

TRANSPORT DE PARTICULES EN MILIEU STOCHASTIQUE. APPLICATION AU CALCUL DE RÉACTIVITÉ D'UN CORIUM

THÈSE N° 1382 (1995)

PRÉSENTÉE AU DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE

ÉCOLE POLYTECHNIQUE FÉDÉRALE DE LAUSANNE

POUR L'OBTENTION DU GRADE DE DOCTEUR ÈS SCIENCES

PAR

Olivier ZUCHUAT

Ingénieur physicien diplômé EPF
originaire de Grimisuat (VS)

acceptée sur proposition du jury:

Prof. J. Ligou, rapporteur
Dr P.A. Haldy, corapporteur
Dr C. Maeder, corapporteur
Dr R. Sanchez, corapporteur

Lausanne, EPFL
1995

Ceux qui peuvent agissent; ceux qui ne peuvent pas enseignent aux autres; ceux qui ne devraient pas s'imaginent qu'ils sont ceux qui peuvent; ceux qui devraient préfèrent généralement se la couler douce sur les bancs de l'université.

Isaac Asimov

TABLE DES MATIÈRES

ABSTRACT	1
RÉSUMÉ	3
1 INTRODUCTION	5
1.1 Recriticité d'un Corium sur un récupérateur plan	12
1.2 Transport stochastique	15
1.3 Objectifs du travail	18
2 ÉQUATIONS DU TRANSPORT STOCHASTIQUE	21
2.1 Définition d'un processus stochastique	23
2.2 Différentes approches du transport stochastique	28
2.3 Équations intégró-différentielles	31
2.4 Équations intégrales	34
2.5 Nécessité d'une modélisation	39
3 CAS DE RÉFÉRENCE	41
3.1 Considérations statistiques	42
3.2 Procédure d'échantillonnage	47
3.3 Résolution numérique de l'équation du transport	49
3.4 Résultats et discussions	52
4 MODÈLES	61
4.1 Description des modèles	63
4.1.1 Modèles intégró-différentiels	63
4.1.2 Modèles intégraux	69
4.1.3 Modèles mixtes	75

4.2	Résolution numérique des modèles	75
4.2.1	Modèles intégró-différentiels	76
4.2.2	Modèles intégraux	77
4.2.3	Modèles mixtes	79
4.3	Comparaison et discussions	81
4.3.1	Comparaison des modèles de base	81
4.3.2	Validité des modifications du modèle du remplacement	88
4.3.3	Comparaison des modèles en présence de sources	91
5	RÉACTIVITÉ D'UN CORIUM SUR UN RÉCUPÉRATEUR PLAN	95
5.1	Homogénéisation du Corium fragmenté	98
5.2	Modélisation du transport stochastique multigroupe en milieu infini	101
5.3	Sections efficaces multigroupes et autoprotection	108
5.4	Calcul de la réactivité	112
5.5	Résultats et discussions	113
	CONCLUSION	121
	ANNEXE A	125
	ANNEXE B	133
	ANNEXE C	147
	ANNEXE D	151
	ANNEXE E	153
	ANNEXE F	157
	ANNEXE G	161
	ANNEXE H	163
	ANNEXE I	169
	ANNEXE J	173
	RÉFÉRENCES	181
	REMERCIEMENTS	191
	CURRICULUM VITAE	193

ABSTRACT

The aim of a particle transport theory in stochastic media is to describe the ensemble-averaged and higher moments of the flux by a relatively small set of deterministic equations. These equations based on the classical transport equations describe the transport of particles when the properties of the background material (host medium), as functions of space and time, are only known in a statistical sense. The goal of this work is to find a simple set of equations to describe the mean flux of particles, in this case neutrons.

Chapter 1 indicates in which cases this new theory called stochastic transport, may be used. This Chapter describes particularly the problem of criticality calculation of a molten Corium, composed of a mixture of all possible reactor elements, spread on a core catcher. The flooding of the melt with water produces a substantial fragmentation with the appearance of water cracks which sizes and distributions are random. Chapter 2 describes the bases of the stochastic transport problem. This description consists of an infinite hierarchy of equations which can not be used to directly solve practical problems. So, it is necessary to truncate this hierarchy by an approximate closure. This approximation can be validated only with benchmark results. Chapter 3 displays complete benchmark results for the particle transmission problem through a system with a finite thickness. This system describes a background media composed of two randomly mixed materials following an equilibrium alternating renewal process. The results given are the coefficients of reflection and transmission and three different types of ensemble-averaged flux for all interior location points. These results confirm previous evidence that different statistics yield different results and that mean and variance are the parameters of the statistical distributions that have the largest influence on the transport problem. In Chapter 4 we describe the closure schemes used to obtain models for the transport problem in renewal

Abstract

media. The predictions of these models are compared with the above benchmark results. The best of them solve the transmission problem with an accuracy of 5%. Finally, Chapter 5 applies the best and simplest model, the constrained model, to a multigroup formalism in an infinite statistical medium. This model is used to homogenize the fragmented Corium spread on the concrete of a core catcher and cooled by water injection from the top. The homogenization with the stochastic theory is compared to the standard volume homogenization. The results indicate which statistical parameters are necessary for an accurate prediction of the system reactivity and what amount of errors implies the uncertainty of these statistical parameters.

RÉSUMÉ

Le but des études sur le transport de particules en milieu stochastique est la description du flux moyen et des moments supérieurs par un ensemble restreint d'équations. Ces équations, basées sur les équations classiques du transport, prennent en compte le fait que les propriétés, fonctions de l'espace et du temps, du milieu hôte où se propage les particules ne sont connues que de manière statistique. L'objectif de ce travail est de rechercher un ensemble simple d'équations décrivant le flux moyen des particules, en l'occurrence des neutrons.

Le Chapitre 1 de cette thèse indique dans quels cas pratiques peut être utilisée cette nouvelle théorie, appelée transport stochastique. Ce chapitre décrit plus particulièrement le problème du calcul de la réactivité d'un Corium étalé sur un récupérateur et qui, lors de son refroidissement, se fragmente avec l'apparition de fentes d'eau de tailles et de distribution aléatoires. Le Corium est un ensemble d'éléments initialement fondus du cœur d'un réacteur nucléaire. Le Chapitre 2 décrit le transport stochastique de manière approfondie. Cette description conduit à une hiérarchie infinie d'équations qui ne peut être utilisée directement pour résoudre des problèmes pratiques. Il est donc nécessaire de tronquer cette hiérarchie par une fermeture approximative adéquate. L'approximation réalisée ne peut être validée que par comparaison avec des cas de référence. Le Chapitre 3 développe des cas de référence complets pour le problème de la transmission de particules à travers un système d'épaisseur finie. Ce système décrit un milieu hôte composé de deux matériaux mélangés aléatoirement suivant un processus équilibré de remplacement alterné. Ce processus est décrit par l'alternance des deux matériaux sous forme de plaques dont l'épaisseur est distribuée aléatoirement. Les résultats fournis pour les cas de référence sont les coefficients de réflexion et de transmission ainsi que les distributions spatiales de trois différents types de flux moyens. D'autre part, avec ces cas de

Résumé

référence, il a été confirmé que la connaissance de la variance et de la moyenne des distributions d'épaisseur de matériau était indispensable pour la description du problème. Le Chapitre 4 est consacré à l'élaboration de modèles décrivant le transport de particules dans un milieu régi par un processus de remplacement. Les modèles obtenus sont comparés aux cas de référence. Les meilleurs modèles décrivent le problème de transmission avec une précision de 5%. Le Chapitre 5 enfin développe un de ces modèles, le plus simple, dans un formalisme multigroupe en milieu infini et l'applique à l'homogénéisation du Corium fragmenté ce qui permet ensuite le calcul de la réactivité du système. La configuration étudiée est celle du Corium étalé sur le béton du récupérateur et refroidi par-dessus par injection d'eau. L'homogénéisation à l'aide de la théorie stochastique est comparée à l'homogénéisation volumique standard. Les résultats obtenus précisent les paramètres statistiques nécessaires à un calcul correct de la réactivité et les erreurs dues à diverses incertitudes concernant ces paramètres.

CHAPITRE 1

INTRODUCTION

Depuis plusieurs années, un important travail d'ingénierie est lancé dans la conception des futurs réacteurs, notamment des réacteurs à eau légère. Un des buts du développement de ces réacteurs avancés est d'élaborer des systèmes et/ou des stratégies efficaces visant à minimiser les accidents graves tels la fusion partielle ou totale du cœur. La demande de standards de sécurité plus élevés que dans les centrales actuelles a émergé, plus spécialement, après les accidents de Three Mile Island (TMI) et de Tchernobyl. Le niveau de sécurité des futures centrales nucléaires sera accru en construisant ces réacteurs nucléaires avancés de sorte que toutes les possibilités d'événements anormaux puissent être détectées et que les actions pour y remédier puissent être réalisées automatiquement et/ou par les soins d'un opérateur. La probabilité du déclenchement d'un accident grave s'en trouvera ainsi limitée. En se fournissant les moyens adéquats pour faire face à ces accidents graves les risques seront diminués. Les accidents de TMI^{1,2} et de Tchernobyl^{3,4} nous ont appris qu'il existe plusieurs mesures pour minimiser et mettre un terme à ces accidents graves. De sérieuses conséquences seront inévitables si les mesures adéquates n'existent pas ou ne seront pas mises en place dans un futur proche.

Une probabilité faible, 10^{-5} à 10^{-6} par année,^{5,6} est attribuée à la possibilité de fusion du cœur d'un réacteur commercial actuel à eau pressurisé. Une probabilité de 10^{-5} à 10^{-6} par année signifie que l'on devrait s'attendre à ce que, sur une durée de cent ans, un réacteur sur mille ou sur dix mille fonde. Des études probabilistes de risques d'accident ont montré que la contribution, de faible probabilité, de ces accidents graves au risque total est élevée en raison de l'énorme quantité de matériaux radioactifs pouvant être relâchée à l'extérieur d'une centrale

nucléaire. Afin de réduire ce risque, les réacteurs futurs devront⁷ être conçus dès le départ pour contenir le "Corium" à l'intérieur de la troisième barrière pour tous les scénarios d'accidents graves considérés comme plausibles, notamment la fusion complète du cœur.

Le terme de Corium désigne l'ensemble des matériaux issus du cœur ayant perdu leur géométrie et pouvant se trouver sous forme d'agglomérats solides ou de volumes fondus. Autrement dit, le Corium est un mélange de matériaux fondus issus du combustible (oxyde d'uranium enrichi), des gaines contenant le combustible (Zircaloy) et des matériaux de structure (acier).

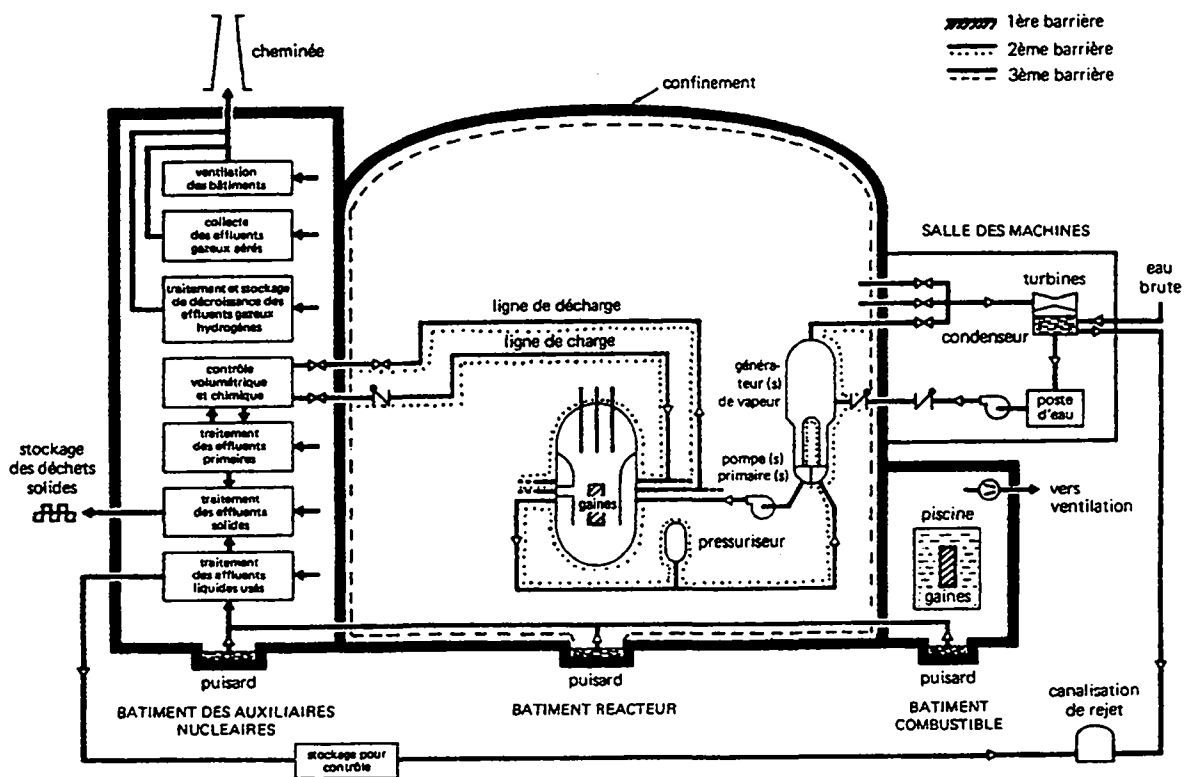


Figure 1.1: Schéma des trois barrières d'un réacteur à eau légère pressurisé.

Les barrières de sécurité pour un réacteur à eau pressurisé sont au nombre de trois (figure 1.1). Leur but est de s'opposer à la migration des produits de fission vers l'environnement. La première barrière correspond à l'élément combustible lui-même avec sa gaine. Sauf accident très grave (fusion), seule une fraction des produits de fission les plus

volatiles parvient à la périphérie des barreaux et remplit l'espace situé entre l'oxyde d'uranium et la gaine. La deuxième barrière est constituée par l'enveloppe du circuit primaire, caisson ou cuve du réacteur, tuyauteries primaires, circuits d'épuration et générateur de vapeur. La troisième barrière est ce que l'on appelle le confinement du réacteur. À la différence des précédentes cette dernière barrière joue peu de rôle en marche normale puisqu'une étanchéité globale excellente est réalisée grâce aux deux premières barrières. Les réacteurs graphite-gaz de la première génération étaient d'ailleurs dépourvus d'enceinte étanche de confinement. Le but du confinement est d'augmenter la sécurité, surtout en cas de relâchement accidentel de radioactivité. Cette barrière protège en outre le réacteur contre les dangers extérieurs: ouragans, chutes d'avions, etc.. Dans le cas de l'accident de TMI, la troisième barrière a bien joué son rôle en retenant en son sein le combustible fondu. Par contre à Tchernobyl, l'absence de troisième barrière autour du réacteur graphite a été responsable de la dissémination de la radioactivité dans l'environnement.

Les scénarios d'accidents graves menant à la fusion partielle ou totale du coeur sont nombreux, mais leur point de départ découlent de deux types d'accidents possibles.^{1,8,9}

Le premier résulte d'une augmentation brutale de la réactivité d'un réacteur par un retrait brusque des barres de contrôle ou par l'introduction de matériaux divers. La réactivité, ρ , d'un réacteur est mesurée par la relation¹

$$\rho = \frac{k_e - 1}{k_e}, \quad (1.1)$$

où k_e est le facteur de multiplication effectif des neutrons. Ce facteur se définit comme le rapport du nombre de neutrons de fission produits ($\bar{\nu}S_f$) au nombre de neutrons perdus, par absorption (A) et fuite (F), ces quantités étant relatives à l'ensemble du système et à l'unité de temps. On écrira donc

$$k_e = \frac{\bar{\nu}S_f}{A + F}. \quad (1.2)$$

En pratique, le facteur de multiplication k_e est voisin de l'unité. La réactivité, ρ , est donc petite, c'est ainsi une bonne mesure de l'écart à la criticalité. Pour $\rho=0$ le réacteur est critique, la

réaction en chaîne est auto-entretenue et le flux de neutrons est stationnaire. Avec $\rho < 0$ le réacteur est sous-critique, la réaction en chaîne est convergente, le flux décroît avec le temps. Pour $\rho > 0$ le réacteur est sur-critique, la réaction en chaîne est divergente, le flux croît avec le temps. Si en outre, $\rho > \beta$ (la fraction de neutrons retardés), on obtient une excursion en puissance incontrôlable, accompagnée d'une hausse de la température pouvant amener la fusion de divers éléments du coeur.

Le deuxième type d'accident pouvant conduire à la fusion du coeur, connu sous le nom de LOCA (LOss of Coolant Accident), consiste en la perte du fluide caloporteur dont le rôle est d'évacuer la chaleur du coeur.

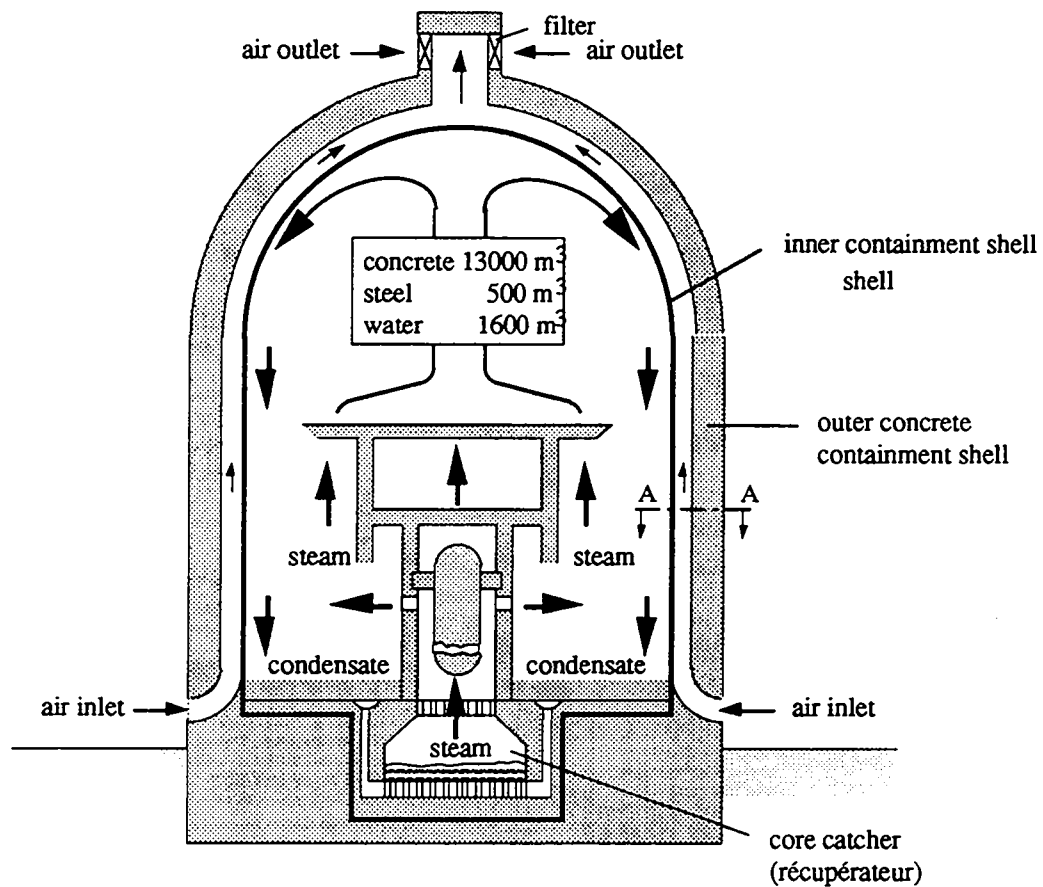


Figure 1.2: Confinement composite pour la prochaine génération de réacteurs à eau légère pressurisés avec récupérateur et extraction passive de la chaleur.

Dans le but de contenir le Corium à l'intérieur de la troisième barrière, plusieurs esquisses de solutions techniques ont été imaginées. Les techniques nécessaires pour parvenir à ces objectifs, notamment dans le cas des réacteurs à eau légère en fonctionnement, faisaient déjà l'objet d'études bien avant¹⁰ l'accident de TMI en 1979. L'effort était mis sur la recherche et le développement du refroidissement des débris hors de la cuve. Plusieurs systèmes de retenue du Corium ont été proposés, mais aucun n'a été installé dans les réacteurs actuels. Les raisons en sont multiples: faisabilité non prouvée, peu ou pas de validation expérimentale, grande complexité, coût élevé, etc.. Dans ce travail, on considère plus particulièrement les systèmes qui pourront être installés dans les réacteurs à eau légère avancés dans le but d'exclure le mode ϵ de rupture de confinement, c'est à dire la perforation par le Corium du fond en béton de l'enceinte de confinement suite à l'interaction Corium-béton.⁷ Les conséquences finales d'une rupture de confinement en mode ϵ sont

- i) la contamination des sols et des eaux souterraines,
- ii) l'échappement dans l'atmosphère des produits de fission solides et gazeux.

D'autre part, l'interaction Corium-béton produit des aérosols et des gaz combustibles (H_2 , CO)¹¹ qui augmentent la concentration de ces derniers dans l'enceinte, créant ainsi un risque d'explosion de l'enceinte de confinement.

La prévention de l'interaction Corium-béton est possible en utilisant, par exemple, un récupérateur dans le puits de cuve comme illustré dans la figure 1.2. Le récupérateur devra, comme son nom l'indique, récupérer l'ensemble du Corium soit environ 200 tonnes de matériaux fondus composés, pour un réacteur de 1300 MWe,⁶ de 120 tonnes d'oxydes et de 80 tonnes de métal comprenant 20 tonnes de zircaloy métallique. Cette récupération devra se faire quelles que soient les conditions d'accidents. Les exigences de base pour un récupérateur de Corium sont¹⁰

- i) de pouvoir récupérer la totalité des débris fondus,
- ii) de transférer les débris collectés à un système conçu pour leur récupération,
- iii) de confiner les débris indéfiniment et de les empêcher de pénétrer dans le fond de l'enceinte de confinement et de détruire des structures importantes,

Chapitre 1

- iv) d'être à même d'évacuer efficacement la chaleur pour refroidir les débris fondus jusqu'à leur solidification.

Il est évident que les exigences formulées ci-dessus pourront être satisfaites si le récupérateur est construit pour

- v) survivre à des accidents graves,
- vi) des opérations passives à long terme.

D'autres exigences sont reliées au terme source¹² et à des considérations pratiques appliquées aux réacteurs:

- vii) grande efficacité de rétention des produits de fission,
- viii) pas d'effets contraires au confinement durant l'utilisation normale du réacteur et durant les accidents,
- ix) pas de charges supplémentaires augmentant la complexité de la situation ou créant de nouveaux problèmes (comme la recriticité du Corium qui va occuper une place importante dans ce travail),
- x) inspection facilitée,
- xi) coûts modérés,
- xii) facile à démanteler après un accident.

En outre le Corium doit, dans tous les cas, être refroidi afin de mettre fin à l'interaction Corium-béton.^{5,13,14} La recommandation suivante¹⁰ peut être considérée comme une exigence particulière pour les récupérateurs installés dans les réacteurs refroidis à l'eau:

- xiii) utilisation de toute l'eau disponible dans l'enceinte de confinement pour refroidir les débris du coeur et extraire la chaleur résiduelle à l'extérieur du confinement.

La plupart des concepts proposés actuellement sont présentés schématiquement dans le tableau 1.1. Dans ce tableau on considère deux types de concept, l'un humide où le Corium est refroidi avec de l'eau, l'autre sec où le Corium est récupéré dans des creusets refroidis extérieurement. En accord avec les études en cours sur l'interaction eau-Corium (explosion de vapeur, refroidissement),^{14,15,16} les concepts de récupérateur humide basés sur le mode bas risque¹⁰ de contact eau-Corium sont encouragés. Le récupérateur le plus intéressant au niveau

industriel¹⁷ est celui avec étalement et refroidissement du Corium par noyade sous eau dans le puits de cuve ou éventuellement dans une zone aménagée hors du puits de cuve (Concept H1 P1 du tableau 1.1). On appellera ce récupérateur, récupérateur plan.


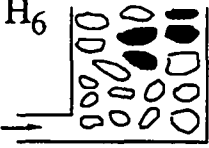
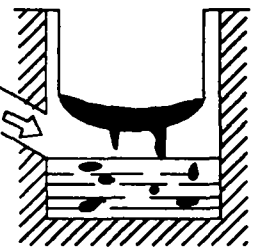

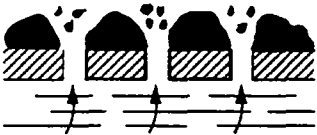
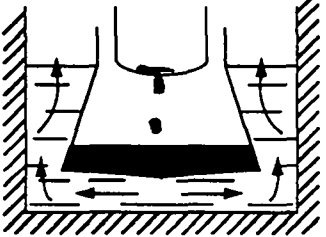

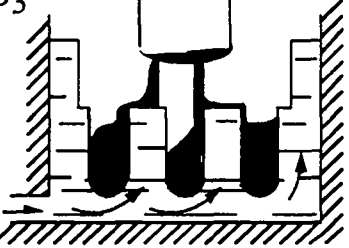
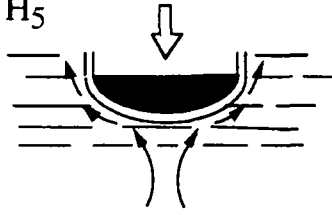
<p>H₁ ↓  Etalement du Corium avec injection d'eau par dessus</p> <p>P₁</p>	<p>H₆  Chambre poreuse multicouche inondée</p> <p>V₂</p>
<p>H₂  Corium tombant et se fragmentant dans une piscine: inondation de la cavité du réacteur</p> <p>V₁</p>	<p>S₁  Cas limite: étalement du Corium sur une large surface en béton. Refroidissement par radiation au dessus et par conduction en dessous sans attaque thermique du béton</p> <p>P₅</p>
<p>H₃  Etalement du Corium avec injection d'eau par dessous</p> <p>P₂</p>	<p>S₂  Récupération et étalement du Corium dans un creuset sec refroidi par eau, optimisé pour le refroidissement par radiation</p> <p>P₆</p>
<p>H₄ ↓ ↓  Etalement du Corium avec injection d'eau par dessus et par dessous</p> <p>P₃</p>	<p>S₃  Récupération du Corium dans plusieurs creusets secs verticaux refroidis extérieurement</p> <p>V₃</p>
<p>H₅ ↓  Etalement du Corium dans un creuset unique refroidi dessus et dessous</p> <p>P₄</p>	

Tableau 1.1: Concepts de récupérateur¹⁰ (dans les figures H équivaut à humide, S à sec, P à plat et V à vertical).

Les études menées actuellement sur la récupération du Corium se portent surtout sur l'analyse de la pénétration du Corium dans le béton,⁹ sur les aspects thermomécaniques de la dégradation du coeur,⁸ sur les processus mécaniques et de vaporisation,¹² sur les interactions $\text{UO}_2\text{-ZrO}_2$,¹³ sur le type de Corium, stratifié ou homogène, en fonction de la température,⁹ sur la composition du Corium selon le type d'accident¹⁸ et sur le mélange du Corium stratifié par les flux de gaz issus de l'interaction Corium-béton.¹¹ L'étude de la réactivité des configurations du Corium après son étalement sur un récupérateur plan a commencé tout récemment.¹⁹ Ces études sont réalisées dans le but de prévenir tous risques d'accident de deuxième criticité. Autrement dit, on essaie de calculer la criticité du système selon différentes configurations pour déterminer lesquelles de ces configurations pourraient être sur-critiques. La sur-criticité de ces configurations, tout en enfreignant l'exigence ix) sur la conception des récupérateurs, rendrait les conséquences de la fusion totale du coeur catastrophiques. Dans ce travail on s'intéresse plus particulièrement aux problèmes de recriticité d'un Corium sur un récupérateur plan.

1.1 Recriticité d'un Corium sur un récupérateur plan.

Les premières études¹⁹ de réactivité d'un Corium sur un récupérateur plan ont été réalisées pour un réacteur à eau légère de la filière française (REP 900) fournissant en cas d'accident 130 tonnes de matériaux fondus comprenant 82 tonnes d' UO_2 , 30 tonnes de métal et 18 tonnes de zirconium. Le récupérateur considéré est un récupérateur plan d'environ 50 m^2 de surface. Si on suppose que le Corium s'étale uniformément sur le récupérateur, on obtient une épaisseur de Corium de 20 à 30 cm. Les calculs de réactivité ont été réalisés¹⁹ pour plusieurs types de Corium: stratifié,⁹ homogène^{9,18} et dispersé.¹⁸ Ces types de Corium dépendent des températures atteintes lors de la fusion du coeur (cf. figure 1.3).² Le Corium stratifié correspond à la remontée à la surface du bain de Corium des éléments de structure à cause de leur différence de densité. Le Corium homogène résulte de la fusion du coeur avec une température supérieure à $2500 \text{ }^\circ\text{C}$ (cf. figure 1.3) et consiste en un mélange homogène entre la

phase métallique et la phase combustible de la configuration stratifiée. Un tel Corium pourrait, par exemple dans une atmosphère oxydante, être représenté formellement par la formule:¹⁸

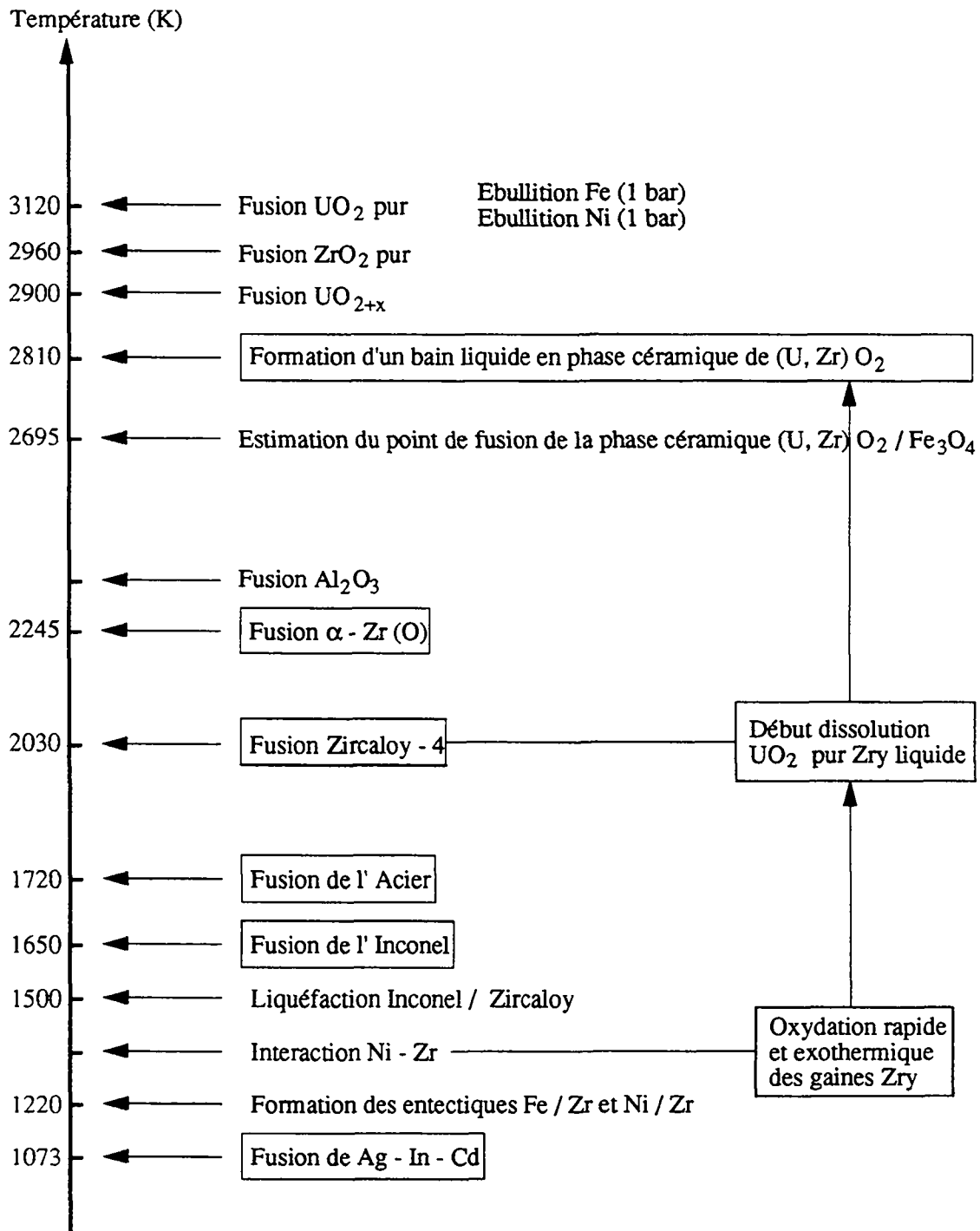
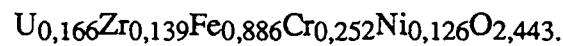


Figure 1.3: Indicateur de température pour les matériaux d'un cœur de réacteur nucléaire

Chapitre 1

Le Corium dispersé est constitué d'une matrice métallique, de zircaloy et d'acier entre autres, dans laquelle le combustible se trouve sous forme d'une dispersion de billes réparties de manière homogène. Les configurations standards étudiées jusqu'à présent consistent en une épaisseur de béton de 40 cm de type de fond de cuve, avec par dessus, étalé de manière homogène et uniforme, 25 cm de Corium recouvert d'une couche d'eau de 60 cm. Différentes études paramétriques¹⁹ ont montré que, quelle que soit l'épaisseur des différentes couches des trois matériaux (béton, Corium, eau), ces configurations étaient toujours sous-critiques pour du combustible Uranium, mais pouvaient devenir sur-critiques avec du combustible MOX, mélange²⁰ d'oxyde d'uranium et d'oxyde de plutonium.

Cette configuration simple des trois couches de matériau ne tient pas compte de l'apparition de fissures dans le Corium, fissures qui se remplissent d'eau. En effet, lors du refroidissement du Corium par de l'eau, il y a fragmentation^{6,13,16} avec infiltration d'eau dans le Corium. En fin de refroidissement le Corium devient poreux.^{6,15} Plusieurs expériences permettent d'estimer le coefficient de porosité ($V_{\text{eau}}/V_{\text{tot}}$).^{6,13,15,16} Une expérience récente a permis de mesurer une porosité du Corium de $0,18 \pm 0,11$.²¹ L'apparition des fentes d'eau complique le calcul de la réactivité d'un Corium sur un récupérateur plan. L'équation du transport des neutrons fournit la distribution des neutrons, en tout point et en tout temps, ainsi que la réactivité, ρ . La théorie du transport est utilisable uniquement quand la composition du milieu est connue exactement en tout point (cf. Chapitre 2). Or dans le cas de l'apparition des fissures, l'emplacement, les dimensions et le nombre de ces dernières sont totalement inconnus. Dans cette situation, les calculs neutroniques que l'on peut effectuer sont des calculs enveloppes où l'on suppose que la couche de Corium est composée d'un bloc de Corium de longueur L suivi d'une fente d'eau verticale de largeur l , motif qui se répète jusqu'à remplir la géométrie du récupérateur. De tels calculs réalisés récemment,¹⁹ ont montré que, dans ces conditions, le Corium était sur-critique pour plusieurs valeurs de L et l . Une autre possibilité de calcul consiste à considérer un mélange volumique homogène de Corium et d'eau. Lors des derniers travaux,¹⁹ il a été constaté que les hypothèses de la fissuration devaient être précisées et qu'une manière plus réaliste devait être envisagée pour le calcul de la réactivité du Corium en présence

de fentes d'eau de dimension et de distribution aléatoires. Ces dernières années ont vu l'émergence d'une nouvelle théorie qui devrait permettre l'amélioration des méthodes d'homogénéisation des milieux stochastiques, milieux dont la composition est connue uniquement de manière statistique tels que les Coriums fragmenté ou dispersé. Cette nouvelle théorie est la théorie du transport stochastique.²²

1.2 Transport stochastique.

Récemment est apparu un intérêt évident⁹ à formuler une description de la théorie cinétique linéaire et du transport de particules quand les propriétés du milieu hôte, fonctions de l'espace et du temps, sont connues uniquement de manière statistique. Dans la terminologie actuelle on appelle cette théorie émergente:²² transport stochastique. Par exemple, le milieu hôte avec lequel les particules interagissent peut contenir un mélange turbulent de deux fluides immiscibles. En n'importe quel point de l'espace et du temps, on ne connaît pas avec certitude lequel des deux fluides est présent; seule la probabilité d'avoir l'un ou l'autre fluide présent est connue. Le but, dans un tel ensemble statistique, est de trouver la moyenne, et peut-être des moments statistiques supérieurs, de la distribution des particules tests dans l'espace des phases. Ces moments sont calculés sur l'ensemble des réalisations physiques possibles de la description statistique du milieu hôte. Le but actuel du transport stochastique consiste à établir un ensemble relativement restreint et simple d'équations déterministes qui contiennent la distribution moyenne directement comme une de leurs inconnues.

Dans ce travail on utilise une classe restreinte de statistiques du mélange du milieu hôte. Plus spécifiquement, on traitera les cas dans lesquels le matériau hôte est composé de deux (ou plusieurs) solides ou fluides immiscibles mélangés aléatoirement. C'est à dire qu'en chaque point de l'espace et du temps, l'un ou l'autre des composants est présent dans son état pur en accord avec la statistique du mélange; on ne permet pas que ces deux composants soient mélangés au niveau atomique. Ainsi l'image physique qui se dégage est celle d'un milieu hôte composé de morceaux des deux composants distribués aléatoirement et dont la forme et la taille

Chapitre 1

sont aussi aléatoires. Pour chaque problème on considère que l'on connaît la fraction volumique des composants et la moyenne d'une grandeur géométrique caractéristique de ces composants. Cette dernière valeur n'étant pas suffisante comme on le montrera au Chapitre 3, on considère que l'on connaît aussi la variance de la grandeur caractéristique des composants. Ces trois valeurs peuvent être obtenues dans certains cas de manière expérimentale.²³

Habituellement, les calculs cinétiques de systèmes hétérogènes sont réalisés en considérant le milieu homogénéisé équivalent.^{24,25} Cela revient à homogénéiser les propriétés nucléaires des composants comme, par exemple, la section efficace macroscopique totale, Σ_t . Si l'arrangement du milieu n'est pas régulier, l'homogénéisation de ces propriétés suppose que les composants soient mélangés au niveau atomique. La section efficace homogène, Σ_{th} , est alors donnée pour un mélange de deux matériaux α et β par

$$\Sigma_{th} = F_\alpha \Sigma_{\alpha} + F_\beta \Sigma_{\beta}, \quad (1.3)$$

où F représente la fraction volumique du matériau considéré ($F_\beta = V_\beta / (V_\beta + V_\alpha)$). Σ_{th} sera utilisée pour les calculs cinétiques du système ainsi homogénéisé. Pour des raisons physiques, une telle homogénéisation des propriétés neutroniques des composants du milieu hôte est justifiée seulement quand

$$\Sigma_\alpha \ell_\alpha \ll 1 \quad \text{et} \quad \Sigma_\beta \ell_\beta \ll 1, \quad (1.4)$$

où ℓ représente une grandeur caractéristique des morceaux de matériau. L'équation (1.4) établit que les grandeurs caractéristiques des deux composants doivent être petites comparées au libre parcours moyen des particules pour que l'homogénéisation décrite par l'éq. (1.3) soit valable. La limite ultime de la taille d'un morceau est physiquement, bien entendu, la taille d'un atome, c'est pourquoi on parle de mélange au niveau atomique.

Si une ou les deux relations (1.4) sont fausses, l'utilisation de Σ_{th} donnée par l'équation (1.3) dans un calcul du transport classique peut donner de très mauvais résultats.²⁶ Considérons, par exemple, le simple problème de transmission sans diffusion, indépendant du temps, à travers un milieu sans source, de volume V arbitraire et constitué d'un mélange de

deux matériaux α et β . Soit le matériau α composé de morceaux optiquement minces ($\Sigma_{\alpha} \ell_{\alpha} \ll 1$), et soit le matériau β composé de morceaux optiquement épais ($\Sigma_{\beta} \ell_{\beta} \gg 1$). De plus supposons que le matériau β est éparsé ($F_{\beta} \ll 1$). Physiquement on a presque du vide parsemé de quelques morceaux d'épaisseur optique essentiellement infinie. Les particules incidentes sur ce mélange auront, en moyenne, une bonne chance de passer au travers. Elles ne rencontreront pas souvent les morceaux absorbants dispersés, passeront entre ceux-ci et seront transmises à travers le mélange. D'un autre côté, la section efficace Σ_{th} issue d'un mélange atomique (éq. 1.3) peut être grande et ainsi le milieu homogénéisé aura une grande section efficace partout. Cela implique que la description du transport en mélange atomique ne mènera à aucune transmission à travers le mélange, ce qui n'est pas le cas dans le problème réel. Cette simple argumentation indique que l'homogénéisation d'un milieu stochastique par l'équation (1.3) peut être grossièrement erronée sous certaines conditions. Les résultats de cette argumentation sont vérifiables dans des cas pratiques.²⁷ Ils nous démontrent l'utilité d'une description du transport des particules dans un milieu stochastique.

On peut mentionner que la liste des applications potentielles du transport stochastique ne se limite pas aux problèmes de réactivité d'un Corium. Son champ d'application est très vaste que ce soit en physique des réacteurs pour le calcul des réacteurs à eau bouillante,^{24,27} dans les problèmes de "shielding",²⁴ pour le problème de la double hétérogénéité,²⁸ ou encore dans les problèmes de criticité lors de la dissolution des oxydes de combustible dans le cadre de leur retraitement.²⁹ Le transport stochastique s'applique aussi dans d'autres domaines tels le transfert radiatif pour le traitement des instabilités de Rayleigh-Taylor,^{30,31,32} l'astrophysique,³³ ou encore dans des problèmes atmosphériques.^{34,35,36,37} L'idée du transport stochastique s'applique aussi aux équations décrivant des grandeurs thermiques, électriques, magnétiques ou la propagation d'ondes.^{38,39,40,41}

Dans l'état actuel, il existe des descriptions exactes du transport stochastique sans diffusion dans un milieu hôte dont le mélange est modélisé par un processus stochastique élémentaire. Ces descriptions sont basées soit sur l'équation intégral-différentielle,³¹ soit sur la forme intégrale⁴² du transport. Il existe aussi un formalisme exact⁴³ décrivant le transport

stochastique avec diffusion, mais ce formalisme mène à une infinité d'équations et malheureusement, n'est pas applicable à la résolution de cas pratiques. Pour utiliser ce formalisme dans des cas concrets comme le problème du Corium fragmenté, il s'agira de développer et de valider un modèle du transport stochastique.

1.3 Objectifs du travail.

Le but principal de ce travail est de modéliser le transport de particules, en l'occurrence des neutrons, dans un milieu stochastique avec diffusion pour un mélange statistique de matériaux pouvant décrire un Corium fragmenté. Ensuite, il s'agira d'appliquer le modèle créé et correctement validé aux calculs de réactivité d'un Corium homogène fragmenté sur un récupérateur plan.

Dans un premier temps (Chapitre 2) nous introduirons l'équation du transport classique ainsi que divers processus stochastiques pouvant décrire un mélange aléatoire de matériaux. Nous montrerons quelles sont les différentes approches possibles du problème du transport en milieu stochastique. Les équations exactes, mais inutilisables dans des cas pratiques, du transport stochastique seront décrites en détails dans les formalismes intégral et intégral-différentiel du transport classique.

Nous développerons ensuite dans le Chapitre 3 des cas de référence suffisamment élaborés pour tester les modèles existants dans ce domaine et valider notre propre modèle. Ces calculs de référence nous permettront aussi de déterminer les grandeurs statistiques nécessaires à la description du transport de particules dans un milieu composé de deux matériaux mélangés aléatoirement.

Une fois ces cas de référence établis, les descriptions exactes existantes pour le transport stochastique sans diffusion ainsi que les premiers modèles réalisés pour le transport avec diffusion seront décrits brièvement dans le Chapitre 4. L'étude des modèles existants et leur comparaison avec les calculs de référence permettront le développement et l'amélioration de notre propre modèle basé sur le formalisme intégral exact décrit en première partie de ce travail.

Finalement, au Chapitre 5, le nouveau modèle développé et testé dans ce travail pour le problème de la transmission de particules sera étendu au formalisme multigroupe en milieu infini. Ainsi, il pourra être appliqué au calcul de réactivité du Corium fragmenté. Les problèmes surgissant lors de l'utilisation de notre modèle dans ce cas pratique particulier seront décrits en détails afin de permettre une amélioration future du modèle et une extension de son domaine d'application. Il faut bien noter que le but de cette dernière partie n'est pas une étude exhaustive des problèmes de réactivité d'un Corium dans un récupérateur. C'est plutôt la description de l'application du transport stochastique à un problème concret.

Chapitre 1

ÉQUATIONS DU TRANSPORT STOCHASTIQUE

Le transport déterministe de particules dans un volume arbitraire V est entièrement défini par le flux angulaire $\psi(\vec{r}, t, \vec{v})$, solution de l'équation cinétique:⁴⁴

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t, \vec{v}) + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, t, \vec{v}) + v \Sigma_t(\vec{r}, t, \vec{v}) \psi(\vec{r}, t, \vec{v}) = \\ v \left[\int \Sigma_s(\vec{r}, t, \vec{v}' \rightarrow \vec{v}) \psi(\vec{r}, t, \vec{v}') d\vec{v}' + q(\vec{r}, t, \vec{v}) \right] \text{ dans } X, \\ \psi(\vec{r}, t, \vec{v}) = \Phi(\vec{r}, t, \vec{v}) \text{ sur } \partial X, \end{aligned} \tag{2.1}$$

où $\Sigma_t(\vec{r}, t, \vec{v})$ et $\Sigma_s(\vec{r}, t, \vec{v}' \rightarrow \vec{v})$ sont les sections efficaces macroscopiques totale et de diffusion, \vec{v} désigne la vitesse des particules et $q(\vec{r}, t, \vec{v})$ représente une source connue de particules. Par la suite on utilisera la notation $\vec{x} = (\vec{r}, t, \vec{v})$ pour décrire un point dans l'espace des phases $X = \{ \vec{x} | \vec{r} \in V, t \geq t_0, v \leq v_{\max} \}$. Dans l'équation (2.1) les conditions initiales et les conditions aux bords ont été réunies dans le terme $\Phi(\vec{x})$ défini sur l'ensemble $\partial X = \{ \vec{x} \in X | t = t_0 \text{ ou } \vec{r} \in \partial V \text{ et } \vec{v} \cdot \vec{n} \leq 0 \}$ où \vec{n} est un vecteur unitaire normal à la surface ∂V pointant vers l'extérieur du volume V . L'équation (2.1) est l'équation fondamentale du transport des neutrons. Elle est abondamment décrite dans la littérature.^{44,45,46,47,48,49} L'équation du transport (2.1) est simplement l'expression mathématique de la conservation des particules dans l'espace des phases et elle est basée sur les hypothèses suivantes:

- i) les particules sont considérées comme ponctuelles,
- ii) les interactions particule-particule peuvent être négligées,
- iii) les particules voyagent en ligne droite entre chaque collision,
- iv) les collisions peuvent être considérées comme instantanées,

v) les propriétés des noyaux décrites par les sections efficaces et la composition du milieu sont connues.

L'équation (2.1) peut aussi s'écrire:

$$(L + v\Sigma_t(\bar{x}))\psi(\bar{x}) = v[q(\bar{x}) + H_s\psi(\bar{x})] , \quad (2.2)$$

où on a introduit les opérateurs de dérivée, $L \equiv \frac{\partial}{\partial t} + \bar{v} \cdot \bar{\nabla}$, et de diffusion H_s tel que

$$(H_s\psi)(\bar{x}) = \int \Sigma_s(\bar{r}, t, \bar{v}' \rightarrow \bar{v})\psi(\bar{r}, t, \bar{v}') d\bar{v}' .$$

Le transport de particules dans un volume V est déterminé par les propriétés physiques du milieu hôte et par les conditions aux limites. Une fois les valeurs de $\Sigma_t(\bar{x})$, $\Sigma_s(\bar{r}, t, \bar{v}' \rightarrow \bar{v})$, $q(\bar{x})$ et $\Phi(\bar{x})$ connues, il existe alors une unique distribution de particules décrite par le flux angulaire $\psi(\bar{x})$ solution de l'équation (2.1).⁴⁷

Le problème du transport stochastique est celui du transport quand l'hypothèse v) n'est plus vérifiée, autrement dit, quand les propriétés physiques et la composition du milieu hôte sont uniquement connues de manière statistique. Le but de cette nouvelle théorie du transport, appelée²² transport stochastique, est d'établir un ensemble simple et restreint d'équations qui régissent directement la moyenne du flux angulaire et ses moments statistiques supérieurs. La moyenne du flux angulaire est calculée sur toutes les réalisations physiques statistiquement possibles du milieu hôte. En vue d'établir une formulation statistique du transport en milieu stochastique, on considère un ensemble d'états $\Omega = \{\omega\}$ avec une densité de probabilité dépendante du temps $p_t(\omega)$ telle que

$$\int p_t(\omega) d\omega = 1 .$$

Chaque état ω représente une réalisation physique du système et les propriétés, fonctions de l'espace et du temps, du milieu hôte ($\Sigma_t(\bar{x}, \omega)$, $\Sigma_s(\bar{r}, t, \bar{v}' \rightarrow \bar{v}, \omega)$, $q(\bar{x}, \omega)$ et $\Phi(\bar{x}, \omega)$) dépendent de l'état du système et sont considérées comme des variables aléatoires ou plus précisément comme des processus stochastiques. Ainsi, dans l'équation (2.1), Σ_t , Σ_s , q et Φ sont des variables stochastiques et, par conséquent, la solution de cette équation, $\psi(\bar{x}, \omega)$, est aussi un processus stochastique dépendant de la réalisation du système.

2.1 Définition d'un processus stochastique.

Soit $(\Omega, \mathfrak{S}, P)$ un espace de probabilité,^{50,51} avec Ω , l'espace non vide des réalisations, représentant une collection de toutes les réalisations ω possibles d'une expérience. \mathfrak{S} est une σ -algèbre avec les propriétés:⁵¹

- i) $\emptyset \in \mathfrak{S}$ et $\Omega \in \mathfrak{S}$,
- ii) $F^c \in \mathfrak{S}$ pour tout $F \in \mathfrak{S}$, où $F^c = \{\omega \in \Omega \mid \omega \notin F\}$,
- iii) $\bigcup_{i=1}^{\infty} F_i \in \mathfrak{S}$ pour tout $F_1, F_2, \dots, \in \mathfrak{S}$.

\mathfrak{S} est la collection de tous les sous-ensembles (événements) de Ω et de l'ensemble vide \emptyset (l'événement impossible) ce qui inclut en particulier l'ensemble Ω (l'événement certain). Les éléments de \mathfrak{S} sont appelés des événements mesurables. P , la mesure de probabilité, est une attribution de probabilité aux événements de \mathfrak{S} et satisfait les conditions suivantes:

- i) $0 \leq P(F) \leq 1$ pour chaque $F \in \mathfrak{S}$,
- ii) $P(\emptyset) = 0$; $P(\Omega) = 1$,
- iii) $P(\bigcup_i F_i) = \sum_i P(F_i)$ pour n'importe quelle séquence finie ou dénombrable d'événements mutuellement exclusifs.

Si Ω est un ensemble fini ou dénombrable, alors les probabilités sont définies pour tous les sous-ensembles F de Ω dès qu'elles sont spécifiées pour tous les ω . Ainsi, si f est une fonction de probabilité de masse pour la réalisation ω , c'est à dire que $f(\omega) \geq 0$ pour tout $\omega \in \Omega$ et $\sum_{\omega} f(\omega) = 1$, alors on peut définir $P(F) = \sum_{\omega \in F} f(\omega)$. Dans ce cas la mesure de probabilité $P(F)$ est déterminée par les probabilités des ω .

Dans le cas où Ω n'est pas un ensemble fini ou dénombrable, par exemple, quand Ω est la ligne des réels \mathfrak{R}^1 , alors la formulation ci-dessus n'est plus possible en général. À la place, dans le cas $\Omega = \mathfrak{R}^1$, on se donne souvent une fonction de densité de probabilité (f.d.p.) f , continue par morceau, non négative, intégrable avec $\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) dx = 1$. Alors, pour un intervalle $K=(a,b)$, $-\infty \leq a < b \leq +\infty$, on définit la probabilité $P(K) = \int_a^b f(x) dx$ par une intégrale de Riemann.

Étant donné un ensemble d'indice I , un processus stochastique^{52,53} indexé par I est une collection de variables aléatoires $\{X(\lambda, \omega); \lambda \in I, \omega \in \Omega\}$ d'un espace de probabilité $(\Omega, \mathfrak{F}, P)$ prenant leurs valeurs dans un ensemble S . Cet ensemble S est appelé espace des états du processus. Les ensembles S et I peuvent être discrets ou continus. Par exemple $X(\lambda, \omega)$ peut représenter une grandeur physique comme le flux $\psi(\bar{x}, \omega)$ où λ serait la variable espace-temps \bar{x} . On peut aussi avoir i) $I=\mathbb{Z}_+$, $S=\mathfrak{R}_+$, ii) $I=[0, \infty)$, $S=\mathbb{Z}_+$ ou iii) $I=\mathfrak{R}^3$, $S=\mathfrak{R}^3$. Dans le cas des processus stochastiques indexés par un ensemble d'indices à une dimension comme le temps, abondamment décrit dans la littérature,⁵⁰⁻⁶⁰ l'ordre naturel des nombres coïncide avec le sens de l'évolution du processus. Cet ordre est perdu pour des processus stochastiques indexés par un paramètre multidimensionnel. Les processus indexés par un paramètre multidimensionnel sont appelés des champs aléatoires.

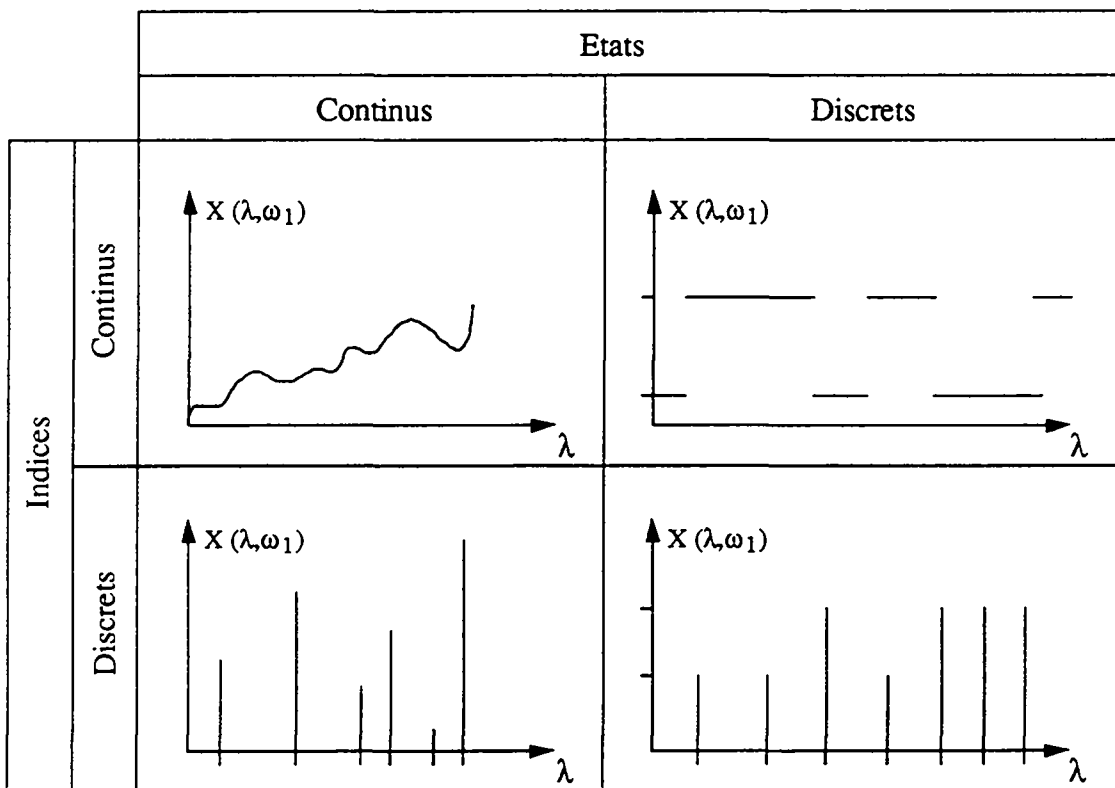


Figure 2.1: Exemples d'une réalisation de différents processus.

Un processus stochastique $\{X(\lambda, \omega); \lambda \in I, \omega \in \Omega\}$ est, dans un sens strict, une fonction de deux arguments. En pratique on utilise la notation $X(\lambda)$ pour représenter un

processus stochastique omettant, comme pour les variables aléatoires, sa dépendance en ω . $X(\lambda)$ peut être interprété, selon les cas, de manière suivante:

- i) C'est une famille de fonctions aléatoires $X(\lambda, \omega)$. Dans cette interprétation λ et ω sont des variables.
- ii) C'est une fonction à une variable appelée réalisation du processus ou encore trajectoire du processus⁵⁴ (cf. figure 2.1). Dans ce cas λ est une variable et ω est fixé.
- iii) Si λ est fixé et ω est une variable, alors $X(\lambda)$ est une variable aléatoire égale à l'état du processus en λ .
- iv) Si λ et ω sont fixés, alors $X(\lambda)$ est un nombre.

Les processus stochastiques (indexés par un ensemble d'indices à une dimension) peuvent être considérés dans un sens large⁵⁵ comme des systèmes qui évoluent de manière probabiliste en fonction de λ ou plus précisément, comme des systèmes dans lesquels une certaine variable aléatoire fonction de λ existe. On peut mesurer des valeurs, x_1, x_2, \dots , etc., de $X(\lambda)$ pour des valeurs $\lambda_1, \lambda_2, \dots$, etc., et on suppose qu'un ensemble de densité de probabilités conjointes

$$f(x_1, \lambda_1; x_2, \lambda_2; \dots) \quad (2.3)$$

avec

$$\int dx_1 \int dx_2 \dots f(x_1, \lambda_1; x_2, \lambda_2; \dots) = 1$$

existe et décrit complètement le système. Le concept d'un processus stochastique général est très large. Pour définir un processus, on a besoin de connaître au moins toutes les probabilités conjointes possibles telles que (2.3). Si une telle connaissance définit le processus, ce dernier est qualifié de processus stochastique séparable.⁵⁵ Le processus le plus simple est celui possédant une complète indépendance:

$$f(x_1, \lambda_1; x_2, \lambda_2; \dots) = \prod_i f_i(x_i, \lambda_i).$$

Cela signifie que la valeur de X au point λ est complètement indépendante de ses valeurs passées (ou futures) si on assimile λ au temps.

Un autre processus simple est le processus Markovien^{52,55} dans lequel seulement la connaissance du présent détermine le futur. Plus précisément un processus stochastique $X(\lambda)$ est un processus de Markov si sa densité de probabilité conditionnelle satisfait la condition:

$$f(x_1, \lambda_1; x_2, \lambda_2; \dots | y_1, \zeta_1; y_2, \zeta_2; \dots) = f(x_1, \lambda_1; x_2, \lambda_2; \dots | y_1, \zeta_1),$$

où $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \zeta_1 \geq \zeta_2 \geq \dots$.

C'est à dire que la probabilité conditionnelle est entièrement déterminée pas la plus récente condition, à savoir que $X(\lambda)$ prend la valeur y_1 pour $\lambda = \zeta_1$.

Plusieurs processus stochastiques ont une structure régénératrice. Un processus stochastique possède une structure régénératrice s'il se régénère ou autrement dit, s'il se répète. Afin d'éviter une définition trop formelle⁵⁶ de ces processus régénérateurs, on utilise comme ensemble d'indices, l'ensemble continu à une dimension de nombres réels représentant le temps t et on introduit la notion de temps d'arrêt. Le temps d'arrêt⁵⁷ d'un processus stochastique $\{X(t); t \geq 0\}$ est une variable aléatoire T prenant ses valeurs dans $[0, \infty)$. Pour chaque $t \geq 0$ fini, le fait que l'événement $\{T \leq t\}$ se produise ou ne se produise pas, doit pouvoir être déterminé à partir de l'histoire $\{X(u); u \leq t\}$ du processus jusqu'au temps t . Ainsi un processus stochastique $\{X(t); t \geq 0\}$ est un processus régénérateur à temps continu⁵⁷ si:

- i) Il existe une séquence de temps d'arrêt $\{T_k; k \geq 0\}$ de telle sorte que les $\{T_{k-1} - T_k; k \geq 0\}$ soient indépendants et identiquement distribués.
- ii) Pour chaque séquence de temps $0 < t_1 < t_2 < \dots < t_m$ ($m \geq 1$) et $k \geq 0$, les variables aléatoires $\{X(t_1), \dots, X(t_m)\}$ et $\{X(T_k + t_1), \dots, X(T_k + t_m)\}$ ont la même densité de probabilité et les processus $\{X(t); t \geq 0\}$ et $\{X(T_k + t); t \geq 0\}$ sont indépendants:

$$f[X(T_k + t)] = f[X(t)].$$

Les temps aléatoires $\{T_k; k \geq 0\}$ sont des points de régénération pour le processus $\{X(t); t \geq 0\}$ et l'intervalle de temps $[T_{k-1}, T_k]$ est appelé le $k^{\text{ème}}$ cycle du processus.

