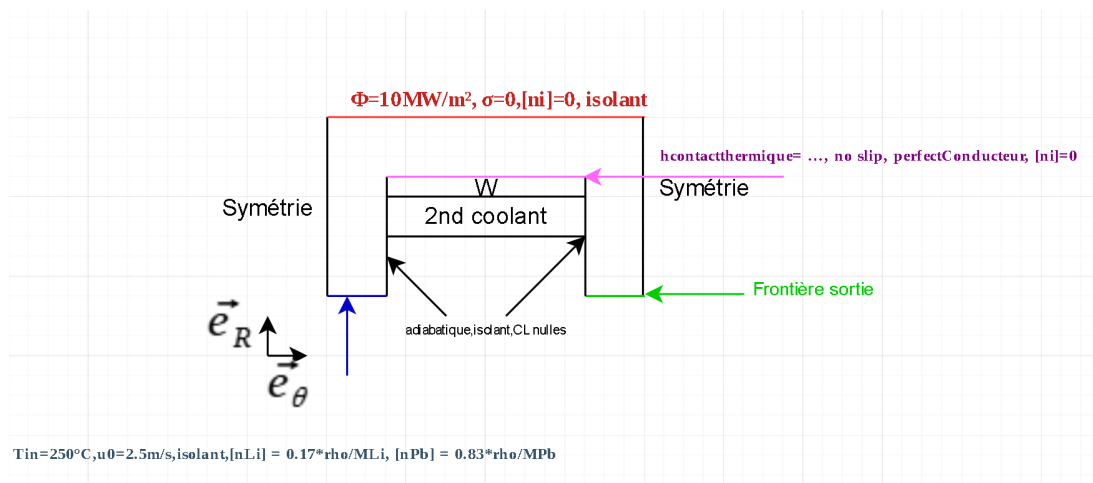


RAPPORT DE SYNTHÈSE

Simulation thermo-MHD d'un PFC à métal liquide Li_{17}Pb Tokamak & Stellarator — coordonnées locales 2D/q2D

Auteur : Rémi Angoin



*Schéma de cas : surface libre côté plasma, $W + 2^{\text{nd}}$ coolant, CL
thermiques/électriques*

2 décembre 2025

Table des matières

1	Introduction	1
1.1	Contexte général	1
1.2	Mots-clés et définitions	2
1.3	But & critères d’acceptabilité	3
2	État de l’art — méthodes numériques pour PFC MHD	4
2.1	Modèles d’écoulement	4
2.2	Électromagnétisme couplé	5
2.3	Suivi de surface libre	6
2.4	Discrétisations, maillages et solveurs	6
2.5	Apprentissage et calcul scientifique hybride	7
3	Méthodologie	9
3.1	(3-a) Équations de conservation généralisée	9
3.2	(3-b) Simplifications généralisées	12
3.3	(3-c) Résolution par volumes finis optimisée	13
3.4	(3-d) Données utilisées et lois d’interpolation	13
3.5	(3-e) Conditions aux limites et initiales	15
4	Solution numérique, sorties et V&V	16
4.1	Sorties principales	16
4.2	Maillage et convergence	16
4.3	Validation	16
4.4	Analyse de sensibilité (poids des paramètres)	16
5	Réactions Li–n et production de Tritium	17
5.1	Canaux considérés	17
6	Architecture logicielle et chaîne outil	18
6.1	IHM Java → JSON → Python (Numba/Cython)	18
7	Conclusions et perspectives	19

A	Listes de symboles	20
B	Nombres adimensionnels et paramètres de couplage	21
	Références	24

Table des figures

3.1	Cas de référence : surface libre côté plasma ($q'' = 10 \text{ MW/m}^2$, isolant élec., $\sigma = 0$, $[n_i] \cdot \mathbf{n} = 0$), interface W/2 nd coolant (h de contact, no-slip, conducteur parfait, $[n_i] = 0$), bas adiabatique/isolant, bords verticaux de symétrie, entrée ($T_{\text{in}}=250 \text{ °C}$, $u_0 = 2.5 \text{ m/s}$, composition), sortie convective.	15
-----	---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	----

Liste des tableaux

2.1	Comparatif qualitatif des familles de modèles d'écoulement pour PFC-ML.	5
2.2	Panorama IA scientifique pour PFC-ML.	8
3.1	Décomposition des termes M_ϕ , K_ϕ , Ψ_s par physique dans la formulation généralisée.	9
3.2	Couplages multi-physiques explicites. Chaque cellule indique le terme ajouté dans l'équation <i>cible</i> lorsqu'il provient de la <i>physique d'origine</i> . Les dépendances matériaux ($\mu(T)$, $\sigma(T)$, $D_i(T)$, etc.) sont gérées dans la section données / interpolations.	11
3.3	Lois diffusivité $D_i(T)$ (à confirmer pour Pb).	14
3.4	Données micro ENDF/B-VIII, He via $\sigma = 4\pi b^2$ avec $b = 3.099$ fm. $\Sigma_{tr,g}$: à remplir via densités atomiques du mélange.	14
B.1	Liste complète des nombres adimensionnels utilisés et de leurs expressions normalisées.	22

Chapitre 1

Introduction

1.1 Contexte général

La conception et le dimensionnement des parois d'un réacteur à fusion sont **structurants** pour le rendement énergétique et la durée de vie des composants. En pratique, les PFC conditionnent :

- **La conversion énergétique** : les PFC intègrent (ou jouxtent) les circuits de refroidissement, au plus près de la surface exposée, pour extraire des flux q'' de l'ordre de $1-10 \text{ MW/m}^2$. En PFC LM, le *même fluide* assure refroidissement et, avec Li-Pb, **génération de tritium** (milieu tritigène).
- **Les coûts de maintenance** : éléments les plus sollicités (thermiques, MHD, neutroniques), sensibles aux événements transitoires (*ELMs, disruptions, ballooning*).

