyde vers une couche métallique qui peut conduire à une augmentation significative de la densité de cette couche métal et ainsi à sa relocalisation, par gravité, sous la couche oxyde. L'équilibre thermochimique associé dépend :

- de la température du mélange à l'équilibre ($\bar{T}$),
- du degré d'oxydation du Zr (C_n^0) et du rapport molaire U/Zr ($R_{U/Zr}^0$) du corium oxyde initial,
- du rapport entre la masse d'acier et la masse de corium oxyde initialement mises en présence (x_{steel}).

Pour $\bar{T}$, C_n^0 et $R_{U/Zr}^0$ fixés, il existe une valeur seuil de x_{steel} en dessous de laquelle la densité de la phase métallique est supérieure à celle de la phase oxyde. Ceci est illustré à la Figure B.2a par l'évolution calculée en fonction de x_{steel} des densités des phases métallique et oxyde à l'équilibre.⁴ Pour un corium sous-stœchiométrique défini par C_n^0 et $R_{U/Zr}^0$, la valeur seuil

3. Dans tout ce qui suit, on utilisera les termes "métal" et "oxyde" pour qualifier la nature d'une couche d'un bain de corium stratifié mais il faut garder à l'esprit que les couches ne sont pas "pures" *i.e.* une couche métal contient de l'oxygène et une couche oxyde présente un indice d'oxydation inférieur à un.

4. Ces calculs ont été réalisés avec le minimiseur d'énergie de Gibbs GEMINI2 et la base CALPHAD NUCLEA'09 [5] (voir Annexe B.3) associés à une loi de mélange idéale des espèces et des lois de densité des différentes espèces telles qu'implémentées dans le code TOLBIAC-ICB code [6] et interfacées dans PROCOR.

associée à x_{steel} notée $\tilde{x}_{steel}$ correspond au seuil d'inversion de stratification et définit la masse maximum d'acier qui peut être ajouté au système sous la forme d'une couche métallique lourde sous la phase oxyde. Ainsi, ces essais servent largement, pour la définition des configurations de stratification stationnaires "enveloppes" dans des évaluations du chargement thermique sur la cuve (voir, par exemple, [7]).

Une partie des essais de la série MA du programme MASCA (MA-1 à MA-6) réalisés en atmosphère neutre dans l'installation RASPLAV-3 du NITI a montré, à la fois par l'observation de l'état de la surface libre au cours de l'expérience et des examens post-mortem des lingots, la possibilité des deux configurations stratifiées en régime stationnaire (telles qu'illustrées à la Figure B.3). Ces essais ont été réalisés par chauffage inductif en creuset froid et mettaient en jeu de l'ordre de 2kg de corium sous-oxydé pour un diamètre du creuset de 7cm ; le régime stationnaire a été atteint dans tous les cas pour un temps court inférieur à la demi-heure.

D'autres programmes d'essais ont, par la suite, été réalisés dans les mêmes installations que les essais du programme MASCA dans le cadre de contrats privés ; citons, par exemple, les essais du programme EPICOR (voir [3, 8]) financés par AREVA-GmbH qui visaient, entre autres, à quantifier le seuil d'inversion de stratification associé à x_{steel} pour un corium ($R_{U/Zr}^0 = 0.83$ et $C_n^0 = 35\%$) typique d'un réacteur à eau bouillante c'est-à-dire avec $R_{U/Zr}^0$ nettement plus faible que pour un réacteur à eau pressurisée ($R_{U/Zr}^0 \approx 1.2$).

Ensuite, on peut citer l'installation COSMOS en Corée (KAERI, voir [9]) basée sur la même technologie que l'installation RASPLAV-3 avec un creuset légèrement plus grand (diamètre de 9.45cm) et une masse de corium oxyde de l'ordre de 5kg. Dans la même veine que les essais précédemment cités, COSMOS a pour but affiché de caractériser le seuil d'inversion de stratification en termes de x_{steel} pour des coriums représentatifs de conditions accidentelles pour le réacteur APR1400.

Ce type d'essais caractérise essentiellement un état stationnaire d'un système à deux couches proche d'une configuration d'équilibre thermodynamique. En effet, par les masses mises en jeu, le transitoire de stratification se résume à un mouvement "en bloc" de la phase métal.

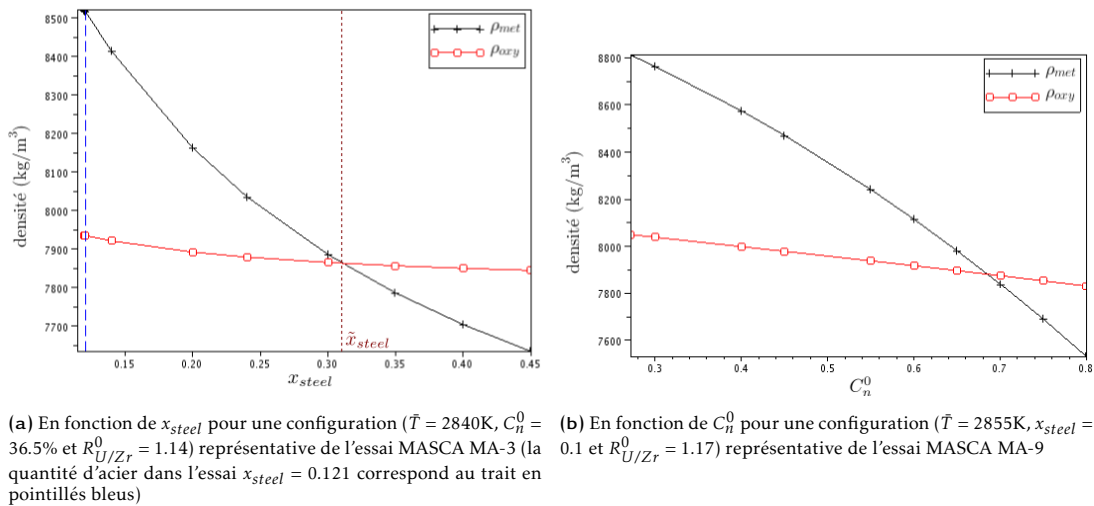


FIGURE B.2 – Evolution calculée des densités des phases oxyde (ρ_{oxy}) et métal (ρ_{met}) à l'équilibre

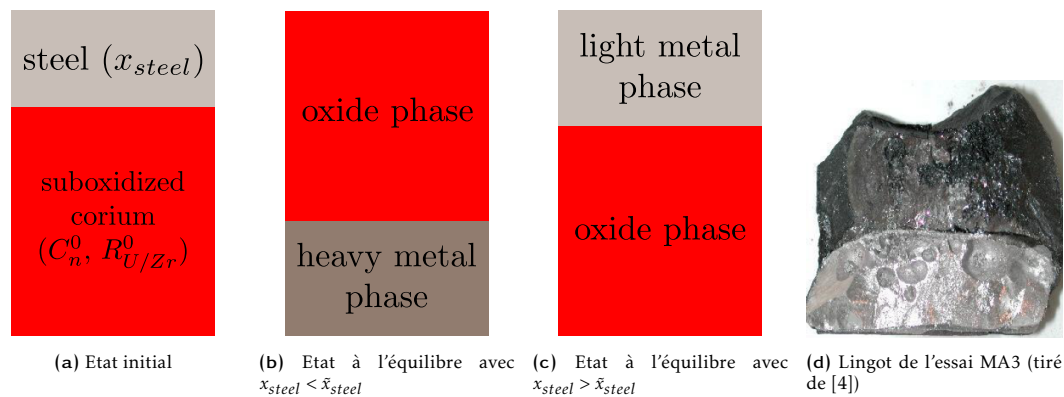


FIGURE B.3 – Vision schématique des configurations initiale et à l'équilibre des essais de la série MA du programme MASCA - lingot post-mortem de l'essai MA3

B.2.2 Cinétique de stratification

La connaissance seule de l'état de stratification à l'état stationnaire n'est pas suffisante pour une évaluation "enveloppe" du chargement thermique de la cuve vis-à-vis du transitoire de stratification et du possible phénomène de concentration de flux de chaleur ("focusing effect") associé à une fine couche de métal au-dessus du bain d'oxyde.

