

.....

NNT/NL : 2020AIXM0424/048ED352

THÈSE DE DOCTORAT

Soutenue à Aix-Marseille Université
le 02 décembre 2020 par

Aurélie CALAME

Contribution à la validation du calcul de la puissance résiduelle des réacteurs à neutrons rapides : aspects expérimentaux et méthodologiques

Discipline

Physique et Sciences de la Matière

Spécialité

Energie, Rayonnement, Plasma

École doctorale

Ecole Doctorale 352 – Physique et
Sciences de la Matière

Laboratoire/Partenaires de recherche

CEA / DES / IRESNE / DER / SPRC / LE2C
(Laboratoire d'Etude des Cœurs et du
Cycle)



Composition du jury

Bertrand MERCIER *Rapporteur*
Professeur à l'INSTN

Pablo RUBIOLO *Rapporteur*
Professeur à Grenoble INP

Lydie GIOT *Examinatrice*
Enseignante-chercheuse au CNRS/IN2P3/Subatch

José BUSTO *Président du jury*
Professeur à l'AMU

Laurent BUIRON *Directeur de thèse*
Ingénieur au CEA

Jean-François LEBRAT *Invité*
Ingénieur au CEA

Cette page est laissée blanche intentionnellement

AFFIDAVIT

Je soussignée, Aurélie CALAME, déclare par la présente que le travail présenté dans ce manuscrit est mon propre travail, réalisé sous la direction scientifique de Laurent BUIRON, dans le respect des principes d'honnêteté, d'intégrité et de responsabilité inhérents à la mission de recherche. Les travaux de recherche et la rédaction de ce manuscrit ont été réalisés dans le respect à la fois de la charte nationale de déontologie des métiers de la recherche et de la charte d'Aix-Marseille Université relative à la lutte contre le plagiat.

Ce travail n'a pas été précédemment soumis en France ou à l'étranger dans une version identique ou similaire à un organisme examinateur.

Fait à Rians, le 24 novembre 2020



Cette œuvre est mise à disposition selon les termes de la [Licence Creative Commons Attribution - Pas d'Utilisation Commerciale - Pas de Modification 4.0 International](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/).

Cette page est laissée blanche intentionnellement

RESUME

La puissance résiduelle est la puissance émise par un réacteur nucléaire après son arrêt. La connaissance de cette dernière est importante à diverses étapes du cycle du combustible, et représente un intérêt majeur pour la sûreté et le coût des installations nucléaires. Elle repose notamment sur la connaissance des bilans matières, c'est-à-dire la composition isotopique des milieux après leur irradiation.

Le formulaire DARWIN3 a vocation à devenir le nouveau formulaire déterministe multifilière de calcul des bilans matière et de la puissance résiduelle dans les réacteurs à neutrons rapides. Composé du formulaire neutronique APOLLO3® et du module d'évolution MENDEL, il nécessite d'être validé par des comparaisons à des mesures expérimentales, mais aussi à son prédécesseur (DARWIN2), et à un code de référence Monte Carlo (TRIPOLI-4®).

Grâce à l'interprétation des expériences TRAPU et DOUBLON ayant eu lieu respectivement dans le cœur interne et la couverture fertile du réacteur à neutrons rapides PHENIX, nous avons accès à la mesure de production de noyaux lourds, responsables de la majorité de la puissance résiduelle aux temps longs.

Nous avons démontré que DARWIN3 offre des résultats semblables à TRIPOLI-4® pour le calcul des niveaux de flux et des bilans matières pour la majorité des isotopes, aussi bien dans le cœur interne que dans la couverture fertile. Cependant, nous avons montré que les deux codes ont du mal à modéliser le niveau de flux neutronique et son spectre énergétique dans la couverture fertile. De plus, le calcul de la production de certains isotopes nécessiterait un découpage énergétique plus fin, ainsi qu'une meilleure connaissance de certaines sections efficaces dans les domaines épithermiques et rapides.

DARWIN3 semble fournir des résultats semblables à DARWIN2 dans le cœur interne pour les actinides majeurs. Quelques disparités sont observées pour les actinides mineurs, que l'on explique par des désaccords au niveau de spectre neutronique. Dans la couverture fertile, DARWIN3 fournit des résultats semblables à DARWIN2 mais le flux neutronique s'adoucit davantage avec DARWIN3 qu'avec DARWIN2, induisant d'importants écarts pour l'étude de l'indicateur de fluence, le rapport isotopique $^{148}\text{Nd}/^{238}\text{U}$.

Nous avons montré que certaines hypothèses simplificatrices de notre modélisation sont valables : il est possible de faire évoluer uniquement les concentrations des aiguilles d'intérêt plutôt que de l'ensemble du cœur, et d'utiliser un plan de chargement constant du réacteur sans prendre en compte ses modifications en cours d'irradiation.

Grâce à l'interprétation de l'expérience de mesure de la puissance résiduelle ayant eu lieu dans SUPERPHENIX en 1987, expérience aux temps courts et dont la puissance résiduelle résulte principalement des produits de fission, nous avons montré que DARWIN3 permet d'obtenir des résultats similaires aux précédentes interprétations réalisées avec le code MECCYCO. DARWIN3 présente des incertitudes plus faibles et mieux maîtrisées. Il est à remarquer que tous les formulaires d'évolution sous-estiment la puissance résiduelle de Superphénix, alors qu'elle est surestimée dans d'autres études similaires dans PHENIX, sans que ce réacteur ne présente des différences notables en termes de neutronique et de nature des contributeurs à la

puissance résiduelle. Ainsi, les désaccords observés résultent probablement d'une sous-estimation des incertitudes expérimentales et d'éventuels biais de mesure ou biais technologiques non encore identifiés. Il serait nécessaire de pouvoir coupler la mesure de la puissance résiduelle à l'analyse des bilans matières afin de s'affranchir des biais du niveau de flux et d'avoir une meilleure compréhension des écarts observés.

Mots-clés : Puissance résiduelle, DARWIN3, bilans matière, validation, incertitudes, évolution, formulaire

ABSTRACT

The decay heat is the power emitted by a nuclear reactor after its shutdown. The knowledge of the latter is important at various stages of the fuel cycle, and represents a major interest for the safety and the cost of nuclear facilities. It is based in particular on the knowledge of final isotopic concentrations.

The DARWIN3 package aims to become the new multi-channel deterministic code for calculating isotopic concentrations and decay heat in sodium-cooled fast reactors (SFR). Composed of the APOLLO3® neutronic package and the MENDEL depletion module, it needs to be validated by experimental comparisons to measurements, to calculation results provided by its predecessor (DARWIN2), and to a Monte Carlo reference code (TRIPOLI-4®).

Thanks to the interpretation of the TRAPU and DOUBLON experiments, which took place respectively in the internal core and the fertile blanket of the PHENIX SFR, we have access to heavy nuclides production measurements, responsible of most of the decay heat at long cooling times. We have demonstrated that the DARWIN3 package offers similar results to TRIPOLI-4® for the calculation of flux levels and isotopic ratios for the majority of isotopes, both in the inner core and in the fertile blanket.

However, both codes show difficulties to model the level of flux and the neutron energy spectrum in the fertile blanket. In addition, the calculation of the final inventory of some isotopes would require a more refined energy mesh, as well as a better knowledge of their production cross sections in the epithermal and fast range.

DARWIN3 seems to provide similar results to DARWIN2 in the inner core for major actinides. Discrepancies are observed for minor actinides, due to neutron spectrum discrepancies. In the fertile blanket, DARWIN3 offers results similar to DARWIN2, but the neutron flux is more "softened" with DARWIN3 than with DARWIN2, inducing significant differences for the study of the fluence indicator, the $^{148}\text{Nd}/^{238}\text{U}$ isotopic ratio.

Some of the approximations we made in our modelization have proven to be valid: we can apply the depletion on the concentrations of the pins of interest only rather than on the whole reactor, and use a constant description of the reactor loading map without taking into account its modifications without having significant discrepancies in our calculation results.

Thanks to the interpretation of the decay heat measurement experiment that took place in SUPERPHENIX in 1987, a short-time experiment where the decay heat mainly results from fission products, we have shown that DARWIN3 allows to obtain results similar to previous interpretations carried out with the MECCYCO code. DARWIN3 has lower and better mastered uncertainties, however, all codes underestimate the decay heat measured during several experiments in Superphenix. On the contrary, it is overestimated in other similar studies in PHENIX, which has no significant difference in terms of neutronics and decay heat contributors. Thus, the disparities probably result from an underestimation of the experimental uncertainties and maybe unidentified measurement or technological biases. It would be necessary to be able to couple the measurement of the decay heat with the analysis of the

isotopic ratios in order to overcome the biases of the flux level and have a better understanding of the discrepancies we have observed.

Keywords: decay heat, DARWIN3, final inventory, validation, uncertainties, depletion, calculation package

REMERCIEMENTS

Je tenais ici à remercier toutes les personnes grâce à qui ce travail de thèse a pu être ce qu'il est aujourd'hui.

Ainsi, je remercie la direction du Service de Physique des Réacteurs et du Cycle (SPRC) où j'ai pu réaliser cette thèse : Mr. Jean-Christophe BOSQ et Mr. Philippe DARDÉ, ainsi que les chefs successifs du Laboratoire d'Étude des Cœurs et du Cycle (LE2C), Mr. Romain ESCHBACH et Mr. Guillaume MARTIN. Merci à vous de m'avoir accueillie avec bienveillance au sein du service et du laboratoire, et de m'avoir permis de réaliser cette thèse dans les meilleures conditions. J'en profite également pour remercier les secrétaires du service, Claire et Alexandra, pour leur gentillesse et leur aide sur de nombreux sujets administratifs.

Je remercie également les membres de mon jury : Mme Lydie GIOT, Mr. José BUSTO, Mr. Pablo RUBIOLO et Mr. Bertrand MERCIER. Je vous remercie pour le temps que vous avez consacré à lire mon manuscrit, ainsi que pour vos remarques constructives et enrichissantes, qui ont contribué à le rendre meilleur.

Je remercie chaleureusement Mr. Jean-François LEBRAT et Mr. Laurent BUIRON, qui ont encadré et dirigé cette thèse. Merci dans un premier temps d'avoir cru en moi et de m'avoir donné l'opportunité de réaliser cette thèse. C'était une expérience très riche, et je suis heureuse de l'avoir fait grâce à vous. Merci également pour votre temps et votre patience, votre pédagogie ainsi que vos nombreux conseils tout au long de la thèse, qui ont largement contribué à sa qualité. Je veux aussi vous remercier pour votre bienveillance et vos encouragements qui m'ont rassurée et redonné confiance dans les moments de doute.

Je remercie également l'ensemble de mes collègues du SPRC qui ont créé une ambiance propice à la fois aux échanges scientifiques mais aussi à la bonne humeur, et qui ont ainsi contribué à mon épanouissement durant ces trois années. Je remercie notamment Yannick, aussi bien pour ton aide avec TRIPOLI-4® que pour nos déjeuners avec Cindy, Florian et Nathan, qui toujours un bon moment.

Sans les citer tous et toutes, je pense aussi aux thésard·e·s, aux alternant·e·s, et aux stagiaires qui se sont succédés au sein du SPRC. Je remercie notamment Elias G., Amine H., Hui G., Martin F., Weifeng Z., Pierre D., Matthieu L., Francesco M., Anne-Laure M., Kevin T, Axel R. Je pense aussi aux autres thésard·e·s, alternant·e·s, et stagiaires qui ont fait un pas au Hameau, et qui ont contribué à rendre cette expérience meilleure, notamment aux ami·e·s que je m'y suis fait : Thomas, Maryon, Maëva, Manon, Antoine, Karen. Se rendre compte que des thésard·e·s d'autres domaines passaient par les mêmes moments de doutes et pouvoir échanger avec vous a toujours été une source de réconfort, même si je garderai davantage le souvenir de nos nombreuses activités et soirées. Sans vous, cette aventure n'aurait pas eu la même saveur.

Je remercie bien évidemment ma famille, notamment mes parents et mes frères, qui m'ont toujours soutenue, qui ont toujours cru en moi, qui m'ont encouragée. Merci pour votre soutien sans faille et de m'avoir donné les moyens de réussir.

Je remercie enfin Lucas. Merci pour tout ton amour et tout ton soutien au cours de ces trois ans.

SOMMAIRE

Affidavit	3
Résumé	5
Abstract.....	7
Remerciements	9
Sommaire	11
Liste des tableaux.....	20
Liste des graphiques	22
Liste des figures.....	25
Liste des équations.....	27
Glossaire	29
1. Chapitre 1 : Introduction.....	30
1.1 Éléments de contexte et objectifs	30
1.1.1 <i>Le retour d'expérience de l'accident de Fukushima... des exigences de sûreté plus strictes</i>	30
1.1.2 <i>Le développement de la IVème génération de réacteurs</i>	32
1.1.3 <i>Le développement continu des outils de calculs et la nécessité du processus de VVQI</i>	35
1.1.3.1 Le processus de VVQI.....	35
1.1.3.2 Le développement des formulaires de calcul, de nouvelles possibilités de modélisation	36
1.1.3.3 Les retours d'expériences	36
1.1.4 <i>Objectif de la thèse et stratégie</i>	41
1.1.4.1 Problématiques multiples.....	41
1.1.4.2 Stratégie générale.....	42

1.2	Eléments de neutronique et de physique des réacteurs	44
1.2.1	<i>L'équation du transport de Boltzmann</i>	<i>44</i>
1.2.1.1	Le flux neutronique.....	45
1.2.1.2	Construction de l'équation de Boltzmann.....	45
1.2.2	<i>Les équations d'évolution de Bateman</i>	<i>46</i>
1.3	Les outils et données de la neutronique.....	50
1.3.1	<i>Les codes de calcul neutroniques.....</i>	<i>50</i>
1.3.1.1	Les codes neutroniques stochastiques.....	50
1.3.1.2	Les codes neutroniques déterministes.....	50
1.3.2	<i>Les codes de calcul d'évolution</i>	<i>54</i>
1.3.3	<i>Les bibliothèques de données nucléaires</i>	<i>54</i>
1.3.4	<i>Les chaînes d'évolution / chaînes de décroissance.....</i>	<i>55</i>
1.3.5	<i>Les matrices de variances et de covariances</i>	<i>55</i>
1.4	Les formulaires de calculs disponibles pour le calcul de la puissance résiduelle	57
1.4.1	<i>Le formulaire DARWIN2</i>	<i>57</i>
1.4.1.1	ERANOS2.....	58
1.4.1.2	PEPIN2	58
1.4.2	<i>Le formulaire DARWIN3</i>	<i>58</i>
1.4.2.1	APOLLO3®	58
1.4.2.2	MENDEL – DARWIN3	61
1.4.3	<i>Apports du formulaire DARWIN3.....</i>	<i>63</i>
2.	Chapitre 2 : Méthodologie des Calculs de Sensibilités et d'Incertitudes	66
2.1	Généralités	66
2.1.1	<i>Intérêts de la connaissance des incertitudes et de ses contributeurs.....</i>	<i>66</i>
2.1.2	<i>Biais et incertitudes.....</i>	<i>67</i>
2.1.2.1	Les erreurs de calcul.....	67
2.1.2.2	Les erreurs et incertitudes de mesure	68
2.1.2.3	Sources d'erreurs considérées	69
2.2	Méthodologie des calculs d'incertitudes	70

2.2.1	<i>Notion de couplage Boltzmann-Bateman</i>	70
2.2.2	<i>Calcul par sensibilité directe (perturbation et propagation)</i>	71
	Principe.....	71
	Outils de calcul des incertitudes par sensibilité directe.....	73
	Limites.....	74
2.2.3	<i>Calcul par propagation statistique</i>	74
	Principe.....	74
	Outils de calcul de propagation statistique.....	75
	Limites.....	76
2.2.4	<i>Sensibilités couplées Boltzmann-Bateman</i>	76
2.2.4.1	Aspects théoriques des sensibilités couplées	77
2.2.4.2	Sensibilités couplées Boltzmann-Bateman « en pratique »	80
2.2.5	<i>Sensibilités considérées</i>	82

3. Chapitre 3 : Interprétation d'expériences d'irradiation dans Phénix avec le nouvel Outil de Calcul Scientifique DARWIN383

3.1	Analyse des bilans matières suite aux expériences d'irradiations d'aiguilles.....	83
3.1.1	<i>Intérêt de l'analyse des bilans-matière</i>	83
3.1.2	<i>Estimation du niveau de flux</i>	84
	Estimation du niveau de flux par un indicateur de fluence	84
	Notion de recalage en fluence	85
3.1.3	<i>Démarche d'analyse des bilans matière</i>	85
3.2	Les expériences d'irradiations d'aiguilles dans PHENIX.....	87
3.2.1	<i>Le réacteur PHENIX</i>	87
3.2.2	<i>L'expérience TRAPU</i>	89
3.2.3	<i>L'expérience DOUBLON</i>	91
3.3	Description géométrique et modélisation	94
3.3.1	<i>Hypothèses</i>	94
3.3.2	<i>Modélisation avec TRIPOLI-4®</i>	95
3.3.3	<i>Modélisation avec DARWIN3</i>	97
3.3.4	<i>Données nucléaires utilisées et cas testés</i>	100
	Pour l'expérience TRAPU	100

Pour l'expérience DOUBLON	101
3.4 Analyse des résultats de l'expérience TRAPU	102
3.4.1 <i>Provenance et voies de formation des isotopes analysés</i>	102
3.4.2 <i>Performances de DARWIN3 (comparaison à TRIPOLI-4®)</i>	104
3.4.2.1 Analyse des C/E sur les rapports isotopiques	105
3.4.2.2 Analyse comparative des spectres neutroniques de DARWIN3 et de TRIPOLI-4®	107
3.4.2.3 Analyse de la production du neptunium 237	109
3.4.2.4 Analyse de la production des américiums et curiums.....	110
3.4.2.5 Conclusion partielle	114
3.4.3 <i>Comparaison de DARWIN3 à DARWIN2</i>	115
3.4.3.1 Analyse des C/E des rapports isotopiques	115
3.4.3.2 Analyse comparative des spectres neutroniques.....	116
3.4.3.3 Analyse des américiums et des curiums	118
3.4.3.4 Conclusion partielle	123
3.4.4 <i>Impact de l'évolution du cœur</i>	124
3.4.5 <i>Impact de la chaîne de filiation</i>	126
3.4.6 <i>Impact de la bibliothèque de données nucléaires</i>	130
3.4.7 <i>Impact de la température</i>	133
3.4.8 <i>Conclusions concernant l'expérience TRAPU</i>	137
Conclusions partielles concernant DARWIN3.....	137
Conclusions partielles concernant les hypothèses et les modélisations	137
3.5 Analyse des résultats de l'expérience DOUBLON	139
3.5.1 <i>Complexité du calcul du niveau de flux dans la couverture fertile</i>	139
3.5.2 <i>Impact du plan de chargement avec TRIPOLI-4®</i>	141
3.5.2.1 Modélisation de la modification du plan de chargement dans l'environnement de l'assemblage FEG58	142
3.5.2.2 Impact du plan de chargement sur l'assemblage FEG58.....	143
3.5.2.3 Conclusion partielle	144
3.5.3 <i>Analyse du niveau de flux au cours de l'irradiation</i>	145
3.5.3.1 Présentation des résultats	145
3.5.3.2 Analyse du flux calculé avec APOLLO3®.....	147

3.5.3.3	Impact de la renormalisation en puissance	149
3.5.4	<i>Provenance et voies de formation des isotopes analysés</i>	152
3.5.5	<i>Comparaison entre TRIPOLI-4® et DARWIN3</i>	153
3.5.5.1	Analyse de la production du néodyme 148.....	153
3.5.5.2	Analyse des autres rapports isotopiques	154
3.5.5.3	Conclusion partielle	160
3.5.6	<i>Comparaison entre DARWIN3 et DARWIN2</i>	161
3.5.6.1	Analyse de la production du néodyme 148.....	161
3.5.6.2	Analyse comparative du spectre neutronique entre DARWIN2 et DARWIN3	162
3.5.6.3	Analyse de la section de l'uranium 238.....	164
3.5.6.4	Analyse de la production des autres isotopes	165
3.5.7	<i>Impact de la chaîne d'évolution</i>	167
3.5.8	<i>Impact de la bibliothèque de données nucléaires</i>	169
3.5.9	<i>Impact de la température</i>	173
3.5.10	<i>Conclusions concernant l'expérience DOUBLON</i>	177
3.6	Conclusions du chapitre 3 – Performances de DARWIN3 pour le calcul des Bilans-Matière	179
3.6.1	<i>Conclusions sur les hypothèses de modélisation</i>	179
3.6.2	<i>Conclusions concernant la performance de DARWIN3 dans le cœur interne (expérience TRAPU)</i>	180
3.6.3	<i>Conclusions concernant la performance de DARWIN3 dans la couverture fertile (expérience DOUBLON)</i>	181
3.6.4	<i>Problématiques soulevées et réponses apportées</i>	181
3.6.4.1	Problématiques spatiales	181
3.6.4.2	Problématiques temporelles	182
3.6.4.3	Problématiques méthodologiques	182
4.	Chapitre 4 : Analyse d'expériences de mesure de la Puissance Résiduelle	183
4.1	La puissance résiduelle	183
4.1.1	<i>Décomposition de la puissance résiduelle</i>	184
4.1.2.1	Fissions résiduelles.....	185
4.1.3.2	Les noyaux lourds (NL)	186

4.1.3.3 Les produits de fission (PF)	187
4.1.2 Les différentes expériences de mesures de la puissance résiduelle dans PHENIX et SUPERPHENIX et leurs interprétations.....	188
Les interprétations de PUIREX 2008.....	189
Choix de l'expérience réinterprétée avec DARWIN3.....	189
4.2 L'expérience de mesure de la puissance résiduelle de 1987 (SPX 87)	190
4.2.1 Le réacteur SUPERPHÉNIX.....	190
4.2.2 La mesure de la puissance résiduelle	191
4.2.3 Historique d'irradiation.....	194
4.2.4 Précédentes interprétations	194
4.4.2.1 Le code MECCYCO	194
4.4.2.2 L'interprétation de 1988.....	195
4.4.2.3 L'interprétation de 1996.....	195
4.3 Calcul de la puissance résiduelle avec DARWIN3	196
4.3.1 Modélisation du cœur Superphénix avec APOLLO3®.....	196
4.3.1.1 Etape réseau.....	196
4.3.1.2 Etape cœur.....	197
4.3.2 Description de l'historique d'irradiation	198
4.3.3 Propagation à la puissance résiduelle des incertitudes sur les données nucléaires 198	
4.3.4 Autres incertitudes de calcul.....	200
4.4 Analyse des résultats.....	201
4.5 Conclusions du chapitre 4 – Performances de DARWIN3 pour le calcul de la puissance résiduelle.....	204
Conclusions	204
Problématiques soulevées et réponses apportées	206
Problématiques spatiales	206
Problématiques temporelles	206
Problématiques méthodologiques	206
5. Chapitre 5 : Conclusions générales et Perspectives	208
5.1 Conclusions concernant la validation du calcul des bilans-matière	208

5.1.1	Validation des schémas de calculs : comparaison de DARWIN3 à TRIPOLI-4®	208
5.1.2	Amélioration des formulaires déterministes d'évolution : comparaison de DARWIN3 à DARWIN2.....	209
5.1.3	Validité des hypothèses utilisées	210
	Evolution des concentrations des aiguilles.....	210
	Plan de chargement constant	210
	Impact de la chaîne d'évolution	210
	Impact de la bibliothèque de données nucléaires	211
	Impact de la température	211
5.2	Conclusions concernant le calcul de la puissance résiduelle	211
5.3	Perspectives	213
Références.....		216
Annexes		223
	Annexe A : Rappels de physique	223
I.	Le noyau.....	223
II.	Radioactivité et stabilité.....	223
III.	Fission du noyau.....	224
IV.	Réactions nucléaires au sein d'un réacteur.....	225
V.	Notion de section efficace σ	227
VI.	Facteur de multiplication effectif et réactivité.....	228
	Annexe B : Calcul de propagation des incertitudes aux rapports isotopiques et aux rapports calcul / expérience (C/E).....	229
I.	Formule générale de propagation des incertitudes	229
II.	Cas des fonctions de type $f = a / b$	229
1)	Calcul exact des corrélations δab	230
2)	Calcul avec estimation des corrélations δab	230
3)	Calcul avec absence de corrélation	231
4)	Calcul enveloppe.....	231
III.	Cas des fonctions de type $f = Aa + Bb + Cc$	232
IV.	Calcul des incertitudes sur les rapports isotopiques et les C/E.....	232
1)	Calcul de l'incertitude du rapport isotopique.....	232

2)	Calcul de l'incertitude du C/E du rapport isotopiques.....	232
Annexe C : Description détaillée des modélisations avec TRIPOLI-4® et APOLLO3®		233
Annexe C.1 : Description détaillée de la modélisation avec TRIPOLI-4®		233
Annexe C.2 : Description détaillée de la modélisation avec DARWIN3.....		234
Etape de calcul « réseau »		234
Etape de calcul « cœur »		238
Historique d'irradiation et plans de chargement		240
Annexe D : Facteur de renormalisation / de recalage		241
Annexe E : C/E des rapports isotopiques de TRAPU		241
1)	Facteurs de recalage.....	241
2)	Valeurs des C/E.....	241
Annexe F : C/E des rapports isotopiques de DOUBLON		243
1)	Facteurs de recalage.....	243
2)	C/E du $^{148}\text{Nd} / ^{238}\text{U}$	243
3)	C/E des autres rapports isotopiques	243
Annexe G : Contribueurs à la puissance résiduelle		245
Annexe G.1 : Expérience PUIREX 2008, calculs DARWIN2		245
1)	Puissance résiduelle totale	245
2)	Puissance résiduelle due aux émissions α	246
3)	Puissance résiduelle due aux émissions β	247
4)	Puissance résiduelle due aux émissions γ	250
Annexe G.2 : Expérience SPX 87, calculs DARWIN3.....		253
Annexe H : Discussion sur les Sections efficaces représentées		254
I.	Sections efficaces multigroupes	254
II.	Impact des paramètres de modélisation sur la section efficace multigroupe du ^{240}Pu autour de 1eV (calcul cœur)	257
II.1	Impact de l'évolution sur la section efficace « effective » de capture du ^{240}Pu	258
II.2	Impact de la température sur la section efficace « effective » de capture du ^{240}Pu	259
II.3	Impact du milieu sur la section efficace « effective » de capture du ^{240}Pu	261

II.4	Impact de la bibliothèque de données nucléaires sur la section efficace de capture du ^{240}Pu	264
III.	<i>Sections efficaces et flux à 1760 groupes (calcul réseau)</i>	<i>267</i>

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 1 : Comparaison ERANOS2 / APOLLO3®	65
Tableau 2 : Impact de la prise en compte de l'ensemble des termes des sensibilités couplées Boltzmann-Bateman	82
Tableau 3 : Caractéristiques des formulaires d'évolution	86
Tableau 4 : Compositions du plutonium des aiguilles TRAPU	90
Tableau 5 : Techniques utilisées pour les différentes analyses (Benoit, 2012)	91
Tableau 6 : Hypothèses de modélisation TRIPOLI-4®	96
Tableau 7 : Hypothèses de modélisation APOLLO3®	98
Tableau 8 : Paramètres de calcul avec APOLLO3®	98
Tableau 9 : Données utilisées et nomenclature des cas DARWIN3 pour l'expérience TRAPU	101
Tableau 10 : Données utilisées et nomenclature des cas DARWIN3 pour l'expérience DOUBLON	101
Tableau 11 : Principales voies de formation des noyaux lourds analysés de TRAPU	103
Tableau 12 : Extrait du Tableau 9 pour l'analyse des performances de DARWIN3	104
Tableau 13 : Extrait du Tableau 11 : provenance de l'américium 241	106
Tableau 14 : Extrait du Tableau 11 : provenance de l'américium 242M	106
Tableau 15 : Extrait du Tableau 11 : provenance de l'américium 243	107
Tableau 16 : Extrait du Tableau 11 : provenance du curium 244	107
Tableau 17 : Extrait du Tableau 11 : provenance du curium 243	111
Tableau 18 : Extrait du Tableau 11 : provenance du curium 245	112
Tableau 19 : Extrait du Tableau 9 pour la comparaison DARWIN3 à DARWIN2	115
Tableau 20 : Extrait du Tableau 11 : provenance de l'américium 241	118
Tableau 21 : Extrait du Tableau 11 : provenance de l'américium 242M	119
Tableau 22 : Extrait du Tableau 11 : provenance de l'américium 242M	119
Tableau 23 : Extrait du Tableau 11 : provenance de l'américium 242M	119
Tableau 24 : Extrait du Tableau 11 : provenance du curium 244	120
Tableau 25 : Extrait du Tableau 11 : provenance du curium 245	120
Tableau 26 : Extrait du Tableau 11 : provenance du curium 243	121
Tableau 27 : Extrait du Tableau 9 pour l'impact de l'évolution du cœur	124
Tableau 28 : Extrait du Tableau 9 pour l'impact de la chaîne d'évolution	126
Tableau 29 : Ecart $C/C - 1$ entre les chaînes d'évolution REP et RNR	128
Tableau 30 : Extrait du Tableau 9 pour l'impact de la bibliothèque de données nucléaires	130
Tableau 31 : Extrait du Tableau 9 pour l'impact de la température	133

<i>Tableau 32 : Extrait du Tableau 10 – Impact du plan de chargement</i>	<i>142</i>
<i>Tableau 33 : Nomenclature des modélisations « FEF » et « FEG » pour l’analyse du flux</i>	<i>146</i>
<i>Tableau 34 : Test de renormalisation en puissance</i>	<i>149</i>
<i>Tableau 35 : Impact du flux considéré sur le C/E moyen.....</i>	<i>150</i>
<i>Tableau 36 : Impact du flux considéré sur le C/E par assemblage</i>	<i>151</i>
<i>Tableau 37 : Principales voies de formation des noyaux lourds analysés de DOUBLON.....</i>	<i>152</i>
<i>Tableau 38 : Extrait du Tableau 10 – Comparaison TRIPOLI-4® / DARWIN3.....</i>	<i>153</i>
<i>Tableau 39 : DOUBLON : Comparaison TRIPOLI-4® / DARWIN3 - Valeur des C/E du ^{148}Nd / ^{238}U.....</i>	<i>155</i>
<i>Tableau 40 : Ordre de grandeur des rapports isotopiques.....</i>	<i>157</i>
<i>Tableau 41 : Extrait du Tableau 10 pour la comparaison DARWIN3 à DARWIN2.....</i>	<i>161</i>
<i>Tableau 42 : Extrait du Tableau 10 pour l’impact de la chaîne d’évolution</i>	<i>167</i>
<i>Tableau 43 : Extrait du Tableau 10 pour l’impact de la bibliothèque de données nucléaires</i>	<i>169</i>
<i>Tableau 44 : Extrait du Tableau 10 pour l’impact de la température</i>	<i>173</i>
<i>Tableau 45 : Caractéristiques des réacteurs à neutrons rapides refroidis au sodium PHENIX et SUPERPHENIX</i>	<i>184</i>
<i>Tableau 46 : Interprétations des différentes expériences de mesure de la puissance résiduelle (Benoit, 2012)</i>	<i>188</i>

LISTE DES GRAPHIQUES

<i>Graphique 1 : Contributions à la puissance résiduelle alpha, beta et gamma (calculs DARWIN2, expérience PUIREX2008) en fonction du temps de refroidissement.....</i>	<i>37</i>
<i>Graphique 1 : Contributeurs à la puissance résiduelle α.....</i>	<i>38</i>
<i>Graphique 2 : Historique d'irradiation de l'expérience TRAPU.....</i>	<i>90</i>
<i>Graphique 3 : Historique d'irradiation de l'assemblage FEF79</i>	<i>92</i>
<i>Graphique 4 : Historique d'irradiation de l'assemblage FEG58</i>	<i>93</i>
<i>Graphique 5 : TRAPU : Comparaison TRIPOLI-4® et DARWIN3 (config. 1)</i>	<i>105</i>
<i>Graphique 6 : Analyse comparative des spectres neutroniques de DARWIN3 et TRIPOLI-4® - échelle linéaire ..</i>	<i>108</i>
<i>Graphique 7 : Analyse comparative des spectres neutroniques de DARWIN3 et TRIPOLI-4® - échelle logarithmique.....</i>	<i>108</i>
<i>Graphique 8 : Flux neutroniques et section (n, Xn) de ^{238}U – échelle linéaire</i>	<i>109</i>
<i>Graphique 9 : Flux neutronique et section (n, Xn) de ^{238}U – échelle logarithmique.....</i>	<i>110</i>
<i>Graphique 10 : Comparaison TRIPOLI-4® et DARWIN3 des américiums et curiums</i>	<i>111</i>
<i>Graphique 11 : Sections efficaces et flux neutronique – échelle linéaire</i>	<i>113</i>
<i>Graphique 12 : Sections efficaces et flux neutroniques – échelle logarithmique</i>	<i>114</i>
<i>Graphique 13 : TRAPU : Comparaison DARWIN2 et DARWIN3 (config. 6).....</i>	<i>116</i>
<i>Graphique 14 : Spectres neutroniques dans DARWIN2 et DARWIN3 (échelle logarithmique pour l'analyse à basse énergie)</i>	<i>117</i>
<i>Graphique 15 : Spectres neutroniques dans DARWIN2 et DARWIN3 (échelle linéaire pour l'analyse à haute énergie)</i>	<i>117</i>
<i>Graphique 16 : Comparaison DARWIN2 et DARWIN3 des américiums et curiums</i>	<i>118</i>
<i>Graphique 17 : Sections efficaces – échelle linéaire.....</i>	<i>121</i>
<i>Graphique 18 : Sections efficaces – échelle logarithmique</i>	<i>122</i>
<i>Graphique 19 : TRAPU : Impact de l'évolution du cœur</i>	<i>124</i>
<i>Graphique 20 : TRAPU : Impact de l'évolution du cœur – américiums et curiums.....</i>	<i>125</i>
<i>Graphique 21 : TRAPU : Impact de la chaîne de filiation.....</i>	<i>127</i>
<i>Graphique 22 : TRAPU : Impact de la chaîne de filiation – américiums et curiums</i>	<i>127</i>
<i>Graphique 23 : TRAPU : Impact de la bibliothèque de données nucléaires.....</i>	<i>130</i>
<i>Graphique 24 : TRAPU : Impact de la bibliothèque de données nucléaires – américiums et curiums.....</i>	<i>131</i>
<i>Graphique 25 : TRAPU : Impact de la température de modélisation</i>	<i>134</i>
<i>Graphique 26 : TRAPU : Impact de la température de modélisation – américiums et curiums</i>	<i>135</i>
<i>Graphique 27 : Comparaison du calcul à 20°C par rapport à celui à 1227°C</i>	<i>135</i>