La technologie **PFC LM** est prometteuse car elle :

- **Réduit l'usure** par une surface *auto-réparatrice* (liquide) limitant l'endommagement solide ;
- **Ferme le cycle du tritium** : les alliages Li-Pb produisent du T via les réactions Li-n ;
- Offre une **capacité d'extraction de chaleur** élevée, grâce aux propriétés thermophysiques des métaux liquides.

Défis technologiques (à maîtriser selon le point de vue application/régime) :

- **Splashing/éjections** en cas de décharges : contrôle des ondes de surface et des accélérations transitoires ;
- **Pertes de charge MHD** potentiellement importantes ($Ha \gg 1$, $N \gg 1$) selon CL électriques ;
- **Chauffage Joule** (σ_e élevée) et couplage thermo-MHD (impact sur marges thermiques).

1.2 Mots-clés et définitions

- **MHD** : La magnétohydrodynamique (MHD) étudie le comportement des fluides conducteurs d'électricité en présence de champs électromagnétiques.
- **PFC** : Le plasma face component (PFC) est la première paroi autour du plasma qui encaisse le plus de contraintes.
- **PFC ML** : Le PFC Metal Liquid (ML) est une variante de PFC utilisant du métal fondu liquide maintenu et circulant via un champ électromagnétique. Cette technique propose de grands avantages mais aussi des inconvénients qui seront exposés ci-après.
- **Couches de Hartmann/Shercliff** : couches limites MHD d'épaisseur $\sim L/\text{Ha}$ (Hartmann) contrôlant pertes et profils.
- **FCI** : *Flow Channel Insert* (SiC) — paroi isolante électrique pour réduire les courants transverses et les pertes MHD.

1.3 But & critères d'acceptabilité

Objectif : **obtenir des lois simulées des coefficients de perte de charge** pour configurations MHD PFC-ML, en fonction des données d'entrée (B , \dot{m} , q'' , géométrie, CL électriques), et vérifier les **critères** :

$$T_{\max} < T_{\text{évap}}, \quad p_{\max} < p_{\text{lim}}, \quad u_{\max} < u_{\text{lim}}, \quad Q_{\text{diss,ML}} \text{ et } \dot{n}_T \text{ (taux T)}.$$

Nous évaluons aussi les **sensibilités** (poids des paramètres) et l'**influence de la génération de tritium** (par réactions Li-n) sur le comportement du ML (composition locale, chauffage réactionnel éventuel).

Chapitre 2

État de l’art — méthodes numériques pour PFC MHD

Cette section synthétise les approches de simulation utilisées pour les PFC à métal liquide (ML) sous champ magnétique intense, en distinguant (i) les modèles d’écoulement, (ii) les stratégies électromagnétiques, (iii) le traitement de la surface libre, (iv) les discrétisations et solveurs, et (v) les méthodes d’IA scientifique (surrogates, PINNs, solveurs différentiables). L’objectif est d’outiller le choix méthodologique en fonction des **régimes** (Ha , N , Re , Pe , We) et des **contraintes industrielles** (coût, traçabilité, V&V).

2.1 Modèles d’écoulement

DNS MHD incompressible (QS magnétique)

Principe. Résolution directe (toutes les échelles) des équations de Navier–Stokes couplées à Maxwell en régime quasi-statique (QS). **Atout.** Fidélité maximale, utile pour *truth models* et V&V fine. **Limites.** Coût prohibitif lorsque $Ha \gg 1$: la couche de Hartmann d’épaisseur $\delta_H/L \sim 1/Ha$ impose un maillage normal à la paroi avec $\mathcal{O}(Ha)$ nœuds pour capturer correctement cisaillement et courant. En 3D, la complexité mémoire/temps croît $\sim \mathcal{O}(N_x N_y N_z)$ avec des pas de temps restreints par les vitesses d’ondes/visqueuse. **Usage.** Campagnes courtes, géométries réduites, validation de lois de paroi/corrélations [3, 4].

LES et RANS en MHD

Principe. Modèles sous-maille (LES) ou à fermeture statistique (RANS) adaptés à l’anisotropie MHD : laminarisation lorsque $N = Ha^2/Re \gg 1$; turbulence résiduelle *quasi-bidimensionnelle*. **Atouts.** Bon compromis coût/précision pour canaux et *ducts* sous B . **Limites.** Modèles classiques (e.g. $k-\varepsilon$, $k-\omega$ SST) doivent être modifiés (diffusion turbulente anisotrope, suppression de production dans Hartmann/Shercliff). Calibrations

spécifiques et V&V indispensables. **Usages.** Études design paramétriques 3D modérées, effets de singularités (coudes, jonctions), présence de recirculations [?].

Quasi-2D et *shallow-water* MHD

Principe. Filtrage de l'épaisseur via intégration sur r avec *lois de paroi Hartmann/Shercliff* qui modélisent frottement électrique/visqueux ; équations 2D en coordonnées curvilignes avec terme de freinage Lorentz effectif. **Atouts.** Très efficace pour films guidés, tokamak/stellarator en coordonnées locales ; saisit correctement la contribution dominante des couches lorsque $Ha \gg 1$ et que la topologie est « douce ». **Limites.** Précision dégradée près des singularités (injections, coudes à 90° , sauts de conductivité), pertes 3D et jets secondaires non résolus. **Usages.** *Early design*, balayage de paramètres, contrôle des marges thermiques/hydrauliques en quelques minutes [3, 4].