Un essai prototypique de plus grande taille du programme MASCA a permis d'avancer sur cet aspect. Il s'agit de l'essai MASCA-RCW [10] d'interaction entre environ 45.3kg de corium sous-oxydé ($R_{U/Zr}^0 = 1.2$, $C_n^0 = 32\%$) avec une masse d'acier d'environ 4.6kg (plaçant le système total, au sens de l'équilibre thermodynamique, en dessous du seuil d'inversion). Cet essai a été réalisé en auto-creuset (diamètre $\approx 18\text{cm}$); il a été interrompu au bout de vingt minutes et l'analyse du lingot post-mortem montre clairement que le système n'avait pas atteint un état stationnaire à deux couches comme le montre la Figure B.4. L'interprétation faite de cet essai [11] conduit à considérer ce lingot comme l'état solidifié du système au cours du transitoire de relocalisation de l'acier sous l'oxyde et les phases métalliques se répartissent comme suit :

- une phase métallique légère continue (7, sur la Figure B.4) au dessus du bain d'oxyde (5);
- des inclusions métalliques enrichies en U et Zr interprétées comme des gouttelettes (4) en train de traverser l'oxyde (5) vers le bas ;
- une phase métallique lourde continue (2) sous la couche oxyde (5).

A partir de là, les mécanismes mis en jeu, tels que proposés dans [11], sont :

- le transfert d'U et Zr métallique vers l'acier à son interface avec l'oxyde (associé au décalage de la réaction $UO_2 + Zr \xrightleftharpoons[(2)]{(1)} ZrO_2 + U$ dans la direction (1) dans la phase oxyde, au niveau de l'interface);
- la formation et le détachement par instabilités de Rayleigh-Taylor (associées à cet enrichissement local de la phase métallique au-dessus de l'oxyde) de gouttelettes métalliques plus lourdes que la phase oxyde qui "coulent" ; ce mécanisme est plus rapide que la diffusion effective de U et Zr dans la phase métallique haute comme en témoigne l'analyse post-mortem de cette phase et la présence d'un "gradient" de concentration en U et Zr à l'interface avec l'oxyde (voir Figure B.4).

Dans [11], le temps caractéristique associé au transfert de masse à l'interface oxyde-métal (resp. à la relocalisation des gouttelettes au travers de l'oxyde) est évalué en ordre de grandeur à 1000s (resp. 1s).

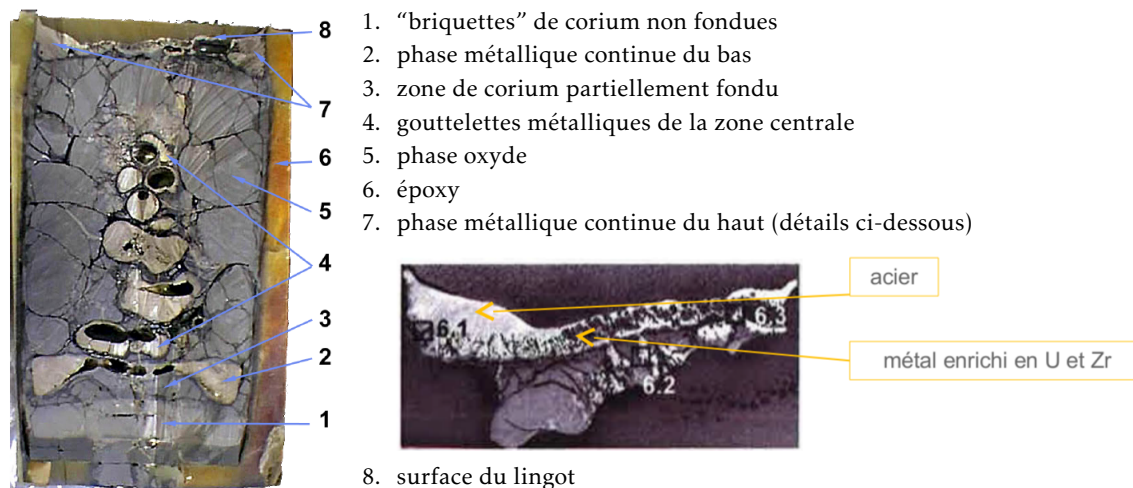


FIGURE B.4 – Lingot post-mortem solidifié de l'essai MASCA-RCW (adapté de [10])

B.2.3 Influence d'une croûte à l'interface acier/oxyde

Dans les essais du programme MASCA, les interactions entre l'acier et un bain oxyde ont été étudiées dans des configurations sans croûte à l'interface. Dans la situation réacteur, les modélisations faites du bain de corium en fond de cuve considèrent en général, de par les hypothèses de ségrégation qui sont faites, qu'une croûte réfractaire à l'interface est présente. Son épaisseur estimée est millimétrique (au sens du bilan thermique stationnaire associé à ces modélisations du bain) et sa tenue mécanique incertaine mais pour autant, son potentiel rôle de "barrière" solide au transfert de masse interfacial pose question.

C'est en ce sens que le programme expérimental CORDEB⁵ mené dans l'installation RASPLAV-3 a inclus un volet (essais CD1-01 et CD1-02) consacré à l'étude de l'impact d'une croûte sous-oxydée (voir [12]) sur la stratification sous atmosphère neutre (tel que schématisé à la Figure B.5a). Ces essais ont montré qu'après une période d'incubation (voir Figure B.5b) de l'ordre de l'heure, le transfert de l'acier au travers de cette croûte a bien lieu amenant le système, avec les paramètres considérés dans ces essais, à une inversion de stratification (la phase métallique devenant plus légère que la phase oxyde (voir Figure B.5c). L'interprétation faite de cet essai dans [12] a permis d'avancer des pistes sur les mécanismes d'interaction entre l'acier et la croûte :

- d'abord, l'acier diffuse dans la croûte par le biais des inclusions métalliques (enrichies en Zr) présentes dans cette croûte sous-oxydée ;
- ensuite, l'interaction entre la phase métallique (acier-Zr) intergranulaire et les grains oxydes de la croûte conduit à la dissolution partielle des grains augmentant ainsi la fraction liquide dans la croûte oxyde, et permet la percolation de cette phase liquide à travers la croûte ;

5. Ce programme expérimental financé par IRSN, CEA, EDF, et AREVA a pris la forme d'un contrat bilatéral entre l'IRSN et le NITI pour réaliser cinq campagnes d'essais dans l'installation RASPLAV-3 entre 2012 et 2015.

- pour finir, un écoulement convectif de cette phase liquide au travers de la croûte se met en place et cette phase métallique interagit avec le bain oxyde (de manière analogue aux essais précédents sans croûte). Dans le même temps, la phase métallique au-dessus de la croûte s'enrichit légèrement en U et Zr.

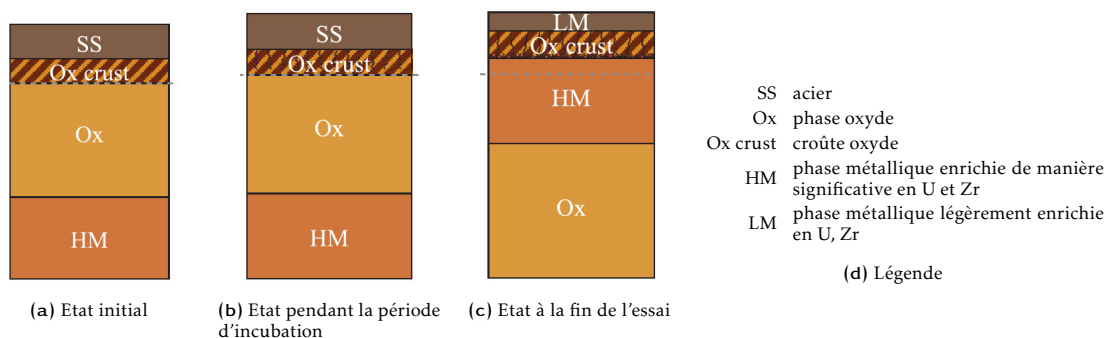


FIGURE B.5 – Schémas de principe relatifs aux essais CD1 du programme CORDEB (adaptés de [12])

Ces essais permettent clairement de conclure que l'impact de la croûte est significatif : le transfert de l'acier est bien possible mais le temps caractéristique associé est largement modifié : dans l'essai MASCA-MA6 (qui mettait en jeu un inventaire comparable à ces essais CD1), l'état stationnaire à deux couches a été atteint en moins d'une demi-heure tandis que dans l'essai CD2, arrêté au bout de 3h, le transfert de l'acier n'est pas terminé. Pour autant, ces essais ne permettent pas d'établir clairement et de quantifier les différents mécanismes (interactions chimiques, écoulement) à l'œuvre (en particulier dans la dernière phase).