Parmi les processus stochastiques régénérateurs on trouve comme cas particulier le processus de remplacement ou de renouvellement.^{56,57} Un processus de remplacement⁵⁹ est une séquence $\{W_i\} i=1,2,\dots$ de variables aléatoires indépendantes, positives, identiquement distribuées. Ces variables aléatoires $\{W_i\}$ peuvent représenter la durée de vie d'un composant

que l'on remplace en fin de vie (les termes de durée de vie et de composant peuvent avoir plusieurs interprétations concrètes différentes et ne sont utilisés que pour fixer les idées). Le premier composant est installé à un temps initial, $t=0$ par exemple, et il est remplacé (instantanément!) au temps $t=W_1$ par un autre composant. Autrement dit $X(t)$ connaît un changement brutal en $t=W_1$. Ce deuxième composant est à son tour remplacé au temps $t=W_1+W_2$ et ainsi de suite. Ce processus est généralement désigné comme processus de remplacement ordinaire. Il peut être modifié. Premièrement supposons que, comme auparavant, le premier composant soit remplacé à $t=W_1$, le deuxième à $t=W_1+W_2$, le troisième à $t=W_1+W_2+W_3$ où les $\{W_i\}$ sont des variables aléatoires indépendantes et positives. Mais cette fois W_1 a comme fonction de densité de probabilité (f.d.p.) $f_1(w)$ alors que W_2, W_3, \dots ont tous la même f.d.p. $f(w)$ différente de $f_1(w)$. Un tel processus est appelé processus de remplacement modifié.⁵⁹ Un autre processus, appelé processus de remplacement équilibré⁵⁹ est obtenu en remplaçant $f_1(w)$ dans le processus modifié par

$$f_s(w) = \frac{\int_w^\infty f(y)dy}{\int_0^\infty yf(y)dy} \quad (2.4)$$

qui est bien une f.d.p. puisque

$$\int_0^\infty f_s(w)dw = 1.$$

Physiquement on interprète de la façon suivante ce processus. Supposons qu'un simple processus de remplacement ordinaire ait commencé dans le passé ($t=-\infty$) loin de l'origine $t=0$. Si l'observation du processus commence à $t=0$, la f.d.p. de la durée de vie du composant présent en $t=0$ ne sera plus donnée par $f(x)$ mais par l'équation⁵⁹ (2.4). Ainsi un processus de remplacement équilibré peut être considéré comme un processus ordinaire dans lequel le système fonctionnait déjà bien avant sa première observation.

Ces processus peuvent être généralisés de plusieurs manières. Une généralisation qui nous intéresse plus particulièrement est celle aboutissant au processus équilibré de remplacement alterné.⁵⁹ Comme précédemment, la durée de vie d'un composant est donnée par la variable aléatoire W_i , mais dans ce cas on a deux types différents de composants qui

Chapitre 2

sont utilisés en alternance. Autrement dit, les variables aléatoires W_{2n} $n=1,2,\dots$ ont une f.d.p. $f_2(w)$ et les variables W_{2n+1} $n=1,2,\dots$ ont une f.d.p. $f_1(w)$ pour avoir l'alternance des deux différents composants. Pour que le processus soit équilibré, la variable W_1 doit avoir une f.d.p. $f_s(w)$ donnée par l'éq. (2.4), avec $f(y)$ remplacée par $f_1(y)$. En plus, on peut aussi ne pas connaître le type de composant présent à $t=0$. Dans ce cas on a un mélange de deux processus, comme décrits ci-dessus, l'un avec un composant de type $2n$ à $t=0$ et l'autre avec un composant de type $2n+1$ à $t=0$.

Lorsque $f_1(w)$ et $f_2(w)$ sont des distributions de type exponentiel:

$$f(w) = \rho e^{-\rho w},$$

avec des coefficients ρ différents ou égaux pour les deux distributions, on obtient un cas particulier de processus de remplacement et l'identité:

$$f_s(w) = f(w).$$

Ce cas particulier n'est alors rien d'autre qu'un processus de Markov à deux états discrets seulement (fig 2.1).⁶⁰

Une généralisation du processus équilibré de remplacement alterné qu'on utilisera aussi par la suite consiste à avoir k types de composant au lieu de deux comme précédemment et une matrice (p_{ij}) de probabilités de transition. La valeur de p_{ij} détermine la probabilité qu'a un composant de type i d'être remplacé, après un temps W_i , par un composant de type j . Cette généralisation du processus équilibré de remplacement alterné est un cas particulier⁵⁸ des processus semi-Markoviens.⁵¹

2.2 Différentes approches du transport stochastique.

Le premier objectif²² de la théorie du transport stochastique est de dériver une équation ou un ensemble d'équations pour la moyenne du flux angulaire, $\langle \psi(\bar{x}) \rangle$, sur toutes les réalisations du système. Comme $p_i(\omega)$ est la probabilité d'observer l'état ω et le flux $\psi(\bar{x}, \omega)$ au temps t , on conclut que la moyenne du flux angulaire est donnée par

$$\langle \psi(\bar{x}) \rangle = \int_{\Omega} p_i(\omega) \psi(\bar{x}, \omega) d\omega. \quad (2.5)$$

Si on dénomme R, n'importe laquelle des variables stochastiques Σ_i , Σ_s , q, Φ et ψ , on peut écrire R comme la somme de sa moyenne $\langle R \rangle$ et de sa fluctuation statistique δR , c'est à dire

$$R = \langle R \rangle + \delta R \quad (2.6)$$

où $\langle \delta R \rangle = 0$. L'opérateur moyenne $\langle \rangle$ est celui défini dans l'équation (2.5). En utilisant l'équation (2.6) dans l'équation (2.2) et en effectuant la moyenne on obtient²⁶

$$\begin{aligned} (L + v \langle \Sigma_i \rangle) \langle \psi \rangle = v[\langle q \rangle + \langle H_s \rangle \langle \psi \rangle + \langle \delta H_s \delta \psi \rangle - \langle \delta \Sigma_i \delta \psi \rangle] \text{ dans } X, \\ \langle \psi \rangle = \langle \Phi \rangle \text{ sur } \delta X. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Cette équation, bien qu'exacte, n'est qu'un résultat formel. Elle ne représente pas une équation fermée pour la quantité $\langle \psi \rangle$. Il est nécessaire de trouver une formule qui donne les deux derniers termes de l'éq. (2.7) (les termes de corrélation) en fonction de $\langle \psi \rangle$ pour que l'équation (2.7) soit utilisable. Cette approche peut fournir une formulation exacte⁴² du transport stochastique, mais uniquement dans les cas sans diffusion de particules dans le milieu hôte, en absence de toute dépendance temporelle et pour un modèle Markovien²⁶ de mélange des matériaux.

Une autre approche consiste à effectuer directement la moyenne de l'équation (2.2), cela nous donne l'équation⁴³

$$\begin{aligned} L \langle \psi \rangle + v \langle \Sigma_i \psi \rangle = \int_{\Omega} \left(\frac{\partial}{\partial t} p_i(\omega) \right) \psi d\omega + v[\langle q \rangle + \langle H_s \psi \rangle] \text{ dans } X \\ \langle \psi \rangle = \langle \Phi \rangle \text{ sur } \delta X. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Même dans le cas simple d'une statistique stationnaire, $p_i(\omega) = p(\omega)$, les valeurs de $\langle \Sigma_i \psi \rangle$ et de $\langle H_s \psi \rangle$ seront en général différentes des produits respectifs des moyennes. Une approche de ce type, décrite par Williams,²⁴ a été essayée sur la formulation intégrale de l'équation (2.1) dans le cas d'un mélange de deux matériaux dont l'un, d'une taille plus petite, a une géométrie

sphérique. Cette démarche particulière aboutit à une formulation paramétrique approchée du transport stochastique.

Dans le cadre de ce travail, on suppose qu'il existe un ensemble fini de matériaux $\{\alpha\}$ ^{22,43} où chaque matériau est caractérisé par ses propriétés Σ_{α} , $\Sigma_{s\alpha}$, q_{α} et Φ_{α} . Ainsi chaque ω correspond à une réalisation possible de la statistique comme définie par la carte

$$\omega: \{(\bar{r}, t) | \bar{r} \in V, t \geq t_0\} \rightarrow \{\alpha\}$$

qui associe à chaque point $\bar{P} = (\bar{r}, t)$ le matériau $\alpha = \omega(\bar{P})$. Par conséquent, les propriétés physiques du milieu hôte $\Sigma_t(\omega)$, $\Sigma_s(\omega)$, $q(\omega)$ et $\Phi(\omega)$ pour un état ω au point \bar{r} et au temps t sont celles du matériau $\alpha = \omega(\bar{P})$.

Par la suite on sera amené à utiliser la notation (α) , non α , qui signifie que l'on considère tous les matériaux qui ne sont pas le matériau α . On dira aussi qu'un point \bar{P} est un point de transition⁶¹ pour la réalisation ω si

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \omega(\bar{P} - \varepsilon) \neq \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \omega(\bar{P} + \varepsilon).$$

Autrement dit, la réalisation ω a un point de transition en \bar{P} si elle attribue des matériaux différents dans le passé et le futur du point \bar{P} . Quelques unes des réalisations de l'ensemble Ω peuvent avoir des comportements très irréguliers, tels que subir des transitions très proches l'une de l'autre, ou même avoir un point isolé (un point \bar{P} où la valeur de $\omega(\bar{P})$ est différente des valeurs limites à droite et à gauche). De manière général on suppose que la plupart des réalisations de Ω ont des comportements plus réguliers. On fait ainsi l'hypothèse que l'ensemble Ω est régulier.⁶¹ Par régulier on signifie que la mesure de l'ensemble des réalisations irrégulières est nulle.

Une propriété de base de ces statistiques faisant intervenir la notion de matériau est l'existence d'une partition naturelle, dépendante du temps et de l'espace, de l'ensemble des réalisations Ω telle que⁴³

$$\Omega = \left(\bigcup_{\alpha} \Omega_{\alpha}(\bar{P}) \right) \bigcup \Omega_t(0)$$

où $\Omega_t(0)$ est le sous-ensemble des états de Ω qui sont absents au temps t , et

$$\Omega_\alpha(\bar{P}) = \left\{ \omega \in \Omega \mid \omega(\bar{P}) = \alpha \right\}$$

est le sous-ensemble des états qui ont le matériau α au point \bar{r} et au temps t . Ainsi le flux angulaire moyen $\langle \psi(\bar{x}) \rangle$ est donné par

$$\langle \psi(\bar{x}) \rangle = \sum_\alpha p_\alpha(\bar{P}) \psi_\alpha(\bar{x}), \quad (2.9)$$

où

$$p_\alpha(\bar{P}) = \int_{\Omega_\alpha(\bar{P})} p_t(\omega) d\omega \equiv M_\alpha(\bar{P}) \cdot 1 \quad (2.10)$$

avec

$$\sum_\alpha p_\alpha(\bar{P}) = 1$$

est la probabilité de trouver le matériau α au temps t à la position \bar{r} et

$$\psi_\alpha(\bar{x}) = \frac{\int_{\Omega_\alpha(\bar{P})} p_t(\omega) \psi(\bar{x}, \omega) d\omega}{p_\alpha(\bar{P})} \equiv \frac{M_\alpha(\bar{P}) \cdot \psi(\bar{x}, \omega)}{M_\alpha(\bar{P}) \cdot 1} \quad (2.11)$$

est le flux angulaire moyen calculé sur toutes les réalisations qui ont le matériau α au point \bar{P} . Par la suite on appellera le flux angulaire moyen ψ_α *flux de matériau* et la probabilité p_α *probabilité de matériau*. Grâce à l'équation (2.9) la tâche de trouver une description pour $\langle \psi(\bar{x}) \rangle$ se réduit à celle de trouver une équation ou un ensemble d'équations pour $\psi_\alpha(\bar{x})$ à partir de l'équation (2.1) ou de sa forme intégrale équivalente.^{22,44}

2.3 Équations intégréo-différentielles.

Pour obtenir une équation intégréo-différentielle décrivant le flux de matériau, $\psi_\alpha(\bar{x})$, on applique l'opérateur $M_\alpha(\bar{P})$, défini par l'équation (2.10), à l'équation (2.2) le matériau α se trouvant en \bar{P} . On obtient alors

$$\begin{aligned} M_\alpha(\bar{P}) \cdot [L\psi(\bar{x}, \omega)] + v \Sigma_\alpha(\bar{x}) p_\alpha(\bar{P}) \psi_\alpha(\bar{x}) &= p_\alpha(\bar{P}) v [q_\alpha(\bar{x}) + H_{s\alpha} \psi_\alpha(\bar{x})] \text{ dans } X, \\ \psi_\alpha(\bar{x}) &= \Phi_\alpha(\bar{x}) \text{ sur } \partial X, \end{aligned} \quad (2.12)$$

Chapitre 2

avec les définitions (2.10) et (2.11). Si l'on veut fermer cette équation, il faut calculer la moyenne du terme $L\psi(\bar{x}, \omega)$ sur les états $\Omega_\alpha(\bar{P})$. L'opérateur L peut être vu comme une dérivée totale ($L = d/dt$) si l'on se place sur une caractéristique (trajectoire). On peut ainsi écrire

$$\frac{d}{dt}[M_\alpha(\bar{P}) \cdot \psi(\bar{P}, \omega)] = M_\alpha(\bar{P}) \cdot \frac{d\psi(\bar{P}, \omega)}{dt} + \frac{dM_\alpha(\bar{P})}{dt} \cdot \psi(\bar{P}, \omega)$$

où \bar{v} est omis dans ψ puisqu'on opère dans l'espace des \bar{P} . En utilisant (2.11) et en revenant aux notations usuelles $d/dt = L$ on obtient le terme cherché, à introduire dans (2.12):

$$M_\alpha(\bar{P}) \cdot [L\psi(\bar{P}, \omega)] = L[p_\alpha(\bar{P})\psi_\alpha(\bar{P})] - \frac{dM_\alpha(\bar{P})}{dt} \cdot \psi(\bar{P}, \omega).$$

De son côté, la dérivée totale de M_α peut s'écrire:

$$\frac{dM_\alpha(\bar{P})}{dt} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} [M_\alpha(\bar{P}') - M_\alpha(\bar{P})]$$

avec $\bar{P}' = (\bar{r} + \varepsilon\bar{v}, t + \varepsilon)$ puisqu'on se trouve sur une caractéristique d'équation $\bar{r} = \bar{r}_0 + \bar{v}t$ (\bar{v} fixe). Finalement Sanchez a montré,⁴³ à partir de la dernière expression, que:

$$\frac{dM_\alpha(\bar{P})}{dt} \cdot \psi(\bar{P}, \omega) = [M_{(\alpha)\alpha}(\bar{P}) - M_{\alpha(\alpha)}(\bar{P})] \cdot \psi(\bar{P}, \omega),$$

où

$$M_{(\alpha)\alpha}(\bar{x})\psi(\bar{x}, \omega) = \int_{\Omega_{(\alpha)\alpha}(\bar{x})} p_t(\omega)\psi(\bar{x}, \omega) d\omega$$

avec une définition symétrique pour $M_{\alpha(\alpha)}$. $\Omega_{(\alpha)\alpha}(\bar{x})$ peut être interprété comme l'ensemble des réalisations ω qui passent par unité de temps du matériau α à un autre matériau (α) quelconque au point \bar{P} dans la direction \bar{v} . On remarquera que \bar{P} est un point de transition⁶¹ pour ces réalisations et que le nouvel ensemble statistique $\Omega_{\alpha(\alpha)}(\bar{x})$ dépend désormais de la direction \bar{v} de propagation des particules.

Avec ces considérations sur la relation de commutation entre L et $M_\alpha(\bar{P})$ l'équation (2.12) devient:

$$\begin{aligned}
 (L + v \Sigma_{i\alpha}(\bar{x})) p_{\alpha}(\bar{P}) \psi_{\alpha}(\bar{x}) &= p_{\alpha}(\bar{P}) v [q_{\alpha}(\bar{x}) + H_{s\alpha} \psi_{\alpha}(\bar{x})] \\
 + p_{(\alpha)\alpha}(\bar{x}) \psi_{(\alpha)\alpha}(\bar{x}) - p_{\alpha(\alpha)}(\bar{x}) \psi_{\alpha(\alpha)}(\bar{x}) &\text{ dans } X \\
 \psi_{\alpha}(\bar{x}) &= \Phi_{\alpha}(\bar{x}) \text{ sur } \partial X
 \end{aligned} \tag{2.13}$$

où

$$p_{\alpha(\alpha)}(\bar{x}) = M_{\alpha(\alpha)}(\bar{x}) \cdot 1 \tag{2.13a}$$

est la densité de probabilité, par unité de temps de transit dans la direction \bar{v} , de traverser une interface entre un matériau α et un matériau quelconque et

$$\psi_{\alpha(\alpha)}(\bar{x}) = \frac{M_{\alpha(\alpha)}(\bar{x}) \cdot \Psi(\bar{x}, \omega)}{M_{\alpha(\alpha)}(\bar{x}) \cdot 1} \tag{2.13b}$$

est le flux angulaire moyen sur toutes les réalisations qui ont une interface entre le matériau α et un matériau quelconque au point \bar{P} dans la direction \bar{v} . En inversant les indices α et (α) on obtient les définitions pour les autres termes inconnus de l'équation (2.13). Afin de traiter le flux angulaire moyen $\psi_{\alpha(\alpha)}(\bar{x})$ on introduit sa décomposition en flux moyen sur toutes les réalisations qui ont une interface entre le matériau α et un matériau β déterminé. Ces nouveaux flux moyens seront appelés par la suite *flux d'interface* $\alpha\beta$ dans la direction \bar{v} . Cette décomposition s'écrit :

$$\psi_{\alpha(\alpha)}(\bar{x}) = \sum_{\beta \neq \alpha} t_{\alpha\beta}(\bar{x}) \psi_{\alpha\beta}(\bar{x})$$

où $\psi_{\alpha\beta}(\bar{x})$ est le flux moyen angulaire d'interface $\alpha\beta$ dans la direction \bar{v} . Les coefficients

$$t_{\alpha\beta}(\bar{x}) = \frac{M_{\alpha\beta}(\bar{x}) \cdot 1}{M_{\alpha(\alpha)}(\bar{x}) \cdot 1}$$

sont les probabilités conditionnelles locales de quitter le matériau α pour entrer dans le matériau β sachant que \bar{x} est un point de transition entre le matériau α et un matériau quelconque. Ces nouvelles probabilités sont normalisées à 1:

$$\sum_{\beta \neq \alpha} t_{\alpha\beta}(\bar{x}) = 1.$$

En inversant les indices α et β on obtient la décomposition du flux moyen $\psi_{(\alpha)\alpha}(\bar{x})$ et l'équation (2.13) devient

$$\begin{aligned}
 (L + v\Sigma_{\alpha}(\bar{x}))p_{\alpha}(\bar{P})\psi_{\alpha}(\bar{x}) &= p_{\alpha}(\bar{P})v[q_{\alpha}(\bar{x}) + H_{s\alpha}\psi_{\alpha}(\bar{x})] \\
 + \sum_{\beta \neq \alpha} [p_{\beta(\beta)}(\bar{x})t_{\beta\alpha}(\bar{x})\psi_{\beta\alpha}(\bar{x}) - p_{\alpha(\alpha)}(\bar{x})t_{\alpha\beta}(\bar{x})\psi_{\alpha\beta}(\bar{x})] &\text{ dans } X \\
 \psi_{\alpha}(\bar{x}) &= \Phi_{\alpha}(\bar{x}) \text{ sur } \partial X
 \end{aligned}
 \tag{2.14}$$

Un résultat similaire, basé sur le bilan de particules dans chaque matériau, a été obtenu de manière indépendante par Adams et al.⁶² dans le cadre plus restrictif d'un mélange Markovien de deux matériaux et d'une statistique homogène. Une statistique homogène^{43,61,63} signifie que tous les points du système ont les mêmes propriétés statistiques. Cela implique, par exemple, que $p_{\alpha}(\bar{P})$ soit constant.

2.4 Équations intégrales.

La solution de la forme intégrale de l'équation de transport (2.1) est le flux angulaire ψ au point $\bar{x} = (\bar{P}, \bar{v})$, avec $\bar{P} = (\bar{r}, t)$. Ce flux angulaire est donné en terme de l'émission locale à vitesse \bar{v} le long de la trajectoire passée, c'est à dire le long de l'ensemble

$$\text{Tr}(\theta_t, \bar{x}) = \{ \bar{P}_{\theta} = (\bar{r} - \theta\bar{v}, t - \theta) | \theta \in [0, \theta_t) \}$$

où

$$\theta_t(\bar{x}) = \min[\theta_{bd}(\bar{r}, \bar{v}), \theta_{in}(t)].$$

Dans ce cas θ_{bd} est le temps requis, à une particule de vitesse \bar{v} , pour voyager de la frontière ∂V au point \bar{r} et $\theta_{in} = t - t_0$. La résolution^{1,22,44,45} de l'équation intégral-différentielle (2.1) fournit la forme intégrale du transport:

$$\begin{aligned}
 \psi(\bar{x}) &= e^{-\tau(\theta_t, \bar{x})} \Phi(\bar{x}_{\theta_t}) \\
 &+ \int_0^{\theta_t} e^{-\tau(\theta, \bar{x})} v [q(\bar{x}_{\theta}) + \int \Sigma_s(\bar{P}_{\theta}, \bar{v}' \rightarrow \bar{v}) \psi(\bar{P}_{\theta}, \bar{v}') d\bar{v}'] d\theta.
 \end{aligned}$$

$\Phi(\bar{x}_{\theta_t})$ peut être soit une condition au bord, soit une condition initiale selon que θ_t est égal à θ_{bd} ou à θ_{in} et

$$\tau(\theta, \bar{x}) = v \int_0^{\theta} \Sigma_t(\bar{r} - \theta' \bar{v}, t - \theta', \bar{v}) d\theta'$$

est la distance optique le long de la trajectoire passée $\text{Tr}(\theta, \bar{x})$. La notation adoptée pour les coordonnées le long de la trajectoire passée est $\bar{x}_\theta = (\bar{P}_\theta, \bar{v})$ avec $\bar{P}_\theta = (\bar{r} - \theta\bar{v}, t - \theta)$ et de manière similaire pour $\bar{x}_l(\theta = \theta_l)$. Dans le cas stochastique les flux et les propriétés (Σ_t, \dots) dépendent de la variable d'état ω .

Pour réaliser la moyenne de l'équation intégrale en milieu stochastique en appliquant l'opérateur $M_\alpha(\bar{P})$ défini par l'équation (2.11), il est nécessaire d'étudier le comportement des réalisations physiques de la statistique le long de la trajectoire passée. Supposons que la réalisation ω attribue le matériau α au point \bar{P} , alors le comportement local de ω le long de la trajectoire passée peut être caractérisé par la durée maximale durant laquelle une particule de vitesse \bar{v} peut voyager de sorte qu'elle atteigne \bar{P} en voyant de manière continue le matériau α . Plus précisément pour chaque \bar{x} on définit la fonction $\theta(\bar{x}) : \Omega \rightarrow \mathfrak{R}^+$ telle que

$$\theta_\omega(\bar{x}) = \max \left\{ \theta \in \mathfrak{R}^+ \mid \omega(\bar{P}') = \omega(\bar{P}), \forall \bar{P}' \in \text{Tr}(\theta, \bar{x}) \right\} .$$

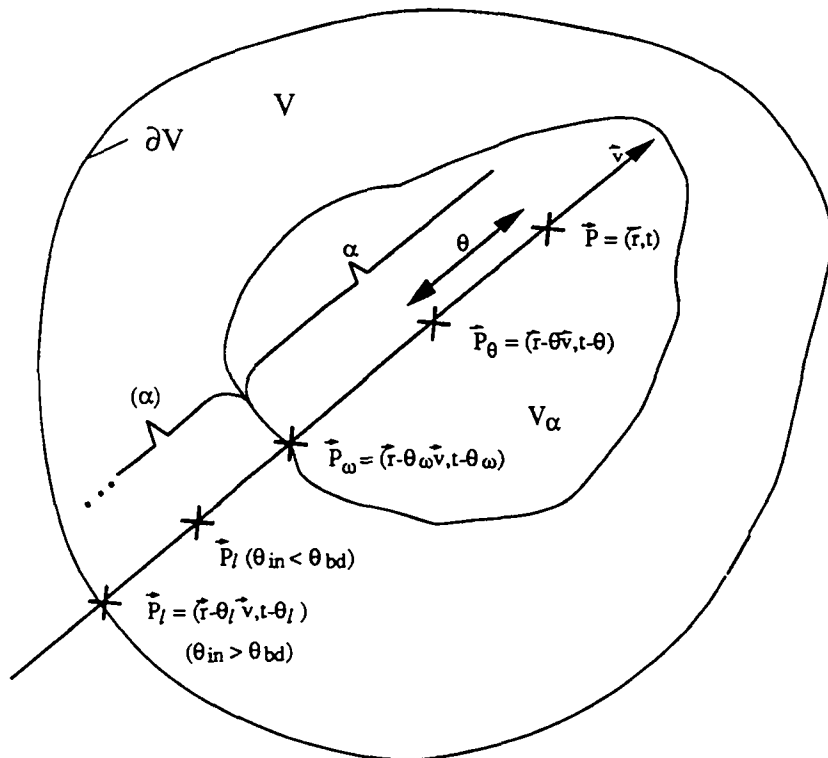


Figure 2.2: Schéma des coordonnées de l'équation intégrale

Le long de la trajectoire passée, la configuration ω est composée sans discontinuité de matériau α sur l'ensemble $\text{Tr}(\theta_\omega, \bar{x})$ et change de matériau en $\bar{P}_\omega = (\bar{r} - \theta_\omega \bar{v}, t - \theta_\omega)$, c'est à dire que $\omega(\bar{P}_\omega) \neq \omega(\bar{P}), \forall \bar{P} \in \text{Tr}(\theta_\omega, \bar{x})$ ou que \bar{P}_ω est un point de transition.

Pour un état $\omega \in \Omega_\alpha(\bar{P})$, l'équation intégrale du transport peut s'écrire en \bar{x} comme

$$\begin{aligned} \psi(\bar{x}, \omega) = & H(\theta_\omega - \theta_t) e^{-\tau_\alpha(\theta_t, \bar{x})} \Phi(\bar{x}_t, \omega) \\ & + H(\theta_t - \theta_\omega) e^{-\tau_\alpha(\theta_\omega, \bar{x})} \psi(\bar{x}_\theta, \omega) \\ & + \int_0^{\min(\theta_\omega, \theta_t)} e^{-\tau_\alpha(\theta, \bar{x})} v \left[q_\alpha(\bar{x}_\theta) + \int \Sigma_{s\alpha}(\bar{P}_\theta, \bar{v}' \rightarrow \bar{v}) \psi(\bar{P}_\theta, \bar{v}', \omega) d\bar{v}' \right] d\theta. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Dans cette équation H représente la fonction de Heaviside et $\bar{x}_\omega = (\bar{P}_\omega, \bar{v})$. Les différentes coordonnées utilisées dans l'équation intégrale (2.15) sont décrites schématiquement dans la figure 2.2.

L'opérateur $M_\alpha(\bar{P})$ tel qu'il est décrit dans l'équation (2.11), n'est pas pratique pour calculer le flux angulaire moyen de matériau α , $\psi_\alpha(\bar{x})$, à partir de l'équation intégrale (2.15). L'intégration sur le sous-ensemble $\Omega_\alpha(\bar{P})$ peut être modifiée et se faire⁴³ en sélectionnant une trajectoire passée à \bar{P} et en prenant en compte les configurations qui ont la même valeur de $\theta_\omega(\bar{x})$. Ceci est formellement équivalent⁴³ au changement de variable $\omega = (\theta_\omega, \omega_\perp)$ où ω_\perp représente le reste des coordonnées. Ainsi, l'opérateur $M_\alpha(\bar{P})$ peut s'écrire

$$M_\alpha(\bar{P}) \cdot \psi(\bar{x}, \omega) \equiv \int_0^\infty \int_{\Omega_{(\alpha)\alpha}(\bar{x}_\omega, \bar{x})} p_t(\omega) \psi(\bar{x}, \omega) d\omega_\perp d\theta_\omega$$

où l'intégrale sur ω_\perp est calculée sur le sous-ensemble des états de Ω qui sont continûment α le long de la trajectoire (entre \bar{P}_ω et \bar{P}) et qui changent en un matériau quelconque dans un intervalle $d\theta_\omega$ au point \bar{P}_ω . En appliquant l'opérateur $M_\alpha(\bar{P})$ à l'équation (2.15) on obtient, avec la définition (2.11),

$$\begin{aligned} p_\alpha(\bar{P}) \psi_\alpha(\bar{x}) = & e^{-\tau_\alpha(\theta_t, \bar{x})} \int_{\theta_t}^\infty \int_{\Omega_{(\alpha)\alpha}(\bar{x}_\omega, \bar{x})} p_t(\omega) \Phi(\bar{x}_t, \omega) d\omega_\perp d\theta_\omega \\ & + \int_0^{\theta_t} e^{-\tau_\alpha(\theta, \bar{x})} \int_{\Omega_{(\alpha)\alpha}(\bar{x}_\theta, \bar{x})} p_t(\omega) \psi(\bar{x}_\theta, \omega) d\omega_\perp d\theta \\ & + \int_0^{\theta_t} e^{-\tau_\alpha(\theta, \bar{x})} v \left\{ q_\alpha(\bar{x}_\theta) \int_0^\infty \int_{\Omega_{(\alpha)\alpha}(\bar{x}_\omega, \bar{x})} p_t(\omega) d\omega_\perp d\theta_\omega \right. \\ & \left. + \int [\Sigma_{s\alpha}(\bar{P}_\theta, \bar{v}' \rightarrow \bar{v}) \int_0^\infty \int_{\Omega_{(\alpha)\alpha}(\bar{x}_\omega, \bar{x})} p_t(\omega) \psi(\bar{P}_\theta, \bar{v}', \omega) d\omega_\perp d\theta_\omega] d\bar{v}' \right\} d\theta. \end{aligned} \quad (2.16)$$

La dernière intégrale en $d\theta$ dans le membre de droite de l'équation est obtenue par inversion de l'ordre d'intégration

$$\int_0^\infty d\theta_\omega \int_0^{\min(\theta_\omega, \theta_t)} d\theta \rightarrow \int_0^{\theta_t} d\theta \int_\theta^\infty d\theta_\omega$$

et la variable d'intégration du deuxième terme à droite a été changée, $d\theta_\omega$ est devenu $d\theta$.

Définissons :

$$i) R_\alpha(\theta, \bar{x}) = \frac{\int_\theta^\infty \int_{\Omega_{(\alpha)\alpha}(\bar{x}_\theta, \bar{x})} p_t(\omega) d\omega_\perp d\theta_\omega}{p_\alpha(\bar{P})}, \quad (2.17a)$$

probabilité relative aux configurations $\omega \in \Omega_\alpha(\bar{P})$ telles que les particules vont de \bar{P}_θ à \bar{P} sans quitter le matériau α ($\theta_\omega \geq \theta$). Comme attendu, on vérifie bien que $R_\alpha(0, \bar{x}) = 1$.

$$ii) \Psi_{\alpha\alpha}(\bar{P}_\theta, \bar{v}'; \bar{x}) = \frac{\int_\theta^\infty \int_{\Omega_{(\alpha)\alpha}(\bar{x}_\theta, \bar{x})} p_t(\omega) \Psi(\bar{P}_\theta, \bar{v}', \omega) d\omega_\perp d\theta_\omega}{\int_\theta^\infty \int_{\Omega_{(\alpha)\alpha}(\bar{x}_\theta, \bar{x})} p_t(\omega) d\omega_\perp d\theta_\omega}, \quad (2.17b)$$

moyenne du flux angulaire $\Psi(\bar{P}_\theta, \bar{v}', \omega)$ sur l'ensemble des configurations précédentes.

$$iii) f_{s\alpha}(\theta, \bar{x}) = \frac{\int_{\Omega_{(\alpha)\alpha}(\bar{x}_\theta, \bar{x})} p_t(\omega) d\omega_\perp}{p_\alpha(\bar{P})} = -\partial_\theta R_\alpha(\theta, \bar{x}), \quad (2.17c)$$

densité conditionnelle de probabilité (par unité de temps de transit dans la direction \bar{v}) relative aux configurations $\omega \in \Omega_\alpha(\bar{P})$ telles que les particules passent d'un matériau (α) à α en \bar{P}_θ et parviennent en \bar{P} sans quitter ce dernier. On remarquera que $f_{s\alpha}$ s'obtient simplement par dérivation de R_α ce qui est cohérent avec les définitions précédentes.

$$iv) \Psi_{(\alpha)\alpha}(\bar{x}_\theta; \bar{x}) = \frac{\int_{\Omega_{(\alpha)\alpha}(\bar{x}_\theta, \bar{x})} p_t(\omega) \Psi(\bar{x}_\theta, \omega) d\omega_\perp}{\int_{\Omega_{(\alpha)\alpha}(\bar{x}_\theta, \bar{x})} p_t(\omega) d\omega_\perp}, \quad (2.17d)$$

moyenne du flux angulaire $\psi(\bar{P}_\theta, \bar{v}, \omega)$ sur l'ensemble des configurations définies en iii).

En utilisant les quatres définitions précédentes l'équation (2.16) devient

$$\begin{aligned} \psi_\alpha(\bar{x}) &= e^{-\tau_\alpha(\theta, \bar{x})} R_\alpha(\theta, \bar{x}) \Phi_{\alpha\alpha}(\bar{x}_t; \bar{x}) \\ &+ \int_0^{\theta_t} e^{-\tau_\alpha(\theta, \bar{x})} \{ f_{s\alpha}(\theta, \bar{x}) \psi_{(\alpha)\alpha\alpha}(\bar{x}_\theta; \bar{x}) \\ &+ R_\alpha(\theta, \bar{x}) v [q_\alpha(\bar{x}_\theta) + \int \Sigma_{s\alpha}(\bar{P}_\theta, \bar{v}' \rightarrow \bar{v}) \psi_{\alpha\alpha}(\bar{P}_\theta, \bar{v}'; \bar{x}) d\bar{v}'] \} d\theta. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Afin de pouvoir analyser $\psi_{(\alpha)\alpha\alpha}$ on introduit la décomposition (voir § 2.3):

$$\psi_{(\alpha)\alpha\alpha}(\bar{x}_\theta; \bar{x}) = \sum_{\beta \neq \alpha} t_{\beta\alpha\alpha}(\bar{x}_\theta; \bar{x}) \psi_{\beta\alpha\alpha}(\bar{x}_\theta; \bar{x}).$$

Dans ce cas

$$\psi_{\beta\alpha\alpha}(\bar{x}_\theta; \bar{x}) = \frac{\int_{\Omega_{\beta\alpha}(\bar{x}_\theta, \bar{x})} p_t(\omega) \psi(\bar{x}_\theta, \omega) d\omega_\perp}{\int_{\Omega_{\beta\alpha}(\bar{x}_\theta, \bar{x})} p_t(\omega) d\omega_\perp}$$

est la moyenne du flux angulaire $\psi(\bar{x}_\theta, \omega)$ sur l'ensemble des réalisations $\omega \in \Omega_\alpha(\bar{P})$ qui ont l'intervalle $Tr(\theta, \bar{x})$ dans le matériau α et qui, ensuite, passent dans le matériau β en \bar{P}_θ , et

$$t_{\beta\alpha\alpha}(\bar{x}_\theta; \bar{x}) = \frac{\int_{\Omega_{\beta\alpha}(\bar{x}_\theta, \bar{x})} p_t(\omega) d\omega_\perp}{\int_{\Omega_{(\alpha)\alpha}(\bar{x}_\theta, \bar{x})} p_t(\omega) d\omega_\perp} \quad \beta \neq \alpha$$

est la densité conditionnelle de probabilité pour les réalisations $\omega \in \Omega_\alpha(\bar{P})$ qui ont l'intervalle $Tr(\theta, \bar{x})$ dans le matériau α et qui change de matériau en \bar{P}_θ , de passer dans le matériau β . Pour un mélange statistique binaire (à deux matériaux), la probabilité de transition $t_{\beta\alpha\alpha}(\bar{x}_\theta; \bar{x})$ vaut nécessairement 1 et $\psi_{(\alpha)\alpha\alpha}$ devient $\psi_{\beta\alpha\alpha}$. La continuité du flux angulaire à l'interface entre deux matériaux (on suppose que dans notre cas, il n'y a pas de sources de surface) assure la continuité des flux moyens. Par conséquent, le flux d'interface $\beta\alpha$, $\psi_{\beta\alpha\alpha}$, peut être vu comme la moyenne du flux angulaire de particules quittant le matériau β dans la direction $\bar{\Omega} = \bar{v}/v$ en \bar{x}_θ pour voyager dans le matériau α au moins jusqu'au temps t . Ce nouveau flux d'interface $\psi_{\beta\alpha\alpha}(\bar{x}_\theta; \bar{x})$ ne dépend plus seulement de la position, du temps et de la vitesse comme le flux d'interface local $\psi_{\beta\alpha}(\bar{x})$ de l'équation intégrro-différentielle (2.14), mais aussi

de la distribution du matériau le long de la trajectoire future des particules. Dans la notation adoptée pour $\psi_{\beta\alpha\alpha}$ et $\psi_{\alpha\alpha}$ de l'équation intégrale (2.17) on a rajouté un indice de matériau pour indiquer quel matériau se trouve dans la trajectoire future et on a placé les variables indiquant le chemin après le point virgule.

2.5 Nécessité d'une modélisation.

Les équations (2.13) et (2.17) sont deux formulations exactes en toute généralité du transport stochastique. Elles permettent de déterminer les flux de matériau, $\psi_{\alpha}(\bar{x})$, entrant dans le calcul du flux angulaire moyen $\langle \psi(\bar{x}) \rangle$ donné par l'équation (2.9). Malheureusement, ces deux formalismes dépendent de nouveaux moments du flux angulaire qu'il s'agit de calculer pour obtenir $\psi_{\alpha}(\bar{x})$. La dérivation⁴³ d'équations pour ces nouveaux moments conduit à une hiérarchie infinie d'équations contenant des moyennes statistiques du flux angulaire de plus en plus complexes et dépendant d'un nombre de plus en plus grand de coordonnées. En effet, dans le cas des équations intégrales, l'éq. (2.17) fournit $\psi_{\alpha}(\bar{x})$ en terme de $\psi_{\alpha\alpha}(\bar{P}_{\theta}, \bar{v}; \bar{x})$ et de $\psi_{\beta\alpha\alpha}(\bar{x}_{\theta}; \bar{x})$ $\beta \neq \alpha$ qui dépendent des coordonnées \bar{x}_{θ} et \bar{x} . L'utilisation d'équations similaires à (2.17) pour calculer d'abord $\psi_{\alpha\alpha}$, puis $\psi_{\beta\alpha\alpha}$ fait apparaître quatre nouveaux types de moment du flux angulaire, chacun dépendant de trois coordonnées. Pour le formalisme intégro-différentiel, l'éq. (2.14) donne $\psi_{\alpha}(\bar{x})$ en fonction de $\psi_{\beta\alpha}(\bar{x})$ et de $\psi_{\alpha\beta}(\bar{x})$. Mais, pour l'instant, il n'existe aucune formulation intégro-différentielle exacte fournissant ces deux nouveaux flux angulaires moyens. On remarquera aussi que la première équation intégrale de la hiérarchie n'est pas équivalente à celle du formalisme intégro-différentiel;⁴³ cela ne signifie pas pour autant que les deux approches ne soient pas équivalentes si l'on considère les hiérarchies complètes.

La hiérarchie infinie d'équations décrivant le transport stochastique se réduit à un nombre fini d'équations seulement dans le cas où tous les matériaux du milieu hôte ne diffusent pas les particules et uniquement pour des statistiques particulières. Ce point sera discuté plus en détails dans le Chapitre 4. Lorsque au moins un des matériaux diffuse les

particules (en pratique il n'y a que le vide où les particules peuvent voyager sans collisions) le transport stochastique est décrit par un système infini d'équations. Ces équations sont de peu d'intérêt pour la plupart des applications pratiques. Leur intérêt réside dans le fait qu'elles fournissent une base théorique pour le développement de formalismes approchés nécessaires à la résolution des problèmes pratiques.

La modélisation du transport de particules dans un milieu stochastique, en plus du problème de la troncature du système infini d'équations, doit aussi tenir compte des difficultés liées à la description des processus stochastiques décrivant le mélange des matériaux. En effet, si l'on veut utiliser pour la description du mélange des matériaux du milieu hôte des processus stochastiques simples, comme le processus Markovien ou le processus de remplacement, on doit se limiter à une description unidimensionnelle du problème. Les processus de remplacement sont définis uniquement pour un ensemble d'indices à une dimension. Les processus Markovien à deux états peuvent, d'une certaine manière, être étendus au mieux au plan.⁶⁴ À notre connaissance il n'existe aucune description de processus de remplacement avec un ensemble d'indices multidimensionnels et de processus Markovien de dimension supérieure à deux.

Étant donné la complexité du problème, il est nécessaire de pouvoir comparer les modèles existants et ceux qui seront développés dans le cadre de ce travail à des cas de référence. Ces cas de référence devront être aussi complets que possible afin de s'assurer de la validité et de la précision du formalisme approché utilisé lors de la troncature des équations exactes. Dans le chapitre suivant on décrit la mise en oeuvre de ces cas de référence pour quelques cas particuliers de processus stochastique de mélange du milieu hôte dans une géométrie unidimensionnelle.

CHAPITRE 3

CAS DE RÉFÉRENCE

Dans le chapitre précédent sont décrites les équations régissant le flux angulaire moyen $\langle \psi(\vec{x}) \rangle$. Cette moyenne est calculée sur toutes les réalisations physiques statistiquement possible du milieu hôte. Une alternative à la résolution des équations du transport stochastique consiste à:

- i) générer à partir de la statistique présumée connue du milieu hôte une réalisation physique par une procédure d'échantillonnage,
- ii) pour cette réalisation particulière bien déterminée, résoudre l'équation intégrale ou intégral-différentielle du transport classique (2.1),
- iii) répéter les points i) et ii) pour toutes les réalisations possibles,
- iv) calculer la moyenne du flux.

En principe, le nombre de réalisations est infini, c'est pourquoi on préfère tronquer la hiérarchie infinie d'équations décrite dans le chapitre précédent. Pour le calcul de cas de référence, on adopte l'approche décrite ci-dessus pour un nombre fini de réalisations, suffisamment grand pour que l'erreur sur la moyenne soit raisonnable. Le nombre nécessaire de réalisations peut être élevé et le temps de résolution d'un très grand nombre d'équations du transport classique (2.1) devient très vite coûteux mais, on évite tout problème de fermeture.

Dans le but de réduire le temps de calcul on choisit des cas de transport et de statistique stationnaires, c'est à dire indépendants du temps, et une géométrie plane à une dimension. Ce dernier choix est dicté par la nécessité de réduire le temps de calcul et par le fait que les processus stochastiques les plus simples ne sont définis que pour un ensemble d'indices à une dimension. Le nombre de matériaux composant le milieu hôte est limité à deux. Le mélange de

ces deux matériaux est assimilé à un processus équilibré de remplacement alterné en statistique homogène. L'ensemble des indices du processus est la ligne des réels \mathfrak{R}^1 . L'ensemble des états est l'ensemble des matériaux $\{\alpha, \beta\}$. La géométrie du problème est constituée d'une suite de plaques de matériau d'indice α ou β d'épaisseur aléatoire.

3.1 Considérations statistiques.

Pour la réalisation des cas de référence une classe restreinte de statistiques est utilisée: les statistiques homogènes.^{61,63} Par statistiques homogènes, on entend un ensemble de statistiques sur la ligne des réels \mathfrak{R}^1 invariant pour des translations arbitraires.⁶¹ Autrement dit, tous les points du système ont les mêmes propriétés statistiques.⁶³ Cette définition implique que les fonctions densités de probabilité $f_\alpha(z)$ sont des fonctions prédéfinies pour chaque matériau et en particulier que les probabilités de matériau (éq. (2.10)) sont constantes. La fonction densité de probabilité $f_\alpha(z)$ est définie de sorte que $f_\alpha(z)dz$ est la probabilité que le matériau α ait une largeur comprise entre z et $z+dz$. Cette fonction a la normalisation

$$\int_0^\infty f_\alpha(z) dz = 1$$

et est indépendante de la position x conformément à l'hypothèse de statistiques homogènes. Ainsi quelle que soit la position x , la largeur de la plaque du matériau présent en x est tirée de la même fonction de distribution des épaisseurs $f_\alpha(z)$. L'épaisseur moyenne d'une plaque de matériau α est donnée par

$$\lambda_\alpha = \int_0^\infty z f_\alpha(z) dz. \tag{3.1}$$

En plus de la fonction de distribution $f_\alpha(z)$, il est utile d'introduire la probabilité:

$$Q_\alpha(z) = \int_z^\infty f_\alpha(z') dz'. \tag{3.2}$$

$Q_\alpha(z)$ est la probabilité, pour une plaque de matériau α , d'avoir une épaisseur supérieure à z . Bien que la fonction de distribution $f_\alpha(z)$ puisse-t-être utilisée pour échantillonner la largeur d'une plaque de matériau α suivant une plaque de matériau β , elle ne peut pas être utilisée pour

obtenir l'épaisseur de la première plaque du système. En effet, le point $x=0$ de la géométrie considérée ne correspond pas forcément à un point de transition de matériau β en α . Ce point doit être choisi uniformément de manière aléatoire le long de l'axe des x pour satisfaire l'hypothèse d'une statistique homogène.⁶⁵ L'échantillonnage de la largeur de la première plaque nécessite une fonction densité de probabilité $f_{s\alpha}(z)$ telle que $f_{s\alpha}(z)dz$ soit la probabilité que la largeur entre le point de transition et un point choisi aléatoirement dans le matériau α soit comprise entre z et $z+dz$. Cette fonction est donnée par⁵⁹ l'équation (2.4) ou avec nos définitions par^{61,63}

$$f_{s\alpha}(z) = \frac{Q_{\alpha}(z)}{\lambda_{\alpha}}.$$

A l'aide de la distribution $f_{s\alpha}(z)$ on peut construire $R_{\alpha}(z)$, la probabilité que la frontière droite d'une plaque de matériau α soit à une distance supérieure à z d'un point arbitraire x à l'intérieur de la plaque. $R_{\alpha}(z)$ se définit comme suit:

$$R_{\alpha}(z) = \int_z^{\infty} f_{s\alpha}(z') dz'. \quad (3.3)$$

Ces définitions de $f_{s\alpha}(z)$ et de $R_{\alpha}(z)$ sont cohérentes avec celles du Chapitre 2. Pour des statistiques homogènes $Q_{\alpha}(z)$ et $f_{s\alpha}(z)$ sont proportionnelles, mais ce n'est pas toujours le cas pour des statistiques arbitraires. Les statistiques étant homogènes, la probabilité de matériau, p_{α} , définie comme la probabilité d'un point de l'axe des x d'appartenir à une plaque de matériau α , est une constante indépendante de l'espace donnée par^{59,61,63}

$$p_{\alpha} = \frac{\lambda_{\alpha}}{\lambda_{\alpha} + \lambda_{\beta}}. \quad (3.4)$$

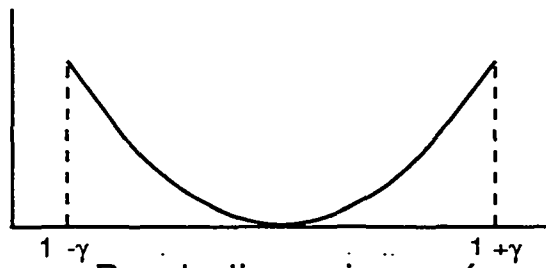
Pour le calcul des cas de référence on considère un système en géométrie plane de longueur finie L avec coordonnées $x=0$ à gauche et $x=L$ à droite. Les distributions pour l'épaisseur des matériaux composant le système ont été choisies parmi huit différents types de distributions: exponentielle, bloc, parabolique inversée, rampe inversée, tente, rampe, gamma et périodique. Ces types ne correspondent pas forcément à des situations réelles, mais permettent par leur diversité de couvrir un large domaine. Ces distributions sont présentées

dans la figure 3.1. Les expressions analytiques de $f_{\alpha}(z)$ et $f_{s\alpha}(z)$ ainsi que leur écart type sont décrits dans l'Annexe A. Par la suite, la distribution exponentielle sera désignée comme distribution de Markov car lorsque les deux matériaux ont une distribution exponentielle, le processus de renouvellement est un processus de Markov à deux états.⁶⁰

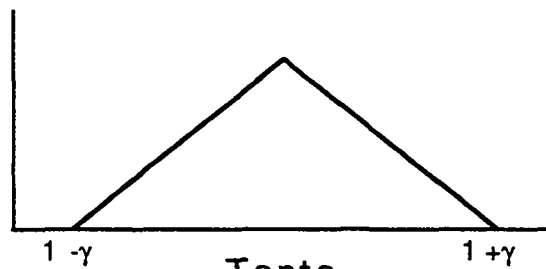
Parmi ces huit distributions décrites dans l'Annexe A, les distributions de Markov et gamma admettent des épaisseurs de matériau allant de zéro à l'infini, alors que la distribution périodique correspond à une valeur unique d'épaisseur λ . Seules deux distributions, de Markov et périodique, sont uniquement déterminées par la valeur λ de l'épaisseur moyenne. Les six autres distributions dépendent de λ et d'un second paramètre. La distribution gamma dépend d'un entier n , $n > 0$. Cet entier permet à la distribution gamma de simuler tout un spectre de distributions allant de la distribution de Markov avec $n=1$ à la distribution périodique avec $n=\infty$ en passant par des variances proches de celles des distributions bloc et rampe. Les cinq dernières distributions ont toutes un support compact et dépendent d'un paramètre γ dont la valeur varie entre 0 et 1. Pour $\gamma=1$, toutes les cinq distributions permettent d'obtenir des épaisseurs de plaque qui varient de manière continue de 0 à une valeur maximum. Pour $\gamma < 1$ ces distributions ne permettent plus d'obtenir des épaisseurs inférieures à $(1-\gamma)\lambda$. L'écart type de ces distributions est proportionnel au produit $\gamma\lambda$ et ainsi le paramètre γ peut être utilisé pour modifier l'écart type de la distribution tout en préservant la moyenne (cf. Annexe A). Notons encore qu'avec $\gamma=0$ les distributions parabolique inversée, rampe inversée, bloc, tente et rampe deviennent des distributions périodiques.



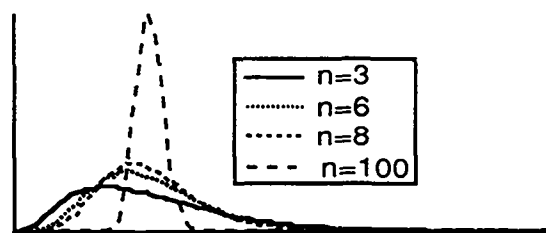
Exponentielle



Parabolique inversée



Tente



Gamma

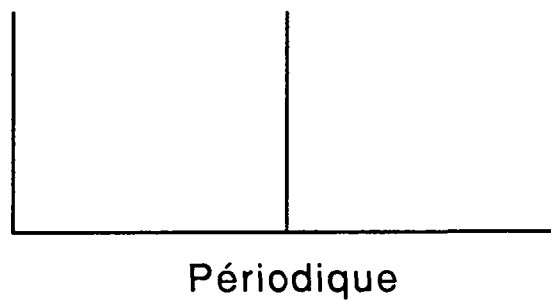
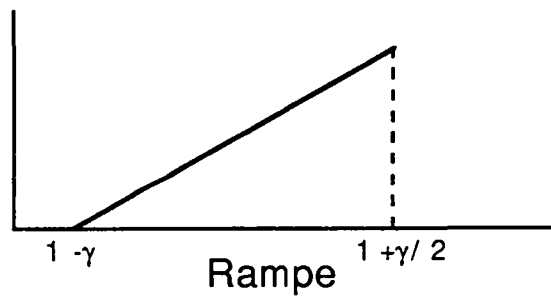
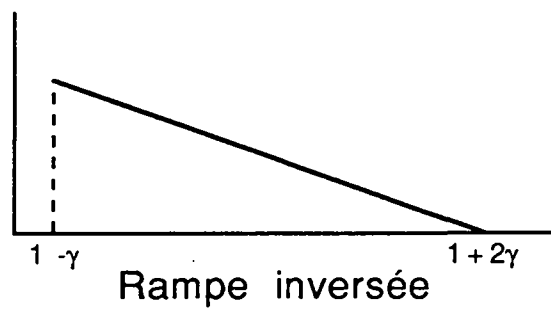
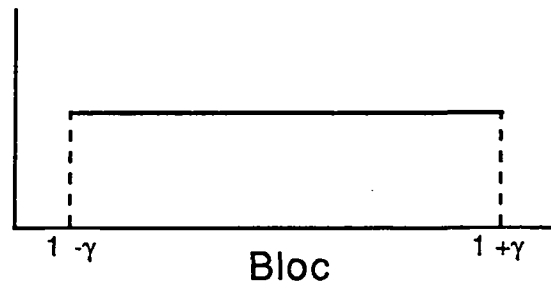


Figure 3.1: Forme des huit distributions d'épaisseur de matériau.

3.2 Procédure d'échantillonnage.

Le calcul des cas de référence pour le transport stochastique nécessite un très grand nombre de réalisations physiques du système de plaques alternées. Ces réalisations sont générées par échantillonnage des distributions des épaisseurs de plaques de matériau composant le système. La réalisation de cet échantillonnage est liée à l'obtention de nombres aléatoires uniformément distribués dans l'intervalle $[0, 1]$ comme on le fait dans les calculs de Monte Carlo. Ces nombres aléatoires sont fournis par un générateur de nombres aléatoires, ou plus justement appelé pseudo-aléatoires, construit selon les règles de l'art⁶⁶ d'après la méthode linéaire multiplicative congrue. Dans le cadre de ce travail, il n'est pas nécessaire d'entrer dans les détails des techniques spécialisées dans la création d'algorithmes générateurs de nombres aléatoires,⁶⁶ mais par contre, il est nécessaire d'utiliser un générateur testé avec succès. C'est pourquoi nous avons choisi un des générateurs testés par Wood.⁶⁷ En principe, les nombres aléatoires uniformément distribués peuvent être transformés par diverses méthodes⁶⁸ en des nombres aléatoires de n'importe quelle distribution non uniforme. Quelques méthodes de transformation sont brièvement décrites en Annexe A où sont aussi explicitées les méthodes de transformation utilisées pour obtenir des nombres aléatoires distribués selon les fonctions de distribution $f(z)$ et $f_s(z)$ utilisées dans ce travail.

Un nombre, N , très grand, de réalisations physiques du système doit être considéré pour obtenir une bonne approximation des flux moyens du problème du transport stochastique. Le choix de N , en fonction de la précision des résultats et du temps CPU nécessaire à la résolution de l'équation du transport classique (2.1) pour toutes les réalisations, est discuté plus tard. Chaque réalisation physique de la statistique du mélange des matériaux est obtenue par échantillonnage^{22,62} de l'épaisseur des matériaux distribuées selon $f_\alpha(z)$ et $f_{s\alpha}(z)$. Premièrement, le matériau présent en $x=0$ est choisi statistiquement selon la probabilité p_α . Ensuite, la fonction densité de probabilité $f_{s\alpha}(z)$ est échantillonnée pour la valeur de α déterminée afin d'établir la distance jusqu'au premier point de transition à droite de $x=0$. Ayant déterminé le premier point de transition, c'est $f_\beta(z)$ qui est alors échantillonné pour donner

l'épaisseur de la seconde plaque. Cette procédure d'échantillonnage de $f(z)$ est poursuivie avec des indices alternés de matériau jusqu'à ce que l'intervalle $[0, L]$ soit rempli des deux matériaux alternés. Toute la procédure est répétée pour obtenir de nouvelles réalisations physiques du système. Cette description de la procédure d'échantillonnage est utilisée uniquement pour calculer les flux moyens $\langle \psi \rangle$ et les flux de matériau $\langle \psi_\alpha \rangle$ et $\langle \psi_\beta \rangle$. Par contre, pour calculer les flux d'interface $\langle \psi_{\alpha\beta} \rangle$, cette procédure doit être changée. La notation $\langle \rangle$ est utilisée pour marquer la différence dans la manière de calculer le flux de matériau ψ_α , solution d'une équation de transport stochastique, et le flux de matériau $\langle \psi_\alpha \rangle$, calculé ici.

Les flux d'interface $\alpha\beta$ peuvent être physiquement interprétés comme la moyenne des flux sur tous les états qui changent de matériau et passent du matériau α au matériau β au point x . Pour l'échantillonnage, on fixe d'abord la position $x_{\alpha\beta}$ du point de transition. Ensuite, on échantillonne à gauche la fonction densité de distribution $f_\alpha(z)$, à droite $f_\beta(z)$. Ce processus est poursuivi, indépendamment à droite et à gauche, avec des indices alternés de matériau jusqu'à ce que les deux intervalles $[0, x_{\alpha\beta}]$ et $[x_{\alpha\beta}, L]$ soient entièrement remplis. L'ensemble de la procédure doit être répétée pour tous les points $x_{\alpha\beta}$ de l'intervalle $[0, L]$ pour lesquels un flux d'interface $\langle \psi_{\alpha\beta} \rangle$ est souhaité.

Il est possible de montrer⁶¹ que, pour le cas présent de statistiques homogènes, cette procédure d'échantillonnage bidirectionnelle (de droite à gauche du point d'interface $x_{\alpha\beta}$ au point 0 et , indépendamment, de gauche à droite de $x_{\alpha\beta}$ à L) génère des réalisations qui obéissent au même processus stochastique que celles obtenues par la procédure unidirectionnelle décrite ci-dessus. L'avantage de la procédure bidirectionnelle est qu'elle sélectionne directement parmi toutes les réalisations possibles celles qui sont utilisées pour le calcul de $\langle \psi_{\alpha\beta} \rangle$, économisant ainsi l'effort numérique de la génération de réalisations qui ne contribuent pas au calcul du flux à l'interface choisie. Pour le cas général de statistiques inhomogènes, une procédure bidirectionnelle est toujours possible, mais l'échantillonnage des distributions dépend de la direction d'échantillonnage.⁶¹

3.3 Résolution numérique de l'équation du transport.

La partie numérique de ce chapitre a deux buts. Premièrement, il s'agit d'étendre les cas de référence existants^{42,62,69} à la géométrie plane et/ou aux statistiques binaires autres que celle de Markov et de donner des résultats numériques complets pour la distribution spatiale des différents flux moyens (ce dernier point n'a jamais été traité auparavant), deuxièmement d'examiner si la moyenne et la variance d'une distribution quelconque constitue une information suffisante pour obtenir une bonne approximation de $\langle \psi(x, \mu) \rangle$ comme suggéré dans la littérature,⁴² mais cette fois pour le transport de particules avec diffusion.

Un code en langage FORTRAN a été développé spécialement pour étudier ces questions. Il résout numériquement l'équation stationnaire du transport monoénergétique par la méthode S_N en géométrie plane ou "ligne" avec diffusion anisotrope et sources isotropes. La géométrie "ligne" est un cas particulier de géométrie plane où les particules ne peuvent diffuser que de droite à gauche ou de gauche à droite le long de l'axe des x . La solution numérique du problème en géométrie plane est obtenue par la méthode: "diamond difference discrete ordinate method"⁴⁵ qui utilise pour la discrétisation spatiale une approximation linéaire⁴⁶ et pour la discrétisation angulaire une quadrature de Gauss-Legendre.⁷⁰ Les itérations sur la source de diffusion peuvent être accélérées en utilisant au choix deux méthodes: "Coarse Mesh Rebalancing"⁴⁵ ou "MP_nSA"⁷¹ (Modified P_n Synthetic Acceleration). La méthode "MP_nSA" est une généralisation de la méthode "DSA"⁴⁵ (Diffusion Synthetic Acceleration).