Méthodes intégrales (corrélations de pertes)

Principe. Décomposition de Δp en contributions visqueuses/Dean/singulières/MHD avec corrélations f_{Hart} , f_{Dean} , K_{sing} issues d'analytique/expériences/DNS. **Atouts.** Très rapide ; idéal pour optimisation amont, estimation d'ordre de grandeur, sensibilités. **Limites.** Domaine de validité borné ; dépendance aux CL électriques, à la géométrie locale et à Ha , Re . V&V par cas test indispensable. **Usages.** Dimensionnement système, étude d'impact de FCI, *sizing* de pompes, choix d'angles d'injection.

Approche	Coût	Précision	Géométrie	Régime cible	Remarques
DNS QS	↑↑↑	↑↑	locale 3D	Ha modéré	V&V, couches résolues
LES/RANS MHD	↑	↑	3D	Ha élevé	modèles anisotropes requis
Quasi-2D	↓	~	2D/q2D	$Ha \gg 1$	lois de paroi Hartmann
Intégrales	↓↓	~	1D/2D	concept	corrélations à borner

TABLE 2.1 – Comparatif qualitatif des familles de modèles d'écoulement pour PFC-ML.

2.2 Électromagnétisme couplé

Inductionless / Quasi-statique (QS)

Quand $Rm = \mu_0 \sigma UL \ll 1$, le champ est imposé et l'on résout un **potentiel électrique** scalaire ϕ tel que $\mathbf{J} = \sigma(-\nabla\phi + \mathbf{u} \times \mathbf{B})$, $\nabla \cdot \mathbf{J} = 0$, avec CL électriques (conductrices/isolantes/FCI). **Standard** en métaux liquides : robuste, peu coûteux, idéal pour PFC [3, 4].

MHD complet (induction résolue)

Nécessaire si champs AC, géométries générant $\partial_t \mathbf{B}$ non négligeables, ou couplage fort avec circuits ; on intègre $\partial_t \mathbf{B} = -\nabla \times \mathbf{E}$. Coût et rigidité accrus, étapes de préconditionnement spécifiques (curl-curl, jauges, formulation $A-\phi$) [?].

Lignes directrices. QS dès que $Rm < 10^{-2}-10^{-3}$ et fréquences faibles ; MHD complet sinon. Toujours vérifier l'échelle d'effet de peau $\delta_{\text{skin}} = \sqrt{2/(\mu\sigma\omega)}$ pour champs variables.

2.3 Suivi de surface libre

VOF / Level-Set / Front-Tracking

VOF conserve strictement le volume, **Level-Set** donne une interface lisse ; le **Ghost-Fluid** et les modèles de **tension de surface** (CSF) traitent les forces capillaires. **Atouts.** Grandes déformations ; multi-physiques ; interfaces conducteur/isolant gérables via conductivité dépendant de la fraction. **Limites.** Coût (3D+t), contrainte de pas de temps capillaire $\Delta t \lesssim \sqrt{\rho\Delta x^3/\gamma}$, nécessité d'anti-diffusion. Intégration MHD plus lourde (saut de σ et \mathbf{J}).

Surface libre fixe (film mince)

Hypothèse. Interface lisse, contrainte tangentielle nulle, $\mathbf{n} \cdot \mathbf{J} = 0$. **Atout.** Extrêmement efficace ; cohérent avec $N \gg 1$ (laminarisation, film guidé) et absence de splashing. **Limite.** Non valide en présence de jets, impacts, ondes de surface fortes.

Choix pratique. Pour PFC ML fortement contraint ($Ha \gg 1$, $N \gg 1$) et flux stables, **surface libre fixe** + lois Hartmann est la meilleure efficacité/cohérence. Migrer vers VOF/LS si instationnarités et ondes sont au cœur du problème.

2.4 Discrétisations, maillages et solveurs

FV/FE/FD et maillages

FV domine en industriel (conservativité stricte, CL naturelles). FE utile pour formulations magnétiques. FD sur grilles cartésiennes si géométrie simple. **Maillage anisotrope** : résolution des couches Hartmann/Shercliff nécessite $\geq 8-12$ cellules dans δ_H ; si impossible, recourir aux **lois de paroi MHD**. **Immersed Boundary** possible pour intégrer inserts FCI sans remaillage fin.

Schémas et stabilisation

Convection : upwind 2^e ordre / QUICK avec limiteurs TVD ; diffusion centrée ; projection de pression (SIMPLE/PISO). IMEX : diffusion/Joule implicites (BDF2/CN), convection explicite (RK2/RK3) si transitoire ; stationnaire par point fixe.

Solveurs et préconditionnement

Poisson/pression : AMG/CG ; couplé MHD : Schur complément/Uzawa ; systèmes curl-curl : Hiptmair–Xu. Grand Ha : conditionnements dégradés \Rightarrow **préconditionneurs blocs et échelles** physiques (normalisation par Ha, Re) recommandés. Tendance : **GPU** (AMG hybride), JAX/CUDA pour chaînes différentiables.

Coûts indicatifs (règles de pouce)

Résoudre les couches $\Rightarrow N_{\perp} \sim \mathcal{O}(\text{Ha})$ en direction normale, Δt fixé par la diffusion $\nu/\Delta x^2$ ou la contrainte capillaire. Les approches quasi-2D réduisent le coût de $\times 10^2 - 10^3$ par rapport à une 3D pleinement résolue.

2.5 Apprentissage et calcul scientifique hybride

Surrogates discrétisation-aware

GNN sur maillages (graphes d'éléments/faces) pour prédire champs ou opérateurs ; variantes **GAT** (attention locale, poids apprenant les voisins pertinents) et **Graph Transformers** (attention globale, encodages positionnels Laplaciens) offrent une meilleure expressivité sur géométries complexes [?, ?, ?]. **Avantages.** Temps d'inférence court après entraînement ; adaptables à des géométries variées (stellarator). **Limites.** Données d'entraînement coûteuses (DNS/LES multiples) ; *domain shift* hors du manifold d'apprentissage ; risque de *over-smoothing* (GNN profonds).