B.2.4 Influence de l'atmosphère gazeuse

Dans les paragraphes précédents concernant l'interaction entre acier et bain oxyde sous atmosphère neutre, nous avons raisonné sur le paramètre x_{steel} et le seuil associé d'inversion de stratification. De la même manière, pour $\bar{T}$, x_{steel} et $R_{U/Zr}^0$ fixés, il existe une valeur seuil de C_n^0 au-dessus de laquelle la densité de la phase métallique est inférieure à celle de la phase oxyde, tel qu'illustré par le calcul à la Figure B.2b. Ainsi, l'oxydation du bain par l'atmosphère gazeuse est *a priori* un phénomène important du point de vue de la stratification et a fait l'objet d'essais par le passé, entre autres, au sein du programme MASCA. Comme le système considéré (*i.e.* le bain stratifié et l'atmosphère oxydante) est hétérogène, en principe, la cinétique globale d'oxydation dépend de deux mécanismes : la cinétique des réactions chimiques redox et le transport des réactifs (resp. des produits des réactions) vers (resp. depuis) l'interface. En pratique, dans les essais passés en atmosphère gazeuse oxydante, la cinétique d'oxydation mesurée correspond à un régime limité par l'apport d'oxydant ("oxidant starvation"), de telle manière que c'est la convection de l'atmosphère gazeuse qui est le phénomène déterminant. Dans ces essais, l'état final du système correspond généralement bien à une géométrie stratifiée à deux couches qui s'interprète de la même manière que les essais en atmosphère neutre mais en tenant compte de la quantité d'oxygène absorbé.

Dans les essais passés en revue dans [13, 14], la surface du bain en contact avec l'atmosphère gazeuse est une surface libre. De la même manière que précédemment, le programme CORDEB a cherché à compléter la connaissance associée à cette thématique en incluant un volet (série

d'essais CD2) consacré à l'étude de l'impact d'une croûte sur la stratification sous atmosphère oxydante d'un bain stratifié.

L'interprétation faite de ces essais montre que la croûte a, à nouveau, par sa composition et son épaisseur, un impact important sur le transitoire par le biais, cette fois-ci, de la cinétique d'absorption de l'oxygène de l'atmosphère gazeuse. La cinétique globale d'oxydation du bain correspond bien à un régime limité par l'apport d'oxydant mais le phénomène limitant est ici le "transfert" de l'oxygène au travers de la croûte. L'analyse quantitative en termes des cinétiques d'absorption est compliquée par les difficultés rencontrées dans ces expériences pour maîtriser la composition initiale de la croûte et son épaisseur durant le transitoire.

B.3 Introduction à la méthode CALPHAD et aux bases thermodynamiques associées

La connaissance des "propriétés" thermodynamiques relatives au corium prend la forme de bases de données thermodynamiques construites selon la méthode CALPHAD (CALculation of PHase Diagram) [15]. Ces bases de données font l'objet d'une consolidation expérimentale continue [16, 17, 18] et représentent la source principale de données thermodynamiques relatives au corium.

Cette méthode est une technique semi-empirique de modélisation et de calcul des diagrammes de phases qui repose sur la détermination des énergies de Gibbs des différentes phases d'un système multicomposant. Pour chaque phase, cette énergie libre de Gibbs est décrite par un modèle mathématique qui dépend des variables d'état : composition, température, pression ainsi que d'un ensemble de coefficients ajustables. Ces paramètres sont déterminés à partir de données expérimentales (limite de solubilité, analyse calorimétrique, etc ...), de résultats de calculs *ab initio* et éventuellement à partir de données prédites par des modèles empiriques, par le biais d'une procédure d'ajustement itérative au cours de laquelle on cherche à reproduire au mieux les données disponibles (diagrammes de phases, données thermodynamiques). Dans cette méthode, la description des systèmes d'ordres élevés (à partir du quaternaire) est en pratique obtenue à partir de l'extrapolation des systèmes d'ordres inférieurs (systèmes binaires et ternaires) de telle sorte que cette description ne fait intervenir qu'un faible nombre de paramètres ajustables supplémentaires. Les paramètres ajustables dépendent du modèle thermodynamique de la phase. La plupart de ces modèles peuvent être décrits par le biais du formalisme basé sur l'énergie des composés ("Compound Energy Formalism" – CEF) dans lequel les constituants d'une phase (atomes neutres, ions, lacunes, etc. dont l'ensemble définit les variables d'état relatives à la composition) sont distribués sur un ou plusieurs sous-réseaux où ils se mélangent en solution (idéale ou non). En tous les cas, l'énergie libre de Gibbs par unité formulaire $\mathcal{G}_m^\gamma$ d'une phase γ est une fonction de la forme

$$\mathcal{G}_M^\gamma : T, p, \left(y_k^{(s)} \right)_{k,s} \rightarrow G \quad (\text{B.21})$$

où T est la température (K), p la pression (Pa) et $y_k^{(s)}$ la fraction molaire du constituant k dans le sous-réseau s de telle sorte que $\sum_k y_k^{(s)} = 1$. Elle est décomposée selon

$$G = {}^{ref}\mathcal{G}_M^\gamma + {}^{id}\mathcal{G}_M^\gamma + {}^{ex}\mathcal{G}_M^\gamma + {}^{phy}\mathcal{G}_M^\gamma \quad (\text{B.22})$$

avec

- ${}^{ref}\mathcal{G}_M^\gamma$, l'énergie libre de référence relative à chacun des constituants pris séparément ;

- $^{id}\mathcal{G}_M^\gamma$, la contribution associée à un mélange idéal, c'est à dire pour lequel les interactions entre les constituants sont toutes identiques ;
- $^{ex}\mathcal{G}_M^\gamma$, le terme qui traduit la non-idéalité du mélange ;
- $^{phy}\mathcal{G}_M^\gamma$, la contribution éventuelle des différentes propriétés physiques (par exemple, les propriétés magnétiques) à l'énergie de Gibbs de la phase γ du système.

L'énergie de Gibbs par mole de composants $\mathcal{G}_m^\gamma$ (J/mole) est définie à partir de $\mathcal{G}_M^\gamma$ par :

$$\mathcal{G}_m^\gamma : T, p, \left(y_k^{(s)}\right)_{k,s} \rightarrow \mathcal{G}_M^\gamma \left(T, p, \left(y_k^{(s)}\right)_{k,s}\right) / \sum_i \sum_s a^{(s)} \sum_k S_i(k) y_k^{(s)} \quad (\text{B.23})$$

où

- $a^{(s)}$ est le nombre de sites du sous-réseau s ;
- $S_i(k)$ est le coefficient stœchiométrique associé au composant i dans le constituant k .

Le dénominateur de l'Eq. B.23 représente le nombre de moles de composants par unité formulaire. De la même manière, l'énergie de Gibbs spécifique (J/kg) est obtenue par :

$$\mathcal{G}^\gamma : T, p, \left(y_k^{(s)}\right)_{k,s} \rightarrow \mathcal{G}_M^\gamma \left(T, p, \left(y_k^{(s)}\right)_{k,s}\right) / \sum_i \sum_s a^{(s)} \sum_k M_i S_i(k) y_k^{(s)} \quad (\text{B.24})$$

où M_i est la masse molaire du composant i .

B.3.1 Calcul d'équilibres thermodynamiques

Cette information sert en particulier au calcul des conditions d'équilibre thermodynamique pour les systèmes multicomposants dans diverses conditions.

Par exemple, à température, pression et composition globale (inventaire en composants) fixés, la proportion des différentes phases à l'équilibre ainsi que leur composition sont obtenues par la minimisation de l'énergie libre de Gibbs G du système décomposée selon les différentes phases possibles sous la forme :

$$G = \sum_\gamma n^\gamma \mathcal{G}_m^\gamma \left(T, p, \left(y_k^{(s)}\right)_{k,s}\right) \quad (\text{B.25})$$

où n^γ est le nombre de moles de la phase γ .

B.3.2 Evaluation directe de propriétés thermodynamiques

Ces données peuvent aussi être utilisées pour évaluer les propriétés thermodynamiques des phases hors équilibre en utilisant directement les fonctions $\mathcal{G}^\gamma$ et leurs dérivées par le biais de relations thermodynamiques standards.

En particulier, l'enthalpie spécifique pour la phase γ peut s'écrire :

$$\mathcal{H}^\gamma : T, p, \left(y_k^{(s)}\right)_{k,s} \rightarrow H = \mathcal{G}^\gamma \left(T, p, \left(y_k^{(s)}\right)_{k,s}\right) + T \mathcal{S}^\gamma \left(T, p, \left(y_k^{(s)}\right)_{k,s}\right) \quad (\text{B.26})$$

avec l'entropie spécifique donnée par :

$$\mathcal{S}^\gamma : T, p, \left(y_k^{(s)}\right)_{k,s} \rightarrow S = - \left. \frac{\partial \mathcal{G}^\gamma}{\partial T} \right|_{p, \left(y_k^{(s)}\right)_{k,s}} \left(T, p, \left(y_k^{(s)}\right)_{k,s}\right) \quad (\text{B.27})$$

Pour cette même phase, on peut aussi obtenir la capacité calorifique à pression constante Cp_γ sous la forme :

$$Cp_\gamma : T, p, \left(y_k^{(s)}\right)_{k,s} \rightarrow -T \left. \frac{\partial^2 \mathcal{G}^\gamma}{\partial T^2} \right|_{p, \left(y_k^{(s)}\right)_{k,s}} \left(T, p, \left(y_k^{(s)}\right)_{k,s} \right) \quad (\text{B.28})$$

Pour ce qui est de la dépendance à la pression, on notera que, formellement, le volume molaire (et par conséquent la densité) de la phase γ peut être obtenue par $\frac{\partial \mathcal{G}_m^\gamma}{\partial p}$, la dérivée de l'énergie de Gibbs molaire par rapport à la pression p . Pour autant, dans les bases CALPHAD relatives au corium, la dépendance de $\mathcal{G}_m$ à la pression n'est décrite que pour la phase gazeuse de telle sorte que l'on ne peut pas évaluer le volume molaire par cette approche pour les phases liquides ou solides qui nous intéressent dans la modélisation du corium.