Le code développé permet de construire un système par échantillonnage d'un mélange stochastique de deux matériaux dont la distribution d'épaisseur peut être sélectionnée parmi les huit types de fonctions $f(z)$ décrites au § 3.1. La discrétisation numérique est obtenue en divisant chaque plaque de matériau en plusieurs mailles d'égale taille. La taille des mailles est choisie telle que

$$\frac{\sum_{\omega} \Delta x}{|\mu|_{\min}} \leq \frac{1}{5},$$

où $|\mu|_{\min}$ est le plus petit cosinus positif de la quadrature de Gauss-Legendre,⁴⁵ afin d'obtenir un schéma de discrétisation précis. Ce choix de la taille des mailles assure aussi que l'approximation diamant du schéma de discrétisation donnera toujours des flux positifs.⁴⁶

Tous les résultats présentés dans ce chapitre correspondent au problème du transport indépendant du temps sans source ($S(x)=0$) en géométrie plane. On suppose aussi que la diffusion est isotrope, de sorte que l'équation de transport (2.1) qui est ici stationnaire et monoénergétique s'écrit

$$\left[\mu \frac{\partial}{\partial x} + \Sigma_t(x) \right] \psi(x, \mu) = \frac{\Sigma_s(x)}{2} \phi(x), \quad (3.5)$$

où μ est le cosinus de l'angle entre l'axe des x et la direction de propagation des particules et

$$\phi(x) = \int_{-1}^{+1} \psi(x, \mu) d\mu$$

est le flux scalaire à la position x . Les sections efficaces macroscopiques totale et de diffusion sont $\Sigma_t(x)$ et $\Sigma_s(x)$, respectivement. De plus, les sections efficaces de chaque matériau sont supposées spatialement indépendantes. L'équation (3.5) est résolue sur l'intervalle $0 \leq x \leq L$, composé de plaques de matériaux α et β en alternance, avec des conditions aux bords non stochastiques données par

$$\psi(0, \mu) = 2 \quad \mu > 0; \quad \psi(L, \mu) = 0 \quad \mu < 0. \quad (3.6)$$

Ces conditions aux bords correspondent sur la face gauche du système ($x=0$) à un flux entrant isotrope de courant unitaire, et sur la face droite ($x=L$) à un flux incident nul. Tous les résultats obtenus correspondent à une quadrature de Gauss-Legendre à 16 points.⁷⁰

Le flux scalaire $\phi(x)$ est calculé en cent points de $x=0$ à $x=L$ identiques pour chaque réalisation physique du système. Les flux scalaires sont obtenus par interpolation linéaire entre les valeurs effectivement calculées dans les divers matériaux pour chaque réalisation. Les coefficients de réflexion R et de transmission T pour le système, sont données par

$$R = \int_0^1 \psi(0, -\mu) \mu d\mu, \quad T = \int_0^1 \psi(L, \mu) \mu d\mu. \quad (3.7)$$

L'échantillonnage des distributions et les calculs numériques qui s'ensuivent sont répétés un très grand nombre de fois pour obtenir une estimation des valeurs moyennes $\langle R \rangle$, $\langle T \rangle$, $\langle \phi(x) \rangle$ et une estimation des flux de matériau $\langle \phi_\alpha(x) \rangle$ et $\langle \phi_\beta(x) \rangle$. Pour un échantillonnage de taille N , les estimations des valeurs moyennes sont calculées de la manière suivante

$$\langle \phi(x) \rangle \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \phi_i(x), \quad \langle \phi_\alpha(x) \rangle \approx \frac{1}{N_\alpha} \sum_{i_\alpha=1}^{N_\alpha} \phi_{i_\alpha}(x)$$

où N_α est le nombre de réalisations qui correspondent à un matériau α au point x et la sommation en i_α concerne uniquement ces réalisations. A chaque valeur moyenne est associée une estimation de l'écart type relatif de la forme

$$\sigma(x) \approx \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [\phi_i(x) / \langle \phi(x) \rangle - 1]^2} .$$

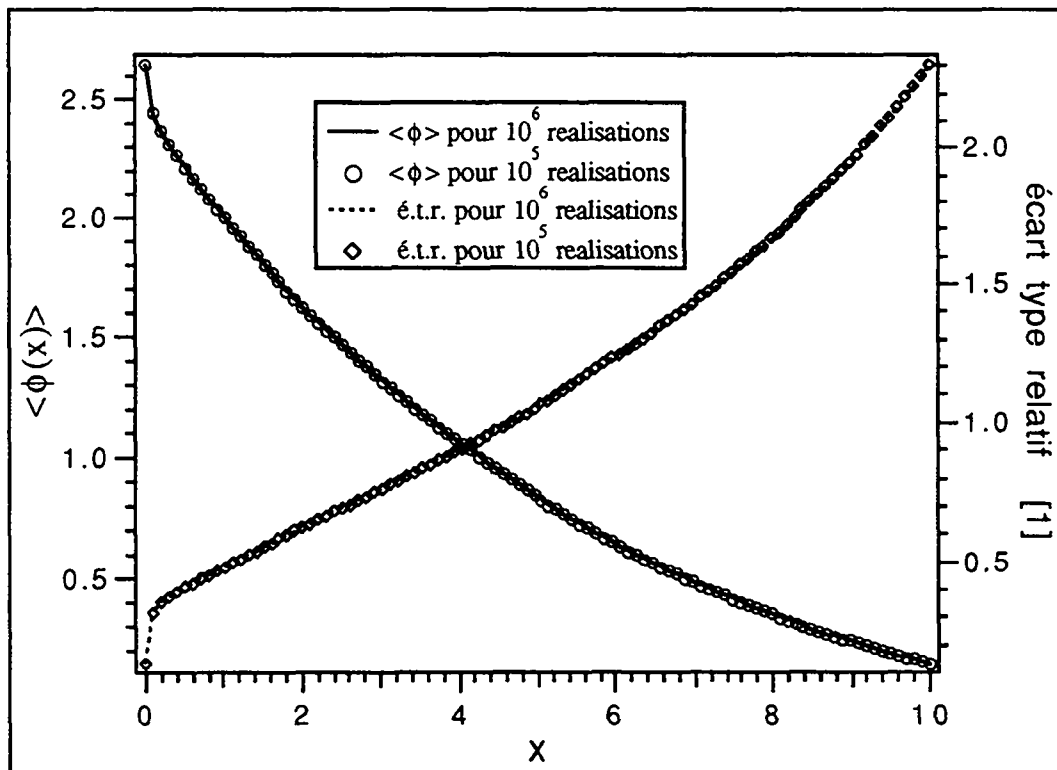


Figure 3.2: Comparaison entre des résultats typiques de 10^5 et de 10^6 réalisations .

Pour chaque choix des paramètres physiques et des distributions des épaisseurs de matériau, 10^5 problèmes de transport ont été résolus pour obtenir une estimation des valeurs moyennes! Ce nombre de réalisations est un compromis entre précision et temps de calcul. Le fait d'augmenter le nombre de réalisations de 10^5 à 10^6 multiplie le temps CPU (typiquement de l'ordre de cinq heures sur une station de travail HP710) par un facteur 10, réduisant l'écart type d'un facteur $1/\sqrt{10} \cong 0.3$. Ainsi, l'augmentation du temps de calcul fournit seulement une modeste amélioration des valeurs moyennes. La figure 3.2 montre que l'augmentation du nombre de réalisations de 10^5 à 10^6 ne change pas significativement la moyenne et l'écart type relatif pour $\langle \phi(x) \rangle$. Cependant avec 10^5 réalisations, de petites fluctuations apparaissent encore dans quelques cas quand un des matériaux, disons α , a une petite fraction volumique (quand $p_\alpha=0.1$), alors seulement 10% des réalisations contribuent en moyenne à $\langle \phi_\alpha(x) \rangle$. Bien entendu les écarts types observés sur les résultats dépendent surtout des variances des fonctions de distribution $f_\alpha(z)$ (§ 3.1).

3.4 Résultats et discussions.

Les résultats obtenus proviennent de 54 mélanges binaires différents. Cela correspond à six types de processus de remplacement: Markov-Markov, Bloc-Bloc, Rampe-Rampe, Périodique-Périodique, Tente-Tente et Markov-Tente. Le premier terme désigne la distribution d'épaisseur du matériau α et le second celle du matériau β . Le paramètre γ est choisi égal à un pour les distributions qui en dépendent (cf. Annexe A). La spécification de chaque mélange binaire est complétée par la donnée de l'épaisseur moyenne λ , la section efficace totale Σ_t et le nombre de secondaires par collision $c=\Sigma_s/\Sigma_t$ pour chaque matériau du mélange. Pour chaque type de processus de remplacement neuf mélanges binaires différents sont générés en utilisant trois ensembles ($\Sigma_{t\alpha}$, λ_α , $\Sigma_{t\beta}$, λ_β) de sections efficaces totales et d'épaisseurs moyennes (cas 1, 2 et 3 dans le tableau 3.1) et trois ensembles de paire de (c_α , c_β) (cas a, b et c dans le tableau 3.1). Sont aussi considérées trois longueurs différentes L du système comme indiqué dans le tableau 3.1, ce qui signifie qu'en tout 162 problèmes statistiques du transport sont résolus. Les

différentes combinaisons des valeurs pour $(\Sigma_{i\alpha}, \lambda_{\alpha}, \Sigma_{i\beta}, \lambda_{\beta})$, (c_{α}, c_{β}) et L , listées dans le tableau 3.1, sont celles qui ont été utilisées dans d'autres calculs de cas de référence,^{42,62,69,72} et dans tous les cas elles correspondent à une section efficace totale moyenne unitaire ($\langle \Sigma_t \rangle = p_{\alpha} \Sigma_{t\alpha} + p_{\beta} \Sigma_{t\beta} = 1$); L est donc en fait l'épaisseur optique moyenne du système.

Cas	$\Sigma_{i\alpha}$	λ_{α}	$\Sigma_{i\beta}$	λ_{β}	Cas	c_{α}	c_{β}	L
1	10/99	99/100	100/11	11/100	a	0.0	1.0	0.1
2	10/99	99/10	100/11	11/10	b	1.0	0.0	1.0
3	2/101	101/20	200/101	101/20	c	0.9	0.9	10.0

Tableau 3.1: Paramètres du problème.

Les cas de référence calculés pour $\langle R \rangle$ et $\langle T \rangle$ sont présentés dans les tableaux B.1 à B.3 de l'Annexe B pour 27 combinaisons de paramètres et pour six choix de processus. Parmi ces six choix, cinq utilisent des distributions identiques d'épaisseurs pour les deux matériaux, mais avec des épaisseurs moyennes différentes λ_{α} et λ_{β} . Le dernier choix utilise la distribution de Markov pour le matériau α , qui a la plus grande épaisseur moyenne des deux composantes dans les cas 1 et 2, et la distribution tente pour le matériau β . Ce choix devrait être une bonne approximation pour décrire la dispersion de petites hétérogénéités ou de fissures d'eau dans un milieu uniforme, situations qui apparaissent dans le problème de la double hétérogénéité²⁸ ou du Corium homogène fragmenté (Chapitre 5), respectivement. Les résultats pour le cas où les deux matériaux ont une distribution d'épaisseurs de Markov ont déjà été calculés auparavant⁶² pour la géométrie plane. Les résultats sont comparables jusqu'à quatre ou cinq décimales. Cela valide ces deux ensembles de calcul qui ont été obtenus avec des générateurs de nombres aléatoires différents et des méthodes indépendantes de résolution de l'équation de transport. Si l'on compare, pour un ensemble donné de paramètres, les résultats des différents processus de remplacement on aperçoit quelques différences mineures dans les valeurs pour les systèmes d'épaisseurs $L=0.1$ et $L=1$. Par contre pour $L=10$, il peut y avoir jusqu'à un facteur deux entre certains coefficients de réflexion et jusqu'à un facteur cent entre certains coefficients de transmission. Cela montre, contrairement à ce qui a été dit dans la littérature,⁶⁹ que des processus différents donnent des résultats quantitativement différents pour de grands systèmes.

Ainsi un processus de remplacement Markov-Markov n'est pas représentatif en toute généralité des processus de remplacement pour les grands systèmes. Par grand système, on entend un système dont la longueur est telle qu'il contient en moyenne quelques points de transition $x_{\alpha\beta}$ entre les différents matériaux. Alors que les petits systèmes sont composés, dans la plupart des réalisations, d'un seul matériau et dans ce cas la seule information statistique relevante est p_{α} qui est la même pour toutes les distributions.

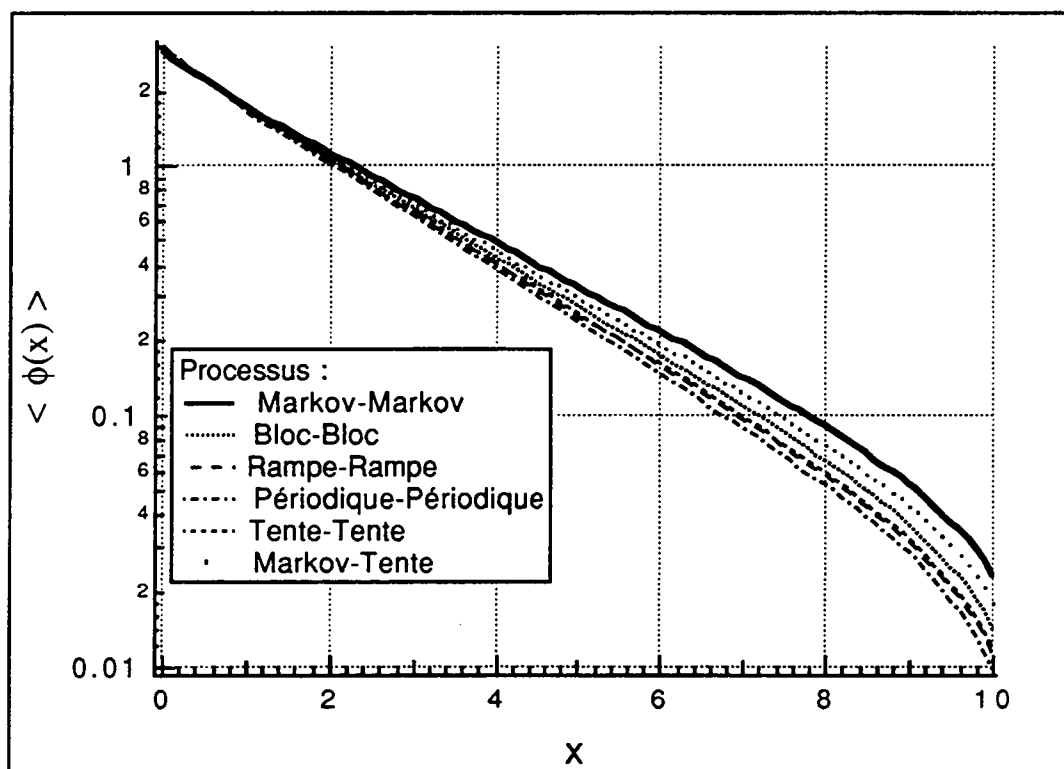


Figure 3.3: Flux scalaire moyen $\langle \phi(x) \rangle$ pour le cas 1a et $L=10$.

Dans les figures 3.3 à 3.5, ainsi que dans les figures B.1 à B.24 de l'Annexe B, sont représentées graphiquement les dépendances spatiales de $\langle \phi(x) \rangle$, $\langle \phi_{\alpha}(x) \rangle$ et $\langle \phi_{\beta}(x) \rangle$ pour les mêmes choix, décrits ci-dessus, de processus et de paramètres des matériaux. Les flux de matériau $\langle \phi_{\alpha}(x) \rangle$ et $\langle \phi_{\beta}(x) \rangle$, jamais présentés dans la littérature, sont essentiels pour déterminer les taux de réaction des particules transportées dans les deux matériaux. Les cas $L=0.1$ et $L=1$ ne sont pas présentés ici car la dépendance des résultats aux différents processus est très faible comme on l'a constaté dans les résultats pour $\langle R \rangle$ et $\langle T \rangle$. Une analyse des figures montre plusieurs faits intéressants. Premièrement, on remarque que la dispersion entre

les différents processus au bord droit du système (condition de vide) apparaît beaucoup plus grande qu'au bord gauche (courant unitaire entrant non stochastique). Bien que cet effet soit visuellement renforcé par l'utilisation d'une échelle logarithmique, les tableaux B.1 à B.3 (Annexe B) confirment que la transmission dépend plus du processus de remplacement que la réflexion. La deuxième caractéristique intéressante est que les valeurs des moyennes de flux semblent se classer suivant la variance de la fonction de distribution des épaisseurs des matériaux. Les quelques exceptions locales à cette règle, notamment les valeurs de $\langle \phi_{\beta}(x) \rangle$ dans les cas 3b et 3c en quelques points ne détruisent pas l'impression que les processus de remplacement Markov-Markov et Périodique-Périodique, processus dont les fonctions de distribution ont la plus grande et la plus petite variance, respectivement, forment une enveloppe comprenant tous les autres processus ordonnés selon les variances de leur distribution. Cela peut être une conclusion importante permettant d'estimer les effets d'un processus particulier seulement par comparaison.

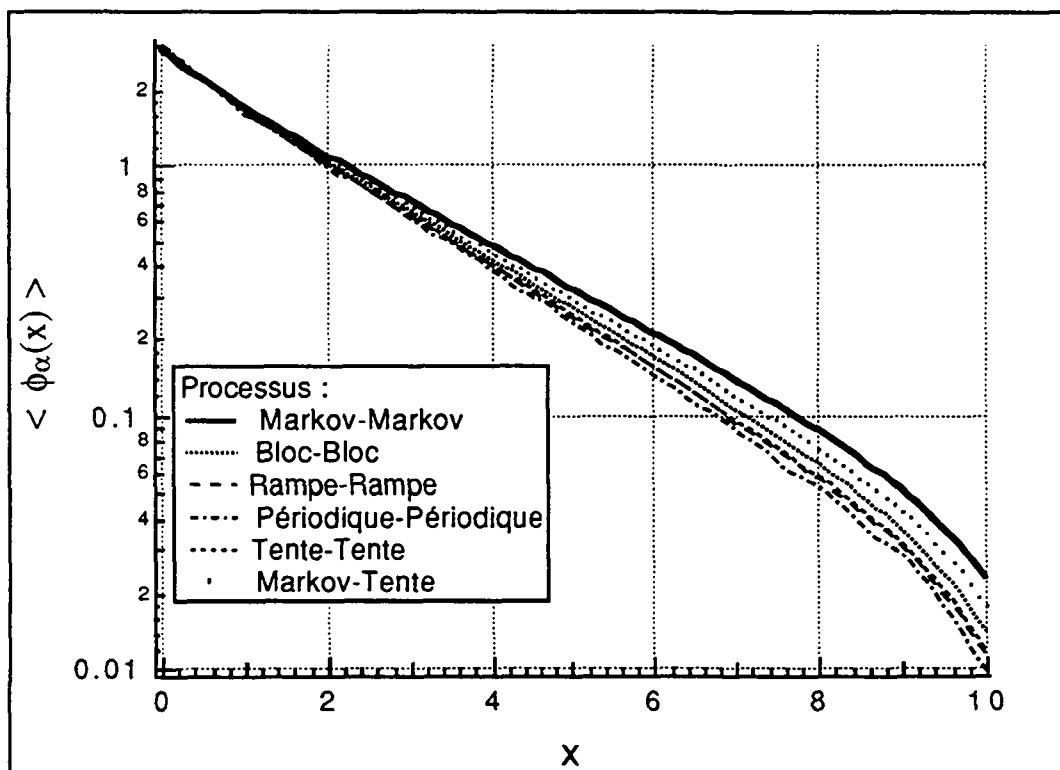


Figure 3.4: Flux de matériau $\langle \phi_{\alpha}(x) \rangle$ pour le cas 1a et L=10.

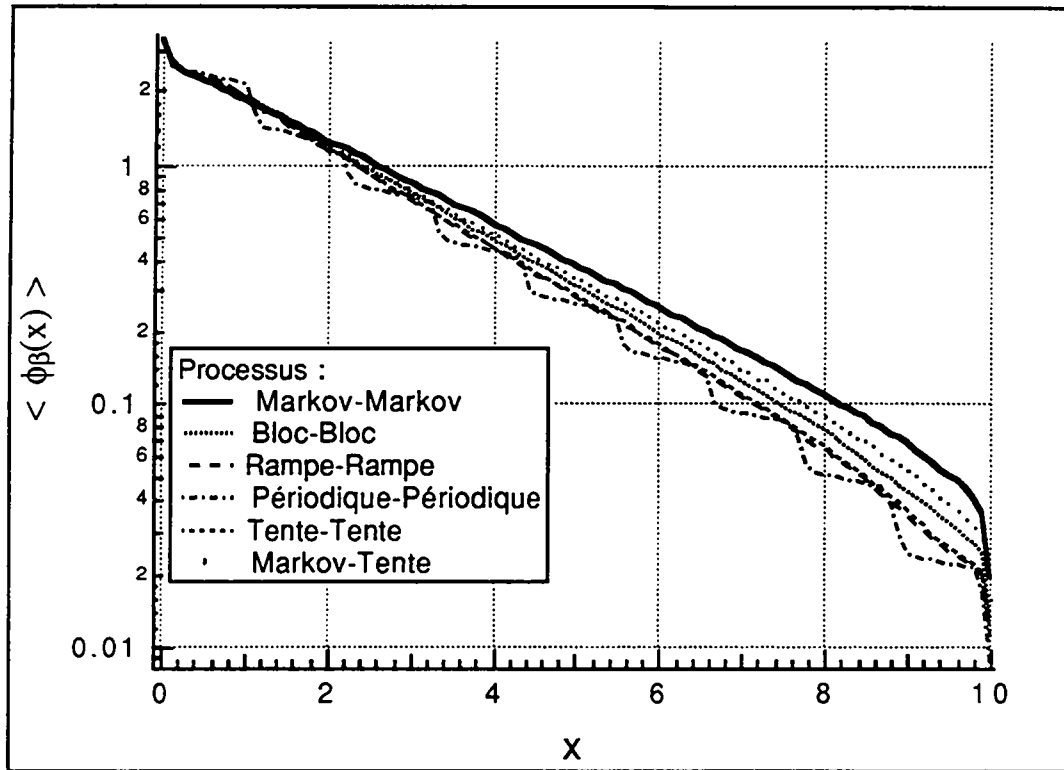


Figure 3.5: Flux de matériau $\langle \phi_{\beta}(x) \rangle$ pour le cas 1a et $L=10$.

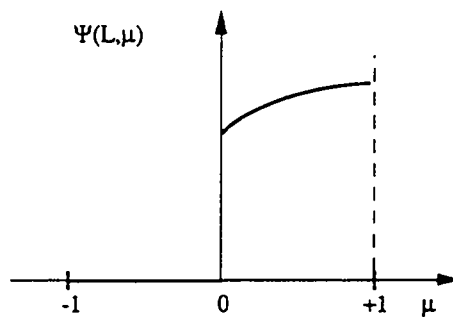


Figure 3.6: Discontinuité du flux angulaire.

La forme particulière en escalier de la distribution des flux de matériaux pour quelques cas du processus Périodique-Périodique est liée à la variance nulle associée aux distributions d'épaisseur des matériaux α et β . Ce comportement est confirmé par la solution analytique du cas du transport sans diffusion en milieu stochastique décrite en Annexe C. Le même comportement peut être obtenu pour n'importe quel autre processus avec deux distributions à support compact lorsqu'on diminue sa variance, tout en conservant sa moyenne et en jouant sur le paramètre γ . La comparaison des figures et aussi des tableaux montre en outre que les

processus Markov-Markov et Markov-Tente donnent des résultats très similaires, suggérant ainsi que pour le problème de la double hétérogénéité ou des fissures dans un Corium, la distribution du matériau de plus petite dimension joue un rôle secondaire. Les fluctuations dans les courbes pour $\langle\phi_\beta(x)\rangle$ dans les cas 1 et 2 (tableau 3.1) sont dues, comme déjà mentionné § 3.3, au nombre relativement peu élevé de réalisations physiques qui contribuent à ces valeurs. Finalement, la variation de pente des courbes de $\langle\phi_\beta(x)\rangle$ entre le premier point $x=0$ et le deuxième, ainsi que celle plus brutale entre l'avant dernier point et le dernier point $x=L$ dans les cas 1a, 1c, 2a et 2c est un effet de frontière.¹ Cet effet est dû à la discontinuité du flux par rapport à la variable angulaire μ . Par exemple en $x=L$, le flux angulaire est nul pour $\mu<0$ et positif pour $\mu>0$ (cf. figure 3.6). L'effet de frontière est maximum dans les cas similaires à celui illustré par la figure 3.7. Dans les cas a et c, la section efficace de diffusion du matériau β est la plus grande de toutes les combinaisons possibles de paramètres (tableau 3.1). En $x=0$, cet effet est moins marqué car aucun des deux flux angulaires, $\mu<0$ et $\mu>0$ n'est nul. Cette effet de frontière joue un rôle important en transport dans un problème connu sous le nom de problème de Milne,^{1,44} problème qui a été aussi analysé en théorie du transport stochastique.^{73,74}

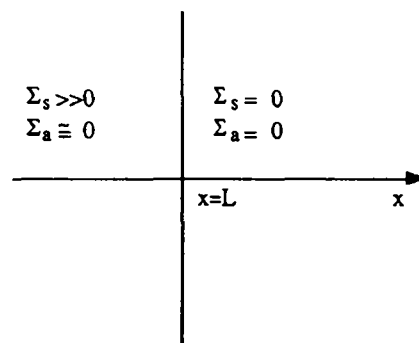


Figure 3.7: Situation à effet de frontière important.

Ayant observé que différents processus de remplacement dont les distributions ont les mêmes moyennes fournissent des solutions quantitativement différentes, on peut examiner alors une suggestion faite pour le transport stochastique sans diffusion.⁴² Cette suggestion est que la moyenne et la variance des distributions sont suffisantes pour prédire la moyenne du flux $\langle\phi(x)\rangle$. Autrement dit, quelle que soit la forme des distributions utilisées, si elles ont la même

variance et la même moyenne, elles fournissent des résultats comparables. Ainsi cinq distributions ont été sélectionnées (tente avec $\gamma=1$, bloc avec $\gamma = 1/\sqrt{2}$, rampe inversée avec $\gamma = 1/\sqrt{3}$, parabolique inversée avec $\gamma = \sqrt{5/18}$ et gamma avec $n=6$) toutes avec la même moyenne λ et le même écart type $\lambda/\sqrt{6}$. Les figures 3.8 à 3.10 montrent les résultats pour $\langle\phi(x)\rangle$ dans les cas 1b, 2b et 3b, cas où l'on a observé la plus grande dispersion entre les différents processus. Dans le cas 1b les courbes sont indiscernables les unes des autres, mais dans les cas 2b et 3b de petites différences peuvent être observées aux environs de la frontière droite. On peut conclure d'après ces résultats et de nombreux autres non présentés ici que la moyenne et la variance sont les seules informations statistiques relevantes pour le transport stochastique pourvu que le système soit bien mélangé (homogène), c'est à dire, $\lambda_\alpha+\lambda_\beta\ll L$. Dans les cas où $\lambda_\alpha+\lambda_\beta\geq L$ les effets de l'épaisseur de la première plaque de matériau échantillonnée de $f_{s\alpha}(z)$ et non pas de $f_\alpha(z)$ commencent à se faire sentir. Néanmoins, il n'est pas présomptueux d'affirmer, du moins pour les distributions utilisées, que la solution pour $\langle\phi(x)\rangle$, $\langle\phi_\alpha(x)\rangle$ et $\langle\phi_\beta(x)\rangle$ est insensible aux moments statistiques des distributions supérieures à deux, et ceci tout particulièrement pour des milieux pas trop hétérogènes. Ainsi, une distribution peut être représentée par n'importe quelle distribution homogène ayant la même moyenne et la même variance pour prédire une valeur précise de $\langle\phi(x)\rangle$. C'est là, sans doute, la conclusion la plus importante que l'on puisse tirer de ces calculs de référence, conclusion qui peut se révéler très utile dans le développement de modèles pour le transport stochastique.

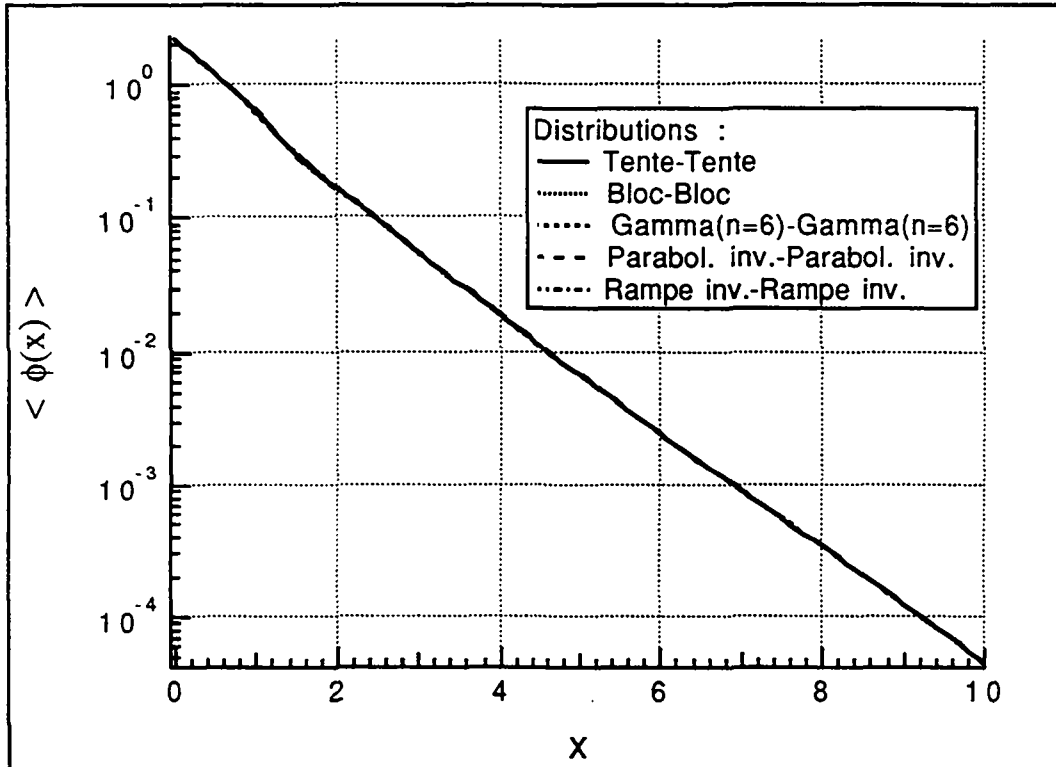


Figure 3.8: Comparaison de $\langle \phi(x) \rangle$ pour cinq distributions avec la même moyenne et la même variance pour le cas 1b et $L=10$.

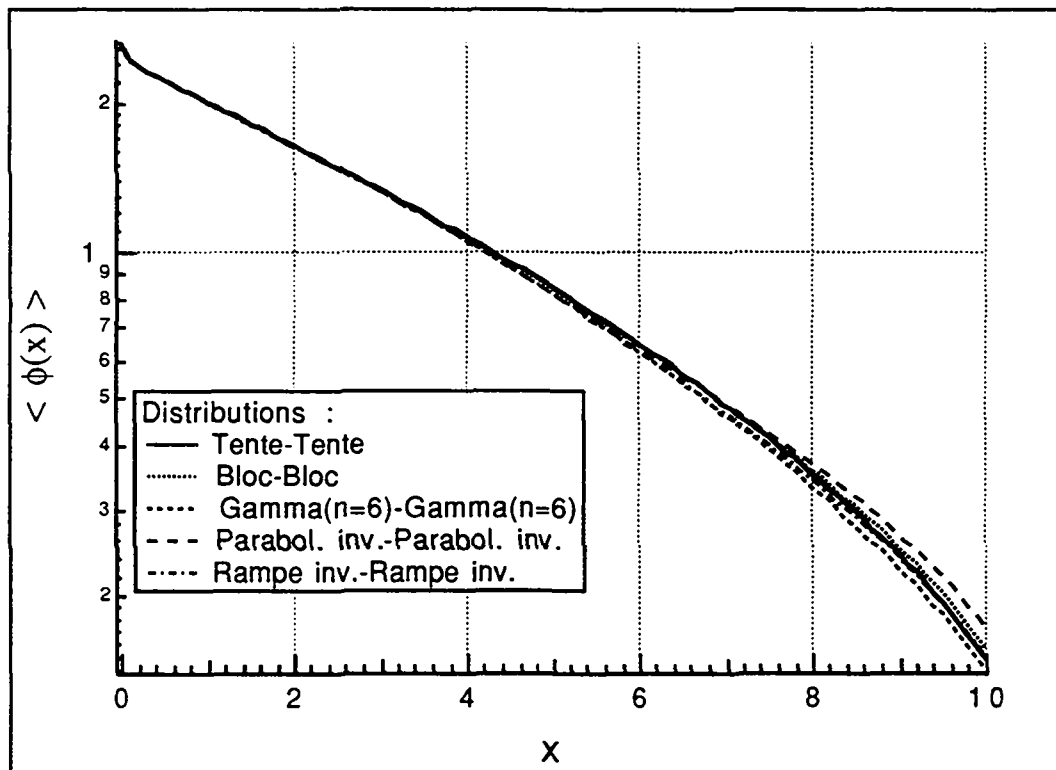


Figure 3.9: Comparaison de $\langle \phi(x) \rangle$ pour cinq distributions avec la même moyenne et la même variance pour le cas 2b et $L=10$.

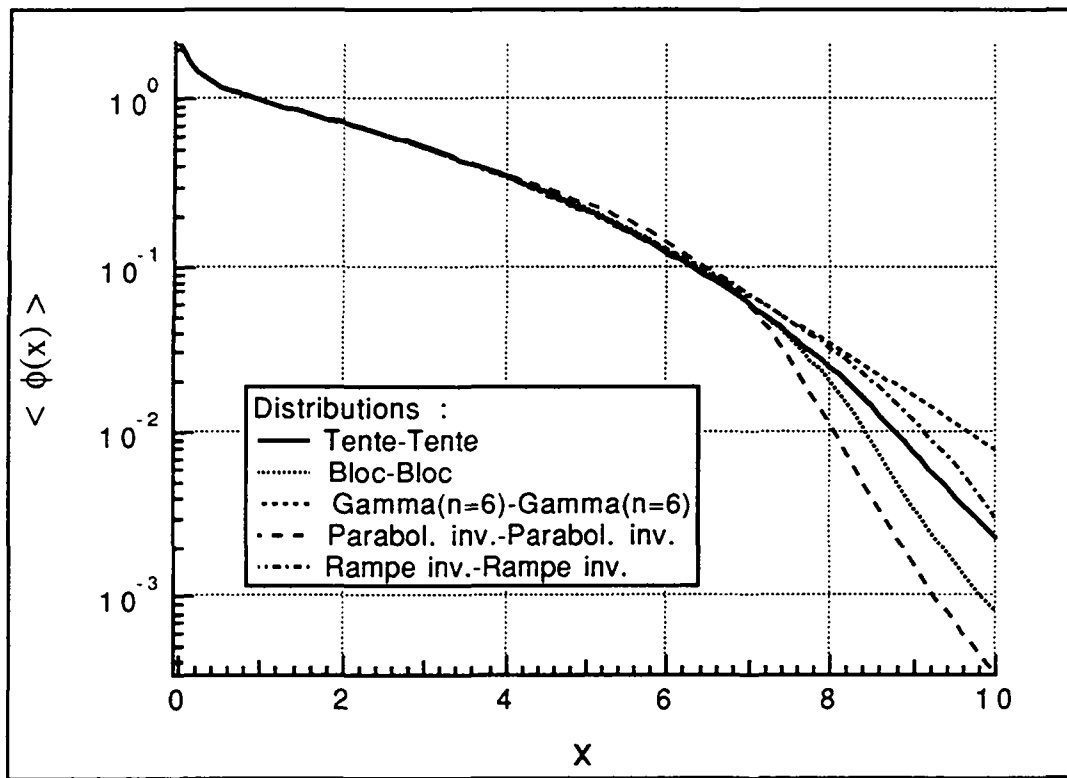


Figure 3.10: Comparaison de $\langle \phi(x) \rangle$ pour cinq distributions avec la même moyenne et la même variance pour le cas 3b et $L=10$.

MODÈLES

La création de modèles décrivant le transport de particules en milieu stochastique revient à trouver une troncature à la hiérarchie infinie d'équations intégró-différentielles ou intégrales du transport stochastique, (2.13) et (2.17) représentant seulement les premières équations de ces hiérarchies. Ces équations décrivent en toute généralité le transport stochastique, mais dans de nombreux cas pratiques le mouvement des particules est beaucoup plus rapide que le mouvement des composants du milieu hôte. On peut alors supposer qu'à tout instant, et pour chaque configuration, les flux angulaires sont fournis par les solutions stationnaires de l'équation de transport. En d'autres termes les distributions des particules "suivent sans retard" les modifications temporelles du milieu hôte; c'est l'hypothèse adiabatique fondée sur deux échelles de temps différentes: celle des particules et celle du milieu hôte. Le temps n'étant plus qu'un paramètre, on peut l'omettre pour simplifier l'écriture des équations. Le cas où les statistiques du milieu sont elles mêmes stationnaires est évidemment inclus dans ce qui précède.

Dans ces conditions on posera $\bar{P} = \bar{r}$ et on introduira $\bar{\Omega} = \bar{v}/v$. Pour obtenir la nouvelle forme de l'équation intégró-différentielle (2.13) il suffit de noter que $L = \bar{v} \cdot \bar{\nabla}$ ($\partial/\partial t = 0$) et de diviser par v :

$$\begin{aligned}
 (\bar{\Omega} \cdot \bar{\nabla} + \sum_{\alpha} (\bar{x})) p_{\alpha}(\bar{r}) \psi_{\alpha}(\bar{x}) &= p_{\alpha}(\bar{r}) [q_{\alpha}(\bar{x}) + H_{s\alpha} \psi_{\alpha}(\bar{x})] \\
 + p_{(\alpha)\alpha}(\bar{r}, \bar{\Omega}) \psi_{(\alpha)\alpha}(\bar{x}) - p_{\alpha(\alpha)}(\bar{r}, \bar{\Omega}) \psi_{\alpha(\alpha)}(x) &\text{ dans } X, \\
 \psi_{\alpha}(\bar{x}) &= \Phi_{\alpha}(\bar{x}) \text{ sur } \partial X.
 \end{aligned}
 \tag{4.1}$$

où maintenant $\bar{x} = (\bar{r}, \bar{v})$.

Seules les probabilités de "frontière" ont été modifiées, puisqu'elles s'obtiennent à partir des anciennes par la relation:

$$P_{(\alpha)\alpha}(\bar{r}, \bar{\Omega}) = \frac{P_{(\alpha)\alpha}(\bar{x})}{v}$$

et sont donc relatives à l'unité de longueur définie sur la direction $\bar{\Omega}$. On notera aussi que l'on a posé $\bar{x} = (\bar{r}, \bar{\Omega})$ puisque seules les directions sont déterminantes dans la définition de ces probabilités.

Pour trouver la nouvelle forme de l'équation intégrale (2.17) on fera d'abord les remarques suivantes:

- i) les points $\bar{P}_\theta = (\bar{r} - \theta\bar{v}, t - \theta)$ auraient pu se définir dès le début comme $(\bar{r} - s\bar{\Omega}, t - s/v)$ où s désigne la distance de \bar{P}_θ à \bar{P} mesurée sur la trajectoire $\bar{\Omega}$. En abandonnant la variable temps on peut alors écrire:

$$\bar{P}_\theta = \bar{r}_s = \bar{r} - s\bar{\Omega}.$$

- ii) les intégrales en θ peuvent être remplacées par des intégrations sur s en notant que $ds = v d\theta$ ce qui s'applique aussi aux chemins optiques.

En partant de (2.17) on arrive ainsi à

$$\begin{aligned} \psi_\alpha(\bar{x}) = & e^{-\tau_\alpha(s, \bar{x})} R_\alpha(s, \bar{r}, \bar{\Omega}) \Phi_{\alpha\alpha}(\bar{x}_s; \bar{r}, \bar{\Omega}) \\ & + \int_0^{s'} e^{-\tau_\alpha(s, \bar{x})} \{ f_{s\alpha}(s, \bar{r}, \bar{\Omega}) \psi_{(\alpha)\alpha}(\bar{x}_s; \bar{r}, \bar{\Omega}) \\ & + R_\alpha(s, \bar{r}, \bar{\Omega}) [q_\alpha(\bar{x}_s) + \int \Sigma_{s\alpha}(\bar{x}_s, \bar{v}' \rightarrow \bar{v}) \psi_{\alpha\alpha}(\bar{x}_s, \bar{v}'; \bar{r}, \bar{\Omega}) d\bar{v}'] \} ds. \end{aligned} \quad (4.2)$$

avec

$$\tau_\alpha(s, \bar{x}) = \int_0^s \Sigma_{i\alpha}(\bar{r} - s' \bar{\Omega}, \bar{v}) ds'. \quad (4.2a)$$

Comme précédemment, chaque fois qu'une définition de probabilité ne fait intervenir que les directions, la variable \bar{x} , dans cette définition, peut être remplacée par $(\bar{r}, \bar{\Omega})$. Les probabilités R_α sont identiques à celles du Chapitre 2 (2.17a), seules les notations ont changé pour signaler le fait que les variables temporelles ne jouent plus. En effet d'après i), la coordonnée s suffit à positionner $\bar{P}_\theta = \bar{r}_s$ par rapport à $\bar{P} = \bar{r}$.

Ici aussi les probabilités de "frontière" apparaissent avec une expression légèrement différente, puisqu'il a fallu poser:

$$f_{s\alpha}(s, \bar{r}, \bar{\Omega}) = \frac{f_{s\alpha}(\theta, \bar{x})}{v} = -\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial \theta} R_{\alpha}(\theta, \bar{x}) = -\frac{\partial}{\partial s} R_{\alpha}(s, \bar{r}, \bar{\Omega}) \quad (4.2b)$$

où $f_{s\alpha}(\theta, \bar{x})$ est définie par (2.17c). On peut conserver leur définition à condition d'invoquer l'unité de longueur et non plus de temps.

4.1 Description des modèles.

Afin de rendre la dérivation des modèles à partir des équations (4.1) ou (4.2) plus aisée et sans perte de généralité on suppose que

- i) les particules sont monoénergétiques,
- ii) la diffusion et les sources sont isotropes,
- iii) les conditions aux bords sont non stochastiques,
- iv) le milieu hôte se compose de deux matériaux uniquement.

4.1.1 Modèles intégral-différentiels.

Pour des problèmes sans diffusion de particules dans le milieu hôte ($\Sigma_s=0$) et vérifiant les hypothèses i), iii) et iv), une description exacte et complète pour $\langle \psi \rangle$ a été trouvée par plusieurs auteurs dans le cas spécial d'un mélange de deux matériaux et pour un processus Markovien en statistiques homogènes. Cette description a la forme de deux équations intégral-différentielles couplées (une équation pour chaque matériau). Autrement dit l'éq. (4.1), sans diffusion, se ferme au premier ordre.⁴³ La raison pour cela est l'identité

$$\Psi_{\alpha\beta}(\bar{x}) = \Psi_{\alpha}(\bar{x}) \quad (4.3)$$

entre les flux d'interface et de matériau. Toujours pour des milieux non diffusants, divers auteurs ont obtenu des solutions exactes par d'autres méthodes: celle du "lissage",³⁰ de l'équation pilote de Liouville⁷⁵ et du processus conjugué.⁷⁶

Dans le cas de matériaux diffusants, une fermeture simple telle que celle exprimée par l'identité (4.3) n'existe pas. Il est alors nécessaire de développer des modèles qui tronquent la

hiérarchie infinie d'équations par une fermeture appropriée. Plusieurs modèles ont été proposés, toujours dans le cas de mélange binaire Markovien en statistiques homogènes, avec des hypothèses plus ou moins restrictives. Parmi ces modèles on peut mentionner ceux: qui font l'hypothèse que les trajectoires des particules ne sont pas corrélées,⁷⁷ qui utilisent les techniques du bruit des réacteurs nucléaires⁷⁸ ou encore qui se placent dans la limite des petites longueurs de corrélation λ_{cor} ($1/\lambda_{cor} = 1/\lambda_{\alpha} + 1/\lambda_{\beta}$).⁷⁹ Des formulations exactes sont disponibles:

- si la seule variable stochastique du problème est la densité du milieu hôte pour un système en géométrie unidimensionnelle,^{80,81}
- si l'on peut utiliser l'approximation de Bourret (moyenne d'un produit = produit des moyennes) en se plaçant à la limite des petites longueurs de corrélation avec une géométrie "ligne" (géométrie plane avec seulement deux directions opposées de diffusion) et des sections efficaces totales non stochastiques³¹
- ou encore si l'on utilise la méthode des invariants pour un transport en géométrie "ligne".⁸²

Les deux modèles intégrro-différentiels que nous considérerons plus particulièrement dans le cadre de ce travail ne font appel à aucune des hypothèses particulières brièvement citées ci-dessus. Ces modèles sont basés sur l'équation (4.1) et les quatre hypothèses i) à iv) pour un processus Markovien dans le cadre de statistiques homogènes. Avec ces hypothèses l'équation (4.1) devient, en notant que $(\alpha) \rightarrow \beta$ puisque seuls deux matériaux sont présents:

$$\begin{aligned}
 [\bar{\Omega} \cdot \bar{\nabla} + \Sigma_{i\alpha}(\bar{r})]p_{\alpha}\psi_{\alpha}(\bar{r}, \bar{\Omega}) &= \frac{P_{\alpha}}{4\pi}[\Sigma_{s\alpha}(\bar{r})\phi_{\alpha}(\bar{r}) + S_{\alpha}(\bar{r})] \\
 + p_{\beta\alpha}(\bar{\Omega})\psi_{\beta\alpha}(\bar{r}, \bar{\Omega}) - p_{\alpha\beta}(\bar{\Omega})\psi_{\alpha\beta}(\bar{r}, \bar{\Omega}) &\text{ dans } X, \\
 \psi_{\alpha}(\bar{r}, \bar{\Omega}) &= \psi_{bd}(\bar{\Omega}) \text{ sur } \partial X,
 \end{aligned}
 \tag{4.4}$$

où $\phi_{\alpha}(\bar{r})$ est le flux scalaire de matériau,

$$\phi_{\alpha}(\bar{r}) = \int_{4\pi} \psi_{\alpha}(\bar{r}, \bar{\Omega}) d\bar{\Omega},$$

et $S_{\alpha}(\bar{r})$ représente une source isotrope de particules. On remarquera que la dépendance en \bar{r} des probabilités de matériau p_{α} et des probabilités $p_{\alpha\beta}$ a disparu, car pour des statistiques

homogènes ces deux types de probabilités sont indépendants de \vec{r} . Pour un processus de remplacement quelconque décrit par des distributions de longueur de corde dans la direction $\vec{\Omega}$, les probabilités de matériaux p_α sont données par^{42,61}

$$\frac{\lambda_{c\alpha}(\vec{\Omega})}{\lambda_{c\alpha}(\vec{\Omega}) + \lambda_{c\beta}(\vec{\Omega})}$$

où $\lambda_{c\alpha}(\vec{\Omega})$ est la longueur de corde moyenne du matériau α dans la direction $\vec{\Omega}$. Cette longueur se calcule aisément en géométrie plane en notant que les directions $\vec{\Omega}$ sont définies uniquement par $\mu = \vec{\Omega} \cdot \vec{n}$ ou \vec{n} est la normale commune à toutes les interfaces. Les probabilités $p_{\alpha\beta}$ peuvent s'exprimer en fonction des p_α et des $\lambda_{c\alpha}$:⁶¹

$$p_{\alpha\beta}(\vec{\Omega}) = \frac{P_\alpha}{\lambda_{c\alpha}(\vec{\Omega})} .$$

L'équation (4.4) s'écrit alors

$$\begin{aligned} [\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} + \Sigma_{i\alpha}(\vec{r})]\psi_\alpha(\vec{r}, \vec{\Omega}) &= \frac{1}{4\pi} [\Sigma_{s\alpha}(\vec{r})\phi_\alpha(\vec{r}) + S_\alpha(\vec{r})] \\ &+ \frac{1}{\lambda_{c\alpha}(\vec{\Omega})} [\psi_{\beta\alpha}(\vec{r}, \vec{\Omega}) - \psi_{\alpha\beta}(\vec{r}, \vec{\Omega})] \text{ dans } X, \\ \psi_\alpha(\vec{r}, \vec{\Omega}) &= \psi_{bd}(\vec{\Omega}) \text{ sur } \partial X. \end{aligned} \tag{4.5a}$$

Dans ce contexte $\lambda_{c\alpha}$, la longueur moyenne de corde, est reliée à la probabilité de transition Markovienne.^{60,63} C'est à dire que si nous sommes dans le matériau α en un point s quelconque sur la trajectoire des particules de direction $\vec{\Omega}$, alors la probabilité d'être dans un autre matériau au point $s+ds$ dans la direction $\vec{\Omega}$ est donnée par $ds/\lambda_{c\alpha}(\vec{\Omega})$. Autrement dit (figure 4.1), $ds/\lambda_{c\alpha}(\vec{\Omega})$ est la probabilité conditionnelle, sachant que l'on est dans le matériau α en s , de changer de matériau entre s et $s+ds$ en conformité avec les définitions générales (2.13a).

L'équation (4.5a) et l'équation correspondante pour le deuxième matériau appelé β forment un système à deux équations avec quatre inconnues. La première fermeture élémentaire suggérée pour obtenir un modèle de transport stochastique^{43,62} a été d'imposer la relation (4.3) bien que cette relation ne soit plus applicable dans le cas du transport avec diffusion.^{62,72} L'utilisation de l'éq. (4.3) dans l'équation (4.5a) donne le système fermé d'équations

$$\begin{aligned}
 [\bar{\Omega} \cdot \bar{\nabla} + \Sigma_{i\alpha}(\bar{r})]\psi_{\alpha}(\bar{r}, \bar{\Omega}) &= \frac{1}{4\pi} [\Sigma_{s\alpha}(\bar{r})\phi_{\alpha}(\bar{r}) + S_{\alpha}(\bar{r})] \\
 &+ \frac{1}{\lambda_{c\alpha}(\bar{\Omega})} [\psi_{\beta}(\bar{r}, \bar{\Omega}) - \psi_{\alpha}(\bar{r}, \bar{\Omega})] \text{ dans } X, \\
 \psi_{\alpha}(\bar{r}, \bar{\Omega}) &= \psi_{bd}(\bar{\Omega}) \text{ sur } \partial X,
 \end{aligned}
 \tag{4.6}$$

la deuxième équation s'obtenant en permutant α et β . À partir de la solution de ces équations on peut calculer le flux moyen $\langle \psi(\bar{r}) \rangle$ à l'aide de la relation (2.9). Par la suite le modèle défini par l'équation (4.6) sera appelé *le modèle Markovien*.

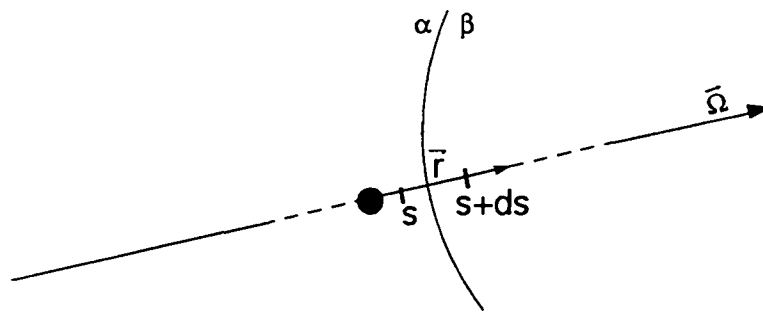


Figure 4.1: Description de la situation intervenant dans le calcul de $\psi_{\alpha\beta}(\bar{r}, \bar{\Omega})$.

Le second modèle qui nous intéresse, appelé *le modèle d'interface*,⁷² est plus récent que le précédent. Il est basé sur l'équation exacte de bilan (4.5a), mais il utilise une fermeture plus élaborée que celle fournie par l'identité (4.3). Celle-ci fait appel à la deuxième équation de la hiérarchie qui régit les flux d'interface. Elle s'obtient en principe en reprenant les raisonnements du §2.3, c'est à dire en appliquant l'opérateur de "transit" $M_{\alpha\beta}$ (2.13a) à l'équation de transport initiale (2.1). On s'aperçoit alors que cette nouvelle équation présente les particularités suivantes:

- son 1^{er} membre est obtenu en remplaçant ψ_{α} dans (4.5a) pour $\psi_{\alpha\beta}$.
- formellement le terme de diffusion a aussi la même structure, sauf que $\tilde{\phi}_{\alpha\beta}$ n'est pas exactement le flux scalaire associé à $\psi_{\alpha\beta}$; on reviendra plus loin sur cette question.
- le dernier terme n'a évidemment plus rien à voir avec celui de (4.5a). Il fait intervenir les moments des flux angulaires d'ordre supérieur mais il est très difficile de l'explicitier car le calcul du commutateur $[M_{\alpha\beta}, L]$ est inextricable. En fait ceci n'est pas très grave, car il

faudra de toute façon faire une approximation sur ce terme pour assurer la fermeture de la hiérarchie.

En supposant que les flux d'ordre supérieur peuvent être remplacés par les flux d'interface $\psi_{\alpha\beta}$ et en tenant compte des remarques précédentes, diverses considérations physiques⁷² conduisent à écrire:

$$\begin{aligned} [\bar{\Omega} \cdot \bar{\nabla} + \Sigma_{s\alpha}(\bar{r})]\psi_{\alpha\beta}(\bar{r}, \bar{\Omega}) &= \frac{1}{4\pi} [\Sigma_{s\alpha}(\bar{r})\bar{\Phi}_{\alpha\beta}(\bar{r}) + S_{\alpha}(\bar{r})] \\ &+ \frac{1}{\lambda_{c\alpha}(\bar{\Omega})} [\psi_{\beta\alpha}(\bar{r}, \bar{\Omega}) - \psi_{\alpha\beta}(\bar{r}, \bar{\Omega})] \text{ dans } X, \\ \psi_{\alpha\beta}(\bar{r}, \bar{\Omega}) &= \psi_{\beta\alpha}(\bar{\Omega}) \text{ sur } \partial X, \end{aligned} \quad (4.5b)$$

où nous rappelons que $\psi_{\alpha\beta}(\bar{r}, \bar{\Omega})$, le flux d'interface, est le flux moyen des particules voyageant dans la direction $\bar{\Omega}$ dont la moyenne est calculée sur l'ensemble des réalisations qui ont un interface dans la direction $\bar{\Omega}$ entre le matériau α et le matériau β au point \bar{r} (cf. figure 4.1). Le système d'équations (4.5) n'est toujours pas fermé pour des géométries arbitraires puisque le "flux scalaire" d'interface s'écrit

$$\bar{\Phi}_{\alpha\beta}(\bar{r}) = \int_{4\pi} \bar{\Psi}_{\alpha\beta}(\bar{r}, \bar{\Omega}'; \bar{\Omega}) d\bar{\Omega}'$$

et nécessite donc la connaissance d'une nouvelle grandeur $\bar{\Psi}_{\alpha\beta}(\bar{r}, \bar{\Omega}'; \bar{\Omega})$. Celle-ci est le flux angulaire moyen des particules voyageant dans la direction $\bar{\Omega}'$ avant le choc, mais dont la moyenne est prise sur toutes les réalisations qui ont une interface entre le matériau α et le matériau β au point \bar{r} en considérant la direction $\bar{\Omega}$ après choc (cf. figure 4.2). Cependant pour le cas particulier de la géométrie plane on peut tout exprimer en fonction des flux d'interface standards $\psi_{\alpha\beta}(x, \mu)$ et écrire:⁷²

$$\bar{\Phi}_{\alpha\beta}(x) = \begin{cases} \int_{-1}^0 \psi_{\beta\alpha}(x, \mu') d\mu' + \int_0^1 \psi_{\alpha\beta}(x, \mu') d\mu'; & \mu > 0, \\ \int_{-1}^0 \psi_{\alpha\beta}(x, \mu') d\mu' + \int_0^1 \psi_{\beta\alpha}(x, \mu') d\mu'; & \mu < 0. \end{cases} \quad (4.7)$$

Les équations (4.5) écrites en géométrie plane complétées par (4.7) et leurs homologues obtenues en échangeant les indices α et β représentent un système fermé de quatre équations à quatre inconnues $\psi_{\alpha}(\bar{r}, \bar{\Omega})$, $\psi_{\beta}(\bar{r}, \bar{\Omega})$, $\psi_{\alpha\beta}(\bar{r}, \bar{\Omega})$ et $\psi_{\beta\alpha}(\bar{r}, \bar{\Omega})$. Le modèle décrit ci-dessus

devrait être en principe plus précis que le précédent puisque les approximations exigées par la fermeture ne portent que sur la deuxième équation de la hiérarchie.

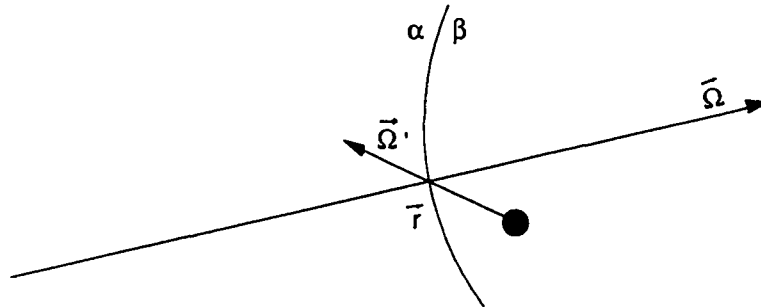


Figure 4.2: Description de la situation intervenant dans le calcul de $\psi_{\alpha\beta}(\bar{r}, \bar{\Omega}', \bar{\Omega})$.

Les modèles Markovien et d'interface respectent les propriétés générales⁷² des équations exactes tel que la limite du transport sans diffusion ou la limite du mélange atomique. Cette dernière limite consiste à faire tendre la longueur moyenne de corde de chaque matériau vers zéro en préservant la relation $\sum_i \lambda_i \ll 1$ pour les deux matériaux.^{26,72,83} En fait, cette limite correspond à un mélange homogène, atome par atome, des matériaux composant le milieu hôte. En appliquant cette limite aux équations des deux modèles on obtient⁷² l'équation (2.7) avec les deux termes de corrélation nuls, qui n'est autre que l'équation de transport déterministe.

Ces deux modèles ont déjà été évalués dans la littérature.^{62,72,84} Mais cette évaluation n'a été réalisée que sur la prédiction de grandeurs intégrales telles que les coefficients de transmission et de réflexion. Une comparaison de ces grandeurs entre les deux modèles et des cas de référence en géométrie "ligne" a montré⁷² que le 2^{ème} modèle (dit d'interface) était le meilleur de tous ceux qui ont été développés jusqu'à présent dans le cas des mélanges binaires Markoviens⁸⁴ pour prédire les coefficients de transmission et de réflexion. Mais aucune comparaison n'a été faite pour les distributions spatiales des différents flux moyens qui sont les grandeurs principales intervenant dans le calcul des taux de réaction par exemple. C'est pourquoi on comparera plus loin les résultats de ces deux modèles aux résultats de référence complets obtenus dans le chapitre précédent.

Les deux modèles intégro-différentiels, les modèles de Markov et d'interface, ont été développés pour des processus Markoviens de mélange de deux matériaux. Mais il a été suggéré^{22,26,34,42} que ces modèles pouvaient aussi être utilisés pour traiter des processus de remplacement non Markoviens en remplaçant les longueurs moyennes de corde, $\lambda_{c\alpha}$ et $\lambda_{c\beta}$, dans les équations (4.5) et (4.6) par

$$\lambda_{\alpha,\text{eff}} = q\lambda_{c\alpha} , \quad \lambda_{\beta,\text{eff}} = q\lambda_{c\beta} ,$$

où

$$q = \frac{1}{\Sigma_{\alpha}} \left[\frac{1}{\tilde{Q}_{\alpha}(\Sigma_{\alpha})} - \frac{1}{\lambda_{\alpha}} \right] + \frac{1}{\Sigma_{\beta}} \left[\frac{1}{\tilde{Q}_{\beta}(\Sigma_{\beta})} - \frac{1}{\lambda_{\beta}} \right] - 1,$$

$$\tilde{Q}_{\alpha}(s) = \int_0^{\infty} Q_{\alpha}(x) e^{-sx} dx,$$

avec $Q_{\alpha}(x)$ et λ_{α} définis au § 3.1. Le facteur de correction q a été dérivé en préservant,⁴² dans le modèle Markovien sans diffusion, la distance moyenne parcourue avant une collision,

$$\ell = \int_0^{\infty} x \left| \frac{d \langle \psi(x) \rangle}{dx} \right| dx,$$

pour une particule dans un semi-espace. Dans le cas particulier de processus de remplacement tel que le processus Markovien à deux états, le facteur de correction vaut 1 (cf. Annexe D). Les calculs de ce facteur de correction pour les différents processus décrits par les fonctions de distribution de la figure 3.1 sont détaillés dans l'Annexe D. L'utilisation de ce facteur de correction dans le modèle d'interface n'a au mieux qu'une justification heuristique. Néanmoins, comme il n'a jamais été testé, nous allons vérifier sa validité pour les modèles Markoviens (éq. 4.6) et d'interface (éqs. 4.5) dans le cas du transport avec diffusion pour lequel il a été suggéré.

4.1.2 Modèles intégraux.

Pour des problèmes sans diffusion de particules, avec un milieu hôte vérifiant les hypothèses i), iii) et iv), une description exacte et complète du flux moyen de particules $\langle \psi \rangle$ a été trouvée par plusieurs auteurs. C'est le cas des mélanges régis par un processus équilibré de remplacement alterné en statistiques non homogènes,^{42,63} en statistiques homogènes avec des distributions quelconques⁶⁵ de longueurs de corde ou avec des distributions telles que $Q_{\alpha}(z)$,

la probabilité d'avoir une longueur de corde supérieure à z , puisse s'exprimer comme une transformée de Laplace.⁸⁵ La méthode utilisée pour décrire le transport de particules dans ces cas est la même chez tous les auteurs; elle est basée sur l'équation intégrale du transport et consiste en quatre équations intégrales couplées (deux pour chaque matériau).⁴²

Dans le cadre du transport stochastique avec diffusion dans un mélange décrit par des processus de remplacement (afin de simplifier l'écriture, dorénavant nous appellerons les processus équilibrés de remplacement alterné simplement des processus de remplacement) peu de modèles ont été développés, mis à part la modification par un facteur de correction des modèles Markovien et d'interface. Quelques suggestions^{43,63} ont été formulées, sans avoir été menées à terme, sur l'extension aux problèmes avec diffusion du système de quatre équations intégrales évoqué ci-dessus.

Les nouveaux modèles du transport de particules que nous développons dans ce travail pour un mélange binaire régi par des processus de remplacement se basent, comme suggéré,^{43,63} sur les équations exactes du problème sans diffusion et sur le formalisme intégral, plus général, décrit en début de chapitre. Avec les hypothèses i) à iv) l'équation (4.2) peut s'écrire sous une forme très compacte. Puisque les particules sont monocinétiques les variables du type \bar{x}_j peuvent être remplacée par $(\bar{r}_j, \bar{\Omega})$ et l'intégration dans l'espace des vitesses (\bar{v}') se réduit à une intégration sur les directions $\bar{\Omega}'$. L'hypothèse sur l'isotropie (ii) conduit à poser $q_\alpha(\bar{x}_s) = S_\alpha(\bar{r}_s)/4\pi$ et $\Sigma_{s\alpha}(\bar{r}_s, \bar{\Omega}' \rightarrow \bar{\Omega}) = \Sigma_{s\alpha}(\bar{r}_s)/4\pi$ et la moyenne du flux scalaire $\Phi_{\alpha\alpha}$ apparaît automatiquement. Enfin les conditions aux frontières étant non stochastiques, on peut poser $\Phi_{\alpha\alpha} = \Psi_{bd}(\bar{r}_1, \bar{\Omega})$, où Ψ_{bd} est le spectre angulaire entrant connu.