PINNs et variantes

PINNs incorporent les PDE dans la fonction de coût (résidus intérieurs + CL/CI) via différentiation automatique ; pas besoin de vérité terrain dense [?]. **Atouts.** Inverse problems, identification de paramètres (e.g. h_{contact} , $\sigma_e(T)$). **Limites.** Sensibles aux hyperparamètres ; coût élevé en 3D+t ; généralisent mal à de nouvelles CL/CI sans réentraînement. Des approches *discretization-aware* (FD/FE/FV-informées) améliorent robustesse [?].

Opérateurs neuronaux et solveurs différentiables

Neural Operators (ex. FNO, GNO) apprennent le mapping fonctionnel (données d'entrée \rightarrow solution) sur familles de PDE ; prometteur pour balayages rapides [?]. **Solveurs différentiables** : pipeline FV/FE codé en autodiff (PyTorch/JAX) pour co-entraînement d'un modèle ML et d'un solveur *end-to-end*. Puissant pour corrections d'erreurs numériques, contrôle, et optimisation de forme [?]. **Caveats**. Budget mémoire important ; besoin d'un *reference solver* ; V&V spécifique (tests de conservation, bilans).

Famille	Points forts	Points d'attention
GNN/GAT/GT	Maillages non structurés, inférence rapide ; contexte stellarator	Données coûteuses ; extrapolation hors distribution ; tuning profond
PINNs	PDE+CL/CI dans la loss ; param. inverse	Coût 3D ; sensibilité hyperparam. ; re-train par cas
Opérateurs neuronaux	Surrogate global (famille de PDE)	Nécessite large base ; garanties limitées hors support
Solveurs différentiables	Optimisation/contrôle end-to-end ; gradients exacts	Empreinte mémoire ; complexité ingénierie

TABLE 2.2 – Panorama IA scientifique pour PFC-ML.

Chapitre 3

Méthodologie

3.1 (3-a) Équations de conservation généralisée

Formulation générale

L'ensemble des phénomènes physiques mis en jeu (écoulement, transfert thermique, électromagnétisme, chimie et transport neutronique) peut être formulé sous la forme d'une **équation de conservation généralisée** :

$$\frac{\partial(M_\phi \phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi \mathbf{u}) = \nabla \cdot (K_\phi \nabla \phi) + \Psi_s. \quad (3.1)$$

Cette écriture unique permet de traiter toutes les physiques dans un même cadre numérique, chaque phénomène se distinguant par la définition de ses trois opérateurs :

- M_ϕ : terme **inertiel ou de masse** (quantité conservée associée au champ ϕ),
- K_ϕ : terme **diffusif** (viscosité, conductivité, diffusivité, etc.),
- Ψ_s : **terme source** (effet de couplage, réaction, production ou dissipation).

Application aux différentes physiques

Physique	Champ ϕ	Terme de masse M_ϕ	Terme diffusif K_ϕ	Remarques / sources principales
Écoulement (NS)	\mathbf{u}	ρ	μ	$\Psi_s = \mathbf{J} \times \mathbf{B}$ (Lorentz) + Φ_{visc}
Continuité	m	1	0	$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ (incompressible)
Chaleur	T	ρc_p	k	$\Psi_s = \sigma \ \mathbf{E}\ ^2 + \Phi_{\text{visc}} + \dot{q}_{\text{nucl}}$
Électromagnétisme (QS)	ϕ ou \mathbf{B}	1	$\eta = 1/(\mu_0 \sigma)$	$\Psi_s = \nabla \times (\mathbf{u} \times \mathbf{B})$
Chimie (espèces)	$[n_i]$	1	D_i	$\Psi_s = R_i(T, [n_j], \Phi_n)$ (réactions)
Transport neutronique	Φ_n	1	D_n	$\Psi_s = S_n - \Sigma_a \Phi_n - k_{\text{fiss}} \Phi_n$

TABLE 3.1 – Décomposition des termes M_ϕ , K_ϕ , Ψ_s par physique dans la formulation généralisée.

Dans cette écriture, la structure de l'équation reste commune à toutes les physiques : seuls les opérateurs et sources diffèrent, ce qui permet une **discrétisation unifiée** (schéma volume fini ou éléments finis identique pour toutes les grandeurs) et un **assemblage automatique** des équations couplées.

Couplages entre physiques

Les phénomènes précédents interagissent via les **termes sources** Ψ_s et les dépendances croisées des coefficients (ρ , k , σ , D_i , etc.). Le tableau ?? résume les principaux mécanismes de couplage :

Définition normalisée des termes sources (expressions et unités)

Lorentz (force volumique, NS).

$$\boxed{\mathbf{S}_{\text{NS}}^{(\text{Lorentz})} = \mathbf{J} \times \mathbf{B}} \quad [\text{N m}^{-3}]$$

Chauffage Joule (énergie).

$$\boxed{\dot{q}_J = \mathbf{J} \cdot \mathbf{E} = \sigma \left\| -\nabla\phi + \mathbf{u} \times \mathbf{B} \right\|^2} \quad [\text{W m}^{-3}]$$

(en QS : $\mathbf{J} = \sigma(-\nabla\phi + \mathbf{u} \times \mathbf{B})$, $\mathbf{E} = -\nabla\phi$)

Dissipation visqueuse (énergie).

$$\boxed{\Phi_{\text{visc}} = 2\mu \mathbf{S} : \mathbf{S}, \quad \mathbf{S} = \frac{1}{2}(\nabla\mathbf{u} + \nabla\mathbf{u}^\top)} \quad [\text{W m}^{-3}]$$

Chauffage « réaction chimique » (énergie).

$$\boxed{\dot{q}_{\text{rxn}} = \sum_r R_r \Delta H_r} \quad [\text{W m}^{-3}]$$

où R_r est le **taux de réaction** r [$\text{m}^{-3} \text{s}^{-1}$] et ΔH_r l'**enthalpie de réaction** (exothermique > 0).