B.4 Introduction à la méthode du champ de phase

C'est dans le contexte de la modélisation de l'évolution de microstructures complexes lors de transformations de phases que la méthode du champ de phase a connu un développement important au cours des dernières décennies. Ses applications diverses incluent la croissance de précipités dans une matrice, la décomposition spinodale, la croissance dendritique, les transitions de phase solide-solide, etc. (voir, par exemple, les revues faites dans [19, 20]).

Si macroscopiquement les interfaces séparant des phases α et β aux propriétés différentes apparaissent "raides" (*i.e.* d'épaisseur nulle), à l'échelle microscopique, l'interface entre deux domaines peut présenter un caractère diffus. C'est notamment le cas des interfaces liquide-liquide qui font apparaître une zone de transition de quelques rangées atomiques. Suivant la représentation de l'interface, comme illustré à la Figure B.6, les propriétés physiques ϕ de chacune des phases sont alors soit discontinue soit continue au niveau de cette interface.

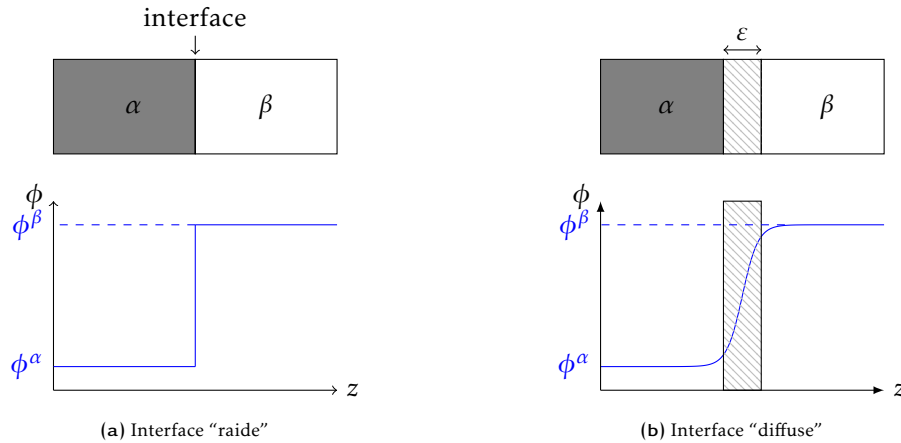


FIGURE B.6 – Interface "raide" vs. interface "diffuse"

C'est à la famille des méthodes à interface diffuse qu'appartient la méthode du champ de phase en introduisant un ensemble de variables $\phi(\vec{r}, t)$, couramment appelées paramètres d'ordre, pour décrire l'état local du système. Cette approche fait ainsi apparaître une nouvelle variable, l'épaisseur de l'interface diffuse entre deux domaines α et β ; la localisation de l'interface est alors implicite et associée aux valeurs prises par les paramètres d'ordre.

Le concept d'interface diffuse a été initialement introduit par Van der Waals dans son étude de la transition liquide-vapeur [21] tandis que la notion de paramètre d'ordre a été introduite par Landau dans sa théorie phénoménologique des transitions de phase ordre-désordre qui se produisent à une température critique T_c . Ce paramètre d'ordre est une variable supplémentaire (valant 0 dans la phase désordonnée et prenant une valeur non nulle dans la phase ordonnée) introduite pour faire le développement limité de l'énergie libre au voisinage de la transition de phase :

$$F(\phi, T) = F_0 + A(T)\phi + B(T)\phi^2 + C(T)\phi^3 + \dots \quad (\text{B.29})$$

où F_0 est l'énergie libre de la phase désordonnée à haute température. L'état d'équilibre du système correspond au minimum du potentiel thermodynamique $F(\phi, T)$. Ainsi, à $T > T_c$, l'énergie libre du système doit présenter un seul minimum en $\phi=0$ alors qu'en dessous de la température critique, le minimum d'énergie libre doit correspondre à une valeur de ϕ non nulle. Le choix classique pour le potentiel thermodynamique $F(\phi, T)$ dans le cas d'un paramètre d'ordre scalaire avec symétrie est un développement à l'ordre 4 sous la forme :

$$F(\phi, T) = F_0 + a(T - T_c)\phi^2 + c\phi^4 \quad (a, c > 0) \quad (\text{B.30})$$

telle qu'illustré à la Figure B.7.

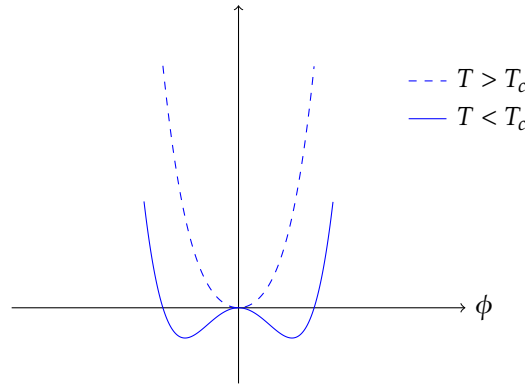


FIGURE B.7 – Energie libre $F(\phi, T) - F_0$ pour $T > T_c$ et $T < T_c$

On qualifie l'approche phénoménologique de Landau de "champ moyen" *i.e.* les variations spatiales du paramètre d'ordre ne sont pas prises en compte et la valeur du paramètre d'ordre ϕ est une valeur moyenne obtenue sur l'ensemble des configurations spatiales.

Ginzburg et Landau ont ensuite proposé une approche phénoménologique pour décrire l'énergie libre d'un système présentant des inhomogénéités spatiales du paramètre d'ordre ϕ à partir d'une fonctionnelle $\mathcal{F}$ de la forme

$$\mathcal{F}[\phi] = \int_{\Omega} \left(f(\phi, T) + \frac{\kappa}{2} \|\vec{\nabla} \phi\|^2 \right) dV \quad (\text{B.31})$$

avec $f(\phi, T)$ la densité d'énergie libre (en J.m^{-3}). Les inhomogénéités spatiales sont prises en compte au plus bas ordre par le terme de gradient carré qui traduit la pénalisation énergétique de la formation d'une interface. Cette fonctionnelle d'énergie libre est appelée fonctionnelle de Ginzburg-Landau et elle est qualifiée de théorie de "champ moyen inhomogène". En effet, les variations du paramètre d'ordre sur une longueur de corrélation inférieure à l'échelle spatiale

sur laquelle se produisent les fluctuations $\|\vec{\nabla}\phi\|^2$ du paramètre d'ordre ϕ ne sont pas prises en compte. Cette fonctionnelle présente un caractère mésoscopique puisque la variable de champ de phase ϕ résulte d'une moyenne locale sur l'ensemble des configurations microscopiques (par une opération de "coarse-graining", voir [22]) et conduit à un modèle où l'interface est diffuse à cette échelle dite "mésoscopique".

Dans leur travaux subséquents [23, 24], Cahn et Hilliard ont utilisé une fonctionnelle de Ginzburg-Landau similaire à l'Eq. B.31 où le paramètre d'ordre est la composition locale c en élément B d'un alliage binaire A-B. Cette fonctionnelle est obtenue, en considérant de faibles variations de la composition c , à partir d'un développement de Taylor autour d'une composition moyenne et en ne prenant que le terme $\|\vec{\nabla}c\|^2$ pour les dérivées spatiales de la concentration.