On voit donc que sur une direction donnée $\bar{\Omega}$, le lien entre les trois points \bar{r} , \bar{r}_s et \bar{r}_l s'exprime en fonction des deux coordonnées locales: s et s_l . Il est toutefois plus judicieux de choisir \bar{r}_l comme origine sur cette direction plutôt que \bar{r} . Les nouvelles coordonnées locales se définissent alors comme indiqué sur la figure 4.3: $\xi = |\bar{r} - \bar{r}_l|$ et $\eta = |\bar{r}_s - \bar{r}_l| = \xi - s$ et l'équation (4.2) devient:

$$\begin{aligned} \psi_{\alpha}(\xi) = & e^{-\tau_{\alpha}(0,\xi)} R_{\alpha}(0,\xi) \psi_{bd} + \int_0^{\xi} e^{-\tau_{\alpha}(\eta,\xi)} \{ f_{s\alpha}(\eta,\xi) \psi_{\beta\alpha\alpha}(\eta;\xi) \\ & + \frac{R_{\alpha}(\eta,\xi)}{4\pi} [S_{\alpha}(\eta) + \Sigma_{s\alpha}(\eta) \phi_{\alpha\alpha}(\eta;\xi)] \} d\eta. \end{aligned} \quad (4.8)$$

avec d'après (4.2a) et (4.2b)

$$\tau_{\alpha}(\eta,\xi) = \int_{\eta}^{\xi} \Sigma_{s\alpha}(\eta') d\eta' \quad (4.8a)$$

$$f_{s\alpha}(\eta,\xi) = \frac{\partial}{\partial \eta} R_{\alpha}(\eta,\xi) \quad (4.8b)$$

Dans cette équation $S_{\alpha}(\eta)$ représente la source isotrope de particules et $\phi_{\alpha\alpha}(\eta;\xi)$ le flux scalaire moyen associé au flux angulaire moyen $\psi_{\alpha\alpha}(\eta,\bar{\Omega};\xi)$. Les deux matériaux composant le milieu sont indicés α et β .

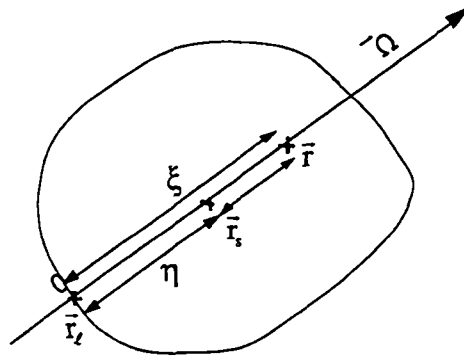


Figure 4.3: Schéma des coordonnées de l'équation (4.8).

Dans le but d'établir les bases du nouveau modèle, on note que pour les processus de remplacement avec du transport sans diffusion on a l'identité⁸⁶

$$\psi_{\beta\alpha\alpha}(\eta;\xi) = \psi_{\beta\alpha}(\eta) \quad (4.9)$$

entre le flux d'interface $\psi_{\beta\alpha\alpha}(\eta;\xi)$ qui dépend de la trajectoire future de la particule qui devra se faire dans le matériau α au moins jusqu'en ξ , et le flux local d'interface $\psi_{\beta\alpha}(\eta)$ obtenu dans la formulation intégral-différentielle du transport stochastique. Une telle simplification n'intervient cependant pas pour le terme $\phi_{\alpha\alpha}(\eta;\xi)$, sauf pour des processus Markoviens (cas particuliers de

processus de remplacement). Alors, et à nouveau dans la limite de matériaux purement absorbants, $\phi_{\alpha\alpha}(\eta;\xi)$ devient le flux de matériau $\phi_{\alpha}(\eta)$. En supposant que ces expressions limites soient aussi valables pour des matériaux diffusants, la première équation de notre modèle s'écrit

$$\begin{aligned} \psi_{\alpha}(\xi) = & e^{-\tau_{\alpha}(0,\xi)} R_{\alpha}(0,\xi) \psi_{bd} + \int_0^{\xi} e^{-\tau_{\alpha}(\eta,\xi)} \{f_{\alpha\alpha}(\eta,\xi) \psi_{\beta\alpha}(\eta) \\ & + \frac{R_{\alpha}(\eta,\xi)}{4\pi} [S_{\alpha}(\eta) + \Sigma_{\alpha\alpha}(\eta) \phi_{\alpha}(\eta)]\} d\eta. \end{aligned} \quad (4.10a)$$

Dans le cas du transport avec diffusion et du processus de remplacement, l'hypothèse de fermeture (4.9) est exacte seulement dans la limite où $\eta \rightarrow \xi$. Des problèmes surviendront certainement si les processus de mélange favorisent des distributions de corde avec de longs parcours optiques. Pour compléter l'équation (4.10a), une équation pour calculer le flux local d'interface doit être trouvée. Cette nouvelle équation est obtenue en procédant de la même manière que dans le paragraphe 2.4, en appliquant cette fois l'opérateur $M_{\alpha\beta}$ (2.13a) à l'équation de base (2.15) relatives à des états $\omega \in \Omega_{\beta\alpha}(\bar{x})$:

$$\begin{aligned} \psi_{\beta\alpha}(\xi) = & e^{-\tau_{\beta}(0,\xi)} Q_{\beta}(0,\xi) \psi_{bd} + \int_0^{\xi} e^{-\tau_{\beta}(\eta,\xi)} \{f_{\beta}(\eta,\xi) \psi_{\alpha\beta\beta\alpha}(\eta;\xi) \\ & + \frac{Q_{\beta}(\eta,\xi)}{4\pi} [S_{\beta}(\eta) + \Sigma_{\beta\beta}(\eta) \phi_{\beta\beta\alpha}(\eta;\xi)]\} d\eta, \end{aligned} \quad (4.11)$$

où $Q_{\beta}(\eta,\xi)$ est la probabilité conditionnelle que η soit dans β sachant que ξ est sur l'interface $\beta\alpha$ et $\phi_{\beta\beta\alpha}(\eta;\xi)$ est le flux scalaire moyen sur l'ensemble de ces états. De son côté $f_{\beta}(\eta,\xi) = \partial_{\eta} Q_{\beta}(\eta,\xi)$ est la densité conditionnelle de probabilité pour que η soit sur l'interface $\alpha\beta$ sachant que ξ est sur $\beta\alpha$, et $\psi_{\alpha\beta\beta\alpha}(\eta;\xi)$ est le flux moyen angulaire associé à ces états. L'équation (4.11) obtenue dans le cadre de ce travail,^{87,88} n'a jamais été présentée, semble-t-il, dans la littérature.

Pour fermer cette nouvelle équation, on utilise, comme auparavant, le comportement limite des processus de remplacement avec des matériaux purement absorbants.^{43,65,86} C'est à dire qu'on adopte l'identité:

$$\Psi_{\alpha\beta\beta\alpha}(\eta; \xi) = \Psi_{\alpha\beta}(\eta), \quad (4.12)$$

analogue à (4.9). Comme approximation du terme de diffusion, on pourrait utiliser un résultat valable à la limite du transport sans diffusion dans un mélange Markovien,

$$\Phi_{\beta\beta\alpha}(\eta; \xi) = \Phi_{\beta}(\eta), \quad (4.13)$$

mais on préfère insister sur l'effet d'interface, comme dans le modèle d'interface⁷² qui semble donner de bons résultats, et on utilise l'approximation

$$\Phi_{\beta\beta\alpha}(\eta; \xi) \approx \tilde{\Phi}_{\beta\alpha}(\eta). \quad (4.14)$$

Avec les équations (4.12) et (4.14), la deuxième équation de ce nouveau modèle devient:

$$\begin{aligned} \Psi_{\beta\alpha}(\xi) = & e^{-\tau_{\beta}(0, \xi)} Q_{\beta}(0, \xi) \Psi_{\beta\alpha} + \int_0^{\xi} e^{-\tau_{\beta}(\eta, \xi)} \{f_{\beta}(\eta, \xi) \Psi_{\alpha\beta}(\eta) \\ & + \frac{Q_{\beta}(\eta, \xi)}{4\pi} [S_{\beta}(\eta) + \Sigma_{s\beta}(\eta) \tilde{\Phi}_{\beta\alpha}(\eta)]\} d\eta. \end{aligned} \quad (4.10b)$$

Le système d'équations (4.10), appelé *modèle du remplacement*, n'est toujours pas fermé pour des géométries arbitraires pour les mêmes raisons que les équations (4.5). Dans le cas de géométries plane et "ligne", la fermeture du terme $\tilde{\Phi}_{\beta\alpha}(\eta)$ est donnée par l'équation (4.7) avec les indices α et β inversés. En posant $\Sigma_s=0$ pour les deux matériaux dans le système de quatre équations couplées (4.10), on obtient la description exacte du transport sans diffusion pour les processus de remplacement.

Les premiers tests numériques et des comparaisons avec les autres modèles, ainsi qu'avec des cas de référence,⁸⁷ nous ont montré que le modèle du remplacement donnait de bons résultats qui, cependant, devaient pouvoir être améliorés. Une amélioration possible du modèle du remplacement consiste à remplacer les eqs. (4.12) et (4.14) par les expressions pondérées:⁴³

$$\Psi_{\alpha\beta\beta\alpha}(\eta; \xi) = \epsilon_{\beta}(\eta, \xi) \Psi_{\alpha}(\eta) + [1 - \epsilon_{\beta}(\eta, \xi)] \Psi_{\alpha\beta}(\eta) \quad (4.15)$$

pour le terme d'interface, et

$$\phi_{\beta\beta\alpha}(\eta; \xi) = \varepsilon_{\beta}(\eta, \xi)\tilde{\phi}_{\beta\alpha}(\eta) + [1 - \varepsilon_{\beta}(\eta, \xi)]\phi_{\beta}(\eta) \quad (4.16)$$

pour le terme de diffusion. Ici $\tilde{\phi}_{\beta\alpha}(\eta)$ est aussi donné par (4.7) pour des géométries planes et "lignes". Dans ces deux hypothèses de troncature, le coefficient de pondération $\varepsilon_{\beta}(\eta, \xi)$ est choisi comme une fonction positive rapidement décroissante de $s=\xi-\eta$, avec les valeurs limites: $\varepsilon_{\beta}(\xi, \xi)=1$ et $\varepsilon_{\beta}(-\infty, \xi)=0$. De plus, pour préserver la limite des matériaux purement absorbants, ε_{β} doit s'annuler uniformément dans la limite du transport sans diffusion. Dans le cas de mélanges régis par les processus de remplacement, un candidat pour la fonction de fermeture ε_{β} est

$$\varepsilon_{\beta}(\eta, \xi) = e^{-\frac{\chi_{\beta}\tau_{\beta}(\eta, \xi)}{\bar{c}}}, \quad (4.17)$$

où χ_{β} est un paramètre d'ajustement et \bar{c} le nombre "moyen" de secondaires du mélange que nous choisissons de calculer comme la moyenne volumique

$$\bar{c} = \sum_{\alpha} p_{\alpha}c_{\alpha}, \quad (4.18)$$

où $c_{\alpha} = \Sigma_{s\alpha}/\Sigma_{t\alpha}$. Le terme moyen a été mis entre guillemets parce qu'il a été montré⁷⁹ que l'expression (4.18) n'est pas valable en toute généralité. Notons que dans la limite de matériaux purement absorbants \bar{c} s'annule et la limite du transport sans diffusion est respectée. Avec cette fonction de fermeture on obtient aussi la limite:

$$\lim_{\xi \rightarrow \eta} \psi_{\alpha\beta\beta\alpha}(\eta; \xi) = \psi_{\alpha}(\eta)$$

qui est le comportement correct pour des processus Markoviens à deux matériaux.^{43,86}

Ce qui est important dans ce qui précède, c'est la structure du paramètre sans dimension τ_{β}/\bar{c} et la décroissance de ε_{β} lorsque ce paramètre croît, car cela découle de considérations physiques. Par contre, c'est pour des raisons de commodité qu'une fonction exponentielle a été choisie dans (4.17).

Ce modèle du remplacement modifié que nous proposons est composé des équations (4.10a) et (4.11) où l'on introduit les hypothèses de troncature (4.15), (4.16) ainsi que la définition (4.17). Si on le désire, les paramètres χ_{α} et χ_{β} peuvent être déterminés par

ajustement sur un ou plusieurs cas de référence (§ 3.3) similaires aux problèmes que l'ont veut traiter. On parlera alors de modèles ajustés (ou non).

Malheureusement actuellement il n'y a pas de preuve rigoureuse que ce modèle préserve la limite du mélange atomique (cf. § 4.1.1), mais il est toujours valable tant que la relation $\Sigma_i \lambda_i \ll 1$ n'est pas respectée pour au moins un des deux matériaux.^{26,72} Pour obtenir cette limite, le modèle doit respecter le bilan local de particules pour chaque flux de matériau. Un tel modèle peut être construit en combinant l'équation intégral-différentielle de matériau du bilan local⁴³ (4.5a) avec l'équation intégrale pour le flux local d'interface, éq. (4.11). Ces modèles que nous appellerons mixtes sont brièvement décrits dans le paragraphe suivant.

4.1.3 Modèles mixtes.

Les modèles mixtes sont des modèles décrivant un mélange régi par des processus de remplacement, dont la première équation est l'équation intégral-différentielle (4.5a) exacte pour les processus de remplacement en statistiques homogènes.^{43,62,72} L'équation du second ordre de ces modèles donnant le flux local d'interface, est basée sur l'équation intégrale (4.11). L'avantage de ces modèles, c'est que, d'une part, l'approximation de fermeture n'est faite que sur cette équation de second ordre contrairement aux modèles du remplacement standard et modifié, et d'autre part, ces modèles respectent la limite du mélange atomique.⁸⁸

Nous considérerons plus en détail, d'une part les modèles mixtes du type remplacement composés des équations (4.5a) et (4.10b) et d'autre part les modèles mixtes du type remplacement modifié composés des équations (4.5a) et (4.11) mais cette fois avec les approximations de troncature (4.15) et (4.16).

4.2 Résolution numérique des modèles.

Pour comparer les différents modèles décrits ci-dessus avec nos résultats de référence décrits dans le Chapitre 3, on se limitera aux statistiques homogènes et à la géométrie plane sans source ($S=0$). On suppose aussi que les matériaux ont des propriétés homogènes, c'est à

dire que les sections efficaces macroscopiques totale, Σ_t , et de diffusion, Σ_s , sont constantes pour chacun des deux matériaux. Le système matériel étudié en géométrie plane occupe la région $0 \leq x \leq L$ et les conditions aux bords non stochastiques sont données par

$$\psi(0, \mu) = 2, \quad \mu > 0; \quad \psi(L, \mu) = 0, \quad \mu < 0, \quad (4.19)$$

où μ est le cosinus de l'angle entre l'axe des x et la direction de vol $\vec{\Omega}$ des particules. Ces conditions aux bords correspondent à un flux entrant isotrope de courant unitaire incident sur le système plan en $x=0$, et à aucun flux incident sur la surface du système en $x=L$. La géométrie plane étudiée est composée de plaques de matériaux α et β dont les épaisseurs sont distribuées aléatoirement en accord avec les processus de remplacement en statistiques homogènes. La figure 4.4 remplacera dorénavant la figure 4.3.

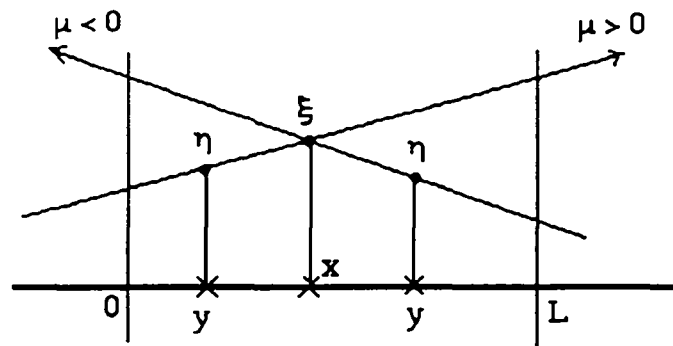


Figure 4.4: Schéma des coordonnées en géométrie plane

4.2.1 Modèles intégral-différentiels.

La description du transport stochastique pour le problème décrit ci-dessus est donnée, pour le modèle Markovien, par l'équation (4.6) qui s'écrit ici:

$$\left[\mu \frac{\partial}{\partial x} + \Sigma_{\alpha} \right] \psi_{\alpha}(x, \mu) = \frac{\Sigma_{\alpha\beta}}{2} \phi_{\alpha}(x) + \frac{|\mu|}{\lambda_{\alpha}} [\psi_{\beta}(x, \mu) - \psi_{\alpha}(x, \mu)], \quad (4.20)$$

puisque en géométrie plane $\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} = \mu \partial / \partial x$. Le coefficient $|\mu|$ provient du fait que la longueur moyenne de corde $\lambda_{c\alpha}(\mu)$ vue par une particule voyageant avec un angle par rapport à l'axe des x caractérisé par son cosinus μ est simplement égale à $\lambda_{\alpha}/|\mu|$, où λ_{α} , indépendante de la

direction de vol des particules, désigne l'épaisseur moyenne de la plaque de matériau α (cf. § 3.1).

Les équations correspondant au modèle d'interface (éqs. 4.5) deviennent:

$$\left[\mu \frac{\partial}{\partial x} + \Sigma_{\alpha}\right] \psi_{\alpha}(x, \mu) = \frac{\Sigma_{\alpha}}{2} \phi_{\alpha}(x) + \frac{|\mu|}{\lambda_{\alpha}} [\psi_{\beta\alpha}(x, \mu) - \psi_{\alpha\beta}(x, \mu)] \quad (4.21a)$$

pour les flux de matériau, et

$$\left[\mu \frac{\partial}{\partial x} + \Sigma_{\alpha}\right] \psi_{\alpha\beta}(x, \mu) = \frac{\Sigma_{\alpha}}{2} \tilde{\phi}_{\alpha\beta}(x) + \frac{|\mu|}{\lambda_{\alpha}} [\psi_{\beta\alpha}(x, \mu) - \psi_{\alpha\beta}(x, \mu)] \quad (4.21b)$$

pour les flux d'interface. Le "flux scalaire" $\tilde{\phi}_{\alpha\beta}$ est donné par l'équation (4.7). On notera que tous les flux angulaires dans toutes ces équations obéissent aux conditions aux bords (4.19) puisque en ces points la nature stochastique du problème a disparu.

Ces deux modèles sont résolus avec le schéma numérique classique décrit dans le § 3.3. Des tests numériques ont montré que les itérations internes convergeaient très lentement dans le modèle d'interface (plus de 5000 itérations). Afin d'accélérer le processus d'itération du terme source⁴⁵ nous avons implanté dans notre schéma d'itération la méthode d'accélération "Coarse Mesh Rebalancing"⁸⁹ déjà utilisée dans les calculs de référence (§ 3.3).

4.2.2 Modèles intégraux.

Avant d'établir la nouvelle forme des équations intégrales, on fera les remarques suivantes:

- les formules de transformations à utiliser sont (figure 4.4): $\xi = x/\mu$ et $\eta = y/\mu$,
- les matériaux étant homogènes les chemins optiques s'écrivent d'après (4.8a):

$$\tau_{\alpha}(\eta, \xi) = \Sigma_{\alpha}(\xi - \eta) = \Sigma_{\alpha} \frac{(x - y)}{|\mu|},$$

- l'hypothèse de la statistique homogène conduit à admettre que $R_{\alpha}(\eta, \xi)$ est une fonction de $(\xi - \eta)/\xi_0$ où ξ_0 est une longueur de référence prise sur $\bar{\Omega}$; mais d'après les formules de

transformation il peut aussi s'écrire $(x - y)/x_0$ où x_0 est l'homologue de ξ_0 prise sur l'axe des x . On peut donc poser $R_\alpha(\eta, \xi) = R_\alpha(x - y)$.

• avec les formules de transformation, l'équation (4.8b) peut s'écrire:

$$f_{s\alpha}(\xi, \eta) = |\mu| \frac{\partial}{\partial y} R_\alpha(x - y) = |\mu| f_{s\alpha}(x - y)$$

ce qui définit une nouvelle densité de probabilité par unité de longueur prise sur l'axe des x . Les deux dernières considérations valent aussi pour les moments Q_β et f_β . Dans ces conditions les équations (4.10) du modèle du remplacement s'écrivent

$$\Psi_\alpha(x, \mu) = e^{-\frac{\Sigma_{\alpha} x}{|\mu|}} R_\alpha(x) \Psi_{bd}(\mu) + \int_0^x e^{-\frac{\Sigma_{\alpha}(x-y)}{|\mu|}} \left\{ f_{s\alpha}(x-y) \Psi_{\beta\alpha}(y, \mu) + \frac{R_\alpha(x-y)}{2|\mu|} \Sigma_{s\alpha} \phi_\alpha(y) \right\} dy \quad (4.22a)$$

et

$$\Psi_{\beta\alpha}(x, \mu) = e^{-\frac{\Sigma_{\beta} x}{|\mu|}} Q_\beta(x) \Psi_{bd}(\mu) + \int_0^x e^{-\frac{\Sigma_{\beta}(x-y)}{|\mu|}} \left\{ f_\beta(x-y) \Psi_{\alpha\beta}(y, \mu) + \frac{Q_\beta(x-y)}{2|\mu|} \Sigma_{s\beta} \tilde{\phi}_{\beta\alpha}(y) \right\} dy \quad (4.22b)$$

où d'après ce qui précède

$$f_{s\alpha}(x - y) = \frac{\partial}{\partial y} R_\alpha(x - y) \text{ et } f_\beta(x - y) = \frac{\partial}{\partial y} Q_\beta(x - y). \quad (4.22c)$$

On rappellera que $\tilde{\phi}_{\beta\alpha}$ est toujours le "flux scalaire" donné par l'équation (4.7). Les coordonnées x et y sont maintenant mesurées dans la direction perpendiculaire aux frontières de la géométrie plane, dans la direction positive pour $\mu > 0$ et dans la direction inverse pour $\mu < 0$ (fig. 4.4). Les moments statistiques apparaissant dans les équations (4.22) ne font plus intervenir que les caractéristiques géométriques des plaques de matériau. En revenant à leurs définitions telles qu'elles sont apparues lors de l'établissement des équations intégrales, on s'aperçoit qu'ils sont identiques aux diverses probabilités, fonctions des épaisseurs de plaques, présentées dans le paragraphe § 3.1. C'est là un résultat très important. Les équations du modèle du remplacement sont résolues numériquement en utilisant pour la discrétisation angulaire une formule S_N basée sur la quadrature de Gauss-Legendre à 16 points.⁷⁰ Pour le

traitement des variables spatiales, la méthode des éléments finis est utilisée.^{89,90} Les détails de ce traitement sont donnés dans l'Annexe E.

Les équations du modèle du remplacement modifié reviennent, comme on l'a vu, à remplacer ici (4.22b) par

$$\begin{aligned} \Psi_{\beta\alpha}(x, \mu) = & e^{-\frac{\Sigma_{\beta} x}{|\mu|}} Q_{\beta}(x) \Psi_{bd}(\mu) + \int_0^x e^{-\frac{\Sigma_{\beta}(x-y)}{|\mu|}} \{f_{\beta}(x-y) [e^{-\frac{\chi_{\beta} \Sigma_{\beta}(x-y)}{\bar{c}|\mu|}} \Psi_{\alpha}(y, \mu) \\ & + (1 - e^{-\frac{\chi_{\beta} \Sigma_{\beta}(x-y)}{\bar{c}|\mu|}}) \Psi_{\alpha\beta}(y, \mu)] + \frac{Q_{\beta}(x-y)}{2|\mu|} \Sigma_{\beta} [e^{-\frac{\chi_{\beta} \Sigma_{\beta}(x-y)}{\bar{c}|\mu|}} \tilde{\Phi}_{\beta\alpha}(y) \\ & + (1 - e^{-\frac{\chi_{\beta} \Sigma_{\beta}(x-y)}{\bar{c}|\mu|}}) \phi_{\beta}(y)]\} dy, \end{aligned} \quad (4.23)$$

où $\tilde{\Phi}_{\beta\alpha}$ à toujours le même sens (équation (4.7)) et \bar{c} est le paramètre défini par l'équation (4.18). Numériquement, le modèle est résolu presque de la même manière que le précédent (cf. Annexe E). Sauf que, pour des flux de matériaux Ψ_{α} connus, la méthode d'itération de la source⁴⁶ est utilisée pour calculer les flux d'interfaces $\Psi_{\beta\alpha}$ et $\Psi_{\alpha\beta}$ pour chaque direction angulaire. Chaque itération sur la source nécessite des itérations internes pour $\Psi_{\beta\alpha}$ et $\Psi_{\alpha\beta}$ (en pratique très peu sont nécessaires). Une fois que les flux d'interface ont été calculés, leurs valeurs sont utilisées dans les équations des flux de matériaux Ψ_{α} et Ψ_{β} . Ces derniers sont aussi obtenus par des itérations sur le terme source. En plus, des itérations extérieures sont effectuées entre les équations des flux d'interface et celles des flux de matériau jusqu'à ce que les flux de matériau aient convergé.

4.2.3 Modèles mixtes.

La résolution numérique des modèles mixtes fait intervenir les deux méthodes décrites ci-dessus aux § 4.2.1 et 4.2.2. Malheureusement en ce qui concerne le modèle mixte de type remplacement modifié (éqs. (4.21a) et (4.23)), des tests numériques ont montré qu'un tel modèle ne convergerait pas à cause d'oscillations et de valeurs négatives de flux. Par contre, en ce qui concerne le modèle mixte de type du remplacement standard (éqs. (4.21a) et (4.22b)), les calculs numériques ont montrés, comme espéré, qu'il fournissait les mêmes résultats que le modèle du remplacement standard (éqs. (4.22a) et (4.22b)) pour des matériaux purement

Chapitre 4

absorbants.⁸⁷ Les seules différences proviennent des discrétisations spatiales qui ne sont pas tout à fait les mêmes pour les formalismes intégraux et intégro-différentiels. Malgré ces bons résultats pour les milieux sans diffusion, ce modèle conduit à certaines difficultés dans le cas de matériaux diffusants. Comme on l'a vu tout au long de ce chapitre, le processus de diffusion complique singulièrement les problèmes de fermeture. Malheureusement en neutronique la diffusion est souvent prépondérante d'où l'importance des comparaisons avec les résultats "exacts" des cas de références. Ces problèmes sont discutés ci-après dans la troisième partie de ce chapitre.

Le tableau 4.1 qui suit résume tout ce qui précède en associant les noms (parfois discutables) des modèles étudiés aux équations qu'il faudra résoudre.

Tableau 4.1: Description des différents modèles

Type d'équations:	Intégro-différentiel	Intégral
Nom des modèles		
Markovien	(4.20)	
d'Interface	(4.21a)/(4.21b)	
du remplacement (standard)		(4.22a)/(4.22b)
du remplacement modifié (*)		(4.22a)/(4.23)
mixte de remplacement (standard)	(4.21a)	(4.22b)
mixte de remplacement modifié (*)	(4.21a)	(4.23)

* L'équation (4.23) fait apparaître le facteur χ_β d'ajustement. On dira du modèle qu'il est non ajusté, si on se fixe $\chi_\beta=1$.

4.3 Comparaison et discussions.

Comme pour la résolution des cas de référence du Chapitre 3, on calcule pour les différents modèles décrits ci-dessus les flux moyens scalaires $\langle \phi(x) \rangle$, $\phi_\alpha(x)$ et $\phi_\beta(x)$ ainsi que les coefficients de réflexion et de transmission $\langle R \rangle$ et $\langle T \rangle$ pour les 27 combinaisons des paramètres donnés dans le tableau 3.1 et pour différents processus de remplacement. Les résultats obtenus sont comparés aux résultats de référence du chapitre précédent. Dans la première partie de cette section on compare les trois modèles de base: Markovien, d'interface et du remplacement (standard). Ensuite on vérifie si les modifications du modèle du remplacement constituent une amélioration valable du modèle. La dernière partie de cette section est consacrée aux résultats obtenus pour des problèmes avec sources.

4.3.1 Comparaison des modèles de base.

Les trois modèles de base, Markovien, d'interface et du remplacement ont été calculés pour trois processus de remplacement: Markov-Markov, Bloc-Bloc et Tente-Tente. On rappelle que le premier terme désigne la distribution d'épaisseur du matériau α et le second celle du matériau β et que dans les modèles intégró-différentiels seules les valeurs moyennes des épaisseurs interviennent. Les résultats pour $\langle R \rangle$ et $\langle T \rangle$ sont apportés dans les tableaux F.1 à F.3 de l'Annexe F. Les résultats du modèle Markovien ont déjà été mentionnés auparavant dans la littérature.⁶² Nos résultats sont comparables à ceux obtenus dans ce précédent travail jusqu'à quatre décimales, ce qui est consistant avec l'erreur de troncation de la discrétisation spatiale. Une comparaison des résultats de nos modèles avec nos calculs de référence présentés dans les tableaux B.1 à B.3 nous permet de discerner plusieurs tendances.

En premier lieu, on discute le cas particulier du processus Markov-Markov. On constate que tous les modèles donnent des prédictions très précises pour les petits systèmes ($L=0.1$) et que la précision se détériore quand le système s'élargit. En général le modèle Markovien semble sous-estimer les probabilités de réflexion et surestimer les coefficients de transmission et d'absorption. Cette dernière n'est pas donnée dans les tables, mais elle est facilement

calculable: $\langle A \rangle = 1 - \langle R \rangle - \langle T \rangle$. Le modèle d'interface tend à surestimer la réflexion et la transmission, sous-estimant l'absorption, tandis que le modèle du remplacement a la tendance opposée. Quantitativement les erreurs pour $\langle R \rangle$, $\langle T \rangle$ et $\langle A \rangle$ sont de l'ordre de 5% pour le modèle d'interface, de 10% pour le modèle du remplacement, et 15% pour le modèle Markovien. Parmi les modèles intégrô-différentiels, le modèle d'interface donne de meilleurs résultats que le modèle Markovien dans tous les cas, excepté pour la valeur de $\langle T \rangle$ du cas 1b (cf. tableau 3.1) avec $L=10$, comme cela à déjà été observé par Pomraning⁷² en géométrie "ligne". Le modèle du remplacement, quoiqu'en général quelque peu moins précis que le modèle d'interface, fournit de meilleurs résultats dans certains cas.

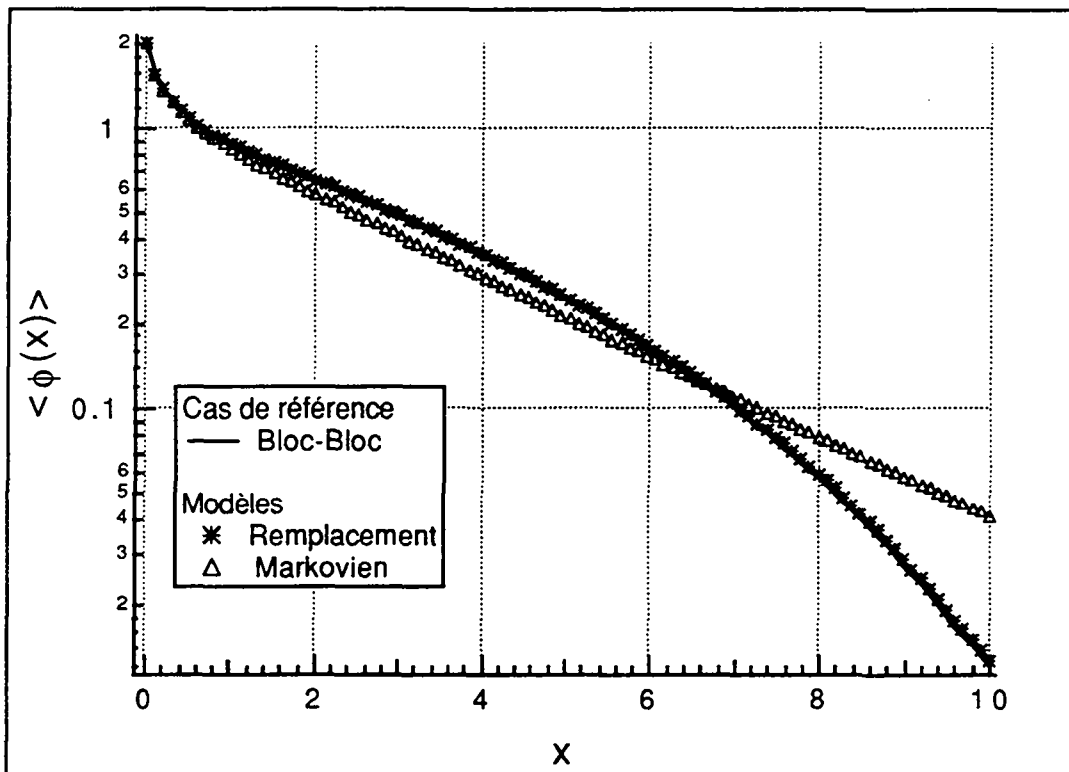


Figure 4.5: Comparaison de $\langle \phi(x) \rangle$ pour deux modèles dans le cas 3 sans diffusion avec $L=10$.

La précision des trois modèles se détériore pour des processus non Markoviens, mais les tendances générales restent inchangées. En particulier, on note que le facteur de correction q introduit dans les modèles intégrô-différentiels pour les processus non Markovien déplace, de

manière consistante, les résultats dans la bonne direction. Malheureusement, avec ce facteur de correction, le comportement à la limite de matériaux non diffusants n'est plus respecté. C'est à dire que dans le cas du transport sans diffusion pour un processus de remplacement non Markovien, les modèles Markovien et d'interface ne sont plus exacts contrairement au modèle du remplacement comme le montre la figure 4.5 pour un cas particulier de processus Bloc-Bloc. Sur cette figure n'est représenté, pour les modèles intégrés-différentiels, que le modèle Markovien, car le modèle d'interface est équivalent au modèle Markovien dans le cas de matériaux non diffusants comme nous l'indique la relation (4.3).

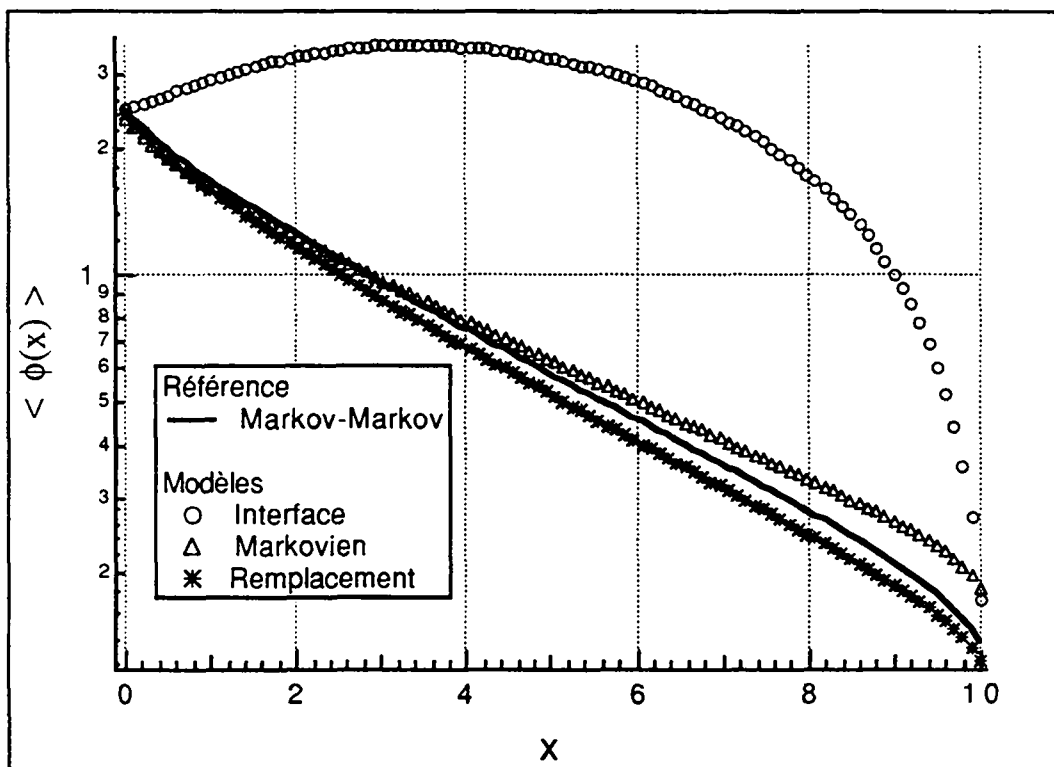


Figure 4.6: Comparaison de $\langle \phi(x) \rangle$ entre les modèles de base et un résultat de référence pour le cas 2a, $L=10$ et un processus Markov-Markov.

Les figures 4.6 à 4.8 montrent les distributions des flux $\langle \phi(x) \rangle$, $\phi_\alpha(x)$ et $\phi_\beta(x)$ à l'intérieur du système pour les trois modèles de base, dans un cas particulier (le milieu β est diffusant) et pour un processus Markovien. L'analyse de tous les résultats obtenus, y compris de ceux non présentés dans ce travail et dont certains ont déjà été discutés dans la littérature,⁸⁷

montre que les modèles Markovien et du remplacement prédisent avec succès la forme des distributions des flux scalaires moyens et cela avec une précision comparable. Le modèle d'interface, quant à lui, présente parfois des comportements non physiques comme la bosse qui apparaît dans les courbes des figures 4.6 à 4.8. Ce comportement intervient quand un des deux matériaux est optiquement épais et sans absorption, comme dans les cas 1a, 2a, et dans une moindre mesure 3a. L'origine de ce problème se comprend si on analyse l'équation (4.21a). Quand un matériau est optiquement épais et non absorbant, alors l'équation (4.21a) pour ce matériau ressemble à celle d'un milieu semi-infini non absorbant avec une source "externe" donnée par

$$K(\mu) = \frac{|\mu|}{\lambda_\alpha} [\psi_{\beta\alpha}(x, \mu) - \psi_{\alpha\beta}(x, \mu)]. \quad (4.24)$$

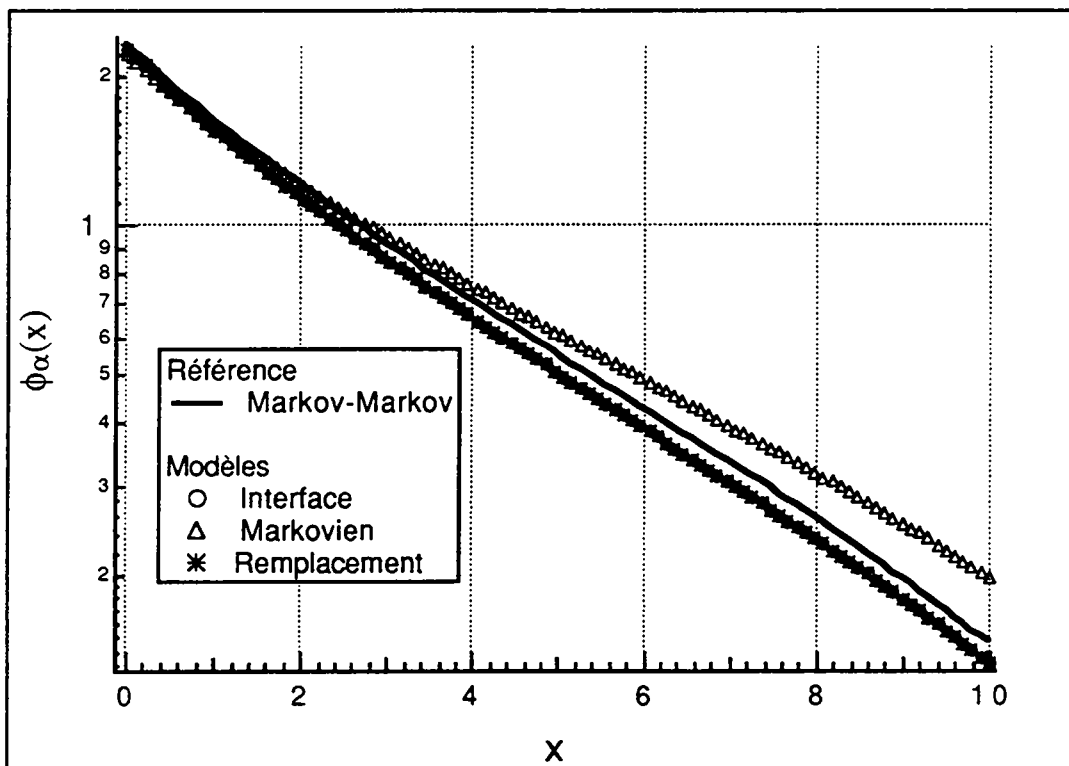


Figure 4.7: Comparaison de $\phi_\alpha(x)$ entre les modèles de base et un résultat de référence pour le cas 2a, $L=10$ et un processus Markov-Markov.

Si l'intégrale de K sur μ est positive, alors K représente une somme nette de particules générant ainsi une distribution convexe pour le flux scalaire. Une analyse des cas de référence⁸⁷ montre que la valeur exacte de l'intégrale de K , pour les cas de références étudiés, est effectivement négative. On rappelle que l'équation (4.21a) est une équation exacte pour ψ_α pourvu que l'on obtienne les valeurs correctes pour les flux d'interfaces. Malheureusement, le modèle d'interface donne le mauvais signe pour la différence des deux termes de l'équation (4.24) qui se compensent presque mutuellement comme dans le cas 2a de la figure 4.9, c'est donc l'équation (4.21b) qui doit être incriminée, la seule qui caractérise le modèle d'interface. Ce comportement non physique du modèle d'interface qui produit un maximum local pour le flux scalaire moyen dans un milieu non multiplicateur et sans sources, a échappé aux investigations précédentes.⁷² Cela était dû, partiellement, au manque de résultats de référence pour la distribution des flux moyens.

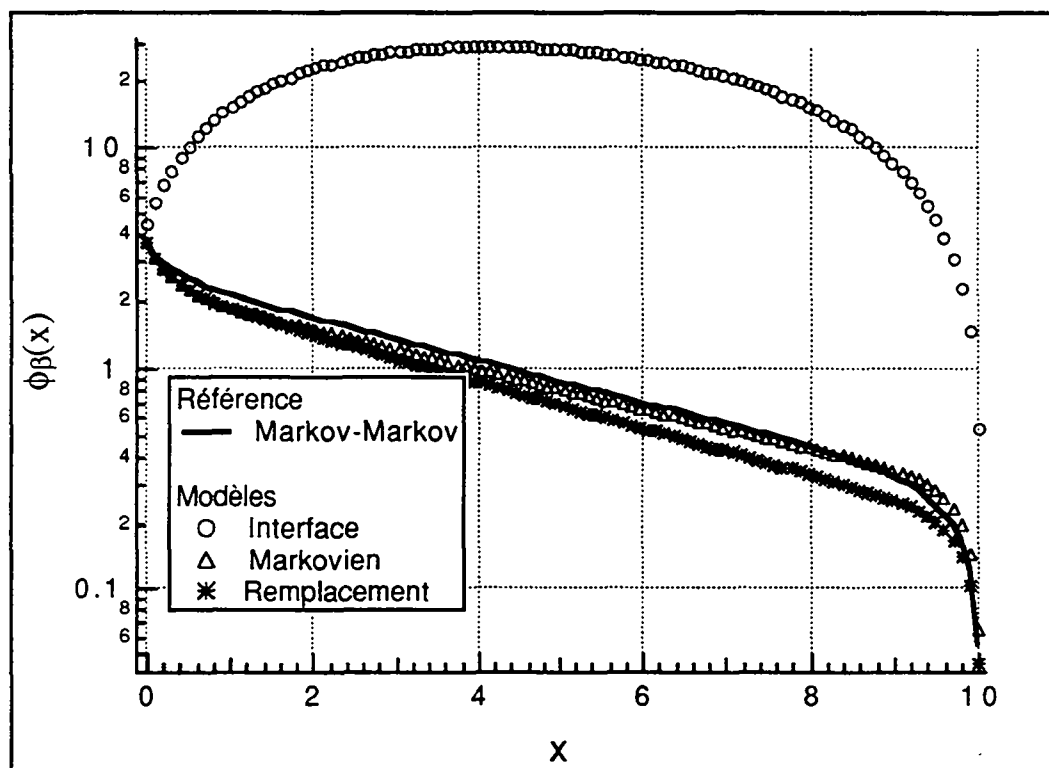


Figure 4.8: Comparaison de $\phi_\beta(x)$ entre les modèles de base et un résultat de référence pour le cas 2a, $L=10$ et un processus Markov-Markov.

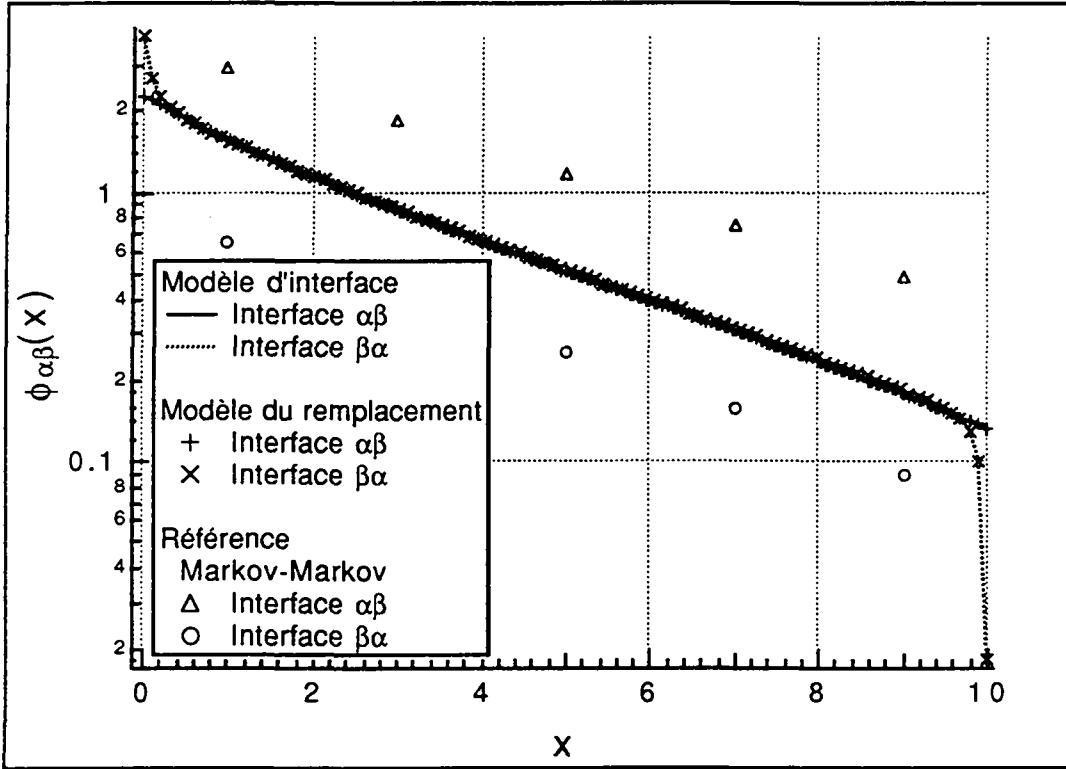


Figure 4.9: Comparaison de $\phi_{\alpha\beta}(x)$ entre deux modèles et un résultat de référence pour le cas 2a avec $L=10$ et un processus Markov-Markov.

La figure 4.9 représente la distribution des (vrais) flux scalaires d'interface $\phi_{\alpha\beta}(x)$ donnés par

$$\phi_{\alpha\beta} = \int_{-1}^0 \psi_{\alpha\beta}(\mu) d\mu + \int_0^1 \psi_{\alpha\beta}(\mu) d\mu.$$

Ces flux scalaires ne doivent pas être confondus avec les flux $\tilde{\phi}_{\alpha\beta}(x)$, donnés par l'éq. (4.7), fermant les équations de second ordre en géométrie unidimensionnelle. Les flux scalaires d'interface $\alpha\beta$ et $\beta\alpha$ sont donnés dans la figure 4.9 pour un processus Markovien à deux états dans le cas 2a. La comparaison entre les flux scalaires d'interface du cas de référence et du modèle d'interface permet d'expliquer, comme on l'a vu, les problèmes rencontrés par ce modèle dans ce cas particulier. D'autre part on constate aussi, que, dans ce cas particulier où un des matériaux est optiquement épais et non absorbant, les flux scalaires d'interface du modèle d'interface donnés par les équations (4.21b) sont semblables à ceux fournis par les équations (4.22b) du modèle du remplacement. Cela est très fâcheux en ce qui concerne le modèle mixte

de type du remplacement (éqs. (4.21a) et (4.22b)). En effet, ce modèle mixte aura le même comportement que le modèle d'interface dans les cas où un des matériaux est optiquement épais et non absorbant. La première équation de ces deux modèles est identique (éq. (4.21a)) et les équations de second ordre de ces deux modèles donnent les mêmes résultats dans ce cas particulier, comme on le voit sur la figure 4.9 pour le cas 2a. Ainsi aucun des modèles mixtes n'est actuellement capable de prédire correctement les distributions des flux moyens scalaires pour des processus de remplacement dans un milieu avec matériaux diffusants. En fait aucun modèle n'est bon pour prédire le flux scalaire d'interface $\phi_{\alpha\beta}(x)$, mais en pratique ce flux n'est pas très important en lui-même.

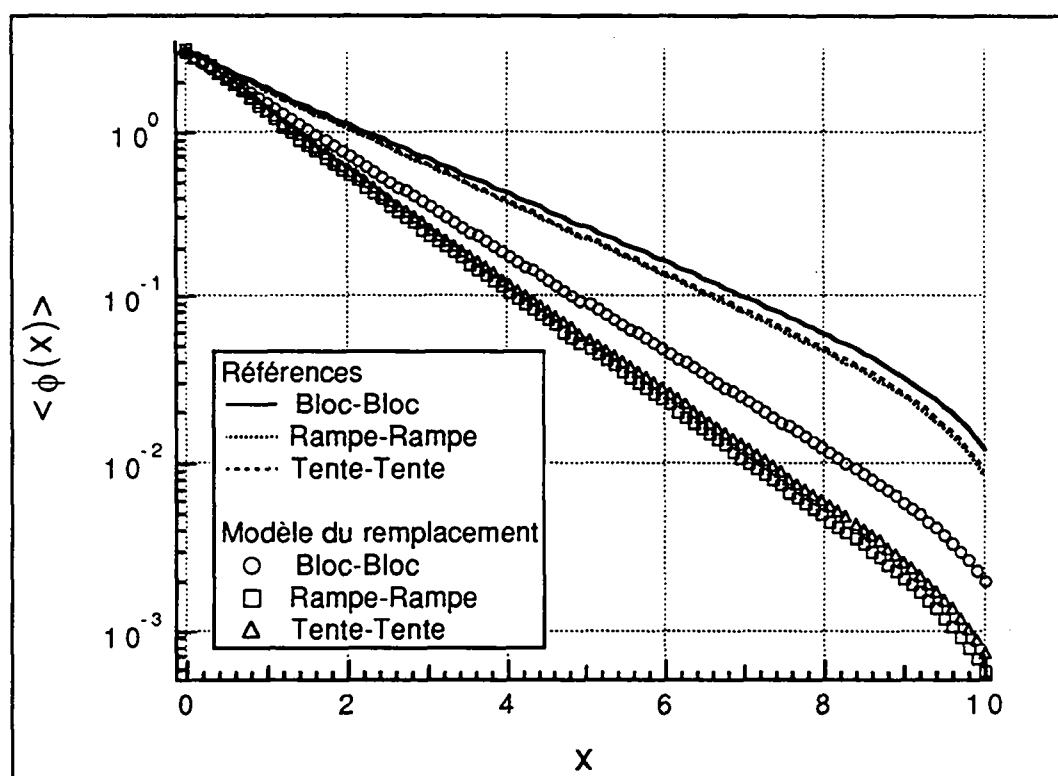


Figure 4.10: Comparaison de $\langle \phi(x) \rangle$ entre le modèle du remplacement et les résultats de référence pour plusieurs processus dans le cas 1c avec $L=10$.

Le seul modèle capable de prédire plus ou moins correctement les processus de remplacement différents des processus Markoviens à deux états pour des problèmes de transport stochastique avec diffusion est le modèle du remplacement (standard). Les figures

4.10 et 4.11 présentent deux cas typiques de distribution de $\langle \phi(x) \rangle$ pour trois processus de remplacement: Bloc-Bloc, Rampe-Rampe et Tente-Tente. En analysant ces résultats et de nombreux autres non présentés dans ce texte, on constate que la précision de ce modèle varie fortement selon les cas étudiés. Afin d'essayer d'améliorer la précision de ce modèle, nous avons apportés des modifications à la troncature des équations de second ordre. Ces modifications décrites au § 4.2.2 sont testées dans le paragraphe qui suit.

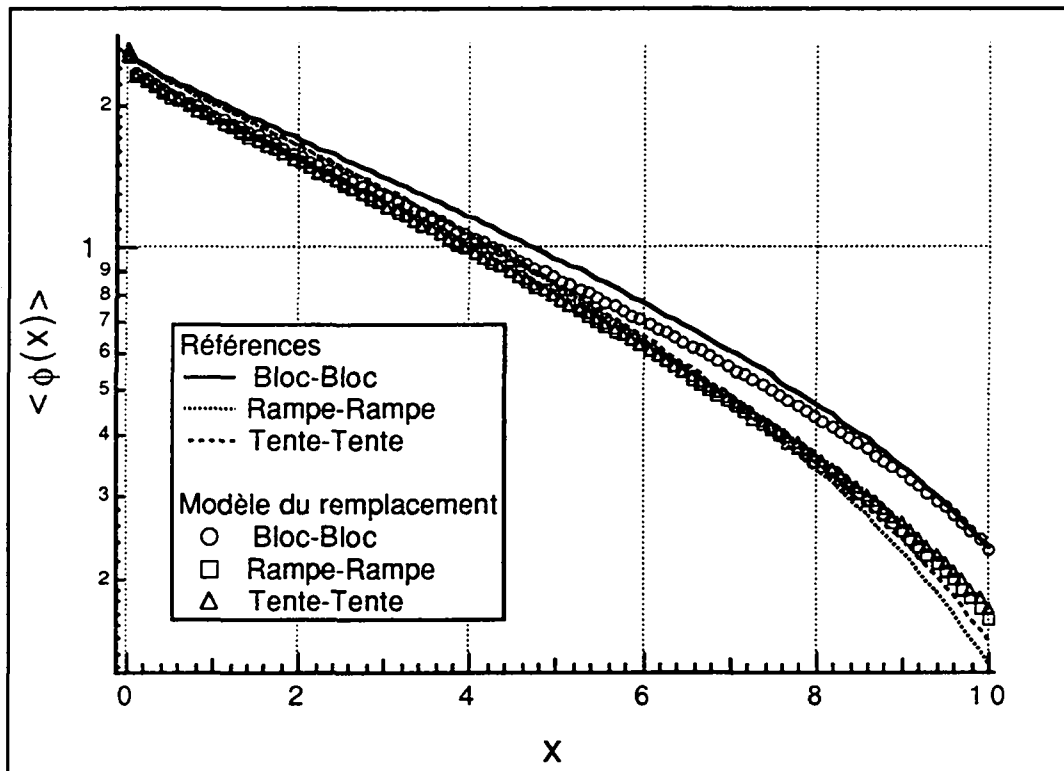


Figure 4.11: Comparaison de $\langle \phi(x) \rangle$ entre le modèle du remplacement et les résultats de référence pour plusieurs processus dans le cas 2b avec $L=10$.

4.3.2 Validité des modifications du modèle du remplacement.

Pour la comparaison entre les modèles du remplacement standard et modifié, le processus de remplacement Tente-Tente a été choisi pour décrire le mélange des deux matériaux du milieu hôte. La distribution tente peut modéliser, par exemple, la distribution de longueur de corde de grains de matériau dans un milieu hôte, de bulles d'eau en ébullition ou l'épaisseur des fentes d'eau dans un Corium. À l'exception des cas 1b et 1c, le nouveau modèle donne de

meilleures valeurs pour la distribution du flux scalaire moyen $\langle \phi(x) \rangle$ et des flux scalaires de matériau $\phi_\alpha(x)$ et $\phi_\beta(x)$. Remarquons que dans les cas 1 les longueurs moyennes de corde sont inférieures ou égales au libre parcours moyen des neutrons. Les figures 4.12 et 4.13 montrent des résultats numériques pour le flux scalaire moyen $\langle \phi(x) \rangle$. Les deux figures présentent quatre courbes: un résultat de référence⁸⁷, le résultat du modèle du remplacement standard et deux résultats du modèle modifié. Ces derniers ont été obtenus avec les paramètres d'ajustement $\chi_\alpha = \chi_\beta = 1$ et $\chi_\alpha = \chi_\beta = \infty$. Ce dernier choix des paramètres d'ajustement correspond à $\varepsilon_\alpha(y, x) = \varepsilon_\beta(y, x) = 0$ dans les équations (4.15) et (4.16) et donne un modèle similaire au modèle du remplacement mais qui utilise la fermeture Markovienne (4.13) au lieu de la fermeture par interface (4.14). Par la suite on appellera la première variante du modèle ($\chi_\alpha = \chi_\beta = 1$) tout simplement *modèle non ajusté* et la deuxième variante ($\chi_\alpha = \chi_\beta = \infty$) *modèle contraint*.

Une procédure d'ajustement⁹¹ a été utilisée pour minimiser la "somme" des carrés des erreurs⁹² des flux de matériaux:

$$\int_0^L |\langle \psi_\alpha(x) \rangle - \psi_\alpha(x)|^2 dx$$

où $\langle \psi_\alpha(x) \rangle$ désigne le flux de matériau des cas de référence et $\psi_\alpha(x)$ le flux de matériau fourni par le modèle.

Les modèles intermédiaires, correspondant à des valeurs positives supérieures à un pour les paramètres χ_α et χ_β , donnent des résultats compris entre le modèle non ajusté et le modèle contraint pour des cas similaires à celui décrit par la figure 4.12, où il n'y a pas d'intersection entre les résultats des modèles et ceux de référence. Dans ce cas, le meilleur modèle correspond au modèle contraint ($\chi_\alpha = \chi_\beta = \infty$). Dans le cas de processus Markoviens à deux états en statistiques homogènes et matériaux homogènes, les modèles contraint et Markovien sont identiques. Cette affirmation est démontrée analytiquement en Annexe G, de plus des résultats numériques ont montré un accord entre les deux modèles jusqu'à la quatrième décimale. Cet écart est dû à la différence de discrétisation spatiale entre les deux modèles.

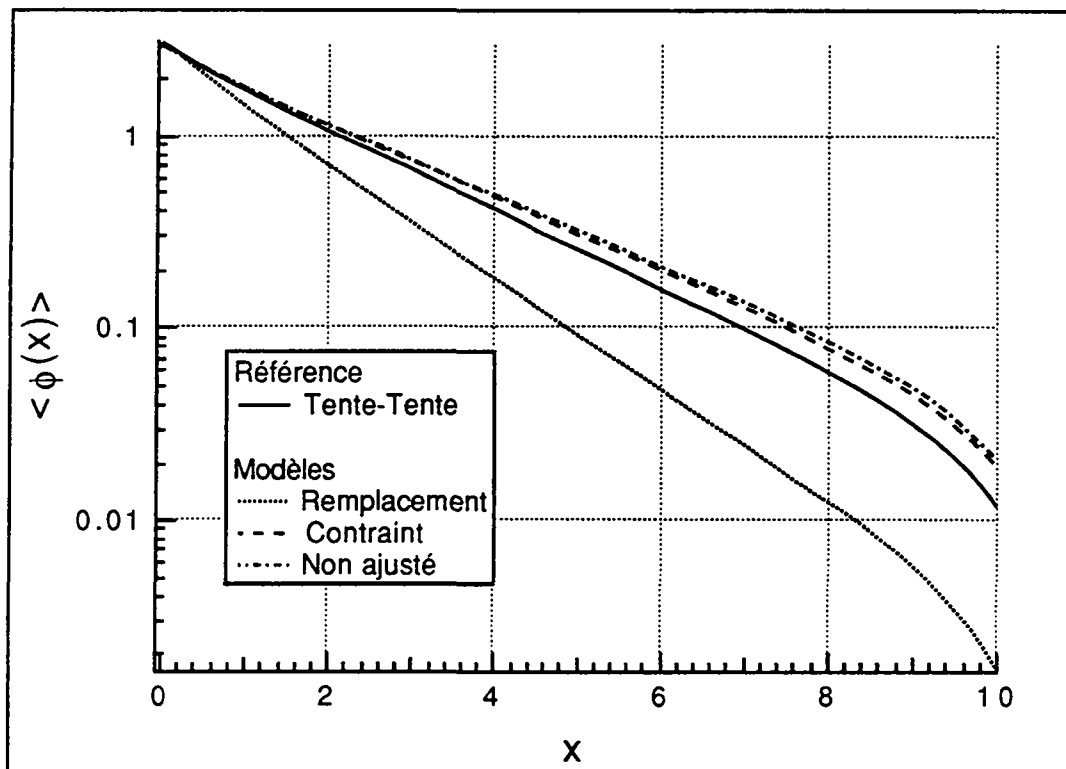


Figure 4.12: Comparaison des flux scalaires moyens $\langle \phi(x) \rangle$ dans le cas 1a avec $L=10$.