Chauffage « nucléaire » (énergie).

$$\boxed{\dot{q}_{\text{nucl}} = \sum_{r \in \text{Li-n}} R_r E_r} \quad [\text{W m}^{-3}]$$

avec E_r l'énergie libérée par réaction neutronique r (ex. ${}^6\text{Li}(n, \alpha)T$: $E_r \simeq 4.8 \text{ MeV}$).

Sources d'espèces (chimie).

$$\boxed{\omega_i = \sum_r \nu_{i,r} R_r} \quad [\text{m}^{-3} \text{s}^{-1}]$$

$\nu_{i,r}$: coefficient stœchiométrique de l'espèce i dans la réaction r (positif si produit, négatif si réactif).

Cinétique « 1-groupe » pour les réactions Li–n (définition de R_r).

$$\boxed{R_r = \Phi_n \Sigma_r = \Phi_n N_{\text{cible}} \sigma_r}$$

où Φ_n est le **flux neutronique** $[\text{m}^{-2} \text{s}^{-1}]$, N_{cible} la **densité atomique** des noyaux cibles $[\text{m}^{-3}]$, et σ_r la **section efficace microscopique** de la réaction r $[\text{m}^2]$. Pour le mélange Li_{17}Pb , on peut regrouper ${}^6\text{Li}/{}^7\text{Li}$ via un *facteur effectif* sur N_{cible} (pondération 7%/93%) — cf. section données.

Remarque EM (QS). Le problème QS se résout via

$$\mathbf{J} = \sigma(-\nabla\phi + \mathbf{u} \times \mathbf{B}), \quad \nabla \cdot \mathbf{J} = 0,$$

les CL électriques (conducteur/isolant/FCI) fixant le potentiel ϕ . La partie MHD intervient ensuite dans NS via $\mathbf{J} \times \mathbf{B}$ et dans l'énergie via $\dot{q}_J = \mathbf{J} \cdot \mathbf{E}$.

Origine → Cible	NS	Continu.	Chaleur	Électromagn.	Chimie	Neutron.
Navier–Stokes	—	—	$\Phi_{\text{visc}} = 2\mu \mathbf{S} : \mathbf{S}$	—	—	—
Électromagnétisme (QS) $\mathbf{J} \times \mathbf{B}$	—	—	$\dot{q}_J = \mathbf{J} \cdot \mathbf{E}$	—	—	—
Chimie (réactions)	—	—	$\dot{q}_{\text{rxn}} = \sum_r R_r \Delta H_r$	—	$\omega_i = \sum_r \nu_{i,r} R_r$	—
Neutronique (Lin)	—	—	$\dot{q}_{\text{nuc}} = \sum_r R_r E_r$	—	$\omega_i = \sum_r \nu_{i,r} R_r - \sum_r \Sigma_r \Phi_n$	—
Continuité (masse)	—	0	—	—	—	—

TABLE 3.2 – Couplages multi-physiques explicites. Chaque cellule indique le terme ajouté dans l'équation *cible* lorsqu'il provient de la *physique d'origine*. Les dépendances matériaux ($\mu(T)$, $\sigma(T)$, $D_i(T)$, etc.) sont gérées dans la section données / interpolations.

Ce formalisme global permet :

- une **intégration naturelle des équations couplées** dans un solveur multi-physique unique ;
- la possibilité d'utiliser un **même noyau numérique (Volume Finis)** pour chaque champ ;
- une gestion cohérente des **termes d'interaction** (*e.g.* couplage électro-thermo-hydrodynamique) via une seule structure de données.

Ainsi, la formulation (3.1) constitue la base unifiée sur laquelle sont construites les simplifications adimensionnelles et la méthode numérique optimisée (voir section 3-b et 3-c).

3.2 (3-b) Simplifications généralisées

Apparition de chaque terme source dans les équations avec la normalisation :

Origine → Cible	Navier–Stokes	Continuité	Chaleur	Électromagn.	Chimie/espèces	Neutronique
Navier–Stokes (NS)	$\frac{1}{\text{Re}} \nabla^{*2} \mathbf{u}^*$	—	$2 \mathbf{S}^* : \mathbf{S}^*$	$\text{Rm} \nabla^* \times (\mathbf{u}^* \times \mathbf{B}^*)$	—	—
Chaleur (T)	$T \theta^* \mathbf{e}_g$	—	$\frac{1}{T} \nabla^{*2} \theta^* + \nabla^* \cdot \nabla^* Y^*$	—	$\nabla^{*2} \theta^*$	$-\alpha_T \theta^* \Phi_n^*$
Chimie / espèces (Y)	$C Y^* \mathbf{e}_g$	$\Pi_m \dot{\omega}_\Sigma^*$	$Q \beta \dot{\omega}_\Sigma^* + \nabla^* \cdot \nabla^* Y^*$	—	$\frac{1}{\text{Re}} \nabla^{*2} Y^* + \dot{\omega}_i^*$	$-\alpha_C Y^* \Phi_n^*$
Électromagnétisme (QS MHD)	$N \mathbf{J}^* \times \mathbf{B}^*$	—	$(N) \mathbf{J}^* \cdot \mathbf{E}^*$	$\frac{1}{\text{Rm}} \nabla^{*2} \mathbf{B}^*; \nabla^* \cdot \mathbf{B}^* = 0$	—	—
Neutronique (Φ_n)	—	—	$\Pi_n \Phi_n^*$	—	${}_n \nu_i \Phi_n^*$	$-\rho_{\text{th}}(\theta^*, Y^*) \Phi_n^*$
(Diffusions “propres”)	$\frac{1}{\text{Re}} \nabla^{*2} \mathbf{u}^*$	0	$\frac{1}{T} \nabla^{*2} \theta^*$	$\frac{1}{\text{Rm}} \nabla^{*2} \mathbf{B}^*$	$\frac{1}{\text{Re}} \nabla^{*2} Y^*$	—

On peut négliger un terme source quand son nombre adimensionné est très inférieur à 1.