Ces divers travaux ont jeté les bases de la méthode du champ de phase, nommément, la notion de paramètre d'ordre, le caractère diffus de l'interface et la représentation du système au travers d'une fonctionnelle d'énergie libre. Ainsi, dans une méthode de champ de phase pour un système isotherme, le point départ est l'écriture d'une fonctionnelle $\mathcal{F}$, dite fonctionnelle de Ginzburg-Landau généralisée, qui représente l'énergie libre du système et l'identification des paramètres d'ordre associés. Ces paramètres sont, soit une quantité physique conservée qui obéit à une loi de conservation, soit une quantité non-conservée. A titre d'exemple, considérons un système binaire diphasique décrit par la fraction molaire x d'un des deux composants et par φ , l'indicatrice de phase ; dans ce cas, la fonctionnelle s'écrit :

$$\mathcal{F}[\varphi, x] = \int_{\Omega} \left(f_0(\varphi, x) + \frac{\kappa}{2} \|\vec{\nabla}\varphi\|^2 + \frac{\varepsilon}{2} \|\vec{\nabla}x\|^2 \right) dV \quad (\text{B.32})$$

telle qu'introduite pour la modélisation de la solidification d'un liquide binaire [25]. Dans cette définition, on retrouve

- $f_0(\varphi, x)$ la densité d'énergie libre d'un système homogène caractérisé par les valeurs locales de φ et x ; pour un système diphasique, elle peut être écrite sous la forme

$$f_0(\varphi, x) = f_p(\varphi, x) + \omega g(\varphi) \quad (\text{B.33})$$

avec $f_p(\varphi, x)$ obtenue par interpolation des énergies libres des phases en présence et $\omega g(\varphi)$ qui décrit un potentiel en double puits de profondeur ω qui présente deux minima distincts, un pour chaque phase.

- $\frac{\kappa}{2} \|\vec{\nabla}\varphi\|^2$ et $\frac{\varepsilon}{2} \|\vec{\nabla}x\|^2$ associés à l'énergie et l'épaisseur interfaciales ; comme les coefficients κ et ε sont positifs, on obtient bien des termes de gradients défavorables au sens du minimum en énergie qui se traduisent par une tension de surface.

Le système d'équations aux dérivées partielles qui régit le comportement du système est alors obtenu en considérant les dérivées variationnelles de $\mathcal{F}[\varphi, x]$, par exemple, par rapport à φ , $\frac{\delta \mathcal{F}[\varphi(\cdot), x]}{\delta \varphi(\cdot)}$ qui doivent tendre vers une valeur constante à l'équilibre de telle manière que $\mathcal{F}[\varphi, x]$ atteigne un minimum vis-à-vis des variations de φ et x . La forme que prend ces équations dépend alors du caractère conservé ou non de chacun de ces paramètres d'ordre. Ainsi, dans notre exemple, φ n'est pas conservée tandis que x l'est et une forme classique des équations

associées est donnée par :

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = -L \frac{\delta \mathcal{F}[\varphi(\cdot), x]}{\delta \varphi(\cdot)} = -L \left(\frac{\partial f_0(\varphi, x)}{\partial \varphi} - \kappa \nabla^2 \varphi \right) \quad (\text{B.34})$$

$$\frac{\partial x}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot M \vec{\nabla} \frac{\delta \mathcal{F}[\varphi, x(\cdot)]}{\delta x(\cdot)} = \vec{\nabla} \cdot M \vec{\nabla} \left(\frac{\partial f_0(\varphi, x)}{\partial x} - \varepsilon \nabla^2 x \right) \quad (\text{B.35})$$

soit une équation dite de Allen-Cahn et une équation dite de Cahn-Hilliard avec les paramètres cinétiques L et M appelés “mobilités”. On peut vérifier que ces équations obéissent bien au second principe thermodynamique puisque $\frac{d\mathcal{F}[\varphi, x]}{dt} \leq 0$.

Références

- [1] M. Kaviani, Essentials of Heat Transfer, Cambridge University Press, 2011.
- [2] A. Prosperetti, Boundary conditions at a liquid-vapor interface, *Meccanica* 14 (1) (1979) 34–47.
- [3] M. Fischer, P. Levi, G. Langrock, A. A. Sulatsky, E. V. Krushinov, The impact of thermal chemical phenomena on the heat fluxes into the RPV during in-vessel melt retention, in : Proc. of Int. Congress on Advances in Nuclear Power Plants ICAPP 2011, ANS, Nice, France, 2011.
- [4] D. F. Tsurikov, V. F. Strizhov, S. V. Bechta, V. N. Zagriazkin, N. P. Kiselev, Main results of MASCA1 and 2 projects, Tech. rep., RRC Kurchatov Institute (2007).
- [5] B. Cheynet, P. Chevalier, E. Fischer, Thermosuite, *Calphad* 26 (2) (2002) 167–174.
- [6] B. Spindler, B. Tourniaire, J. M. Seiler, Simulation of MCCI with the TOLBIAC-ICB code based on the phase segregation model, *Nuclear Engineering and Design* 236 (2006) 2264–2270.
- [7] H. Esmaili, M. Khatib-Rahbar, Analysis of in-vessel retention and ex-vessel fuel coolant interaction for AP1000, Tech. Rep. NUREG/CR-6849 ERI/NRC 04-201, U.S. Nuclear Regulatory Commission, Office of Nuclear Regulatory Research (2004).
- [8] M. Fischer, A. A. Sulatsky, E. V. Krushinov, Impact of B_4C on the stratification of molten steel and BWR-type core material under IVR conditions, in : Proc. of Int. Congress on Advances in Nuclear Power Plants ICAPP 2012, ANS, Chicago, USA, 2012.
- [9] K.-H. Kang, R.-J. Park, S.-H. Hong, S.-W. Hong, K. S. Ha, An experimental study on layer inversion in the corium pool during a severe accident, *Nuclear Engineering and Design* 278 (2014) 163 – 170.
- [10] V. G. Asmolov, S. S. Abalin, Y. A. Veselkin, V. Y. Vishnevsky, V. V. Vlasov, B. L. Gershman, Y. G. Degaltsev, Y. K. Dyakov, J. F. Isaev, A. N. Kiselev, N. P. Kiselev, A. M. Kovalev, A. G. Ol’khovsky, K. V. Pechalin, L. M. Semenov, V. F. Strizhov, T. V. Trushkina, V. S. Uglov, Y. M. Utkin, V. V. Chudanov, A. E. Aksenova, V. A. Pervichko, L. M. Khazanivich, RCW post-test analysis results, Technical report MP-TR-11, Russian Research Centre Kurchatov Institute (2003).
- [11] G. Ratel, F. Deffort, K. Froment, B. Tourniaire, J. M. Seiler, Considerations on mass transfer kinetics for layer inversion and layer oxidation : from MASCA program to the reactor situation, in : Proc. of MASCA-2 Seminar, Cadarache, France, 2007.

- [12] V. I. Almyashev, V. S. Granovsky, V. B. Khabensky, S. Y. Kotova, E. V. Krushinov, A. A. Sulatsky, S. A. Vitol, V. V. Gusarov, F. Fichot, B. Michel, P. Piluso, **R. Le Tellier**, M. Fischer, C. Le Guennic, N. Bakouta, Experimental study of transient phenomena in the three-liquid oxidic-metallic corium pool, *Nuclear Engineering and Design* 332 (2018) 31 – 37.
- [13] A. A. Sulatsky, S. A. Smirnov, V. S. Granovsky, V. B. Khabensky, E. V. Krushinov, S. A. Vitol, S. Y. Kotova, M. Fischer, S. Hellmann, W. Tromm, A. Miassoedov, D. Bottomley, P. Piluso, M. Barrachin, Oxidation kinetics of corium pool, *Nuclear Engineering and Design* 262 (2013) 168 – 179.
- [14] V. I. Almyashev, V. S. Granovsky, V. B. Khabensky, E. V. Krushinov, A. A. Sulatsky, S. A. Vitol, V. V. Gusarov, S. Bechta, M. Barrachin, F. Fichot, P. D. Bottomley, M. Fischer, P. Piluso, Oxidation effects during corium melt in-vessel retention, *Nuclear Engineering and Design* 305 (2016) 389 – 399.
- [15] H. Lukas, S. G. Fries, B. Sundman, *Computational Thermodynamics : The Calphad Method*, Cambridge University Press, 2007.
- [16] S. Bakardjieva, M. Barrachin, S. Bechta, D. Bottomley, L. Brissoneau, B. Cheynet, E. Fischer, C. Journeau, M. Kiselova, L. Mezentseva, P. Piluso, T. Wiss, Improvement of the european thermodynamic database NUCLEA, *Progress in Nuclear Energy* 52 (1) (2010) 84–96.
- [17] M. Barrachin, F. Defoort, Thermophysical properties of in-vessel corium : MASCA programme related results, in : *Proc. of MASCA Seminar*, OECD, Aix-en-Provence, France, 2004.
- [18] C. Guéneau, S. Gossé, A. Quaini, N. Dupin, B. Sundman, D. Manara, R. Konings, M. Kurata, T. Besmann, P. Turchi, J. C. Dumas, E. C. Corcoran, M. Piro, T. Ogata, R. Hania, B. O. Lee, R. Kennedy, M. S., FUELBASE, TAF-ID databases and OC software : Advanced computational tools to perform thermodynamic calculations on nuclear fuel materials, in : *Proc. of the 7th European Review Meeting on Severe Accident Research ERMSAR-2015*, Marseille, France, 2015.
- [19] N. Moelans, B. Blanpain, P. Wollants, An introduction to phase-field modeling in micro-structure evolution, *Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry* 32 (2008) 268–294.
- [20] I. Singer-Loginova, H. M. Singer, The phase field technique for modeling multiphase materials, *Reports on Progress in Physics* 71 (10) (2008) 1–32.
- [21] J. Rowlinson, Translation of J. D. Van der Waals : The thermodynamik theory of capillarity under the hypothesis of a continuous variation of density, *Journal of Statistical Physics* 20 (2) (1978) 200–244.
- [22] Q. Bronchart, Développement de méthodes de champs de phase quantitatives et applications à la précipitation homogène dans les alliages binaires, Ph.D. thesis, Université de Cergy-Pointoise (2006).
- [23] J. W. Cahn, J. E. Hilliard, Free energy of a nonuniform system. I. interfacial free energy, *The Journal of Chemical Physics* 28 (2) (1958) 258–267.
- [24] J. W. Cahn, Free energy of a nonuniform system. II. thermodynamic basis, *The Journal of Chemical Physics* 30 (5) (1959) 1121–1124.
- [25] A. A. Wheeler, W. J. Boettinger, G. B. McFadden, Phase-field model for isothermal phase transitions in binary alloys, *Physical Review A* 45 (1992) 7424–7439.