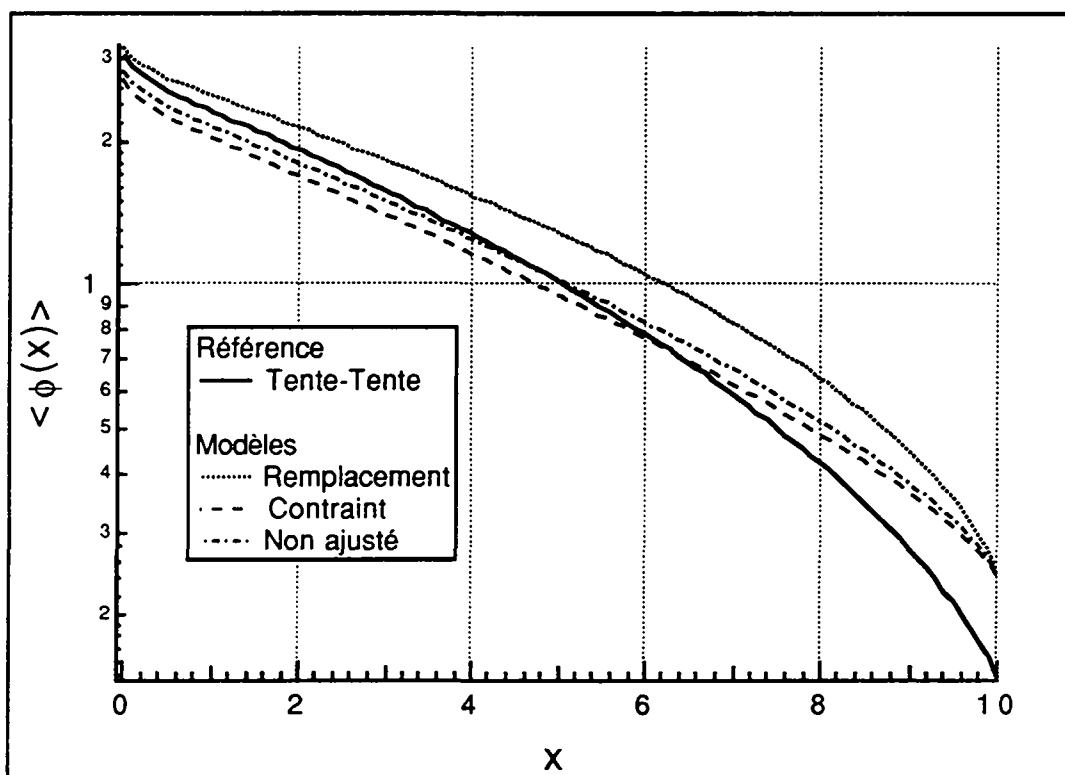


Figure 4.13: Comparaison des flux scalaires moyens $\langle \phi(x) \rangle$ dans le cas 2c avec $L=10$.

Dans les cas similaires à celui décrit par la figure 4.13, où il y a intersection entre les résultats des modèles contraint et non ajusté et ceux de référence, les modèles intermédiaires correspondant à des valeurs positives inférieures à un de χ_α et χ_β donnent des résultats compris entre le modèle non ajusté et le calcul de référence. On notera que les coefficients d'ajustement χ_α et χ_β ne doivent pas être négatifs (voir l'éq. (4.17)), car $\varepsilon(y,x)$ doit être une fonction décroissante de τ/\bar{c} . Le meilleur modèle dans ce cas de figure correspond à des valeurs nulles pour les paramètres d'ajustement ($\chi_\alpha = \chi_\beta = 0$). Malheureusement avec $\chi_\alpha = \chi_\beta = 0$ les modifications apportées au modèle du remplacement créent un modèle qui ne respecte plus la limite des milieux purement absorbants. En effet, avec $\chi_\alpha = \chi_\beta = 0$ les fonctions de fermeture (éq. 4.17) deviennent $\varepsilon_\alpha(y,x) = \varepsilon_\beta(y,x) = 1$. Par conséquent l'expression (4.15) devient

$$\Psi_{\alpha\beta\beta\alpha}(y;x) = \Psi_\alpha(y) .$$

Le modèle ainsi obtenu ne respecte plus le comportement à la limite de milieux sans diffusion pour des processus de remplacement non Markoviens.

4.3.3 Comparaison des modèles en présence de sources.

Toutes les comparaisons effectuées dans ce chapitre ont été réalisées pour des milieux non multiplicateurs et/ou sans sources ($S_\alpha = S_\beta = 0$). Mais dans la pratique il est extrêmement rare qu'il n'y ait aucune source volumique dans le système. Théoriquement l'ajout d'une source à un ou aux deux matériaux ne devrait pas poser de problème pourvu qu'elle soit non stochastique (voir l'éq. (2.15)). Afin de le vérifier numériquement, les conditions aux bords (4.19) ont été modifiées et des sources ont été ajoutées, soit dans le matériau α , soit dans le matériau β ou soit dans les deux. Les nouvelles conditions aux bords pour les cas de référence et les modèles sont

$$\psi(0,\mu) = 0, \quad \mu > 0; \quad \psi(L,\mu) = 0, \quad \mu < 0.$$

Ainsi le problème correspond à un milieu isolé avec des sources de particules uniquement internes.

La comparaison des cas sans diffusion montre que les modèles sont exacts comme on pouvait s'y attendre. Dans les comparaisons portant sur des matériaux diffusants, dans le cas où un des matériaux est purement absorbant avec une source et où l'autre matériau sans source est purement diffusant, d'excellents résultats ont aussi été constatés pour les modèles du remplacement, non ajusté et contraint comme nous le montre la figure 4.14. Dans cette figure sont représentés les trois modèles avec un calcul de référence pour un processus de mélange Tente-Tente dans le cas 1b (cf. tableau 3.1) avec $S_{\alpha}=0$ et $S_{\beta}=1$. Par contre, dans le cas où le matériau purement absorbant n'a pas de source et le milieu purement diffusant en possède une, les résultats sont très mauvais. En effet dans la figure 4.15, où sont présentés les trois modèles pour un processus de mélange Tente-Tente dans le cas 2a avec $S_{\alpha}=0$ et $S_{\beta}=1$, on constate un facteur 4.5 entre les résultats du modèle du remplacement et le cas de référence, et un facteur 1.5 entre les modèles non ajusté et contraint et la référence. Cette différence de précision entre les deux cas (1b et 2a) peut s'expliquer de la manière suivante. Dans le premier cas les particules émises par la source sont presque entièrement absorbées dans le même matériau et le nombre de particules transférées au second matériau est très faible. Dans le second cas les particules émises dans le matériau purement diffusant sont entièrement transmises au matériau sans source. Dans les trois modèles, le transfert des particules d'un matériau à l'autre est décrit par les équations de second ordre décrivant les flux d'interface. La fermeture de ces équations, qui ont déjà été modifiées une fois, devra encore être améliorée si l'on veut augmenter la précision du modèle non ajusté ou du modèle contraint. Dans les cas intermédiaires à ces deux situations extrêmes, la précision du modèle du remplacement non ajusté contraint est de l'ordre de 10 à 15 %. Par contre, la précision du modèle du remplacement standard est beaucoup plus mauvaise. Elle est de l'ordre de 30 % dans plusieurs résultats non présentés ici.

Ainsi le modèle le plus simple décrivant le mieux le transport stochastique pour un mélange décrit par un processus de remplacement est, dans presque tous les cas, le modèle contraint.

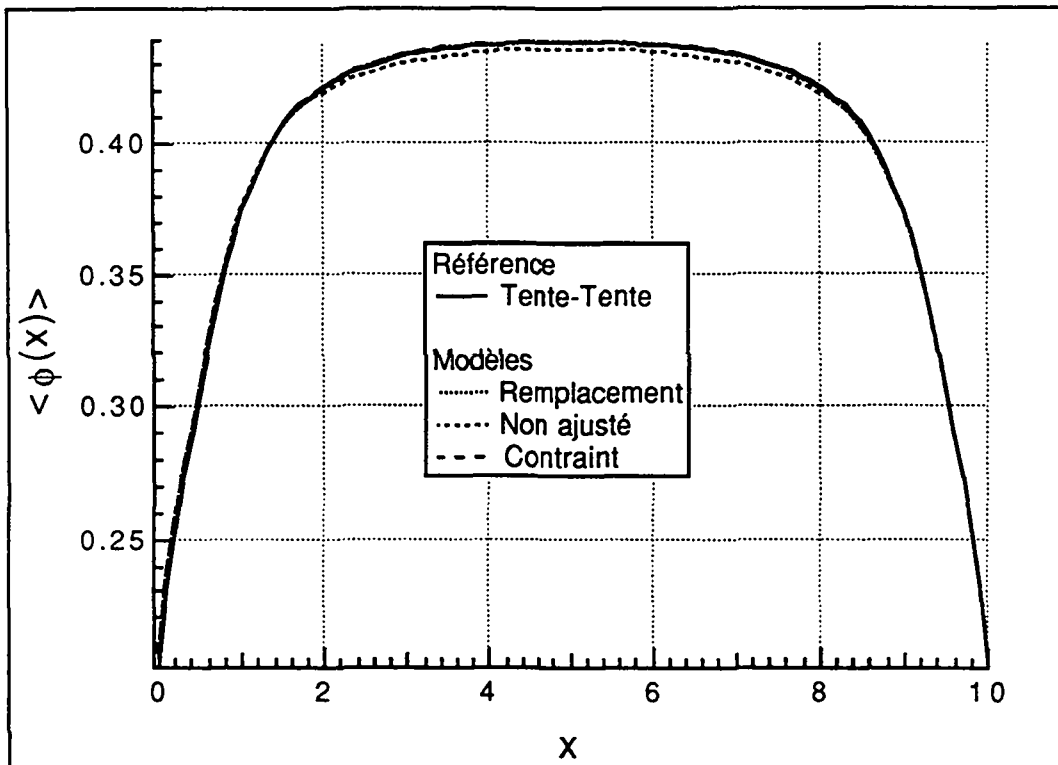


Figure 4.14: Comparaison des flux scalaires moyens $\langle \phi(x) \rangle$ dans le cas 1b avec $S_\alpha=0$ et $S_\beta=1$ et $L=10$ pour un processus Tente-Tente.

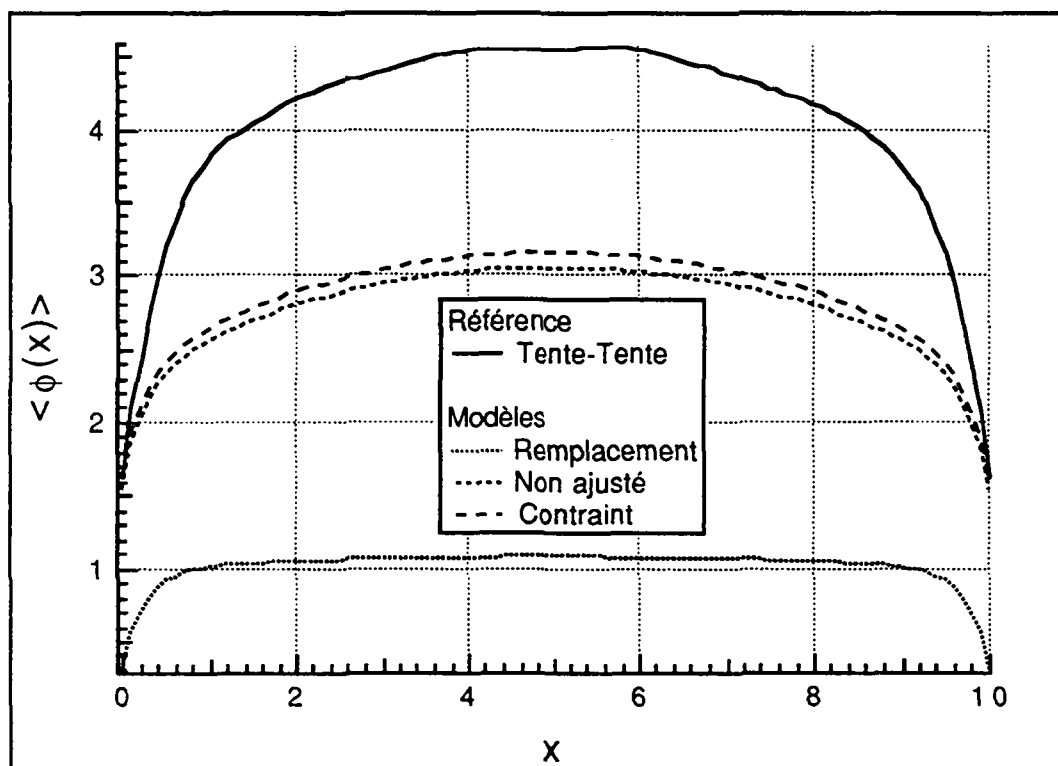


Figure 4.15: Comparaison des flux scalaires moyens $\langle \phi(x) \rangle$ dans le cas 2a avec $S_\alpha=0$ et $S_\beta=1$ et $L=10$ pour un processus Tente-Tente.

RÉACTIVITÉ D'UN CORIUM SUR UN RÉCUPÉRATEUR PLAN

Dans ce chapitre les calculs de réactivité d'un Corium sur un récupérateur plan sont réalisés à une dimension selon l'axe z en supposant le système infini dans les directions x et y . Cette hypothèse est justifiée si l'on considère le rapport des dimensions. En effet, le Corium est supposé s'étaler de manière uniforme avec une épaisseur de 25 cm sur un récupérateur de 50 m², soit avec un diamètre d'environ 8 m. Avec un système de grandes dimensions selon les directions x et y , les fuites radiales peuvent être négligées. Par conséquent, les valeurs calculées du facteur de multiplication, k_e (éq. (1.2)), seront surestimées.

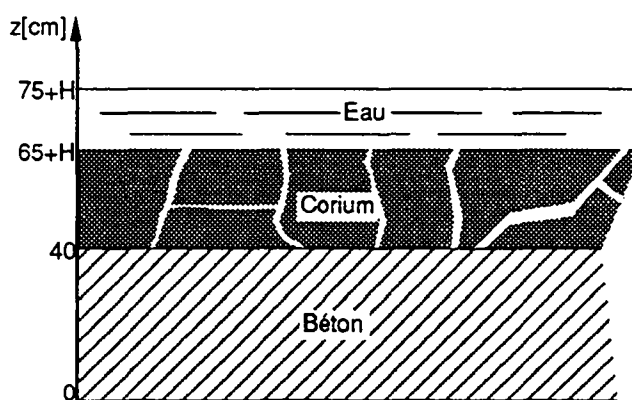


Figure 5.1: Configuration du Corium refroidi à l'eau sur un récupérateur en béton

La configuration du système étudié est décrite par la figure 5.1. Elle consiste en une couche de béton épaisse de 40 cm où vient s'étaler 25 cm de Corium. Au dessus du Corium se trouve une couche d'eau de 10 cm. Ces dimensions ont été choisies d'après une étude

Chapitre 5

paramétrique réalisée récemment.¹⁹ Cette étude montre, à partir de la configuration standard décrite au Chapitre 1 (§ 1.1) que

- i) une épaisseur de 25 cm de Corium produit un k_e maximum,
- ii) une couche d'eau supérieure à 10 cm n'apporte pas un surcroît de réactivité,
- iii) à partir de 40 cm de béton la réactivité du système n'augmente quasiment plus.

La fragmentation du Corium par apparition de fentes d'eau à pour effet d'augmenter l'épaisseur du Corium fragmenté. Cette augmentation, H , est proportionnelle à la fraction d'eau rajoutée. À l'augmentation de l'épaisseur du Corium fragmenté devrait correspondre une diminution de celle de la couche d'eau, ce n'est pas le cas de la configuration étudiée dans la figure 5.1. L'épaisseur d'eau peut être limitée à 10 cm pour des raisons de calcul neutronique comme on l'a vu (ii). Dans la réalité elle est beaucoup plus importante. Elle dépend de la quantité d'eau disponible dans l'enceinte de confinement au moment de l'étalement du Corium sur le récupérateur. Ainsi, quelle que soit la quantité d'eau qui fragmentera le Corium, il en restera toujours assez pour former au moins une épaisseur de 10 cm au-dessus du Corium fragmenté.

Le béton formant le récupérateur est un béton de type puits de fond de cuve, c'est à dire de type siliceux composé de 75% à 80% de SiO_2 et de 1,3% à 1,6% de CaCO_3 . Les caractéristiques et la composition isotopique des différents éléments du béton sont décrites dans les tableaux H.1 et H.2 de l'Annexe H. Dans cette même annexe, tableaux H.3 et H.4, on trouve aussi les caractéristiques et la concentration de l'eau utilisée pour le refroidissement du Corium à une pression de 1 bar. On remarquera la présence dans l'eau de bore naturel à une concentration de 0,1 ppm.

Le Corium fragmenté est formé d'eau et de Corium à proprement parlé. Pour les calculs de réactivité réalisés dans le cadre de ce travail, deux types de Corium, appelé Corium 1 et Corium 2, sont examinés. Dans les deux cas les températures atteintes lors de la formation du Corium sont supposées supérieures à 2500° C. Ainsi les Coriums 1 et 2 peuvent être considérés comme des mélanges homogènes (cf. figure 1.3) des différents éléments du coeur du réacteur sans les produits de fission qui, à ces températures, se sont volatilisés. Pour la formation du Corium 1, on considère d'abord un mélange de 74,4% de combustible et de 25,5% d'oxyde de

zirconium (ZrO_2). Le combustible est un combustible irradié représentatif d'un REP 1300 en fonctionnement normal. En plus de l'oxygène et des différents isotopes d'uranium ce combustible contient aussi plusieurs isotopes de plutonium, de neptunium et d'americium. Ces éléments sont créés par capture neutronique des différents isotopes d'uranium du combustible enrichi irradié.²⁰ L'oxyde de zirconium mélangé au combustible fondu et irradié ne contient pas la totalité du zirconium présent dans un réacteur, notamment celui des gaines des barreaux de combustible. En effet il a été constaté¹³ que, malgré des températures supérieures à $2500^\circ C$, il reste encore une quantité significative de Zirconium à l'état métallique dans les débris fondus des éléments métalliques du coeur. En général la partie métallique (matériaux de structure) d'un coeur de réacteur est formée de 48% de Zircaloy, de 48% d'acier type 304 et de 4% d'inconel.¹⁹ Le Corium 1 utilisé dans nos calculs est un mélange constitué de 28,5% de partie métallique et de 71,5% du mélange combustible- ZrO_2 . Avant l'apparition des fentes d'eau ce Corium occupera, dans notre étude, une épaisseur de 25 cm sur le récupérateur (cf. figure 5.1).

Comme indiqué au Chapitre 1, le Corium et le béton vont se mélanger partiellement à cause de leur interaction.^{12,13} L'apport d'éléments du béton au Corium peut être très important en quantité. Des mélanges allant jusqu'à 2/3 de béton et 1/3 de Corium peuvent être obtenus lors de cette interaction.⁹³ Pour la composition du Corium 2 on considère un mélange homogène constitué de 33,3% de Corium1 et de 66,6% de béton. Ce mélange aura encore, dans nos calculs et avant sa fragmentation, une épaisseur de 25 cm (cf. figure 5.1). Pour les calculs neutroniques l'épaisseur de 40 cm de béton est conservée. Les caractéristiques et la composition isotopique des Corium 1 et 2 sont données dans les tableaux H.5 à H.8 de l'Annexe H.

Pour calculer la réactivité de la configuration décrite par la figure 5.1, il faut homogénéiser le Corium fragmenté. Un calcul direct à une dimension selon l'axe z ne peut pas tenir compte correctement de la présence des fentes d'eau et de leur distribution aléatoire selon l'axe x. Il est donc nécessaire de développer une procédure d'homogénéisation.

5.1 Homogénéisation du Corium fragmenté.

La première méthode qui vient à l'esprit est la méthode classique d'homogénéisation décrite par l'équation (1.3). C'est celle utilisée pour la formation des Coriums 1 et 2. Mais cette homogénéisation n'est justifiée seulement que si les relations (1.4) sont vérifiées, ce qui n'est pas le cas la plupart du temps, notamment avec le Corium fragmenté.

La clef pour trouver des sections efficaces homogènes équivalentes, Σ_{hxg} (h rappelle qu'il y a eu homogénéisation, x représente une section efficace totale, de diffusion, de fission ou de transfert, et g désigne le groupe d'énergie considéré), est d'exiger que certains taux de réaction soient préservés.⁹⁴ On suppose que les sections efficaces multigroupes pour le problème concerné sont connues. L'obtention des sections efficaces multigroupes qui préservent les taux de réaction intégrés sur un groupe d'énergie et sur la région hétérogène à homogénéiser est un problème important et complexe⁹⁴ qui a retenu et continue à exiger énormément d'attention.⁹⁵ Ce problème pour des milieux classiques et stochastiques est exposé dans le § 5.3.

Pour obtenir des sections équivalentes spatialement constantes sur une grande région, on utilise une méthode très largement répandue.^{24,49,94,96,97} Cette méthode pondère les sections efficaces dans chaque région V_i à homogénéiser par le flux scalaire à l'intérieur des sous-volumes V_i :

$$\Sigma_{hxg} = \frac{\int_{V_i} \Sigma_{xg}(\vec{r}) \phi_g(\vec{r}) dV}{\int_{V_i} \phi_g(\vec{r}) dV} . \quad (5.1)$$

Si on admet que les $\Sigma_{xg}(\vec{r})$ sont connues (le problème des résonances est pour l'instant ignoré), alors la définition (5.1) est correcte mais n'est d'aucune utilité car elle suppose le problème résolu. On peut néanmoins sortir de ce cercle vicieux, si l'on considère un grand nombre de zones V_i identiques.⁹⁷ Ceci revient à considérer deux échelles pour l'espace et à poser $\phi_g(\vec{r}) = \Phi_g(\vec{r}) \phi_g(\vec{r})$ où Φ_g le flux macroscopique ignore l'hétérogénéité dans V_i alors que ϕ_g , la fonction de structure fine, est là pour en tenir compte. On s'aperçoit alors que (5.1) ne fait

plus intervenir que les $\phi_g(\vec{r})$ puisque Φ_g est par définition constant dans V_i . Tout ceci revient à dire que ϕ_g est calculé seulement dans V_i ou plus généralement que l'on considère un milieu infini à structure répétitive V_i ($\Phi_g(\vec{r}) = \text{constante partout}$); c'est ainsi que sont calculés les réseaux des réacteurs. Une fois connues les $\phi_g(\vec{r})$ et donc les Σ_{hxg} à travers (5.1), le système réel (fini) peut être étudié à l'aide de ces sections efficaces homogénéisées.

L'équation (5.1) est utilisable à condition de connaître en chaque point les sections efficaces de base $\Sigma_{xg}(\vec{r})$. Dans le cas du Corium fragmenté, les Σ_{xg} sont seulement connues, par homogénéisation si nécessaire, pour chacun des deux matériaux du milieu: Corium 1 ou 2 d'une part, eau d'autre part. Mais la position de ces matériaux n'est définie qu'aléatoirement; il est donc impossible de connaître à l'avance Σ_{xg} en tout point. Il faut donc modifier l'éq. (5.1) pour le transport stochastique en s'appuyant sur (2.9):

$$\Sigma_{hxg} = \frac{\int_{V_i} \sum_{\alpha} p_{\alpha} \Sigma_{x\alpha g} \phi_{\alpha g}(\vec{r}) dV}{\int_{V_i} \langle \phi(\vec{r}) \rangle dV}, \quad (5.2)$$

où les p_{α} sont les probabilités de matériau (éq. (2.10)) et les $\phi_{\alpha g}$ sont les flux scalaires de matériau (éq. (2.11)). En chaque point d'un sous-volume V_i , la présence d'un matériau est déterminée par sa probabilité p_{α} . Si les probabilités de matériau sont les mêmes dans tout le volume V , les V_i sont "identiques" et ainsi les taux de réaction moyens seront conservés dans une description stochastique du transport de neutrons. Cette philosophie est tout à fait cohérente avec la précédente; autrement dit les $\phi_{\alpha g}(\vec{r})$ vont être calculés pour un milieu infini dans toutes les directions (flux macroscopiques constants).

Le calcul des sections Σ_{hxg} (5.2) nécessite la connaissance des flux scalaires de matériau $\phi_{\alpha g}(\vec{r})$ du groupe d'énergie g . Pour obtenir les $\phi_{\alpha g}(\vec{r})$ on utilise un des modèles développés dans le chapitre précédent. Ces modèles n'existent que pour une géométrie à une dimension. Ceci nous oblige donc à modéliser le Corium fragmenté comme une succession de plaques d'épaisseur aléatoire de Corium et d'eau en alternance le long de l'axe des x . Les fuites dans les autres directions sont négligées en considérant le système infini selon les axes y et z . Pour un

Chapitre 5

récupérateur plan refroidi par de l'eau, la longueur du système en x est de 8 m environ. C'est très grand et le système peut aussi être considéré comme infini le long de l'axe x ce qui de toute façon est impératif si l'on veut respecter les règles d'homogénéisation édictées plus haut. La géométrie modélisant le Corium fragmenté est décrite dans la figure 5.2. Elle consiste en une succession infinie de plaques de Corium et d'eau en alternance, d'épaisseur aléatoire et de dimensions infinies dans les directions y et z. En milieu infini l'équation (5.2) devient

$$\Sigma_{hxg} = \sum_{\alpha} K_{\alpha g} \Sigma_{x\alpha g} \quad (5.3)$$

où

$$K_{\alpha g} = \frac{p_{\alpha} \phi_{\alpha g}}{\langle \phi \rangle} .$$

Les flux de matériau $\phi_{\alpha g}$ sont obtenus par la résolution d'un modèle multigroupe du transport stochastique en milieu infini.

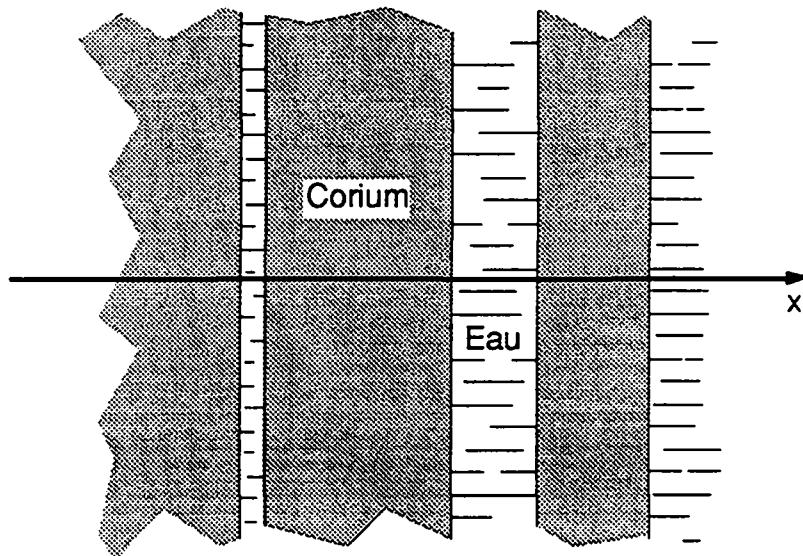


Figure 5.2: Modélisation du Corium fragmenté

5.2 Modélisation du transport stochastique multigroupe en milieu infini.

Parmi tous les modèles développés dans ce travail ou existants dans la littérature, on choisit le modèle intégral contraint (§4.3.2), car il est le plus simple et un des plus précis pour décrire le transport monoénergétique de particules dans un mélange de matériau régi par un processus équilibré de remplacement alterné. Dans des cas pratiques, il est souvent impossible d'appliquer un modèle à un groupe. Si l'on ne possède aucune information sur les spectres neutroniques, on ne voit pas comment déterminer un jeu de sections efficaces moyennes, applicable à une population de neutrons dont les énergies vont de zéro à quelques MeV. On doit donc en principe calculer les flux de matériau du modèle en fonction de l'espace, comme on l'a fait dans les chapitres précédents, mais aussi en fonction de l'énergie. Ainsi les équations (4.22a) et (4.23), avec $\chi \rightarrow \infty$, du modèle contraint en géométrie plane pour un milieu multiplicateur tel le Corium fragmenté deviennent

$$\begin{aligned} \Psi_{\alpha}(x, \mu, E) &= e^{-\frac{\Sigma_{\alpha}(E)x}{|\mu|}} R_{\alpha}(x) \Psi_{bd}(\mu, E) + \int_0^x e^{-\frac{\Sigma_{\alpha}(E)(x-y)}{|\mu|}} \left\{ f_{\alpha}(x-y) \Psi_{\beta\alpha}(y, \mu, E) \right. \\ &\quad \left. + \frac{R_{\alpha}(x-y)}{|\mu|} S_{\alpha}(y, E) \right\} dy, \\ \Psi_{\alpha\beta}(x, \mu, E) &= e^{-\frac{\Sigma_{\alpha}(E)x}{|\mu|}} Q_{\alpha}(x) \Psi_{bd}(\mu, E) + \int_0^x e^{-\frac{\Sigma_{\alpha}(E)(x-y)}{|\mu|}} \left\{ f_{\alpha}(x-y) \Psi_{\beta\alpha}(y, \mu, E) \right. \\ &\quad \left. + \frac{Q_{\alpha}(x-y)}{|\mu|} S_{\alpha}(y, E) \right\} dy, \end{aligned} \tag{5.4}$$

avec

$$S_{\alpha}(y, E) = \frac{1}{k_{\infty}} \sum_{i=1}^{ni} X^i(E) \int_0^{\infty} \bar{\nu} \Sigma_{f\alpha}^i(E') \phi_{\alpha}(y, E') dE' + \int_0^{\infty} \Sigma_{s\alpha}(E' \rightarrow E) \phi_{\alpha}(y, E') dE' \tag{5.5}$$

qui généralise les termes de diffusion des études monocinétiques (§4.2) et

$$\phi_{\alpha}(y, E') = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \Psi_{\alpha}(y, \mu, E') d\mu$$

qui est la nouvelle expression des flux scalaires. En outre k_{∞} est la valeur propre du problème de criticité^{1,45} du milieu multiplicateur étudié, ni le nombre d'isotopes fissiles présents dans le

Corium et $\bar{\nu}$ le nombre moyen de neutrons émis par fission. Par exemple, pour l' U^{235} , $\bar{\nu}$ vaut environ 2.5.¹ Par ailleurs $X^i(E)$ est le spectre des neutrons de fission de l'isotope i , $\Sigma_{fa}^i(E')$ la section efficace de fission de l'isotope i et $\Sigma_{sa}(E' \rightarrow E)$ la section efficace de diffusion isotrope des neutrons de l'énergie E' vers l'énergie E . Dans les équations (5.4) et (5.5) on se limite au cas de la diffusion isotrope afin de ne pas alourdir les équations. L'extension du problème au cas de la diffusion anisotrope est immédiat comme dans le cas classique. Les équations du modèle contraint (5.4) avec (5.5) représentent une infinité d'équations pour la variable énergie. Pour résoudre ce problème on utilise, parmi toutes les approches possibles, la théorie multigroupe^{1,45}. Cette théorie est de loin la plus populaire et pratiquement tous les codes numériques actuels reposent sur son formalisme.

Considérons le domaine d'énergie $(0, E_0)$ où E_0 est une énergie au-dessus de laquelle on peut admettre qu'aucun neutron n'est émis (10 à 15 Mev),¹ et divisons ce domaine en G intervalles en introduisant la suite de valeurs E_g , avec $g=1, 2, \dots, G$ (cf. figure 5.3). On dit que les neutrons situés dans la bande d'énergie $E_g \leq E \leq E_{g-1}$ appartiennent au groupe g .

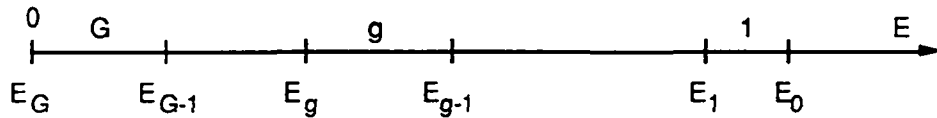


Figure 5.3: Division du domaine d'énergie en G groupes.

Si on intègre les équations (5.4) sur E de E_g à E_{g-1} , on obtient les équations pour le groupe g :

$$\Psi_{\alpha g}(x, \mu) = e^{-\Sigma_{\alpha g} \frac{x}{|\mu|}} R_{\alpha}(x) \Psi_{bdg}(\mu) + \int_0^x e^{-\Sigma_{\alpha g} \frac{(x-y)}{|\mu|}} \left\{ f_{sa}(x-y) \Psi_{\beta \alpha g}(y, \mu) + \frac{R_{\alpha}(x-y)}{|\mu|} S_{\alpha g}(y) \right\} dy,$$

$$\Psi_{\alpha \beta g}(x, \mu) = e^{-\Sigma_{\alpha g} \frac{x}{|\mu|}} Q_{\alpha}(x) \Psi_{bdg}(\mu) + \int_0^x e^{-\Sigma_{\alpha g} \frac{(x-y)}{|\mu|}} \left\{ f_{\alpha}(x-y) \Psi_{\beta \alpha g}(y, \mu) + \frac{Q_{\alpha}(x-y)}{|\mu|} S_{\alpha g}(y) \right\} dy,$$

(5.6)

avec

$$S_{\alpha g}(y) = \frac{1}{k_{\infty}} \sum_{i=1}^{ni} X_g^i \sum_{h=1}^G \bar{v} \Sigma_{f\alpha h}^i \phi_{\alpha h}(y) + \sum_{h=1}^G \Sigma_{s\alpha}(h \rightarrow g) \phi_{\alpha h}(y), \quad (5.7)$$

où l'on a posé

$$\begin{Bmatrix} \Psi_{\alpha g}(x, \mu) \\ \Psi_{\alpha \beta g}(x, \mu) \\ \Psi_{bdg}(\mu) \end{Bmatrix} = \int_{E_g}^{E_{g-1}} \begin{Bmatrix} \Psi_{\alpha}(x, \mu, E) \\ \Psi_{\alpha \beta}(x, \mu, E) \\ \Psi_{bd}(\mu, E) \end{Bmatrix} dE$$

ainsi que

$$\Sigma_{x\alpha g} = \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \Sigma_{x\alpha}(E) \phi_{\alpha}(x, E) dE}{\phi_{\alpha g}(x)}, \quad (5.8)$$

où x représente soit t , soit f ou soit s . Les grandeurs $\Psi_{\alpha g}(x, \mu)$, $\Psi_{\alpha \beta g}(x, \mu)$ et $\Psi_{bdg}(\mu)$ ont les significations usuelles mais s'appliquent seulement aux neutrons du groupe g . Quant aux sections efficaces macroscopiques $\Sigma_{x\alpha g}$, elles font intervenir le spectre $\phi_{\alpha}(x, E)$, dans l'intervalle (E_g, E_{g-1}) , qui dépend de la géométrie. Dans ce qui suit, les sections efficaces multigroupes, $\Sigma_{x\alpha g}$, sont supposées connues. Cette hypothèse n'est pas évidente dans des calculs classiques. Elle l'est encore moins pour du transport stochastique comme on le montre au § 5.3.

Pour alléger la notation l'indice g est omis dans les équations suivantes sauf s'il y a possibilité de confusion. Les équations (5.6) sont écrites pour une géométrie finie mais, puisqu'on doit s'en tenir à un système infini dans toutes les directions, il faut remplacer les bornes inférieures des intégrales $x=0$ par $x=-\infty$ et supprimer la contribution des flux angulaires entrants Ψ_{bd} . En utilisant le fait que Ψ_{α} et $\Psi_{\beta\alpha}$ sont invariants par translation on obtient les équations

$$\Psi_{\alpha}(\mu) = \int_{-\infty}^x e^{-\Sigma_{\alpha} \frac{(x-y)}{|\mu|}} \left\{ f_{s\alpha}(x-y) \Psi_{\beta\alpha}(\mu) + \frac{R_{\alpha}(x-y)}{|\mu|} S_{\alpha} \right\} dy,$$

$$\Psi_{\alpha\beta}(\mu) = \int_{-\infty}^x e^{-\Sigma_{\alpha} \frac{(x-y)}{|\mu|}} \left\{ f_{\alpha}(x-y) \Psi_{\beta\alpha}(\mu) + \frac{Q_{\alpha}(x-y)}{|\mu|} S_{\alpha} \right\} dy.$$

Chapitre 5

Si on effectue le changement de variables $z=x-y$ ces équations deviennent

$$\begin{aligned}\Psi_{\alpha}(\mu) &= \int_0^{\infty} e^{-\Sigma_{\alpha} \frac{z}{|\mu|}} f_{s\alpha}(z) dz \Psi_{\beta\alpha}(\mu) + \int_0^{\infty} e^{-\Sigma_{\alpha} \frac{z}{|\mu|}} \frac{R_{\alpha}(z)}{|\mu|} dz S_{\alpha}, \\ \Psi_{\alpha\beta}(\mu) &= \int_0^{\infty} e^{-\Sigma_{\alpha} \frac{z}{|\mu|}} f_{\alpha}(z) dz \Psi_{\beta\alpha}(\mu) + \int_0^{\infty} e^{-\Sigma_{\alpha} \frac{z}{|\mu|}} \frac{Q_{\alpha}(z)}{|\mu|} dz S_{\alpha}.\end{aligned}\tag{5.9}$$

Afin de simplifier l'écriture des équations du modèle contraint multigroupe en milieu infini on définit les transformées de Laplace suivantes:

$$\begin{aligned}F_{s\alpha}(\mu) &= \int_0^{\infty} e^{-\Sigma_{\alpha} \frac{z}{|\mu|}} f_{s\alpha}(z) dz, \\ R_{\alpha}(\mu) &= \frac{1}{|\mu|} \int_0^{\infty} e^{-\Sigma_{\alpha} \frac{z}{|\mu|}} R_{\alpha}(z) dz, \\ F_{\alpha}(\mu) &= \int_0^{\infty} e^{-\Sigma_{\alpha} \frac{z}{|\mu|}} f_{\alpha}(z) dz, \\ Q_{\alpha}(\mu) &= \frac{1}{|\mu|} \int_0^{\infty} e^{-\Sigma_{\alpha} \frac{z}{|\mu|}} Q_{\alpha}(z) dz.\end{aligned}\tag{5.10}$$

Ces quatre grandeurs ne sont pas indépendantes. En effet, si l'on utilise les définitions du §3.1 ainsi que les propriétés des «transformées de Laplace», on peut montrer que

$$\begin{aligned}Q_{\alpha}(\mu) &= \frac{1 - F_{\alpha}(\mu)}{\Sigma_{\alpha}}, \\ F_{s\alpha}(\mu) &= \frac{|\mu|}{\lambda_{\alpha}} Q_{\alpha}(\mu) = \frac{|\mu|}{\lambda_{\alpha} \Sigma_{\alpha}} (1 - F_{\alpha}(\mu)), \\ R_{\alpha}(\mu) &= \frac{1 - F_{s\alpha}(\mu)}{\Sigma_{\alpha}} = \frac{1}{\Sigma_{\alpha}} \left[1 - \frac{|\mu|}{\lambda_{\alpha} \Sigma_{\alpha}} (1 - F_{\alpha}(\mu)) \right].\end{aligned}\tag{5.11}$$

Pour le calcul des quatre grandeurs définies par les éq. (5.10), il suffit ainsi de calculer la transformée de Laplace de la fonction densité de distribution $f(z)$ du matériau concerné. Les transformées de Laplace des distributions $f(z)$ utilisées dans ce travail sont calculées dans

l'Annexe D. En introduisant les définitions (5.10) dans les équations (5.9) on obtient la description du modèle contraint multigroupe en milieu infini:

$$\Psi_{\alpha}(\mu) = F_{s_{\alpha}}(\mu)\Psi_{\beta\alpha}(\mu) + R_{\alpha}(\mu)S_{\alpha} , \quad (5.12)$$

$$\Psi_{\alpha\beta}(\mu) = F_{\alpha}(\mu)\Psi_{\beta\alpha}(\mu) + Q_{\alpha}(\mu)S_{\alpha} . \quad (5.13)$$

En passant du problème de transmission au problème du milieu isolé avec des sources volumiques fixes (cf. Chapitre 4), une dégradation de la précision des modèles a été constatée. Ainsi, il ne serait pas inutile de pouvoir comparer le modèle contraint multigroupe en milieu infini ou au moins le modèle contraint à un groupe en milieu infini avec des cas de référence. La première idée de cas de référence qui vient à l'esprit est de prendre le même système que celui utilisé au § 4.3.3. C'est à dire, un système de géométrie de largeur L avec, cette fois, des conditions aux bords de réflexion pour simuler un milieu infini. Malheureusement, le cas de référence que l'on obtient n'est pas celui pour un processus équilibré de remplacement alterné. Le processus de remplacement décrit, lorsque les conditions aux bords sont celles de réflexion, est un processus périodique de période L. Ces derniers processus ne sont qu'un sous-ensemble particulier de l'ensemble des processus équilibrés de remplacement alterné. Si $L \rightarrow \infty$, alors le processus décrit est bien un processus de remplacement. Une autre possibilité de cas de référence consisterait à résoudre la hiérarchie d'équations décrivant le transport stochastique en milieu infini avec une troncature d'ordre supérieur à celle décrite par les équations (5.12) et (5.13). Cela ne devrait pas poser trop de problèmes car les moments statistiques, quel que soit l'ordre de l'équation, restent élémentaires dans le cas des processus de remplacement.

Les équations du modèle contraint peuvent encore être simplifiées. Le système couplé des deux équations des flux d'interface (5.13) peut être résolu directement, on trouve:

$$\Psi_{\alpha\beta}(\mu) = \frac{1}{1 - F_{\alpha}(\mu)F_{\beta}(\mu)} (F_{\alpha}(\mu)Q_{\beta}(\mu)S_{\beta} + Q_{\alpha}(\mu)S_{\alpha}),$$

$$\Psi_{\beta\alpha}(\mu) = \frac{1}{1 - F_{\alpha}(\mu)F_{\beta}(\mu)} (F_{\beta}(\mu)Q_{\alpha}(\mu)S_{\alpha} + Q_{\beta}(\mu)S_{\beta}).$$

On remarquera que la solution des flux d'interface est symétrique dans les indices α et β . En introduisant ces valeurs des flux d'interface dans l'équation du flux de matériau (5.12) et en regroupant les termes on obtient

$$\Psi_{\alpha}(\mu) = \left(\frac{F_{s\alpha}(\mu)F_{\beta}(\mu)Q_{\alpha}(\mu)}{1 - F_{\alpha}(\mu)F_{\beta}(\mu)} + R_{\alpha}(\mu) \right) S_{\alpha} + \frac{F_{s\alpha}(\mu)Q_{\beta}(\mu)}{1 - F_{\alpha}(\mu)F_{\beta}(\mu)} S_{\beta}.$$

Les coefficients qui multiplient les termes sources peuvent s'exprimer uniquement en fonction des F_{α} à l'aide des relations (5.11) et deviennent, après un peu d'algèbre,

$$\frac{F_{s\alpha}(\mu)F_{\beta}(\mu)Q_{\alpha}(\mu)}{1 - F_{\alpha}(\mu)F_{\beta}(\mu)} + R_{\alpha}(\mu) = \frac{1}{\Sigma_{i\alpha}} \left[1 - \frac{Y(\mu)}{\lambda_{\alpha}\Sigma_{i\alpha}} \right],$$

$$\frac{F_{s\alpha}(\mu)Q_{\beta}(\mu)}{1 - F_{\alpha}(\mu)F_{\beta}(\mu)} = \frac{1}{\Sigma_{i\beta}} \left[\frac{Y(\mu)}{\lambda_{\alpha}\Sigma_{i\alpha}} \right],$$

où

$$Y(\mu) = |\mu| \frac{(1 - F_{\alpha}(\mu))(1 - F_{\beta}(\mu))}{1 - F_{\alpha}(\mu)F_{\beta}(\mu)}.$$

Le modèle contraint multigroupe en milieu infini à deux matériaux est entièrement défini par les deux équations des flux de matériau:

$$\Psi_{\alpha}(\mu) = \frac{S_{\alpha}}{\Sigma_{i\alpha}} + \frac{Y(\mu)}{\lambda_{\alpha}\Sigma_{i\alpha}} \left(\frac{S_{\beta}}{\Sigma_{i\beta}} - \frac{S_{\alpha}}{\Sigma_{i\alpha}} \right), \quad (5.14)$$

$$\Psi_{\beta}(\mu) = \frac{S_{\beta}}{\Sigma_{i\beta}} - \frac{Y(\mu)}{\lambda_{\beta}\Sigma_{i\beta}} \left(\frac{S_{\beta}}{\Sigma_{i\beta}} - \frac{S_{\alpha}}{\Sigma_{i\alpha}} \right). \quad (5.15)$$

En fait, l'une de ces deux équations peut être remplacée par une expression plus simple. En effet, en multipliant l'équation (5.14) par $\lambda_{\alpha}\Sigma_{i\alpha}$, l'équation (5.15) par $\lambda_{\beta}\Sigma_{i\beta}$, en additionnant ces deux équations et en multipliant le résultat par $(1/(\lambda_{\alpha} + \lambda_{\beta}))$ on obtient la relation de conservation

$$p_{\alpha}\Sigma_{i\alpha}\Psi_{\alpha}(\mu) + p_{\beta}\Sigma_{i\beta}\Psi_{\beta}(\mu) = p_{\alpha}S_{\alpha} + p_{\beta}S_{\beta}. \quad (5.16)$$

Réactivité d'un Corium sur un récupérateur plan

Le modèle contraint en milieu infini, défini par les équations (5.14) et (5.15), respecte la limite de deux matériaux identiques, pouvant être distribués différemment. Dans ce cas on obtient la solution attendue du transport pour le groupe en milieu homogène infini:

$$\phi = \frac{S_{ext}}{\Sigma_a},$$

où Σ_a est la section efficace macroscopique d'absorption et S_{ext} la source extérieure au groupe. Pour démontrer cela, on sépare en deux termes l'expression de la source (5.7) qui devient, pour un milieu infini,

$$\sum_{h=1}^G \Sigma_{s\alpha}(h \rightarrow g)\phi_{\alpha h} = \sum_{\substack{h=1 \\ h \neq g}}^G \Sigma_{s\alpha}(h \rightarrow g)\phi_{\alpha h} + \Sigma_{s\alpha}(g \rightarrow g)\phi_{\alpha g}.$$

On réécrit (5.7)

$$S_{\alpha g} = S_{ext\alpha g} + \Sigma_{s\alpha}(g \rightarrow g)\phi_{\alpha g}. \quad (5.17)$$

Si on suppose que dans cette limite, en omettant l'indice du groupe,

$$S_{\alpha} = S_{\beta}. \quad (5.18)$$

Il est alors très facile de vérifier que les équations (5.14) et (5.15) conduisent au résultat escompté

$$\phi_{\beta} = \phi_{\alpha} = \frac{S_{ext}}{\Sigma_a}$$

et que, à l'aide de ce résultat, on confirme l'hypothèse (5.18) dans l'équation (5.17).

Les équations (5.14) et (5.15), du groupe g , du modèle contraint en milieu infini avec le terme source (5.20) peut se résoudre avec une quadrature de Gauss-Legendre à N points en μ et des itérations sur les termes sources. Il existe aussi une méthode analytique plus élégante. Elle est décrite dans l'Annexe I pour un milieu composé de plusieurs matériaux avec diffusion anisotrope.

5.3 Sections efficaces multigroupes et autoprotection.

Les équations du modèle contraint multigroupe en milieu infini (5.14) et (5.15) ne sont valides que si l'on dispose des sections efficaces multigroupes obtenues par l'équation (5.8). Ces sections multigroupes $\Sigma_{\alpha g}$ dépendent du flux scalaire $\phi_{\alpha}(x,E)$ et des sections $\Sigma_{\alpha}(E)$ qui sont des fonctions continues qui peuvent varier très rapidement avec l'énergie (résonances). Classiquement, la difficulté de cette définition réside dans le fait que, par l'intermédiaire du flux, les taux de réaction et par conséquent les sections multigroupes dépendent de l'espace, sauf pour un milieu infini homogène.

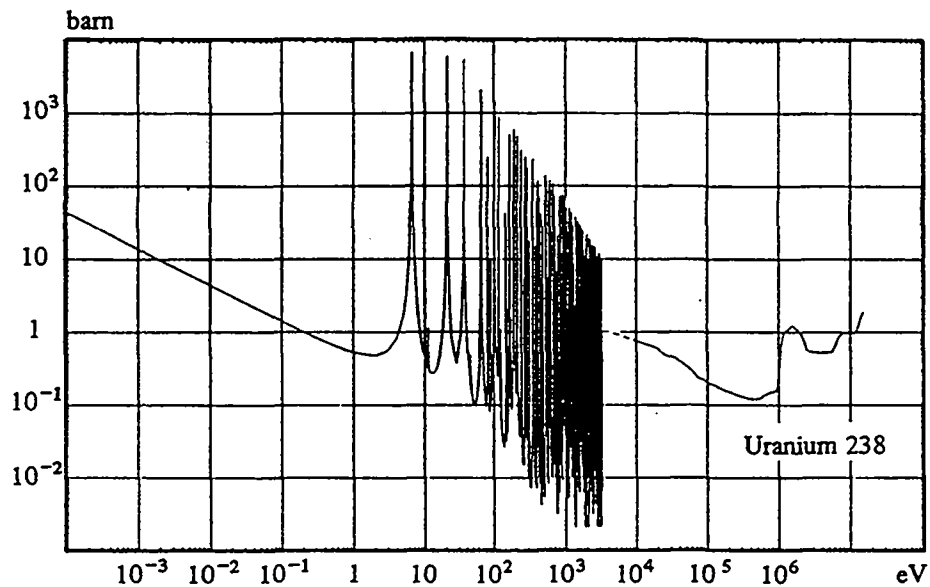


Figure 5.4: Section efficace microscopique d'absorption de l'uranium 238 en fonction de l'énergie des neutrons.

En général les isotopes non résonnants ont des sections efficaces qui varient lentement et de façon régulière avec l'énergie. Leurs sections multigroupes dépendent peu du spectre de pondération. Le flux réel dépendant de l'espace peut donc être remplacé par un flux ne dépendant que de l'énergie. Les sections multigroupes calculées avec un facteur de pondération connu à l'avance sont dites non autoprotégées. Pour les parties non résonnantes des isotopes résonnants, notamment dans le domaine thermique (cf. figure 5.4), les sections varient

lentement avec l'énergie. L'approximation précédente est licite.⁹⁵ Par contre, elle est inacceptable dans le domaine des résonances où les sections efficaces varient brutalement de plusieurs décades comme le montre la figure 5.4. Les sections multigroupes des isotopes résonnants dans les groupes du maillage multigroupe correspondant au domaine des résonances sont dites autoprotégées. Le flux réel à l'intérieur des groupes étant inconnu a priori, il faut procéder à un calcul des spectres fins. Si le matériau est réellement homogène (mélange atomique) et infini, on peut toutefois appliquer l'équation (5.8) à condition de remplacer $\phi_\alpha(x,E)$ par une fonction poids $\psi_\alpha(E)$ qui résulte d'une étude fine du ralentissement des neutrons au niveau des résonances. Il est évident qu'il faut considérer des milliers de points pour être sûr que les résonances sont bien prises en compte. On peut montrer alors,^{95,98} que $\psi_\alpha(E)$ et donc $\Sigma_{\alpha g}$ ne dépendent que d'un *paramètre de dilution* σ_b . Ceci fait, il suffit de dresser une fois pour toute des tables $\Sigma_{\alpha g}(\sigma_b)$.

Par contre, le cas des géométries hétérogènes n'a jamais pu être résolu rigoureusement. On cherche une recette qui consiste à établir une *équivalence* entre milieux hétérogènes et homogènes, ces derniers pouvant être analysés correctement comme on l'a vu. Cette équivalence ne peut être établie malheureusement que dans quelques cas limites (résonances étroites, larges, etc.) et elle revient à incorporer la géométrie du problème dans les paramètres de dilution, en écrivant la conservation des taux de réaction.

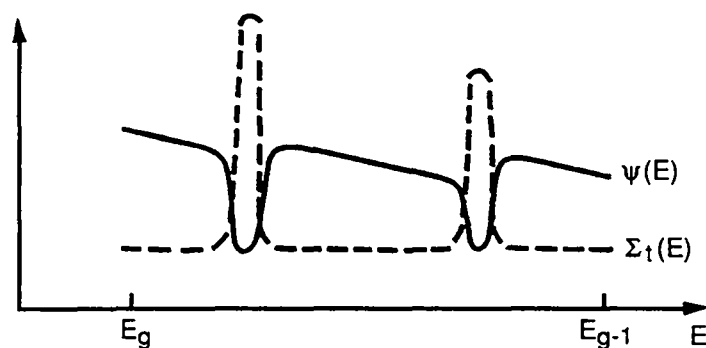


Figure 5.5: Flux en fonction de l'énergie pour un matériau homogène dans le domaine des résonances.

On peut illustrer ce qui précède dans le cas du milieu homogène infini, en considérant la figure 5.5 où sont représentés schématiquement une section efficace totale Σ_t avec des résonances et le flux scalaire, solution de l'équation de ralentissement. Ce flux a une structure à peu près inversement proportionnelle à Σ_t ; c'est la raison pour laquelle bien des codes de préparation des sections efficaces multigroupes se contentent d'injecter dans (5.8) une fonction de poids $1/(E\Sigma_t(E))$. On voit clairement apparaître sur la figure 5.5 une dépression de flux au niveau de chaque résonance et cela fait que l'absorption est considérablement moindre que celle qu'on pouvait attendre: c'est le phénomène d'autoprotection. La figure 5.5 est extrêmement schématique, car en pratique un grand nombre de résonances peuvent apparaître dans un seul groupe.

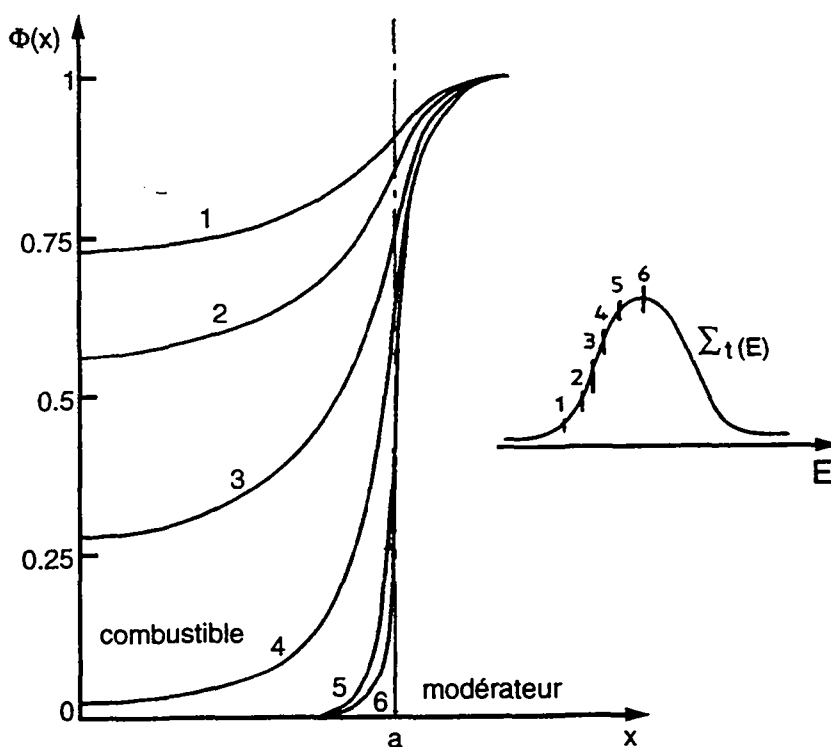


Figure 5.6: Déformation spatiale du flux au niveau d'une résonance.

Dans une géométrie hétérogène, comme celle d'un réacteur, le phénomène de dépression du flux au niveau des résonances se situe aussi dans l'espace. Au niveau d'une résonance, peu

de neutrons atteignent le centre de la zone absorbante (par exemple le combustible dans un réacteur). Le flux de neutrons y est fortement déprimé, ce qui minimise le taux d'absorption. La figure 5.6 illustre ce phénomène. Le flux γ est représenté en fonction de l'espace à différentes énergies.

Le problème du Corium fragmenté, tel que nous le traitons, est un milieu infini hétérogène, mais pas hétérogène au sens ci-dessus où l'emplacement de chaque matériau est connu. En fait, pour une réalisation définie du processus stochastique décrivant le mélange de matériaux, la position de chaque matériau est bien connue comme illustré par la figure 5.7. Dans ce cas on peut avoir $\Sigma_{x\alpha^1_g} = \Sigma_{x\alpha^2_g}$ en dehors du domaine des résonances. Mais dans le domaine des résonances on a $\Sigma_{x\alpha^1_g} \neq \Sigma_{x\alpha^2_g}$ puisque l'autoprotection dépend de l . De plus, dans ce cas, $\Sigma_{x\alpha^1_g}$ et $\Sigma_{x\alpha^2_g}$ devraient dépendre de l'espace dans le matériau α .

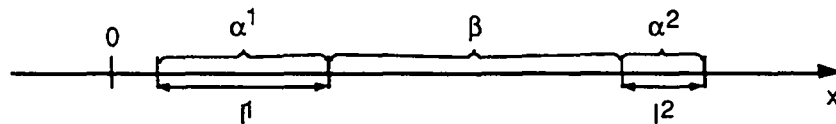


Figure 5.7: Description d'une réalisation possible du processus décrivant le Corium fragmenté.

L'autoprotection dans une configuration donnée, comme par exemple celle de la figure 5.7, dépend du flux dans les régions contenant le Corium et, dans chacune de ces régions, le flux est déterminé non seulement par l'épaisseur de la région, mais aussi par l'épaisseur des couches d'eau environnantes et, par effet Dancoff,¹ par les couches de Corium avoisinantes. Les facteurs les plus importants sont les épaisseurs moyennes des régions de Corium et des couches d'eau aussi bien que la variation de ces épaisseurs autour de la valeur moyenne.

Comme on a essayé de le montrer, l'étude de l'autoprotection des sections efficaces dans le domaine des résonances pour un milieu stochastique reste à approfondir. Une mauvaise autoprotection peut être la cause d'erreurs de ± 2000 pcm dans le calcul du k_e . D'où l'importance du développement d'une théorie de l'autoprotection en milieu stochastique. Cette théorie dépasse le cadre de ce travail où l'on considère les sections efficaces multigroupes comme des données du problème (donc déjà autoprotégées).

5.4 Calcul de la réactivité.

Le calcul de la réactivité d'un Corium sur un récupérateur plan a été effectué à l'aide du code APOLLO II⁹⁹ du Service d'Études des Réacteurs et de Mathématiques Appliquées du Centre d'Études de Saclay du Commissariat à l'Énergie Atomique. Le code APOLLO II est un code modulaire de transport multigroupe. Il résout, dans une géométrie donnée, l'équation du transport soit sous sa forme intégrale en utilisant le formalisme des probabilités de collisions,^{1,45} soit sous sa forme intégral-différentielle en utilisant des méthodes S_N . Pour le calcul de réactivité dans ce travail on a utilisé la méthode S_N avec $N=4$, le schéma de discrétisation diamant et un degré d'anisotropie 0 ou 1.

Les données d'APOLLO II sont les sections efficaces multigroupes. En principe, les sections pour chaque isotope sont issues de la bibliothèque JEF1 et recalculées par THEMIS.¹⁰⁰ Dans le cadre de ce travail on a utilisé les sections efficaces à 99 groupes fournies par la bibliothèque CEA93.⁹³ Les sections efficaces des éléments U^{238} , U^{235} , Pu^{239} , Pu^{240} , Pu^{241} et Zr ont été autoprotégées avant l'homogénéisation. L'autoprotection a été calculée en milieu homogène infini, avec le modèle statistique⁹⁵ pour des énergies supérieures à 55 eV et avec le modèle des résonances larges^{95,98} en deçà de cette énergie. Ce milieu homogène est constitué du mélange Corium étudié.

La géométrie du problème est celle décrite par la figure 5.1. H est donné par

$$H = \frac{25p_\beta}{1 - p_\beta},$$

où p_β est la probabilité de trouver de l'eau en tout point du Corium et qui, comme on le voit avec la définition (3.4), est rattachée aux épaisseurs moyennes. À ce stade on pourrait considérer des dimensions latérales finies si le problème traité l'exigeait, mais comme on l'a déjà dit en début de chapitre, le système étudié ici peut être supposé infini dans les directions x et y . Les conditions aux bords dans la direction z sont celles du vide. Le maillage dans cette

direction est de 1 cm dans le béton et de 0.2 cm dans l'eau et le Corium fragmenté. La précision sur la valeur propre est de 10^{-5} . La précision ponctuelle sur le flux est de 10^{-4} .

Le Corium fragmenté est homogénéisé à l'aide d'un nouveau module ajouté au code APOLLO II. Ce module résout les équations (5.14) et (5.15) du modèle contraint multigroupe en milieu infini avec itérations sur les sources interne et externe et une quadrature de Gauss-Legendre à 16 points. Les sections efficaces multigroupes du nouveau milieu homogène créé sont calculées à l'aide de la relation (5.3) pour un mélange stochastique ou (1.3) pour un mélange volumique homogène.

Les températures des différents milieux varient très rapidement.^{15,16} En effet, d'après les expériences,⁶ 10 secondes à 3 minutes après la fusion sont nécessaires à la solidification du mélange fondu et l'obtention d'un milieu poreux. Ce temps de refroidissement dépend de la viscosité du mélange fondu. Les températures des milieux en présence évoluent différemment selon les diverses phases du refroidissement du Corium.^{15,16} Dans le cadre de ce travail on ne s'intéresse qu'aux problèmes neutroniques et la température des trois milieux a été fixée arbitrairement à 20° C, comme cela a déjà été fait dans une récente étude paramétrique.¹⁹ La largeur des résonances des sections efficaces est ainsi fixée. À cette température les taux d'absorption, seront plus faibles que ceux obtenus à une température plus élevée parce que la largeur des résonances croît avec la température par effet Doppler.¹ Les k_e calculés seront donc plus grands que les facteurs de multiplication réels du problème.