Graphique 28 : Spectre neutronique dans DOUBLON (couverture fertile radiale) et dans TRAPU (fissile cœur interne) – Echelle logarithmique pour l'analyse à basse énergie	140
Graphique 29 : Spectre neutronique dans DOUBLON (couverture fertile radiale) et dans TRAPU (fissile cœur interne) – Echelle linéaire pour l'analyse à basse énergie	140
Graphique 30 : C/E du $^{148}\text{Nd} / ^{238}\text{U}$ pour l'assemblage FEG58, avec plan de chargement constant et évoluant	144
Graphique 31 : Rapport isotopique $^{148}\text{Nd} / ^{238}\text{U}$ pour l'assemblage FEG58	144
Graphique 32 : Distance de l'aiguille au centre du cœur (en cm) en fonction de sa position	147
Graphique 33 : Niveau de flux dans les couronnes d'assemblages du cœur avec APOLLO3®	148
Graphique 34 : Impact du flux considéré.....	150
Graphique 35 : DOUBLON : Comparaison TRIPOLI-4® / DARWIN3 - C/E du $^{148}\text{Nd} / ^{238}\text{U}$	154
Graphique 36 : Comparaison des C/E avec DARWIN3 après recalage et TRIPOLI-4® pour la 14 ^{ème} aiguille de la couverture fertile (dans FEG58) (les incertitudes sont données à 1σ).....	156
Graphique 37 : DOUBLON : Flux neutronique et sections efficaces de capture avec DARWIN3 – échelle linéaire	158
Graphique 38 : DOUBLON : Flux neutronique et sections efficaces de capture avec DARWIN3 – échelle logarithmique.....	159
Graphique 39 : DOUBLON : Comparaison du C/E du $^{148}\text{Nd} / ^{238}\text{U}$ DARWIN2 et DARWIN3.....	161
Graphique 40 : DOUBLON – Comparaison DARWIN2 / DARWIN3 – Spectre moyen dans la couverture fertile – Echelle logarithmique pour l'analyse à basse énergie	163
Graphique 41 : DOUBLON – Comparaison DARWIN2 / DARWIN3 – Spectre moyen dans la couverture fertile – Echelle linéaire pour l'analyse à basse énergie	163
Graphique 42 : Ecart DARWIN3 / DARWIN2 pour les sections de l'uranium 238.....	164
Graphique 43 : DOUBLON : Comparaison entre DARWIN2 et DARWIN3.....	166
Graphique 44 : DOUBLON : Impact de la chaîne sur le C/E du $^{148}\text{Nd} / ^{238}\text{U}$	167
Graphique 45 : DOUBLON : Impact de la chaîne sur le C/E des autres isotopes	168
Graphique 46 : DOUBLON : Impact de la bibliothèque de données nucléaires sur le C/E du $^{148}\text{Nd} / ^{238}\text{U}$	169
Graphique 47 : Impact de la bibliothèque de données nucléaires sur les autres isotopes	170
Graphique 48 : DOUBLON : Impact de la bibliothèque de données nucléaires sur le flux neutronique et les sections efficaces – échelle logarithmique	171
Graphique 49 : DOUBLON : Impact de la bibliothèque de données nucléaires sur le flux neutronique et les sections efficaces – échelle linéaire.....	172
Graphique 50 : DOUBLON : Impact de la température sur le C/E du $^{148}\text{Nd} / ^{238}\text{U}$	173
Graphique 51 : DOUBLON : Impact de la température sur les autres isotopes.....	174
Graphique 52 : DOUBLON : Impact de la température sur le flux neutronique et les sections efficaces – échelle linéaire	175
Graphique 53 : DOUBLON : Impact de la température sur le flux neutronique et les sections efficaces – échelle logarithmique.....	176
Graphique 54 : Historique d'irradiation de SPX 87.....	194

<i>Graphique 55 : Historique d'irradiation de Superphénix, historique simplifié en 7 pas</i>	<i>198</i>
<i>Graphique 56 : Contributions à l'incertitude en fonction du temps de refroidissement</i>	<i>200</i>
<i>Graphique 57 : C/E-1 entre la valeur calculée avec DARWIN3 et la valeur expérimentale (les incertitudes sont données à 1σ)</i>	<i>201</i>
<i>Graphique 58 : Puissance résiduelle (les incertitudes sont données à 1σ) (La flèche représente le début de l'expérience de mesure de la puissance résiduelle, 3 heures après l'arrêt du 26 mai 1987)</i>	<i>202</i>
<i>Graphique 59 : Milieux contributeurs à la puissance résiduelle (avec DARWIN3)</i>	<i>203</i>

LISTE DES FIGURES

<i>Figure 1 : Evolution des concepts de réacteurs nucléaires (Huy, 2018).....</i>	<i>32</i>
<i>Figure 2 : Représentation schématique du cœur ASTRID CFV (Huy, 2018)</i>	<i>34</i>
<i>Figure 3 : Comparaison des CFE du ²³⁹Pu issues de DARWIN2 à l'expérience (Lebrat, 2018).....</i>	<i>41</i>
<i>Figure 4 : Formation et disparition du noyau i sous irradiation</i>	<i>47</i>
<i>Figure 5 : Formation et disparition du noyau i en refroidissement</i>	<i>49</i>
<i>Figure 6 : Schéma de calcul dans une approche déterministe (Garcia-Cervantes, 2019).....</i>	<i>53</i>
<i>Figure 7 : Chaînes de décroissance radioactive simplifiées</i>	<i>55</i>
<i>Figure 8 : Exemple de calcul réseau sur une cellule combustible ou sur un cluster fissile / structure</i>	<i>61</i>
<i>Figure 9 : exemple de modélisation homogène pour le calcul cœur (ici Superphénix).....</i>	<i>61</i>
<i>Figure 10 : Fonctionnement de DARWIN3.....</i>	<i>63</i>
<i>Figure 11 : Schéma du biais de calcul et de l'incertitude de calcul.....</i>	<i>67</i>
<i>Figure 12 : Couplage Boltzmann-Bateman</i>	<i>71</i>
<i>Figure 13 : Calcul des incertitudes par sensibilité directe.....</i>	<i>73</i>
<i>Figure 14 : Propagation statistique des incertitudes.....</i>	<i>75</i>
<i>Figure 15 : Principe d'un méta-modèle</i>	<i>76</i>
<i>Figure 16 : Evolutions directe et adjointe.....</i>	<i>80</i>
<i>Figure 17 : Sensibilités couplées Boltzmann-Bateman.....</i>	<i>81</i>
<i>Figure 18 : Le bloc réacteur de Phénix (Image, 3)</i>	<i>87</i>
<i>Figure 19 : Schéma du cœur Phénix (au cycle 20) : coupe radiale.....</i>	<i>88</i>
<i>Figure 20 : Position des aiguilles analysées de l'expérience TRAPU dans l'assemblage 18-20</i>	<i>89</i>
<i>Figure 21 : Schéma des positions des aiguilles analysées dans DOUBLON</i>	<i>92</i>
<i>Figure 22 : Modélisation semi-hétérogène de PHENIX avec TRIPOLI-4®.....</i>	<i>95</i>
<i>Figure 23: Position des assemblages TRAPU et DOUBLON dans le réacteur PHENIX.....</i>	<i>96</i>
<i>Figure 24 : Modélisation semi-hétérogène avec APOLLO3®</i>	<i>97</i>
<i>Figure 25 : Modélisation des assemblages d'intérêt lors de l'étape cœur (TRAPU, FEF79, FEG58)</i>	<i>97</i>
<i>Figure 26 : Les positions 25-14 et 26-15 auxquelles ont lieu des changements d'assemblages durant l'expérience DOUBLON</i>	<i>141</i>
<i>Figure 27 : Géométrie sans prise en compte des modifications du plan de chargement</i>	<i>142</i>
<i>Figure 28 : Géométries avec prise en compte des changements aux positions 25-14 et 26-15.</i>	<i>143</i>
<i>Figure 29 : Assemblages FEF58 et FEF79 en cœur pour l'expérience DOUBLON.....</i>	<i>145</i>
<i>Figure 30 : Position des assemblages FEF79 et FEG58 dans le cœur et alignement des aiguilles</i>	<i>146</i>
<i>Figure 31 : Evolution de la Puissance Résiduelle en fonction du temps de refroidissement.....</i>	<i>183</i>

<i>Figure 32 : Contributeurs à la puissance résiduelle dans un RNR en fonction du temps (Lebrat, 2018). Pour chaque temps, la somme des contributions vaut 100%.....</i>	<i>185</i>
<i>Figure 33 : Différentes contribution à la puissance résiduelle calculées pour un REP (Benoit, 2012)</i>	<i>186</i>
<i>Figure 34 : C/E de la puissance résiduelle calculée pour PUIREX 2008 (Lebrat, 2018)</i>	<i>189</i>
<i>Figure 35 : Le circuit primaire de Superphénix (Gourdon, 1990).....</i>	<i>190</i>
<i>Figure 36: Cœur de Superphénix – assemblages fissiles et fertiles (Garcia, 2019).....</i>	<i>191</i>
<i>Figure 37: Systèmes d’évacuation de la chaleur (Gillet, 1990).....</i>	<i>192</i>
<i>Figure 38: Température du sodium dans Superphénix pendant la mesure de la puissance résiduelle (Gillet, 1990)</i>	<i>192</i>
<i>Figure 39 : Valeur expérimentales de la mesure de la puissance résiduelle et moyenne mobile (Gillet, 1990) ..</i>	<i>193</i>
<i>Figure 40 : Géométries pour la génération des sections efficaces (Garcia, 2019)</i>	<i>197</i>
<i>Figure 41 : Modélisation de Superphénix.....</i>	<i>197</i>

LISTE DES EQUATIONS

Équation 1 : Calcul de la courbe de fission élémentaire	39
Équation 2 : Calcul de la puissance résiduelle grâce aux CFE.....	39
Équation 3 : Flux.....	45
Équation 4 : Flux.....	45
Équation 5 : Population neutronique	45
Équation 6 : Equation de Boltzmann	46
Équation 7 : Equations de Bateman sous irradiation	48
Équation 8 : Equations de Bateman en refroidissement	49
Équation 9 : Erreur de calcul	67
Équation 10 : Erreur de mesure.....	68
Équation 11 : Paramètre perturbée	72
Équation 12 : Réponse perturbée.....	72
Équation 13 : Sensibilité directe	72
Équation 14 : Incertitude.....	72
Équation 15 : Sensibilité en évolution.....	77
Équation 16 : Terme de Boltzmann	78
Équation 17 : Equation de Bateman directe.....	78
Équation 18 : Equation de Bateman adjointe	78
Équation 19 : Concentration adjointe initiale.....	78
Équation 20 : Opérateur de Boltzmann direct.....	79
Équation 21 : Opérateur de Boltzmann adjoint	79
Équation 22 : Equation de Boltzmann directe.....	79
Équation 23 : Equation de Boltzmann adjointe.....	79
Équation 24 : Contrainte de renormalisation à la puissance.....	80
Équation 25 : Calcul de la Puissance Résiduelle	83
Équation 26 : Relation entre le taux de réaction et le flux	85
Équation 27 : Taux de réaction.....	105
Équation 28 : Flux à l'instant i factorisé sous la forme $\text{forme} \times \text{amplitude}$	149
Équation 29 : Flux à l'instant i factorisé sous la forme $\text{forme initiale} \times \text{amplitude}$	149
Équation 30 : Production des isotopes 240, 241 et 242 du plutonium	156
Équation 31 : Normalisation du flux.....	162

<i>Équation 32 : Calcul de la puissance résiduelle par méthode calorimétrique</i>	<i>192</i>
<i>Équation 33 : Sensibilité de la puissance résiduelle.....</i>	<i>199</i>
<i>Équation 34 : Calcul des incertitudes via les matrices.....</i>	<i>199</i>
<i>Équation 35 : Incertitude totale de la puissance résiduelle.....</i>	<i>199</i>

GLOSSAIRE

CFE	Courbe de Fission Élémentaire
JEPN / JEPP	Jour Equivalent Puissance Nominale / Jour Equivalent Pleine Puissance
OCS	Outil de Calcul Scientifique
REP	Réacteur à Eau Pressurisée
RNR	Réacteur à Neutron Rapide
RNR-Na	Réacteur à Neutron Rapide refroidis au sodium
SFR	Sodium-cooled Fast Reactor (= RNR-Na)
VVQI	Vérification, Validation, Quantification de l'Incertitude

1. CHAPITRE 1 : INTRODUCTION

1.1 ÉLÉMENTS DE CONTEXTE ET OBJECTIFS

Au cours de cette thèse, nous étudions la puissance résiduelle dans les réacteurs à neutrons rapides refroidis au sodium. La puissance résiduelle est la « puissance thermique émise par un réacteur à l'arrêt, provenant essentiellement de la radioactivité du combustible irradié et des autres matériaux, mais aussi des fissions résiduelles » (*ASN, définition*). Pour des raisons de sûreté, il apparaît comme essentiel de connaître précisément sa valeur dans le temps et ce quelles que soient les conditions d'irradiation (historique, compositions, plans de chargement...).

Cet intérêt pour la puissance résiduelle résulte de plusieurs éléments contextuels.

1.1.1 Le retour d'expérience de l'accident de Fukushima... des exigences de sûreté plus strictes

Le retour d'expérience suite à l'accident nucléaire de Fukushima, qui a eu lieu en mars 2011, montre qu'il est nécessaire de pouvoir évacuer correctement la puissance résiduelle. En effet, l'initiateur principal de cet accident de fusion des cœurs est dû à une défaillance des systèmes de secours permettant l'évacuation de la puissance résiduelle.

La détection des premières secousses du séisme a provoqué l'arrêt automatique de la centrale par insertion automatique des grappes de commande dans les cœurs de réacteurs. Cependant, le séisme engendre en parallèle la destruction de plusieurs lignes d'alimentation électriques externes. La centrale dépend alors de ses groupes électrogènes internes de secours à moteur diesel pour faire fonctionner les pompes de refroidissement.

Le tsunami qui s'en est suivi a inondé la centrale. La centrale avait en effet été conçue pour résister à un séisme de magnitude 8 et à un tsunami de 5,7 mètres de haute, or la première vague

du tsunami, d'une hauteur de 15 mètres, a pu atteindre la centrale. Ceci a entraîné la perte de la source froide¹ et des moteurs diesels.

A la suite de la perte du système de refroidissement par perte de la source froide, le niveau d'eau dans la cuve du réacteur a diminué, et sa température a fortement augmenté, ce qui a entraîné une dégradation du combustible avec relâchement des produits de fission dans le circuit primaire lorsque les gaines du combustible ont commencé à se déformer puis se rompre. Certains éléments de la gaine ont réagi avec la vapeur d'eau, entraînant des dégagements gazeux et une augmentation de la température. Le combustible n'étant plus refroidi, il a atteint sa température de fusion pour former du **corium**, un mélange en fusion de combustible, de gaines et d'éléments de structures (aciers).

Le corium a alors pu s'échapper de la cuve par fusion ou par corrosion, entraînant de ce fait d'importants rejets radioactifs dans l'environnement.

On comprend donc nettement l'intérêt de s'assurer de l'évacuation de la puissance résiduelle pour assurer la sûreté des installations. Cet accident nucléaire a en effet permis de mettre en évidence la vulnérabilité de certains réacteurs japonais, notamment ceux exposés aux séismes, insuffisamment préparés à de tels scénarii. Au-delà du Japon, cet accident a aussi remis en question la politique énergétique de certains pays, en plus de la méfiance croissante de la part des populations à l'égard du nucléaire. L'Union Européenne prend la décision de tester la sûreté des réacteurs pour chaque centrale européenne afin de réévaluer les risques et durcir les normes de sécurité si nécessaire. En France, c'est l'ASN – Autorité de Sûreté Nucléaire – qui a pour mission d'auditer le parc nucléaire. Après cet accident, le dispositif de sûreté nucléaire, la radioprotection, la gestion de crise et des situations post-accidentelles se voient renforcés par l'ouverture de nouveaux postes répartis au sein de l'ASN mais aussi de l'IRSN – Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire.

Ainsi, les directives de l'ASN étant de plus en plus strictes, il est nécessaire pour les industriels de s'assurer de la bonne connaissance des incertitudes sur les données du cycle du combustible, notamment sur la puissance résiduelle. Pour cela, il leur est demandé de démontrer, auprès des organismes compétents, de la sûreté de leurs installations, existantes et en projet. Il est ainsi essentiel de :

- renforcer les dossiers de sûreté des centrales,
- dimensionner (ou redimensionner) de façon conforme aux exigences les systèmes d'évacuation de la chaleur (donc de la puissance résiduelle) que ce soit dans le cœur mais aussi en transport ou lors du stockage,
- évaluer (ou réévaluer) les temps de refroidissement nécessaires avant interventions, que ce soit le rechargement des assemblages dans le cœur, ou des opérations de maintenance afin d'assurer la radioprotection des travailleurs.

Ainsi, pour répondre aux exigences des autorités compétentes, la **sûreté** des installations et la **radioprotection** des professionnels intervenant sur celles-ci font partie des enjeux majeurs qui

¹ Selon l'ASN, « la source froide est composée de l'ensemble des équipements et des circuits permettant de prélever l'eau en mer ou dans un cours d'eau pour contribuer au refroidissement des installations et leur maintien en état sûr, en situation de fonctionnement normal comme en situation incidentelle et accidentelle » (ASN, référence 2)

justifient pour les industriels de maîtriser le calcul de la puissance résiduelle et de son incertitude. Cela leur permet, en parallèle, d'**optimiser les coûts** en adaptant au mieux les marges de sécurité, actuellement maximisées et impactant de façon non négligeable ceux-ci.

1.1.2 Le développement de la IVème génération de réacteurs

Afin de répondre à la fois aux besoins énergétiques à venir et aux impératifs écologiques de production d'énergie sans génération de gaz à effet de serre, la filière nucléaire semble proposer des solutions intéressantes. Cependant, comme nous l'avons vu, elle nécessite de se conformer aux normes de sûreté exigeantes et cela tout en gérant l'approvisionnement des matières premières et le recyclage de ses déchets.

En 2000, le Forum International Génération IV (GIF) est né de la volonté de créer un cadre de recherche international sur le nucléaire du futur et de faire émerger des technologies performantes.

En 2002, six technologies sont retenues, parmi elles, trois sont des **réacteurs à neutrons rapides** (RNR). On retrouve ainsi les réacteurs à neutrons rapides **refroidis au sodium** (*SFR Sodium-cooled Fast Reactor*), mais aussi les réacteurs à neutrons rapides refroidis au **gaz** (*GFR Gas-cooled Fast Reactor*) et au **plomb** (*LFR Lead-cooled Fast Reactor*).

L'évolution des concepts de réacteurs nucléaires est synthétisée dans la figure ci-dessous (Figure 1).

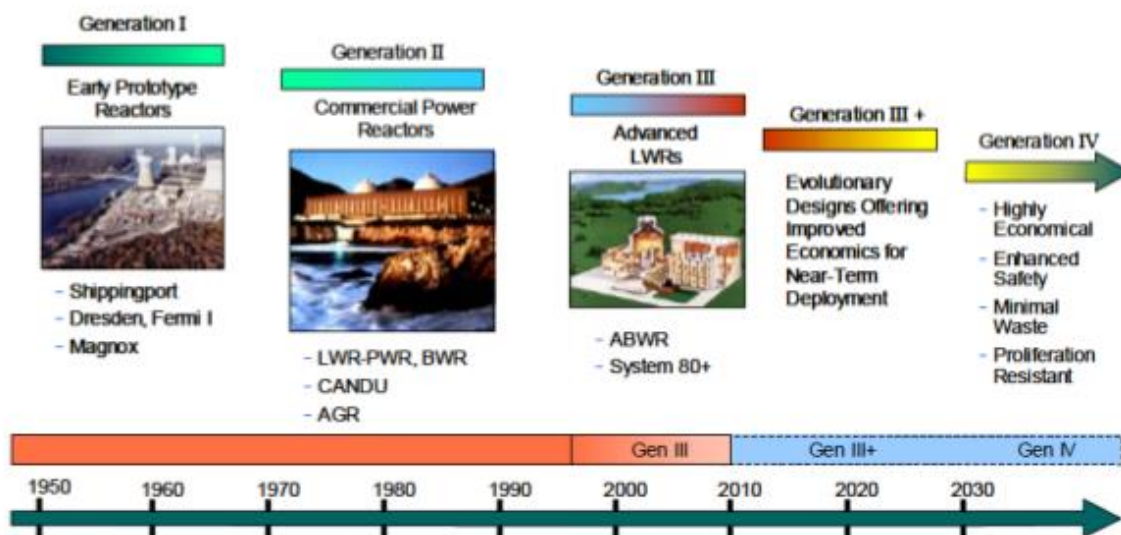


Figure 1 : Evolution des concepts de réacteurs nucléaires (Huy, 2018)

Les **réacteurs de quatrième génération à neutrons rapides** et refroidis au sodium présentent des avantages indéniables.

- Ils permettent de **recycler le plutonium** actuellement produit par le parc nucléaire actuel composé de réacteurs à eau légère (REL), mais aussi par les réacteurs à neutrons rapides eux-mêmes. Ceci permet d'assurer une gestion pérenne du plutonium qui se retrouve ainsi valorisé en tant que matière énergétique. En effet, du fait de la population neutronique très importante, des fissions sont induites dans le matériau fissile (composé de plutonium 239), mais il y a également une conversion du combustible fertile, l'uranium 238, en plutonium 239. Ceci permet une iso-génération voire une surgénération, c'est-à-dire que l'on crée autant, voire davantage, de matière combustible que ce qui est consommé.
- Ils permettent également la **transmutation des actinides mineurs**, c'est-à-dire qu'ils transforment ces déchets hautement radioactifs à vie longue en éléments radioactifs à vie plus courte, ce qui réduit à long terme les émissions de chaleur et la radiotoxicité des déchets ultimes.
- Enfin, ils sont **durables et économes en uranium**, car ils peuvent consommer tout type d'uranium, contrairement aux réacteurs à eau légère composant actuellement le parc nucléaire français, qui eux ne peuvent brûler que de l'uranium 235, largement minoritaire.

Le caloporteur utilisé dans les RNR français est le **sodium liquide**. Il présente également de nombreux avantages : il ne **ralentit pas les neutrons**, ce qui est indispensable pour avoir un réacteur à neutrons rapides, tout en étant doté de **propriétés thermiques de dissipation de la chaleur** importantes. Il présente l'avantage d'avoir un point de fusion assez bas et un point d'ébullition assez haut, permettant de maintenir l'état liquide du sodium.

De plus, il est **faiblement activé** par le flux neutronique ce qui limite la production de déchets radioactifs, et il est **peu corrosif**, le rendant compatible avec les aciers.

En revanche, il est opaque, rendant les opérations de maintenance parfois délicates, et il réagit fortement avec l'oxygène de l'air et l'eau, ce qui nécessite de prendre quelques précautions particulières.

Dans le cadre de la loi relative aux recherches sur la gestion des déchets radioactifs de 1991 (et renouvelée en 2006) (*Légifrance, Loi 91-1381*), les recherches s'organisent autour de trois axes : la séparation et la transmutation, le stockage géologique et l'entreposage de longue durée. Le CEA (Commissariat à l'Energie Atomique et aux Energies Alternatives) est alors chargé d'étudier la transmutation des éléments radioactifs à vie longue contenus dans les déchets nucléaires. Ces recherches sont menées en synergies avec menées sur les réacteurs nucléaires de quatrième génération, capables de réaliser les transmutations.

En se fondant sur les connaissances accumulées sur les réacteurs à neutrons rapides, le projet ASTRID (« Advanced Sodium Technological Reactor for Industrial Demonstration ») voit le jour en 2010 afin de remplir ces obligations légales. Il permet de développer les technologies pour s'aligner aux objectifs de la quatrième génération.

En effet, les règles de sûreté ont changé depuis l'arrêt du réacteur SUPERPHENIX. Les challenges du projet ASTRID sont ainsi :

- De prouver que les réacteurs rapides ont une sûreté équivalente ou améliorée par rapport aux réacteurs à eau pressurisée (REP).
- Démontrer que les réacteurs à neutrons rapides sont économiquement compétitifs.
- De construire un prototype avant le déploiement industriel.

Ainsi, le projet ASTRID est un prototype de réacteur de 4^{ème} génération d'une puissance de 1500MWth, avec une production de 600MWe, largement étudié au sein du CEA. Cette puissance assure la représentativité nécessaire au déploiement industriel des concepts de réacteurs à neutrons rapides. Sa conception de base (Figure 2) doit minimiser le risque d'accident grave notamment la perte de caloporteur sodium.

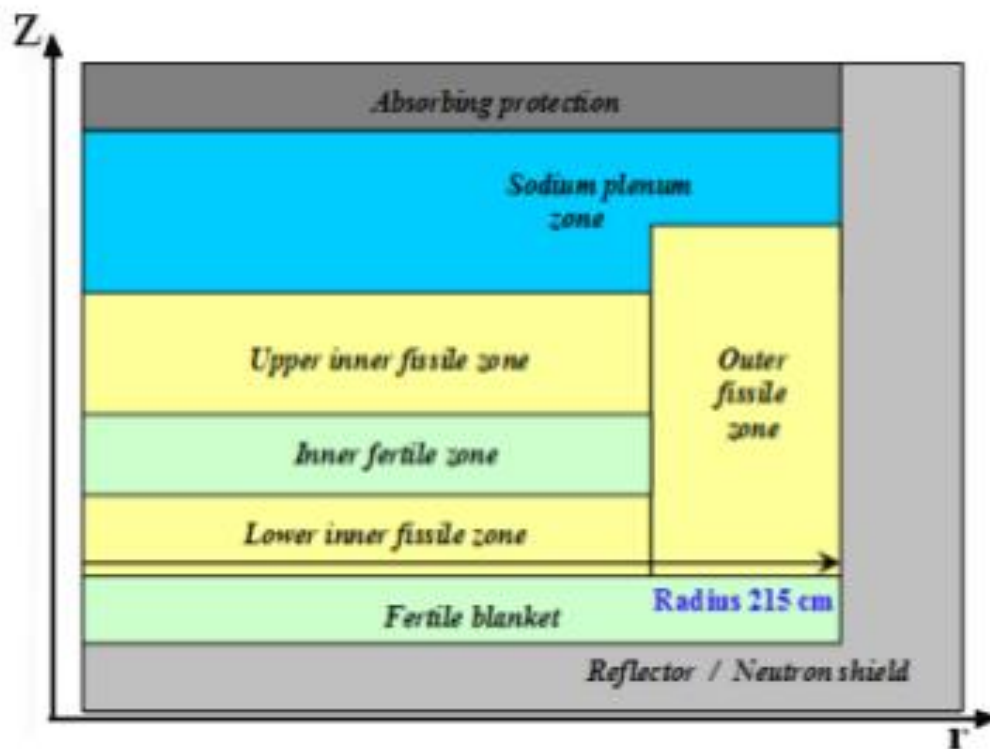


Figure 2 : Représentation schématique du cœur ASTRID CFV (Huy, 2018)

Ainsi, le concept de cœur ASTRID CFV (Cœur à Faible Vidange) est choisi. Il permet de favoriser les fuites de neutrons en situation de perte de caloporteur sodium. Cependant, les choix de design donnent lieu à une géométrie complexe avec de nombreuses hétérogénéités, qui représentent un challenge pour les codes neutroniques. De plus, la stabilité du cœur s'en trouve affectée, avec une sensibilité accrue de la nappe de puissance à des perturbations locales ou globales (Maillot, 2016).

1.1.3 Le développement continu des outils de calculs et la nécessité du processus de VVQI

Afin de s'assurer de la performance des outils de calculs scientifiques (OCS) et de leur capacité à prédire la valeur des grandeurs d'intérêt, ceux-ci doivent subir un processus de VVQI : Validation, Vérification, Qualification et Quantification de l'Incertitude.

1.1.3.1 Le processus de VVQI

« La démarche de **vérification**, **validation** et **qualification** (VVQ) d'un outil de calcul scientifique est le processus consistant à évaluer sa capacité à prédire les valeurs des grandeurs physiques d'intérêt [...].

Elle vise en particulier à aboutir à la **quantification des incertitudes** (I) et à la **maîtrise des biais de calcul** associés aux grandeurs utilisées et/ou obtenues dans les études réalisées avec cet outil. » (*Monographie DEN*).

Ce sont des étapes qui sont indispensables pour que les outils de calcul puissent être utilisés par la suite par les industriels. Il faut démontrer leur performance, leur qualité, s'assurer de la confiance qu'on peut leur accorder, pour que les industriels puissent par la suite démontrer la sûreté de leurs projets et installations à l'aide de ces outils qualifiés auprès de l'ASN et de l'IRSN.

La vérification

L'étape de vérification consiste à s'assurer que les équations des modèles physiques utilisés dans l'OCS sont résolues de façon correcte d'un point de vue mathématique, numérique et informatique. C'est l'étape dans laquelle on définit un domaine de pertinence. Elle peut se faire par confrontation avec un cas résolu de façon analytique ou par confrontation avec un outil précédemment vérifié et validé.

La validation

L'étape de validation permet de s'assurer que les résultats de la simulation numérique permettent de reproduire l'expérience. C'est l'étape dans laquelle on définit l'étendue du domaine de validité. Elle se fait par confrontation avec l'expérience (validation expérimentale) ou à un code de référence (validation numérique), au regard de la qualité des données d'entrée utilisées.

La qualification et la quantification des incertitudes

L'étape de qualification et de quantification des incertitudes consiste à s'assurer que l'outil de calcul et les données d'entrée associées sont adéquates pour une utilisation dans le domaine de validité préalablement défini avec des incertitudes maîtrisées.

1.1.3.2 Le développement des formulaires de calcul, de nouvelles possibilités de modélisation

Le **formulaire de calcul** se définit comme un ensemble regroupant un ou plusieurs codes de calculs avec des méthodes et modèles définis, des données nucléaires d'entrée associées (sections efficace multigroupes, constantes de décroissance, énergies, ...), des incertitudes et des covariances pour une utilisation donnée.

L'augmentation continue des moyens de calculs disponibles mais aussi l'amélioration des méthodes de résolution numérique permettent le développement de nouveaux codes de calculs, qui se veulent toujours plus performants, plus rapides et plus précis. Les bibliothèques de données nucléaires sont elles aussi régulièrement enrichies, complétées ou modifiées grâce aux apports des connaissances nouvelles.

Cependant, tout nouvel outil doit subir un processus de VVQI. L'objectif de la qualification des formulaires est, pour un concept donné, de fournir un ensemble de bibliothèques de données nucléaires, de codes de calculs, de choix de modèles dans le code, de définition des enchaînements de calcul, ainsi qu'une évaluation des incertitudes sur les résultats du calcul. Afin de s'assurer de sa performance ou de son exactitude, le formulaire est testé par comparaison à d'autres formulaires de calcul ayant déjà subi un processus de VVQI (validation numérique), ou à des valeurs expérimentales (validation expérimentale).

Le formulaire déterministe² de calcul **DARWIN3-RNR** est actuellement en développement, et a pour ambition d'être un nouvel outil de calcul de la puissance résiduelle dans les réacteurs à neutrons rapides. Il offre, en effet, des possibilités de modélisation plus poussées, avec pour objectif de diminuer les biais et les incertitudes sur le calcul de la puissance résiduelle³. Cependant, la qualification de ce formulaire pour le calcul de la puissance résiduelle est indispensable.

1.1.3.3 Les retours d'expériences

La comparaison avec des résultats de mesures permet l'étape de validation expérimentale, ainsi l'interprétation (ou la réinterprétation) d'expériences vont partie intégrante du processus de VVQI.

Pour valider le calcul de la puissance résiduelle, un certain nombre d'expériences peuvent se montrer intéressantes : on retrouve ainsi les expériences en réacteurs par la mesure de la puissance résiduelle, ou encore l'analyse des bilans matière. Certaines expériences participent

² Cf. §1.3.1

³ Cf. §1.4

de façon complémentaire à la validation des calculs de puissance résiduelle, c'est le cas des courbes de fission élémentaire.

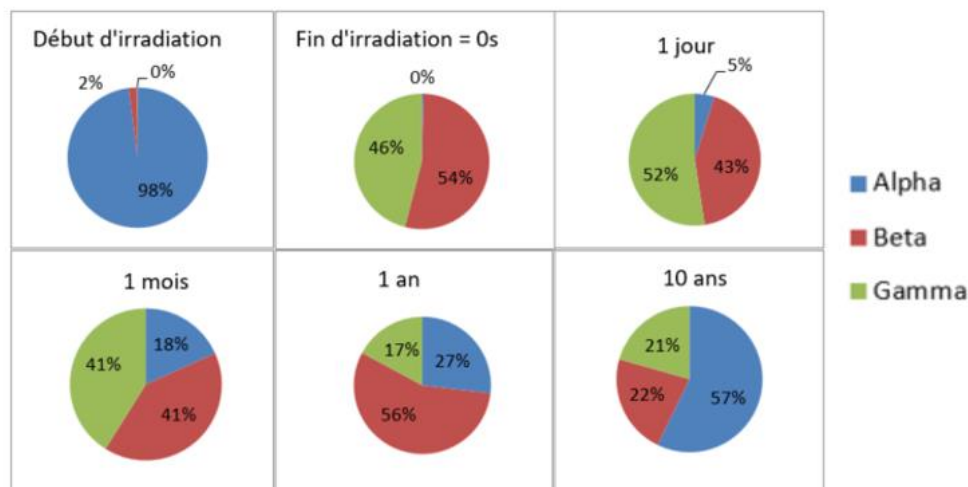
Les retours d'expérience en réacteurs

Afin de mener à bien ce processus de VVQI pour le formulaire **DARWIN3-RNR** pour le calcul de la puissance résiduelle dans les RNR-Na, nous disposons d'un certain nombre d'expériences en réacteur et qui ont été précédemment interprétées avec des codes déjà vérifiés, validés et qualifiés.

La puissance résiduelle provient, de sa définition, de la radioactivité du combustible irradié, de l'activation du caloporteur et des structures soumises aux flux neutronique, ainsi que des fissions résiduelles aux temps courts (qui ne seront pas étudiées dans cette thèse, nous y reviendrons en partie §4).

Ainsi, un nombre important d'isotopes, qui constituent notamment le **combustible irradié**, contribuent à la puissance résiduelle : parmi eux des **noyaux lourds** ainsi que des **produits de fission**. Ces produits de fission, comme leur nom l'indique, sont issus de la fission des noyaux lourds.

Aux temps courts, les produits de fission sont majoritaires, et contribuent notamment à la puissance résiduelle β et γ . Aux temps longs, ce sont plutôt les noyaux lourds qui contribuent majoritairement, par leurs émissions α (Graphique 1).