Annexe C

Encadrement d'étudiants

Sont données ici la liste des étudiants encadrés pour des travaux directement rapportés dans ce manuscrit (voir Tableau C.1) et la liste des principaux étudiants encadrés pour d'autres travaux menés au CEA Cadarache entre 2007 et 2018 (voir Tableau C.2).

doctorants				
nom	période	soutenance	te [†] autres encadrants	situation actuelle
Vaishnvi Tiwari	11/2016-11/2019	-	80% M. Plapp (directeur de thèse, Ecole Polytechnique, Palaiseau)	doctorante, CEA Cadarache
sujet : méthodologie de couplage thermohydraulique/thermodynamique pour la modélisation du corium en fond de cuve				
Eleonora Skrzypek	09/2014-03/2019	-	50% L. Saas (autre encadrant, CEA Cadarache), M. Dabrowski (directeur de thèse, NCBJ, Varsovie)	doctorante à temps partiel, WUT, Varsovie - ingénieure, NCBJ, Varsovie
sujet : Thermohydraulic modelling of a steel metal layer on top of a corium pool in a PWR under severe accident conditions				
Clément Cardon	11/2013-11/2016	21/11/2016	80% M. Plapp (directeur de thèse, Ecole Polytechnique, Palaiseau)	ingénieur, Framatome, La Défense
sujet : modélisation de la diffusion multi-composants dans un bain de corium diphasique oxyde-métal par une méthode d'interface diffuse				
Damien Fournier	10/2008-10/2011	10/10/2011	80% R. Herbin (directeur de thèse, Université de Provence, Marseille)	associé de recherche, Georg-August-Universität Göttingen, Göttingen
sujet : analyse et développement de méthodes de raffinement <i>hp</i> en espace pour l'équation de transport des neutrons				
post-doctorant				
nom	période	te [†] autres encadrants	situation actuelle	
Laura Gastaldo	02/2008-02/2009	50% C. Suteau (CEA Cadarache)	Ingénieure-chercheuse, IRSN Cadarache	
sujet : généralisation en 3D de la méthode de perturbation pour l'analyse physique en neutronique				
stagiaires de fin d'études d'ingénieur ou de Master 2				
Nom	Période	Ecole/Master	te [†] Autres encadrants	Situation actuelle
Adrien Drouillet	01-2017-07-2017	Université de Nantes, Master Mathématiques et applications	30% M. Peybernes, L. Viot (CEA Cadarache)	doctorant, CEA Cadarache
sujet : simulation numérique d'un front de fusion/solidification dans un bain de corium				
Vaishnvi Tiwari	04/2016-10/2016	Université de Delhi, M. Tech. en génie nucléaire	100% -	doctorante, CEA Cadarache
sujet : thermal/thermodynamical coupling methodology for corium solidification in the context of light water reactor severe accidents				
Giovanni Porcellana	02/2011-08/2011	Politecnico di Torino, Master en ingénierie énergétique et nucléaire	100% -	ingénieur, CERN, Genève
sujet : domain decomposition techniques for core/steel reflector interface of generation IV sodium cooled fast reactors				
Laurent Naymeh	02/2010-08/2010	PHELMA, Master en ingénierie nucléaire	100% -	ingénieur, CS Communication & Systèmes, Marseille
sujet : accélération synthétique de l'équation de transport neutronique discrétisée par éléments finis discontinus aux d'encadrement				

† taux d'encadrement

TABLEAU C.1 – Liste des étudiants encadrés pour des travaux directement discutés dans ce manuscrit (les étudiants évoqués au Chapitre 3 ne sont pas répertoriés ici)

doctorants					
nom	période	soutenance	te [†]	autres encadrants	situation actuelle
Maxime Guyot	10/2011-10/2014	28/10/2014	30%	P. Gubernatis (encadrant principal, CEA Cadarache), G. Chiavassa (directeur de thèse, Ecole Centrale de Marseille, Marseille)	Ingénieur-chercheur, CEA Cadarache
sujet : neutronics and thermal-hydraulics coupling : some contributions toward an improved methodology to simulate the initiating phase of a severe accident in a sodium fast reactor					
Ansar Calloo	10/2009-10/2012	10/10/2012	30%	J.F. Vidal (encadrant principal, CEA Cadarache), G. Rimpault (directeur de thèse, Université Grenoble Alpes, CEA Cadarache)	Ingénieur-chercheur, CEA Saclay
sujet : développement d'une nouvelle modélisation de la loi de choc dans les codes de transport neutronique multigroupe					

stagiaires de fin d'études d'ingénieur ou de Master 2					
nom	période	école/Master	te [†]	autres encadrants	situation actuelle
Benjamin Turquais	01-2017-07-2017	PHELMA, Master en ingénierie nucléaire	30%	L. Saas, N. Chikhi (CEA Cadarache)	doctorant, CEA Cadarache
sujet : Influence of the steel properties on the progression of a severe accident in a nuclear reactor					
Fabio Alcaro	03/2010-07/2010	Politecnico di Torino, Ph.D. en génie énergétique et nucléaire [‡]	50%	C. Suteau (CEA Cadarache)	Ingénieur, NRG, Arnhem
sujet : quasi-static methods in neutron transport					
Caroline Mouis	02/2010-08/2010	PHELMA	50%	C. Suteau (CEA Cadarache)	-
sujet : couplage du code de simulation des accidents graves SIMMER avec la plateforme de neutronique PARIS					
Damien Fournier	03/2008-08/2008	IMAG - ENSIMAG, Master 2 Recherche en mathématiques appliquées	100%	-	Associé de recherche, Georg-August-Universität Göttingen, Göttingen
sujet : a wavelet based finite element method for the self-shielding issue in neutron transport					

[†] taux d'encadrement

[‡] ce stage fait partie intégrante du travail de la thèse de Fabio Alcaro qui a été soutenue en juillet 2012.

TABLEAU C.2 – Liste des principaux étudiants encadrés pour des travaux non détaillés dans ce manuscrit mais relatifs au développement des outils numériques SNATCH et PROCOR

Publications avec comité de lecture

Sont répertoriées ici les publications avec comité de lecture (dans des revues scientifiques ou des actes de conférences) auxquelles j'ai contribué depuis le début de ma carrière de chercheur.