5.5 Résultats et discussions.

L'épaisseur des plaques de Corium 1 et 2 est modélisée par la distribution Markovienne. Cette distribution a pour moyenne λ_α (dorénavant on considère que le matériau α est le Corium et le matériau β , l'eau) et un écart type de λ_α . Elle permet d'avoir des plaques très grandes. L'épaisseur de la plaque d'eau sera décrite par une distribution tente dont l'épaisseur moyenne est de λ_β et l'écart type $\pm \sqrt{6}/6\lambda_\beta$. Cette distribution a une extension limitée de 0 à $2\lambda_\beta$, avec un maximum centré (cf. figure 3.1, $\gamma=1$). Le processus décrivant le Corium fragmenté est ainsi

un processus Markov-Tente et il devrait être celui qui modélise le mieux le mélange étudié. Comme le Corium constitue une masse compacte de matériaux fondus, il est probable que les épaisseurs des fentes d'eau soient plus petites que les épaisseurs des morceaux de Corium qu'elles délimitent (au moins pour des dilutions d'eau moyennes). C'est pourquoi l'on a choisi une distribution qui limite la taille des fentes d'eau. Afin d'étudier l'effet des distributions et de l'écart type sur le calcul du k_e on utilisera aussi les processus Markov-Markov et Périodique-Périodique pour modéliser le Corium fragmenté.

Expérimentalement une porosité de 0.18 ± 0.11 a été observée.²¹ Ainsi, afin de couvrir tout l'intervalle des porosités possibles (0.07, 0.29), on calculera le k_e pour les cinq porosités suivantes: 0.05, 0.10, 0.15, 0.20, 0.25. Une fois que la porosité est fixée, il faut encore déterminer un paramètre pour que la description du mélange stochastique soit complète. Comme aucune donnée n'est disponible sur l'épaisseur moyenne des fentes d'eau ou des morceaux de Corium, on varie l'épaisseur des fentes d'eau entre 0.2 cm et 2 cm par pas de 0.2 cm. L'épaisseur moyenne du Corium interstitiel se trouve ainsi fixée par la relation

$$\lambda_\alpha = \frac{1 - p_\beta}{p_\beta} \lambda_\beta,$$

qui découle de (3.4) où p_β est connu.

Pour chaque porosité, le facteur de multiplication k_e du système est aussi calculé avec une homogénéisation volumique du Corium fragmenté (cf. équation (1.3)), c'est à dire pour un mélange atomique. Ce calcul sert de cas de référence pour étudier l'effet d'une homogénéisation stochastique selon l'éq. (5.3) en fonction de l'épaisseur moyenne des fentes d'eau pour une porosité fixée. Tous les calculs sont effectués en supposant la diffusion isotrope (sauf mention contraire) dans les procédures d'homogénéisation (éqs. (5.14) et (5.15)) ainsi que lors de la détermination du k_e du système complet. Pour chaque type de Corium (1 et 2), on a étudié 50 configurations (5 porosités et 10 épaisseurs moyennes de fentes d'eau) auxquelles on a appliqué trois statistiques différentes, soit 150 calculs au total! De leur côté, les cas de références (mélange atomique) n'ont nécessité que cinq calculs puisqu'ils ne dépendent que des

porosités. Les facteurs de multiplication k_e de tous ces calculs sont donnés dans les tableaux de l'Annexe J.

Notons que l'on obtient, sans fragmentation, pour le Corium 1 un k_e de 0.61310 et pour le Corium 2 un k_e de 0.65830; on se trouve dans le cas limite de la porosité nulle où les spectres de neutrons sont les plus durs. Ceci est cohérent avec ce que l'on observe dans tous les tableaux de l'Annexe J où (à λ_β fixé) les k_e croissent avec la porosité car celle-ci favorise la thermalisation des neutrons à l'intérieur du Corium. En outre le ralentissement des neutrons est plus important dans le Corium 2, qui contient beaucoup d'éléments légers, que dans le Corium 1 où l'on trouve principalement des isotopes lourds (cf. tableaux H.5 à H.8). Le spectre des neutrons du Corium 1 est essentiellement rapide en son centre et thermique aux interfaces, surtout avec l'eau. Par contre, le spectre au centre du Corium 2, est intermédiaire à cause de la présence des éléments légers du béton. Ceci explique pourquoi le Corium 2 est plus réactif, mais on observe, comme attendu, que l'écart diminue fortement pour les grands λ_β , car les fentes d'eau jouent alors un rôle plus important pour le ralentissement des neutrons que le béton inclus dans le Corium.

Les résultats pour le Corium 1 fragmenté, modélisé par un processus Markov-Tente, sont donnés dans le tableau J.1 de l'Annexe J. De ces résultats on constate que le mélange volumique sous-estime la réactivité du système de 800 pcm à 7400 pcm. Cet écart est tributaire du choix de la porosité et de l'épaisseur moyenne des fentes d'eau. Pour une porosité donnée, l'écart entre la méthode du mélange volumique et celle du mélange stochastique augmente de manière monotone avec λ_β . Cet écart augmente aussi de manière monotone avec la porosité pour un λ_β fixé. L'effet des distributions sur l'écart entre les deux méthodes est aussi important. En laissant la possibilité aux fentes d'eau de devenir très grandes avec une distribution Markovienne, l'écart entre les deux méthodes d'homogénéisation augmente (cf. tableau J.2). Par contre, si l'on fixe les deux épaisseurs λ_α et λ_β en utilisant un processus Périodique-Périodique, l'écart entre les deux méthodes d'homogénéisation est le plus faible parmi les cas que l'on a calculé (cf. tableau J.3).

Pour le Corium 2 fragmenté décrit par un processus Markov-Tente (cf. tableau J.4), l'écart par rapport au mélange volumique, pour les cas étudiés, est moindre puisqu'il varie entre 0 pcm et 2000 pcm. Ceci peut se comprendre, puisqu'une partie importante de la modération provenant d'éléments légers présents dans le Corium proprement dit n'est soumise à aucun effet géométrique. Contrairement au Corium 1, où la réactivité pour une porosité donnée augmente en fonction de λ_β de manière monotone (cf. figure 5.8), la réactivité du Corium 2 passe par un maximum avant de décroître monotonement en fonction de l'épaisseur moyenne des fentes d'eau (cf. figure 5.9). Cette différence de comportement peut s'expliquer par la différence de spectre au sein des deux Coriums. Dans le Corium 1 le spectre de neutrons est rapide. Le libre parcours moyen des neutrons du Corium 1 dans l'eau sera plus grand que celui des neutrons du Corium 2 dont le spectre est intermédiaire. Ainsi lorsque l'on augmente l'épaisseur moyenne des fentes d'eau, on atteint plus rapidement dans le Corium 2 que dans le Corium 1 l'épaisseur où l'absorption des neutrons dans l'eau devient assez importante pour diminuer la réactivité du système. En d'autres termes, le Corium 1 est toujours sous-moderé dans le domaine considéré si bien que l'augmentation des fentes d'eau a toujours un effet positif sur la réactivité, ce qui n'est pas le cas du Corium 2. L'effet des distributions sur l'écart entre les deux méthodes d'homogénéisation (cf. tableau J.5 et J.6) est similaire à celui décrit pour le Corium 1 dans la partie croissante de la réactivité et inverse pour la partie décroissante.

La méthode stochastique fournit des résultats qui dépendent fortement de la porosité du Corium et de l'épaisseur moyenne des fentes d'eau, ce qui est normal. La dépendance du k_e en fonction de la précision de la porosité est très grande. En effet dans l'intervalle de porosité étudié (0.05, 0.25), très proche de l'intervalle mesuré expérimentalement (0.07, 0.29), pour une épaisseur λ_β fixée, on constate des différences de réactivité allant jusqu'à 30000 pcm, mais décrire le mélange eau-Corium par la porosité seule est insuffisant. La connaissance de l'épaisseur moyenne des fentes d'eau est indispensable, car pour l'intervalle choisi (0.2, 2.0), similaire à celui de l'étude paramétrique réalisée précédemment,¹⁹ on obtient, pour une porosité fixée, des différences de l'ordre de 7000 pcm. En plus, il n'est pas certains que λ_β dans un cas réel appartienne à cet intervalle et ainsi l'erreur par rapport à la valeur réelle du k_e peut être

encore plus importante. L'écart type de la distribution des épaisseurs joue aussi un rôle, moindre mais non négligeable, dans la précision du calcul du facteur de multiplication du système. La prise en compte de l'hétérogénéité, de nature stochastique, est donc indispensable.

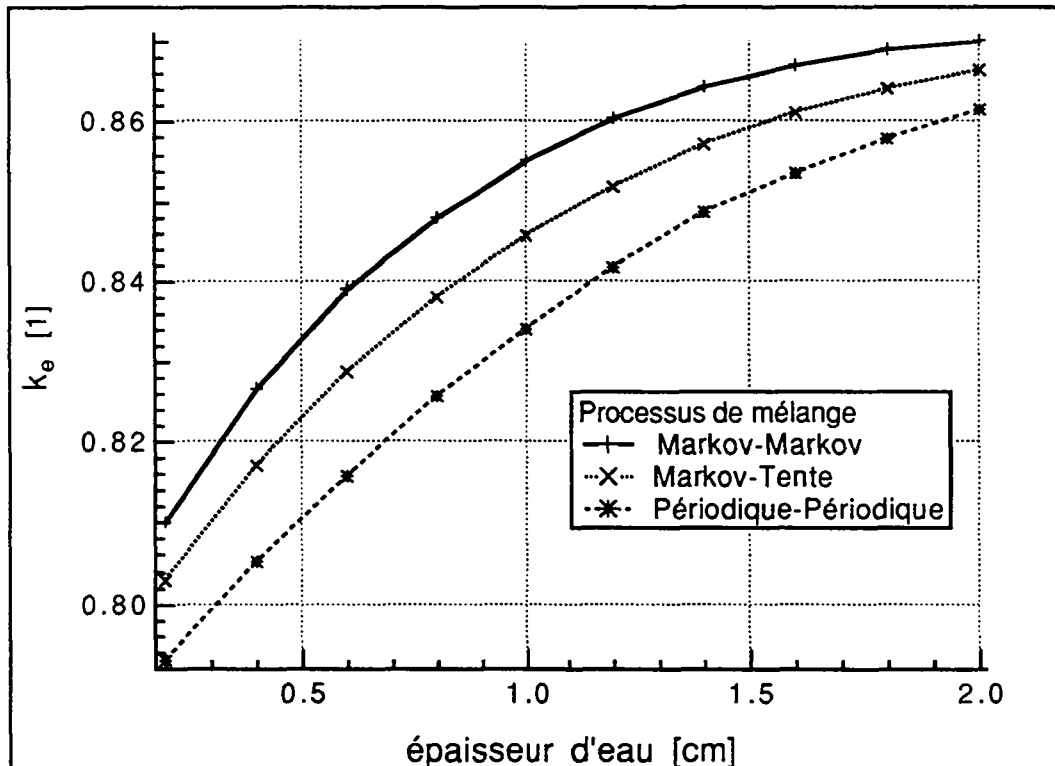


Figure 5.8: Réactivité du Corium 1 en fonction de l'épaisseur moyenne des fentes d'eau pour une porosité de 0.15 et trois processus de mélange.

Les figures 5.8 et 5.9 représentent, pour une porosité de 0.15, la réactivité en fonction de λ_β pour trois type de processus pour les Corium 1 (figure 5.8) et 2 (figure 5.9). Si on compare les courbes des processus Markov-Tente et Markov-Markov on observe un écart maximum de l'ordre de 1000 pcm entre les deux processus. Ainsi l'écart type de la distribution des épaisseurs des fentes d'eau a moins d'influence que leur épaisseur moyenne. Pour le calcul de la réactivité on ne peut plus affirmer, comme dans le cas du problème de transmission, que la distribution du matériau ayant une épaisseur moyenne plus petite joue un rôle secondaire. En effet, comme on le constate dans les figures 5.8 et 5.9, les processus Markov-Markov et Markov-Tente fournissent des résultats quantitatifs significativement différents. Notons quand

même que cette différence est magnifiée par le fait que selon l'usage on exprime les réactivités en pcm alors qu'ici on ne résout pas un problème de réacteur. Par contre, de la même manière que pour le problème de transmission, on constate que les processus Markov-Markov et Périodique-Périodique forment une enveloppe contenant les autres processus de remplacement (cf. figures 5.8 et 5.9).

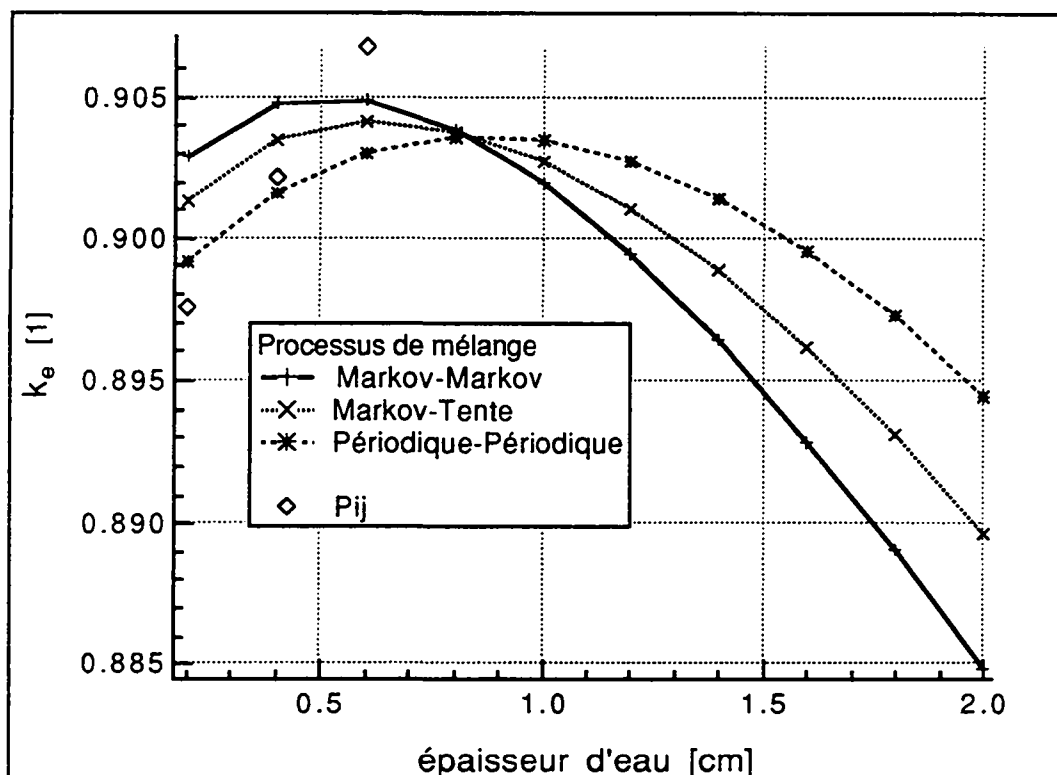


Figure 5.9: Réactivité du Corium 2 en fonction de l'épaisseur moyenne des fentes d'eau pour une porosité de 0.15 et trois processus de mélange.

Dans la figures 5.9 sont aussi représentés des résultats non stochastiques obtenus récemment au Centre d'Études de Saclay.⁹³ Ces résultats ont été calculés à l'aide de la méthode de la double hétérogénéité²⁸ et des probabilités de collision (P_{ij}).⁴⁵ Dans ce cas on considère le Corium fragmenté comme une matrice d'eau contenant une très grande quantité de grains de Corium de petites tailles. L'hypothèse à la base de cette méthode²⁸ est que les particules quittant les grains peuvent être considérées comme étant distribuées de manière isotrope et uniforme dans la matrice d'eau. Ces résultats, obtenus pour des sphères de Corium de rayon inférieur à 3

cm, confirment, comme le montre la figure 5.9, nos résultats obtenus à partir de la méthode d'homogénéisation stochastique.

Dans le tableau J.7 sont présentés les résultats du Corium 1 fragmenté obtenus avec une porosité de 0.15, pour un processus Markov-Tente et un degré d'anisotropie de 1 pour les noyaux de diffusion utilisés dans les calculs d'homogénéisation et de k_e . D'abord on notera que les sections efficaces du Corium fragmenté obtenues par homogénéisation sont identiques à celles obtenues avec un calcul à l'ordre d'anisotropie 0. Cela confirme numériquement ce qui a été démontré analytiquement à l'Annexe I. Le modèle développé pour l'homogénéisation est insensible aux ordres impairs d'anisotropie. Par contre, ce n'est pas le cas pour le calcul classique du facteur de multiplication. En effet, les résultats obtenus pour l'anisotropie d'ordre 1 sont inférieurs de 4000 pcm à ceux du tableau J.1 calculés à l'ordre 0. Cette différence s'explique facilement. La partie Corium est entourée de zones comportant des noyaux légers pour lesquels l'hypothèse du choc isotrope peut être discutable (elle l'est surtout pour l'hydrogène). Avec une anisotropie d'ordre 0, la rétrodiffusion des neutrons vers la partie fissile est favorisée, augmentant ainsi la réactivité. Un ordre d'anisotropie 1 diminue cette rétrodiffusion, augmente la fuite des neutrons et par conséquent diminue la réactivité. Pour les calculs d'homogénéisation à l'ordre 0 du Corium fragmenté le même problème se posera: on surestimera la rétrodiffusion des neutrons des fentes d'eau vers le Corium. Pour des fentes minces, de l'ordre du libre parcours moyen des neutrons, ce problème n'est pas trop important. Mais si les fentes d'eau sont larges, comparées au libre parcours moyen des neutrons, il faudra abandonner l'hypothèse de l'isotropie des chocs. Il est donc important de développer un modèle qui en tienne compte.

CONCLUSION

Ce travail nous a permis de modéliser le transport de particules en milieu stochastique et de l'appliquer à un cas pratique. Les modèles du transport stochastique obtenus ont mis en évidence l'importance de cette nouvelle théorie, notamment pour le calcul de la réactivité d'un Corium s'étalant sur un récupérateur plan. La réalisation des modèles a nécessité le calcul de nombreux cas de référence pour tester leur validité et leur précision.

Les cas de référence numériques réalisés au cours de ce travail constituent un outil complet de validation des modèles du transport stochastique développés dans la littérature et dans ce travail, surtout dans le cas du problème de transmission de neutrons monocinétiques à travers une plaque. Ces cas de référence, difficiles d'un point de vue numérique puisque les flux peuvent varier de plusieurs ordres de grandeur d'un bout à l'autre du système, ont permis de confirmer certaines hypothèses et d'écarter plusieurs modèles proposés. Ils ont révélé l'importance des résultats de référence pour les distributions spatiales des différents flux moyens. Ils ont démontré que des processus différents fournissent des résultats qui ne sont pas comparables et que l'on ne peut pas se contenter d'un processus de Markov pour décrire en toute généralité le transport de particules dans un mélange stochastique. En outre, les résultats obtenus ont confirmé que la variance et la moyenne des distributions des épaisseurs de matériau sont les paramètres les plus importants en ce qui concernent le problème du transport dans un milieu statistique à deux matériaux.

Le développement de différents modèles nous a permis d'obtenir deux modèles pour des processus équilibrés de remplacement alterné dont la précision est de 5% dans le problème de transmission. Parmi les modèles développés, nous avons constaté que les modèles mixtes dont la première équation est de type intégral-différentiel et la deuxième, de type intégral sont

Conclusion

mauvais ou ne convergent pas du tout, contrairement à ce que l'on pouvait espérer. Les deux modèles les plus précis que nous avons obtenu sont les modèles du remplacement modifié. Néanmoins ils sont loin d'être parfaits. En effet ces deux modèles ne vérifient pas les limites élémentaires telles que celle du mélange au niveau atomique par exemple. Ainsi dans les cas où les deux matériaux ont de très petites épaisseurs, ces deux modèles sont mis en échec. De plus, leur précision se dégrade si on considère des problèmes tests autre que de transmission. Le problème test le plus contraignant consiste en un milieu plan isolé, constitué d'un mélange d'un matériau purement diffusant avec une source constante de particules et d'un matériau purement absorbant sans sources. Ce test met à rude épreuve la fermeture de l'équation du second ordre. Dans ce cas très particulier, l'erreur sur les flux moyens des modèles, peut atteindre environ 50%.

Le problème décrit ci-dessus montre qu'il serait peut-être nécessaire de fermer la hiérarchie infinie d'équations, description exacte du transport stochastique, à un ordre plus élevé. Cela semble difficilement réalisable car, dans le formalisme intégro-différentiel, l'équation exacte du deuxième ordre devient très complexe et sa signification physique est difficile à saisir, alors que dans le formalisme intégral, c'est les moments statistiques qui deviennent de plus en plus complexes. Une évolution des modèles dans la voie choisie semble actuellement difficile. Il serait intéressant d'essayer d'autres types de description d'un mélange stochastique, notamment la statistique d'un nombre fini de transitions. Cette description consiste à se donner cette fois la distribution du nombre possible de points d'interface pour une géométrie définie et d'écrire les équations intégrales correspondantes. Le problème semble ici mieux poser, car les matériaux remplissent exactement le volume qui leur est offert quelle que soit la configuration tirée au hasard. D'autre part une étude plus approfondie, notamment d'ordre topologique, sur les sous-ensembles des configurations sur lesquelles sont calculées les différentes moyennes pourrait apporter une meilleure compréhension des modèles et des erreurs dues à la troncature.

La réactivité des matériaux recueillis par le récupérateur, dépend fortement des spectres de neutrons et le formalisme multigroupe s'impose. Nous n'avons pas rencontré de difficulté

particulière en faisant cette extension, ce qui est dû au choix du modèle du remplacement contraint, qui se trouve être un des meilleurs, d'après l'analyse des cas de référence. On a procédé en deux temps: calcul des sections efficaces du Corium moyennées sur l'espace, suivi d'un calcul déterministe du système complet. C'est évidemment le premier problème qui fait appel à la théorie développée dans ce travail puisque la fragmentation du Corium est stochastique. À ce premier stade, le Corium est supposé infini et le formalisme devient très simple. On pourrait objecter que, d'après les études de référence, les résultats devenant mauvais pour les fortes épaisseurs, la démarche proposée ci-dessus est a fortiori discutable. On peut rejeter cette objection en remarquant qu'ici il ne s'agit plus d'un problème d'atténuation mais d'un cas où les flux "macroscopiques" sont constants. Pour vérifier cette assertion, il faudrait pouvoir effectuer les calculs de référence correspondants ce qui est très difficile. Quoiqu'il en soit, lors de l'application de ce modèle en théorie multigroupe et en milieu infini dans le cas pratique du Corium fragmenté, nous avons montré l'importance d'une théorie stochastique d'homogénéisation pour remplacer la traditionnelle homogénéisation volumique. Pour ce cas pratique particulier, il est absolument nécessaire de connaître au moins quatre grandeurs du mélange statistique pour obtenir des résultats précis. Ces grandeurs sont, par ordre d'importance: la porosité p_β connue avec une grande précision, l'épaisseur moyenne des fentes d'eau λ_β et les variances associées.

En ce qui concerne l'étude à proprement parler de la réactivité d'un Corium sur un récupérateur plan, il est indispensable de disposer d'une bonne description de l'ensemble des phénomènes couplés extrêmement complexes décrivant la formation et l'évolution d'un Corium. Malheureusement il n'est pas envisageable à une échéance d'une dizaine d'années de résoudre l'ensemble de ces problèmes. Pour ce qui est du calcul neutronique et malgré les incertitudes liées à la composition du Corium, aux températures des milieux et à la porosité du Corium entre autres, il est nécessaire de prendre en compte la théorie du transport stochastique pour calculer la réactivité du système. Cette nouvelle théorie devrait aussi pouvoir être appliquée au Corium lui-même qui, pratiquement, est loin d'être un mélange totalement homogène dans bien des cas, si ce n'est dans la plupart des cas.

Conclusion

Finalement, il ne faut pas oublier que le but du transport stochastique serait idéalement d'obtenir un ensemble restreint d'équations décrivant non seulement les flux moyens de particules dans chaque matériau mais aussi les moments d'ordres supérieurs de ces flux. Ce travail nous a permis néanmoins de débroussailler le domaine de la modélisation du transport de particules en milieu stochastique, de calculer les flux moyens et de résoudre un problème pratique. Il a aussi révélé les tâches qui restent à accomplir pour trouver des modèles plus robustes et plus précis en prenant en compte d'autres phénomènes. On peut en citer deux:

- l'anisotropie de la diffusion, essentielle lorsque des éléments légers sont présents; nous avons abordés ce problème et les premiers résultats ont montré un découplage des modes pairs et impairs de l'anisotropie pour le cas du milieu infini.
- l'autoprotection des résonances que nous n'avons traité que de façon déterministe pour simplifier.

DESCRIPTION DES DISTRIBUTIONS ET DE LEUR ÉCHANTILLONNAGE

Dans cette annexe sont décrites les expressions analytiques pour les huit fonctions de distribution $f(z)$ présentées dans la figure 3.1 ainsi que les distributions $f_s(z)$ servant à choisir l'épaisseur de la première plaque de chaque réalisation. Le choix aléatoire de l'épaisseur des plaques de matériau nécessite un échantillonnage de chaque distribution. En deuxième partie de cette annexe on décrit quelques procédés courants d'échantillonnage. Ensuite ces procédés sont appliqués individuellement à chaque distribution du § A.1.

A.1 Expression analytique des distributions.

Toutes les expressions sont données en terme de la variable réduite $x=z/\lambda$, telle que la fonction normalisée $f_N(x)$ a une valeur moyenne égale à 1. La distribution $f(z)$ et ses moments associés $\langle z^n \rangle$ peuvent être obtenus de la distribution normalisée $f_N(x)$ et des moments correspondants $\langle x^n \rangle_N$ à l'aide des relations

$$f(z)=f_N(z/\lambda)/\lambda, \langle z^n \rangle = \lambda^n \langle x^n \rangle_N.$$

Des relations similaires fournissent la correspondance entre $f_s(z)$ et $f_{sN}(x)$. Chaque distribution $f_N(x)$ est donnée avec son écart type σ .

Annexe A

1- Markov

$$\begin{aligned}f_N(x) &= e^{-x}, \\ \sigma_N &= 1, \\ f_{sN}(x) &= f_N(x).\end{aligned}$$

2- Bloc

$$\begin{aligned}f_N(x) &= \begin{cases} 1/(2\gamma), & 1-\gamma < x < 1+\gamma \\ 0, & \text{sinon} \end{cases}, \\ \sigma_N &= \frac{\sqrt{3}}{3}\gamma, \\ f_{sN}(x) &= \begin{cases} 1, & x < 1-\gamma \\ \frac{1}{2\gamma}(1+\gamma-x), & 1-\gamma < x < 1+\gamma \\ 0, & \text{sinon} \end{cases}.\end{aligned}$$

3- Parabolique inversée

$$\begin{aligned}f_N(x) &= \begin{cases} \frac{3}{2\gamma^3}(x-1)^2, & 1-\gamma < x < 1+\gamma \\ 0, & \text{sinon} \end{cases}, \\ \sigma_N &= \sqrt{\frac{3}{5}}\gamma, \\ f_{sN}(x) &= \begin{cases} 1, & x < 1-\gamma \\ \frac{1}{2}\left[1 - \left(\frac{x-1}{\gamma}\right)^3\right], & 1-\gamma < x < 1+\gamma \\ 0, & \text{sinon} \end{cases}.\end{aligned}$$

4- Rampe inversée

$$\begin{aligned}f_N(x) &= \begin{cases} \frac{2}{9\gamma^2}(1+2\gamma-x), & 1-\gamma < x < 1+2\gamma \\ 0, & \text{sinon} \end{cases}, \\ \sigma_N &= \frac{\sqrt{2}}{2}\gamma, \\ f_{sN}(x) &= \begin{cases} 1, & x < 1-\gamma \\ \left(\frac{1+2\gamma-x}{3\gamma}\right)^2, & 1-\gamma < x < 1+2\gamma \\ 0, & \text{sinon} \end{cases}.\end{aligned}$$

5- Tente

$$f_N(x) = \begin{cases} \frac{1}{\gamma^2}(x-1+\gamma) & , 1-\gamma < x < 1 \\ \frac{1}{\gamma^2}(1+\gamma-x) & , 1 < x < 1+\gamma \\ 0 & , \text{sinon} \end{cases}$$

$$\sigma_N = \frac{\sqrt{6}}{6}\gamma,$$

$$f_{sN}(x) = \begin{cases} 1 & , x < 1-\gamma \\ 1 - \frac{1}{2}\left(\frac{x-1+\gamma}{\gamma}\right)^2 & , 1-\gamma < x < 1 \\ \frac{1}{2}\left(\frac{1+\gamma-x}{\gamma}\right)^2 & , 1 < x < 1+\gamma \\ 0 & , \text{sinon} \end{cases}$$

6- Rampe

$$f_N(x) = \begin{cases} \frac{8}{9\gamma^2}(x-1+\gamma) & , 1-\gamma < x < 1+\gamma/2 \\ 0 & , \text{sinon} \end{cases}$$

$$\sigma_N = \frac{\sqrt{2}}{4}\gamma,$$

$$f_{sN}(x) = \begin{cases} 1 & , x < 1-\gamma \\ 1 - \frac{4}{9}\left(\frac{x-1+\gamma}{\gamma}\right)^2 & , 1-\gamma < x < 1+\gamma/2 \\ 0 & , \text{sinon} \end{cases} .$$

7- Périodique

$$f_N(x) = \delta(x-1),$$

$$\sigma_N = 0,$$

$$f_{sN}(x) = \begin{cases} 1 & , x < 1 \\ 0 & , \text{sinon} \end{cases} .$$

8- Gamma

Avec n entier ≥ 1 et $z=nx$, la distribution gamma normalisée s'écrit

$$f_N(z) = ne^{-z} \frac{z^{n-1}}{(n-1)!},$$

$$\sigma_N = \frac{1}{\sqrt{n}},$$

$$f_{sN}(z) = e^{-z} \sum_{i=1}^n \frac{z^{i-1}}{(i-1)!}.$$

Pour $n=1$ la distribution gamma se réduit à la distribution exponentielle (Markov). Pour $n=3,6$ et 8 elle a le même écart type que la distribution bloc, tente et rampe, respectivement (avec $\gamma=1$). Avec $n=\infty$ la distribution gamma devient la distribution périodique.

A.2 Méthodes d'échantillonnage.

Dans ce paragraphe sont décrites brièvement quelques techniques de transformation de nombres aléatoires, ρ , uniformément distribués sur l'intervalle $[0,1]$ en des nombres aléatoires distribués selon une fonction de distribution arbitraire mais toujours homogène. Parmi toutes les méthodes existantes,^{67,68} seules quatre d'entre elles sont utilisées pour l'échantillonnage des $f(z)$ et $f_S(z)$.

A.2.1 L'échantillonnage d'une distribution discrète.

Soit p_1, p_2, \dots, p_n les probabilités des événements e_1, e_2, \dots, e_n mutuellement exclusifs telles que

$$\sum_{i=1}^n p_i = 1.$$

L'événement discret e_i est sélectionné si l'inégalité

$$p_1 + \dots + p_{i-1} \leq \rho \leq p_1 + \dots + p_i, \tag{A.1}$$

où ρ est un nombre aléatoire uniformément distribué sur $[0, 1]$, est satisfaite.

A.2.2 La méthode de la distribution inverse.

Si $f(x)$ est la fonction densité de probabilité d'une variable x , $a \leq x \leq b$, alors une valeur x déterminée par les relations

$$\rho = P(x) = \int_a^x f(x) dx$$

$$x = P^{-1}(\rho)$$
(A.2)

est comprise avec une fréquence $f(x)dx$ entre x et $x+dx$, c'est à dire que si les ρ_i ($i=1, \dots, n$) sont des nombres aléatoires indépendants, alors les valeurs $x_i = P^{-1}(\rho_i)$ sont des réalisations indépendantes de la variable aléatoire x .

A.2.3 La méthode de mélange de probabilités.

Si la fonction de densité de probabilité $f(x)$ peut être écrite comme la somme de n fonctions non négatives

$$f(x) = \sum_{i=1}^n \tilde{f}_i(x), \quad \tilde{f}_i(x) \geq 0, \quad a \leq x \leq b,$$

alors l'échantillonnage peut être réalisé en deux étapes. Premièrement le $i^{\text{ème}}$ terme est sélectionné avec une probabilité $f_i = \int_a^b \tilde{f}_i(x) dx$ en accord avec l'équation (A.1):

$$\sum_{j=1}^{i-1} f_j \leq \rho_1 \leq \sum_{j=1}^i f_j.$$

Puis par l'utilisation d'un second nombre aléatoire x , la réalisation actuelle, est sélectionnée à partir de la fonction densité de distribution $\tilde{f}_i(x)$:

$$\rho_2 = P_i(x) = \frac{1}{f_i} \int_a^x \tilde{f}_i(y) dy.$$

Cette technique est facilement étendue aux cas où $f(x)$ est développée dans une série infinie de termes.

Annexe A

A.2.4 Les techniques du rejet.

Ces techniques sont utilisées pour produire des échantillons indépendants quand la solution de l'équation (A.2) est difficile à obtenir. Dans leur plus simple forme, on suppose que $f(x)$ est à nouveau une fonction densité de probabilité de la variable x , $a \leq x \leq b$ et qu'il existe un nombre positif fini M pour lequel $f(x) \leq M$. Si ρ_1 et ρ_2 sont deux nombres aléatoires indépendants alors $x = a + \rho_1(b-a)$ est accepté comme nombre aléatoire distribué selon $f(x)$ si et seulement si $\rho_2 M \leq f(x)$. Sinon, on le rejette et on recommence le processus d'échantillonnage. Cette méthode est moins efficace que les précédentes dans le sens où elle prendra plus de temps pour échantillonner une distribution donnée.

A.3 Échantillonnage des distributions.

Pour générer une réalisation physique de la statistique pour notre cas de référence, on utilise les méthodes décrites ci-dessus. La technique d'échantillonnage d'une distribution discrète est utilisée pour déterminer le matériau présent en $x=0$ en accord avec la probabilité p_α . L'épaisseur de la première plaque $z_s = \lambda x_s$ est obtenue par échantillonnage de $f_s(z)$ et l'épaisseur $z = \lambda x$ des plaques suivantes de $f(z)$. Pour les huit types de distribution décrites au § A.1, la méthode d'échantillonnage utilisée pour obtenir x et x_s est décrite ci-après.

1- Markov

Dans ce cas on utilise la même méthode de distribution inverse pour obtenir x et x_s :

$$x = -\ln(\rho),$$

$$x_s = -\ln(\rho).$$

2- Bloc

Par la méthode de distribution inverse on obtient:

$$x = 2\gamma\rho + (1 - \gamma),$$

$$x_s = \begin{cases} (1 + \gamma) - 2\sqrt{\gamma(1 - \rho)} & (1 - \gamma) < \rho \\ \rho & \rho \leq (1 - \gamma) \end{cases}.$$

3- Parabolique inversée

A l'aide de la méthode de distribution inverse on obtient x:

$$x = \begin{cases} 1 + \gamma(2\rho - 1)^{1/3} & 2\rho - 1 \geq 0 \\ 1 - \gamma|2\rho - 1|^{1/3} & \text{sin on} \end{cases}$$

et par la technique du rejet on accepte

$$x_s = 1 - \gamma + 2\gamma\rho_1$$

si l'inégalité

$$(1 - (2\rho_1 - 1)^3) / 2 \geq \rho_2$$

est vérifiée.

4- Rampe inversée

Par la méthode de distribution inverse on obtient:

$$x = 1 + 2\gamma - 3\gamma\sqrt{1 - \rho},$$

$$x_s = \begin{cases} 1 + 2\gamma - 3\gamma\left(\frac{1 - \rho}{\gamma}\right)^{1/3} & (1 - \gamma) < \rho \\ \rho & \rho \leq (1 - \gamma) \end{cases}.$$

5- Tente

La méthode de distribution inverse fournit x et x_s de la manière suivante

$$x = \begin{cases} (1 + \gamma) - \gamma\sqrt{2(1 - \rho)} & \frac{1}{2} < \rho \\ (1 - \gamma) + \gamma\sqrt{2\rho} & \rho \leq \frac{1}{2} \end{cases},$$

$$x_s = \begin{cases} (1 + \gamma) - (6\gamma^2(1 - \rho))^{1/3} & (1 - \frac{\gamma}{6}) \leq \rho \\ 2\sqrt{2}\gamma \cos\left(\frac{\theta + \pi}{3}\right) + \lambda(1 - \gamma) & \\ \text{avec } \theta = a \cos\left(\frac{3(\rho - (1 - \gamma))}{2\sqrt{2}\gamma}\right) & (1 - \gamma) \leq \rho < (1 - \frac{\gamma}{6}) \\ \text{et } \gamma \geq 0.06 & \\ \rho & \rho < (1 - \gamma) \end{cases}.$$

Annexe A

6- Rampe

Toujours par la méthode de distribution inverse on obtient:

$$x = (1 - \gamma) + \frac{3}{2} \gamma \sqrt{\rho},$$

$$x_s = \begin{cases} 3\gamma \cos\left(\frac{\theta + \pi}{3}\right) + (1 - \gamma) \\ \text{avec } \theta = \arccos\left(\frac{\rho - (1 - \gamma)}{\gamma}\right) \end{cases} \begin{matrix} (1 - \gamma) < \rho \\ \rho \leq (1 - \gamma) \end{matrix}.$$

7- Périodique

Il n'y a pas d'échantillonnage pour le calcul de x : $x=1$ ($z=\lambda$) et x_s est obtenu par la relation $x_s=\rho$.

8- Gamma

Si $n=1$ on utilise l'échantillonnage décrit pour la distribution de Markov. Pour $n \geq 1$ il existe dans la littérature de nombreuses méthodes pour échantillonner la distribution gamma,^{66,101} mais aucune ne décrit comment échantillonner $f_s(z)$ de la distribution gamma. Pour l'échantillonnage de $f(z)$ on utilise une méthode de rejet particulière et on accepte

$$x=(1/\rho_1-1)/n$$

si l'inégalité suivante est vérifiée:

$$\exp(-(x - x_0)) \left(\frac{x}{x_0}\right)^{ne-1} \left(\frac{1+x}{1+x_0}\right)^2 \geq \rho_2,$$

$$\text{où } x_0 = \frac{ne}{2} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4}{ne} \left(1 - \frac{1}{ne}\right)}\right),$$

$$\text{avec } ne = n.$$

Pour l'échantillonnage de $f_s(z)$ on utilise d'abord la méthode de mélange de probabilité pour déterminer la $ne^{\text{ème}}$ composante et ensuite, la méthode du rejet décrite pour la fonction gamma avec ne donnée par la partie entière de l'expression $\rho_0 n + 1$ où ρ_0 est un autre nombre aléatoire tiré en premier.

RÉSULTATS DES CAS DE RÉFÉRENCE

Cette annexe présente la totalité des résultats du calcul des cas de référence qu'il aurait été fastidieux de montrer dans le Chapitre 3.

Tableau B.1: $\langle R \rangle$ et $\langle T \rangle$ pour six processus dans le cas 1.

L	Cas	Mat α	Markov	Bloc	Tente	Rampe	Périodique	Markov
		Mat β	Markov	Bloc	Tente	Rampe	Périodique	Tente
0.1	a	$\langle R \rangle$	0.04913	0.04965	0.05021	0.05032	0.05065	0.04995
		$\langle T \rangle$	0.93603	0.93551	0.93197	0.93484	0.93452	0.93222
	b	$\langle R \rangle$	0.00867	0.00865	0.00861	0.00864	0.00863	0.00862
		$\langle T \rangle$	0.90342	0.90219	0.89782	0.90063	0.89994	0.89842
	c	$\langle R \rangle$	0.04853	0.04905	0.04958	0.04971	0.05000	0.04933
		$\langle T \rangle$	0.93633	0.93577	0.93216	0.93504	0.93468	0.93243
1.0	a	$\langle R \rangle$	0.25126	0.28672	0.31253	0.31674	0.34683	0.27279
		$\langle T \rangle$	0.59591	0.56037	0.53474	0.53057	0.49995	0.57161
	b	$\langle R \rangle$	0.05493	0.05073	0.04659	0.04614	0.04315	0.05230
		$\langle T \rangle$	0.48536	0.4074	0.34182	0.33104	0.25007	0.43632
	c	$\langle R \rangle$	0.25632	0.28891	0.31351	0.31773	0.34897	0.27532
		$\langle T \rangle$	0.60200	0.55659	0.52556	0.52032	0.48232	0.57138
10.0	a	$\langle R \rangle$	0.43555	0.47036	0.48294	0.48600	0.49523	0.45391
		$\langle T \rangle$	0.01463	0.00877	0.00720	0.00689	0.00589	0.01118
	b	$\langle R \rangle$	0.08643	0.06239	0.05247	0.05060	0.04453	0.07680
		$\langle T \rangle$	0.00160	0.00011	0.00004	0.00003	0.00001	0.00059
	c	$\langle R \rangle$	0.48000	0.48065	0.48069	0.48070	0.48072	0.47897
		$\langle T \rangle$	0.01602	0.00708	0.00535	0.00497	0.00388	0.00105

Tableau B.2: <R> et <T> pour six processus dans le cas 2.

L	Cas	Mat α	Markov	Bloc	Tente	Rampe	Périodique	Markov
		Mat β	Markov	Bloc	Tente	Rampe	Périodique	Tente
0.1	a	<R>	0.04345	0.04337	0.04308	0.04319	0.04321	0.04304
		<T>	0.94172	0.94179	0.93910	0.94197	0.94195	0.93913
	b	<R>	0.00890	0.00890	0.00888	0.00891	0.00891	0.00887
		<T>	0.91686	0.91698	0.91450	0.91731	0.91728	0.91455
	c	<R>	0.04287	0.04281	0.04255	0.04267	0.04268	0.04253
		<T>	0.94239	0.94248	0.93981	0.94269	0.94267	0.93985
1.0	a	<R>	0.12133	0.12342	0.12578	0.12569	0.12637	0.12398
		<T>	0.72658	0.72468	0.72226	0.72234	0.72171	0.72146
	b	<R>	0.07465	0.07451	0.07419	0.07443	0.07440	0.07430
		<T>	0.76123	0.75836	0.75245	0.75489	0.75429	0.75527
	c	<R>	0.14396	0.14525	0.14644	0.14683	0.14712	0.14526
		<T>	0.76985	0.76703	0.76119	0.76360	0.76265	0.76311
10.0	a	<R>	0.23714	0.26076	0.28320	0.28592	0.29984	0.24911
		<T>	0.09817	0.07787	0.06101	0.05832	0.03633	0.09015
	b	<R>	0.28951	0.27429	0.26022	0.25856	0.24998	0.28730
		<T>	0.19500	0.13336	0.08495	0.7606	0.00353	0.18457
	c	<R>	0.43578	0.44976	0.46111	0.46310	0.47950	0.43743
		<T>	0.18651	0.13293	0.08635	0.07878	0.01460	0.16650

Tableau B.3: <R> et <T> pour six processus dans le cas 3.

L	Cas	Mat. α	Markov	Bloc	Tente	Rampe	Périodique	Markov
		Mat. β	Markov	Bloc	Tente	Rampe	Périodique	Tente
0.1	a	<R>	0.07606	0.07601	0.07571	0.07595	0.07595	0.07575
		<T>	0.92500	0.92505	0.92231	0.92511	0.92510	0.92227
	b	<R>	0.00098	0.00098	0.00098	0.00098	0.00098	0.00098
		<T>	0.85283	0.85291	0.85046	0.85304	0.85303	0.85039
	c	<R>	0.06720	0.06716	0.06690	0.06710	0.06711	0.06693
		<T>	0.91645	0.91650	0.91380	0.91657	0.91656	0.91376
1.0	a	<R>	0.32211	0.32272	0.32303	0.32412	0.32434	0.32251
		<T>	0.66177	0.66114	0.65789	0.65979	0.65958	0.65844
	b	<R>	0.00885	0.00884	0.00877	0.00880	0.00879	0.00880
		<T>	0.48408	0.48244	0.47857	0.47986	0.47944	0.48020
	c	<R>	0.24433	0.24500	0.24531	0.24613	0.24632	0.24446
		<T>	0.60629	0.60561	0.60228	0.60398	0.60373	0.60282
10.0	a	<R>	0.69248	0.73867	0.75912	0.76299	0.77431	0.70444
		<T>	0.16322	0.11749	0.10017	0.09703	0.08790	0.14905
	b	<R>	0.03700	0.03023	0.02644	0.02568	0.02345	0.03622
		<T>	0.07643	0.01092	0.00166	0.00089	0.00001	0.06676
	c	<R>	0.44779	0.47512	0.47965	0.48013	0.48072	0.45095
		<T>	0.10438	0.03804	0.01664	0.01270	0.00386	0.00859

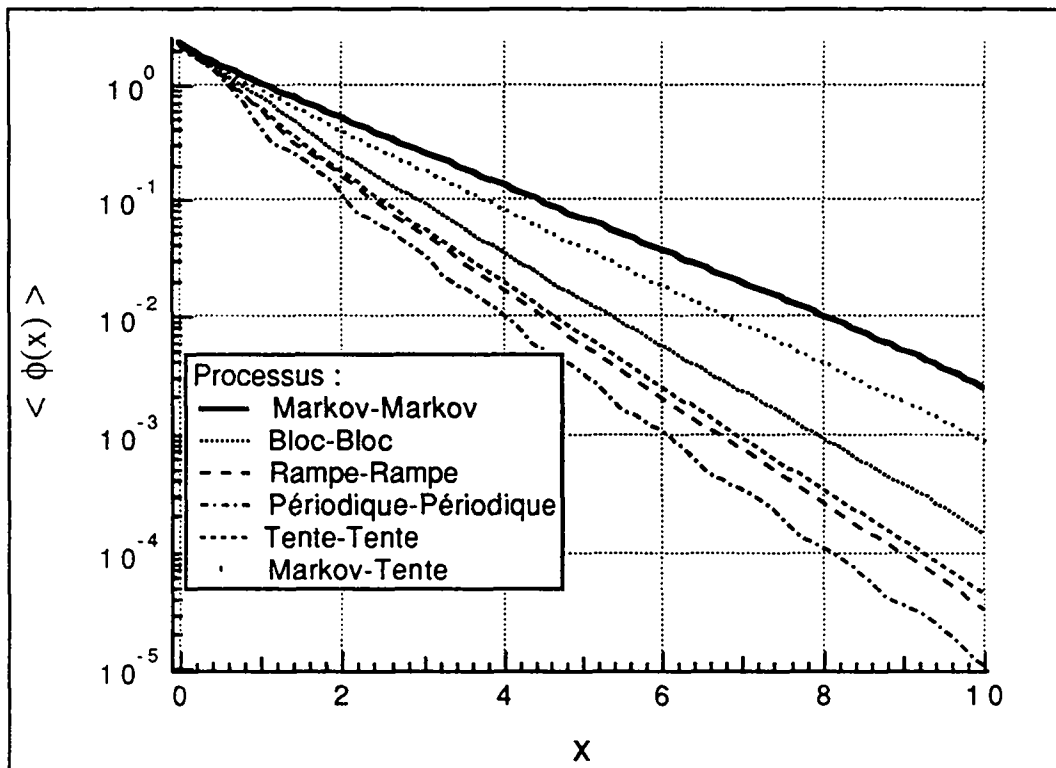


Figure B.1: Flux scalaire moyen $\langle \phi(x) \rangle$ pour le cas 1b et $L=10$.

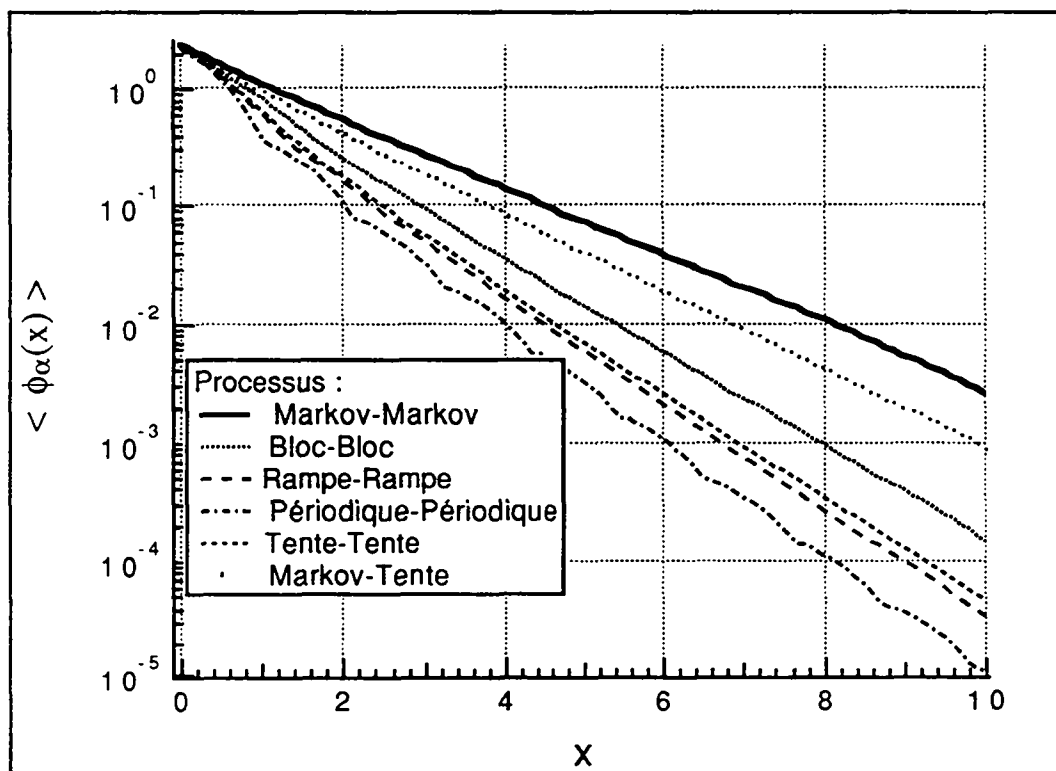


Figure B.2: Flux de matériau $\langle \phi_\alpha(x) \rangle$ pour le cas 1b et $L=10$.

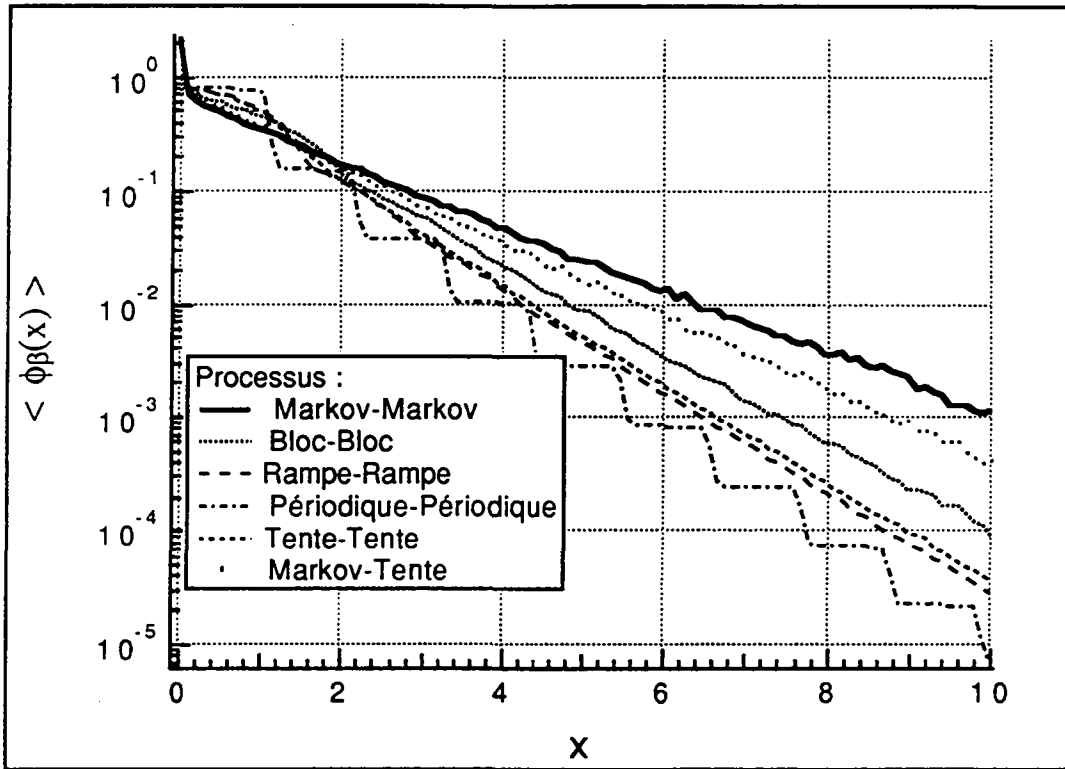


Figure B.3: Flux de matériau $\langle \phi_\beta(x) \rangle$ pour le cas 1b et $L=10$.

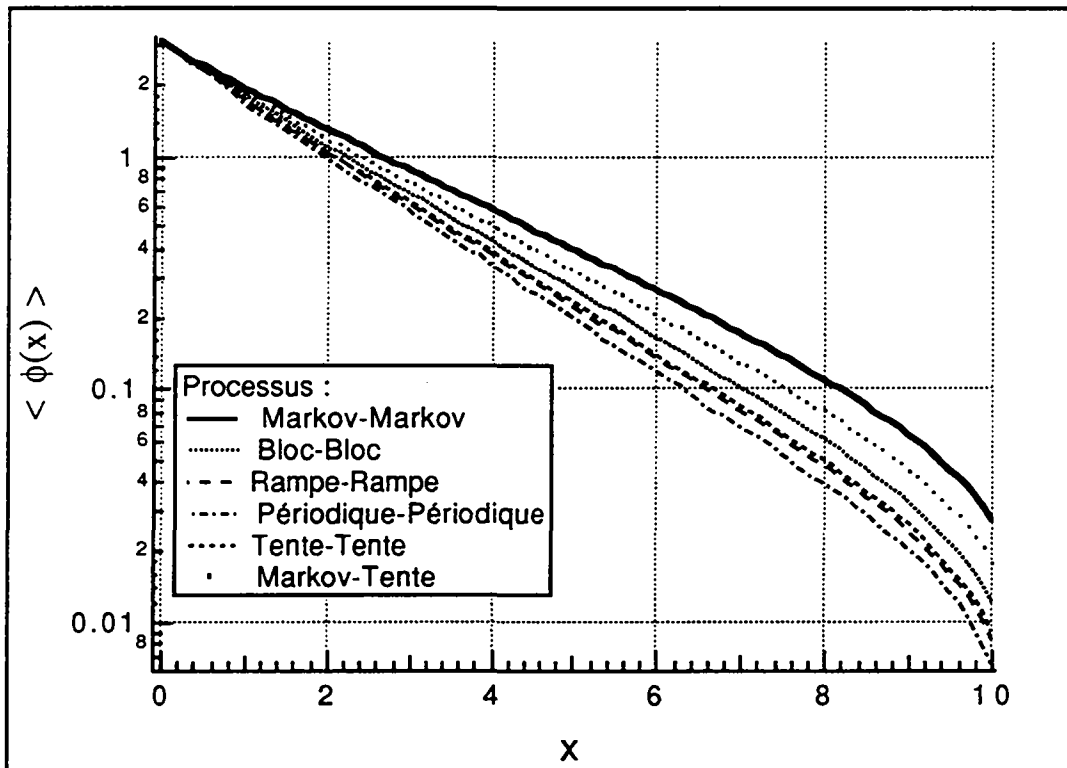


Figure B.4: Flux scalaire moyen $\langle \phi(x) \rangle$ pour le cas 1c et $L=10$.

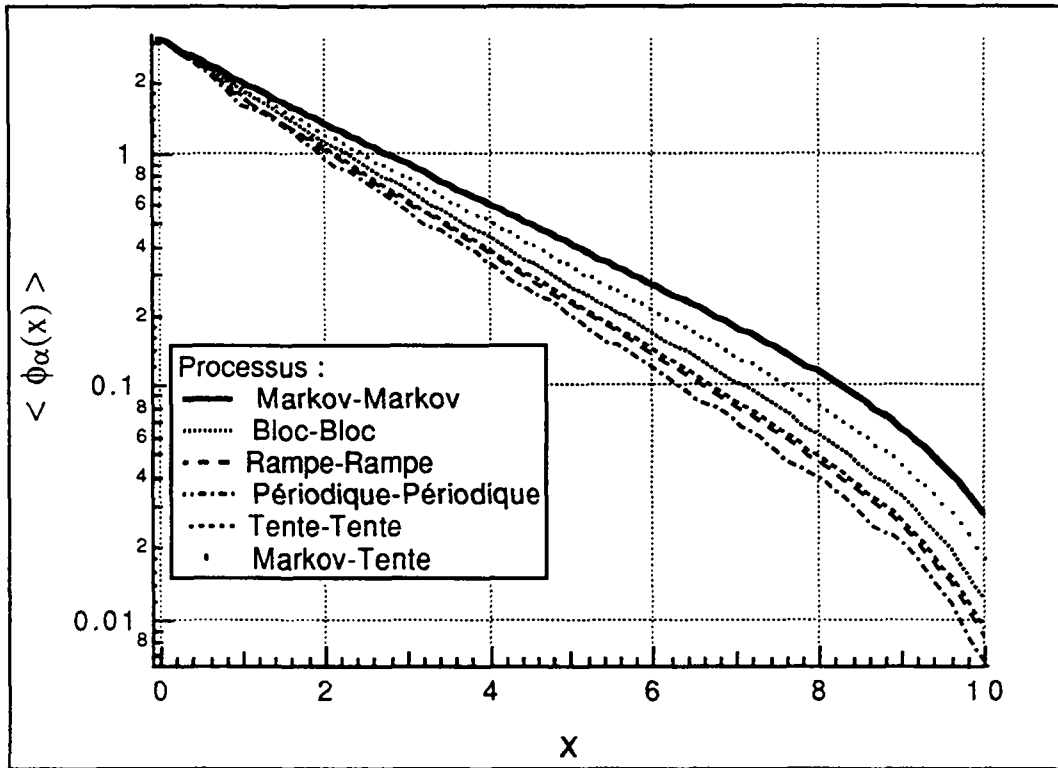


Figure B.5: Flux de matériau $\langle \phi_\alpha(x) \rangle$ pour le cas 1c et L=10.

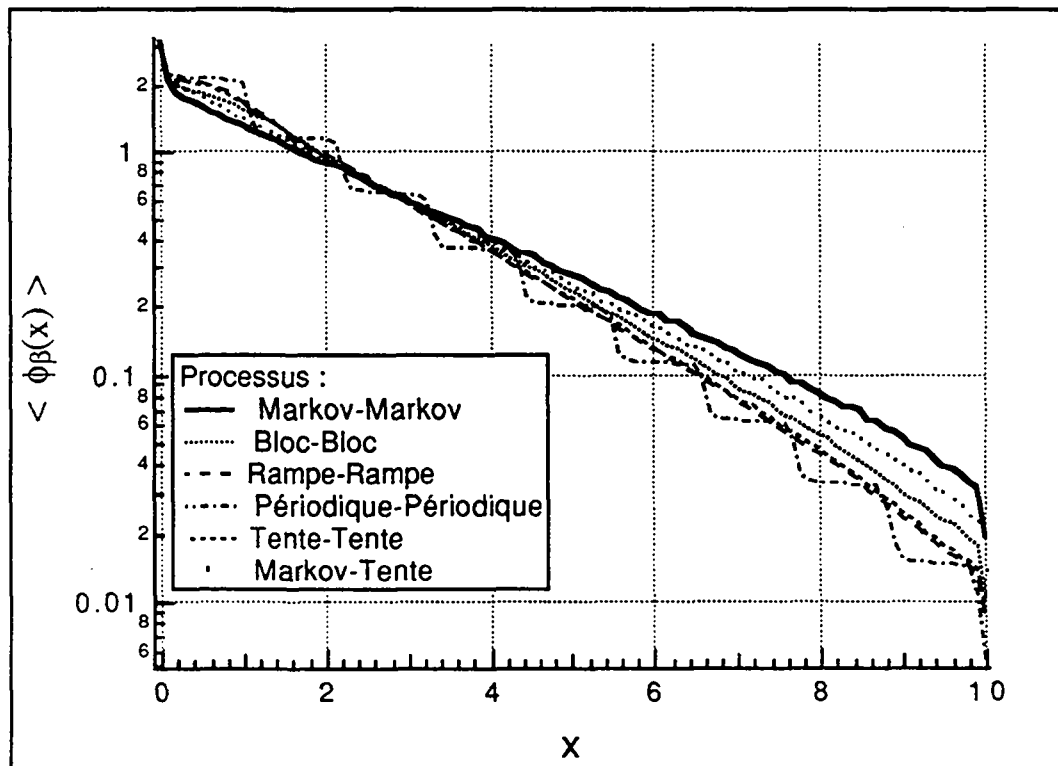


Figure B.6: Flux de matériau $\langle \phi_\beta(x) \rangle$ pour le cas 1c et L=10.

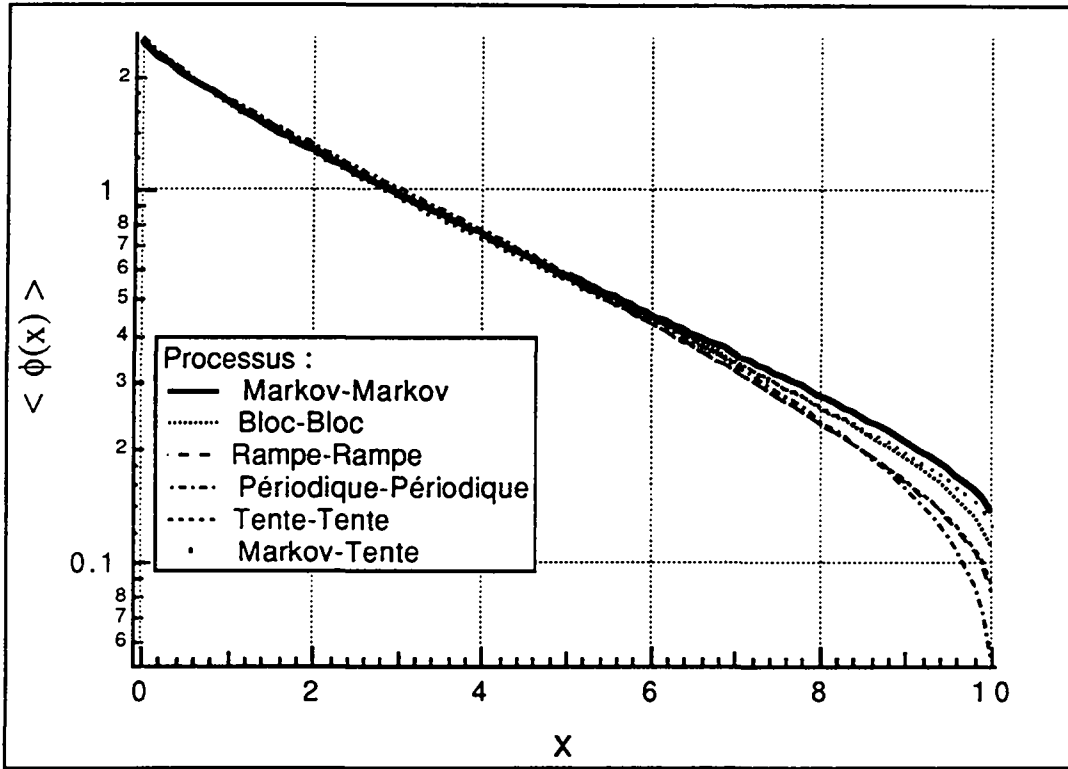


Figure B.7: Flux scalaire moyen $\langle \phi(x) \rangle$ pour le cas 2a et L=10.