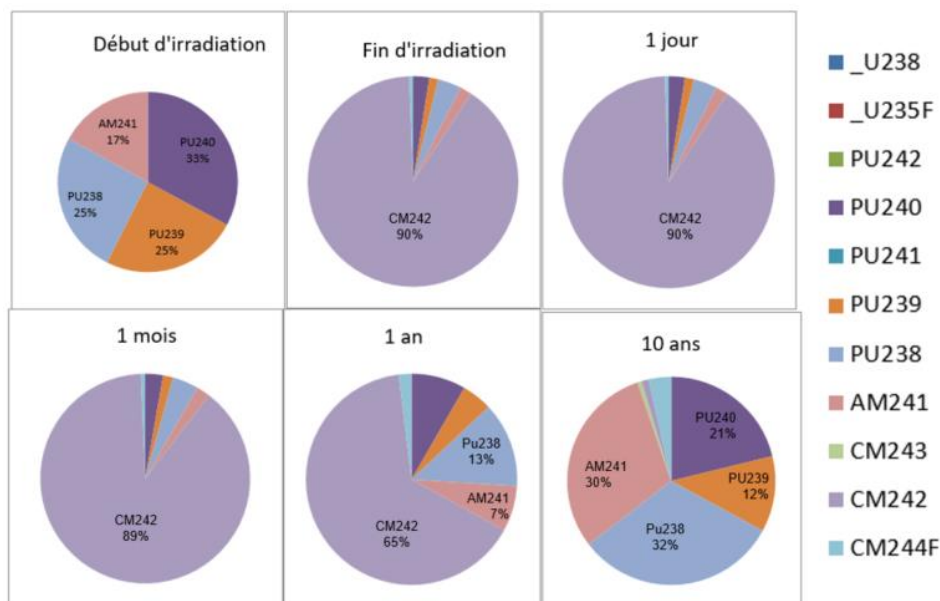
Graphique 1 : Contributions à la puissance résiduelle alpha, beta et gamma (calculs DARWIN2, expérience PUIREX2008) en fonction du temps de refroidissement

De plus, l'analyse des bilans matières est réalisée plusieurs centaines de jours après la fin de l'expérience, afin de permettre de refroidissement des assemblages (en dehors d'assemblages instrumentés qui pourraient permettre leur analyse en temps réel).

Ainsi, un grand nombre de produits de fissions ont disparu et ne peuvent donc pas être analysés. L'analyse des noyaux lourds semble ainsi indispensable pour permettre de valider le bilan matière et participer à la validation des calculs de puissance résiduelle.

Parmi ces noyaux lourds, nous nous intéressons particulièrement à ceux qui sont majoritaires dans les calculs de la puissance résiduelle. C'est ainsi le cas des isotopes de l'uranium et du

plutonium (« actinides majeurs ») ainsi que des isotopes de l'américium et du curium (« actinides mineurs ») (Graphique 2).



Graphique 2 : Contributeurs à la puissance résiduelle α

D'autres noyaux lourds participent à la puissance résiduelle : c'est le cas du neptunium 239, qui est responsable d'environ 30% de la puissance résiduelle β à 1 jour, et d'environ 16% de la puissance résiduelle γ à 1 jour. Cependant, autour d'un mois, sa contribution devient très faible. Comme pour les produits de fission, ce noyau lourd n'est donc pas analysé dans les expériences d'irradiation de combustible.

LES EXPERIENCES DE MESURE DE LA PUISSANCE RESIDUELLE

Parmi ces expériences, on retrouve de façon évidente des expériences de mesure de la puissance résiduelle. Il y en a eu plusieurs dans les réacteurs PHENIX et SUPERPHÉNIX. Généralement complexes à modéliser et impliquant de nombreux paramètres, elles permettent de valider – ou non – le calcul de la puissance résiduelle de façon globale. Cependant elles ne permettent pas de s'affranchir aisément des biais et incertitudes des paramètres qui influencent le calcul de la puissance résiduelle, comme les bilans matières, les sections efficaces, etc.

Ainsi, lors de l'interprétation d'une expérience de mesure de la puissance résiduelle, il n'est pas aisé de connaître la part des biais et des incertitudes liées aux outils de calcul, aux données d'entrée, aux bilans matières...

LES EXPERIENCES DE MESURE DES BILANS MATIERE / EXPERIENCES D'IRRADIATION DE COMBUSTIBLES

On retrouve également des expériences d'irradiation, permettant l'obtention des bilans matières, donnée indispensable au calcul de la puissance. C'est le cas des expériences TRAPU et DOUBLON qui ont eu lieu dans le réacteur PHENIX. Plus simples à modéliser que les expériences de mesures de la puissance résiduelle, elles vont nous permettre d'accéder plus

aisément aux biais et incertitudes liées au calcul des bilans matières et qui viennent se répercuter sur le calcul de la puissance résiduelle.

Les courbes de fission élémentaire (CFE)

Les courbes de fission élémentaire (CFE) représentent **la puissance résiduelle émise par la fission d'un seul noyau**, que l'on exprime en **MeV.s⁻¹.fission⁻¹**. Cependant, pour des raisons de lisibilité, on représente en réalité plutôt le produit de la puissance résiduelle et du temps de refroidissement, en **MeV/fission**.

GENERALITES SUR LES CFE (BENOIT, 2012)

Ces CFE sont obtenues par des mesures spectrométriques (β ou γ) ou des mesures calorimétriques. Pour ces deux types de mesure, des échantillons quasiment purs sont irradiés dans des réacteurs, puis transférés pour effectuer des mesures. Grâce aux mesures, on peut déduire la puissance résiduelle totale de l'échantillon, puis, grâce aux mesures du taux de fission, on peut calculer la courbe de fission élémentaire par déconvolution (Équation 1) :

$$PR(T_{ref}, T_{irrad}) = \tau_f \times \int_{T_{ref}}^{T_{irrad}+T_{ref}} f(t) dt$$

Équation 1 : Calcul de la courbe de fission élémentaire

Avec :

- T_{ref} le temps de refroidissement et T_{irrad} la durée de l'irradiation, qui ont la même origine $t = 0$ et qui correspond au début du palier d'irradiation,
- $f(t)$ la courbe de fission élémentaire,
- $PR(T_{ref}, T_{irrad})$ la puissance résiduelle mesurée au cours du refroidissement T_{ref} précédée de de l'irradiation T_{irrad} ,
- τ_f le taux de fission du noyau lourd étudié.

Les CFE sont lissées par des sommes de lois exponentielles afin d'en simplifier leur utilisation pour le calcul de la puissance résiduelle sur un assemblage ou un réacteur irradié.

Grâce à ces CFE, on peut ensuite calculer la puissance résiduelle de n'importe quel élément irradié. Pour cela, les taux de fission moyens des noyaux lourds τ_f sont calculés pour les différents paliers d'irradiation. Les CFE doivent être intégrées sur le temps approprié.

Le produit des taux de fission et des CFE permet de calculer la puissance résiduelle (Équation 2).

$$PR(T_{ref}, T_{irrad}) = \sum_{NL} (\tau_f)_{NL} \times \int_{T_{ref}}^{T_{irrad}+T_{ref}} f_{NL}(t) dt$$

Équation 2 : Calcul de la puissance résiduelle grâce aux CFE

Avec *NL* les noyaux lourds.

Le calcul des taux de fission présente l'avantage qu'il est moins contraignant : en effet, ils nécessitent la résolution des équations d'évolution de Bateman uniquement pour les noyaux lourds (en petit nombre) et non pas pour l'ensemble des produits de fission (dont le nombre est nettement plus important). Les données nucléaires de ces noyaux lourds sont de plus mieux connues. Cependant, ils nécessitent d'émettre l'hypothèse de puissance constante sur chaque palier.

Il est à noter que les CFE ne prennent pas en compte l'effet de capture neutronique des produits de fission. Cela induit une surestimation de la puissance résiduelle non négligeable pour des temps de refroidissement allant d'un jour à 30 ans. Une correction est ainsi nécessaire.

VALIDATION DES CFE CALCULEES

La validation expérimentale du précédent OCS du calcul de la puissance résiduelle et des bilans matières, DARWIN2, s'est appuyée sur les expériences de mesure de la puissance résiduelle après la fission d'un seul noyau lourd, i.e. une courbe de fission élémentaire.

DARWIN2 a ainsi été comparé aux expériences de mesures dans le spectre rapide pour les isotopes de ^{235}U , ^{238}U , et le ^{239}Pu . Il a été remarqué une sous-estimation aux temps courts (Lebrat, 2018), entre 300 et 3000 secondes de l'ordre de 5 à 7%, lié à l'**effet pandémonium**⁴ (Algora, 2010 ; Yoshida, 1999 ; Hardy, 1977). Cependant, à 2σ , les incertitudes calculées et expérimentales se recoupent, ce qui permet d'utiliser DARWIN2 pour ce type d'étude (voir Figure 3).

⁴ Ce problème est dû aux détecteurs, qui manquent une partie des émissions γ issues des produits de fission. En effet, lorsque les désintégrations β induisent des isotopes excités à haute énergie, les émissions γ issues de ces isotopes excités sont manquées. Les données issues de ces expériences sur les émissions β et γ sont ainsi faussées par ce phénomène, et induisent une sous-estimation de la puissance résiduelle. De nouveaux détecteurs permettent de corriger certaines données et d'améliorer les résultats. (Yoshida, 2008)

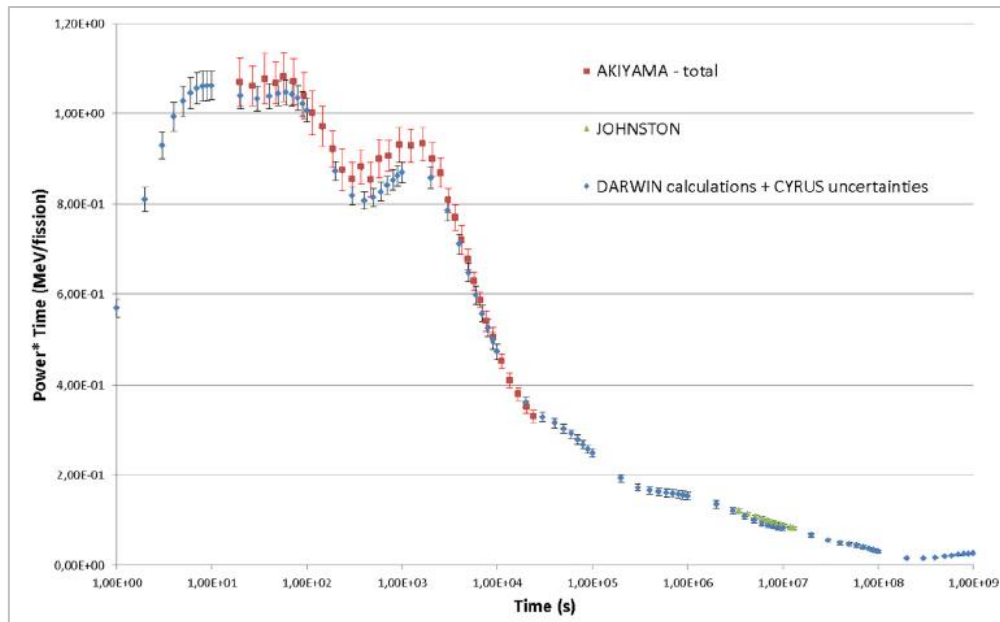


Figure 3 : Comparaison des CFE du ^{239}Pu issues de DARWIN2 à l'expérience (Lebrat, 2018)

1.1.4 Objectif de la thèse et stratégie

L'objectif principal de la thèse est d'**apporter des éléments de qualification pour le formulaire DARWIN3-RNR** pour le calcul de la puissance résiduelle.

Pour cela, il est nécessaire de procéder étape par étape et de définir précisément le domaine de validation et de qualification dans lequel nous évoluons.

1.1.4.1 Problématiques multiples

En effet, plusieurs problématiques gravitent autour du calcul de la puissance résiduelle induisant des biais potentiels dans nos calculs :

- une problématique spatiale
 - « Est-on capable de modéliser le flux correctement en chaque point du réacteur ? »
 - « Est-on capable de reproduire les valeurs des bilans matières en chaque point du réacteur ? »
- une problématique temporelle
 - « Est-on capable de modéliser l'historique d'irradiation ? »
 - « Est-on capable de prendre en compte les modifications de plans de chargement du cœur ? »
 - « Est-on capable de prendre en compte les « histoires » des assemblages ? »
 - « Est-on capable de calculer la puissance résiduelle aux temps courts ? longs ? »
- une problématique méthodologique

« Est-on capable de prendre en compte le couplage Boltzmann-Bateman ? »

« Les biais de calcul de la puissance résiduelle sont-ils les mêmes à tous les temps de refroidissement ? »

Nous allons donc émettre des recommandations quant à l'utilisation de DARWIN3-RNR au regard de l'ensemble de ces problématiques.

1.1.4.2 Stratégie générale

Comme nous l'avons vu, le processus de VVQI nécessite de vérifier les modèles, de valider l'outil par des confrontations aux outils précédents ainsi qu'à l'expérience et de le qualifier par une estimation des biais et des incertitudes.

L'étape de vérification est réalisée en amont au moment du développement du code, et n'est ainsi pas traitée dans le cadre de cette thèse.

La validation et la qualification de DARWIN3-RNR pour le calcul de la puissance résiduelle dans les réacteurs à neutrons rapides va reposer sur plusieurs comparaisons, à la fois expérimentales et numériques.

Les valeurs obtenues avec DARWIN3 vont être comparées avec celles données par un code probabiliste⁵ d'une part – ceux-ci étant généralement considérés comme références d'un point de vue neutronique – par les précédents outils de calculs scientifiques (OCS) déterministes⁶ d'autre part et enfin par comparaison à l'expérience.

La puissance résiduelle dépendant au premier ordre du bilan isotopique des combustibles irradiés à l'instant où le réacteur s'arrête (arrêt de la réaction en chaîne), la validation va s'appuyer sur la réinterprétation d'expériences d'irradiations d'aiguilles combustibles (fissiles et fertiles) afin de valider les calculs des bilans-matière (dont dépend la puissance résiduelle), et notamment ceux des noyaux lourds.

Aux temps courts, la puissance résiduelle présente une contribution résiduelle dépend majoritairement provenant des produits de fission, eux-mêmes issus de la fission des noyaux lourds. Ainsi, **la validation du calcul du bilan-matière des noyaux lourds** est une étape indispensable afin d'identifier les éventuels biais de calculs.

Par la suite, nous réinterpréterons une expérience de mesure de la puissance résiduelle, où celle-ci sera produite à la fois par les noyaux lourds mais aussi par l'ensemble des produits de fissions. Ce type d'expérience est utilisé à des fins de validation des OCS dans un deuxième temps uniquement, car elles sont plus complexes à analyser et dépendent de nombreux paramètres, qui pourraient ne pas permettre d'identifier les éventuelles sources de biais.

⁵ Cf. §1.3.1.1

⁶ Cf. §1.3.1.2

Pour le calcul des **bilans matières**, nous disposons des expériences d'irradiation TRAPU et DOUBLON qui ont eu lieu respectivement dans le cœur interne et la couverture fertile du réacteur à neutrons rapides PHÉNIX. Ces expériences nous permettent d'obtenir la mesure de noyaux lourds intéressants.

- Des actinides majeurs et mineurs dans TRAPU dans le cœur interne (isotopes de l'uranium, du plutonium, de l'américium et du curium, ainsi que du neptunium 237)
- Des actinides majeurs dans DOUBLON dans la couverture fertile (isotopes de l'uranium et du plutonium).

Ces expériences ont été réinterprétés récemment (*Lebrat, 2015*) avec des OCS récents (DARWIN2 (*Tsilanizara, 2000*)).

DARWIN2 était jusque-là le précédent formulaire déterministe utilisé pour le calcul des bilans matières et de la puissance résiduelle dans les réacteurs à neutrons rapides. Il a été validé pour ces applications et a été utilisé pour l'interprétation de nombreuses expériences d'irradiation et de mesure d'expériences de la puissance résiduelle. Sa comparaison avec le nouvel OCS en développé récemment, DARWIN3, va nous permettre de mettre en évidence les apports de DARWIN3-RNR sur le calcul des bilans matières.

Nous allons également nous attarder, dans le cadre de cette thèse, à modéliser ces expériences avec un OCS probabiliste (TRIPOLI-4®) afin d'avoir un élément de comparaison le plus fiable possible. En effet, la comparaison avec le code probabiliste TRIPOLI-4® (*Brun, 2015*) va nous permettre d'identifier les éventuels biais de modèles qui impactent le calcul des bilans matière des noyaux lourds - et donc la puissance résiduelle aux temps longs - dans notre formulaire déterministe. Cependant, peu de calculs ont été effectués en évolution avec TRIPOLI-4® en amont de cette thèse. Ainsi, l'interprétation d'expériences d'irradiations avec le code TRIPOLI-4® en évolution représente une nouveauté apportée par le travail présenté ici.

De plus, il semble important d'effectuer ces comparaisons de DARWIN3 à DARWIN2 et TRIPOLI-4®, car l'expérience de mesure de la puissance résiduelle choisie n'a pas été réinterprétée depuis longtemps, et les codes de calcul et données nucléaires qui avaient été utilisés à l'époque sont désormais obsolètes. Cette étape permet également de conclure quant à la fiabilité des calculs d'évolution réalisés avec DARWIN3.

Pour la validation du calcul de la puissance résiduelle, nous nous appuyons sur l'expérience de la mesure de la puissance résiduelle ayant eu lieu dans SUPERPHÉNIX en 1987. Cette expérience est choisie car le cœur est bien connu quasi-neuf (cœur CMP « cœur de montée en puissance »), et le cœur a été peu irradié (il a intégré l'équivalent de 83 JEPN⁷). Ainsi, la gestion des « histoires » des assemblages et des modifications des plans de chargement n'a pas à être considérée et permet de s'affranchir d'une partie des biais potentiels.

⁷ Jour Equivalent Puissance Nominale

Cependant, cette expérience n'a pas été réinterprétée depuis un certain temps (les dernières interprétations datent de 1988 et 1996). Ainsi, ces interprétations ayant été réalisées avec le formulaire MECCYCO (*Grouiller, 1990*), un code d'évolution bien antérieur à DARWIN2, sur la base de données nucléaires issues d'OCS précurseurs d'ERANOS. Ces données nucléaires (JEFF1, JEFF2) qui avaient été utilisées sont également considérées comme obsolètes pour la validation des OCS actuels.

Cette expérience va être réinterprétée dans le cadre de cette thèse avec l'OCS DARWIN3 et les données nucléaires JEFF-3.1.1. Cela nous permettra de mettre en évidence les éventuels apports de DARWIN3 pour le calcul de la puissance résiduelle.

Le calcul des sensibilités de la puissance résiduelle aux différentes données nucléaires est effectué avec MENDEL, qui nous permet, via des calculs de sensibilités directes, d'obtenir le premier terme **additionnel** des sensibilités couplées Boltzmann-Bateman, appelé « Sensibilité de **Bateman** ». Le remontage des incertitudes va nous permettre d'identifier les éventuels points impactant le plus l'incertitude sur la puissance résiduelle et de juger de l'ordre de grandeur de cette incertitude.

1.2 ELEMENTS DE NEUTRONIQUE ET DE PHYSIQUE DES REACTEURS

1.2.1 L'équation du transport de Boltzmann

L'équation de Boltzmann ou équation du transport est une équation intégral-différentielle de la théorie cinétique⁸, introduite en 1872. Elle décrit initialement l'évolution d'un gaz peu dense qui n'est pas en état d'équilibre.

Au sein d'un réacteur, la population neutronique est très dense, de l'ordre de 10^8 neutrons par cm^3 , mais elle est aussi très diluée par rapport à celle des atomes du milieu, qui est, elle, de l'ordre de 10^{15} .

La population neutronique peut être considérée comme un gaz parfait monoatomique qui va diffuser au sein d'un milieu atomique, d'où la notion de « gaz de neutrons ». Ainsi, en neutronique, la population de neutrons est régie par l'équation de Boltzmann (*Calame, 2017*).

⁸ La théorie cinétique des gaz explique le comportement macroscopique d'un gaz à partir des caractéristiques des particules qui le composent.

1.2.1.1 Le flux neutronique

Le flux neutronique se définit par deux grandeurs :

- La **vitesse** v des neutrons,
- La **densité neutronique**, notée $n(r, E, \Omega)$. $d^3r \cdot dE \cdot d^2\Omega$, et représentant le nombre de neutrons à chaque instant, contenus dans l'élément de volume d^3r pointé en r , à l'énergie E (à dE près), dans l'élément d'angle solide $d^2\Omega$ autour de Ω .

L'intervalle élémentaire considéré est un espace des phases à 6 dimensions $E, \vec{r}, t, \vec{\Omega}$, avec E l'énergie, \vec{r} la direction, t l'instant et $\vec{\Omega}$ l'angle solide.

Le flux s'exprime alors comme suit :

$$\phi(r, E, \Omega) = v \cdot n(r, E, \Omega)$$

Équation 3 : Flux

On peut l'exprimer également sous la forme :

$$\frac{dn(r, E, \Omega)}{dt} = \frac{1}{v} \times \frac{d\phi(r, E, \Omega)}{dt}$$

Équation 4 : Flux

Ainsi, la connaissance de la population neutronique permet de remonter à la connaissance du flux.

1.2.1.2 Construction de l'équation de Boltzmann

Elle s'obtient en réalisant un bilan sur un volume élémentaire de l'espace des phases $d^3r \cdot dE \cdot d^2\Omega$. A chaque instant t , la variation de la population neutronique vaut :

$$\frac{dn}{dt} = \text{apparition} - \text{disparition}$$

*Équation 5 : Population
neutronique*

Le terme d'apparition regroupe les arrivées de neutrons par diffusions, les créations de neutron par fission (prompte ou différée) ainsi que les contributions éventuelles de sources externes.

Le terme de disparition regroupe les fuites de neutrons hors du volume considéré et la disparition de neutrons par interactions avec un noyau (absorption, diffusion).

On en déduit l'équation de Boltzmann ci-dessous :

$$\frac{dn}{dt} = \frac{1}{v} \frac{d\phi}{dt} = -(\Sigma_t \phi + \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi) + (C\phi + F_p \phi + S_d + S_{ext})$$

Équation 6 : Equation de Boltzmann

Avec :

ϕ le flux neutronique,	C l'opérateur de collision,
Σ_t la section efficace totale,	F_p l'opérateur de fission,
Ω la direction de propagation,	S_d le terme de source différée,
∇ l'opérateur de gradient,	S_{ext} le terme de source extérieure de neutrons.

$\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi$ est le **terme de déplacement**, il représente alors la disparition de neutrons par fuite hors du volume élémentaire considéré.

$\Sigma_t \phi$ est le **terme de chocs**, il représente la disparition de neutrons par interactions sur les noyaux du volume.

$C\phi$ est le **terme de transfert**, il représente l'apparition de neutrons dans le volume élémentaire considéré par diffusion.

$F_p \phi$ est le **terme de fission**, représente la création de neutrons suite à une fission prompte.

S_d est le terme de **source différée**, il représente les créations de neutrons différés issus de la désintégration des noyaux précurseurs.

S_{ext} est le terme de **sources neutroniques extérieures**, il représente les créations de neutrons issus de sources externes.

Les codes de neutroniques s'intéressent à cette équation et tentent de la résoudre de différentes manières.

1.2.2 Les équations d'évolution de Bateman

Les équations d'évolution de Bateman modélisent la population de noyaux i à l'instant t . Ces populations de noyaux décroissent selon des chaînes de décroissance, et émettent alors de l'énergie sous forme de chaleur (*Calame, 2017*).

Ces équations d'évolution ont été formulées en premier lieu par Rutherford, suite à ses expériences d'irradiation sur le thorium (parallèlement aux expériences de Becquerel sur l'uranium).

Bateman, mathématicien anglais, propose en 1910 une formulation générale de la solution des équations différentielles dans le cadre de la décroissance. C'est son nom qui est resté, on parle ainsi des « équations d'évolutions de Bateman », bien que la solution générale, prenant en compte la fission spontanée et la transmutation due à un flux de neutrons n'ait été proposé que plus tard, en 1949, par Robinson – les neutrons, découverts en 1932 par Chadwick, étaient en effet encore inconnus lorsque Bateman a proposé sa solution.

Sous irradiation (Figure 4), i.e. soumis à un flux neutronique, les noyaux i :

- sont formés par :
 - fission du noyau fissile noté F
 - par capture d'un noyau j donnant le noyau i
 - ou par désintégration d'un noyau j donnant le noyau i
- disparaissent par :
 - désintégration du noyau i
 - capture du noyau i

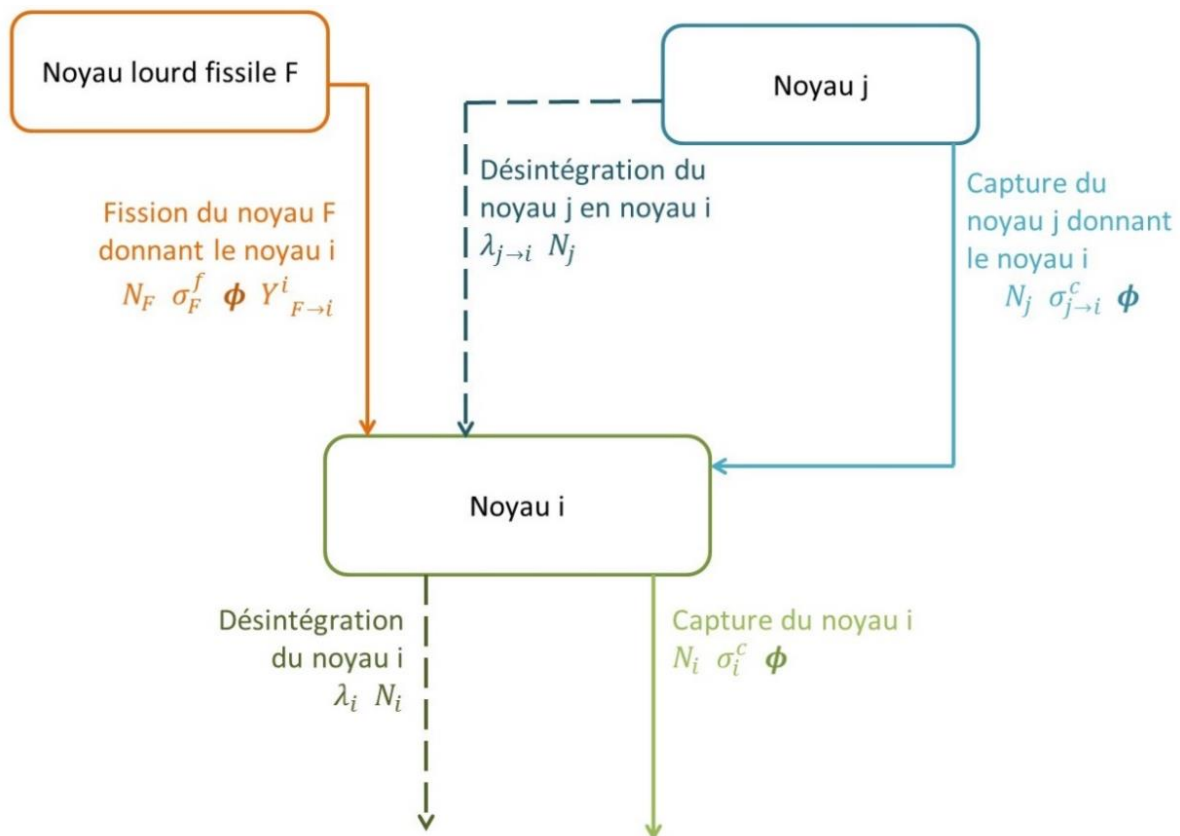


Figure 4 : Formation et disparition du noyau i sous irradiation

Elles se présentent sous la forme :

$$\begin{cases} \frac{dN_i(t)}{dt} = \sum_F N_F(t) \phi \sigma_F^f Y_{F \rightarrow i}^i + \sum_j (\phi \sigma_{j \rightarrow i}^c + \lambda_{j \rightarrow i}) N_j(t) - (\phi \sigma_i^c + \lambda_i) N_i(t) \\ N_i(t = 0) = N_i^0 \end{cases}$$

Équation 7 : Equations de Bateman sous irradiation

Avec :

$N_i(t)$ la concentration du noyau i à l'instant t ;

$N_F(t)$ la concentration du noyau fissile F à l'instant t ;

$N_j(t)$ la concentration du noyau j à l'instant t ;

σ_i^c la section de capture du noyau i ;

σ_F^f la section de fission du noyau F ;

$Y_{F \rightarrow i}^i$ le rendement de fission indépendant du noyau lourd fissile F vers le produit de fission i.

ϕ le flux neutronique (en neutrons. $cm^{-2}.s^{-1}$, soit un débit de fluence) ;

λ_i la constante de décroissance du noyau i ;

$\lambda_{j \rightarrow i}$ la constante de décroissance du noyau j donnant le noyau i ;

$\sigma_{j \rightarrow i}^c$ la section de capture du noyau j donnant le noyau i.

Lorsque l'irradiation s'arrête, c'est-à-dire en **refroidissement** (Figure 5), il n'y a plus de flux neutronique : les termes dépendants du flux de neutrons disparaissent, il ne peut plus y avoir ni fission, ni capture.

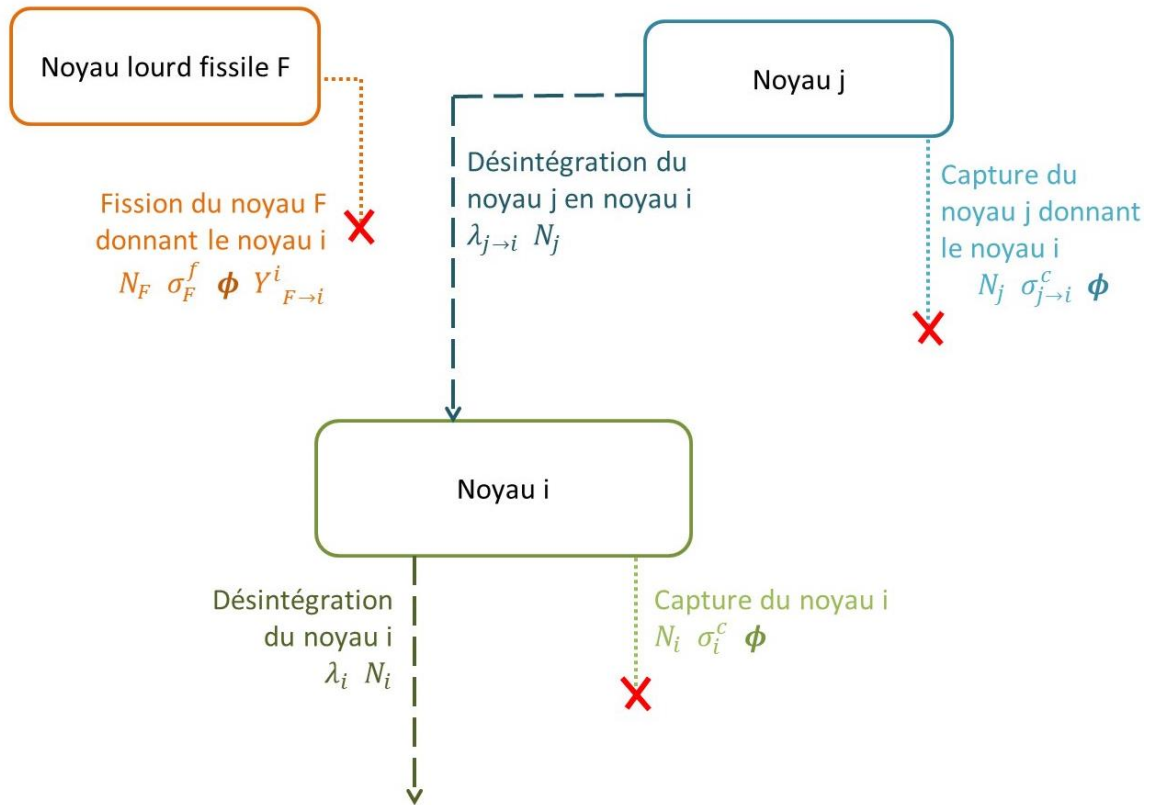


Figure 5 : Formation et disparition du noyau i en refroidissement

Il reste alors les termes suivants :

$$\begin{cases} \frac{dN_i(t)}{dt} = \sum_j \lambda_{j \rightarrow i} N_j - \lambda_i N_i \\ N_i(t = 0) = N_i^0 \end{cases}$$

Équation 8 : Equations de Bateman en refroidissement

Les codes d'évolution ont pour but de résoudre ces équations de Bateman afin de déterminer les concentrations des différents éléments au fil du temps.

1.3 LES OUTILS ET DONNEES DE LA NEUTRONIQUE

1.3.1 Les codes de calcul neutroniques

Les codes de calcul neutronique permettent d'obtenir la solution de l'équation du transport de Boltzmann de manière déterministe (par résolution de l'équation après simplifications) ou stochastique (par simulation Monte Carlo). Ils permettent ainsi d'obtenir la « population neutronique » c'est-à-dire le flux neutronique en tout point du réacteur.

1.3.1.1 *Les codes neutroniques stochastiques*

Les codes neutroniques stochastiques permettent d'obtenir la solution de l'équation de Boltzmann en utilisant des méthodes de **Monte Carlo**. Ils simulent la vie de chaque particule, ici des neutrons, de leur création (principalement par fission) à leur disparition (par capture ou par fuite hors du volume). Cette simulation est réalisée grâce aux tirages aléatoires de très nombreuses particules en respectant les probabilités d'interaction, c'est une **méthode probabiliste**. Ces probabilités d'interactions sont données via la connaissance des bibliothèques de données nucléaires. Du fait de l'absence d'approximations de méthodes, ces codes probabilistes sont considérés comme référence. Cependant, les temps de calcul sont longs et parfois limitants du fait du grand nombre de tirages aléatoires.

Le code de référence utilisé au CEA pour les calculs neutroniques est le code TRIPOLI-4® (Brun, 2015). Il est développé au SERMA (Service d'Etudes de Réacteurs et de Mathématiques Appliquées) sur le site du CEA de Saclay.

1.3.1.2 *Les codes neutroniques déterministes*

Les codes neutroniques déterministes résolvent l'équation de Boltzmann en réalisant des approximations, notamment des discrétisations (énergétique, angulaire, spatiale) afin de simplifier le problème. Ces discrétisations permettent la résolution de l'équation du transport de Boltzmann par des méthodes numériques. Cependant, du fait des discrétisations, on estime qu'il y aurait pour un REP de 900MWe, environ 2.10^{11} inconnues (Garcia-Cervantes, 2019).