Le **nombre de Fourier généralisé** s’écrit :

$$Fo_\phi = \frac{K_\phi t}{M_\phi L^2},$$

et compare le temps caractéristique de *diffusion* d’une grandeur physique ϕ au temps d’observation. Lorsque $Fo_\phi \ll 1$, le régime est **transitoire** (l’évolution temporelle domine), tandis que pour $Fo_\phi \gg 1$, le système atteint un **régime quasi stationnaire**.

Le **nombre de Mach** est défini par :

$$Ma = \frac{U}{c},$$

rapport entre la vitesse caractéristique de l’écoulement et la célérité du son. Si $Ma \ll 1$, les effets de compressibilité sont négligeables et l’écoulement peut être considéré comme **incompressible**, alors que pour $Ma \gtrsim 1$, les effets compressibles deviennent **prépondérants** (écoulement supersonique).

Biot généralisé (directionnel) pour une grandeur ϕ sur deux milieux i, j :

$$\text{Bi}_{ij} = \frac{(K_i/L_i)}{(K_j/L_j)}, \quad \text{quasi-isoaleur de } i \text{ si } \text{Bi}_{ij} \gg 1 \text{ et } \tau_{\text{diff},i} \ll \{\tau_{\text{adv}}, \tau_{\text{src}}\}.$$

La condition sur le terme source peut aussi être que celui ci soit isotrope sur une direction. On applique ces critères pour *sélectionner/négliger* des termes *par direction et par physique*.

3.3 (3-c) Résolution par volumes finis optimisée

Schémas

FV 2D en coordonnées locales (r, θ) ; grille décalée (p-v). Convection : upwind 2^e ordre (QUICK si stable); diffusion : centré. Couplage (\mathbf{u}, p) : SIMPLE/PISO; Maxwell QS (potentiel électrique) puis énergie; boucle de point fixe sur $\nabla p, e(\theta)$.

IMEX et contrôle CFL

Termes raides (diffusion, Joule) \rightarrow implicite (BDF2/CN), convection \rightarrow explicite (RK2/RK3). CFL advection et diffusion respectés; sous-relaxation ($\omega \leq 0.3$) pour $e(\theta)$.

Modèle pertes et fermeture

$$dp = \left[f_{\text{visc}}/D_h + f_{\text{Dean}} + f_{\text{sing}} + f_{\text{MHD}}(\text{Ha}, N; \text{CL électr.}) \right] \frac{\rho U_m^2}{2} ds.$$

f_{MHD} issu d'un modèle effectif Hartmann/Shercliff compatible conductrice/isolante; *lois de paroi MHD* si la maille ne résout pas δ_H .

3.4 (3-d) Données utilisées et lois d'interpolation

Mélanges & densités atomiques

Li₁₇Pb ($x_{\text{Li}} = 0.17, x_{\text{Pb}} = 0.83$). Pour Li : fraction isotopique modélisée *effectivement* par un facteur unique sur la concentration Li pour refléter $\sim 93\%$ ⁷Li et 7% ⁶Li *dans la cinétique* (voir :reactions@cref

:reactions@cref

:reactions@cref

:reactions@cref

??). Grandeurs volumétriques : moyenne pondérée (règle des mélanges) ou loi spécifique si disponible (densité, c_p , k , σ_e).

Propriétés thermo-physiques (à insérer)

— $\rho(T, P), \mu(T), k(T), c_p(T), \sigma_e(T), \gamma(T), p_v(T)$ pour Li₁₇Pb; W; SiC (FCI); He.

Diffusivité d'espèces (Arrhenius)

$$D_i(T) = D_{0,i} \exp\left(-\frac{Q_i}{RT}\right).$$

Espèce i	$D_{0,i}$ [m ² /s]	Q_i/R [K]
Li	6.4×10^{-8}	1.73×10^4
Pb	3.2×10^{-8}	1.73×10^8 (<i>à vérifier, probablement 10^4–10^5</i>)
T	1.0×10^{-7}	1.60×10^4
He	9.2×10^{-8}	1.59×10^4

TABLE 3.3 – Lois diffusivité $D_i(T)$ (à confirmer pour Pb).

Sections efficaces et transport neutronique

Isotope	A	σ_a	σ_s	$S = \sigma_a + (1 - \mu)\sigma_s$	$\Sigma_{tr,g}$
He	4	0	2.0	1.667	
⁶ Li	6	0	1.5	1.333	
⁷ Li	7	0	1.5	1.3571	
Pb (nat.)	207	0.05	3.0	3.04	
T	3	0	1.7	1.322	

TABLE 3.4 – Données micro ENDF/B-VIII, He via $\sigma = 4\pi b^2$ avec $b = 3.099$ fm. $\Sigma_{tr,g}$: à remplir via densités atomiques du mélange.

$$N_j(T, w_j) = \frac{\rho(T) w_j N_A}{M_j} \quad (\text{où } w_j \text{ est la fraction massique, } M_j \text{ la masse molaire}).$$

$$\Sigma_{tr,g}(T, \mathbf{w}) = \sum_j N_j(T, w_j) \left[\sigma_{a,j,g}(T) + (1 - \bar{\mu}_{j,g}(T)) \sigma_{e,j,g}(T) \right].$$

$$D_g(T, \mathbf{w}) = \frac{1}{3 \Sigma_{tr,g}(T, \mathbf{w})}.$$

Remarque : pour le **1-groupe** simplifié, on compile des Σ macroscopiques par moyenne pondérée des espèces (pondération densités atomiques & fractions isotopiques).