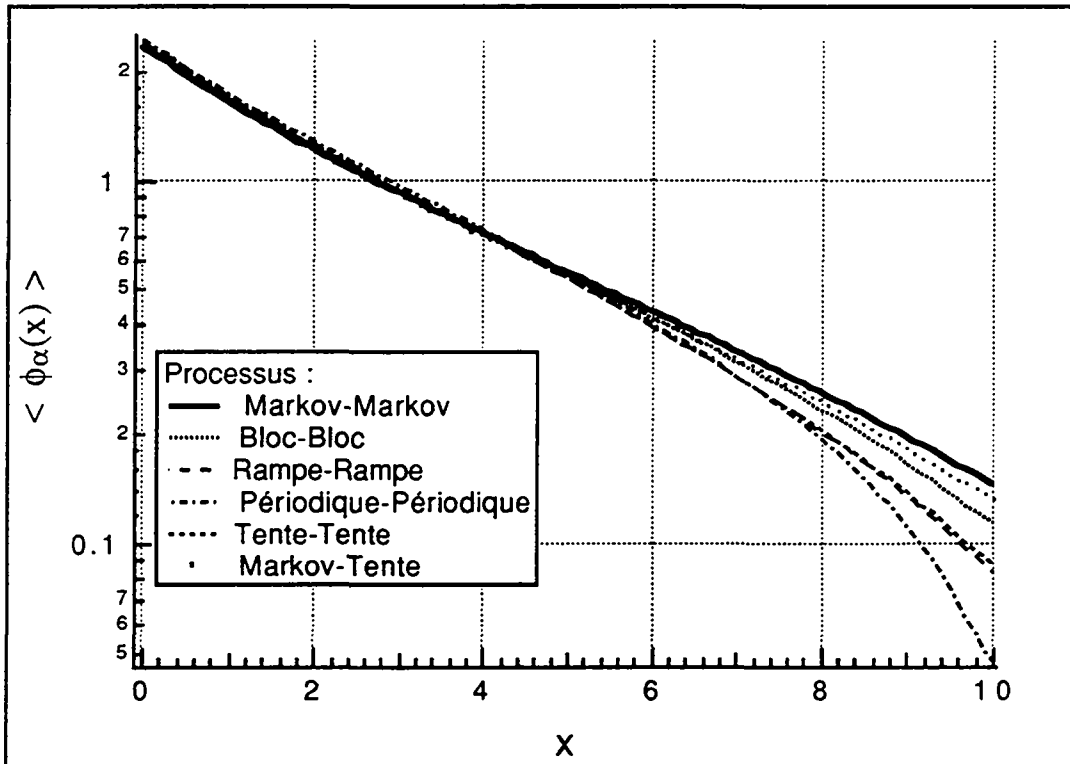


Figure B.8: Flux de matériau $\langle \phi_\alpha(x) \rangle$ pour le cas 2a et L=10.

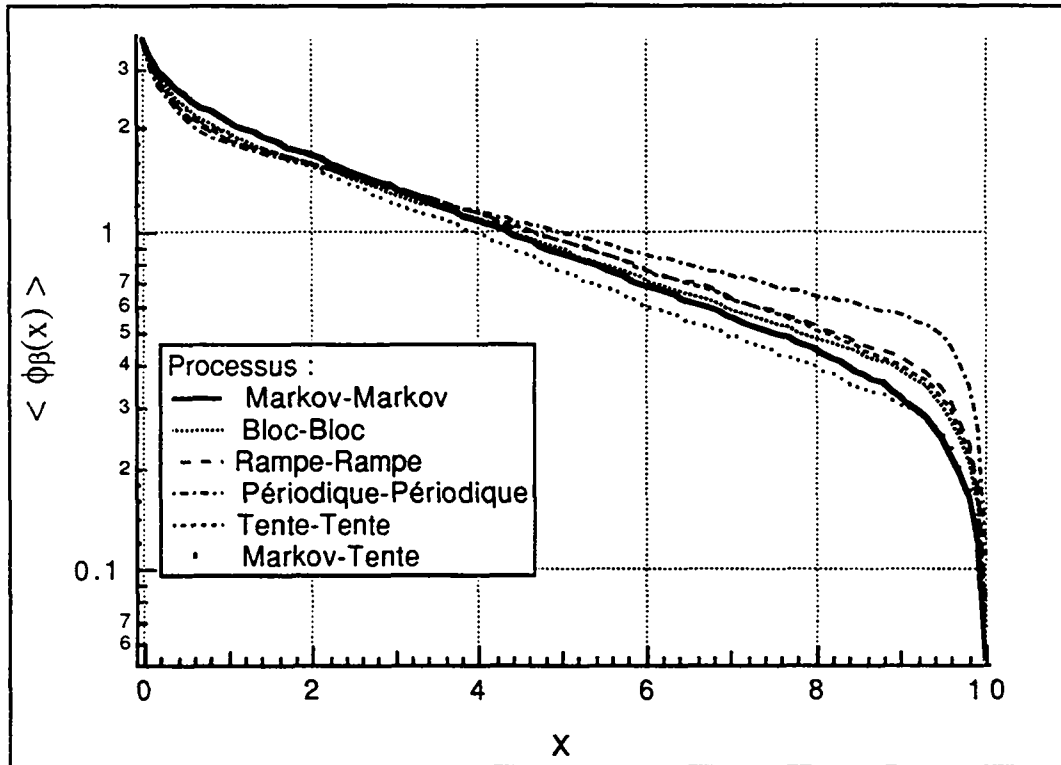


Figure B.9: Flux de matériau $\langle \phi_\beta(x) \rangle$ pour le cas 2a et $L=10$.

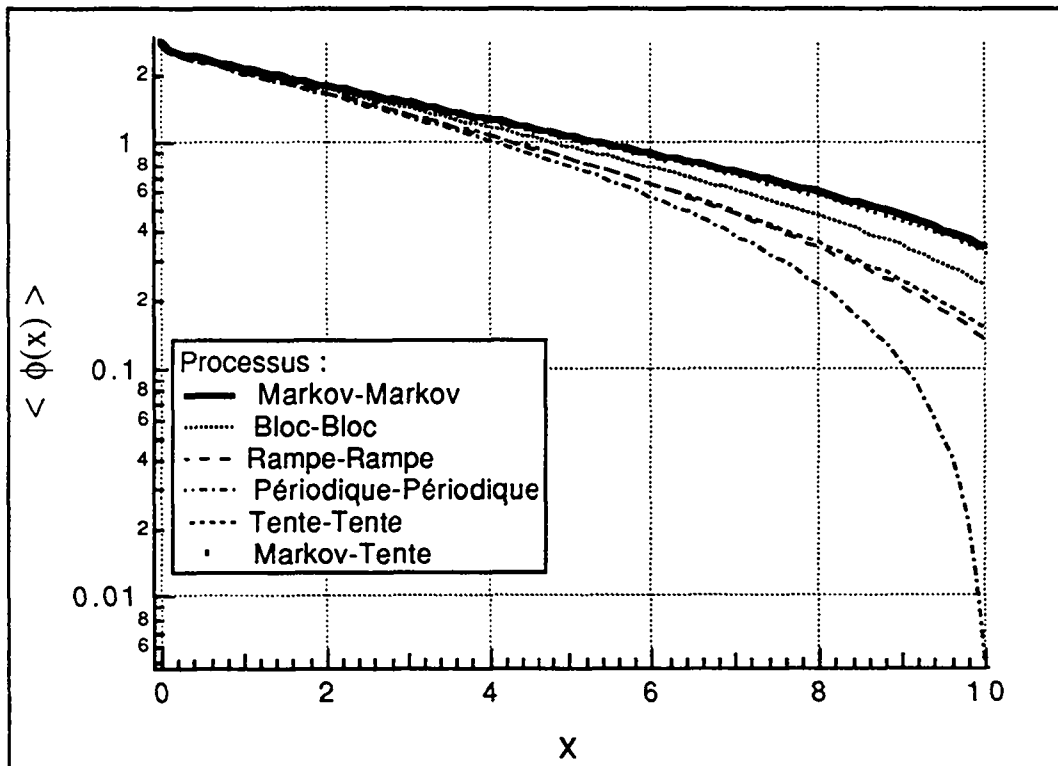


Figure B.10: Flux scalaire moyen $\langle \phi(x) \rangle$ pour le cas 2b et $L=10$.

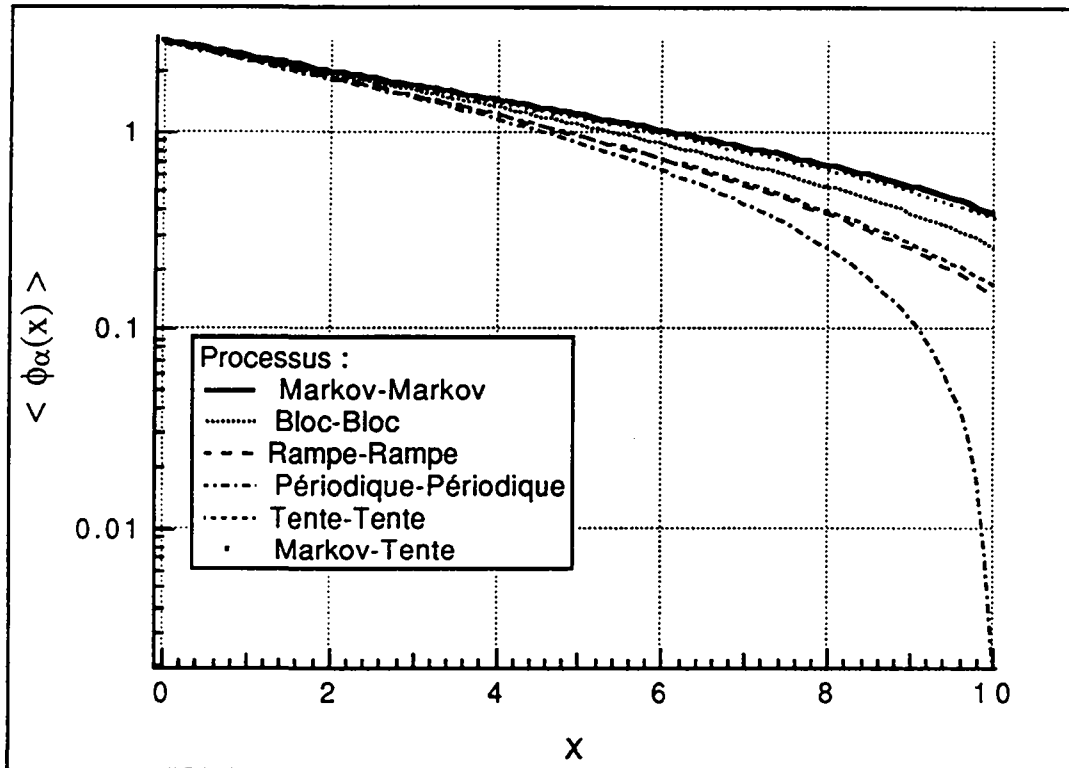


Figure B.11: Flux de matériau $\langle \phi_\alpha(x) \rangle$ pour le cas 2b et L=10.

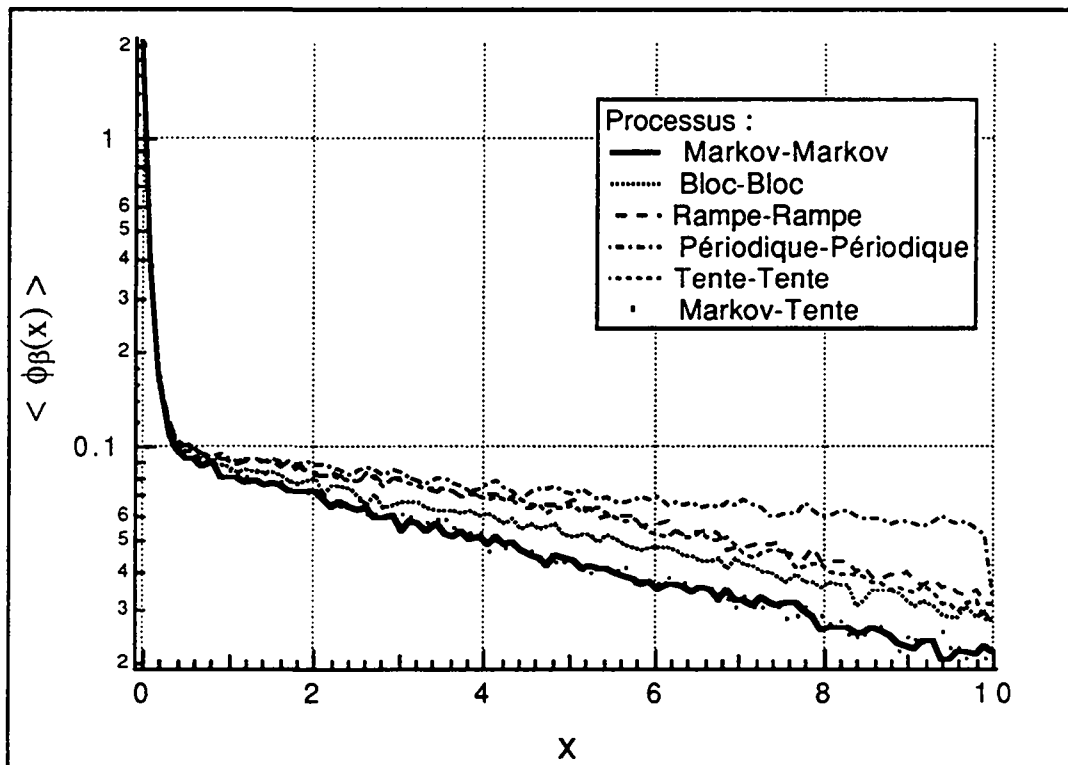


Figure B.12: Flux de matériau $\langle \phi_\beta(x) \rangle$ pour le cas 2b et L=10.

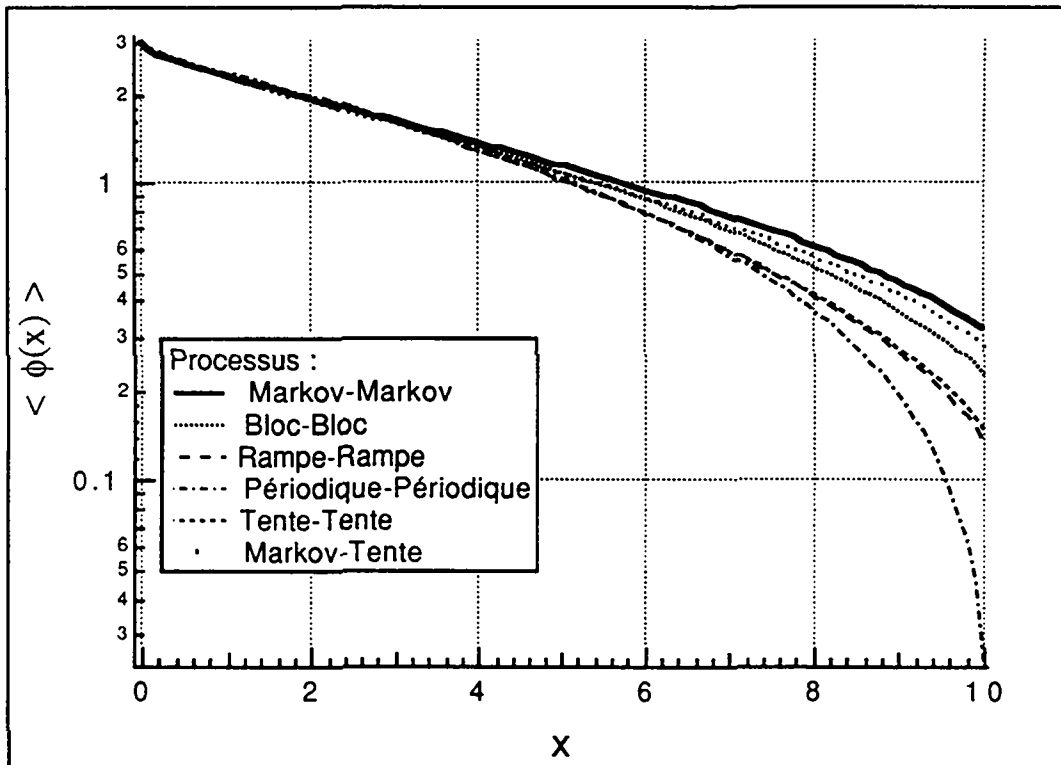


Figure B.13: Flux scalaire moyen $\langle \phi(x) \rangle$ pour le cas $2c$ et $L=10$.

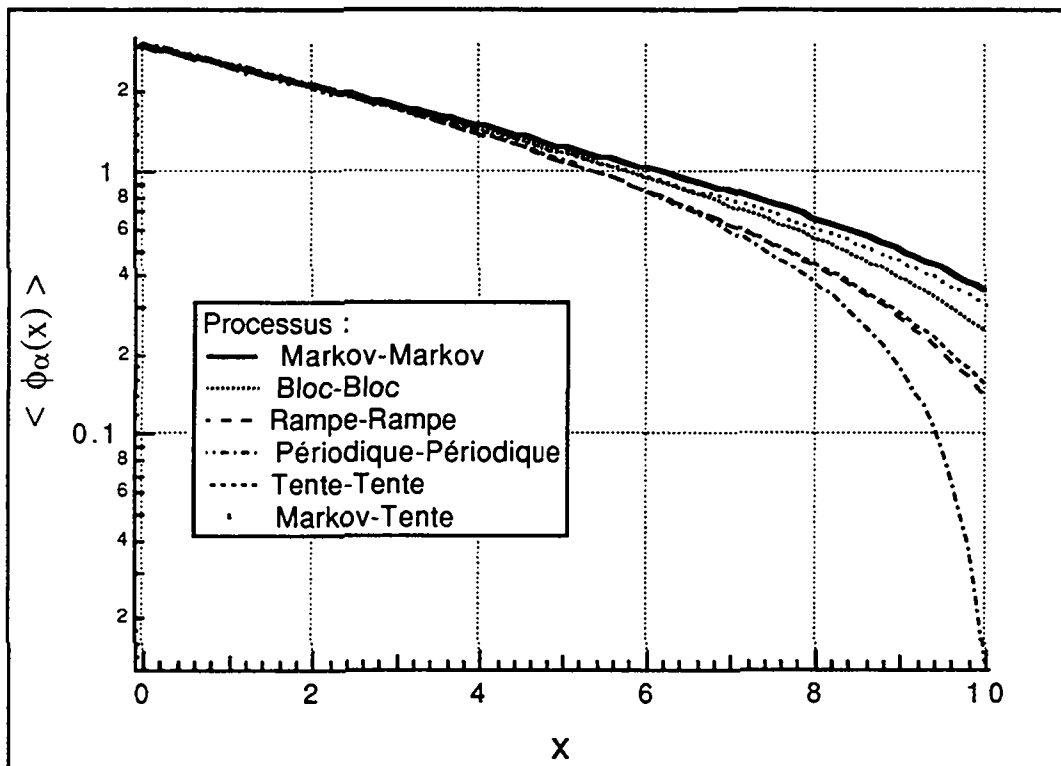


Figure B.14: Flux de matériau $\langle \phi_\alpha(x) \rangle$ pour le cas $2c$ et $L=10$.

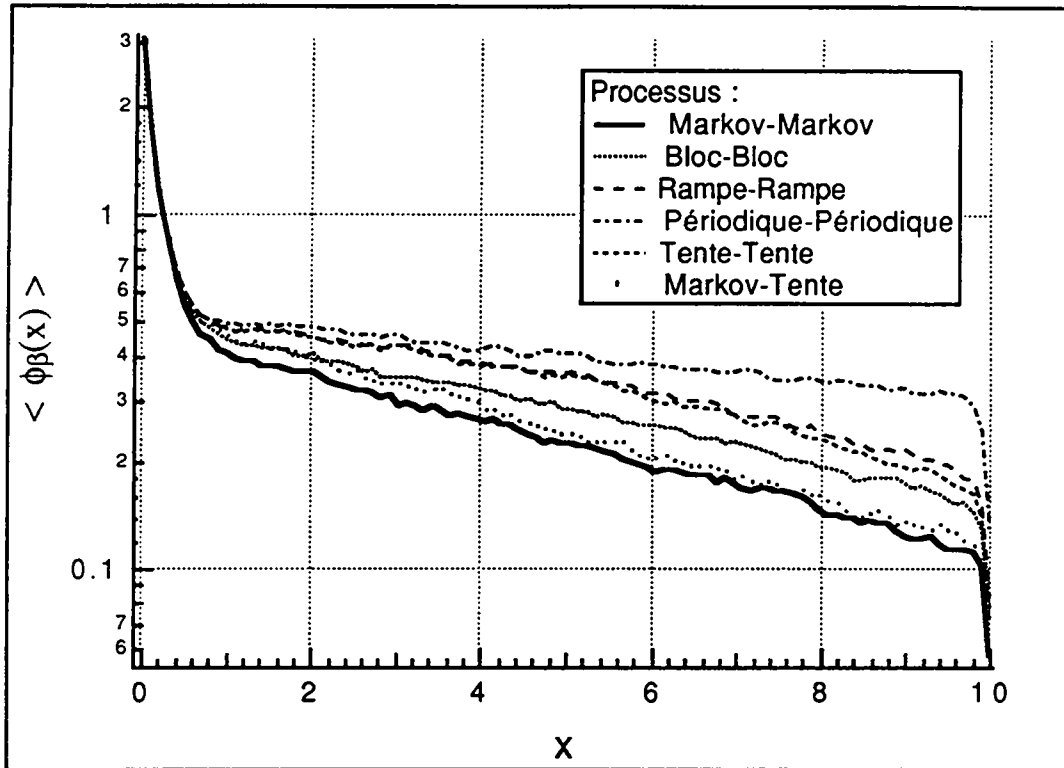


Figure B.15: Flux de matériau $\langle \phi_\beta(x) \rangle$ pour le cas 2c et $L=10$.

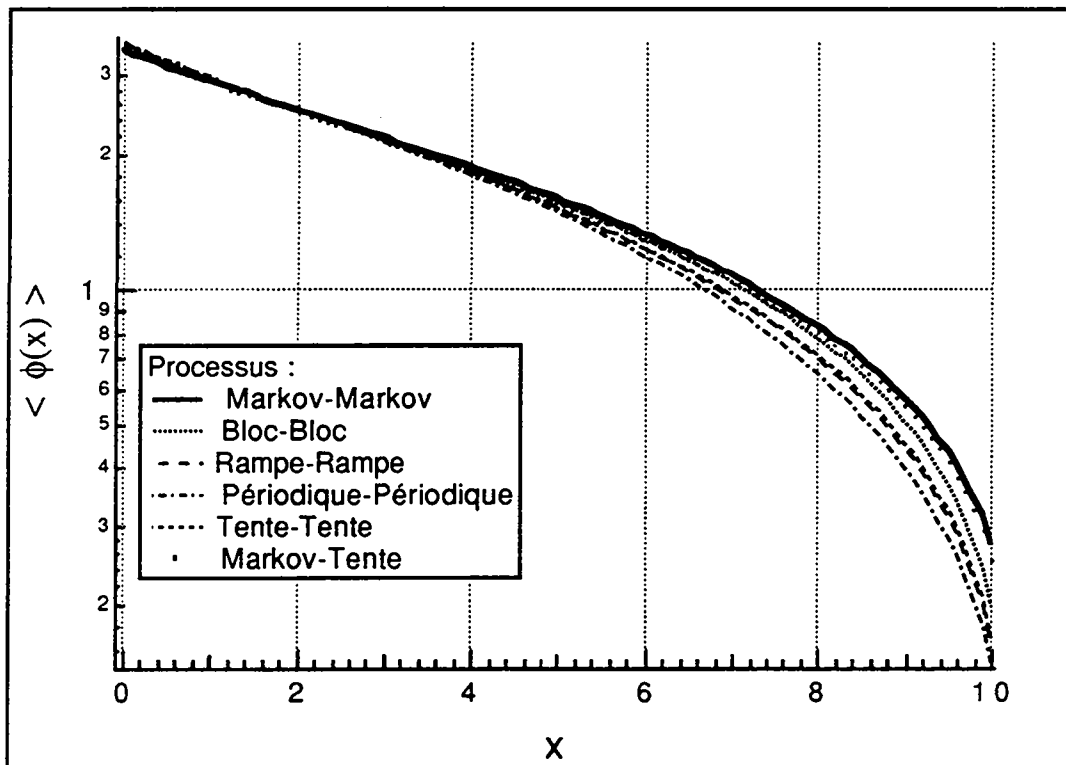


Figure B.16: Flux scalaire moyen $\langle \phi(x) \rangle$ pour le cas 3a et $L=10$.

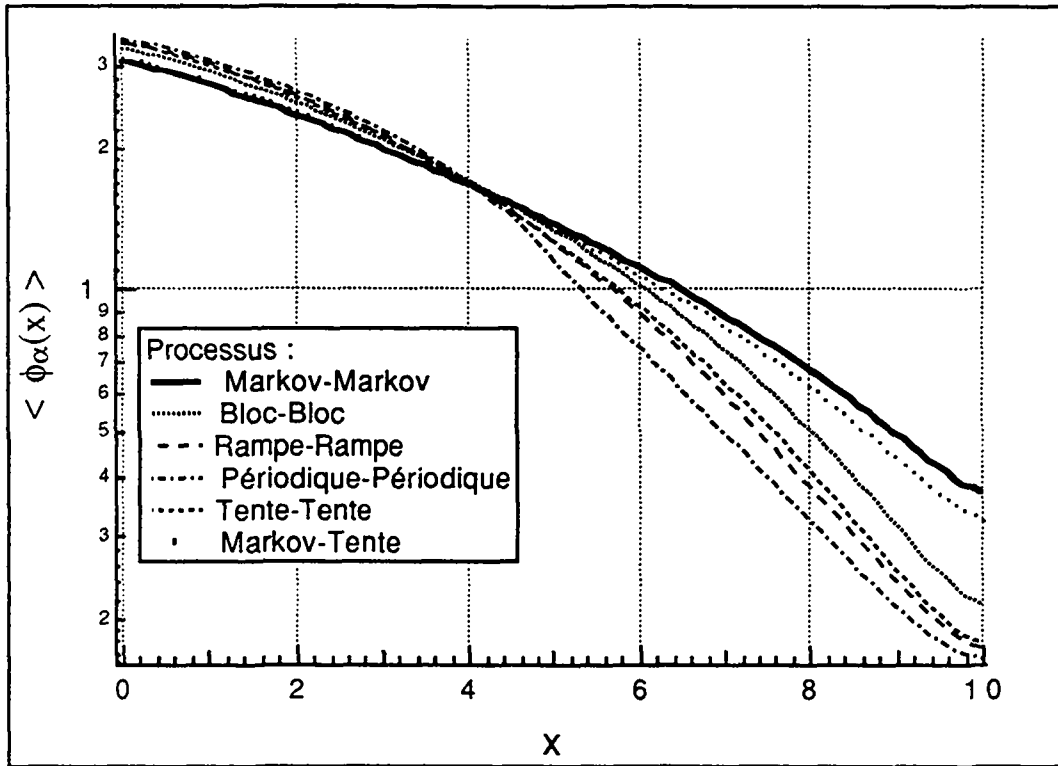


Figure B.17: Flux de matériau $\langle \phi_\alpha(x) \rangle$ pour le cas 3a et L=10.

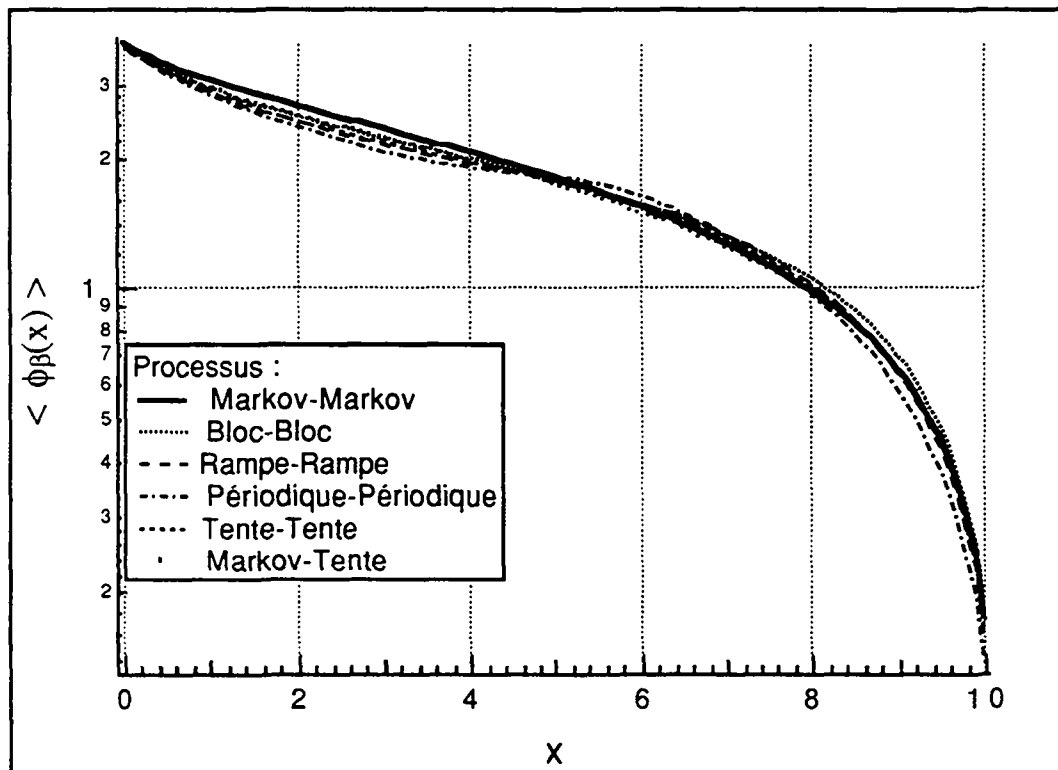


Figure B.18: Flux de matériau $\langle \phi_\beta(x) \rangle$ pour le cas 3a et L=10.

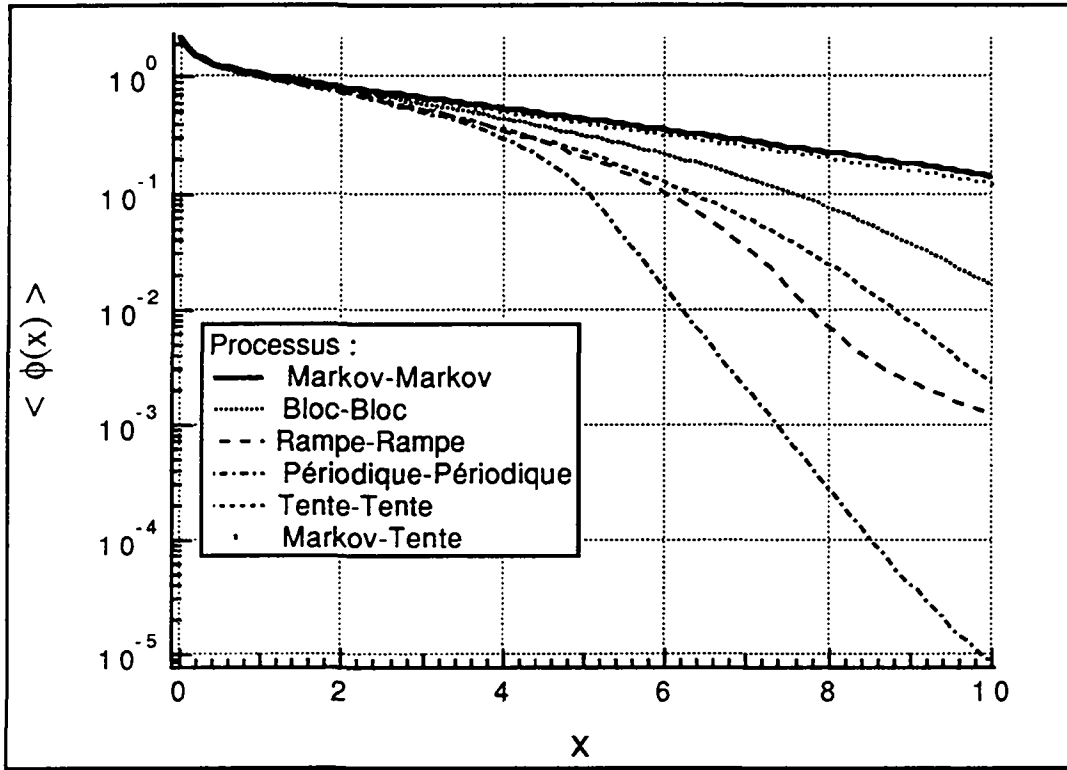


Figure B.19: Flux scalaire moyen $\langle \phi(x) \rangle$ pour le cas 3b et L=10.

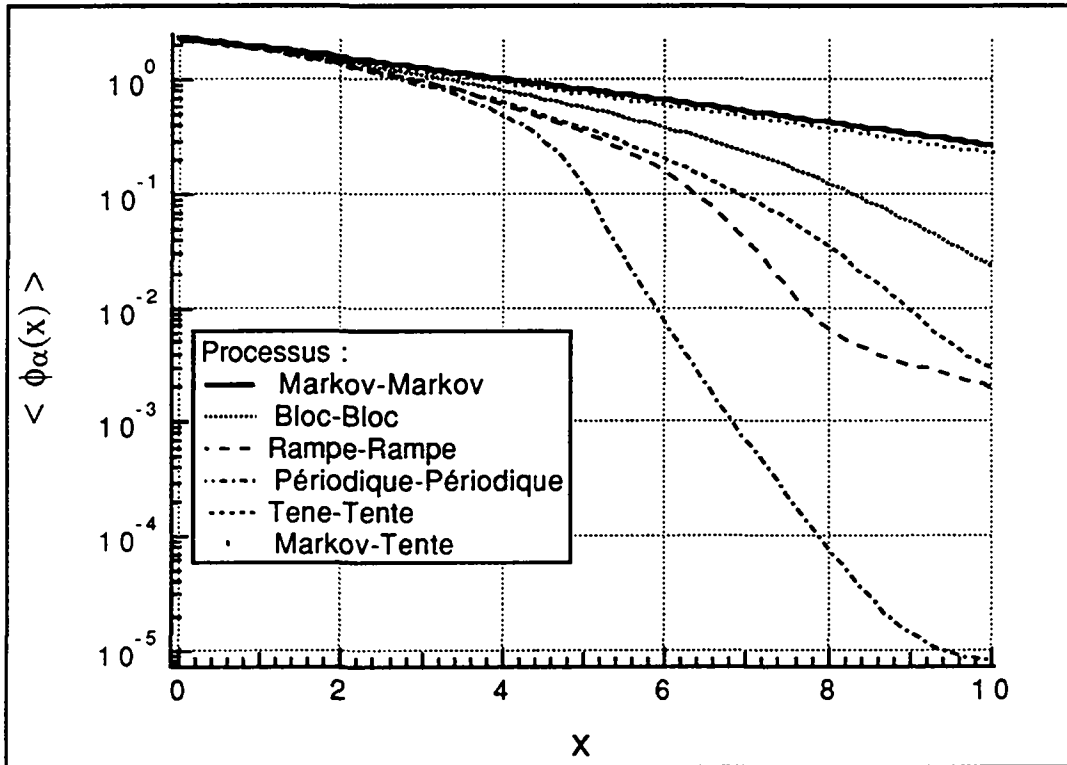


Figure B.20: Flux de matériau $\langle \phi_\alpha(x) \rangle$ pour le cas 3b et L=10.

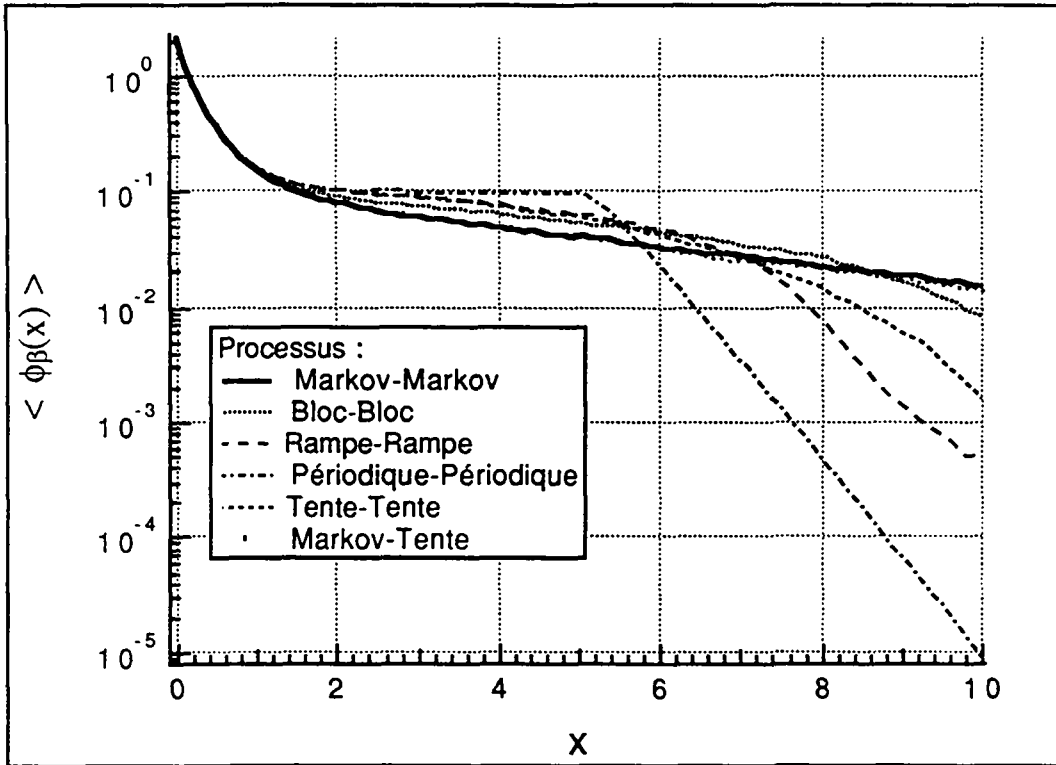


Figure B.21: Flux de matériau $\langle \phi_\beta(x) \rangle$ pour le cas 3b et $L=10$.

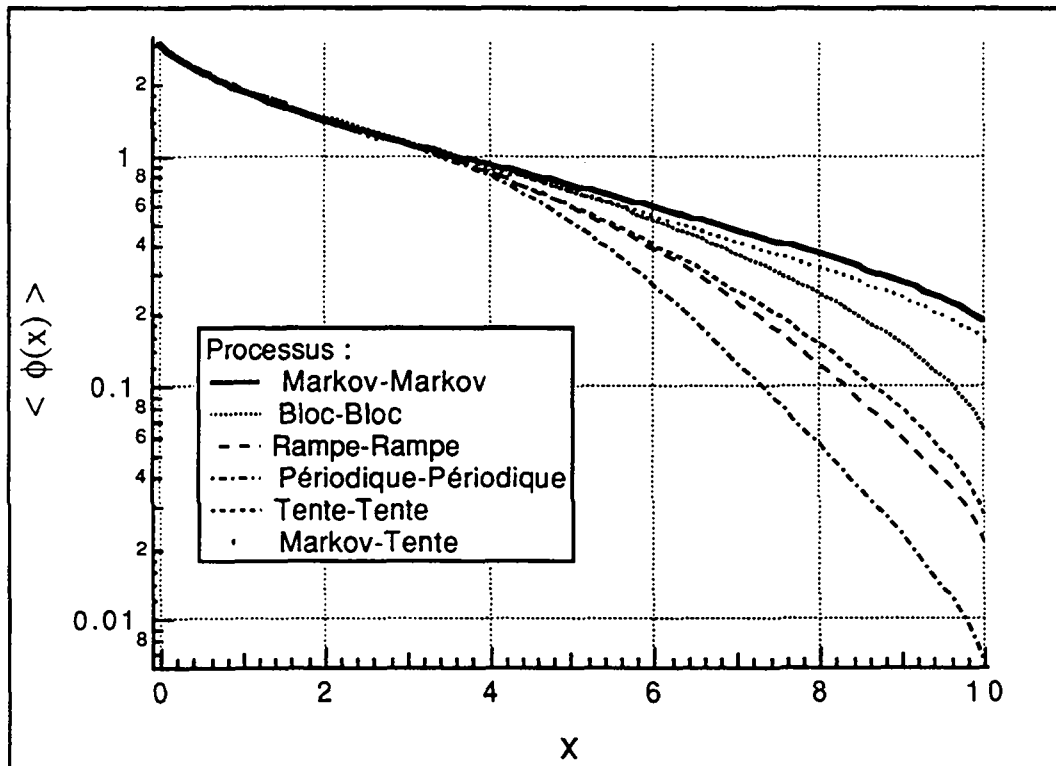


Figure B.22: Flux scalaire moyen $\langle \phi(x) \rangle$ pour le cas 3c et $L=10$.

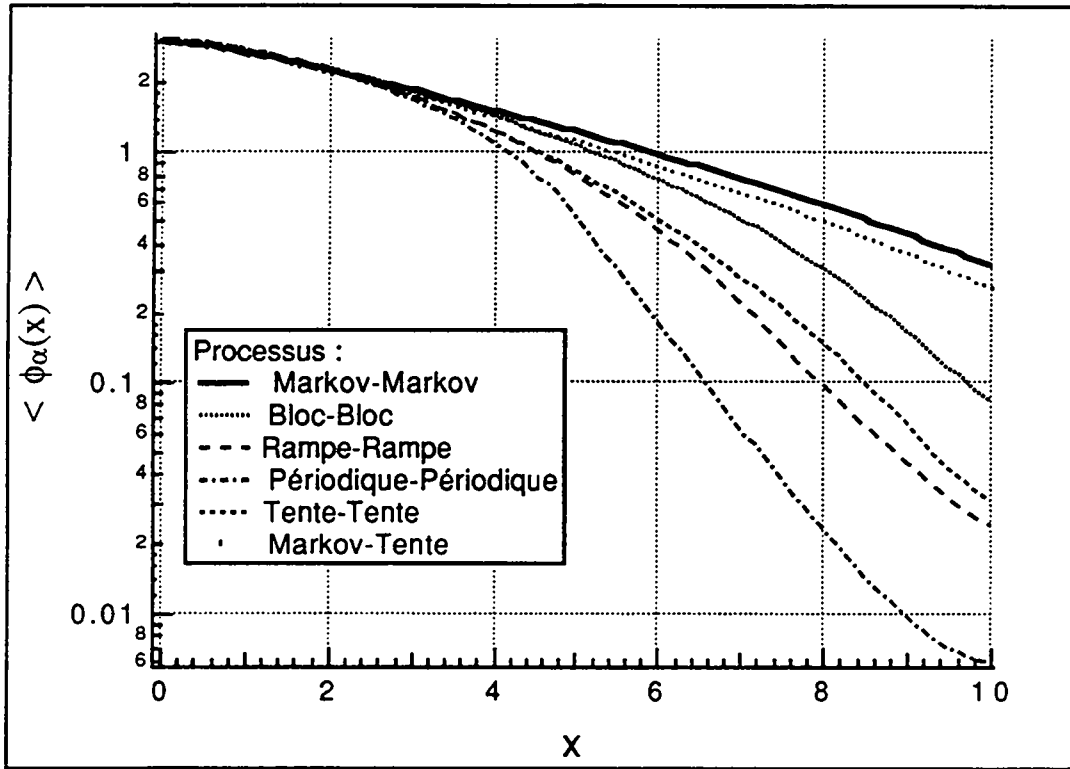


Figure B.23: Flux de matériau $\langle \phi_\alpha(x) \rangle$ pour le cas 3c et L=10.

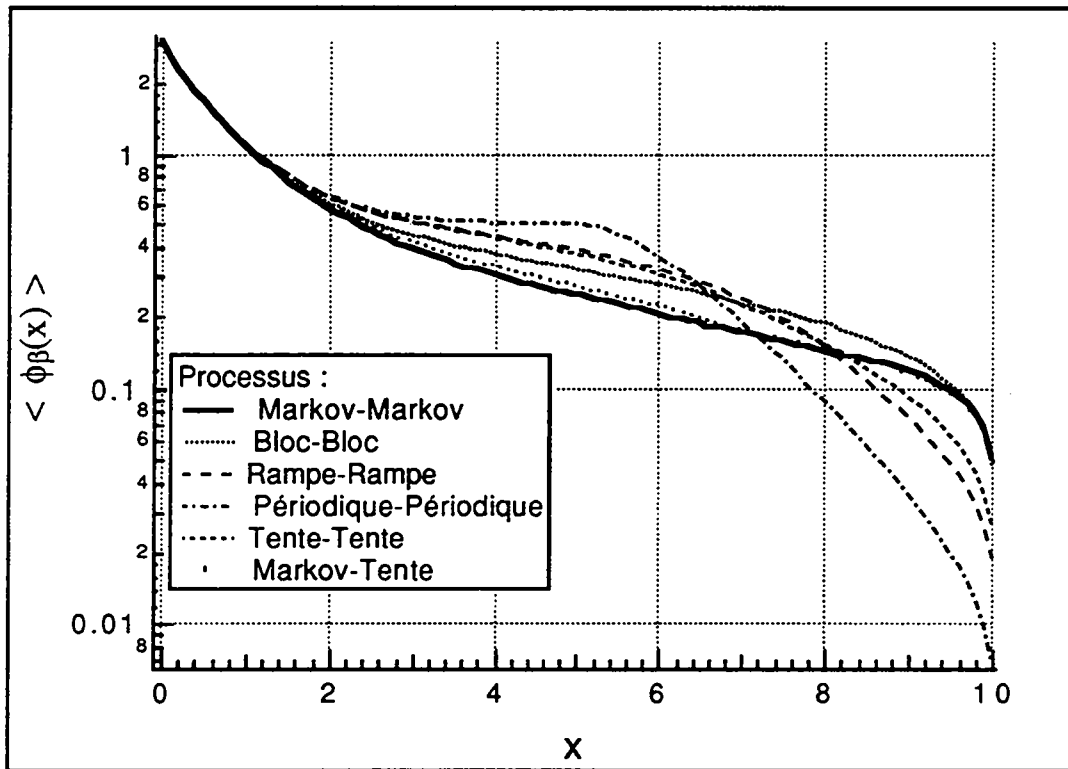


Figure B.24: Flux de matériau $\langle \phi_\beta(x) \rangle$ pour le cas 3c et L=10.

PROCESSUS PÉRIODIQUE-PÉRIODIQUE SANS COLLISIONS

Dans cette annexe on donne la solution analytique des équations (3.5) et (3.6) pour le cas du transport sans diffusion dans un système plan statistiquement composé de matériaux α et β dont la distribution des épaisseurs moyennes λ_α et λ_β est périodique. Chaque réalisation du processus de remplacement Périodique-Périodique est périodique avec une période $\lambda_p = \lambda_\alpha + \lambda_\beta$, ainsi il suffit de calculer la solution de l'éq. (3.5) seulement pour $x \in (0, \lambda_p)$. Pour une réalisation physique arbitraire et pour des matériaux purement absorbants, on a:

$$\psi_\omega(x, \mu) = \psi_{bd} \exp\left[-\frac{1}{\mu} \tau_\omega(x)\right] \quad (\text{C.1})$$

où ψ_{bd} est la condition au bord donnée par l'éq. (3.6) et

$$\tau_\omega(x) = \int_0^x \Sigma_\omega(x') dx'.$$

Pour un processus de remplacement à deux matériaux dont les distributions d'épaisseur sont périodiques, chaque réalisation physique est uniquement définie par la position de son premier point de transition $\alpha\beta$. Soit $\omega \in (0, \lambda_p)$ ce premier point de transition. De plus, comme les statistiques utilisées pour remplir la ligne sont homogènes, on doit avoir $p(\omega) = 1/\lambda_p$. Le calcul de la moyenne de l'équation (C.1) dépend de la position relative de x et de ω dans l'intervalle $(0, \lambda_p)$. Si on suppose, sans perte de généralité, que $\lambda_\beta \leq \lambda_\alpha$, on doit considérer les trois cas suivants:

Annexe C

Cas 1: $x \leq \lambda_\beta$

Ici on a quatre possibilités:

$$\begin{aligned} \omega \in (0, x) & : \tau_\omega(x) = \Sigma_{\beta} (x - \omega) + \Sigma_{\alpha} \omega & , x \in \beta, \\ \omega \in (x, \lambda_\alpha) & : \tau_\omega(x) = \Sigma_{\alpha} x & , x \in \alpha, \\ \omega \in (\lambda_\alpha, x + \lambda_\alpha) & : \tau_\omega(x) = \Sigma_{\beta} (\omega - \lambda_\alpha) + \Sigma_{\alpha} [x - (\omega - \lambda_\alpha)] & , x \in \alpha, \\ \omega \in (x + \lambda_\alpha, \lambda_p) & : \tau_\omega(x) = \Sigma_{\beta} x & , x \in \beta; \end{aligned}$$

et la solution sur ce domaine est:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_\alpha(x, \mu) \rangle &= \frac{e^{-\frac{\Sigma_{\alpha} x}{\mu}}}{\lambda_\alpha} \left[\lambda_\alpha - x + \frac{\mu}{\Sigma_{\beta} - \Sigma_{\alpha}} \left(1 - e^{-\frac{(\Sigma_{\beta} - \Sigma_{\alpha}) x}{\mu}} \right) \right], \\ \langle \Psi_\beta(x, \mu) \rangle &= \frac{e^{-\frac{\Sigma_{\beta} x}{\mu}}}{\lambda_\beta} \left[\lambda_\beta - x + \frac{\mu}{\Sigma_{\alpha} - \Sigma_{\beta}} \left(1 - e^{-\frac{(\Sigma_{\alpha} - \Sigma_{\beta}) x}{\mu}} \right) \right]. \end{aligned}$$

Case 2: $\lambda_\beta \leq x \leq \lambda_\alpha$

Dans ce cas la profondeur optique et la probabilité pour x d'appartenir à un matériau α ou β dépendent des positions suivantes de ω :

$$\begin{aligned} \omega \in (0, x - \lambda_\beta) & : \tau_\omega(x) = \Sigma_{\beta} \lambda_\beta + \Sigma_{\alpha} (x - \lambda_\beta) & , x \in \alpha, \\ \omega \in (x - \lambda_\beta, x) & : \tau_\omega(x) = \Sigma_{\alpha} \omega + \Sigma_{\beta} (x - \omega) & , x \in \beta, \\ \omega \in (x, \lambda_\alpha) & : \tau_\omega(x) = \Sigma_{\alpha} x & , x \in \alpha, \\ \omega \in (\lambda_\alpha, \lambda_p) & : \tau_\omega(x) = \Sigma_{\beta} (\omega - \lambda_\alpha) + \Sigma_{\alpha} [x - (\omega - \lambda_\alpha)] & , x \in \alpha; \end{aligned}$$

et les flux de matériau correspondants sont donnés par:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_\alpha(x, \mu) \rangle &= \frac{e^{-\frac{\Sigma_{\alpha} x}{\mu}}}{\lambda_\alpha} \left[\lambda_\alpha - x + e^{-\frac{(\Sigma_{\beta} - \Sigma_{\alpha}) \lambda_\beta}{\mu}} (x - \lambda_\beta) + \frac{\mu}{\Sigma_{\beta} - \Sigma_{\alpha}} \left(1 - e^{-\frac{(\Sigma_{\beta} - \Sigma_{\alpha}) \lambda_\beta}{\mu}} \right) \right], \\ \langle \Psi_\beta(x, \mu) \rangle &= \frac{e^{-\frac{\Sigma_{\alpha} x}{\mu}}}{\lambda_\beta} \left[\frac{\mu}{\Sigma_{\beta} - \Sigma_{\alpha}} \left(1 - e^{-\frac{(\Sigma_{\beta} - \Sigma_{\alpha}) \lambda_\beta}{\mu}} \right) \right]. \end{aligned}$$

Cas 3: $\lambda_\alpha \leq x$

On a à nouveau quatre possibilités:

$$\begin{aligned} \omega \in (0, x - \lambda_\beta) & : \tau_\omega(x) = \Sigma_{i\beta} \lambda_\beta + \Sigma_{i\alpha} (x - \lambda_\beta) & , x \in \alpha, \\ \omega \in (x - \lambda_\beta, \lambda_\alpha) & : \tau_\omega(x) = \Sigma_{i\alpha} \omega + \Sigma_{i\beta} (x - \omega) & , x \in \beta, \\ \omega \in (\lambda_\alpha, x) & : \tau_\omega(x) = \Sigma_{i\alpha} \lambda_\alpha + \Sigma_{i\beta} (x - \lambda_\alpha) & , x \in \beta, \\ \omega \in (x, \lambda_p) & : \tau_\omega(x) = \Sigma_{i\beta} (\omega - \lambda_\alpha) + \Sigma_{i\alpha} [x - (\omega - \lambda_\alpha)] & , x \in \alpha; \end{aligned}$$

avec les solutions suivantes:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_\alpha(x, \mu) \rangle &= \frac{e^{-\frac{\Sigma_{i\alpha} x}{\mu}}}{\lambda_\alpha} e^{-\frac{(\Sigma_{i\beta} - \Sigma_{i\alpha}) \lambda_\beta}{\mu}} \left[(x - \lambda_\beta) + \frac{\mu}{\Sigma_{i\alpha} - \Sigma_{i\beta}} \left(1 - e^{-\frac{(\Sigma_{i\alpha} - \Sigma_{i\beta})(\lambda_p - x)}{\mu}} \right) \right], \\ \langle \Psi_\beta(x, \mu) \rangle &= \frac{e^{-\frac{\Sigma_{i\beta} x}{\mu}}}{\lambda_\beta} e^{-\frac{(\Sigma_{i\alpha} - \Sigma_{i\beta}) \lambda_\alpha}{\mu}} \left[(x - \lambda_\alpha) + \frac{\mu}{\Sigma_{i\beta} - \Sigma_{i\alpha}} \left(1 - e^{-\frac{(\Sigma_{i\beta} - \Sigma_{i\alpha})(\lambda_p - x)}{\mu}} \right) \right]. \end{aligned}$$

Ainsi, par exemple, dans le calcul du cas 1 (tableau 3.1) pour un processus Périodique-Périodique sans collisions et pour une longueur $L=10$, on obtient la solution analytique représentée graphiquement par la figure C.1. Sur cette figure on distingue aisément la périodicité de la solution. L'effet escalier est dû aux trois parties de la solution décrites ci-dessus qui ont des dérivées très différentes. La différence de valeur de la dérivée de ces trois parties est due à la grande différence qui existe entre les valeurs des sections efficaces totales des différents matériaux (tableau 3.1).

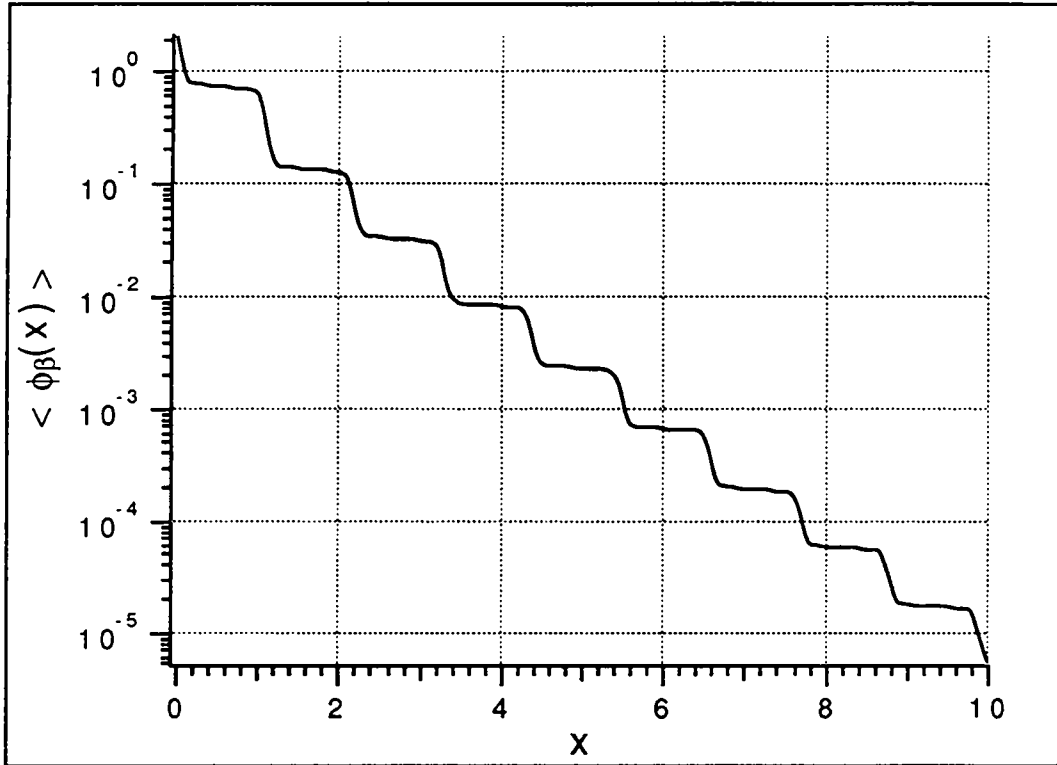


Figure C.1: Solution analytique de $\langle \phi_\beta(x) \rangle$ pour le processus Périodique-Périodique dans le cas 1 sans collisions et $L=10$ ($\lambda_p=1.1$).

FACTEUR DE CORRECTION q

Le facteur de correction q introduit dans les modèles intégro-différentiels décrits au Chapitre 4 pour tenir compte des processus de remplacement, s'écrit

$$q = \frac{1}{\Sigma_{\alpha}} \left[\frac{1}{\tilde{Q}_{\alpha}(\Sigma_{\alpha})} - \frac{1}{\lambda_{\alpha}} \right] + \frac{1}{\Sigma_{\beta}} \left[\frac{1}{\tilde{Q}_{\beta}(\Sigma_{\beta})} - \frac{1}{\lambda_{\beta}} \right] - 1 \quad (\text{D.1})$$

avec la transformée de Laplace

$$\tilde{Q}_{\alpha}(s) = \int_0^{\infty} Q_{\alpha}(x) e^{-sx} dx,$$

où $Q_{\alpha}(x)$ est défini par l'équation (3.2) et λ_{α} par (3.1). En utilisant la définition de $Q_{\alpha}(x)$ donnée par l'équation (3.2), on constate que

$$f_{\alpha}(x) = -\frac{d}{dx} Q_{\alpha}(x).$$

En utilisant les propriétés des transformées de Laplace¹⁰² on obtient la relation

$$\tilde{Q}_{\alpha}(s) = \frac{1 - \tilde{f}_{\alpha}(s)}{s}$$

et l'équation (D.1) devient

$$q = \left[\frac{1}{1 - \tilde{f}_{\alpha}(\Sigma_{\alpha})} - \frac{1}{\lambda_{\alpha} \Sigma_{\alpha}} \right] + \left[\frac{1}{1 - \tilde{f}_{\beta}(\Sigma_{\beta})} - \frac{1}{\lambda_{\beta} \Sigma_{\beta}} \right] - 1. \quad (\text{D.2})$$

Ainsi pour obtenir le facteur de correction, il suffit de connaître la transformée de Laplace des fonctions de distribution d'épaisseur décrites à l'Annexe A. Les transformées de Laplace des huit fonctions de distribution utilisées dans ce travail sont les suivantes:

Annexe D

1- Markov

$$\tilde{f}(s) = \frac{1}{\lambda s + 1} \quad (\text{D.3})$$

2- Bloc

$$\tilde{f}(s) = \frac{e^{-\lambda s}}{\gamma \lambda s} \sinh(\gamma \lambda s)$$

3- Parabolique inversée

$$\tilde{f}(s) = \frac{3e^{-\lambda s}}{\gamma \lambda s} \left[\left(1 + \frac{2}{\gamma^2 \lambda^2 s^2} \right) \sinh(\gamma \lambda s) + \frac{2}{\gamma \lambda s} \cosh(\gamma \lambda s) \right]$$

4- Rampe inversée

$$\tilde{f}(s) = \frac{2e^{-\lambda s}}{9\gamma \lambda s} \left[3e^{+\gamma \lambda s} - \frac{1}{\gamma \lambda s} (e^{+\gamma \lambda s} - e^{-2\gamma \lambda s}) \right]$$

5- Tente

$$\tilde{f}(s) = \frac{2e^{-\lambda s}}{(\gamma \lambda s)^2} (\cosh(\gamma \lambda s) - 1)$$

6- Rampe

$$\tilde{f}(s) = \frac{4e^{-\lambda s}}{3\gamma \lambda s} \left[\frac{2}{3\gamma \lambda s} (e^{+\gamma \lambda s} - e^{-\frac{1}{2}\lambda s}) - e^{-\frac{1}{2}\lambda s} \right]$$

7- Périodique

$$\tilde{f}(s) = e^{-\lambda s}$$

8- Gamma

$$\tilde{f}(s) = \frac{1}{\left(\frac{\lambda}{n}s + 1\right)^n}$$

Il est aisé de constater qu'en introduisant (D.3) dans l'équation (D.2) on obtient un facteur de correction équivalent à un pour des processus Markoviens à deux états.