Discrétisations angulaires et spatiales

La résolution de l'équation du transport de Boltzmann étant extrêmement complexe, les codes déterministes utilisent des approximations pour simplifier le problème. Ces approximations ont bien entendu été vérifiées et validées.

Le but de la thèse n'étant pas de reprendre les méthodes et solveurs implémentés dans les codes déterministes, nous en parlons juste brièvement afin d'avoir un vocabulaire commun. Pour plus d'informations, se référer aux références indiquées.

METHODE S_N

L'équation du transport de Boltzmann est discrétisée angulairement selon un ensemble de N directions discrètes. Plusieurs discrétisations spatiales sont associées à cette méthode. Les méthodes S_N offrent un compromis acceptable entre précision et temps de calcul de référence (Méthodes Monte Carlo).

- **Méthode aux différences finies** : l'équation du transport discrétisée angulairement est intégrée sur une géométrie structurée avec des mailles homogènes.

Cette méthode permet de faire des calculs rapidement sur des géométries 2D, mais elle ne peut traiter que des géométries structurées.

- **Méthode nodale** (Walters, 1981): les polynômes de Legendre des flux de la maille et aux frontières sont utilisés en amont pour décomposer le flux angulaire.

Cela permet d'exprimer les moments de fuites transverses en fonction des moments du flux intérieur et aux frontières. On obtient finalement les coefficients de collision.

Cette méthode ne peut traiter que des géométries cartésiennes structurées (2D ou 3D).

- **Méthode aux éléments finis discontinus de Galerkin (DG-FEM)** (Reed, 1973) (Odry, 2016): la résolution se fait sur le domaine spatial quadrillé avec une partition de mailles K .

L'équation du transport est réécrite sur la maille K que l'on met sous forme variationnelle. Un second niveau de discrétisation est réalisé : chaque maille est divisée en N_K nœuds de calculs, permettant à la solution d'être décomposée sur une base de fonction appelée *base nodale*.

Son avantage est d'être utilisable pour tout type de géométrie et pour toutes conditions aux limites, elle demande en revanche des temps de calculs importants et une place mémoire importante.

METHODE P_N

L'équation du transport multigroupe est discrétisée angulairement via le flux angulaire. Celui-ci est décomposé sur une base de fonctions orthogonales : les harmoniques sphériques. Leur ordre impose celui de la méthode P_N , cependant les temps de convergence peuvent être longs en augmentant celui-ci. Elle est essentiellement utilisée pour discrétiser angulairement l'équation sous sa forme de flux pair (Lewis, 1984).

La **méthode nodale variationnelle** s'obtient en formulant le problème de flux pair de façon variationnelle. Cela permet d'obtenir des matrices d'absorption et de sources (diffusions + fissions), ainsi qu'une matrice de couplage entre les composantes paires et impaires du flux.

METHODE SP_N

Elle correspond à une méthode P_N simplifiée, qui a l'avantage d'être plus précise que la diffusion mais moins coûteuse qu'une méthode de transport P_N ou S_N en temps de calcul. En revanche, elle ne converge pas vers la solution de cette dernière en augmentant l'ordre.

La discrétisation spatiale est réalisée avec la **méthode des éléments finis**, qui consiste à discrétiser l'espace grâce aux éléments finis de Raviart-Thomas-Nedelec (*Raviart, 1977*).

METHODE DES PROBABILITES DE COLLISIONS P_{ij}

Cette méthode résout pour chaque groupe d'énergie l'équation intégrale du transport (en variable spatiale) pour le flux scalaire. Une approximation de flux plat est utilisée pour chaque région. Comme pour la méthode des caractéristiques, le calcul utilise un traçage de trajectoires pour un ensemble fini de directions angulaires. On obtient une matrice des probabilités de collisions.

Les P_{ij} étant des matrices, la place de stockage et la résolution sont coûteuses quand le nombre de régions augmente. Afin de réduire le coût de la méthode, des approximations supplémentaires peuvent être réalisées, notamment le P_{ij} multicellule.

- **Méthode des caractéristiques (MOC)** (*Askew, 1972*): elle consiste à résoudre l'équation du transport discrétisée angulairement sur un domaine D de frontière δ .

Des lignes d'intégration, ou *caractéristiques*, sont générées par une procédure de tracking. L'intersection d'une droite avec le domaine D constitue une *trajectoire*. L'équation du transport est intégrée selon les trajectoires.

L'avantage de cette méthode est de permettre de traiter toute sorte de géométrie.

METHODE DE LA DIFFUSION

L'équation du transport est simplifiée par introduction de la loi de Fick dans celle-ci, donnant l'équation de la diffusion et permettant de traiter la variable angulaire.

Découpage énergétique

Les codes neutroniques déterministes subissent une **discrétisation énergétique** afin de résoudre les équations du transport. Le découpage énergétique utilisé au cours de la thèse est un découpage à 33 groupes d'énergie qui est hérité des études sur les RNR depuis les années 1980. Il est particulièrement adapté à la caractérisation des spectres à neutrons rapides (découpage idoine au-delà de 1 keV pour prendre en compte les différentes résonnances de diffusion élastique et inélastiques des éléments de structures et de caloporteur sodium). **A ce stade de la validation expérimentale ce découpage à 33 groupes pour les sections utilisées au niveau ces calculs cœur est imposé par les concepteurs du schéma de calcul cœur pour des considérations de cohérence avec les schémas anciens (comparaison et analyse d'incertitudes). Ce manque de degré de liberté sera discuté plus en détail dans les chapitres suivants.**

Approche de calcul en deux étapes

Une approche simplifiée est donc souvent utilisée (Figure 6). Elle consiste à décomposer le problème en deux étapes successives : une étape de « calcul réseau » et une étape de « calcul cœur ». L'étape de calcul réseau permet la modélisation des éléments constituant l'assemblage de façon précise (la zone fissile, les couvertures axiales, ...) afin d'obtenir des sections efficaces homogénéisées et condensées en énergie. L'étape de calcul cœur est une modélisation du cœur avec des assemblages qui sont homogénéisés radialement mais qui conservent leur structure axiale. Elle utilise les sections efficaces issues du calcul réseau.

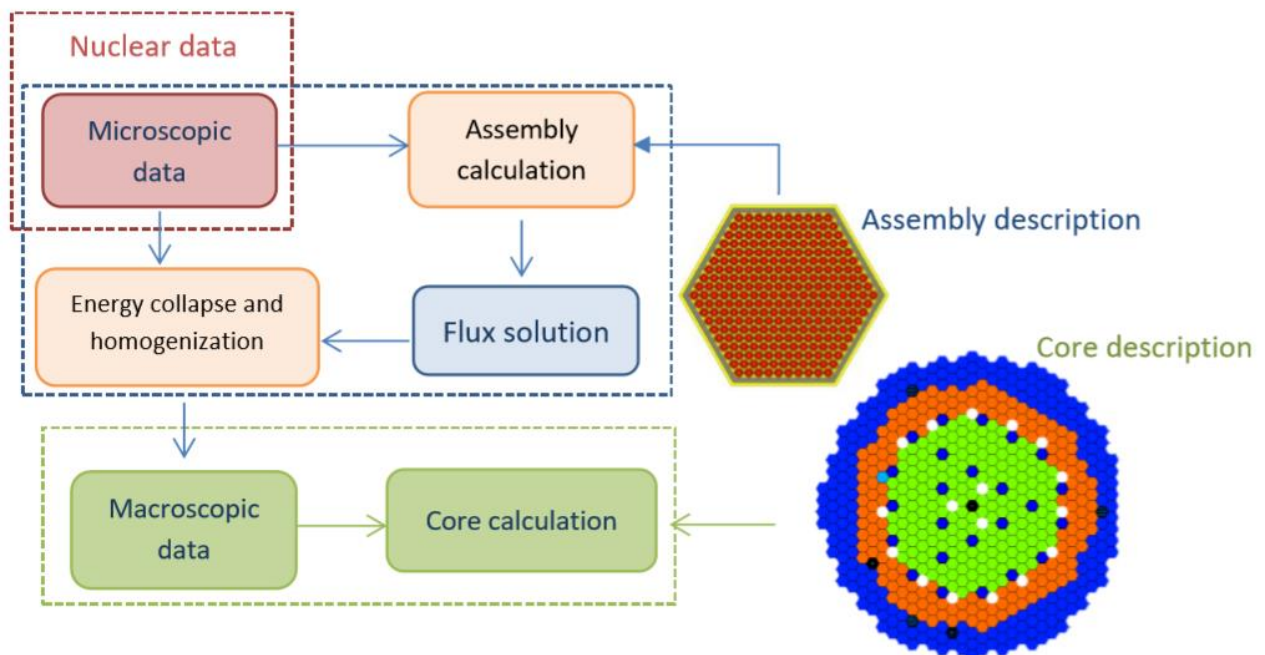


Figure 6 : Schéma de calcul dans une approche déterministe (Garcia-Cervantes, 2019)

Grâce à ces techniques, les codes déterministes ont donc l'avantage d'être plus rapides que les méthodes de résolution stochastiques, en revanche, des biais de calculs peuvent être introduits par ces discrétisations et approximations.

Il est donc nécessaire de valider les codes déterministes par comparaison à des codes de référence (i.e. stochastiques), à d'autres codes déterministes précédemment validés ou à l'expérience.

Le code neutronique déterministe très largement utilisé et validé pour les réacteurs à neutrons rapides est le code ERANOS (Ruggieri, 2006). Le code déterministe APOLLO3® (Golfier, 2009), en cours de développement, a cependant vocation à être le nouveau code déterministe référent pour la filière rapide.

1.3.2 Les codes de calcul d'évolution

Les codes de calcul d'évolution résolvent les équations de Bateman. Ils se basent sur la connaissance du flux neutronique, généralement apportée par un code neutronique. Ils permettent de simuler l'historique d'irradiation souhaité et d'obtenir les bilans matières finaux, nécessaire notamment au calcul de la puissance résiduelle. Cependant, l'évolution est réalisée sur un groupe d'énergie uniquement.

Le code d'évolution utilisé jusqu'à présent est PEPIN2. Il est utilisé sous la forme d'un formulaire communément appelé DARWIN2 (*Tsilanizara, 2000*) qui regroupe le code neutronique, ERANOS pour les réacteurs à neutrons rapides, et le module PEPIN2.

MENDEL (*Lahaye, 2014*) est le code d'évolution actuellement en développement, qui peut être utilisé au sein de TRIPOLI-4® en évolution mais aussi d'APOLLO3® en évolution, et qui peut être aussi utilisé de façon complètement autonome et indépendante. « DARWIN3 » est le nom généralement donné à l'enchaînement du code APOLLO3® en évolution et MENDEL de façon indépendante. Nous y reviendrons partie 1.4.

1.3.3 Les bibliothèques de données nucléaires

Les bibliothèques de données nucléaires regroupent l'ensemble des données caractérisant les noyaux et leurs réactions. On retrouve parmi les données nucléaires les constantes de décroissance λ , les rendements de fission Y , les sections efficaces σ , les énergies de réaction E , les rapports de branchements...

Les données nucléaires sont les paramètres d'entrée des codes neutroniques, et aussi souvent une source importante d'incertitudes (*Huy, 2018*). En effet, l'évaluation des données nucléaires requière des expériences qui sont entachées d'incertitudes de mesures. On distingue deux types d'incertitudes : les erreurs statistiques liées à la mesure et les erreurs systématiques qui peuvent être liées aux compositions d'échantillons, aux détecteurs, au bruit de fond...

Il existe plusieurs bibliothèques de données nucléaires et plusieurs versions de ces bibliothèques : JEFF-3.1.1, JEFF-3.2, ENDF, JENDL. La bibliothèque JEFF (Joint Evaluated Fission and Fusion File) est celle utilisée au CEA. Tout au cours de la thèse, nous utilisons (sauf mention contraire) la version **JEFF-3.1.1**. Celle-ci contient les données nucléaires de 3852 noyaux.

Afin d'être utilisables par les codes de calculs, les données nucléaires subissent un traitement physique, numérique et informatique.

D'une manière générale, les données nucléaires qui caractérisent l'interaction d'une particule incidente – dans notre cas, un neutron – avec le noyau cible dépendent :

- De l'énergie de la particule incidente,
- De la température du noyau cible.

1.3.4 Les chaînes d'évolution / chaînes de décroissance

Les chaînes d'évolution regroupent l'ensemble des données liées aux décroissances des noyaux radioactifs. Elles permettent de connaître les filiations radioactives. Elles représentent des données indispensables pour les codes d'évolution (Figure 7).

Elles permettent notamment de rendre compte des rapports de branchement, qui représentent la probabilité pour un noyau père d'emprunter une voie de désintégration radioactive donné parmi l'ensemble des voies de désintégration disponibles.

Ainsi, la connaissance des chaînes de décroissances va avoir un impact très important sur les calculs d'évolution.

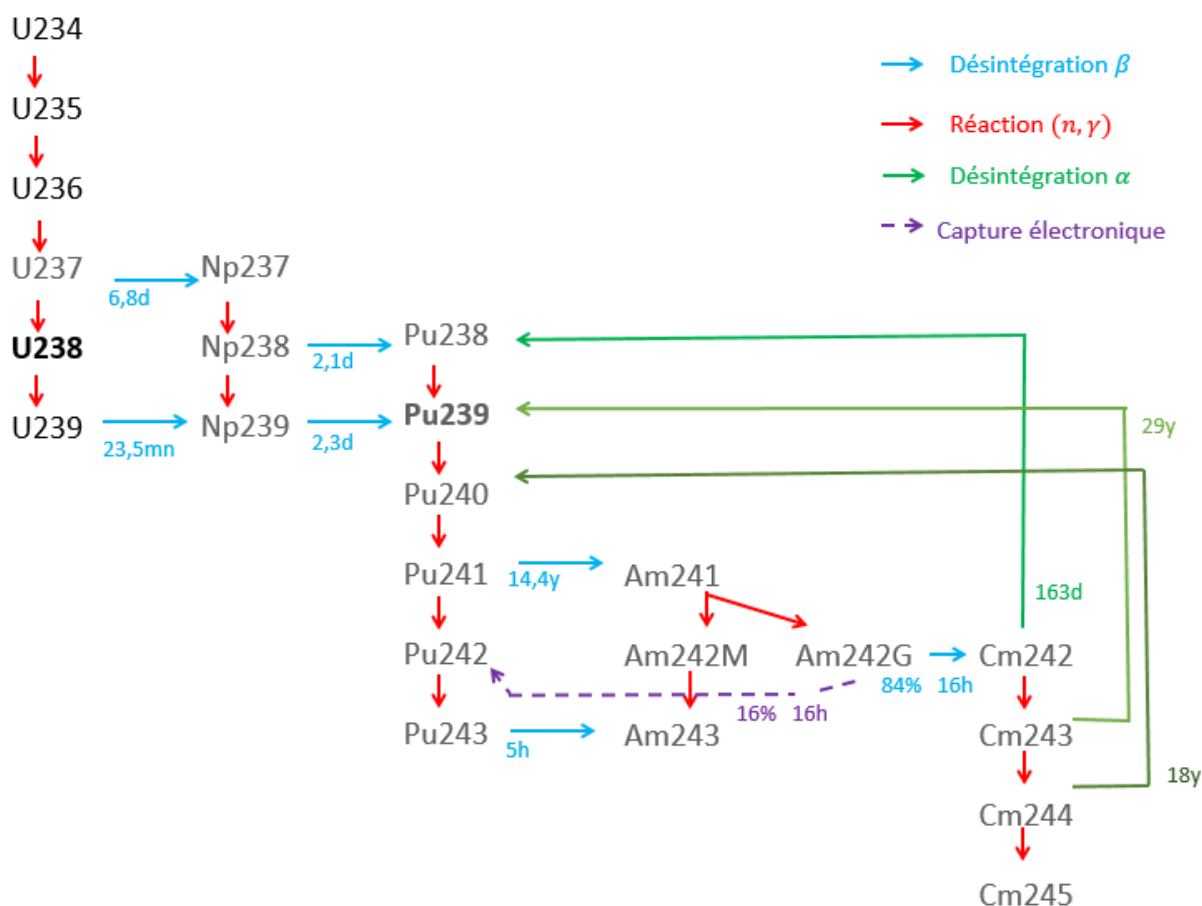


Figure 7 : Chaînes de décroissance radioactive simplifiées

1.3.5 Les matrices de variances et de covariances

Les matrices de variances et de covariances sont des matrices qui représentent les corrélations existantes entre différents paramètres. Elles sont utilisées en physique des réacteurs pour rendre compte des incertitudes et des corrélations des données nucléaires. Par exemple, les incertitudes

sur les sections efficaces sont prises en compte au travers de matrices multi-groupes en énergie. Sur la diagonale, les termes de variance quantifient l'incertitude associée à chaque groupe d'énergie. Les termes non-diagonaux sont les covariances et représentent les corrélations entre des groupes d'énergies différentes.

La matrice de variance et de covariance utilisée est COMAC (Covariance Matrix of Cadarache) (*Archier, 2014*), dans sa version COMAC-V1 à 33 groupes en énergie. Ces matrices COMAC regroupent les données de variances et de covariances concernant un grand nombre d'isotopes (^{238}U , ^{239}Pu , ^{235}U , ...): leurs différentes sections efficaces (fission, capture, absorption, ...), leurs énergies, etc.

1.4 LES FORMULAIRES DE CALCULS DISPONIBLES POUR LE CALCUL DE LA PUISSANCE RESIDUELLE

Plusieurs outils de calculs sont disponibles pour accéder à la connaissance de la puissance résiduelle dans les réacteurs à neutrons rapides. Le formulaire de calcul utilisé dans mon travail est le formulaire DARWIN3-RNR. Il se compose du code neutronique APOLLO3® et du module d'évolution MENDEL. Il fait suite au formulaire déterministe DARWIN2, composé du code neutronique ERANOS et du module d'évolution PEPIN2.

Le calcul de la puissance résiduelle nécessite l'obtention par le calcul de deux type données à un instant donné :

- le bilan matière des assemblages du réacteur,
- et le flux neutronique en tout point du réacteur.

Ces données sont obtenues en résolvant les équations de Bateman (avec les codes d'évolutions) et l'équation du transport de Boltzmann (avec les codes neutroniques).

Une méthode « pas-à-pas » est utilisée entre les codes d'évolutions et les codes neutroniques. En effet, le flux neutronique doit être calculé à chaque pas de temps suivant l'historique d'irradiation en se basant sur des bilans matières actualisés.

Afin de conserver des empreintes mémoire raisonnables pour l'obtention du flux, ces calculs sont effectués avec des chaînes de décroissance simplifiées. Les flux obtenus sont alors utilisés dans le code d'évolution, cette fois-ci avec des chaînes de décroissance beaucoup plus complètes pour l'obtention d'un bilan matières exhaustif nécessaire pour l'estimation de la puissance résiduelle.

Cette approximation est rendue possible grâce à une factorisation quasi-statique. Cette factorisation est rendue possible car dans les calculs cinétiques, on observe souvent une forte variation du niveau de flux sans déformation notable de la forme du flux (*Patricot, 2016*). D'une manière générale, les concentrations évoluent plus rapidement que le flux. C'est le cas dans les réacteurs à neutrons rapides refroidis au sodium, où les effets globaux dominent.

Cette observation a permis une simplification en découplant les calculs de la forme du flux et de son amplitude (*Henry, 1958*) (*Henry, 1958 (2)*), par factorisation du flux intégré comme le produit d'une amplitude \mathcal{N} et d'une fonction dite de forme \mathcal{F} . La fonction de forme \mathcal{F} varie lentement devant l'amplitude \mathcal{N} . Cette factorisation permet l'obtention des **équations quasi-statiques**.

1.4.1 Le formulaire DARWIN2

Le formulaire DARWIN2 repose sur l'enchaînement de deux codes :

- Le code neutronique déterministe ERANOS (pour les réacteurs à neutrons rapides) qui permet de résoudre les équations du transport de Boltzmann,
- Le module d'évolution PEPIN2, qui permet de résoudre les équations d'évolution de Bateman.

1.4.1.1 *ERANOS2*

ERANOS2 (*Ruggieri, 2006*) est un code permettant la réalisation de calcul de cœurs de réacteurs à neutrons rapides (RNR). Il est fondé sur une approche classique en deux étapes : calcul réseau puis calcul cœur. Le code réseau associé est ECCO (*Rimpault, 1995*). Ce dernier a été initialement développé spécifiquement pour les RNR, il repose sur la méthode des probabilités de collision.

ERANOS2 dispose de trois solveurs de cœurs : BISTRO, H3D et VARIANT.

- BISTRO est utilisé pour des géométries 1D et 2D. Il utilise la méthode des différences finies pour des calculs de diffusion ou de transport S_N .
- H3D est utilisé pour des géométries 3D, il utilise la même méthode mais pour des calculs de diffusion uniquement.
- Le solveur VARIANT quant à lui peut être utilisé sur des géométries 3D. Il repose sur une méthode nodale variationnelle utilisée pour la diffusion et le transport simplifié en approximation P_N ou SP_N (*Jouault, 2017*).

Ces trois solveurs fonctionnent sur la base de géométries structurées homogènes (carrés, rectangles ou hexagones)

1.4.1.2 *PEPIN2*

PEPIN2 est le module d'évolution du formulaire DARWIN2. Il utilise les données neutroniques tabulées en taux de réaction issues d'un code neutronique, dans le cas des RNR, il s'agit du code ERANOS2.

1.4.2 Le formulaire DARWIN3

1.4.2.1 *APOLLO3®*

Le code neutronique déterministe APOLLO3®, en cours de développement au CEA, est le code neutronique utilisé pour le formulaire DARWIN3. L'un des objectifs d'APOLLO3® est d'être multifilière, grâce à un panel de fonctionnalités et différents solveurs répondant à différents besoins.

Apports d'APOLLO3®

Si APOLLO3® reprend des fonctionnalités déjà présentes chez ses prédécesseurs (APOLLO2 (Sanchez, 2010), CRONOS2 (Lautard, 1992), ERANOS2 (Ruggieri, 2006)), il en étend également les possibilités. C'est en effet un logiciel flexible et multifilière, dont les performances sont poussées afin de tirer les meilleurs résultats possibles en terme de modélisation et de temps de calcul.

Le code APOLLO3® est ainsi développé dans l'objectif de répondre aux besoins suivantes :

- Augmenter la flexibilité de modélisation.
- Faciliter le couplage entre les codes, notamment les codes de thermohydraulique.
- Etendre le domaine d'application à d'autres types de réacteurs que les REP.
- Implémenter des outils de perturbations pour le calcul d'incertitudes.
- Permettre la parallélisation des calculs.

Les possibilités de modélisation se trouvent améliorées afin de répondre à un nombre important de contraintes et d'objectifs : les solveurs de flux sont multiples, il permet de modéliser très fidèlement les géométries au niveau du calcul réseau mais aussi du calcul cœur. En effet, la granularité géométrique est adaptable au besoin. Cela apporte des possibilités intéressantes en termes de validation, car les objets d'intérêt peuvent être modélisés précisément (pastille, aiguille, assemblage), de façon non structurée. Il est par exemple possible de modéliser uniquement une aiguille d'intérêt au milieu de l'assemblage, comme nous allons le voir dans la suite de la thèse.

APOLLO3® permet ainsi une grande adaptabilité aux besoins des utilisateurs et grâce à la parallélisation des calculs (Golfier, 2009), les temps de calculs sont accélérés, le rendant flexible et utilisable facilement pour un grand nombre d'applications.

Les solveurs de flux

APOLLO3® dispose de plusieurs solveurs de flux. Parmi ceux disponibles, on trouve les solveurs « réseau » et les solveurs « cœurs ».

SOLVEURS RESEAU

- **Le solveur TDT** (Sanchez, 1999): construit sur un traitement couplé des variables d'espace et de direction, il est adapté à tout type de géométrie.
Deux méthodes de résolution sont disponibles :
 - une méthode de probabilités de collisions (TDT-CPM) qui permet des calculs rapides avec une bonne précision pour des petites géométries,
 - et une méthode des caractéristiques (TDT-MOC) qui est la méthode de résolution la plus précise pour des schémas déterministes et permet de traiter n'importe quel type de géométrie avec cependant des coûts de calculs importants.
- **Le solveur IDT** (Zmijarevic, 1999) : construit sur une méthode aux ordonnées discrètes S_N , le traitement spatial peut être réalisé soit en méthode des caractéristiques courtes, soit en méthode nodale, soit en différences finies.

Utilisé pour des calculs réseau 2D et cœur 3D, le maillage rectangulaire limite néanmoins son utilisation.

SOLVEURS CŒURS

- **Le solveur cœur PASTIS** (Lewis, 1986) (Gastaldo, 2004) : offrant un compromis entre précision et performance, il utilise une méthode nodale variationnelle pour discréditer spatialement le flux. Il est utilisé pour des calculs de diffusion.
- **Le solveur cœur P_N MINOS** (Baudron, 2007) : construit sur un maillage non structuré, l'approximation de la diffusion ou du traitement angulaire SP_N permet de simplifier l'opérateur de transport.
- **Le solveur cœur MINARET** (Moller, 2011) : basé sur une méthode aux ordonnées discrètes S_N , le maillage triangulaire **non structuré** permet de traiter tout type de géométrie.

Étapes de calcul

APOLLO3® nécessite un calcul en deux étapes : une première étape de calcul réseau (Figure 8), et une deuxième étape de calcul cœur (Figure 9).

Au cours de l'étape du calcul réseau, le calcul est réalisé :

- sur une cellule combustible hexagonale, représentant une coupe radiale de l'assemblage combustible au niveau de sa zone fissile,
- ou sur un cluster représentant deux cellules côte à côte, l'une fissile (le combustible) et l'autre la cellule d'intérêt, soit une cellule fertile ou un élément de structure.

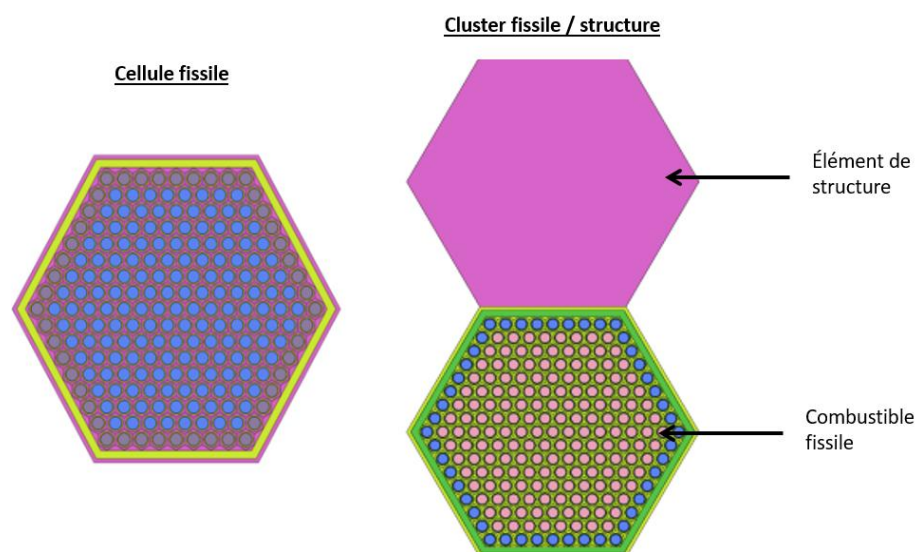


Figure 8 : Exemple de calcul réseau sur une cellule combustible ou sur un cluster fissile / structure

Ces calculs « réseau » permettent d’obtenir des sections efficaces homogénéisées qui seront par la suite utilisées pour le calcul cœur. Au cours de l’étape cœur, les calculs sont classiquement réalisés sur des assemblages qui ont été homogénéisés radialement et qui utilisent les sections efficaces homogénéisées de l’étape réseau.

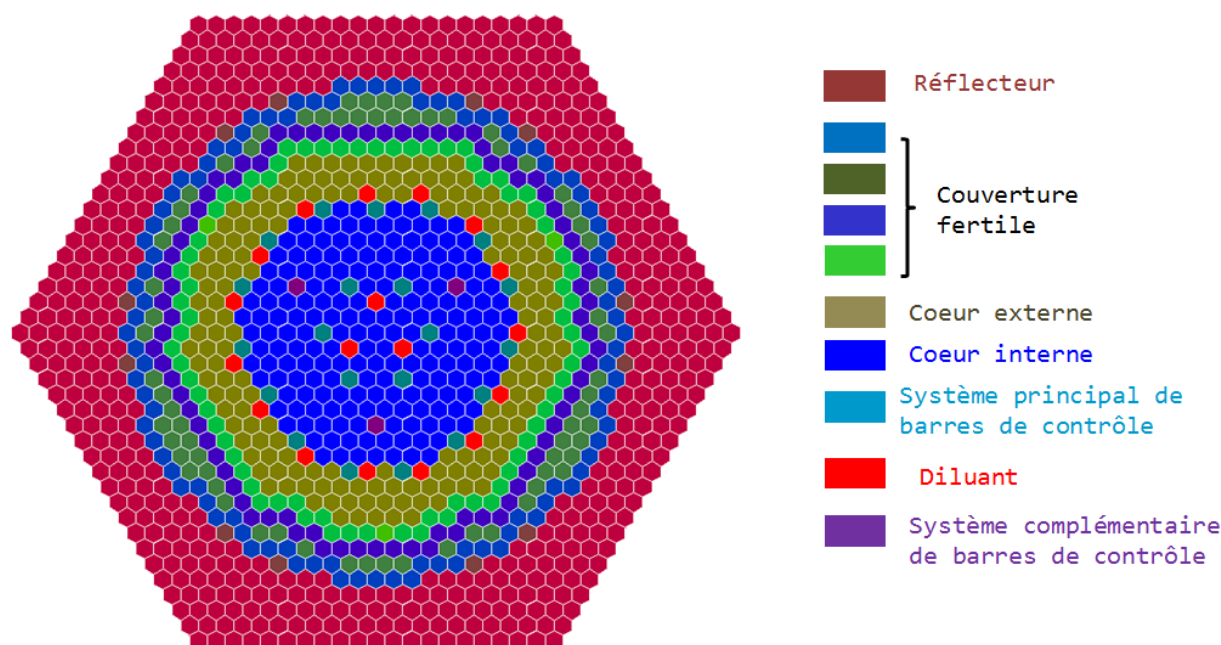


Figure 9 : exemple de modélisation homogène pour le calcul cœur (ici Superphénix)

1.4.2.2 MENDEL – DARWIN3

DARWIN3 est le formulaire d'évolution en développement au CEA composé du code neutronique APOLLO3® et du code d'évolution MENDEL (Lahaye, 2014).

Les principaux changements résident dans le code neutronique utilisé : APOLLO3® présente des améliorations par rapport à ses prédécesseurs (ERANOS2, CRONOS2, APOLLO2), comme nous l'avons vu.

Le formulaire DARWIN3 repose sur l'enchaînement de deux codes :

- Le code neutronique déterministe APOLLO3®, qui permet de résoudre les équations du transport de Boltzmann,

- Le module d'évolution MENDEL, qui permet de résoudre les équations d'évolution de Bateman.

Celui-ci peut être utilisé de deux façons (Figure 10) :

- **Le module d'évolution de MENDEL en « interne » du code APOLLO3®** permet, avec des chaînes d'évolution simplifiées et l'historique d'irradiation, d'obtenir un flux neutronique pour chaque pas d'évolution.
- **Le code MENDEL utilisé de façon autonome et indépendante** a besoin en données d'entrées des flux et des sections efficaces, qui peuvent être données via des MPOs (multi-parameters output) issues du calcul APOLLO3®.

Ensuite, à l'aide de chaînes complètes et de l'historique d'irradiation adéquat, MENDEL permet de résoudre les équations de Bateman et d'obtenir les bilans matières et la puissance résiduelle.

C'est cette façon de procéder que l'on appelle communément **DARWIN3**.

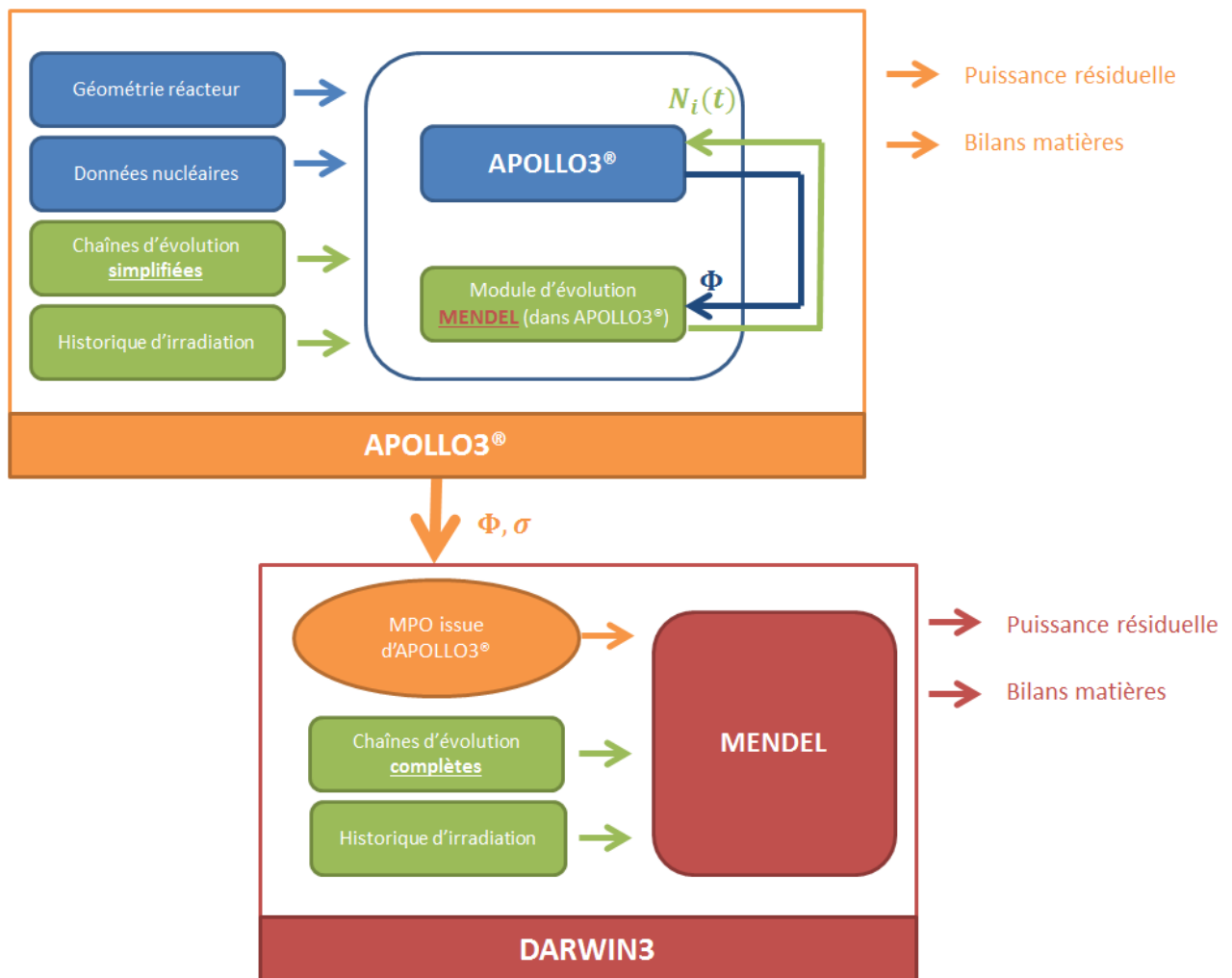


Figure 10 : Fonctionnement de DARWIN3

On peut obtenir des puissances résiduelles et des bilans matières avec APOLLO3® et le module interne MENDEL, mais les calculs d'évolution ne sont pas réalisés directement dans APOLLO3® avec des chaînes complètes car cela nécessiterait des temps de calculs déraisonnables et des empreintes mémoires prohibitives.