On sépare le spectre neutronique en deux groupes : les **neutrons thermiques** et les **neutrons rapides**, afin de pouvoir modéliser les réactions sources suivantes :



Ces réactions sont caractérisées par un **taux de réaction volumique** :

$$R \text{ [réactions/m}^3\text{/s]} = N_j(T) \sigma_{j,r,g}(T) \phi_g, \quad N_j(T) = \frac{\rho(T) w_j N_A}{M_j},$$

où $\rho(T)$ est la densité massique du mélange, w_j la fraction massique de l'isotope j , M_j sa masse molaire et N_A la constante d'Avogadro.

3.5 (3-e) Conditions aux limites et initiales

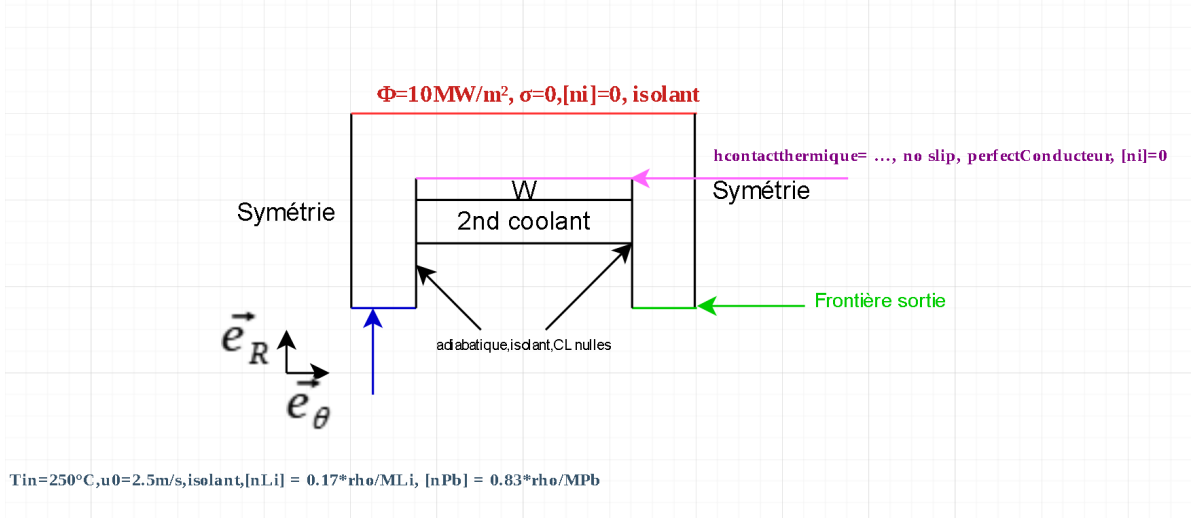


FIGURE 3.1 – Cas de référence : surface libre côté plasma ($q'' = 10 \text{ MW/m}^2$, isolant élec., $\sigma = 0$, $[n_i] \cdot \mathbf{n} = 0$), interface $W/2^{\text{nd}}$ coolant (h de contact, no-slip, conducteur parfait, $[n_i] = 0$), bas adiabatique/isolant, bords verticaux de symétrie, entrée ($T_{\text{in}}=250^\circ\text{C}$, $u_0 = 2.5 \text{ m/s}$, composition), sortie convective.

- **Surface libre** : $\tau_t = 0$, $p = p_{\text{ext}} + \gamma\kappa$, $\mathbf{n} \cdot \mathbf{J} = 0$, $[n_i] \cdot \mathbf{n} = 0$, flux q'' imposé côté plasma.
- **Interface W/ML** : condition Robin thermique h_{contact} , no-slip hydrodynamique, conducteur parfait (ou FCI isolant), continuité espèces.
- **Bas** : adiabatique, isolant, CL nulles espèces.
- **Symétrie** : $\mathbf{n} \cdot \nabla(\cdot) = 0$, $u_n = 0$, $\mathbf{n} \cdot \mathbf{J} = 0$.
- **Entrée** : u_0 , T_{in} , $[n_{\text{Li}}] = 0.17 \rho / M_{\text{Li}}$, $[n_{\text{Pb}}] = 0.83 \rho / M_{\text{Pb}}$.
- **Sortie** : convective/Neumann faible pour T , n_i ; pression de référence.

Extensions conseillées. Évaluer coefficients de pertes singulières (coudes 90° aux entrées/sorties) et stratégies d'**injection tangente** (réduction pertes vs injection normale).

Chapitre 4

Solution numérique, sorties et V&V

4.1 Sorties principales

- Champs $\mathbf{u}(r, \theta)$, $p(r, \theta)$, $T(r, \theta)$, $n_i(r, \theta)$.
- Bilans Δp et décomposition $\{\text{visc}/\text{Dean}/\text{sing}/\text{MHD}\}$; puissance Joule ; Q_{ML} dissipé ; \dot{n}_T .

4.2 Maillage et convergence

4.3 Validation

1. **Hartmann plan** : profils analytiques $u(y)$ et Δp .
2. **Coude/canal courbe** ($B = 0$) : pertes Dean (corrélations).
3. **Conduction pure** : benchmark $T(x)$.
4. **Comparaison expérience** : ...