ÉLÉMENTS FINIS

Dans cette Annexe est décrite la méthode des éléments finis appliquée à la résolution de l'ensemble des quatre équations couplées du modèle du remplacement (éqs. 4.22). La méthode est illustrée pour l'équation (4.22b). Sa résolution est basée sur la technique usuelle de l'itération sur la source dans laquelle le terme de diffusion est mis à jour après chaque itération interne. Lors d'une itération interne les dernières valeurs connues de la source de diffusion sont utilisées pour réaliser un balayage dans toutes les directions angulaires pour le calcul des flux angulaires et obtenir ainsi les nouvelles valeurs du terme source. Ce terme est utilisé pour la prochaine itération. Cependant pour chaque direction angulaire, l'équation (4.22b) doit être résolue avec une source de diffusion donnée. Pour discuter la discrétisation utilisée lors de la résolution, on simplifie la notation utilisée dans l'équation (4.22b) qui maintenant s'écrit

$$\psi_{\beta\alpha}(x) = \hat{Q}_{\beta}(x)\psi_{bd} + \int_0^x \left\{ \hat{f}_{\beta}(x-y)\psi_{\alpha\beta}(y) + \frac{\hat{Q}_{\beta}(x-y)}{|\mu|} F_{\beta}(y) \right\} dy, \quad (\text{E.1})$$

où F_{β} représente la contribution connue de la diffusion et où les facteurs exponentiels ont été absorbés dans les coefficients statistiques. Par exemple

$$\hat{Q}_{\beta}(x) = e^{-\frac{\Sigma_{\text{tr}}x}{|\mu|}} Q_{\beta}(x)$$

et de même pour les autres coefficients. On utilise alors la méthode de projection de Galerkin⁹⁰ pour discrétiser la variable spatiale. On adopte une base finie de fonctions $[f_i(x), i=0, \dots, N]$ et les flux angulaires sont développés dans cette base. Dans la notation vectorielle, ce développement s'écrit

$$\Psi_{\alpha\beta}(x) \approx \bar{\Psi}_{\alpha\beta} \cdot \bar{f}(x), \quad \Psi_{\beta\alpha}(x) \approx \bar{\Psi}_{\beta\alpha} \cdot \bar{f}(x),$$

où $\bar{f}(x) = \{f_i(x), i=0, \dots, N\}$ et $\bar{\Psi}_{\beta\alpha} = \{\Psi_{\beta\alpha,i}, i=0, \dots, N\}$. Ensuite ces approximations sont introduites dans l'équation (E.1) qu'on multiplie par chacune des fonctions de la base et qu'on intègre sur x de 0 à L pour obtenir un système linéaire d'équations pour les coefficients inconnus:

$$M\bar{\Psi}_{\beta\alpha} = \Psi_{bd}\bar{A}_{\beta} + B_{\beta}\bar{F}_{\beta} + C_{\beta}\bar{\Psi}_{\alpha\beta}. \quad (\text{E.2})$$

En définissant le produit scalaire et le produit de convolution

$$(f, g) = \int_0^L f(x)g(x) dx, \quad (f * g) = \int_0^x f(x-y)g(y) dy,$$

on peut écrire le vecteur \bar{A} et les matrices M , B et C comme suit:

$$M_{ij} = (f_i, f_j), \quad A_{\beta,i} = (f_i, \hat{Q}_{\beta}), \quad B_{\beta,ij} = \frac{1}{|\mu|} (f_i, \hat{Q}_{\beta} * f_j), \quad C_{\beta,ij} = (f_i, \hat{f}_{\beta} * f_j). \quad (\text{E.3})$$

Pour nos calculs nous avons utilisés des fonctions "tentes" comme fonctions f_j . Pour cela on divise L en N segments d'égales longueurs et on définit les fonctions

$$\begin{aligned} \Delta \cdot f_0(x) &= \begin{cases} \Delta - x & , \quad 0 \leq x < \Delta \\ 0 & , \quad \text{sinon} \end{cases}, \\ \Delta \cdot f_i(x) &= \begin{cases} x - (i-1)\Delta & , \quad (i-1)\Delta \leq x < i\Delta \\ (i+1)\Delta - x & , \quad i\Delta < x \leq (i+1)\Delta \\ 0 & , \quad \text{sinon} \end{cases}, \quad 0 < i < N, \\ \Delta \cdot f_N(x) &= \begin{cases} x - (N-1)\Delta & , \quad (N-1)\Delta \leq x < L \\ 0 & , \quad \text{sinon} \end{cases}, \end{aligned}$$

où $\Delta=L/N$ est la largeur de la maille. Avec ces fonctions à support fini, la procédure de Galerkin est équivalente à la formulation faible de la méthode des éléments finis.¹⁰³ La matrice M correspondante est

$$M = \frac{\Delta}{6} \begin{pmatrix} 2 & 1 & & & & \\ 1 & 4 & \ddots & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & 4 & 1 & \\ & & & 1 & 2 & \end{pmatrix},$$

et les autres coefficients de l'éq. (E.3) sont calculés à l'aide d'une quadrature de Gauss-Legendre pour chacune des intégrales. En pratique la quadrature de Gauss-Legendre d'ordre n est appliquée après la subdivision de l'intervalle effectif d'intégration en m segments égaux. Dans le but de minimiser le nombre de coefficients à calculer et à sauver on utilise les relations:

$$\begin{cases} B_{ij} = 0 & , \quad j > i+1 & , \\ B_{ij} = B_{i+k, j+k} & , \quad 0 \leq i+k, j+k \leq N & , \\ B_{ij} = B_{N-j, N-i} & . \end{cases}$$

Des relations similaires existent aussi pour la matrice C. D'autre part, la matrice C pour l'équation (4.22a) est égal à la matrice B, pour l'équation (4.22b), multipliée par $|\mu|/\lambda$. Pour nos calculs numériques les valeurs $n=5$ et $m=2$ donnent une précision suffisante.

À cause de la condition au bord $x=0$, on élimine la première équation dans le système (E.2). Le reste du système de N équations est alors résolu pour $\bar{\psi}_{\beta\alpha}$ par une simple technique de balayage.¹⁰⁴ Pour une source de diffusion donnée et pour chaque direction, l'équation (E.2) et son homologue pour $\bar{\psi}_{\alpha\beta}$ sont résolues jusqu'à la convergence (en pratique peu d'itérations sont nécessaires). Après avoir obtenu cette solution on passe à la prochaine itération. Une fois que les flux d'interface ont été calculés, leurs valeurs sont utilisées dans l'équation (4.22a) pour le calcul des flux de matériaux.

Annexe E

RÉSULTATS DES MODÈLES DE BASE

Tableau F.1: <R> et <T> pour les trois modèles de base pour trois mélanges dans le cas 1.

L	Cas	Mélanges					Bloc-Bloc					Tente-Tente				
		Modèles	Markovien	Interface	Rempl.	Markovien	Interface	Rempl.	Markovien	Interface	Rempl.					
0.1	a	<R>	0.04790	0.05009	0.05332	0.05308	0.05615	0.05484	0.05783	0.06101	0.05643					
		<T>	0.93428	0.93210	0.92840	0.92910	0.92603	0.92693	0.92434	0.92117	0.92531					
		<R>	0.00855	0.00865	0.00836	0.00824	0.00839	0.00833	0.00796	0.00812	0.00832					
0.1	b	<R>	0.90041	0.90044	0.90031	0.88732	0.88733	0.89896	0.87629	0.87629	0.89763					
		<T>	0.04732	0.04945	0.05288	0.05247	0.05545	0.05431	0.05718	0.06027	0.05579					
		<R>	0.93441	0.93247	0.93018	0.92886	0.92612	0.92877	0.92388	0.92103	0.92729					
1.0	a	<R>	0.21867	0.26444	0.26416	0.227443	0.30924	0.32510	0.30405	0.32921	0.38469					
		<T>	0.62540	0.58273	0.56053	0.56894	0.53731	0.49529	0.53833	0.51639	0.43276					
		<R>	0.04602	0.05454	0.04004	0.03485	0.04191	0.03618	0.02924	0.03443	0.03317					
1.0	b	<R>	0.48341	0.48488	0.47680	0.36873	0.37000	0.40021	0.31490	0.31585	0.33961					
		<T>	0.21782	0.28142	0.26406	0.27012	0.31673	0.31475	0.29847	0.33134	0.36429					
		<R>	0.62674	0.59577	0.57494	0.56504	0.54023	0.50461	0.53338	0.51517	0.43996					
10.0	a	<R>	0.37596	0.48089	0.39087	0.42986	0.50727	0.45726	0.45433	0.51034	0.49997					
		<T>	0.02589	0.04381	0.00970	0.01325	0.03022	0.00247	0.00934	0.02247	0.00105					
		<R>	0.05906	0.09239	0.04685	0.03929	0.05622	0.03807	0.03171	0.04201	0.03398					
10.0	b	<R>	0.00153	0.01016	0.00106	0.00016	0.00351	0.00008	0.00006	0.00187	0.00003					
		<T>	0.37066	0.50069	0.37123	0.41587	0.48990	0.41925	0.43825	0.48528	0.45261					
		<R>	0.02373	0.01555	0.00634	0.01119	0.00625	0.00118	0.00771	0.00461	0.00045					

Tableau F.2: <R> et <T> pour les trois modèles de base pour trois mélanges dans le cas 2.

L	Cas	Mélanges				Bloc-Bloc				Tente-Tente			
		Modèles	Markovien	Interface	Rempl.	Markovien	Interface	Rempl.	Markovien	Interface	Rempl.		
0.1	a	<R>	0.04316	0.04348	0.04397	0.04339	0.04384	0.04400	0.04358	0.04413	0.04403		
		<T>	0.93903	0.93870	0.93815	0.93880	0.93835	0.93812	0.93861	0.93805	0.93810		
		<R>	0.00886	0.00887	0.00884	0.00884	0.00886	0.00884	0.00883	0.00885	0.00884		
	b	<T>	0.91397	0.91402	0.91398	0.91326	0.91327	0.91396	0.91267	0.91268	0.91395		
		<R>	0.04258	0.04290	0.04344	0.04281	0.04326	0.04346	0.04301	0.04355	0.04349		
		<T>	0.93966	0.93938	0.93905	0.93940	0.93901	0.93903	0.93918	0.93870	0.93901		
	c	<R>	0.10678	0.12830	0.12626	0.11455	0.14157	0.12980	0.12092	0.15168	0.13375		
		<T>	0.73847	0.71781	0.71999	0.73060	0.70469	0.70815	0.72416	0.69474	0.70391		
		<R>	0.07170	0.07447	0.07119	0.06961	0.07323	0.07104	0.06797	0.07222	0.07089		
1.0	b	<T>	0.75806	0.75851	0.75757	0.73568	0.73627	0.75456	0.71809	0.71878	0.75144		
		<R>	0.12551	0.15761	0.15543	0.13049	0.17056	0.15854	0.13490	0.18030	0.16187		
		<T>	0.77325	0.76334	0.76441	0.76023	0.74697	0.76075	0.75027	0.73451	0.75671		
	a	<R>	0.17986	0.25651	0.20765	0.20369	0.29375	0.23202	0.22081	0.31835	0.26032		
		<T>	0.12779	0.11758	0.08933	0.11091	0.10421	0.06453	0.09945	0.09544	0.03983		
		<R>	0.21928	0.29459	0.21427	0.18606	0.26487	0.20278	0.16566	0.24410	0.19281		
	c	<T>	0.17869	0.21991	0.17409	0.12499	0.16583	0.13171	0.09410	0.13297	0.09648		
		<R>	0.29092	0.49053	0.35898	0.28889	0.50313	0.37411	0.29035	0.50888	0.39314		
		<T>	0.19440	0.19702	0.17452	0.15609	0.15669	0.13521	0.13277	0.13172	0.09813		
10.0	b	<R>	0.21928	0.29459	0.21427	0.18606	0.26487	0.20278	0.16566	0.24410	0.19281		
		<T>	0.17869	0.21991	0.17409	0.12499	0.16583	0.13171	0.09410	0.13297	0.09648		
		<R>	0.29092	0.49053	0.35898	0.28889	0.50313	0.37411	0.29035	0.50888	0.39314		
	c	<R>	0.29092	0.49053	0.35898	0.28889	0.50313	0.37411	0.29035	0.50888	0.39314		
		<T>	0.19440	0.19702	0.17452	0.15609	0.15669	0.13521	0.13277	0.13172	0.09813		
		<R>	0.29092	0.49053	0.35898	0.28889	0.50313	0.37411	0.29035	0.50888	0.39314		

Tableau F.3: <R> et <T> pour les trois modèles de base pour trois mélanges dans le cas 3.

L	Cas	Markov-Markov				Bloc-Bloc				Tente-Tente			
		Mélanges Modèles	Markovien	Interface	Rempl.	Markovien	Interface	Rempl.	Markovien	Interface	Rempl.		
0.1	a	<R>	0.07575	0.07577	0.07587	0.07581	0.07585	0.07587	0.07586	0.07590	0.07587		
		<T>	0.92227	0.92225	0.92215	0.92221	0.92218	0.92215	0.92217	0.92213	0.92215		
		<R>	0.00098	0.00098	0.00097	0.00097	0.00097	0.00097	0.00097	0.00097	0.00097	0.00097	
0.1	b	<R>	0.85035	0.85038	0.85034	0.85020	0.85020	0.85034	0.85010	0.85010	0.85034		
		<T>	0.06694	0.06695	0.06704	0.06699	0.06703	0.06705	0.06704	0.06707	0.06705		
		<T>	0.91375	0.91373	0.91365	0.91368	0.91366	0.91365	0.91364	0.91361	0.91365		
0.1	c	<R>	0.31575	0.32426	0.33074	0.32185	0.33355	0.33297	0.32584	0.33919	0.33543		
		<T>	0.66514	0.65666	0.64823	0.65902	0.64738	0.64595	0.65502	0.64174	0.64344		
		<R>	0.00847	0.00890	0.00820	0.00796	0.00856	0.00816	0.00765	0.00834	0.00812		
1.0	b	<R>	0.48288	0.48261	0.48231	0.46290	0.46293	0.48049	0.45066	0.45069	0.47862		
		<T>	0.23813	0.24713	0.25578	0.24394	0.25637	0.25790	0.24775	0.26194	0.26021		
		<T>	0.60852	0.60170	0.59901	0.60085	0.59135	0.59702	0.59591	0.58509	0.59485		
10.0	a	<R>	0.60694	0.67610	0.62666	0.64558	0.71108	0.67974	0.66388	0.72613	0.71475		
		<T>	0.23908	0.19005	0.14844	0.20006	0.16034	0.08656	0.18171	0.14778	0.04443		
		<R>	0.02430	0.03781	0.02277	0.01737	0.02850	0.01935	0.01470	0.02433	0.01751		
10.0	b	<R>	0.07546	0.07806	0.07433	0.03109	0.03294	0.01245	0.01773	0.01918	0.00291		
		<T>	0.32721	0.46978	0.45136	0.34567	0.47907	0.49692	0.35621	0.48041	0.52723		
		<T>	0.11946	0.13433	0.12340	0.07326	0.08465	0.05624	0.05589	0.06665	0.02320		

ÉQUIVALENCE DES MODÈLE MARKOVIEN ET CONTRAINT POUR DES PROCESSUS MARKOVIENS

Le modèle Markovien pour un mélange binaire Markovien en statistiques homogènes avec des matériaux homogènes et dans le cas du transport stationnaire, monoénergétique avec collisions et sources isotropes ainsi que des conditions aux bords non stochastiques s'écrit (§ 4.1.1, éq. (4.6)):

$$\begin{aligned} [\bar{\Omega} \cdot \bar{\nabla} + \Sigma_{\text{ia}}] \Psi_{\alpha}(\bar{r}, \bar{\Omega}) &= \frac{1}{4\pi} [\Sigma_{\text{sa}} \phi_{\alpha}(\bar{r}) + S_{\alpha}] \\ &+ \frac{1}{\lambda_{\text{ca}}(\bar{\Omega})} [\Psi_{\beta}(\bar{r}, \bar{\Omega}) - \Psi_{\alpha}(\bar{r}, \bar{\Omega})] \text{ dans } X, \\ \Psi_{\alpha}(\bar{r}, \bar{\Omega}) &= \Psi_{\text{bd}}(\bar{\Omega}) \text{ sur } \partial X. \end{aligned}$$

En utilisant comme coordonnée spatiale la distance x au bord ∂X , mesurée sur une direction, on obtient

$$\frac{d}{dx} \Psi_{\alpha}(x) + \left[\Sigma_{\text{ia}} + \frac{1}{\lambda_{\text{ca}}} \right] \Psi_{\alpha}(x) = \frac{1}{4\pi} [S_{\alpha} + \Sigma_{\text{sa}} \phi_{\alpha}(x)] + \frac{1}{\lambda_{\text{ca}}} \Psi_{\beta}(x) \text{ dans } X.$$

L'intégration de cette équation avec les conditions aux bords appropriées donnent

$$\begin{aligned} \Psi_{\alpha}(x) &= e^{-\Sigma_{\text{ia}} x} e^{-\frac{x}{\lambda_{\text{ca}}}} \Psi_{\text{bd}} + \int_0^x e^{-\Sigma_{\text{ia}}(x-y)} \left\{ e^{-\frac{(x-y)}{\lambda_{\text{ca}}}} \frac{1}{4\pi} [S_{\alpha} + \Sigma_{\text{sa}} \phi_{\alpha}(y)] \right. \\ &\quad \left. + e^{-\frac{(x-y)}{\lambda_{\text{ca}}}} \frac{1}{\lambda_{\text{ca}}} \Psi_{\beta}(y) \right\} dy. \end{aligned}$$

Dans l'équation précédente on reconnaît les moments statistiques

$$R_{\alpha}(x) = e^{-\frac{x}{\lambda_{\text{ca}}}} \quad \text{et} \quad f_{\text{sa}}(x) = \frac{1}{\lambda_{\text{ca}}} e^{-\frac{x}{\lambda_{\text{ca}}}}$$

Annexe G

pour un processus Markovien le long d'une direction.

Ainsi le modèle Markovien en formulation intégrale s'écrit

$$\Psi_{\alpha}(x) = e^{-\Sigma_{\alpha}x} R_{\alpha}(x) \Psi_{bd} + \int_0^x e^{-\Sigma_{\alpha}(x-y)} \left\{ \frac{R_{\alpha}(x-y)}{4\pi} [S_{\alpha} + \Sigma_{s\alpha} \phi_{\alpha}(y)] + f_{s\alpha}(x-y) \Psi_{\beta}(y) \right\} dy. \quad (G.1)$$

Avec les mêmes hypothèses que celles énoncées pour le modèle Markovien, le modèle du remplacement modifié s'écrit avec les mêmes coordonnées que ci-dessus (§ 4.1.2, éqs. (4.10a) et (4.11) avec (4.15) et (4.16)):

$$\Psi_{\alpha}(x) = e^{-\Sigma_{\alpha}x} R_{\alpha}(x) \Psi_{bd} + \int_0^x e^{-\Sigma_{\alpha}(x-y)} \left\{ f_{s\alpha}(x-y) \Psi_{\beta\alpha}(y) + \frac{R_{\alpha}(x-y)}{4\pi} [S_{\alpha} + \Sigma_{s\alpha} \phi_{\alpha}(y)] \right\} dy, \quad (G.2)$$

$$\begin{aligned} \Psi_{\beta\alpha}(x) = & e^{-\Sigma_{\beta}x} Q_{\beta}(x) \Psi_{bd} + \int_0^x e^{-\Sigma_{\beta}(x-y)} \left\{ f_{\beta}(x-y) [\varepsilon_{\beta}(x-y) \Psi_{\alpha}(y) \right. \\ & + (1 - \varepsilon_{\beta}(x-y)) \Psi_{\alpha\beta}(y)] + \frac{Q_{\beta}(x-y)}{4\pi} \Sigma_{s\beta} [\varepsilon_{\beta}(x-y) \phi_{\beta\alpha}(y) \\ & \left. + (1 - \varepsilon_{\beta}(x-y)) \phi_{\beta}(y)] \right\} dy. \end{aligned} \quad (G.3)$$

Dans le modèle contraint $\varepsilon_{\beta}(x-y)=0$ et pour un processus Markovien $Q_{\beta}=R_{\beta}$ et $f_{\beta}=f_{s\beta}$, ainsi l'équation (G.3) devient

$$\Psi_{\beta\alpha}(x) = e^{-\Sigma_{\beta}x} R_{\beta}(x) \Psi_{bd} + \int_0^x e^{-\Sigma_{\beta}(x-y)} \left\{ f_{s\beta}(x-y) \Psi_{\alpha\beta}(y) + \frac{R_{\beta}(x-y)}{4\pi} [S_{\beta} + \Sigma_{s\beta} \phi_{\beta}(y)] \right\} dy. \quad (G.4)$$

En comparant l'équation (G.4) avec l'équation (G.2) pour le matériau β on obtient l'identité

$$\Psi_{\beta\alpha}(x) = \Psi_{\beta}(x). \quad (G.5)$$

En introduisant l'identité (G.5) dans l'équation (G.2) on obtient l'équation (G.1) qui ainsi décrit le modèle Markovien et le modèle contraint pour un processus Markovien à deux états en statistiques homogènes avec des matériaux homogènes.

COMPOSITION DES MILIEUX

Dans cette annexe sont décrites les caractéristiques et la composition isotopique des milieux béton, eau, Corium 1 et Corium 2 utilisés pour les calculs de réactivité d'un Corium sur un récupérateur plan.

Tableau H.1: Caractéristiques du béton

Densité (g/cm ³)	2.39
Masse atomique moyenne	18.63
Densité des noyaux lourds (g/cm ³)	0

Tableau H.2: Contenu isotopique du béton (10²⁴ atomes/cm³)

Hydrogène	7.2276 10 ⁻³
Carbone	2.4092 10 ⁻⁴
Oxygène	4.6979 10 ⁻²
Al ²⁷	3.7504 10 ⁻⁴
Si ²⁸	2.0070 10 ⁻²
Mn ⁵⁵	2.6311 10 ⁻⁵
Fe ⁵⁴	7.5100 10 ⁻⁶
Fe ⁵⁶	1.1869 10 ⁻⁴
Fe ⁵⁸	3.6000 10 ⁻⁷

Fe ⁵⁷	2.8500 10 ⁻⁶
Calcium	2.5246 10 ⁻³

Tableau H.3: Caractéristiques de l'eau

Densité (g/cm ³)	1.00
Masse atomique moyenne	18.01
Densité des noyaux lourds (g/cm ³)	0

Tableau H.4: Contenu isotopique de l'eau (10²⁴ atomes/cm³)

Eau	3.3444 10 ^{-2*}
B ¹⁰	1.1349 10 ⁻⁹

*unité: 10²⁴ molécules/cm³

Tableau H.5: Caractéristiques du Corium 1

Densité (g/cm ³)	8.41
Masse atomique moyenne	72.15
Densité des noyaux lourds (g/cm ³)	4.64

Tableau H.6: Contenu isotopique du Corium 1 (10²⁴ atomes/cm³)

U ²³⁴	1.3486 10 ⁻⁸
U ²³⁵	3.2008 10 ⁻⁴
U ²³⁶	2.7890 10 ⁻⁵
U ²³⁸	1.1330 10 ⁻²

Pu ²³⁸	5.0792 10 ⁻⁷
Pu ²³⁹	4.2204 10 ⁻⁵
Pu ²⁴⁰	1.1302 10 ⁻⁵
Pu ²⁴¹	6.6905 10 ⁻⁶
Pu ²⁴²	1.4626 10 ⁻⁶
Oxygène	3.4649 10 ⁻²
Np ²³⁷	2.1374 10 ⁻⁶
Np ²³⁹	6.7956 10 ⁻⁷
Am ²⁴¹	1.4987 10 ⁻⁷
Zirconium	1.1557 10 ⁻²
Ni ⁵⁸	3.7035 10 ⁻⁵
Ni ⁶⁰	1.4159 10 ⁻⁵
Ni ⁶¹	6.1300 10 ⁻⁷
Ni ⁶²	1.9475 10 ⁻⁶
Ni ⁶⁴	4.9366 10 ⁻⁷
Cr ⁵⁰	1.4458 10 ⁻⁶
Cr ⁵²	2.7850 10 ⁻⁵
Cr ⁵³	3.1576 10 ⁻⁶
Cr ⁵⁴	7.8441 10 ⁻⁷
Fe ⁵⁴	6.6814 10 ⁻⁴
Fe ⁵⁶	1.0566 10 ⁻²
Fe ⁵⁷	2.5343 10 ⁻⁴
Fe ⁵⁸	3.2255 10 ⁻⁵
B ¹⁰	3.3659 10 ⁻⁹
B ¹¹	1.3464 10 ⁻⁸
Al ²⁷	1.1238 10 ⁻⁶
Molybdène	1.9279 10 ⁻⁶

Ti ⁴⁸	1.1148 10 ⁻⁶
Si ²⁸	3.8866 10 ⁻⁷
Co ⁵⁹	5.1450 10 ⁻⁸
Mn ⁵⁵	1.9869 10 ⁻⁷
Nb ⁹³	3.3780 10 ⁻⁶
Carbone	5.3908 10 ⁻⁴

Tableau H.7: Caractéristiques du Corium 2

Densité (g/cm ³)	4.40
Masse atomique moyenne	35.28
Densité des noyaux lourds (g/cm ³)	1.54

Tableau H.8: Contenu isotopique du Corium 2 (10²⁴ atomes/cm³)

U ²³⁴	4.4909 10 ⁻⁹
U ²³⁵	1.0659 10 ⁻⁴
U ²³⁶	9.2874 10 ⁻⁶
U ²³⁸	3.7729 10 ⁻³
Pu ²³⁸	1.6914 10 ⁻⁷
Pu ²³⁹	1.4054 10 ⁻⁵
Pu ²⁴⁰	3.7635 10 ⁻⁶
Pu ²⁴¹	2.2279 10 ⁻⁶
Pu ²⁴²	4.8703 10 ⁻⁷
Oxygène	4.2826 10 ⁻²
Np ²³⁷	7.1175 10 ⁻⁷
Np ²³⁹	2.2629 10 ⁻⁷

Am ²⁴¹	4.9906 10 ⁻⁸
Zirconium	3.8486 10 ⁻³
Ni ⁵⁸	1.2333 10 ⁻⁵
Ni ⁶⁰	4.7149 10 ⁻⁶
Ni ⁶¹	2.0413 10 ⁻⁷
Ni ⁶²	6.4852 10 ⁻⁷
Ni ⁶⁴	1.6439 10 ⁻⁷
Cr ⁵⁰	4.8146 10 ⁻⁷
Cr ⁵²	9.2740 10 ⁻⁶
Cr ⁵³	1.0515 10 ⁻⁶
Cr ⁵⁴	2.6121 10 ⁻⁷
Fe ⁵⁴	2.2749 10 ⁻⁴
Fe ⁵⁶	3.5975 10 ⁻³
Fe ⁵⁷	8.6291 10 ⁻⁵
Fe ⁵⁸	1.0981 10 ⁻⁵
B ¹⁰	1.1208 10 ⁻⁹
B ¹¹	4.4834 10 ⁻⁹
Al ²⁷	2.5015 10 ⁻⁴
Molybdène	6.4198 10 ⁻⁷
Ti ⁴⁸	3.7124 10 ⁻⁷
Si ²⁸	1.3367 10 ⁻²
Co ⁵⁹	1.7133 10 ⁻⁸
Mn ⁵⁵	1.7589 10 ⁻⁵
Nb ⁹³	1.1249 10 ⁻⁶
Carbone	3.3997 10 ⁻⁴
Hydrogène	4.8136 10 ⁻³
Calcium	1.6814 10 ⁻³

Annexe H

RÉSOLUTION ANALYTIQUE DU MODÈLE CONTRAINT
ANISOTROPE MULTIMATÉRIAU EN MILIEU INFINI

En rajoutant la diffusion anisotrope et des matériaux aux équations (5.12) et (5.13), on obtient les équations multimatériaux du modèle contraint, pour chaque groupe g:

$$\Psi_{\alpha}(\mu) = F_{s\alpha}(\mu) \sum_{\gamma \neq \alpha} t_{\gamma\alpha}(\mu) \Psi_{\gamma\alpha}(\mu) + R_{\alpha}(\mu) \sum_{k=0}^{na} (2k+1) P_k(\mu) [S_{\alpha k} + \Sigma_{s\alpha k} \phi_{\alpha k}], \quad (I.1)$$

$$\Psi_{\alpha\beta}(\mu) = F_{\alpha}(\mu) \sum_{\gamma \neq \alpha} t_{\gamma\alpha}(\mu) \Psi_{\gamma\alpha}(\mu) + Q_{\alpha}(\mu) \sum_{k=0}^{na} (2k+1) P_k(\mu) [S_{\alpha k} + \Sigma_{s\alpha k} \phi_{\alpha k}], \quad (I.2)$$

où $\Sigma_{s\alpha k}$ représente la diffusion dans le groupe g ($g \rightarrow g$) pour le mode k et avec

$$\phi_{\alpha k} = \int_{-1}^1 P_k(\mu) \Psi_{\alpha}(\mu) d\mu / 2,$$

$$S_{\alpha k} = \delta_{0k} \frac{1}{k_{\infty}} \sum_{i=1}^{ni} X_g^i \sum_{h=1}^G v \Sigma_{f\alpha h}^i \phi_{\alpha 0h} + \sum_{\substack{h=1 \\ h \neq g}}^G \Sigma_{s\alpha k} (h \rightarrow g) \phi_{\alpha kh},$$

où $P_k(\mu)$ est un polynôme de Legendre d'ordre k, na le degré maximum d'anisotropie et $t_{\gamma\alpha}(\mu)$ la probabilité conditionnelle de passer du matériau γ au matériau α dans la direction μ sachant que l'on change de matériau.⁶¹ On notera que $S_{\alpha k}$ est ici la source externe au groupe, généralisation du premier terme de l'équation (5.20). Pour la suite de cette annexe, la variable angulaire μ est omise afin de simplifier l'écriture des équations. Pour résoudre ce système d'équations couplées, on multiplie (I.2) par $t_{\alpha\beta}$ et on somme sur tous les α . Ainsi l'équation (I.2) s'écrit

Annexe I

$$A_{\beta} = \sum_{\alpha \neq \beta} t_{\alpha\beta} F_{\alpha} A_{\alpha} + \sum_{\alpha \neq \beta} t_{\alpha\beta} Q_{\alpha} \left[\sum_{k=0}^{na} (2k+1) P_k (S_{\alpha k} + \sum_{s \neq \alpha} \phi_{s\alpha k}) \right], \quad (I.3)$$

où on a défini

$$A_{\alpha} = \sum_{\gamma \neq \alpha} t_{\gamma\alpha} \Psi_{\gamma\alpha} .$$

En utilisant la notation matricielle et vectorielle avec $\bar{\Psi} = (\Psi_{\alpha}, \Psi_{\beta}, \Psi_{\gamma}, \dots)$ les équations (I.1) et (I.2) deviennent simplement

$$\bar{\Psi} = F_s \bar{A} + R \bar{S}, \quad (I.4)$$

$$\bar{A} = t^t F \bar{A} + t^t Q \bar{S}, \quad (I.5)$$

avec

$$\bar{S} = \sum_{k=0}^{na} (2k+1) P_k (\bar{S}_k + \sum_{\alpha} \bar{\phi}_k),$$

où t^t est la matrice transposée de t (coefficients $t_{\alpha\beta}$) et F_s , R , F , Q , Σ_{sk} et P_k des matrices diagonales. On peut tirer \bar{A} de l'équation (I.5) en utilisant la relation (5.10) pour Q :

$$\bar{A} = (1 - t^t F)^{-1} [t^t \Sigma_i^{-1} (1 - F) \bar{S}].$$

À l'aide de cette relation et de l'équation (5.10) pour R , l'équation (I.4) s'écrit

$$\bar{\Psi} = (1 - M) \Sigma_i^{-1} \bar{S}, \quad (I.6)$$

où la matrice M est définie, à l'aide de la relation (5.10) pour F_s , comme suit:

$$M = |\mu| (\lambda \Sigma_i)^{-1} (1 - F) (1 - t^t F)^{-1} (1 - t^t) .$$

On peut montrer facilement que les flux de matériaux de l'équation (I.6) ne sont pas tous indépendants. Pour cela on utilise les propriétés de t^t ⁶¹

$$\bar{w} \cdot (1 - t^t) = (1 - t^t) \cdot \bar{1} = 0, \quad (I.7)$$

avec $w_{\alpha} = p_{\alpha} / \lambda_{\alpha}$. Alors

$$\bar{p} \cdot \Sigma_t \bar{\psi} = \bar{p} \cdot \bar{S} - |\mu| \bar{w} \cdot X \Sigma_t^{-1} \bar{S} ,$$

où on a posé

$$X = (1 - F)(1 - t^i F)^{-1}(1 - t^i) = (1 - t^i) \left[(1 - t^i F)^{-1} - F(1 - t^i F)^{-1} \right],$$

devient, grâce à la relation (I.7) qui fait que $\bar{w} \cdot X = 0$,

$$\bar{p} \cdot \Sigma_t \bar{\psi} = \bar{p} \cdot \bar{S}.$$

Cette relation s'écrit aussi

$$\sum_{\alpha} P_{\alpha} \Sigma_{t\alpha} \Psi_{\alpha} = \sum_{\alpha} P_{\alpha} S_{\alpha} .$$

Ainsi les flux de matériau ne sont pas indépendants et dans le cas de deux matériaux on retrouve bien l'équation (5.16).

Pour résoudre analytiquement l'équation (I.6), on lui applique l'opérateur:

$$\frac{1}{2} \int_{-1}^1 P_k(\mu)(\cdot) d\mu , \quad k = 0, \dots, na .$$

On obtient alors, pour le moment k du flux, l'équation

$$\bar{\phi}_k = \sum_{j=0}^{na} \left(\frac{\delta_{kj}}{2k+1} - M_{kj} \right) \Sigma_t^{-1} (\bar{S}_j + \Sigma_{s_j} \bar{\phi}_j)$$

avec

$$M_{kj} = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 P_k(\mu) P_j(\mu) M(\mu) d\mu .$$

(I.8)

On observe que $M(\mu)$ est pair en μ , ainsi $M_{kj}=0$ si $k+j$ est impair. On a ainsi un découplage entre les modes pairs et impairs. Autrement dit un calcul à l'ordre d'anisotropie $k+j$ impair donne les mêmes résultats pour les flux scalaires de matériau qu'un calcul d'ordre $k+j-1$.

RÉSULTATS DU CALCUL DE RÉACTIVITÉ

Dans cette annexe sont présentés les facteurs de multiplication effectif k_e , résultats du calcul de réactivité pour les Corium 1 et 2, pour trois processus stochastiques et cinq porosités. Dans le cas de l'homogénéisation stochastique les résultats sont donnés en fonction de l'épaisseur moyenne λ_β des fentes d'eau.

Tableau J.1: Réactivité du Corium 1 pour un processus Markov-Tente.

Porosité	0.05	0.10	0.15	0.20	0.25
Mélange Volumique	.65326	.71183	.78082	.85270	.92303
λ_β [cm]					
0.2	.66126	.72855	.80270	.87596	.94539
0.4	.66759	.74083	.81724	.89096	.95952
0.6	.67324	.75067	.82861	.90228	.96985
0.8	.67829	.75906	.83790	.91124	.97779
1.0	.68284	.76620	.84559	.91844	.98394
1.2	.68681	.77222	.85193	.92419	.98869
1.4	.68955	.77720	.85707	.92872	.99226
1.6	.69237	.78120	.86114	.93220	.99484
1.8	.69413	.78428	.86427	.93474	.99652
2.0	.69516	.78650	.86646	.93647	.99751

Tableau J.2: Réactivité du Corium 1 pour un processus Markov-Markov.

Porosité	0.05	0.10	0.15	0.20	0.25
Mélange Volumique	.65326	.71183	.78082	.85270	.92303
λ_{β} [cm]					
0.2	.66479	.73508	.81016	.88365	.95270
0.4	.67302	.74925	.82683	.90051	.96837
0.6	.67967	.76015	.83886	.91222	.97890
0.8	.68528	.76863	.84800	.92024	.98637
1.0	.68956	.77532	.85504	.92727	.99174
1.2	.69283	.78051	.86041	.93202	.99553
1.4	.69520	.78440	.86441	.93544	.99806
1.6	.69666	.78717	.86725	.93777	.99956
1.8	.69732	.78895	.86912	.93913	1.0002
2.0	.69728	.78981	.87009	.93973	1.0002

Tableau J.3: Réactivité du Corium 1 pour un processus Périodique-Périodique.

Porosité	0.05	0.10	0.15	0.20	0.25
Mélange Volumique	.65326	.71183	.78082	.85270	.92303
λ_{β} [cm]					
0.2	.65860	.72201	.79291	.86475	.93395
0.4	.66397	.73217	.80512	.87712	.94545
0.6	.66907	.74151	.81592	.88793	.95534
0.8	.67398	.74996	.82556	.89742	.96395
1.0	.67859	.75764	.83410	.90568	.97132
1.2	.68283	.76445	.84158	.91279	.97754
1.4	.68648	.77044	.84865	.91822	.98269
1.6	.68944	.77591	.85352	.92383	.98687
1.8	.69183	.77967	.85800	.92792	.99017
2.0	.69350	.78279	.86164	.93111	.99266

Tableau J.4: Réactivité du Corium 2 pour un processus Markov-Tente.

Porosité	0.05	0.10	0.15	0.20	0.25
Mélange Volumique	.74232	.82332	.89597	.95877	1.01156
λ_{β} [cm]					
0.2	.74660	.82901	.90135	.96291	1.01399
0.4	.74859	.83157	.90348	.96410	1.01407
0.6	.74947	.83269	.90412	.96389	1.01288
0.8	.74954	.83286	.90378	.96280	1.01092
1.0	.74892	.83229	.90271	.96104	1.00840
1.2	.74770	.83103	.90103	.95870	1.00543
1.4	.74596	.82921	.89883	.95596	1.00208
1.6	.74379	.82687	.89617	.95288	.99846
1.8	.74124	.82403	.89309	.94940	.99458
2.0	.73840	.82093	.88967	.94565	.99048

Tableau J.5: Réactivité du Corium 2 pour un processus Markov-Markov.

Porosité	0.05	0.10	0.15	0.20	0.25
Mélange Volumique	.74232	.82332	.89597	.95877	1.01156
λ_{β} [cm]					
0.2	.74787	.83067	.90288	.96408	1.01473
0.4	.74982	.83313	.90476	.96493	1.01432
0.6	.75029	.83378	.90489	.96413	1.01251
0.8	.74971	.83327	.90383	.96231	1.00987
1.0	.74833	.83118	.90196	.95974	1.00667
1.2	.74631	.82971	.89944	.95669	1.00302
1.4	.74381	.82699	.89640	.95318	.99901
1.6	.74087	.82379	.89282	.94938	.99478
1.8	.73774	.82020	.88903	.94522	.99030
2.0	.73429	.81617	.88484	.94079	.98562

Tableau J.6: Réactivité du Corium 2 pour un processus Périodique-Périodique.

Porosité	0.05	0.10	0.15	0.20	0.25
Mélange Volumique	.74232	.82332	.89597	.95877	1.01156
λ_{β} [cm]					
0.2	.74544	.82693	.89910	.96103	1.01281
0.4	.74759	.82971	.90155	.96274	1.01365
0.6	.74878	.83140	.90298	.96351	1.01323
0.8	.74927	.83225	.90357	.96354	1.01297
1.0	.74895	.83238	.90345	.96292	1.01174
1.2	.74817	.83184	.90268	.96172	1.01002
1.4	.74682	.83070	.90136	.96001	1.00785
1.6	.74495	.82900	.89954	.95779	1.00528
1.8	.74274	.82682	.89724	.95521	1.00231
2.0	.74015	.82414	.89444	.95231	.99909

Tableau J.7: Réactivité du Corium 1 calculée avec un degré d'anisotropie 1 pour l'homogénéisation et le calcul du k_e , pour un processus Markov-Tente avec une porosité de 0.15.

Mélange Volumique	.74477
λ_β [cm]	
0.2	.76481
0.4	.77807
0.6	.78836
0.8	.79674
1.0	.80364
1.2	.80926
1.4	.81379
1.6	.81734
1.8	.82001
2.0	.82189

RÉFÉRENCES

- 1 J. Ligou, Installations Nucléaires, Presses Polytechniques Romandes, Lausanne (1982).
- 2 R.K. McCardell, M.L. Russel, D.W. Akers and C.S. Olsen, Siummary of TMI-2 Core Sample Examination, *Nuclear Engineering and Design* **118**, 441 (1990).
- 3 V.M Chernousenko, Chernobyl Insight from the Inside, Springer Verlag, Berlin (1991).
- 4 Rapport IPSN 2/86, révision 3, L'accident de Tchernobyl, Institut de Protection et de Sureté Nucléaire, CEA, octobre 86.
- 5 K. Soda, Roles of Containment Severe Accident Management, ANP'92, International Conference on Design and Safety of Advanced Nuclear Power Plants **III**, Tokyo (1992).
- 6 W. Scholtyssek, H. Alsmeyer, F.J. Erbacher, Decay Heat Removal after a PWR Core Meltdown Accident, ANP'92, International Conference on Design and Safety of Advanced Nuclear Power Plants **III**, Tokyo (1992).
- 7 T.P. Speis, T.L. King, F. Eltavita, Recent Insights from Severe Accident Research and Implication for Containment Criteria for Advances LWR's, ANP'92, International Conference on Design and Safety of Advanced Nuclear Power Plants **III**, Tokyo (1992).
- 8 M. Livolant and A. Porracchia, Core Degradation in Pressurized Water Reactor During Severe Accidents, Transactions of the 12th International Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology, Volume U, Stuttgart (1993).

Références

- 9 Sand 74-0382, Core Meltdown Experimental Review, Sandia Laboratories, Albuquerque, N. Mex. (1975).
- 10 J.M. Seiler, F. Balard, M. Durin, A. Méjane, S. Pigny, I.Szabo, Conceptual Studies of Core Catchers for Advanced LWR's, ANP'92, International Conference on Design and Safety of Advanced Nuclear Power Plants **III**, Tokyo (1992).
- 11 J.-C. Casas, M.L. Corradini, Study of Void Fraction and Mixing of Immiscible Liquids in a Pool Configuration by an Upward Gas Flow, *Nuclear Technology* **99**, 104 (1992).
- 12 P.N. Smith, A.T.D. Butland, P.E. Porter, M.A. Mignanelli, G.J Roberts, Importance of Core/Concrete Aerosol Production and some Containment Heat Sources to The Source Term, Proc. Int. Symp. Source Term Evaluation for Accident Conditions, Colombus (1985), IAEA-SM-281/32 (1986).
- 13 D.A Powers, E.R. Copus, D.R. Bradley, Results of Recent Investigations at Sandia national Laboratories on Core Debris Interactions with Concrete, *Nuclear Technology* **101**, 255 (1993).
- 14 R. Engelstad and Z. Feng, Mechanical and Structural Analysis of Corium Crusts, Transactions of the 12th International Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology, Vol. U, Stuttgart (1993).
- 15 B.W. Spencer, L. McUmbert, D. Gregorash, R. Aeschlimann and J.J. Sienicki, Corium Quench in Deep Pool Mixing Experiments, 1985 National Heat Transfer Conference, Denver (1985).
- 16 B.W. Spencer, L. McUmbert, J.J. Sienicki, B.R. Sehgal, D. Square, Results of Scoping Tests in Corium-Water Thermal Interactions in Ex-Vessel Geometry, *AIChE symposium series* **79** (225), 268 (1983).
- 17 P. Gandrille, M.Lambert, S. Pigny, J.M. Seiler, L'accident de fusion du coeur: comportement thermodynamique et refroidissement des bains de Corium, Journées SFEN, décembre (1992).

- 18 S. Nazaré, G. Ondracek, B. Schulz, Über theoretische und experimentelle Möglichkeiten zur Bestimmung der Stoffwerte von Corium. Abshussbericht Teil II, KFK 2217, Gesellschaft für Kernforschung M.B.H., Karlsruhe (1975).
- 19 A. Laib, J.-P. Deffain, communications personnelles.
- 20 C. Decurnex, Evaluation des paramètres cinétiques des réacteurs nucléaires. Application aux combustibles mixtes, Thèse N0 1230, Département de physique, EPFL, Lausanne (1994).
- 21 J.-P. Deffain, communication personnelle.
- 22 G.C. Pomraning, Linear Kinetic Theory and Particle Transport in Stochastic Mixtures, World Scientific, Singapore (1991).
- 23 R.J. Allio, C.H. Randall, The quantitative analysis of microstructure with densitometer data, Trans. Metallurgical Soc. of AIME **24**, 221 (1962).
- 24 M.M.R. Williams, Random Processes in Nuclear Reactors, Pergamon Press, Oxford, (1974).
- 25 P.R. Barret, J.J. Thompson, A stochastic Approach to Kinetics of Zero Power Heterogeneous Lattices, *Nukleonik* **11** (1), 4 1968.
- 26 G.C. Pomraning, C.D. Levermore, J. Wong, Transport Theory in Binary Statistical Mixtures, Lectures notes in pure and applied mathematics, edited by Nelson et al. (1989).
- 27 P.R. Barret, J.J. Thompson, The Effect of random Media upon Neutron Transport, *Nukleonik* **12** (4), 159 (1969).
- 28 R. Sanchez and G.C. Pomraning, A Statistical Analysis of the Double Heterogeneity Problem, *Ann. Nucl. Energy* **18** (7), 371 (1991).
- 29 H.J. Smith, A. Santamarina, Analysis of the international criticality Benchmark No 19 of a Realistic Dissolver, Report NEACRP-L-325 (1990).
- 30 C.D. Levermore, G.C. Pomraning, D.L. Sanzo, and J. Wong, Linear Transport Theory in a Random Medium, *J. Math. Phys.* **27**, 2526 (1986).

Références

- 31 D. Vanderhaegen, C. Deutsch and P. Boissé, Radiative Transfer in a One-dimensional Fluctuating Albedo Mixture, *JQSRT* **48** (4), 409 (1992).
- 32 G.C. Pomraning, radiative Transfer in Rayleigh-Taylor unstable ICF Pellets, *Laser and Particle Beams* **8** (4), 741 (1990).
- 33 P. Boissé, Radiative Transfer inside Clumpy Media: The Penetration of UV Photon inside Molecular Clouds, à paraître dans *Astronomy and Astrophysics*.
- 34 F. Malvagi, R.N. Byrne, G.C. Pomraning, R.C.J. Somerville, Stochastic Radiative Transfer in a Partially Cloudy Atmosphere, *J. Atmos. Sci.* **50** (14), 2146 (1993).
- 35 G.L. Stephens, P.M. Gabriel, S.C. Tsay, Statistical radiative transport in one-dimensional media and its application to terrestrial atmosphere, *Transp. Theory Statist. Phys.* **20** (2&3), 139 (1991).
- 36 G.A. Titov, Statistical Description of Radiation Transfer in Clouds, *J. Atmos. Sci.* **47** (1), 24 (1989).
- 37 B. Su, G.C. Pomraning, A Stochastic Description of a Broken Cloud Field, *J. Atmos. Sci.* **51** (13), 1969 (1994).
- 38 A. Ishimaru, Wave Propagation and Scattering in Random Media, Vol 1 et 2, Academic Press, New-York (1978).
- 39 J.G Franklin, C. Javanaud, Attenuation of a Plane Wave in a Two-Phase Medium, *Physics Letters* **109** A, 127 (1985).
- 40 U. Frisch, Wave propagation in random media, p. 75-198, published in Probabilistic methods in applied mathematics, Bharucha-Reid by Academic Press, New-York (1968).
- 41 D. Dence, J.E. Spence, Wave propagation in random anisotropic media, p. 121-183, published in Probabilistic methods in applied mathematics, Bharucha-Reid by Academic Press, New-York (1973).
- 42 C.D. Levermore and J. Wong, G.C. Pomraning, Renewal Theory for Transport Processes in Binary Statistical Mixtures, *J. Math. Phys.* **29** (4), 995 (1988).

- 43 R. Sanchez, Linear Kinetic Theory in Stochastic Media, *J. Math. Phys.* **30**(11), 2498 (1989).
- 44 K.M. Case and P.F. Zweifel, Linear Transport Theory, Addison-Wesley, Reading M. (1967).
- 45 E.E. Lewis, W.F. Miller, Jr., Computational Methods of Neutron Transport, John Wiley & Sons, New York (1984).
- 46 J.J. Duderstadt, W.R. Martin, Transport Theory, John Wiley & Sons, New York (1979).
- 47 P. Benoist, Théorie du transport, Rapport CEA-R-4778, Saclay (1976).
- 48 K.M. Case, F. de Hoffmann, G. Placzek, Introduction to the Theory of Neutron Diffusion, Los Alamos Scientific Laboratory, Los Alamos, (1953).
- 49 A.F. Henry, Nuclear-Reactor Analysis, The MIT Press, Cambridge, (1975).
- 50 R.N. Bhattacharya, E.C. Waymire, Stochastic Processes with Applications, John Wiley & Sons, Inc., New York (1990).
- 51 G.S. Shedler, Regenerative Stochastic Simulation, Academic Press, Boston (1993).
- 52 M.K. Ochi, Applied Probability and Stochastic Processes In Engineering and Physical Sciences, John Wiley & Sons, New York (1990).
- 53 A. Papoulis, Probability, Random Variables and Stochastic Processes, 2nd edition, McGraw-Hill Book Company, Auckland (1984).
- 54 A. Ruegg, Processus stochastique, Presses Polytechniques Romandes, Lausanne (1989).
- 55 C.W. Gardiner, Handbook of Stochastic Methods for Physics, Chemistry and the Natural Sciences, 2nd edition, Springer Verlag, Berlin (1990).
- 56 W.L. Smith, Renewal Theory and Its Ramifications, *J. Roy. Statist. Soc. Ser. B* **20**, 243 (1958).
- 57 D.L. Iglehart, G.S. Shedler, Simulation of Non-Markovian Systems, *IBM J. Res. Develop.* **27**(5), 472 (1983).

Références

- 58 V.R. Cane, Behavior Sequences as Semi-Markov Chains, *J. Roy. Statist. Soc. Ser. B* **21**, 36 (1959).
- 59 D.R. Cox, Renewal theory, Chapman and Hall, London (1962).
- 60 U.N. Bhat, Elements of Applied Stochastic Process, John Wiley & Sons, New York a.o. (1972).
- 61 R. Sanchez, O. Zuchuat, F. Malvagi, I. Zmijarevic, Symmetry and Translations in Multimaterial Line Statistics, *JQSRT* **51** (6), 801 (1994).
- 62 M.L. Adams, E.W. Larsen, G.C. Pomraning, Benchmark Results for Particle Transport in a Binary Markov Statistical Medium, *JQSRT* **42** (4), 253 (1989).
- 63 G.C. Pomraning, Statistics, Renewal Theory, and Particle Transport, *JQSRT* **42** (4), 279 (1989).
- 64 P. Switzer, A Random Set Process in the Plane with a Markovian Property, *Am. Math. Stat.* **36**, 1859 (1965).
- 65 D. Vanderhaegen, Impact of Mixing Structure on Radiative Transfer in Random Media, *JQSRT* **39** (4), 333 (1988).
- 66 D.E. Knuth, The art of computer Programming: Vol. 2/ Seminumerical Algorithms, Addison-Wesley, Reading, Massachussets (1981).
- 67 J. Wood, Computational Methods in Reactor Shielding, Pergamon Press, Oxford a.o. (1982).
- 68 I. Lux, L. Koblinger, Monte Carlo Particle Transport Methods: Neutron and Photon Calculations, CRC Press, Boca Raton (1991).
- 69 Bingjing Su, G.C. Pomraning, Benchmark Results for Particle Transport in Binary non Markovian Mixtures, *JQSRT* **50** (2), 211 (1993).
- 70 M. Abramowitz and I.A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs and Mathematical Tables, Dover Publications, New York (1970).
- 71 K.M. Khattab and E.W. Larsen, Synthetic Acceleration Methods for Linear Transport Problems with Highly Anisotropic Scattering, *Nucl. Sci. Eng.* **107**, 217 (1991).

- 72 G.C. Pomraning, A Model for Interface Intensities in Stochastic Particle Transport, *JQSRT* **46** (4), 221 (1991).
- 73 G.C. Pomraning, Classic Transport Problems in Binary Homogeneous Markov Statistical Mixtures, *Transp. Theory Statist. Phys.* **17** (5&6), 595 (1988).
- 74 G.C. Pomraning, The Milne Problem in a Statistical Medium, *JQSRT* **41** (2), 103 (1989).
- 75 D. Vanderhaegen, Radiative Transfer in Statistically Heterogeneous Mixtures, *JQSRT* **36** (6), 557 (1986).
- 76 C. Deutsch and D. Vanderhaegen, Radiative Transfer in Statistically Heterogeneous Mixtures, *JQSRT* **44** (1), 163 (1990).
- 77 D.C. Sahni, Equivalence of generic equation method and the phenomenological model for linear transport problems in a two-state random scattering medium, *J. Math. Phys.* **30** (7), 1554 (1989).
- 78 D.C. Sahni, An Application of Reactor Noise Techniques to Neutron Transport Problems in a Random Medium, *Ann. nucl. energy* **16** (8), 397 (1989).
- 79 G.C. Pomraning and B. Su, A Closure for Stochastic Transport Equations, Proceedings of the International Conference on Reactor Physics and Reactor Computations, p. 672, Tel-Aviv, (1994).
- 80 G.C. Pomraning, Radiative Transfer in Random Media with Scattering, *JQSRT* **40** (4), 479 (1988).
- 81 F. Malvagi and G.C. Pomraning, A Class of Transport Problems in Statistical Mixtures with Scattering, *Journal de Physique*, Colloque C7, supplément an n^o 12, Tome 49, (1988).
- 82 D. Vanderhaegen, C. Deutsch, Linear Radiation Transport in Randomly Distributed Binary Mixtures: A One-dimensional and Exact Treatment for the Scattering Case, *J. Stat. Phys.* **54** (1/2), 331 (1989).
- 83 F. Malvagi, C.D. Levermore, G.C. Pomraning, Asymptotic Limits of a Statistical Transport Description, *Transp. Theory Statist. Phys.* **18** (3&4), 287 (1989).

Références

- 84 F. Malvagi, G.C. Pomraning, A Comparison of Models for Particle Transport Through Stochastic Mixtures, *Nucl. Sci. Eng.* **111**, 215 (1992).
- 85 H. Frisch, G.C. Pomraning, and P. Z. Zweifel, An Exact Analytical Solution of a Radiative Transfer Problem in a Binary Mixture, *JQSRT* **43** (4), 271 (1990).
- 86 G.C. Pomraning, R. Sanchez, The Use of Renewal Theory for Stochastic Transport, *JQSRT* **43** (4), 267 (1990).
- 87 O. Zuchuat, R. Sanchez, I. Zmijarevic and F. Malvagi, Transport in Renewal Statistical Media: Benchmarking and Comparison with Models, *JQSRT* **51** (5), 689 (1994).
- 88 O. Zuchuat, R. Sanchez, A Two-equation Integral Model for Particle Transport in Renewal Statistical Media, Proceedings of the International Conference on Mathematics and Computations, Reactor Physics, and Environmental Analyses, Portland Oregon (1995).
- 89 S. Nakamura, Computational Methods in Engineering and Science with Application to Fluid Dynamics and Nuclear Systems, John Wiley & Sons, New York a.o. (1977).
- 90 E.B. Becker, G.F. Carey, J.T. Oden, Finite Elements: An introduction, Volume 1, Prentice Hall, Inc., Engelwood Cliffs (1981).
- 91 W.H. Press, B.P. Flannery, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, Numerical Recipes, The Art of Scientific Computing(Fortran Version), Cambridge University Press (1990).
- 92 P. Nüesch, Probabilité et Statistique, EPFL, Département de Mathématiques, Lausanne (1987).
- 93 A. Laib, Communication personnel.
- 94 J.G. Kollas and A.F. Henry, The Determination of Homogenized Groups Diffusion Theory Parameters, *Nucl. Sci. Eng* **60**, 464 (1975).
- 95 M. Coste, Absorption résonnante des noyaux lourds dans les réseaux hétérogènes; I- Formalisme du module d'autoprotection d'APOLLO2, Note CEA-N-2746, (1994).

- 96 T. Takeda, H. Sato and S. Ono, An Effective Homogeneization Method for Heterogeneous Assemblies, *Ann. Nucl. Energy* **9**, 509 (1982).
- 97 T. Takeda, E. Saji and T. Sekiya, Determination of Effective Diffusion Parameters in Thermal Reactor Assemblies, *J. Nucl. Sci. Technol.* **17**(1), 44 (1980).
- 98 J. Bussac, P. Reuss, *Traité de neutronique*, Hermann, Paris (1985).
- 99 R. Sanchez, J. Mondot, and Z. Stankowski, A. Cossic and I. Zmijarevic, APOLLO II: A User Oriented, Portable, Modular Code for Multigroup Transport Assembly Calculations, *Nucl. Sci. Eng.* **100**, 352 (1988).
- 100 P. Reuss, J.B. Thomas, Qu'est-ce qu'un logiciel, *Clef CEA* **29**, CEA (1994).
- 101 J.H. Ahrens and U. Dieter, Computer Methods for Sampling from Gamma, Beta, Poison and Binomial Distributions, *Computing* **12**, 223 (1974).
- 102 M.R. Spiegel, *Formules et tables de mathématique*, Série Schaum, Chap. I.32, McGraw -Hill, New-York (1974).
- 103 A. Kavenoky, J. L. Lautard, State of the Art in Using Finite Element Method for Neutron Diffusion Calculation, *Advances in Reactor Computations*, Vol. 2, ANS (1983).
- 104 E.L. Wachspress, *Iterative Solution of Elliptic System And Application to the Neutron Diffusion Equation of Reactor Physics*, Prentice-Hall, Inc., Engelwood Cliffs, N. J. (1966).

Références

REMERCIEMENTS

Je remercie sincèrement

- le professeur J.-P. Schneeberger de m'avoir accueilli dans son Laboratoire.
- le professeur J. Ligou d'avoir accepté d'être mon directeur de thèse et dont les compétences et la bonne humeur ont contribué à la réalisation de ce travail.
- Richard Sanchez pour m'avoir suivi scientifiquement durant ce travail, pour son amitié ainsi que sa disponibilité.
- René Früh pour son amitié et ses judicieux conseils qui m'ont permis de survivre dans la jungle qu'est devenue l'EPFL.

Je remercie aussi vivement le SERMA du Centre d'Études de Saclay pour son accueil chaleureux et son aide dans la réalisation de ce travail.

De nombreuses personnes ont également collaboré à cette étude. Mes remerciements s'adressent plus particulièrement à

- Igor Zmijarevic pour sa disponibilité et son aide lors de la programmation du nouveau module d'APOLLO II.
- J.-P. Deffain et A. Laib pour leurs informations sur le problème du Corium.
- Claude Jacquat, notre dessinateur, pour sa disponibilité, sa gentillesse et la réalisation des figures.
- Jean-Pierre Steudler et Charles Glauser qui n'ont pas seulement été de parfaits opérateurs du réacteur lors des travaux pratiques mais aussi toujours prêts à rendre service.

Remerciements

Durant mon séjour au Département de Physique de nombreuses personnes m'ont apporté leur amitié et leur soutien, que chacun trouve ici ma reconnaissance.

Je remercie enfin MM. R. Sanchez, Cl. Maeder, P.-A. Haldy pour avoir bien voulu accepter de juger ce travail.

Durant cette étude, j'ai bénéficié d'un soutien financier qui m'a été apporté par le Fond National Suisse de la Recherche Scientifique et par la Division Principale de Sécurité des Installations Nucléaires.

CURRICULUM VITAE

Olivier Zuchuat

originaire de Grimisuat et Savièse (VS), né le 9 janvier 1966, célibataire, de nationalité Suisse.

FORMATION

- | | |
|------|-------------------------------------|
| 1990 | Diplôme d'Ingénieur Physicien EPFL. |
| 1986 | Maturité type C à Sion. |

EXPÉRIENCES

- | | |
|-----------|--|
| 1990-1995 | Assistant des professeurs J.-P. Schneeberger et J. Ligou du Laboratoire de Physique des Réacteurs de l'EPFL. |
| 1992-1995 | Expert en radioprotection, reconnu par l'Office Fédéral de la Santé Publique. |
| 1993-1995 | Chef d'exploitation remplaçant du réacteur nucléaire CROCUS. |

PUBLICATIONS

O. Zuchuat, et J.M. Giovannoni: Calcul d'un champ de vent avec les modèles diagnostiques Difree et Condor3, *Bulletin de l'Association romande pour la protection des eaux et de l'air* 26 (158), Février/Mars (1990).

Curriculum vitae

O. Zuchuat, R. Sanchez, I. Zmijarevic, and F. Malvagi : Transport in Renewal Statistical Media: Benchmarking and Comparison with Models, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **51** (5), 689 (1994).

R. Sanchez, O. Zuchuat, F. Malvagi, and I. Zmijarevic : Symmetry and Translation in Multimaterial Line Statistics, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **51** (6), 801 (1994).

O. Zuchuat, R. Sanchez : A Two-Equation Integral Model for Particle Transport in Renewal Statistical Media, *Proceedings of the International Conference on Mathematics and Computations, Reactor Physics, and Environmental Analyses*, Portland Oregon (1995).