1.4.3 Apports du formulaire DARWIN3

Le formulaire DARWIN3 propose une avancée en termes de flexibilité et capacité de modélisation en comparaison à son prédécesseur DARWIN2, notamment parce que le code déterministe APOLLO3® qui lui associé offre un panel de solutions nouvelles à la fois au niveau des descriptions géométriques et des méthodes de résolutions numériques de l'équation de Boltzmann.

<i>Code neutronique</i>		<i>ERANOS2</i>	<i>APOLLO3®</i>
<i>Autoprotection</i>		Méthode des sous-groupes	Méthode des sous-groupe Formalisme de Tone
<i>Solveur du flux (réseau)</i>	Milieux critiques	Calculs multi-cellules	Méthode des caractéristiques (P_{ij}) (solveur TDT-MOC)
	Milieux sous-critique	Calcul à source (source volumique uniforme)	Calcul sur des motifs représentatifs → cluster avec description explicite de la source
<i>Condensation des sections à 33 groupes</i>		Flux-volume	Flux-volume Condensation par les moments
<i>Solveur de flux (cœur)</i>		Méthode nodale avec transport simplifié , approximation P_N ou SP_N (Solveur AVNM) Développement sur 6, 19 ou 37 nœuds dans l'hexagone	Méthode S_N (Solveur MINARET) Discretisation en triangles (taille paramétrable)
<i>Historique d'irradiation</i>		Evolution en JEPP ⁹ (le réacteur est toujours considéré à la même puissance)	Evolution avec diagramme de marche
<i>Isotopes</i>		Noyaux lourds et pseudo-produits de fission ¹⁰	Noyaux lourds (30) et produits de fission ¹¹ (126)

⁹ JEPP = Jours Equivalents Pleine Puissance

¹⁰ Pseudo-produits de fission : éléments créés de telle sorte que leur section efficace de capture soit équivalente à la section efficace de la distribution des produits de fissions réels pour un isotope fissile donné. Ils permettent d'obtenir des bilans neutroniques représentatifs.

¹¹ Produits de fission importants pour les calculs de réactivité

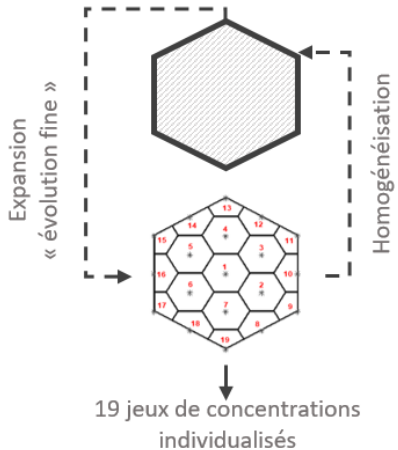
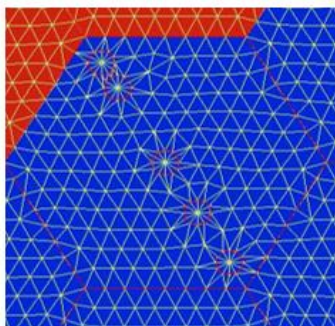
<p><i>Calcul d'évolution</i></p>	<p>19 jeux de concentrations individualisés pour un assemblage, qui ne correspondent pas nécessairement à l'aiguille analysée</p>  <p>Expansion « évolution fine »</p> <p>Homogénéisation</p> <p>19 jeux de concentrations individualisés</p>	<p>Evolution in situ sur l'aiguille réelle</p>  <p>Evolution « in-situ »</p>
----------------------------------	--	---

Tableau 1 : Comparaison ERANOS2 / APOLLO3®

2. CHAPITRE 2 : METHODOLOGIE DES CALCULS DE SENSIBILITES ET D'INCERTITUDES

2.1 GENERALITES

2.1.1 Intérêts de la connaissance des incertitudes et de ses contributeurs

La connaissance d'une grandeur neutronique repose sur la connaissance de sa **valeur centrée** et de son **écart-type**, i.e. l'incertitude qui lui est associée. Ainsi, connaître les incertitudes de la puissance résiduelle et ses contributeurs fait ainsi partie intrinsèquement de la connaissance de la puissance résiduelle.

Une meilleure connaissance de ces incertitudes présente un intérêt majeur, en permettant de **s'affranchir des intervalles de confiance**, souvent maximisés pour respecter des conditions de sûreté nucléaire.

- ➔ Obtenir des incertitudes plus faibles permet donc de satisfaire les exigences de sûreté tout en construisant des réacteurs plus performants et à moindre coût.

De plus, la connaissance des **contributeurs à l'incertitude** de la puissance résiduelle permet de mettre en avant les **paramètres** qui impactent le plus l'incertitude de la puissance résiduelle, que ce soit les données nucléaires, les incertitudes de mesures, etc.

- ➔ Cette connaissance permet ensuite un **retour vers l'expérience**, notamment pour les données qui nécessitent de nouvelles mesures.

Cependant, nos valeurs calculées sont souvent comparées à des valeurs expérimentales (notamment via les rapports calcul / expérience (C/E)), qui présentent elles aussi leurs propres incertitudes.

2.1.2 Biais et incertitudes

Le **biais** se définit comme une **erreur systématique**, l'**incertitude** quant à elle caractérise l'**erreur probable**.

Le biais est donc dépendant du système, récurrent et constant, tandis que l'incertitude correspond à une dispersion statistique autour de la valeur « vraie », comme on peut le voir de façon schématique sur la figure suivante (Figure 11).

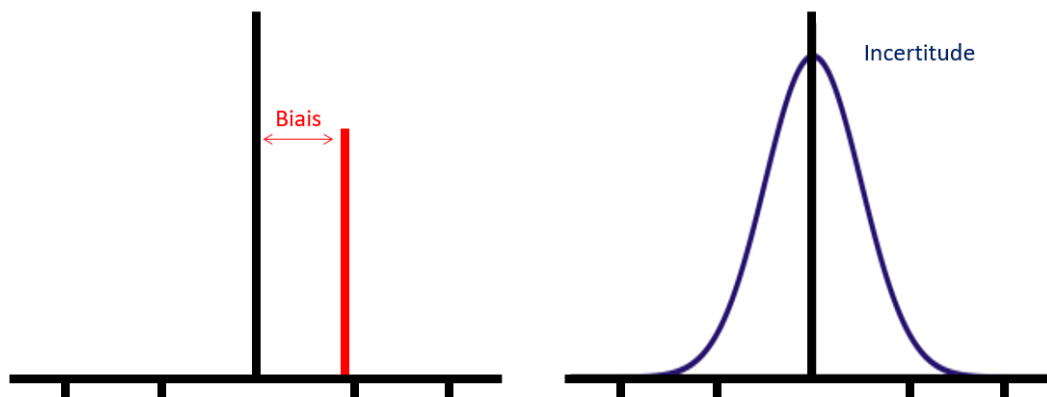


Figure 11 : Schéma du biais de calcul et de l'incertitude de calcul

2.1.2.1 Les erreurs de calcul

Les erreurs de calculs sont une combinaison des approximations du code (Δ_{code}), des incertitudes des données nucléaires ($\varepsilon_{données\ nucléaires}$), et des erreurs technologiques (Δ_{tech}).

Ainsi, le calcul de l'erreur de calcul peut se définir de la façon suivante :

$$\Delta_{calcul} = \Delta_{code} + \varepsilon_{données\ nucléaires} + \Delta_{tech}$$

Équation 9 : Erreur de calcul

Les incertitudes des données nucléaires $\varepsilon_{données\ nucléaires}$

Plusieurs paramètres utilisés dans les calculs d'évolution ont leur propre incertitude. C'est le cas des **données nucléaires** (sections efficaces σ , rapports de branchement br , constantes de décroissances λ , énergies E , rendements de fission Y).

Les erreurs d'origine technologiques Δ_{tech}

Les incertitudes issues des paramètres technologiques nécessitent des **mesures des composants du cœur** telles que des bilans matière initiaux des assemblages ou la géométrie du réacteur. A

partir de ces mesures, il est possible de reconstituer une distribution statistique des valeurs mesurées, autour de leur espérance.

On y regroupe notamment les **données d'entrées** (concentrations initiales en isotopes, puissances nominales, flux neutronique, historiques d'irradiations).

Le biais de code Δ_{code} ou biais de modélisation

Le biais du code ou biais de modélisation est principalement dû aux approximations de modèle, telles que les discrétisations (angulaires, énergétiques, spatiales), les choix de modèles d'autoprotection, etc.

2.1.2.2 Les erreurs et incertitudes de mesure

Les erreurs de mesure sont fournies directement avec les valeurs expérimentales. Elles sont habituellement considérées comme des incertitudes, car l'on suppose qu'il n'y a pas d'erreur systématique comme un biais de calibration – en effet, aucune valeur de biais de calibration n'est fournie avec les valeurs expérimentales, uniquement des incertitudes.

C'est en partie du au fait que les mesures tentent autant que possible de s'affranchir des biais de calibration. Par exemple, dans le cas des concentrations isotopiques, ce sont des rapports isotopiques qui sont mesurés, et non pas des concentrations. En effet, certains matériaux sont considérés comme des « matériaux de référence », ils jouent un rôle fondamental pour la mise au point des méthodes d'analyse isotopique par spectrométrie de masse. Ces matériaux permettent d'élaborer des méthodes de mesures qui permettent de contrôler l'ensemble des « biais instrumentaux » (Chartier, 2014).

$$\Delta_{mesure} = \varepsilon_{mesure} + \Delta_{calibration}$$

Équation 10 : Erreur de mesure

Ainsi, les mesures de certains rapports isotopiques, tel que le rapport isotopique du néodyme 148 (^{148}Nd), sont des **indicateurs de fluence**, c'est-à-dire des témoins du niveau de flux. Leur mesure permet ensuite, lors de la modélisation et du calcul, d'effectuer un **recalage** et donc de s'assurer que le niveau de flux **calculé** est identique au niveau de flux **expérimental**.

Cela permet, s'il y avait initialement un biais de calibration lors de la mesure, qu'il ne fausse pas l'interprétation des rapports calcul / expérience (C/E).

2.1.2.3 Sources d'erreurs considérées

Incertitudes des données nucléaires

Les incertitudes, et notamment celles relatives aux données nucléaires, doivent être **évaluées** et **propagées** correctement. Au cours de cette thèse, la propagation des incertitudes des **données nucléaires** est réalisée avec le module IncerD (*Lahaye, 2018*) du code MENDEL (*Lahaye, 2014*), et leurs **corrélations** sont prises en compte grâce aux matrices de variances et covariances COMAC (*Archier, 2014*).

Biais de calibration

Lors de nos calculs, nous considérons qu'il n'y a pas de biais de calibration pour l'analyse des rapports C/E, grâce au **recalage** qui permet de s'en affranchir.

Cependant, les mesures de la puissance résiduelle ne sont pas associées à la mesure des rapports isotopiques ; il n'est donc pas possible dans ce cas précis de s'affranchir du biais de calibration.

Biais technologiques

CONCENTRATIONS ISOTOPIQUES INITIALES

Les concentrations isotopiques initiales sont données par les entreprises qui fournissent les combustibles nucléaires et les matières nucléaires. Cependant, les interprétations expérimentales réalisées peuvent parfois conclure que les concentrations isotopiques initiales sont biaisées, et nécessitent un léger ajustement. Ainsi, nous nous appuyons sur ces corrections pour fournir nos concentrations initiales aux codes de calculs. Cela permet en partie de s'affranchir des biais des concentrations isotopiques initiales.

FLUX NEUTRONIQUE

Le flux neutronique est une donnée qui n'est pas aisément accessible à la mesure, nous avons seulement accès à un indicateur de fluence. Le **recalage** permet ainsi de s'affranchir également de ce biais, en plus du biais de calibration. Nous y reviendrons en partie 3.1.2.

HISTORIQUE D'IRRADIATION ET PUISSANCES NOMINALES

L'historique d'irradiation et les puissances nominales impactent essentiellement le flux neutronique, les concentrations isotopiques et la puissance résiduelle.

Pour l'interprétation des concentrations isotopiques, nous nous affranchissons de ce biais là encore grâce au recalage.

Pour le calcul de la puissance résiduelle, nous n'avons pas accès à des mesures des concentrations isotopiques et effectuer un recalage pour s'en affranchir totalement. Cependant,

la puissance résiduelle est sensible essentiellement à la puissance de réacteur en fin d'irradiation. Une étude de sensibilité peut être effectuée. Nous avons également accès à des documents qui fournissent une incertitude estimée sur la puissance nominale.

Nous pourrions ainsi propager l'incertitude sur la puissance nominale au calcul de la puissance résiduelle grâce aux coefficients de sensibilité.

Biais résiduel

Certains biais de calculs ne sont pas connus en amont, et ne sont pas considérés lors des propagations d'incertitudes. Ils constituent alors le « biais résiduel » après propagation des autres sources d'erreurs.

L'intérêt de la validation d'un code de calcul est d'estimer sa performance, donc de connaître son biais de modélisation. Un code performant a un biais de modélisation le plus faible possible.

- Pour les interprétations des bilans matières, où l'analyse du niveau de flux est réalisable et le recalage possible, le biais résiduel sera composé du **biais de modélisation**. Nous pourrions ainsi conclure sur la performance du formulaire DARWIN3.
- Pour l'interprétation de la puissance résiduelle, le biais résiduel ne peut pas complètement s'affranchir du niveau de flux neutronique, des concentrations initiales et du biais de calibration du fait de l'absence de recalage possible.

2.2 METHODOLOGIE DES CALCULS D'INCERTITUDES

2.2.1 Notion de couplage Boltzmann-Bateman

Les équations permettant d'accéder au flux neutronique (équation de Boltzmann) et celles permettant d'accéder aux concentrations des noyaux (équations de Bateman) sont interdépendantes (Figure 12).

En effet, l'équation de Boltzmann est dépendante des concentrations isotopiques, tandis que les équations de Bateman sont dépendantes de la population neutronique. Ces deux équations sont également dépendantes des sections efficaces.

Cependant, prendre en compte le couplage existant entre les équations de Boltzmann et de Bateman est en pratique complexe (nous le verrons en partie §2.2.4).

- ➔ Ainsi, lors de la résolution des équations de Bateman par le formulaire d'évolution, le **flux** est considéré comme une donnée d'entrée (issue du code neutronique), et n'est pas modifié en cours d'irradiation.
- ➔ De plus, l'incertitude qui lui est attribuée n'est pas propagée sur les concentrations isotopiques.

$$\frac{dn}{dt} = \frac{1}{v} \frac{d\phi}{dt} = -(N\sigma_t\phi + \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla}\phi) + (C\phi + F_p\phi + S_d + S_{ext})$$

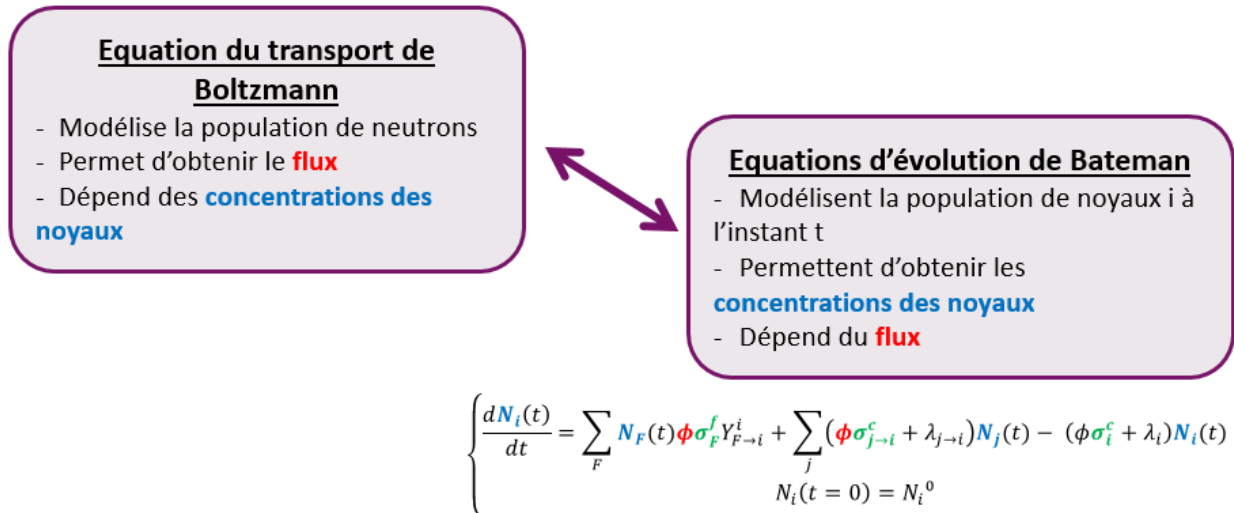


Figure 12 : Couplage Boltzmann-Bateman

Il en est de même pour le calcul des sensibilités et des incertitudes : l'impact des incertitudes des données nucléaires est propagé sur les concentrations isotopiques et sur la puissance résiduelle, mais pas sur le flux neutronique.

Ainsi la majorité des outils de propagation des incertitudes ne permettent pas d'accéder aux **sensibilités couplées Boltzmann-Bateman**.

2.2.2 Calcul par sensibilité directe (perturbation et propagation)

Principe

C'est la méthode de calcul des incertitudes qui est utilisée au cours de cette thèse. Elle repose sur deux calculs : un calcul « nominal » et un calcul « perturbé ». Elle permet de prendre en compte les incertitudes des données nucléaires et de les **propager l'une après l'autre**.

La **perturbation** est réalisée en modifiant l'une après l'autre les données nucléaires d'entrées (sections efficaces σ , rapports de branchement br , constantes de décroissances λ , énergies E , rendements de fission Y).

$$p' = p + \Delta p$$

(avec p' le paramètre perturbé et p le paramètre nominal)

*Équation 11 :
Paramètre perturbée*

Le calcul est relancé avec cette donnée d'entrée modifiée, et on obtient alors la réponse perturbée R' de la grandeur d'intérêt au paramètre d'entrée perturbé (Equation Équation 12)).

$$R' = R + \Delta R$$

(avec R' la réponse perturbée et R la réponse nominale)

*Équation 12 : Réponse
perturbée*

On peut alors calculer la **sensibilité relative** S de la réponse R au paramètre modifié p (Equation Équation 13)).

$$S(R, p) = \frac{\frac{\Delta R}{R}}{\frac{\Delta p}{p}}$$

*Équation 13 :
Sensibilité directe*

Pour remonter à l'incertitude à partir des sensibilités calculées, il est nécessaire de prendre en compte les éventuelles **corrélations** entre les paramètres. On utilise pour cela les **matrices de variances et de covariances COMAC** (V) (Equation Équation 14)).

$$\varepsilon^2 = S^T V S$$

*Équation 14 :
Incetitude*

Cette démarche est schématisée dans la figure ci-dessous pour la puissance résiduelle notée PR (Figure 13) :

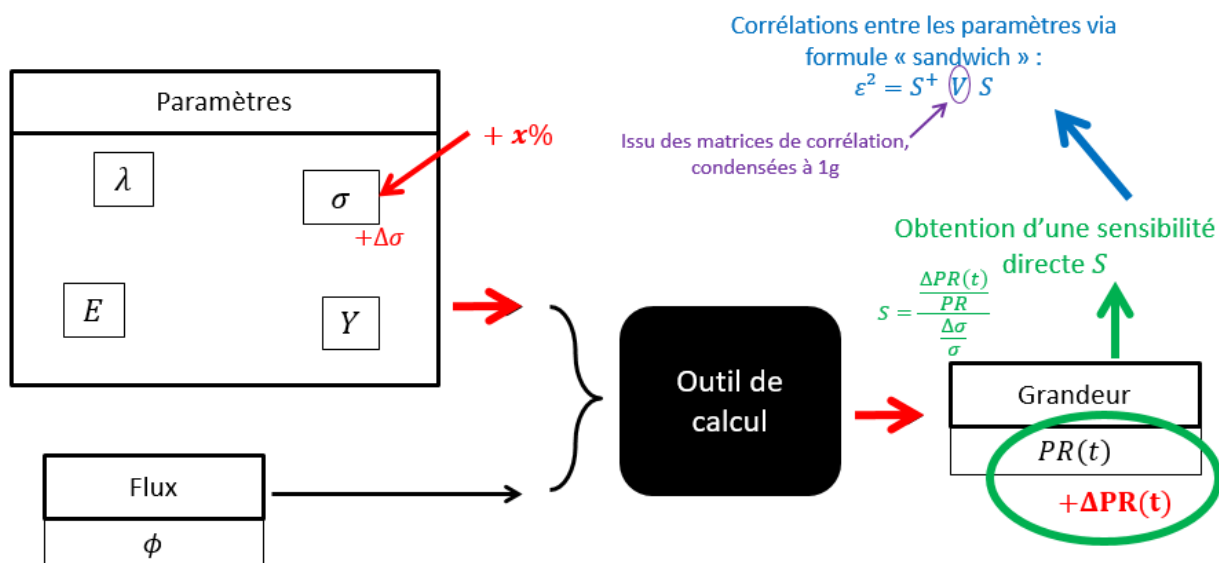


Figure 13 : Calcul des incertitudes par sensibilité directe

Outils de calcul des incertitudes par sensibilité directe

Perturbation et Propagation avec MENDEL

Les calculs de sensibilités de DARWIN3 sont réalisés avec la fonction **Perturbation** de **MENDEL**.

C'est une fonction qui permet le calcul des sensibilités déterministes au premier ordre. Les incertitudes des données nucléaires que l'on peut propager sur les puissances résiduelles ou les concentrations isotopiques sont les sections efficaces σ , les rendements de fission Y , les rapports de branchement (de décroissance et de réaction neutronique), les constantes de décroissances λ , énergies moyenne de décroissance (α, β, γ). Elle permet d'obtenir des coefficient de **sensibilité relative** $S_{G/p} = \frac{\Delta G/G}{\Delta p/p}$, déterminés par différence finie entre le calcul perturbé et le calcul nominal.

La fonction **Propagation** de **MENDEL** est ensuite utilisée pour réaliser l'impression des matrices de sensibilités calculées avec **Perturbation**.

CYRUS / INCERD avec PEPIN2

Le précédent outil de calcul de l'incertitude, associé au formulaire DARWIN2 (Tsilanizara, 2000), est l'outil CYRUS (Benoit, 2012). Cet outil permet la propagation des incertitudes des

données nucléaires dans le code d'évolution déterministe **PEPIN2** via le module **INCERD** (Lahaye, 2018).

Il ne prend pas en compte, de la même façon que MENDEL, les incertitudes technologiques ou des conditions d'irradiations.

Les covariances utilisées sont issues de la matrice de variance et de covariance COMAC, qui couvre la plupart des actinides, des produits de fissions et des matériaux de structure contributeurs de la puissance résiduelle.

Limites

La méthode du calcul des incertitudes par sensibilité directe a l'avantage de se reposer sur une variation « physique » quantifiable : chaque paramètre modifié induit une perturbation mesurable de la grandeur. Cependant, cette méthode de calcul des incertitudes demande un grand nombre de calculs (autant que de paramètres à perturber). Il y a également une perte d'informations : lors des calculs des incertitudes, les matrices de variance et de covariance sont condensées à 1 groupe (Krivtchick, 2014). En effet, les calculs d'évolution sont réalisés à un groupe, et il en est de même avec les calculs de propagation réalisés par ces mêmes codes d'évolution.

Ces outils ne prennent pas en compte le couplage Boltzmann-Bateman : en effet, l'évolution (conduite avec le code MENDEL ou PEPIN2) utilise le même flux en entrée issue d'un code neutronique (APOLLO3® (Golfier, 2009) ou ERANOS (Ruggieri, 2006)).

2.2.3 Calcul par propagation statistique

Principe

La méthode de propagation statistique des incertitudes consiste à analyser la variation d'une grandeur par rapport aux variations de plusieurs paramètres, tirés aléatoirement et suivant les matrices de variance et de covariance (Figure 14).

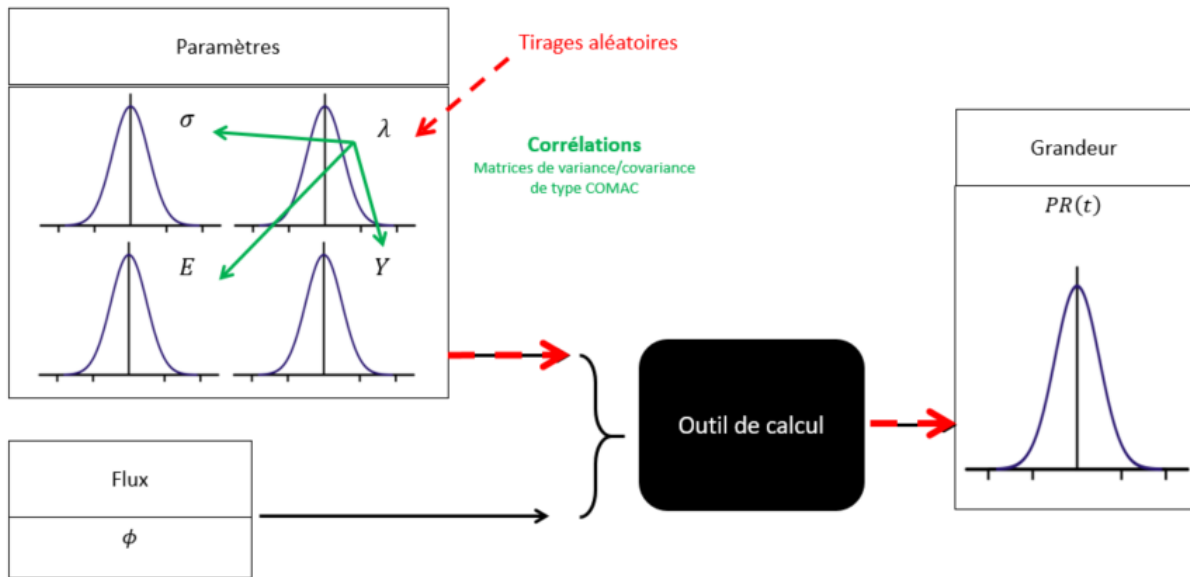


Figure 14 : Propagation statistique des incertitudes

C'est une méthode **statistique** qui repose sur un très grand nombre de tirage aléatoires. Elle permet d'obtenir en sortie la grandeur d'intérêt avec son écart-type, issu de l'incertitude des données nucléaires.

Outils de calcul de propagation statistique

Des codes de calculs, comme URANIE (Blanchard, 2018) permettent de modéliser les incertitudes et réaliser leur propagation, grâce à des **modèles numériques**.

Le but est d'approximer, à l'aide d'un méta-modèle statistique (Figure 15Figure 15), les réponses du code « physique ». En effet, l'utilisation d'un méta-modèle statistique permet de répondre à la problématique du coût élevé en simulations numérique des sensibilités directes du fait du grand nombre de paramètres d'entrées.

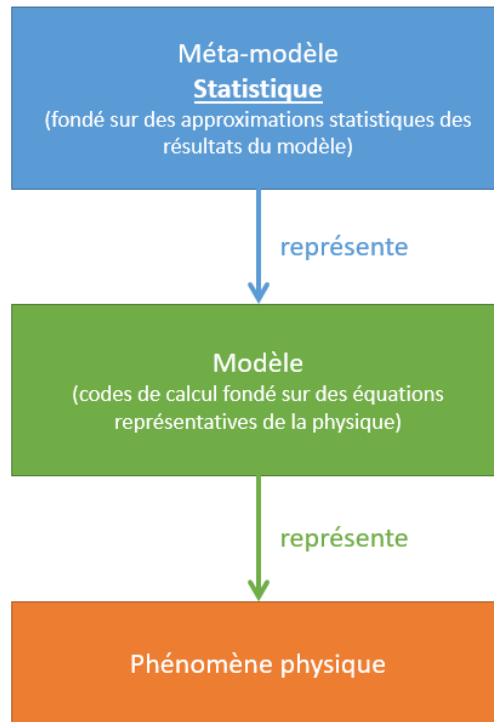


Figure 15 : Principe d'un méta-modèle

Limites

La méthode du calcul des incertitudes par propagation statistique est une méthode purement statistique, fondée sur des méta-modèles¹², et ne rend pas compte des équations de la physique.

Elle ne prend pas non plus en compte le couplage Boltzmann-Bateman.

2.2.4 Sensibilités couplées Boltzmann-Bateman

L'estimation des incertitudes devrait tenir compte du couplage « naturel » qui existe entre :

- L'évolution des noyaux (équations d'évolution de Bateman),
- La distribution neutronique (équation du transport de Boltzmann).

En effet, les concentrations, obtenues grâce aux équations d'évolution de Bateman, nécessitent la connaissance du flux ϕ , obtenu par l'équation de Boltzmann, lui-même dépendant des concentrations et des sections efficaces.

¹² Le méta-modèle est une fonction **statistique** représentative du code de calcul. Son temps d'évaluation est négligeable par rapport à celui du code, et il en approxime les réponses. Il permet de produire de nouvelles réponses dans le domaine de variation des paramètres incertains.

Ainsi, le calcul des sensibilités en évolution permet la prise en compte de ce couplage, on parle donc de **sensibilités couplées Boltzmann-Bateman**.

Le calcul de telles sensibilités repose sur une extension de la **théorie des perturbations**.

2.2.4.1 Aspects théoriques des sensibilités couplées

Le calcul de telles sensibilités nécessite l'introduction de multiplicateurs de Lagrange ($\Gamma^+, \Gamma, N^+, P^+$) qui sont des « images » des variables qui pilotent le couplage des équations.

L'évaluation des sensibilités **en évolution** peut s'écrire de la façon suivante (Equation Équation 15)) (Buiron, 2017) :

$$S(R, p) = \frac{1}{R} \left[\left\langle p \frac{\partial R}{\partial p} \right\rangle + \int \langle N^+ \left(\phi p \frac{\partial B}{\partial p} \right) N \rangle dt + \langle \Gamma^+ p \frac{\partial H}{\partial p} \phi \rangle + \langle \Gamma p \frac{\partial H^+}{\partial p} \phi^+ \rangle + P^+ \left\langle p \frac{\partial P}{\partial p} \right\rangle \right]$$

Équation 15 : Sensibilité en évolution

Avec :

$S(R, p)$ la sensibilité de la réponse R au paramètre p .

$\left\langle p \frac{\partial R}{\partial p} \right\rangle$ représente la sensibilité dite « de Boltzmann ». C'est cette sensibilité qui est obtenue par la théorie des perturbations appliquée à l'équation de Boltzmann.

$\int \langle N^+ \left(\phi p \frac{\partial B}{\partial p} \right) N \rangle dt$ représente l'apport de l'équation de Bateman dans le couplage.

$\langle \Gamma^+ p \frac{\partial H}{\partial p} \phi \rangle$ et $\langle \Gamma p \frac{\partial H^+}{\partial p} \phi^+ \rangle$ représentent les termes de flux directs et adjoints.

$P^+ \left\langle p \frac{\partial P}{\partial p} \right\rangle$ représente le terme de renormalisation en puissance nécessaire à chaque mise à jour du flux en évolution.

Le notation $\langle \rangle$ symbolise la sommation sur l'espace (variable r), l'angle (variable Ω) et l'énergie (variable E).

Le terme $\left\langle p \frac{\partial R}{\partial p} \right\rangle$, dit sensibilité « de Boltzmann »

Ce terme s'obtient par la théorie des perturbations ou par des calculs directs sur la base la seule équation de Boltzmann, donc indépendamment du temps. On pourrait l'écrire de façon simplifiée (en prenant en compte le facteur $\frac{1}{R}$) :

$$\frac{1}{R} \times \left\langle p \frac{\partial R}{\partial p} \right\rangle = \frac{\Delta R}{R} \times \frac{p}{\Delta p} = \frac{\frac{\Delta R}{R}}{\frac{\Delta p}{p}}$$

Équation 16 : Terme de Boltzmann

On retrouve une « sensibilité directe » (Équation 13)). Suivant le type de réponse R étudiée, la forme générique de la sensibilité utilise des intégrales de perturbations appliquées à l'opérateur de Boltzmann. Dans le cas des concentrations qui n'est pas une grandeur linéaire en flux ou flux adjoint (contrairement au cas d'un facteur de multiplication effectif ou d'un rapport de taux de réaction), cette sensibilité est nulle.

Le terme $\int \langle N^+ \left(\phi p \frac{\partial B}{\partial p} \right) N \rangle dt$, apport de l'équation de Bateman

Le terme B représente l'opérateur de Bateman, permettant la résolution de l'équation de Bateman de la forme :

$$\frac{\partial N}{\partial t} = BN$$

Équation 17 : Equation de Bateman directe

Avec N les concentrations directes, t le temps et B l'opérateur de Bateman.

Les multiplicateurs N^+ sont les **concentrations adjointes**, ce sont les images des concentrations directes N . Elles permettent la résolution de l'équation adjointe de Bateman :

$$\frac{\partial N^+}{\partial t} = -B^+ N^+$$

Équation 18 : Equation de Bateman adjointe

Avec B^+ l'opérateur adjoint de Bateman.

L'évolution des concentrations adjointes est faite à rebours de l'évolution des concentrations directes. Elle débute donc à la fin de l'évolution jusqu'au début de l'irradiation.

Les concentrations adjointes N^+ quantifient physiquement **l'importance des filiations isotopiques**.