4.4 Analyse de sensibilité (poids des paramètres)

Chapitre 5

Réactions Li–n et production de Tritium

5.1 Canaux considérés



Modélisation 1-groupe :

$$R_T = \Phi_n \left(k_6 X_{6\text{Li}} + k_7 X_{7\text{Li}} \right) N_{\text{Li}},$$

avec k_6, k_7 issus des sections efficaces moyennes (à renseigner), N_{Li} densité atomique totale du Li (pondération 7%/93% portée via un *coefficient effectif* sur X_{Li} si l'on regroupe isotopes). **Couplages** : source d'espèces (T, He), effet thermique (énergie nette \pm), réaction propriétés si variation de composition significative (optionnel).

La simplification des équations de Boltzmann et de Batemann en une "simple" équation de conservation chimique en négligeant des termes de l'équation pour notre cas et disponible en annexe.

Chapitre 6

Architecture logicielle et chaîne outil

6.1 IHM Java \rightarrow JSON \rightarrow Python (Numba/Cython)

- L'IHM décrit géométrie, domaines, matériaux, CL/CI, maillage et solveur ; exporte un JSON partagé.
- Le cœur Python charge, **diagnostique les régimes** (nombres sans dimension), applique les **simplifications** décrites plus haut.

/Data \rightarrow Propriétés, tables, corrélations

/Fonctions

/Physique \rightarrow NavierStokes.py, Thermique.py, Maxwell.py, Chimie.py, Neutronique

/Couplage \rightarrow sources, fermetures, assembleurs

/Informatique \rightarrow solveurs, maillage, I/O, utils

/Affichage \rightarrow InterfaceGraphique.java

/Solution \rightarrow champs, bilans, rapports

Chapitre 7

Conclusions et perspectives

...

Annexe A

Listes de symboles

Symbole	Unités	Description
L, U	m, m/s	échelles de longueur et vitesse
B	T	champ magnétique (local)
Ha, Re, N, Rm, Pr, Pe	—	nombres adimensionnels
$e(\theta)$	m	épaisseur du film
\mathbf{u}, p, T	m/s, Pa, K	vitesse, pression, température
\mathbf{J}, \mathbf{E}	A/m ² , V/m	courant, champ électrique
D_i, n_i	m ² /s, m ⁻³	diffusivité, densité d'espèce
q''	W/m ²	flux thermique surfacique

Annexe B

Nombres adimensionnels et paramètres de couplage

Définitions complètes des nombres sans dimensions

Symbole	Nom	Expression	Domaine / Signification
Re	Reynolds	$Re = \frac{\rho_0 U L}{\mu} = \frac{UL}{\nu}$	Rapport inertie / viscosité
Pr	Prandtl	$Pr = \frac{\mu}{\alpha} = \frac{c_p \mu}{k}$	Diffusion impulsion / chaleur
Pe_T	Péclet thermique	$Pe_T = Re Pr = \frac{UL}{\alpha}$	Convection / conduction thermique
Sc	Schmidt	$Sc = \frac{\nu}{D}$	Diffusion impulsion / masse
Pe_m	Péclet massique	$Pe_m = Re Sc = \frac{UL}{D}$	Convection / diffusion massique
Br	Brinkman	$Br = \frac{\mu U^2}{k \Delta T}$	Chauffage visqueux
Ec	Eckert	$Ec = \frac{c_p \Delta T}{U^2}$	Conversion énergie cinétique / chaleur
Gr_T	Grashof thermique	$Gr_T = \frac{g \beta_T \Delta T L^3}{\nu^2}$	Poussée d'Archimède (T)
Ri_T	Richardson thermique	$Ri_T = \frac{g \beta_T \Delta T L}{U^2}$	Flottabilité thermique (Boussinesq)
Gr_C	Grashof solutal	$Gr_C = \frac{g \beta_C \Delta Y L^3}{\nu^2}$	Poussée d'Archimède (C)
Ri_C	Richardson solutal	$Ri_C = \frac{g \beta_C \Delta Y L}{U^2}$	Flottabilité solutale
Ha	Hartmann	$Ha = B_0 L \sqrt{\frac{\sigma}{\rho_0 \nu}}$	Rapport forces magnétique / visqueux
Rm	Magnetic Reynolds	$Rm = \mu_0 \sigma U L$	Induction magnétique
N ou N_{int}	Interaction MHD	$N = \frac{\sigma B_0^2 L}{\rho_0 U} = \frac{Ha^2}{Re}$	Rapport Lorentz / inertielle
Du	Dufour	$Du = \frac{D_T \Delta Y}{D \Delta T}$	Chaleur due à ∇Y
So	Soret	$So = \frac{\alpha \Delta T}{D \Delta Y}$	Flux massique dû à ∇T
Da	Damköhler (chimie)	$Da = \frac{U/L}{k_{rxn}} = \frac{\tau_{écoulement}}{\tau_{chimie}}$	Cinétique chimique vs. convection
β	Chaleur de réaction	$\beta = \frac{\sum_r \Delta H_r}{c_p \Delta T}$	Énergie chimique libérée
Π_m	Source de masse	$\Pi_m = \frac{\dot{m}''' L}{\rho_0 U}$	Injection / production massique

Remarques

- Les inverses ($1/Re$, $1/Pe_T$, $1/Rm$, $1/(Re Sc)$) apparaissent dans les termes diffusifs normalisés des équations.
- Les nombres Ri_T , Ri_C , N , Da , Da_n , Π_m , Π_n , β , α_T , α_C interviennent comme coefficients de couplage entre physiques.
- Les coefficients Du et So représentent les effets thermo-diffusifs croisés (Soret et Dufour).

Références

Bibliographie

- [1] ENDF/B-VIII.0, National Nuclear Data Center.
- [2] NIST — données atomiques (b pour He, $\sigma = 4\pi b^2$).
- [3] J.A. Shercliff, *A Textbook of Magnetohydrodynamics*.
- [4] R. Moreau, *Magnetohydrodynamics*.