Revues

- J. Delacroix, **R. Le Tellier** & P. Piluso, "Oxygen diffusion in liquid (over)stoichiometric corium", *Nuclear Engineering and Design*, **337**, 148-160 (2018).
- V. Tiwari & **R. Le Tellier**, "On the use of CALPHAD-based enthalpy-temperature relations in suboxidized corium plane front solidification modelling", *Annals of Nuclear Energy*, **117**, 175-182 (2018).
- V. I. Almjashv, V. S. Granovsky, V. B. Khabensky, S. Y. Kotova, E. V. Krushinov, A. A. Sulatsky, S. A. Vitol, V. V. Gusarov, F. Fichot, B. Michel, P. Piluso, **R. Le Tellier**, M. Fischer, C. Le Guennic & N. Bakouta, "Experimental study of transient phenomena in the three-liquid oxidic-metallic corium pool", *Nuclear Engineering and Design*, **332**, 31-37 (2018).
- L. Berge, N. Estre, D. Tisseur, E. Payan, D. Eck, V. Bouyer, N. Cassiaut-Louis, C. Journeau, **R. Le Tellier**, S. Singh & E. Pluyette, "Fast high-energy X-ray imaging for Severe Accidents experiments on the future PLINIUS-2 platform", *IEEE Transactions on Nuclear Science* (2018).
- **R. Le Tellier**, E. Skrzypek & L. Saas, "On the treatment of plane fusion front in lumped parameter thermal models with convection", *Applied Thermal Engineering*, **120**, 314-326 (2017).
- L. Saas, **R. Le Tellier** & S. Bajard, "A simplified geometrical model for transient corium propagation in core for LWR with heavy reflector", *EPJ Nuclear Sci. Technol.*, **3**, 20 (2017).
- E. Skrzypek, M. Skrzypek, L. Saas & **R. Le Tellier**, "In vessel corium propagation sensitivity study of reactor pressure vessel rupture time with PROCOR platform", *Journal of Power Technologies*, **97** (2), 110-116 (2017).
- B. Sundman, U. R. Kattner, C. Sigli, M. Stratmann, **R. Le Tellier**, M. Palumbo, S. G. Fries, "The OpenCalphad thermodynamic software interface", *Computational Materials Science*, **125**, 188-196 (2016).
- C. Cardon, **R. Le Tellier** & M. Plapp, "Modelling of the Kinetics of Liquid Phase Segregation in the Uranium-Oxygen Binary System", *CALPHAD : Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry*, **52**, 47-56 (2016).
- **R. Le Tellier**, L. Saas & S. Bajard, "Transient Stratification Modelling of a Corium Pool in a LWR Vessel Lower Head", *Nuclear Engineering and Design*, **287**, 68-77 (2015).

- A. Calloo, J. F. Vidal, **R. Le Tellier** & G. Rimpault, "Validation of the Legendre Expansion of the Collision Law for Light Water Reactor Calculations", *Nuclear Science and Engineering*, **180**, 182-198 (2015).
- M. Guyot, P. Gubernatis & **R. Le Tellier**, "Space-time Effects in the Initiating Phase of Sodium Fast Reactors and their Evaluation using a Three-dimensional Neutron Kinetics Model", *Annals of Nuclear Energy*, **85**, 115-126 (2015).
- M. Guyot, P. Gubernatis, C. Suteau, **R. Le Tellier** & J. Lecerf, "An Assessment of Corewide Coherency Effects in the Multichannel Modeling of the Initiating Phase of a Severe Accident in a Sodium Fast Reactor", *Nuclear Technology*, **185**, 21-38 (2014).
- D. Fournier, R. Herbin & **R. Le Tellier**, "Discontinuous Galerkin Discretization and hp-Refinement for the Resolution of the Neutron Transport Equation", *SIAM J. Sci. Comput.*, **35**-2, A936-A956 (2013).
- **R. Le Tellier**, D. Fournier & C. Suteau, "Reactivity Perturbation Formulation for a Discontinuous Galerkin based Transport Solver and its Use with Adaptive Mesh Refinement", *Nucl. Sc. Eng.*, **167**, 209-220 (2011).
- D. Fournier, **R. Le Tellier** & C. Suteau, "Analysis of an a posteriori Error Estimator for the Transport Equation with S_N and Discontinuous Galerkin Discretizations", *Ann. Nucl. Energy*, **38**, 221-231 (2011).
- **R. Le Tellier**, C. Suteau, D. Fournier & J. M. Ruggieri, "High-Order Discrete Ordinate Transport in Hexagonal Geometry : a New Capability in ERANOS", *Il Nuovo Cimento B*, **33C**, 121-128 (2010).
- **R. Le Tellier**, D. Fournier & J. M. Ruggieri, "A Wavelet-Based Finite Element Method for the Self-Shielding Issue in Neutron Transport", *Nucl. Sc. Eng.*, **163**, 34-65 (2009).
- A. Santamarina, N. Hfaiedh, **R. Le Tellier**, V. Marotte, S. Misu, A. Sargeni, C. Vaglio-Gaudard & I. Zmijarevic, "Advanced neutronics tools for BWR design calculations", *Nucl. Eng. Design*, **238**, 1965-1974 (2008).
- **R. Le Tellier**, G. Marleau, M. Dahmani & A. Hébert, "Improvements of the Reactivity Devices Modeling for the Advanced CANDU Reactor", *Ann. Nucl. Energy*, **35**, 868-876 (2008).
- M. Dahmani, G. Marleau & **R. Le Tellier**, "Modeling Reactivity Devices for Advanced CANDU Reactors Using the Code DRAGON", *Ann. Nucl. Energy*, **35**, 804-812 (2008).
- **R. Le Tellier**, A. Hébert, A. Santamarina & O. Litaize, "A Modeling of BWR-MOX Assemblies Based on the Characteristics Method Combined with Advanced Self-Shielding Models", *Nucl. Sc. Eng.*, **158**, 231-243 (2008).
- **R. Le Tellier** & A. Hébert, "Anisotropy and Particle Conservation for Trajectory-Based Deterministic Methods", *Nucl. Sc. Eng.*, **158**, 28-39 (2008).
- **R. Le Tellier** & A. Hébert, "An Improved Algebraic Collapsing Acceleration with General Boundary Conditions for the Characteristics Method", *Nucl. Sc. Eng.*, **156**, 1-18 (2007).
- **R. Le Tellier** & A. Hébert, "On the Integration Scheme along a Trajectory for the Characteristics Method", *Ann. Nucl. Energy*, **33**, 1260-1269 (2006).
- M. Dahmani, **R. Le Tellier**, R. Roy & A. Hébert, "An Efficient Preconditioning Technique Using Krylov Subspace Methods for 3D Characteristics Solvers", *Ann. Nucl. Energy*, **32**, 876-896 (2005).

Actes de conférences

- D. Tisseur, M. Cavarro, F. Rey, K. Paumel, N. Chikhi, J. Delacroix, P. Fouquart, **R. Le Tellier** & V. Bouyer, "Study of online measurements techniques of metallic phases spatial distribution into a corium pool", *Int. Conf. on Advancements in Nuclear Instrumentation Measurement Methods and their Applications. ANIMMA 2019*, 2019, Portorož, Slovenia, June 17-21, 2019.

- **R. Le Tellier**, B. Habert, V. Tiwari & N. Bakouta, “Consistent use of CALPHAD data for in-vessel corium pool modeling : some analytical and practical considerations”, *The 9th European Review Meeting on Severe Accident Research. ERMSAR-2019*, Prague, Czech Republic, March, 18-20, 2019.
- L. Carénini, F. Fichot, N. Bakouta, H. Esmaili, L. Humphries, T. Laato, **R. Le Tellier**, I. Melnikov, P. Pandazis, R. J. Park & A. Philippov, “Elaboration of a PIRT for the modelling of In-Vessel Retention”, *The 9th European Review Meeting on Severe Accident Research. ERMSAR-2019*, Prague, Czech Republic, March, 18-20, 2019.
- L. Carénini, F. Fichot, N. Bakouta, **R. Le Tellier**, L. Viot, I. Melnikov, P. Pandazis & A. Filippov, “Main outcomes from the IVR code benchmark performed in the IVMR project”, *The 9th European Review Meeting on Severe Accident Research. ERMSAR-2019*, Prague, Czech Republic, March, 18-20, 2019.
- J. Delacroix, **R. Le Tellier** & P. Piluso, “Mass transfer inside oxidizing liquid corium droplets”, *The 9th European Review Meeting on Severe Accident Research. ERMSAR-2019*, Prague, Czech Republic, March, 18-20, 2019.
- M. Peybernes, L. Saas, **R. Le Tellier** and C. Dang, “Thermalhydraulics DNS of a thin metallic layer : application to the evaluation of nuclear reactor severe accident mitigation strategy”, *The 9th European Review Meeting on Severe Accident Research. ERMSAR-2019*, Prague, Czech Republic, March, 18-20, 2019.
- A. Pivano, P. Piluso, N. Chikhi, P. Fouquart, J. Delacroix & **R. Le Tellier**, “Experimental studies of molten steel - suboxidized corium crust interaction for IVR application”, *The 9th European Review Meeting on Severe Accident Research. ERMSAR-2019*, Prague, Czech Republic, March, 18-20, 2019.
- M. Peybernes, **R. Le Tellier**, L. Viot, A. Drouillet & L. Saas, “Hybrid lumped/distributed parameter model for treating the vessel lower head ablation by corium during a LWR severe accident”, *The 27th Int. Conf. Nuclear Energy for New Europe. NENE 2018*, Portoróz, Slovenia, September 10-13, 2018.
- L. Saas, E. Skrzypek & **R. Le Tellier**, “Rayleigh-Bénard and Bénard-Marangoni convection in a thin metallic layer on top of corium pool”, *The 8th European Review Meeting on Severe Accident Research. ERMSAR-2017*, Warsaw, Poland, May 16-18, 2017.
- C. Le Guennic, L. Saas & **R. Le Tellier**, Y. Wu, M. Guingo, J. Laviéville, “Contribution of CFD studies to IVR assessment”, *The 8th European Review Meeting on Severe Accident Research. ERMSAR-2017*, Warsaw, Poland, May 16-18, 2017.
- L. Saas, **R. Le Tellier** & S. Bajard, “A Simplified Geometrical Model for Transient Corium Propagation in Core for LWR with Heavy Reflector”, *Int. Congress on Advances in Nuclear Power Plants. ICAPP 2015*, Nice, France, May 03-06, 2015.
- **R. Le Tellier**, L. Saas & F. Payot, “Phenomenological Analyses of Corium Propagation in LWRs : the PROCOR platform”, *The 7th European Review Meeting on Severe Accident Research. ERMSAR-2015*, Marseille, France, March 24-26, 2015.
- N. Bakouta, **R. Le Tellier** & L. Saas, “Assessment of Advanced Corium-In-Lower-Head Models in MAAP and PROCOR codes”, *The 7th European Review Meeting on Severe Accident Research. ERMSAR-2015*, Marseille, France, March 24-26, 2015.
- M. Guyot, **R. Le Tellier**, P. Archier & F. Gabrielli, “Improvement of Space-Time Kinetics Capability of the SNATCH Solver and Comparison to KIN3D/PARTISN Results”, *Int. Conf. on Advances in Reactor Physics. PHYSOR 2014 - The Role of Reactor Physics toward a Sustainable Future*, Kyoto, Japan, September 28 - October 3, 2014.
- J. F. Vidal, P. Archier, A. Calloo, P. Jacquet, J. Tommasi & **R. Le Tellier**, “An Improved Energy-Collapsing Method for Core-Reflector Modelization in SFR Core Calculations Using the Paris Platform”, *Int. Conf. on Advances in Reactor Physics and Linking Research, Industry, and Education. PHYSOR 2012*, Knoxville, USA, April 15-20, 2012.