Leur valeur « initiale », en fin d'évolution, s'écrit de la façon suivante :

$$N^+ = \frac{\partial R}{\partial N}$$

Équation 19 : Concentration adjointe initiale

Les termes de flux $\langle \Gamma^+ p \frac{\partial H}{\partial p} \phi \rangle$ et $\langle \Gamma p \frac{\partial H^+}{\partial p} \phi^+ \rangle$

Les termes de flux représentent l'impact des modifications du spectre neutroniques (flux directs ϕ et adjoints ϕ^+) au cours de l'évolution.

Avec Γ^+ et Γ des multiplicateurs de Lagrange, p le paramètre, H et H^+ les opérateurs de Boltzmann directs et adjoints, et ϕ et ϕ^+ les flux directs et adjoints.

$$H = A - \frac{F}{k}$$

Pour un système critique, avec A l'opérateur de disparition des neutrons, F l'opérateur d'apparition des neutrons et k le facteur de multiplication des neutrons. Dans le cas d'un système sous-critique, on a $H = A - F$.

*Équation 20 :
Opérateur de
Boltzmann direct*

$$H^+ = A^+ - \frac{F^+}{k}$$

*Équation 21 : Opérateur
de Boltzmann adjoint*

Les flux directs et adjoints sont les solutions des équations de Boltzmann directe et adjointe :

$$H\phi = S$$

(dans un système critique, la source est nulle ($S = 0$), dans un système sous-critique, il y a une source externe de neutrons qui alimente le système ($S \neq 0$)).

*Équation 22 : Equation
de Boltzmann directe*

$$H^+\phi^+ = 0$$

(que le système soit critique ou sous-critique, on ne considère que le cas où l'équation est homogène, sans source).

*Équation 23 : Equation
de Boltzmann adjointe*

Le **flux adjoint ϕ^+** quantifie physiquement **l'importance neutronique**.

On comprend par exemple qu'un neutron au centre du réacteur a une plus grande probabilité d'induire une fission qu'un neutron « en surface », qui lui a plus de chance de s'échapper. Le premier neutron au centre aura une plus grande « descendance » neutronique que le deuxième neutron, on peut donc considérer que du point de vue du fonctionnement du réacteur, il a une plus grande importance.

Cependant, il est impossible de compter les « descendants » d'un neutron dans un cas critique et encore plus dans un cas sur-critique. Dans un système sous-critique, tous les neutrons ont une descendance finie. Dans le cas critique, seule une petite fraction des neutrons a une descendance infinie : le flux adjoint d'un tel régime est la limite du flux adjoint sous-critique lorsque la réactivité tend vers zéro.

Le terme de renormalisation $P^+ \langle p \frac{\partial P}{\partial p} \rangle$

Ce terme représente l'impact de la normalisation du flux direct à la puissance du réacteur. En effet, une des contraintes sur le niveau de flux est de respecter la puissance prescrite par le réacteur. La contrainte de renormalisation peut s'écrire de la façon suivante :

$$\langle N \sigma^P \phi \rangle = P$$

Avec σ^P la « section efficace de puissance ».

Équation 24 : Contrainte de renormalisation à la puissance

2.2.4.2 Sensibilités couplées Boltzmann-Bateman « en pratique »

L'obtention de ces termes nécessite d'avoir accès, dans le code, à des fonctionnalités spécifiques. Cela nécessite d'avoir notamment accès à une **évolution adjointe** (Figure 16).

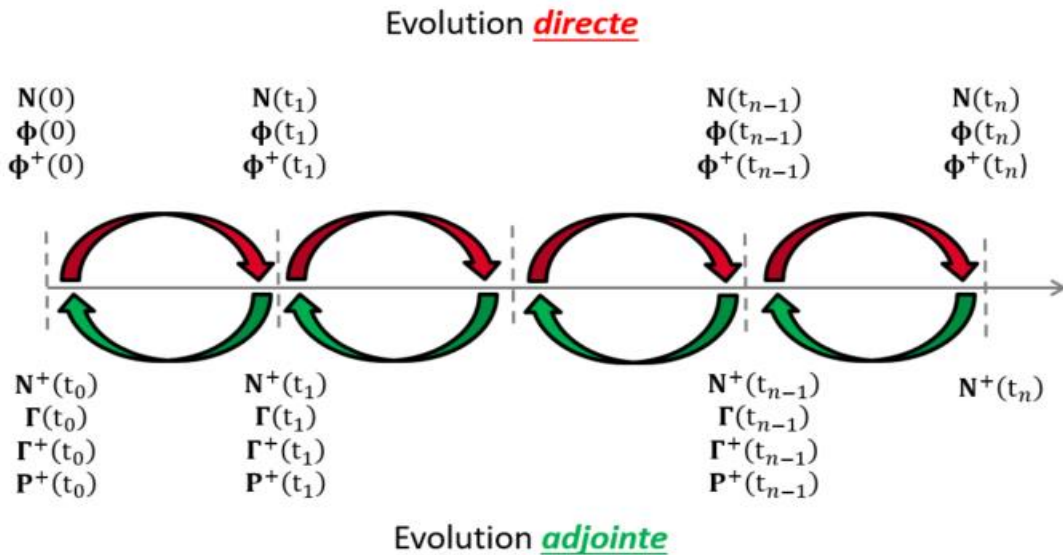


Figure 16 : Evolutions directe et adjointe

A chaque mise à jour du flux ϕ , il est nécessaire de recalculer les termes venant de la renormalisation à la puissance (P^+), le flux adjoint (ϕ^+), ainsi que les multiplicateurs de Lagrange. Ces calculs sont analogues à des **calculs d'importance** (Figure 17) (le flux adjoint ϕ^+ étant représentatif de l'importance neutronique, et les concentrations adjointes N^+ de l'importance des filiations isotopiques).

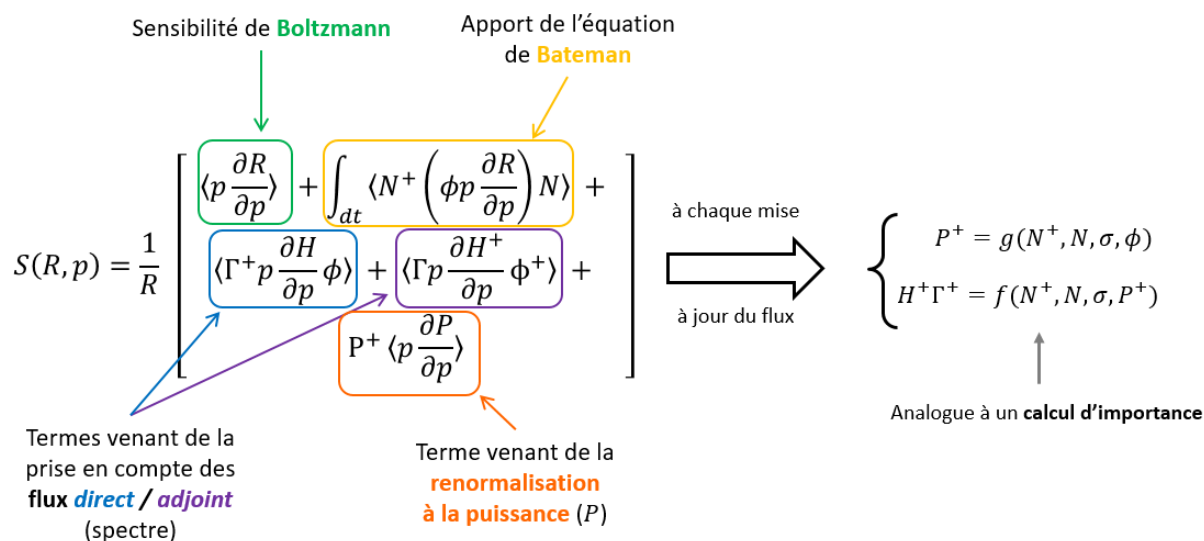


Figure 17 : Sensibilités couplées Boltzmann-Bateman

Ces outils permettant l'obtention des sensibilités couplées Boltzmann-Bateman ne sont pas tous disponibles dans les codes de calcul actuels. Seul le premier additionnel terme des sensibilités couplées Boltzmann-Bateman, dit « sensibilité de Bateman », est généralement calculé par les outils disponibles. Il consiste à ne prendre en compte que l'effet de la dépendance des sections sur les concentrations finales, les flux successifs utilisés dans le processus dévolution restant inchangés.

La prise en compte de l'ensemble des termes des sensibilités couplées Boltzmann-Bateman permettrait de corréliser des isotopes très éloignés entre eux, i.e. qui sont reliés par un nombre relativement important de réactions, et notamment à ceux qui sont important pour le fonctionnement d'un réacteur (pour piloter sa puissance et la réactivité) comme l'uranium 238 et le plutonium 239.

L'exemple ci-dessous¹³ (Tableau 2) montre la sensibilité de la concentration finale du curium 244 aux réactions d'autres isotopes, dans le cas où seul le premier terme est considéré, i.e. la sensibilité de Bateman (par calcul de la sensibilité directe), ou lorsque l'ensemble des termes des sensibilités couplées Boltzmann-Bateman sont considérés.

Sensibilité du ²⁴⁴ Cm (à 40 GWj/t)	<u>Sensibilité directe</u> (Sensibilité de Bateman = 1 ^{er} terme additionnel des sensibilités couplées Boltzmann-Bateman)	<u>Sensibilités couplées Boltzmann- Bateman</u> (prise en compte de l'ensemble des termes)
--	--	--

¹³ Sur une cellule SFR à combustible métallique UPuZr (benchmark NEA-UAM) après 40GWj/t (Zu, 2016)

	Capture	Fission	Capture	Fission
^{235}U	~ 0	~ 0	-0.053	-1.489
^{238}U	~ 0	~ 0	-0.389	-0.175
^{239}Pu	-0.003	~ 0	-0.007	-0.317
^{242}Pu	+0.900	-0.012	+0.901	-0.012
^{243}Am	+0.875	-0.008	+0.874	-0.012
^{244}Cm	-0.037	-0.022	-0.037	-0.022

Tableau 2 : Impact de la prise en compte de l'ensemble des termes des sensibilités couplées Boltzmann-Bateman

On remarque qu'en prenant en compte l'ensemble des termes des sensibilités couplées Boltzmann-Bateman, le curium 244 devient sensible aux réactions de ses « grands-parents » et aux isotopes essentiels au pilotage du réacteur (pour piloter sa puissance et la réactivité), comme les uraniums 235 et 238 ou le plutonium 239.

2.2.5 Sensibilités considérées

Les outils de calculs des sensibilités couplées Boltzmann-Bateman ne sont pas disponibles dans l'ensemble des codes actuels. Cependant, dans la suite de la thèse, nous calculons par le biais des sensibilités directes, avec le code d'évolution MENDEL, qui permet d'avoir accès au premier terme additionnel des sensibilités couplées Boltzmann-Bateman, soit la **sensibilité de Bateman**. Comme on s'intéressera à des grandeurs neutroniques uniquement fonction des concentrations en fin d'irradiation, le terme associé à l'équation de Boltzmann n'est pas à considérer ici car identiquement nul pour ces grandeurs.

Grâce à ces calculs, on peut obtenir les incertitudes des rapports isotopiques et des rapports calculs / expérience, dont la méthodologie est présentée en Annexe B.

3.CHAPITRE 3 :

INTERPRETATION D'EXPERIENCES D'IRRADIATION DANS PHENIX AVEC LE NOUVEL OUTIL DE CALCUL SCIENTIFIQUE DARWIN3

3.1 ANALYSE DES BILANS MATIERES SUITE AUX EXPERIENCES D'IRRADIATIONS D'AIGUILLES

3.1.1 Intérêt de l'analyse des bilans-matière

Comme nous l'avons vu en introduction, les expériences de mesure de la puissance résiduelle dépendent de nombreux paramètres et sont complexes à analyser. Nous allons donc nous concentrer dans un premier temps sur des expériences plus analytiques, permettant dans un premier temps de **valider le formulaire DARWIN3 pour le calcul des bilans-matière**.

Ces expériences plus « analytiques » sont des irradiations d'aiguilles en réacteur: l'expérience TRAPU dans le cœur interne et l'expérience DOUBLON dans la couverture fertile de PHENIX. Elles peuvent nous permettre de mettre en évidence d'éventuels biais de calcul, notamment les approximations de modélisation et l'impact de l'historique d'irradiation.

Le calcul de la puissance résiduelle repose en effet sur l'équation ci-dessous (Equation Équation 25)) et nécessite la **connaissance des concentrations** de tous les noyaux i du bilan-matière final :

$$PR(t) = \sum_i N_i(t) \lambda_i E_i$$

*Équation 25 : Calcul de la
Puissance Résiduelle*

Avec $PR(t)$ la puissance résiduelle à l'instant t , $N_i(t)$ la concentration du noyau i à l'instant t , λ_i sa constante de décroissance et E_i son énergie moyenne de décroissance (alpha, beta, gamma).

Le calcul de la puissance résiduelle nécessite donc la connaissance des **bilans-matière** $N_i(t)$, c'est-à-dire des concentrations de chaque isotope en fin d'irradiation.

Ces expériences sont ainsi complémentaires des expériences de mesure de la puissance résiduelle. En effet, dans les expériences TRAPU et DOUBLON, seuls les noyaux lourds sont analysés. Ils sont importants pour la puissance résiduelle essentiellement aux temps longs (quelques années).

3.1.2 Estimation du niveau de flux

Estimation du niveau de flux par un indicateur de fluence

Sous irradiation, les concentrations dépendent du **flux neutronique** établi dans le réacteur, à la fois de sa norme mais aussi de son spectre énergétique. Il est ainsi nécessaire de s'assurer que le niveau de flux est identique dans l'expérience et dans la modélisation du calcul pour pouvoir ensuite comparer les bilans matières calculés et mesurés.

Or le flux n'est pas accessible directement à la mesure dans ce type d'expérience, contrairement aux taux de réactions. En effet, les mesures effectuées par les collectrons, sont des mesures indirectes : elles correspondent à l'ionisation d'un matériau inerte (type cobalt, vanadium, etc.) avec une mesure du courant associé. Cependant, dans le cas des spectres rapides, les signaux des collectrons se retrouvent pollués par les ionisations issues des rayonnements gamma. Il n'est en effet pas possible de discriminer les ionisations résultant des rayonnements gamma de celles issues des neutrons.

Ainsi, pour rendre compte du niveau de flux dans le réacteur, on se fie à un **indicateur de fluence**. L'indicateur de fluence habituellement utilisé est le rapport isotopique du néodyme 148 sur l'uranium 238.

Le néodyme 148 est un isotope produit par la fission des noyaux lourds – principalement le plutonium 239 dans notre cas – et linéairement avec le taux de combustion¹⁴. Son taux de production est en effet directement proportionnel au taux de fission, et donc au flux – aux effets d'autoprotection près.

En effet, les taux de réactions sont liés au flux neutronique par la relation suivante :

¹⁴ Le taux de combustion ou « burnup » mesure la fraction du combustible nucléaire qui est consommée pour produire de l'énergie. Il s'exprime en de pourcentage d'atomes ayant subi une fission nucléaire, ou en énergie fournie (en mégawatt-jour par tonne (MWj/t)).

$$\tau = N\sigma\phi$$

Équation 26 : Relation entre le taux de réaction et le flux

Avec τ le taux de réaction, σ la section efficace et ϕ le flux neutronique.

Le **rapport isotopique** $^{148}\text{Nd} / ^{238}\text{U}$ permet ainsi de rendre compte du **niveau de flux** dans le réacteur.

Notion de recalage en fluence

Lors de la modélisation du calcul d'évolution d'un réacteur, le flux de neutrons ne peut pas être utilisé comme donnée d'entrée, car c'est une quantité à laquelle nous n'avons pas accès. En particulier, la connaissance fine du flux nécessiterait d'avoir accès à une connaissance fine de la puissance locale, or nous avons uniquement accès à des **puissances globales**, qui reflètent le niveau de flux moyen dans le réacteur. Cependant, ces puissances globales dépendent d'estimations fournies par les thermocouples, souvent entachées d'incertitudes, ainsi, la puissance « réelle » de fonctionnement est une donnée difficilement accessible.

Ainsi, comme le rapport isotopique $^{148}\text{Nd} / ^{238}\text{U}$ permet de rendre compte indirectement du niveau de fluence locale dans le réacteur, une méthode itérative de **recalage en fluence** est mise en œuvre afin de s'affranchir des biais (de détermination de la puissance ou du niveau de flux).

Le rapport isotopique de l'indicateur de fluence ($^{148}\text{Nd} / ^{238}\text{U}$) calculé est comparé à celui de l'expérience (C/E). Ce rapport calcul / expérience (C/E) permet de comparer le niveau de flux de l'expérience à celui obtenu par le calcul ; ainsi, si le C/E vaut 1, cela signifie que le niveau de flux calculé et le niveau de flux réel (mesuré) sont identiques (Annexe D).

Dans le cas contraire, si le C/E est différent de 1, il nous permet de déduire un **facteur de renormalisation de la puissance** ou **facteur de recalage**. Le calcul d'évolution pourra alors être réitéré en ajustant les données d'entrée (la puissance).

Cela permet de s'affranchir de l'incertitude de la connaissance du niveau de flux pour l'analyse des bilans-matière. Pour les expériences de mesure de la puissance résiduelle, effectuer un recalage nécessiterait à la fois l'analyse des bilans-matière combinée à celle de la puissance résiduelle, or nous ne disposons pas de ce type d'expériences.

Ce processus de recalage est considéré comme étant « best estimate », c'est-à-dire que les incertitudes des valeurs expérimentale et calculée du rapport $^{148}\text{Nd} / ^{238}\text{U}$ ne sont pas propagées.

Cette méthodologie pourrait néanmoins être questionnée, mais ne sera pas traitée dans le cadre de cette thèse.

3.1.3 Démarche d'analyse des bilans matière

Dans l'objectif d'estimer les biais de calcul de DARWIN3, nous allons utiliser les outils à notre disposition pour analyser les expériences d'irradiation disponibles et comparer les résultats des codes de calcul entre eux, mais aussi avec les résultats expérimentaux. Plusieurs modélisations seront testées avec DARWIN3, afin de pouvoir comparer les résultats obtenus à ceux des formulaires TRIPOLI-4® et DARWIN2.

Le tableau ci-dessous (Tableau 3) rappelle les caractéristiques des formulaires d'évolution.

Formulaire	formulaire neutronique	module d'évolution
DARWIN2	ERANOS2	PEPIN2
TRIPOLI-4®	TRIPOLI-4®	Module MENDEL (inclus dans TRIPOLI-4®)
DARWIN3	APOLLO3®	MENDEL

Tableau 3 : Caractéristiques des formulaires d'évolution

3.2 LES EXPERIENCES D'IRRADIATIONS D'AIGUILLES DANS PHENIX

3.2.1 Le réacteur PHENIX

Le réacteur PHENIX (Figure 18) est un réacteur à neutrons rapides refroidis au sodium (RNR-Na), d'une puissance de 563 MW thermiques, réduite à 350 MW thermiques en 1993. C'est un réacteur de recherche français qui est situé sur le site du CEA de Marcoule, dans la vallée du Rhône, et qui a fonctionné de 1974 à 2010.

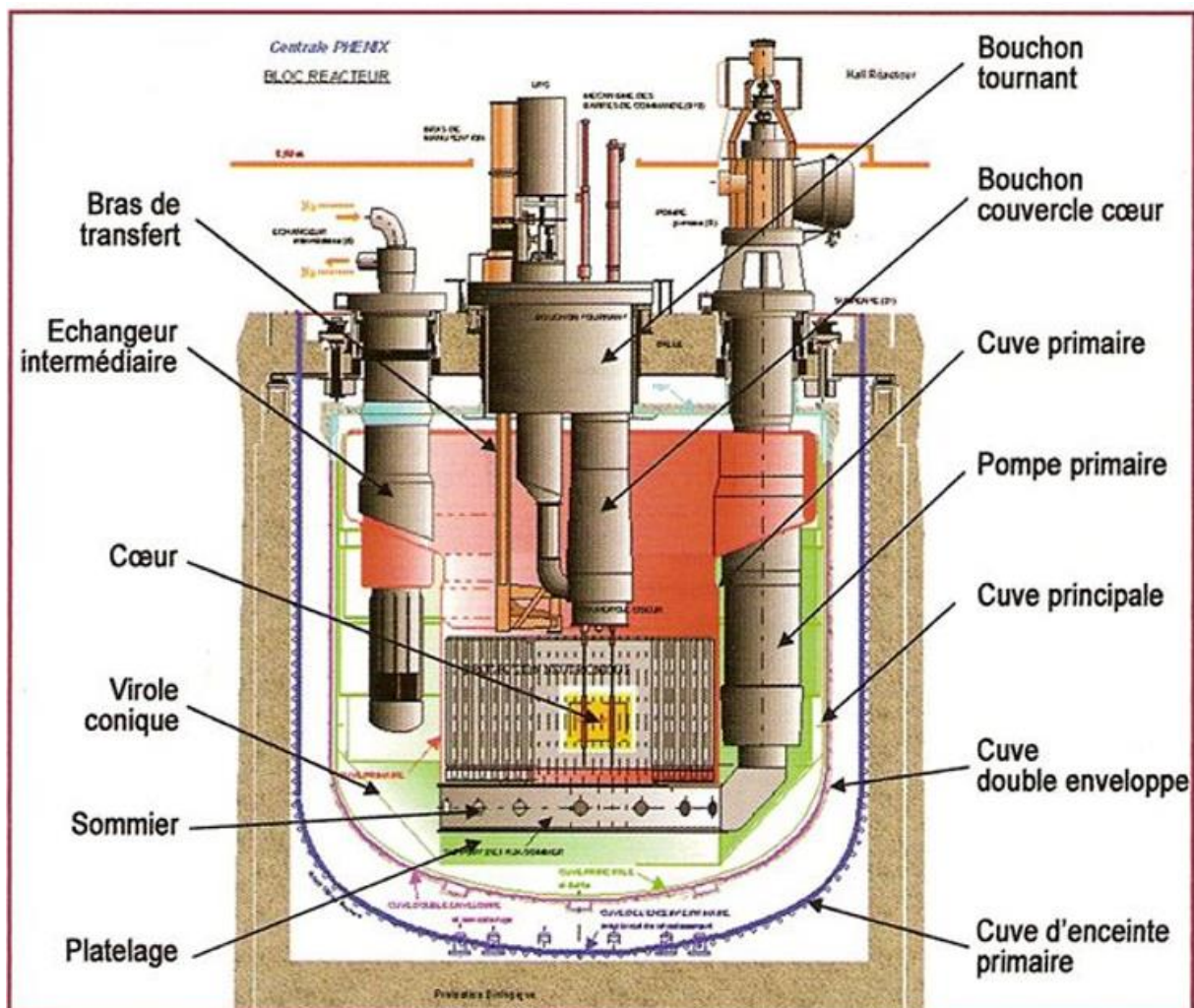


Figure 18 : Le bloc réacteur de Phénix (Image, 3)

Son cœur est composé d'assemblages hexagonaux dont la structure est en acier. La partie centrale du cœur de Phénix est composé du **cœur interne et externe**. Ce sont des assemblages

contenant de la matière fissile en position radiale, différenciée en deux zones car leur teneur en plutonium et leur composition varie.

Au-dessus et au-dessous de cette zone fissile, se situent des **couvertures axiales** supérieure et inférieure de combustible fertile, dont le but est de convertir l'uranium en plutonium.

On retrouve également des **chambres d'expansion**, des **zones de transitions en sodium**, ainsi qu'une **protection neutronique supérieure** afin de diminuer le flux neutronique en partie supérieure et inférieure du cœur pour protéger les structures axiales du cœur (bouchon rotatif, sommier).

Autour, se situe une partie composée d'assemblages de matière fertile, que l'on appelle la **couverture fertile**, dont le but est le même que celui des couvertures axiales.

Enfin, autour de ces assemblages, se situent des couronnes de **protections neutroniques latérales**, constituées d'assemblages hexagonaux composés d'acier, de sodium, de graphite, dont le but est de diminuer le flux neutronique et de protéger les éléments de la cuve.

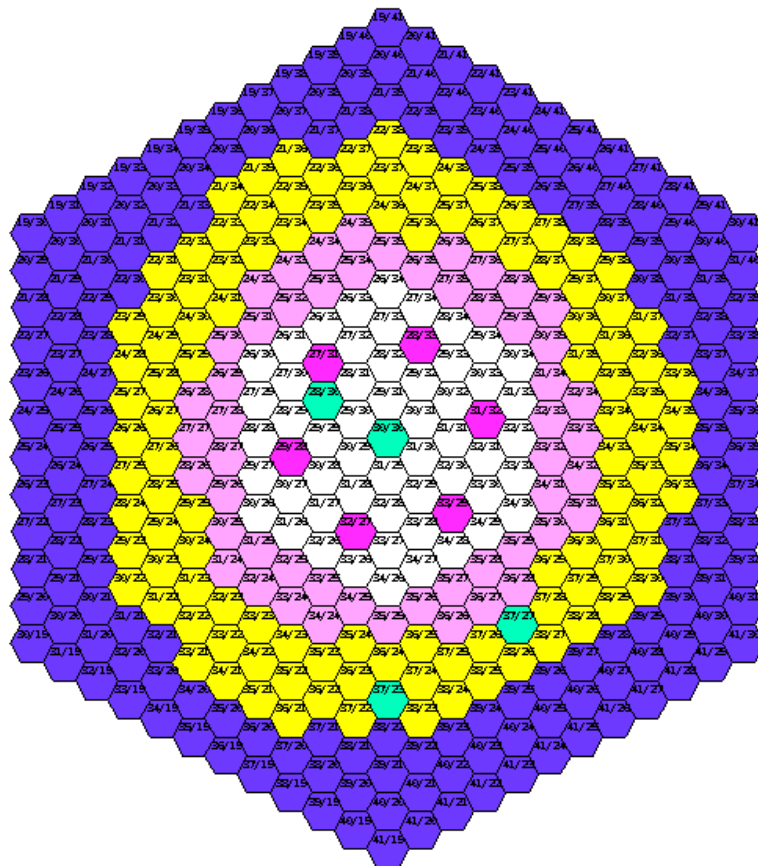


Figure 19 : Schéma du cœur Phénix (au cycle 20) : coupe radiale

Sur la Figure 19 ci-dessus, nous pouvons voir un schéma du cœur du phénix au cycle 20. Il s'agit d'une coupe radiale en position centrale. Nous pouvons voir le cœur interne (en blanc), le cœur externe (en rose pâle), la couverture fertile (en jaune), ainsi que les protections neutroniques latérales (en violet) et les barres de contrôles (en magenta). D'autres assemblages d'intérêt sont également représentés (en cyan) : l'assemblage central, l'assemblage TRAPU dans le cœur interne, et les deux assemblages de DOUBLON en couverture fertile.

3.2.2 L'expérience TRAPU

La validation du calcul du bilan matière dans le cœur interne est basée sur l'expérience TRAPU (*TRAnsmutation du Plutonium (PU)*), ayant eu lieu dans PHENIX, dans le cœur interne entre 1977 et 1979.

Celle-ci était destinée à valider les codes d'évolution pour la formation des actinides secondaires de la filière rapide, à valider les bibliothèques de données nucléaire et à déterminer le gain de régénération (rapport de la quantité de ^{239}Pu produite sur la quantité de ^{239}Pu fissionnée ou transmutée) (Benoit, 2012).

L'assemblage TRAPU, en position 18-20 dans le cœur Phénix, a été irradié pendant 6 cycles, du 10^{ème} au 15^{ème}, du 31 janvier 1977 au 19 mars 1979.

Les aiguilles combustibles irradiées puis analysées présentent trois compositions différentes de plutonium (Figure 20 et Tableau 4), le reste des aiguilles présentent quant à elles les mêmes caractéristiques que les aiguilles fissiles standards. Elles sont restées dans le cœur pendant 649 jours, dont 440 sous irradiation, soit pendant 364,5 JEPP¹⁵.

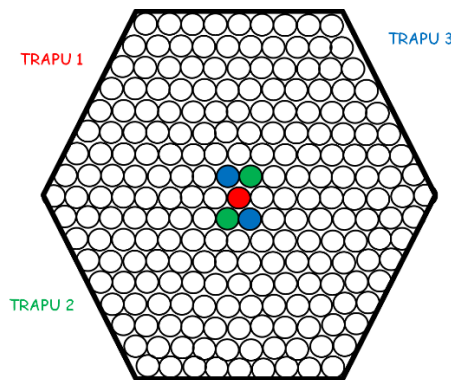


Figure 20 : Position des aiguilles analysées de l'expérience TRAPU dans l'assemblage 18-20

¹⁵ Jour Équivalent Pleine Puissance

Les compositions du plutonium de TRAPU-1, TRAPU-2 et TRAPU-3 (Tableau 4) sont représentatives respectivement :

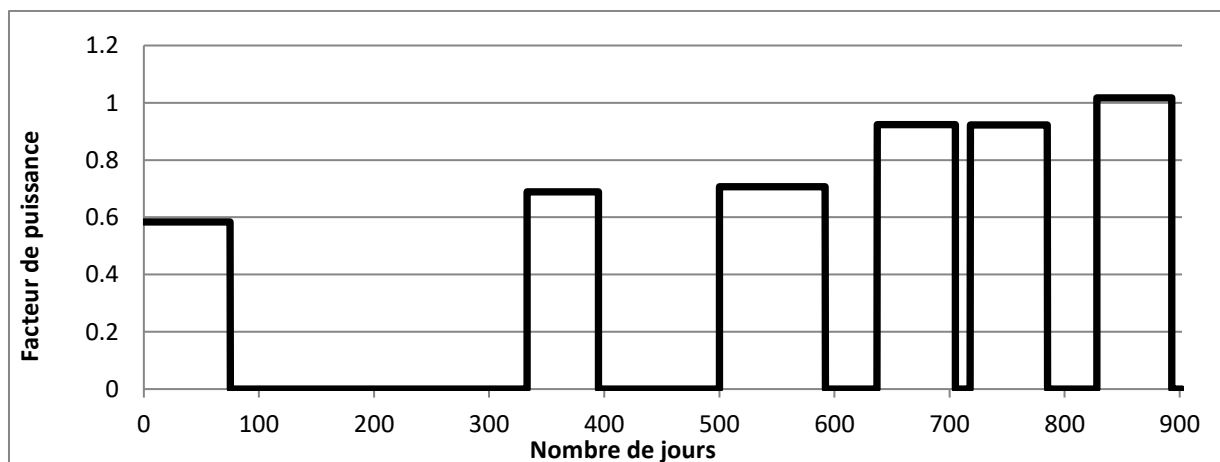
- de l'isotopie du plutonium provenant d'un assemblage usé de type UNGG (Uranium Naturel Graphite Gaz),
- de l'isotopie du plutonium provenant d'un assemblage usé de type MOX,
- d'une aiguille chargée en ^{240}Pu .

Ces aiguilles fournissent autant de puissance d'une aiguille standard grâce à un ajustement de la teneur en plutonium.

Type	^{238}Pu	^{239}Pu	^{240}Pu	^{241}Pu	^{242}Pu	$\frac{\text{PuO}_2}{(\text{U, Pu})\text{O}_2}$ (% <i>en masse</i>)
TRAPU-1 (Pu UNGG)	0.12	73.26	21.92	3.99	0.71	19.60
TRAPU-2 (Pu H2O)	0.77	71.37	18.54	7.42	1.90	19.25
TRAPU-3 (Pu chargé en ^{240}Pu)	0.22	33.97	49.40	10.03	6.38	28.04

Tableau 4 : Compositions du plutonium des aiguilles TRAPU

Le graphique ci-dessous (Graphique 3) présente l'historique d'irradiation des cycles 10 à 15 pendant lesquels les aiguilles TRAPU ont été irradiées.



Graphique 3 : Historique d'irradiation de l'expérience TRAPU

Une fois l'expérience terminée, des échantillons d'environ 10mm ont été prélevés à 20mm en-dessous plan médian cœur car le flux y est maximum. Ils ont par la suite été dissous et analysés par spectrométrie de masse, alpha ou gamma (Tableau 5). La mesure du bilan-matière final se fait par le biais de la mesure des rapports isotopiques suivants : $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$, $^{235}\text{U}/^{238}\text{U}$, $^{236}\text{U}/^{238}\text{U}$, $^{239}\text{Pu}/^{238}\text{U}$, $^{238}\text{Pu}/^{239}\text{Pu}$, $^{240}\text{Pu}/^{239}\text{Pu}$, $^{241}\text{Pu}/^{239}\text{Pu}$, $^{242}\text{Pu}/^{239}\text{Pu}$, $^{237}\text{Np}/^{238}\text{U}$, $^{241}\text{Am}/^{239}\text{Pu}$, $^{242\text{m}}\text{Am}/^{241}\text{Am}$, $^{243}\text{Am}/^{241}\text{Am}$, $^{244}\text{Cm}/^{239}\text{Pu}$, $^{242}\text{Cm}/^{244}\text{Cm}$, $^{243}\text{Cm}/^{244}\text{Cm}$, $^{245}\text{Cm}/^{244}\text{Cm}$ et $^{148}\text{Nd}/^{238}\text{U}$.

Technique mise en œuvre	Noyaux analysés
Spectrométrie de masse (avec ou sans dilution isotopique)	Isotopes de l'uranium, du plutonium, du néodyme, de l'américium et du curium. Isotopes du césium, du lithium et du bore.
Spectrométrie alpha	Ratios : $^{244}\text{Cm}/^{239}\text{Pu}$, $^{237}\text{Np}/^{238}\text{U}$, isotopes du curium
Spectrométrie gamma	Produits de fission et d'activation de la gaine

Tableau 5 : Techniques utilisées pour les différentes analyses (Benoit, 2012)

La teneur en néodyme 148 d'un combustible irradié permet d'avoir accès à une estimation du taux de combustion atteint : il permet d'effectuer un **recalage** en fluence.

3.2.3 L'expérience DOUBLON

La validation du calcul du bilan matière dans la couverture fertile est basée sur l'expérience DOUBLON qui a eu lieu dans le réacteur PHÉNIX entre 1979 et 1981, pendant les cycles 13 à 24. Elle concerne deux assemblages : FEF79 et FEG58. Ces deux assemblages ont été irradiés à des positions différentes, mais aussi durant des cycles différents du réacteur.

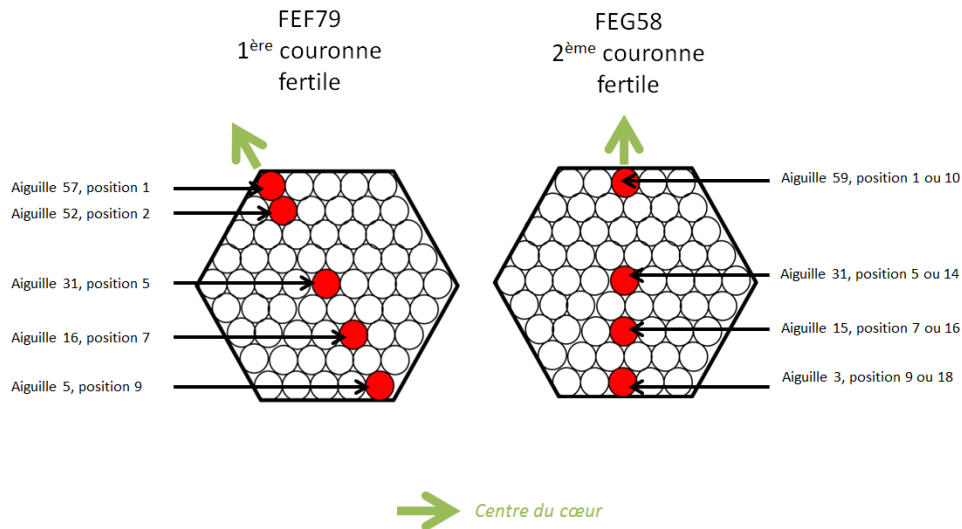
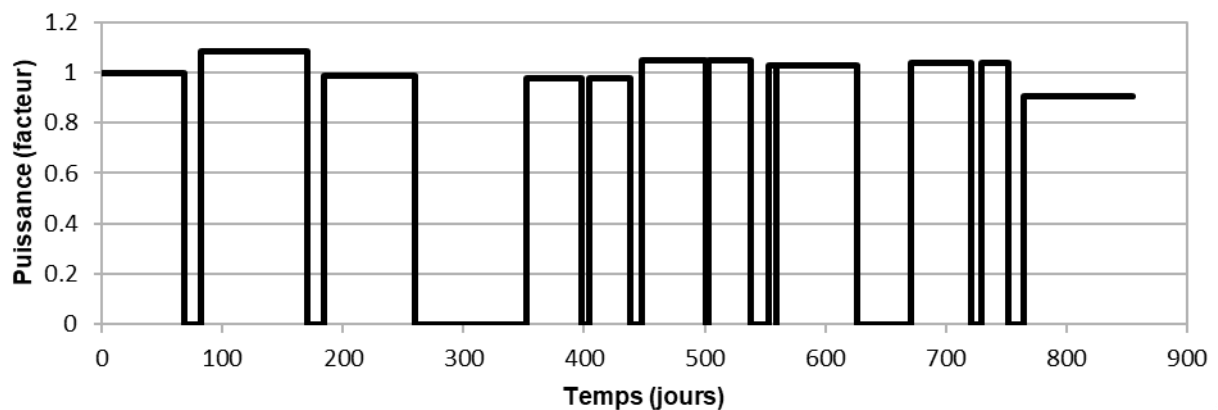


Figure 21 : Schéma des positions des aiguilles analysées dans DOUBLON

- L'assemblage **FEF79** est un assemblage de la première couronne fertile. Il été irradié en position 27-17 pendant les cycles 17 à 24, du 9 juillet 1979 au 23 novembre 1981, pendant l'équivalent de 639,6 JEPP. L'historique d'irradiation est présenté sur le Graphique 4.

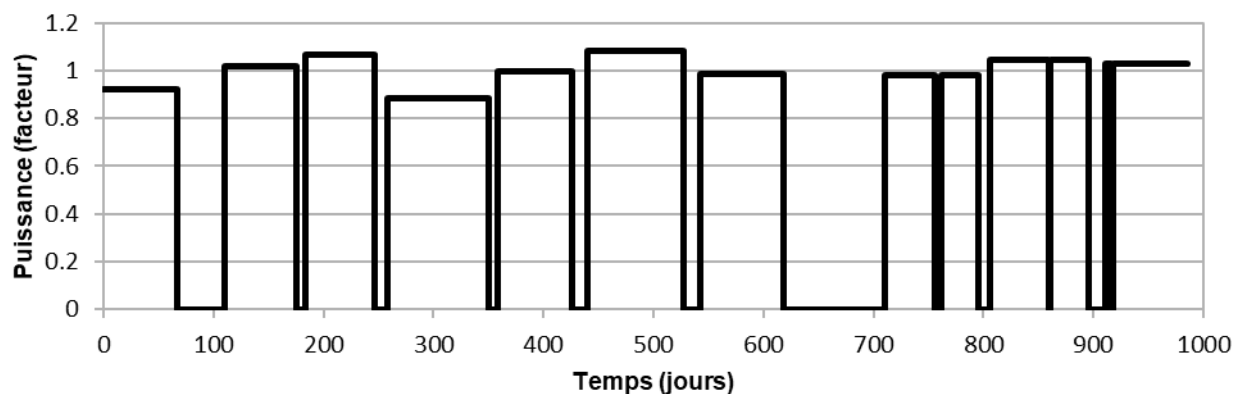
Cinq aiguilles ont été analysées : les aiguilles 57, 52, 31, 16, 5 en s'éloignant du centre du réacteur, que l'on notera 1, 2, 5, 7 et 9 par soucis de facilité (Figure 21). Leur teneur en uranium 235 est de 0,44%.



Graphique 4 : Historique d'irradiation de l'assemblage FEF79

- L'assemblage **FEG58** quant à lui se situe dans la deuxième couronne fertile. Il a été irradié en position 27-13 pendant les cycles 13 à 22, du 11 juillet 1978 au 5 avril 1981, pendant l'équivalent de 758,5 JEPP. L'historique d'irradiation est présenté sur le Graphique 5.

Quatre aiguilles ont été analysées : les aiguilles 59, 31, 15, 3 en s'éloignant du centre du cœur, que l'on notera 1, 5, 7 et 9 (ou 10, 14, 16, 18) par soucis de facilité (Figure 21). Leur teneur en uranium 235 est de 0,47%.



Graphique 5 : Historique d'irradiation de l'assemblage FEG58

Pour chaque aiguille analyse, plusieurs prélèvements sont réalisés et analysés. Les échantillons d'analyses mesurent 20mm de haut et sont issus de différentes localisations : au plan médian cœur¹⁶, en position basse et très basse, et en position haute.

Après découpage et dissolution des échantillons, ces derniers sont analysés. La mesure du bilan-matière final se fait par le biais de la mesure des rapports isotopiques suivants : $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$, $^{235}\text{U}/^{238}\text{U}$, $^{236}\text{U}/^{238}\text{U}$, $^{239}\text{Pu}/^{238}\text{U}$, $^{238}\text{Pu}/^{239}\text{Pu}$, $^{240}\text{Pu}/^{239}\text{Pu}$, $^{241}\text{Pu}/^{239}\text{Pu}$, $^{242}\text{Pu}/^{239}\text{Pu}$ et $^{148}\text{Nd}/^{238}\text{U}$

¹⁶ Seuls les échantillons du plan médian cœur sont analysés au cours de cette thèse.

3.3 DESCRIPTION GEOMETRIQUE ET MODELISATION

3.3.1 Hypothèses

Au cours de son fonctionnement, le cœur du réacteur PHÉNIX a subi plusieurs changements : les assemblages peuvent être déplacés au cours de l'irradiation, certains assemblages rechargés à des positions différentes.

Cependant, si nous disposons des plans de chargements du cœur par le biais des rapports de cycles, nous ne disposons pas des outils de calcul pour modifier aisément le plan de chargement en cours d'irradiation avec les OCS (Outils de Calcul Scientifique) actuels. Ainsi, ces plans de chargement sont **difficilement exploitables**.

De plus, nous ne disposons pas des **outils de gestion des histoires des assemblages** : ces outils ont été développés, mais retracent des informations à partir du cycle 35, soit plusieurs cycles après les expériences TRAPU et DOUBLON (une vingtaine de cycles après l'expérience TRAPU et une dizaine après l'expérience DOUBLON).

Nous faisons ainsi les hypothèses suivantes, en nous reposant sur des données les plus fiables possibles :

- Un **plan de chargement moyen** du cœur est utilisé pour toute la durée d'irradiation.
- Des **bilans matières moyens** sont utilisés.
 - Pour les milieux fissiles et les fertiles radiaux, nous disposons d'une précision couronne par couronne (combustibles internes des couronnes 0 à 4, combustible externe des couronnes 5 et 6, fertiles radiaux des couronnes 6, 7 et 8).
 - Pour les milieux fertiles axiaux, nous disposons uniquement de concentrations moyennes selon leur nature (fertile axial interne et externe).

Ces hypothèses impliquent une approximation concernant le flux local, puisque ce dernier est dépendant des concentrations isotopiques et donc du plan de chargement. La connaissance du flux local est une étape critique pour la connaissance des bilans matières en évolution.

Cependant, on peut considérer en première approximation que le cœur de PHÉNIX est à l'équilibre pour l'ensemble des cycles pris en compte dans cette étude, comme en atteste les teneurs constantes en plutonium au chargement pendant ce laps de temps.

Les interprétations précédentes se sont également basées sur des bilans matières moyennés pour chaque début de cycle intervenant dans les phases d'irradiation concernées. Faute de mieux, cette hypothèse est ici reprise à minima. Le fait de recharger des assemblages en cours d'irradiation est dépendant des possibilités offertes par les codes utilisés.

3.3.2 Modélisation avec TRIPOLI-4®

Un premier calcul est réalisé avec le code stochastique TRIPOLI-4®. L'intérêt de ce calcul stochastique est de pouvoir proposer une **modélisation géométrique aussi précise** que possible et dans laquelle il n'y a **pas d'approximation de modèle**. Fondé uniquement sur des lois de probabilités et sans approximations, les codes stochastiques sont, de ce fait, considérés comme une référence. Cependant, un des challenges des calculs stochastiques en évolution est de conserver des temps de calcul raisonnables. En effet, malgré des possibilités très poussées permettant d'atteindre une très grande précision de modélisation, les temps de calculs nécessaires à ce type de modélisation deviennent prohibitifs. Il faut donc trouver un juste **compromis** entre une description suffisamment précise et des temps de calculs raisonnables¹⁷.

La description du cœur de PHENIX repose sur une modélisation que l'on qualifiera de « semi-hétérogène » (Figure 22).

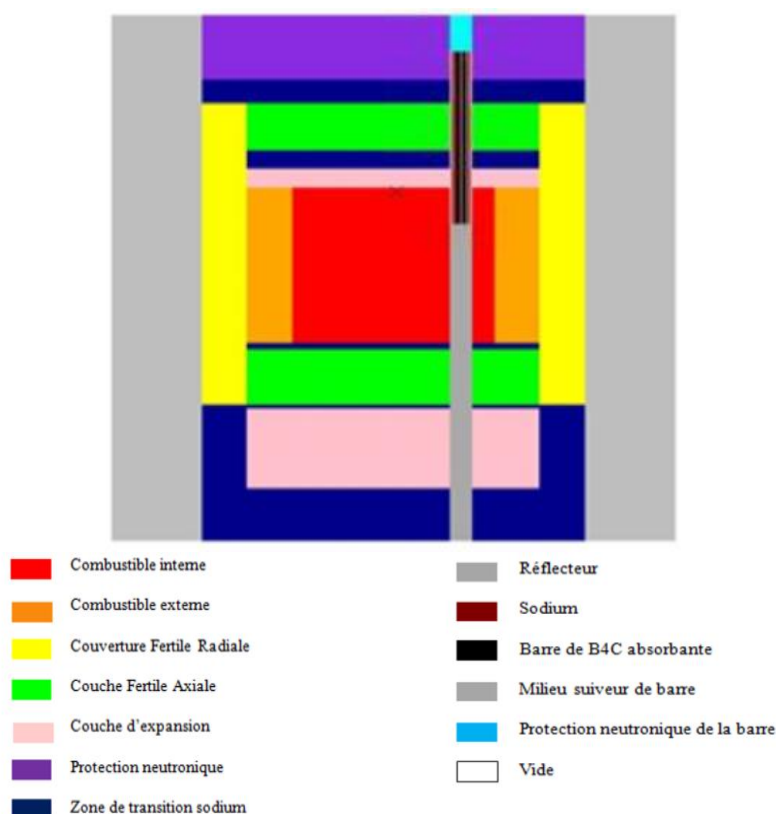


Figure 22 : Modélisation semi-hétérogène de PHENIX avec TRIPOLI-4®

Seuls les assemblages TRAPU et DOUBLON sont décrits de façon hétérogène dans leur zone axiale d'intérêt (respectivement dans la zone fissile et fertile) (Figure 23).

¹⁷ Les calculs TRIPOLI-4® sont réalisés avec 5000 « paquets » (*batches*) de 5000 particules (ici des neutrons), sur 42 répliques.

Concernant l'évolution, seule les zones échantillonnées et analysées sont considérées évolutives (le reste du cœur est considéré « statique », c'est-à-dire que ses concentrations n'évoluent pas).

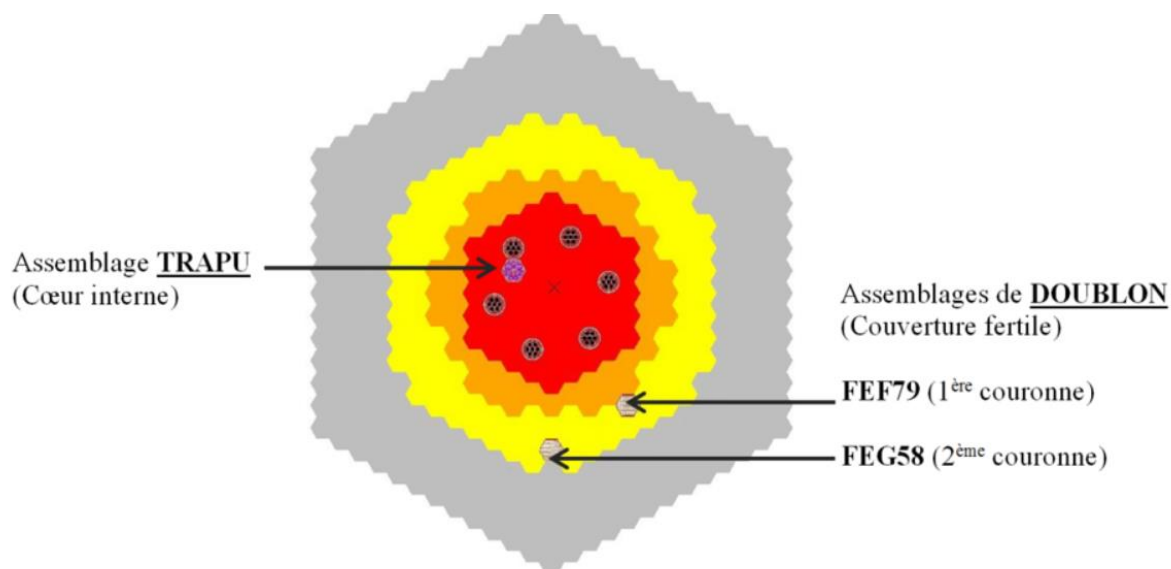


Figure 23: Position des assemblages TRAPU et DOUBLON dans le réacteur PHENIX

Le tableau suivant (Tableau 6) rappelle l'ensemble des hypothèses de la modélisation avec TRIPOLI-4® :

Géométrie	Semi-hétérogène
Evolution possible	Aiguilles d'intérêt
Plan de chargement	Constant

Tableau 6 : Hypothèses de modélisation TRIPOLI-4®

(Pour davantage d'informations sur la modélisation avec TRIPOLI-4®, se référer à l'Annexe C.1.)

3.3.3 Modélisation avec DARWIN3

La modélisation réalisée avec le code neutronique déterministe du formulaire DARWIN3, APOLLO3®, est également **semi-hétérogène** (Figure 24).

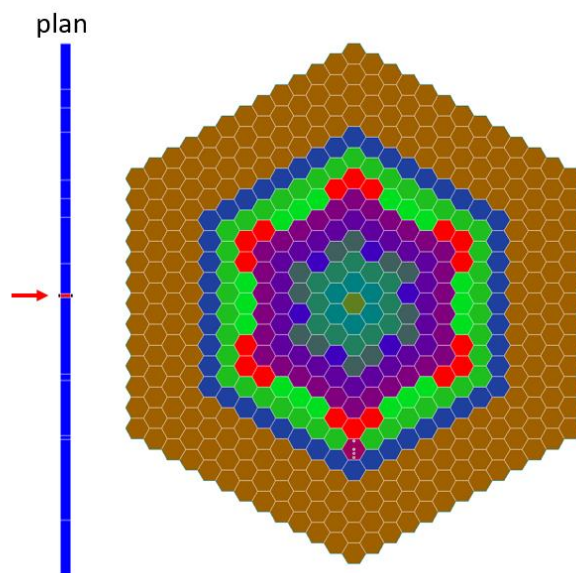


Figure 24 : Modélisation semi-hétérogène avec APOLLO3®

Le calcul en deux étapes des codes déterministes comme APOLLO3® permet de mettre à profit les **géométries non structurées** disponibles dans APOLLO3®. On peut ainsi modéliser les aiguilles d'intérêt dans les assemblages TRAPU et DOUBLON au moment de l'étape cœur, sans nécessiter d'homogénéiser tout l'assemblage (Figure 25).

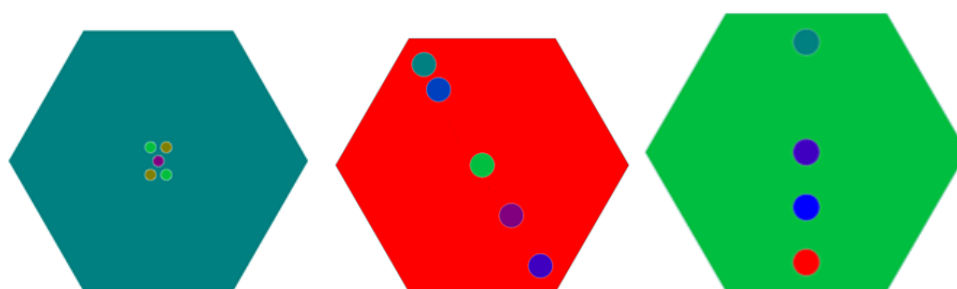


Figure 25 : Modélisation des assemblages d'intérêt lors de l'étape cœur (TRAPU, FEF79, FEG58)

Le schéma de calcul de référence est utilisé pour le calcul réseau¹⁸ (*Garcia-Cervantes, 2019 ; Faure, 2019 ; Jouault, 2017*). Certaines adaptations sont nécessaires pour modéliser correctement les assemblages et les aiguilles TRAPU et DOUBLON. Les sections efficaces représentées par la suite sont des sections efficaces multigroupes et sont dépendantes de la modélisation (Annexe H).

Le tableau suivant (Tableau 7) rappelle l'ensemble des hypothèses de la modélisation avec APOLLO3® :

Géométrie	Semi-hétérogène
Evolution possible	Cœur complet
Plan de chargement	Constant

Tableau 7 : Hypothèses de modélisation APOLLO3®

Les choix de modélisation sont répertoriés dans le tableau ci-dessous (Tableau 8).

Solveur de flux (réseau)	Méthode des caractéristiques (TDT-MOC)
Itérations internes / externes (du calcul réseau)	10 / 200
Solveur cœur	Méthode S_N (MINARET)
Itérations internes / externes (du calcul cœur)	5 / 35
Taille de la maille axiale	5cm
Taille de la maille radiale	10cm

Tableau 8 : Paramètres de calcul avec APOLLO3®

(Pour davantage d'informations sur la modélisation, se référer à l'Annexe C.2).

¹⁸ Le schéma de calcul réseau standard est utilisé (calcul avec 1760 groupes, puis condensés en 33 groupes). Ce schéma a déjà été développé de nombreuses fois et ne sera pas repris car il ne s'agit pas du cœur de la thèse.

3.3.4 Données nucléaires utilisées et cas testés

Les calculs effectués avec TRIPOLI-4® ont été réalisés à une température de 20°C, en ne faisant évoluer que les aiguilles d'intérêt, pour des raisons à la fois de temps de calcul et de disponibilités des sections efficaces (tabulation en température). Une chaîne d'évolution spécifique au spectre thermique est utilisée (« chaîne REP ») par défaut. De leur côté, les calculs effectués avec DARWIN2 ont été réalisés à une température plus représentative de la réalité (1227°C pour TRAPU pour le cœur interne, 627°C pour DOUBLON dans la couverture fertile), avec une chaîne d'évolution spécifique pour le spectre rapide (« chaîne RNR »). Il n'est donc pas possible de comparer directement les valeurs obtenues avec DARWIN2 et TRIPOLI-4®.

Cependant, les possibilités offertes par DARWIN3 peuvent nous permettre de comparer différents cas entre eux et de tester une multitude de modélisations. Les cas testés sont présentés brièvement ci-dessous, et seront repris plus en détails en parties 3.4 et 3.5 lors des analyses.

Pour l'expérience TRAPU

Le tableau ci-dessous (Tableau 9) rappelle les bibliothèques de données utilisées pour chaque formulaire, ainsi que les différents cas testés avec DARWIN3 et leur nomenclature pour la réinterprétation de l'expérience TRAPU.

Formulaire		Température de modélisation	Chaîne d'évolution	Données nucléaires	Evolution dans notre étude
DARWIN2		1227°C (Combustibles)+ 627°C (Fertiles)	RNR	JEFF-3.1.1	Cœur complet
TRIPOLI-4®		20°C	REP	JEFF-3.1.1	Aiguilles TRAPU
DARWIN3	Config 1	20°C	REP	JEFF-3.1.1	Aiguilles TRAPU
	Config 2	20°C	REP	JEFF-3.1.1	Cœur Complet
	Config 3	20°C	RNR	JEFF-3.1.1	Cœur Complet
	Config 4	20°C	RNR	JEFF-3.2	Cœur Complet
	Config 5	650°C	RNR	JEFF-3.1.1	Cœur Complet
	Config 6	1227°C (Combustibles) +	RNR	JEFF-3.1.1	Cœur Complet

		650°C (Fertiles)			
--	--	---------------------	--	--	--

Tableau 9 : Données utilisées et nomenclature des cas DARWIN3 pour l'expérience TRAPU

La chaîne « REP » est la chaîne d'évolution standard utilisée au CEA (« CEAV5 »).

La chaîne « RNR » est la même chaîne pour laquelle le rapport de branchement de l'américium 241 vers les américiums 242 métastable ($^{242\text{M}}\text{Am}$) et fondamental (« Ground state », $^{242\text{G}}\text{Am}$) a été modifié. Cela permet de prendre en compte la modification du rapport de branchement selon que le spectre énergétique des neutrons est thermique ou rapide.

Pour l'expérience DOUBLON

Le tableau ci-dessous (Tableau 10) rappelle les données utilisées pour chaque formulaire, ainsi que les différents cas testés avec DARWIN3 et leur nomenclature pour la réinterprétation de l'expérience DOUBLON.

Formulaire		Température de modélisation	Chaîne d'évolution	Données nucléaires	Evolution	Plan de chargement
DARWIN2		627°C (Fertiles)	RNR	JEFF-3.1.1	Cœur complet	
TRIPOLI-4®		20°C	REP	JEFF-3.1.1	Aiguilles DOUBLON	Constant
TRIPOLI-4®		20°C	REP	JEFF-3.1.1	Aiguilles DOUBLON	Evoluant (FEG58)
DARWIN3	Config 1	20°C	REP	JEFF-3.1.1	Aiguilles DOUBLON	Constant
	Config 2	20°C	RNR	JEFF-3.1.1	Aiguilles DOUBLON	Constant
	Config 3	20°C	RNR	JEFF-3.2	Aiguilles DOUBLON	Constant
	Config 4	650°C	RNR	JEFF-3.1.1	Aiguilles DOUBLON	Constant

Tableau 10 : Données utilisées et nomenclature des cas DARWIN3 pour l'expérience DOUBLON

3.4 ANALYSE DES RESULTATS DE L'EXPERIENCE TRAPU

Tous les résultats de l'expérience TRAPU sont présentés après recalage en fluence, et les incertitudes des rapports Calcul / Expérience (C/E) et des données nucléaires sont données à 1 écart-type (soit à 1σ).

Le calcul des incertitudes – dont la méthodologie est développée dans l'Annexe B – se fonde sur la formule de l'Annexe B, partie IV. Les tableaux présentant les valeurs obtenues sont en Annexe E.

Les résultats présentés seront uniquement des rapports calcul / expérience (C/E). Les données brutes ne sont pas fournies pour des raisons de confidentialité de ces résultats.

3.4.1 Provenance et voies de formation des isotopes analysés

Comme nous l'avons vu (3.2.2), la mesure du bilan-matière final dans l'expérience TRAPU se fait par le biais de la mesure des rapports isotopiques suivants : $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$, $^{235}\text{U}/^{238}\text{U}$, $^{236}\text{U}/^{238}\text{U}$, $^{239}\text{Pu}/^{238}\text{U}$, $^{238}\text{Pu}/^{239}\text{Pu}$, $^{240}\text{Pu}/^{239}\text{Pu}$, $^{241}\text{Pu}/^{239}\text{Pu}$, $^{242}\text{Pu}/^{239}\text{Pu}$, $^{237}\text{Np}/^{238}\text{U}$, $^{241}\text{Am}/^{239}\text{Pu}$, $^{242\text{m}}\text{Am}/^{241}\text{Am}$, $^{243}\text{Am}/^{241}\text{Am}$, $^{244}\text{Cm}/^{239}\text{Pu}$, $^{242}\text{Cm}/^{244}\text{Cm}$, $^{243}\text{Cm}/^{244}\text{Cm}$, $^{245}\text{Cm}/^{244}\text{Cm}$ et $^{148}\text{Nd}/^{238}\text{U}$.

Grâce à des calculs effectués avec le module INVERSION du formulaire DARWIN2, on peut retracer l'origine des différents isotopes et leurs éventuelles voies de formations. Le Tableau 11 montre les principales provenances (>1%) des noyaux lourds analysés.

Noyau lourd	Proportion (%)	Provenance (et voies de formation) après refroidissement
^{238}Pu	~55.5	^{238}Pu
	~22.1	$^{241}\text{Am}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{242}\text{Fm}(\beta^-) \rightarrow ^{242}\text{Cm}(\alpha) \rightarrow ^{238}\text{Pu}$
	~9.0	$^{238}\text{U}(\text{n}, 2\text{n}) \rightarrow ^{237}\text{U}(\beta^-) \rightarrow ^{237}\text{Np}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{238}\text{Np}(\beta^-) \rightarrow ^{238}\text{Pu}$
	~8.0	$^{241}\text{Pu}(\beta^-) \rightarrow ^{241}\text{Am}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{242}\text{Fm}(\beta^-) \rightarrow ^{242}\text{Cm}(\alpha) \rightarrow ^{238}\text{Pu}$
	~3.3	$^{239}\text{Pu}(\text{n}, 2\text{n}) \rightarrow ^{238}\text{Pu}$
	~1.2	$^{240}\text{Pu}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{241}\text{Pu}(\beta^-) \rightarrow ^{241}\text{Am}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{242}\text{Fm}(\beta^-) \rightarrow ^{242}\text{Cm}(\alpha) \rightarrow ^{238}\text{Pu}$
^{239}Pu	~74.5	^{239}Pu
	~25.5	$^{238}\text{U}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{239}\text{U}(\beta^-) \rightarrow ^{239}\text{Np}(\beta^-) \rightarrow ^{239}\text{Pu}$
^{240}Pu	~76.6	^{240}Pu
	~20.1	$^{239}\text{Pu}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{240}\text{Pu}$
	~3.1	$^{238}\text{U}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{239}\text{U}(\beta^-) \rightarrow ^{239}\text{Np}(\beta^-) \rightarrow ^{239}\text{Pu}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{240}\text{Pu}$

²⁴¹Pu	~58.7	²⁴¹Pu
	~35.5	²⁴⁰ Pu(n, γ) → ²⁴¹ Pu
	~5.2	²³⁹ Pu(n, γ) → ²⁴⁰ Pu(n, γ) → ²⁴¹ Pu
²⁴²Pu	~65.8	²⁴²Pu
	~25.4	²⁴¹ Pu(n, γ) → ²⁴² Pu
	~6.5	²⁴⁰ Pu(n, γ) → ²⁴¹ Pu(n, γ) → ²⁴² Pu
	~1.1	²⁴¹ Am(n, γ) → ²⁴² FAm(β ⁺) → ²⁴² Pu
²⁴¹Am	~43.8	²⁴¹Am
	~41.1	²⁴¹ Pu(β ⁻) → ²⁴¹ Am
	~13.4	²⁴⁰ Pu(n, γ) → ²⁴¹ Pu(β ⁻) → ²⁴¹ Am
	~1.5	²³⁹ Pu(n, γ) → ²⁴⁰ Pu(n, γ) → ²⁴¹ Pu(β ⁻) → ²⁴¹ Am
²⁴²MAm	~66.7	²⁴¹ Am(n, γ) → ²⁴² MAm
	~28.0	²⁴¹ Pu(β ⁻) → ²⁴¹ Am(n, γ) → ²⁴² MAm
	~5.0	²⁴⁰ Pu(n, γ) → ²⁴¹ Pu(β ⁻) → ²⁴¹ Am(n, γ) → ²⁴² MAm
²⁴³Am	~78.8	²⁴² Pu(n, γ) → ²⁴³ Pu(β ⁻) → ²⁴³ Am
	~16.8	²⁴¹ Pu(n, γ) → ²⁴² Pu(n, γ) → ²⁴³ Pu(β ⁻) → ²⁴³ Am
	~2.8	²⁴⁰ Pu(n, γ) → ²⁴¹ Pu(n, γ) → ²⁴² Pu(n, γ) → ²⁴³ Pu(β ⁻) → ²⁴³ Am
²⁴²Cm	~62.0	²⁴¹ Am(n, γ) → ²⁴² FAm(β ⁻) → ²⁴² Cm
	~31.2	²⁴¹ Pu(β ⁻) → ²⁴¹ Am(n, γ) → ²⁴² FAm(β ⁻) → ²⁴² Cm
	~6.1	²⁴⁰ Pu(n, γ) → ²⁴¹ Pu(β ⁻) → ²⁴¹ Am(n, γ) → ²⁴² FAm(β ⁻) → ²⁴² Cm
²⁴³Cm	~73.6	²⁴¹ Am(n, γ) → ²⁴² FAm(β ⁻) → ²⁴² Cm(n, γ) → ²⁴³ Cm
	~22.9	²⁴¹ Pu(β ⁻) → ²⁴¹ Am(n, γ) → ²⁴² FAm(β ⁻) → ²⁴² Cm(n, γ) → ²⁴³ Cm
	~3.2	²⁴⁰ Pu(n, γ) → ²⁴¹ Pu(β ⁻) → ²⁴¹ Am(n, γ) → ²⁴² FAm(β ⁻) → ²⁴² Cm(n, γ) → ²⁴³ Cm
²⁴⁴Cm	~78.4	²⁴² Pu(n, γ) → ²⁴³ Pu(β ⁻) → ²⁴³ Am(n, γ) → ²⁴⁴ MAm(β ⁻) → ²⁴⁴ FCm
	~11.4	²⁴¹ Pu(n, γ) → ²⁴² Pu(n, γ) → ²⁴³ Pu(β ⁻) → ²⁴³ Am(n, γ) → ²⁴⁴ MAm(β ⁻) → ²⁴⁴ FCm
	~5.6	²⁴² Pu(n, γ) → ²⁴³ Pu(β ⁻) → ²⁴³ Am(n, γ) → ²⁴⁴ FAm(β ⁻) → ²⁴⁴ FCm
	~1.4	²⁴⁰ Pu(n, γ) → ²⁴¹ Pu(n, γ) → ²⁴² Pu(n, γ) → ²⁴³ Pu(β ⁻) → ²⁴³ Am(n, γ) → ²⁴⁴ FAm(β ⁻) → ²⁴⁴ FCm
²⁴⁵Cm	~81.1	²⁴² Pu(n, γ) → ²⁴³ Pu(β ⁻) → ²⁴³ Am(n, γ) → ²⁴⁴ MAm(β ⁻) → ²⁴⁴ FCm(n, γ) → ²⁴⁵ Cm
	~9.0	²⁴¹ Pu(n, γ) → ²⁴² Pu(n, γ) → ²⁴³ Pu(β ⁻) → ²⁴³ Am(n, γ) → ²⁴⁴ MAm(β ⁻) → ²⁴⁴ FCm(n, γ) → ²⁴⁵ Cm
	~5.7	²⁴² Pu(n, γ) → ²⁴³ Pu(β ⁻) → ²⁴³ Am(n, γ) → ²⁴⁴ FAm(β ⁻) → ²⁴⁴ FCm(n, γ) → ²⁴⁵ Cm
²³⁷Np	~91.6	²³⁸ U(n, 2n) → ²³⁷ U(β ⁻) → ²³⁷ Np
	~7.1	²³⁵ Fu(n, γ) → ²³⁶ U(n, γ) → ²³⁷ U(β ⁻) → ²³⁷ Np

Tableau 11 : Principales voies de formation des noyaux lourds analysés de TRAPU

On remarque notamment que pour certains isotopes, leur source principale de provenance est leur concentration initiale. C'est le cas des isotopes du plutonium et de l'américium 241. Pour les plutoniums, la concentration initiale représente une contribution de plus de moitié à la concentration en fin d'irradiation et après refroidissement. Pour l'américium 241, cette contribution est de 40%.

Ainsi, ces isotopes sont moins sensibles à l'historique d'irradiation ou aux chaînes de décroissance radioactives que les isotopes qui ne sont pas présent en début d'irradiation et sont entièrement produits par des réactions successives, comme c'est le cas du neptunium 237, des autres isotopes de l'américium et des isotopes du curium.

3.4.2 Performances de DARWIN3 (comparaison à TRIPOLI-4®)

Afin de conclure quant aux performances de DARWIN3, nous nous appuyons sur la comparaison au code stochastique TRIPOLI-4®. Pour cela, les hypothèses de calcul de DARWIN3 doivent être similaires à celles de TRIPOLI-4®. Pour rappel, les hypothèses sont appliquées sont les suivantes (Tableau 12) :

- Le cœur est considéré comme « statique », seules les concentrations des aiguilles TRAPU évoluent.
- Le cœur est à 20°C.
- Une chaîne d'évolution « REP » est utilisée.
- La bibliothèque de données nucléaires JEFF-3.1.1 (*Santamarina, 2009*) est utilisée.

*Les calculs stochastiques TRIPOLI-4®, s'ils représentent la meilleure modélisation du point de vue des **schémas de calculs**, ont cependant eux-mêmes été réalisés avec certaines hypothèses (Tableau 12), et sont limités par les données disponibles et les temps de calcul.*

Cette première comparaison TRIPOLI-4® - DARWIN3 permet de tester les performances de ce dernier, c'est pourquoi les hypothèses sont identiques.