- A. Calloo, J. F. Vidal, **R. Le Tellier** & G. Rimpault, “Mixed Legendre Moments and Discrete Scattering Cross Sections for Anisotropy Representation”, *Int. Conf. on Advances in Reactor Physics and Linking Research, Industry, and Education. PHYSOR 2012*, Knoxville, USA, April 15-20, 2012.
- D. Fournier, P. Archier, **R. Le Tellier** & C. Suteau, “Improvement of Neutronic Calculations on a MASURCA Core using Adaptive Mesh Refinement Capabilities”, *Int. Conf. on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering. M&C 2011*, Rio de Janeiro, Brazil, May 8-12, 2011.
- D. Fournier, **R. Le Tellier**, C. Suteau & R. Herbin, “Analysis of a hp-Refinement Method for Solving the Neutron Transport Equation using Two Error Estimators”, *Int. Conf. on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering. M&C 2011*, Rio de Janeiro, Brazil, May 8-12, 2011.
- A. Calloo, **R. Le Tellier** & J. F. Vidal, “Angular Finite Volume Method for Solving the Multigroup Transport Equation with Piecewise-Average Scattering Cross Sections”, *Int. Conf. on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering. M&C 2011*, Rio de Janeiro, Brazil, May 8-12, 2011.
- F. Alcaro, S. Dulla, P. Ravetto, **R. Le Tellier** & C. Suteau, “Implementation of the Quasi-Static Method for Neutron Transport”, *Int. Conf. on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering. M&C 2011*, Rio de Janeiro, Brazil, May 8-12, 2011.
- S. Schunert, Y. Y. Azmy, D. Fournier & **R. Le Tellier**, “Comparison of the Accuracy of Various Spatial Discretization Schemes of the Neutron Transport Equation”, *Int. Conf. on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering. M&C 2011*, Rio de Janeiro, Brazil, May 8-12, 2011.
- L. Gastaldo, **R. Le Tellier**, C. Suteau, D. Fournier & J. M. Ruggieri, “High-Order Discrete Ordinate Transport in Non-Conforming 2D Cartesian Meshes”, *Int. Conf. on Mathematics, Computational Methods & Reactor Physics. M&C 2009*, Saratoga Springs, USA, May 3-7, 2009.
- D. Fournier & **R. Le Tellier**, “Adaptive Algorithms For a Self-Shielding Treatment using a Wavelet-based Galerkin Method”, *Int. Conf. on Mathematics, Computational Methods & Reactor Physics. M&C 2009*, Saratoga Springs, USA, May 3-7, 2009.
- B. Arsenault, **R. Le Tellier** & A. Hébert, “Efficiency of the Delta-Tracking Technique for Monte Carlo Calculations Applied to Neutron-Transport Simulations of the Advanced CANDU Reactor Design”, *Int. Conf. on Reactor Physics, Nuclear Power : A Sustainable Resource. PHYSOR 2008*, Interlaken, Switzerland, September 14-19, 2008.
- **R. Le Tellier**, G. Marleau, A. Hébert, D. Roubstov, D. Altiparmakov & D. Irish, “Burnup Dependence of Coolant Void Reactivity for ACR-1000 Cell”, *Int. Conf. on Reactor Physics, Nuclear Power : A Sustainable Resource. PHYSOR 2008*, Interlaken, Switzerland, September 14-19, 2008.
- A. V. Popov, R. Chambon, **R. Le Tellier**, G. Marleau & A. Hebert, “Models for Coolant Void Reactivity Evaluation in CANDU Generation II and III +”, *Int. Conf. on Reactor Physics, Nuclear Power : A Sustainable Resource. PHYSOR 2008*, Interlaken, Switzerland, September 14-19, 2008.
- J. F. Vidal, **R. Le Tellier**, P. Blaise, G. Guillot, N. Huot, O. Litaize, A. Santamarina & N. Thiollay, “Analysis of the FLUOLE Experiment for the APOLLO2 Qualification of PWR Core Reflectors”, *Int. Conf. on Reactor Physics, Nuclear Power : A Sustainable Resource. PHYSOR 2008*, Interlaken, Switzerland, September 14-19, 2008.
- **R. Le Tellier** & A. Hébert, “PWR Assembly Computational Scheme based on the DRAGON v4 Lattice Code”, *Joint Int. Topical Mtg. on Mathematics & Computation and Supercomputing in Nuclear Applications. M&C + SNA 2007*, Monterey, USA, April, 15-19, 2007.

- **R. Le Tellier**, A. Hébert, A. Santamarina & O. Litaize, “Benchmarking of the Characteristics Method Combined with Advanced Self-Shielding Models on BWR-MOX Assemblies”, *Int. Mtg. on the Physics of Fuel Cycles and Advanced Nuclear Systems : Advances in Nuclear Analysis and Simulation. PHYSOR 2006*, Vancouver, Canada, September 10-14, 2006. **2nd prize - best student paper award.**
- **R. Le Tellier**, A. Hébert & G. Marleau, “The Implementation of a 3D Characteristics Solver for the Generation of Incremental Cross Sections for Reactivity Devices in a CANDU Reactor”, *Int. Mtg. on the Physics of Fuel Cycles and Advanced Nuclear Systems : Advances in Nuclear Analysis and Simulation. PHYSOR 2006*, Vancouver, Canada, September 10-14, 2006.
- R. Karthikeyan, **R. Le Tellier**, A. Hébert & G. Marleau, “Estimation of Coolant Void Reactivity for ACR-type Lattices using DRAGON and Validation using MCNP5 and TRIPOLI4.3”, *Int. Mtg. on the Physics of Fuel Cycles and Advanced Nuclear Systems : Advances in Nuclear Analysis and Simulation. PHYSOR 2006*, Vancouver, Canada, September 10-14, 2006.
- C. Vaglio-Gaudard, A. Sargeni, A. Santamarina, **R. Le Tellier** & J.F. Vidal, “Qualification of APOLLO2 BWR calculation scheme on the BASALA mock-up”, *Int. Mtg. on the Physics of Fuel Cycles and Advanced Nuclear Systems : Advances in Nuclear Analysis and Simulation. PHYSOR 2006*, Vancouver, Canada, September 10-14, 2006.
- **R. Le Tellier** & A. Hébert, “Spectral Analysis of an Algebraic Collapsing Acceleration for the Characteristics Method”, *Int. Mtg. in Mathematics and Computation, Supercomputing, Reactor Physics and Nuclear and Biological Applications. M&C 2005*, Avignon, France, September 12-15, 2005.
- **R. Le Tellier** & A. Hébert, “Application of the DSA Preconditioned GMRES Formalism to the Method of Characteristics - First Results”, *Int. Mtg. on the Physics of Fuel Cycles and Advanced Nuclear Systems : Global Developments. PHYSOR-2004*, Chicago, USA, April 25-29, 2004.