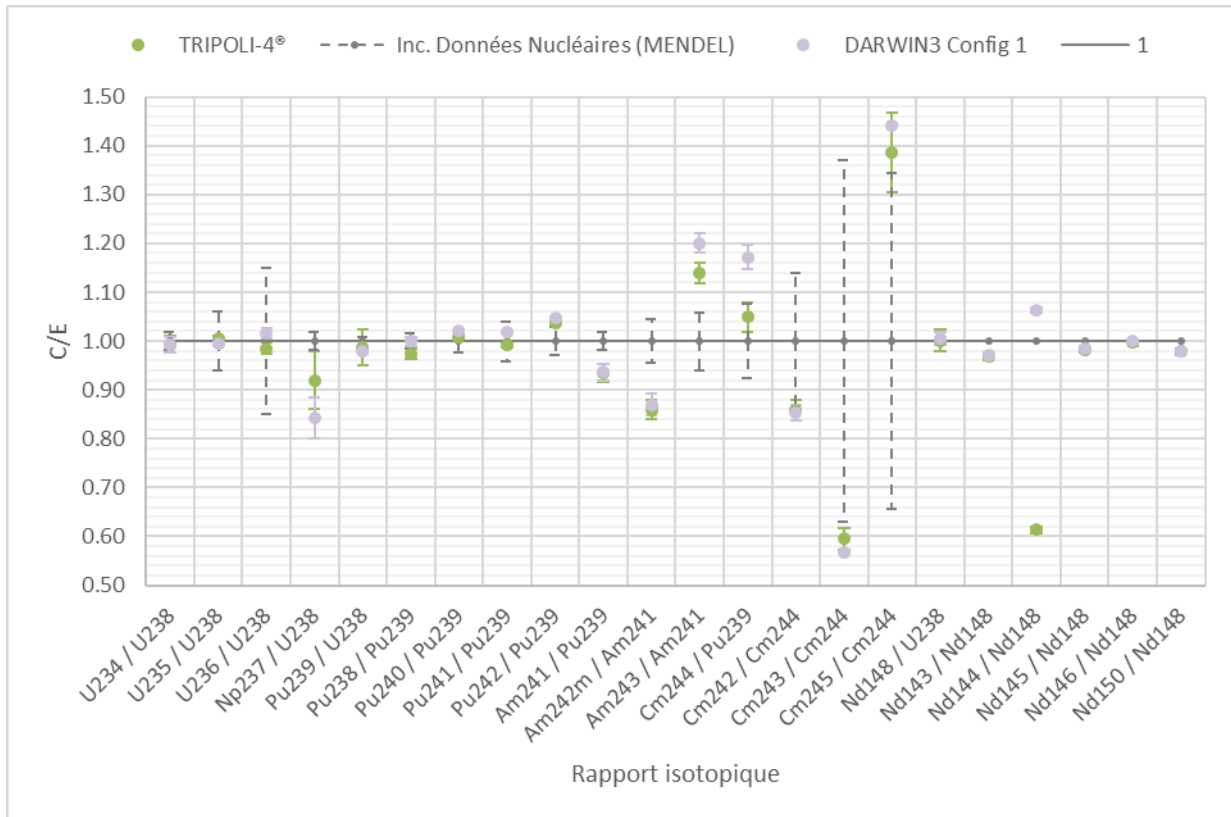
On testera par la suite les différentes hypothèses avec le formulaire DARWIN3, qui est plus souple d'utilisation.

Formulaire		Température de modélisation	Chaîne d'évolution	Données nucléaires	Evolution
TRIPOLI-4®		20°C	REP	JEFF-3.1.1	Aiguilles TRAPU
DARWIN3	Config 1	20°C	REP	JEFF-3.1.1	Aiguilles TRAPU

Tableau 12 : Extrait du Tableau 9 pour l'analyse des performances de DARWIN3

3.4.2.1 Analyse des C/E sur les rapports isotopiques

Le graphique ci-dessous (Graphique 6) présente les résultats des C/E sur les rapports isotopiques obtenus avec TRIPOLI-4® et DARWIN3 (dans sa configuration 1).



Graphique 6 : TRAPU : Comparaison TRIPOLI-4® et DARWIN3 (config. 1)

Les productions des différents isotopes dépendent des taux de réactions τ , qui sont dépendants à la fois des sections efficaces macroscopiques Σ (avec $\Sigma = N\sigma$, σ étant la section efficace microscopique en barns (10^{-24}cm^2) et N la densité atomique en atomes. cm^{-3}) et du flux ϕ (en neutrons. $\text{cm}^{-2}.\text{s}^{-1}$) (Equation Équation 27)).

$$\tau = N\sigma\phi$$

$$\text{Équation 27 : Taux de réaction}$$

On remarque que les résultats sont **extrêmement similaires** pour la grande majorité des isotopes. La production de quelques isotopes est moins bien calculée avec DARWIN3 qu'avec TRIPOLI-4®, c'est le cas pour le ^{237}Np , le ^{243}Am , le ^{244}Cm et le ^{245}Cm . Ceci est cohérent avec les principales voies de formation des isotopes (Tableau 11) : les noyaux lourds qui proviennent essentiellement de leur concentration initiale présentent une meilleure cohérence entre DARWIN3 et TRIPOLI-4® que ceux principalement formés en cours d'irradiation.

En effet :

- La production des isotopes de l'**uranium** et du **plutonium** semble être correctement estimée avec TRIPOLI-4® et DARWIN3, les valeurs obtenues étant comparables entre elles et proches de l'expérience (C/E proche de 1).
- La production de **neptunium 237** est sous-estimée avec le formulaire déterministe DARWIN3. Le formulaire probabiliste TRIPOLI-4® semble légèrement améliorer la valeur du C/E. Le neptunium 237 est produit essentiellement par réactions (n,2n) sur l'²³⁸U. Il semble donc intéressant de s'intéresser à cette réaction.
- La production d'**américium 241** est similaire entre TRIPOLI-4® et DARWIN3. Cela est cohérent car l'américium 241 est sensible à sa concentration initiale (~44%), qui est semblable entre TRIPOLI-4® et DARWIN3. Cependant son C/E est sous-estimé.

Cette sous-estimation peut provenir d'une sous-estimation de la concentration initiale, fournie par les rapports d'expériences.

L'américium 241, en dehors de sa concentration initiale, provient de la désintégration β^- du plutonium 241, soit par des réactions produisant de ce dernier (Tableau 13). Comme le plutonium 241 présente un bon C/E à la fois avec TRIPOLI-4® et DARWIN3, la sous-estimation de l'américium 241 peut également provenir d'une sous-estimation de la voie de désintégration β^- du plutonium 241 vers l'américium 241.

²⁴¹Am	~ 43.8	²⁴¹Am
	~41.1	²⁴¹ Pu(β^-) → ²⁴¹ Am
	~13.4	²⁴⁰ Pu(n, γ) → ²⁴¹ Pu(β^-) → ²⁴¹ Am
	~1.5	²³⁹ Pu(n, γ) → ²⁴⁰ Pu(n, γ) → ²⁴¹ Pu(β^-) → ²⁴¹ Am

Tableau 13 : Extrait du Tableau 11 : provenance de l'américium 241

- La production d'américium **242M** est sous-estimée, mais présente néanmoins un très bon accord entre les valeurs de TRIPOLI-4® et celles de DARWIN3. Sa sous-estimation est cohérente avec sa provenance : 66.7% de l'américium 242M provient de la réaction de capture (n, γ) de l'américium 241, et le reste par des isotopes produisant l'américium 241 (Tableau 14). Ainsi, comme l'américium 241 est sous-estimé, il apparaît cohérent que l'américium 242M le soit également.

^{242M}Am	~ 66.7	²⁴¹Am(n, γ) → ^{242M}Am
	~28.0	²⁴¹ Pu(β^-) → ²⁴¹ Am(n, γ) → ^{242M} Am
	~5.0	²⁴⁰ Pu(n, γ) → ²⁴¹ Pu(β^-) → ²⁴¹ Am(n, γ) → ^{242M} Am

Tableau 14 : Extrait du Tableau 11 : provenance de l'américium 242M

- La production d'**américium 243** est surestimée aussi bien avec TRIPOLI-4® qu'avec DARWIN3. Le C/E obtenu avec TRIPOLI-4® est néanmoins meilleur.

Comme on peut le voir dans le Tableau 15 ci-dessous, l'américium 243 provient essentiellement de la capture du plutonium 242 et dans une moindre mesure, de réactions le produisant. Le plutonium 242 est très légèrement surestimé, mais de façon non significative étant donné les incertitudes dues aux données nucléaires. Cela ne permet pas d'expliquer les valeurs obtenues pour l'américium 243 et il semblerait ainsi que la réaction de capture du plutonium 242 soit surestimée.

²⁴³Am	~78.8	$^{242}\text{Pu}(n, \gamma) \rightarrow ^{243}\text{Pu}(\beta^-) \rightarrow ^{243}\text{Am}$
	~16.8	$^{241}\text{Pu}(n, \gamma) \rightarrow ^{242}\text{Pu}(n, \gamma) \rightarrow ^{243}\text{Pu}(\beta^-) \rightarrow ^{243}\text{Am}$
	~2.8	$^{240}\text{Pu}(n, \gamma) \rightarrow ^{241}\text{Pu}(n, \gamma) \rightarrow ^{242}\text{Pu}(n, \gamma) \rightarrow ^{243}\text{Pu}(\beta^-) \rightarrow ^{243}\text{Am}$

Tableau 15 : Extrait du Tableau 11 : provenance de l'américium 243

- La production de **curium 244** est surestimée à la fois avec TRIPOLI-4® et DARWIN3. Le C/E obtenu avec TRIPOLI-4® est néanmoins meilleur, et compatible avec 1 au vu des incertitudes des données nucléaires, ce qui n'est pas le cas avec DARWIN3. Le curium 244 provient en majorité de chaînes de réactions issues du plutonium 242 et de ses pères (le plutonium 241 et 240) (Tableau 16). On remarque notamment la présence de l'américium 243 dans ces chaînes. Comme ce dernier est surestimé, et davantage avec DARWIN3 qu'avec TRIPOLI-4®, il est cohérent que le curium 244 soit lui aussi surestimé.

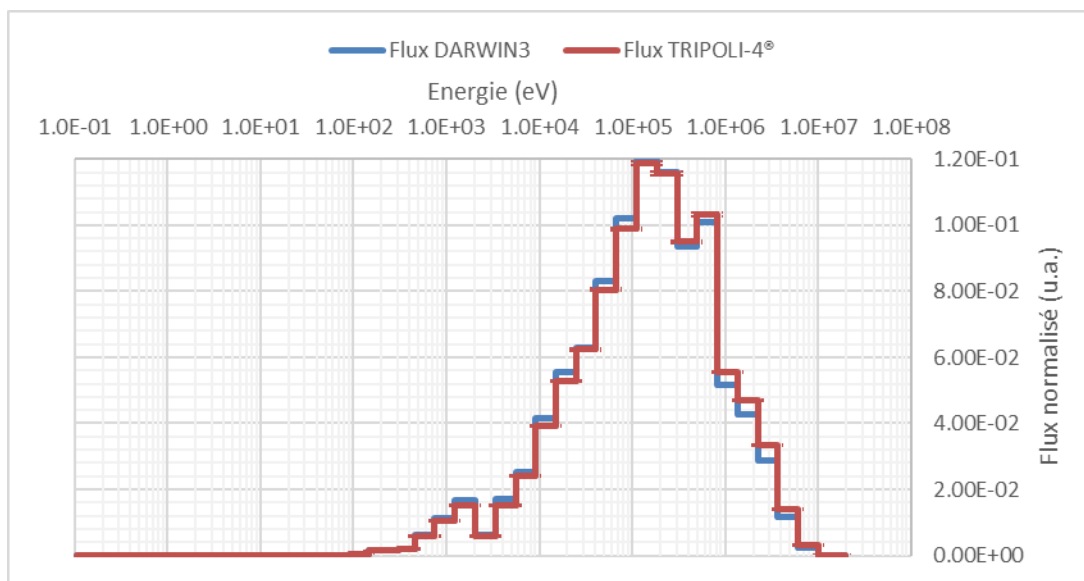
²⁴⁴Cm	~78.4	$^{242}\text{Pu}(n, \gamma) \rightarrow ^{243}\text{Pu}(\beta^-) \rightarrow ^{243}\text{Am}(n, \gamma) \rightarrow ^{244}\text{Am}(\beta^-) \rightarrow ^{244}\text{Fcm}$
	~11.4	$^{241}\text{Pu}(n, \gamma) \rightarrow ^{242}\text{Pu}(n, \gamma) \rightarrow ^{243}\text{Pu}(\beta^-) \rightarrow ^{243}\text{Am}(n, \gamma) \rightarrow ^{244}\text{Am}(\beta^-) \rightarrow ^{244}\text{Fcm}$
	~5.6	$^{242}\text{Pu}(n, \gamma) \rightarrow ^{243}\text{Pu}(\beta^-) \rightarrow ^{243}\text{Am}(n, \gamma) \rightarrow ^{244}\text{Fcm}(\beta^-) \rightarrow ^{244}\text{Fcm}$
	~1.4	$^{240}\text{Pu}(n, \gamma) \rightarrow ^{241}\text{Pu}(n, \gamma) \rightarrow ^{242}\text{Pu}(n, \gamma) \rightarrow ^{243}\text{Pu}(\beta^-) \rightarrow ^{243}\text{Am}(n, \gamma) \rightarrow ^{244}\text{Fcm}(\beta^-) \rightarrow ^{244}\text{Fcm}$

Tableau 16 : Extrait du Tableau 11 : provenance du curium 244

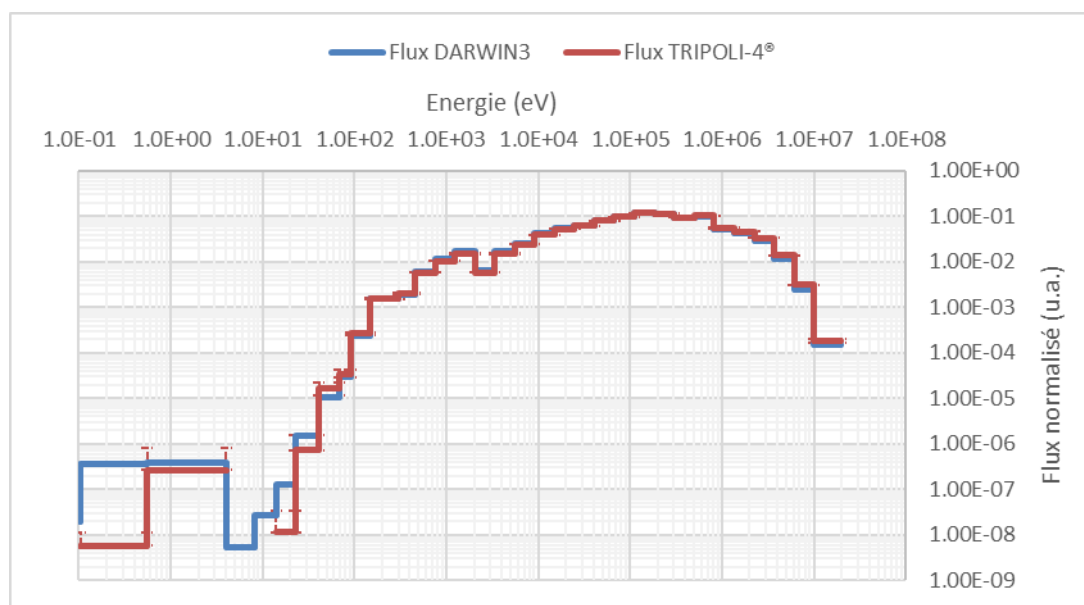
- Nous ne pouvons pas conclure sur les **curiums 242, 243 et 245** car leur rapport isotopique a comme dénominateur le curium 244, qui n'est pas comparable pour les deux formulaires. Il faut donc « ramener » les rapports isotopiques correspondants à un isotope identique et bien calculé (comme le plutonium 239) pour pouvoir comparer les résultats obtenus.

3.4.2.2 Analyse comparative des spectres neutroniques de DARWIN3 et de TRIPOLI-4®

Les graphiques suivants (Graphique 7 et Graphique 8) présentent les flux normalisés calculés dans les aiguilles TRAPU avec DARWIN3 et TRIPOLI-4®.



Graphique 7 : Analyse comparative des spectres neutroniques de DARWIN3 et TRIPOLI-4® - échelle linéaire



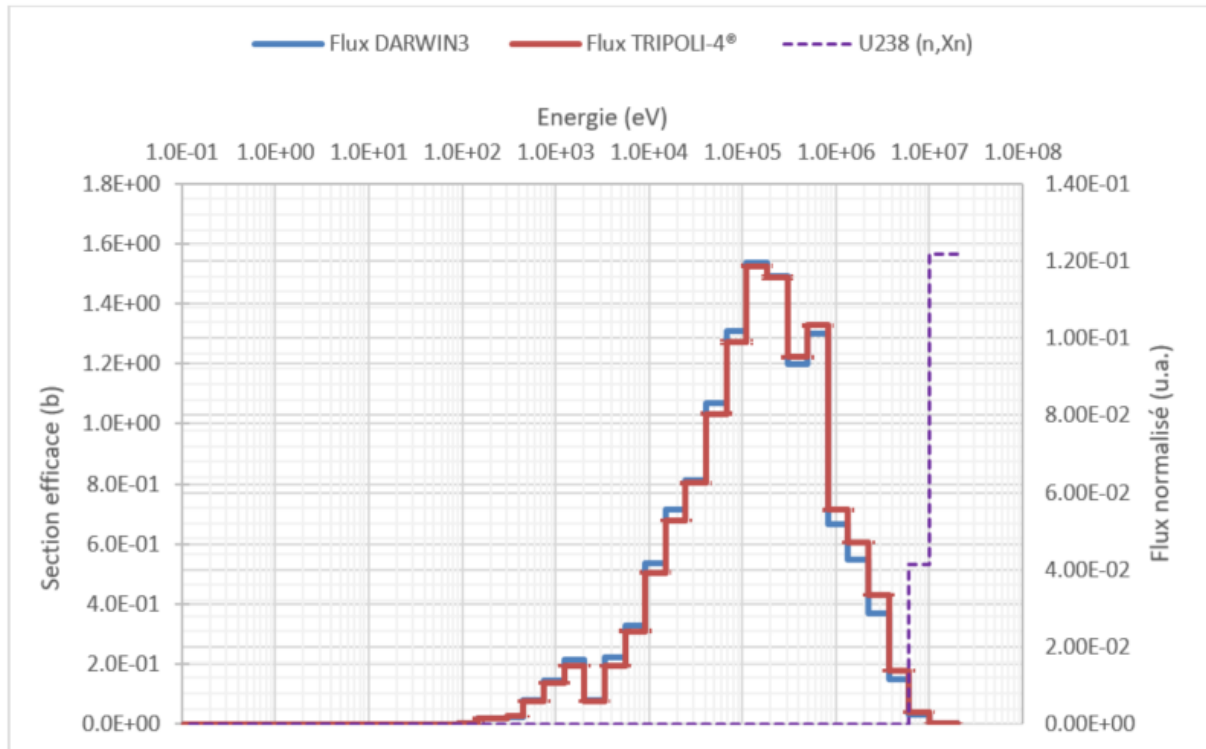
Graphique 8 : Analyse comparative des spectres neutroniques de DARWIN3 et TRIPOLI-4® - échelle logarithmique

On remarque notamment que le flux calculé avec DARWIN3 s'adoucît davantage : en effet, il y a davantage de neutrons dans les énergies thermiques et épithermiques avec DARWIN3 qu'avec TRIPOLI-4®. Inversement, le flux dans TRIPOLI-4® est plus dur : à haute énergie, il y a davantage de neutrons avec TRIPOLI-4® qu'avec DARWIN3. L'origine de ces écarts devra être investiguée au niveau de la VVQI du code APOLLO3®.

3.4.2.3 Analyse de la production du neptunium 237

Comme nous l'avons vu précédemment (Tableau 11), le neptunium 237 provient majoritairement de la réaction $(n, 2n)$ de l'uranium 238.

Les graphiques ci-dessous (Graphique 9 et Graphique 10) présentent les flux obtenus avec TRIPOLI-4® et normalisés, et la section (n, Xn) de ^{238}U .

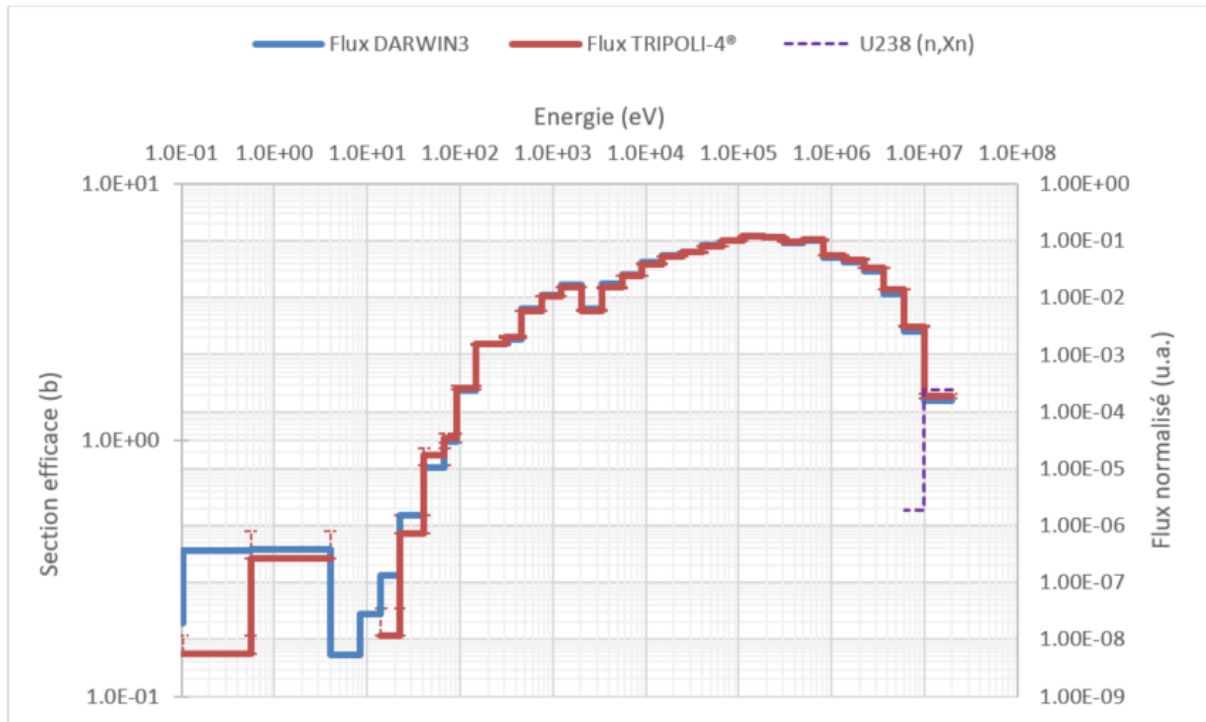


Graphique 9 : Flux neutroniques et section (n, Xn) de ^{238}U – échelle linéaire

On remarque que la section (n, Xn) de l' ^{238}U est importante uniquement à haute énergie ($\geq 6 \text{ MeV}$) et nulle en-dessous. Les différences de taux de réaction de l' ^{238}U , et donc les différences de production du ^{237}Np entre DARWIN3 et TRIPOLI-4® vont être sensible aux variations de flux à haute énergie.

On remarque que :

- La réaction (n, Xn) considérée (principalement $(n, 2n)$) est nulle pour la majorité des groupes sauf à très haute énergie. Son taux de réaction n'est significatif qu'à très haute énergie : c'est une **réaction à seuil**.
- Comme le flux est plus important à haute énergie avec TRIPOLI-4® qu'avec DARWIN3, il est cohérent que le C/E du ^{237}Np soit plus élevé avec TRIPOLI-4® qu'avec DARWIN3.



Graphique 10 : Flux neutronique et section (n, Xn) de ^{238}U – échelle logarithmique

Si on explique les écarts observés entre TRIPOLI-4® et DARWIN3, les deux C/E observés sont tout de même inférieurs à 1. Cela indique une sous-estimation de la production de ^{237}Np qui est liée à une sous-estimation du **taux de réaction** ($n, 2n$) sur l' ^{238}U . Ces taux de réactions sont sensibles à la section efficace mais aussi à la prédiction du flux.

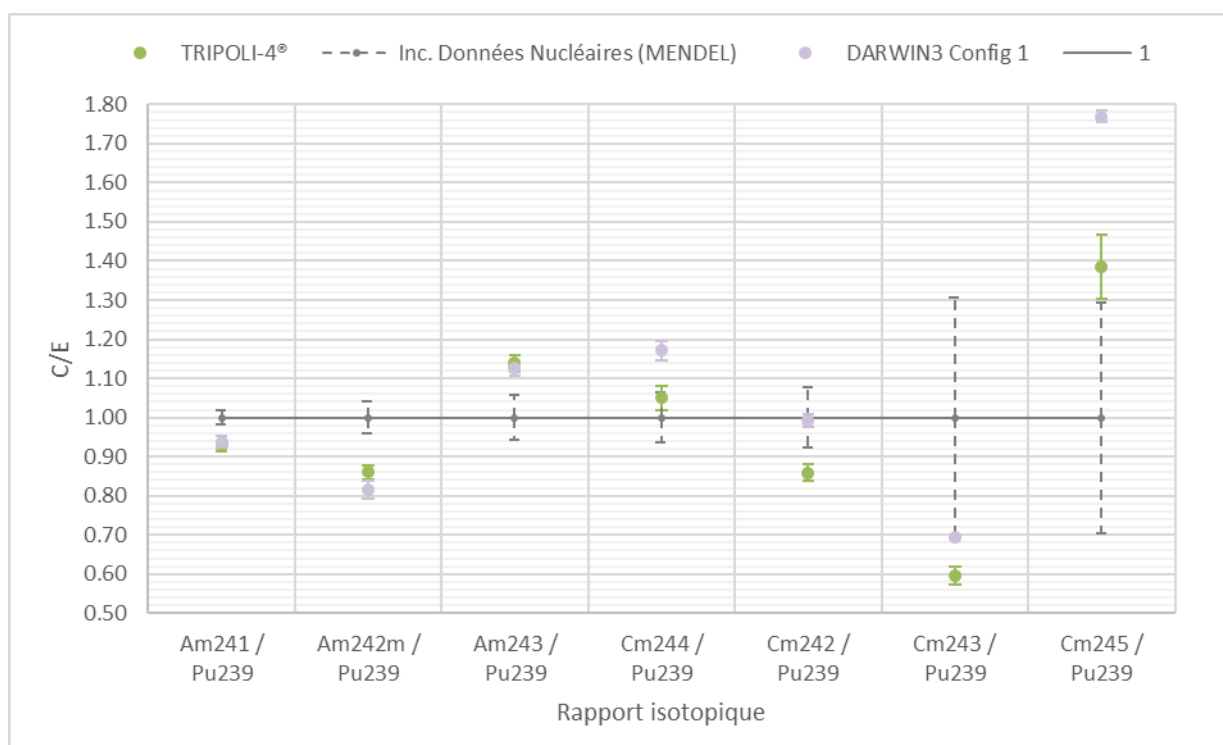
Ces résultats sont cependant cohérents avec d'autres résultats observés dans l'expérience PROFIL ayant eu lieu dans PHENIX également. En effet, les interprétations PROFIL indiquent une sous-estimation des taux de réactions ($n, 2n$) calculés de l'ordre de 7 à 30% (Tommasi, 2008).

3.4.2.4 Analyse de la production des américiums et curiums

Afin de s'affranchir des biais qui se cumulent pour les isotopes de l'américium et du curium, nous avons « ramené » leurs rapports isotopiques sur le plutonium 239 (Graphique 11).

Par exemple, pour l'américium 242M, on définit le rapport suivant :

$$\frac{{}^{242\text{M}}\text{Am}}{{}^{239}\text{Pu}} = \frac{{}^{242\text{M}}\text{Am}}{{}^{241}\text{Am}} \times \frac{{}^{241}\text{Am}}{{}^{239}\text{Pu}}$$



Graphique 11 : Comparaison TRIPOLI-4® et DARWIN3 des américiums et curiums

- La production d'américium 242M est toujours sous-estimée, les conclusions sont semblables à ce que nous avons vu précédemment.
- Cette fois-ci, la **production d'américium 243** est similaire entre DARWIN3 et TRIPOLI-4®, tout en restant surestimée par rapport à la mesure, comme nous l'avons vu précédemment.
- La production de **curium 242** présente un excellent C/E avec DARWIN3, cependant la valeur obtenue avec TRIPOLI-4® est sous-estimée.
- Le **curium 243** est mieux estimé avec DARWIN3, mais reste largement sous-estimé. Cependant, les grandes incertitudes issues des données nucléaires permettent d'avoir un C/E compatible avec 1 aux incertitudes près. La valeur obtenue avec TRIPOLI-4® est quant à elle largement sous-estimée et non compatible avec 1 au vu des incertitudes sur les données nucléaires. Le curium 243 provient en majorité de la chaîne de l'américium 241 et de ses pères (Tableau 17).

²⁴³Cm	~73.6	$^{241}\text{Am}(n, \gamma) \rightarrow ^{242}\text{Fm}(\beta^-) \rightarrow ^{242}\text{Cm}(n, \gamma) \rightarrow ^{243}\text{Cm}$
	~22.9	$^{241}\text{Pu}(\beta^-) \rightarrow ^{241}\text{Am}(n, \gamma) \rightarrow ^{242}\text{Fm}(\beta^-) \rightarrow ^{242}\text{Cm}(n, \gamma) \rightarrow ^{243}\text{Cm}$
	~3.2	$^{240}\text{Pu}(n, \gamma) \rightarrow ^{241}\text{Pu}(\beta^-) \rightarrow ^{241}\text{Am}(n, \gamma) \rightarrow ^{242}\text{Fm}(\beta^-) \rightarrow ^{242}\text{Cm}(n, \gamma) \rightarrow ^{243}\text{Cm}$

Tableau 17 : Extrait du Tableau 11 : provenance du curium 243

- D'importantes disparités sont observées pour la production du **curium 245** entre TRIPOLI-4® et DARWIN3. Si la valeur obtenue avec TRIPOLI-4® est largement surestimée, elle reste compatible avec 1 au vu des incertitudes issues des données nucléaires, ce qui n'est pas le cas avec DARWIN3.

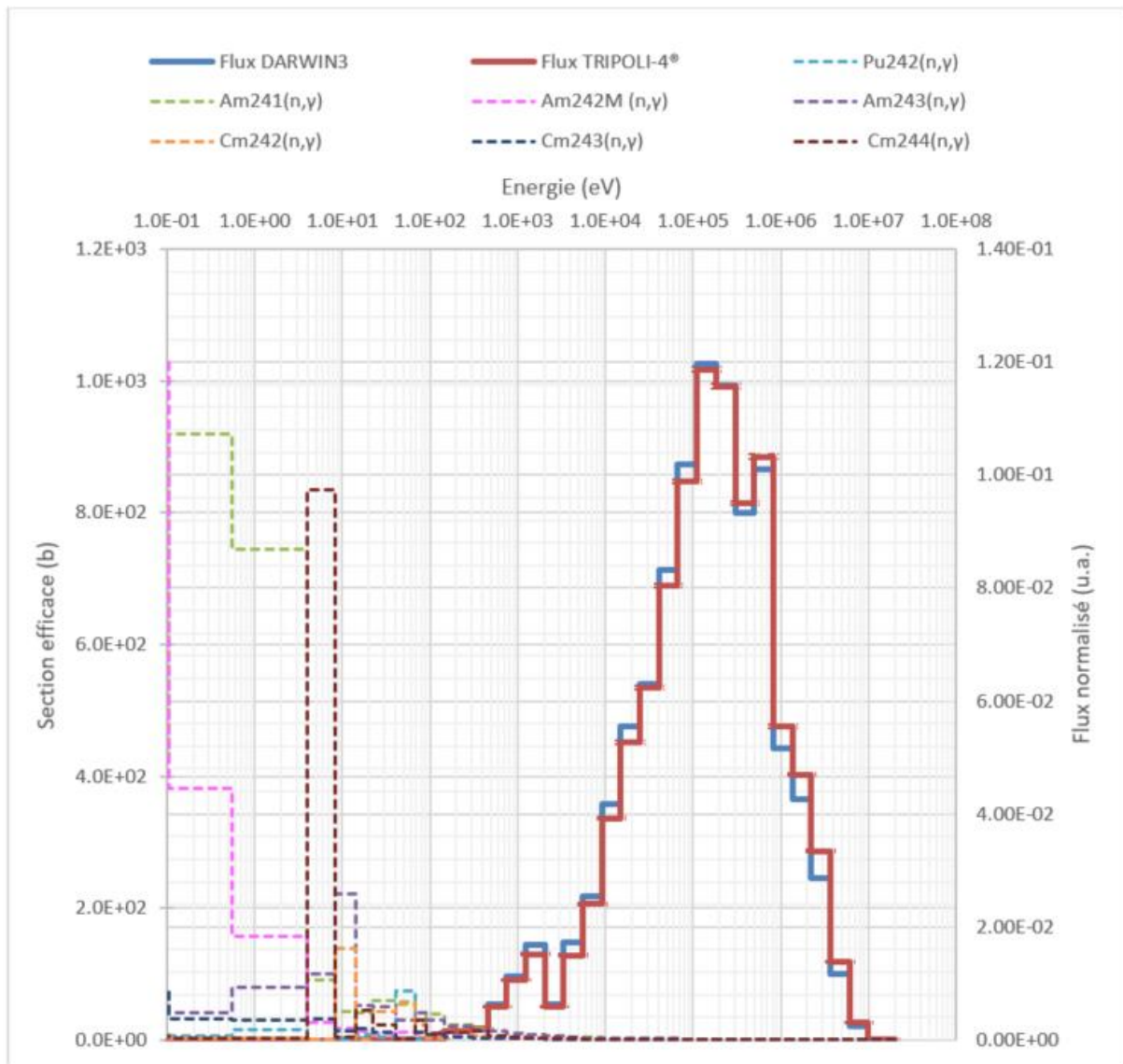
Le curium 245 provient majoritairement de la chaîne du plutonium 242, dans laquelle on trouve notamment l'américium 243 et le curium 244, qui sont déjà surestimés aussi bien avec DARWIN3 qu'avec TRIPOLI-4®.

²⁴⁵Cm	~81.1	$^{242}\text{Pu}(n, \gamma) \rightarrow ^{243}\text{Pu}(\beta^-) \rightarrow ^{243}\text{Am}(n, \gamma) \rightarrow ^{244}\text{MAm}(\beta^-) \rightarrow ^{244}\text{FCm}(n, \gamma) \rightarrow ^{245}\text{Cm}$
	~9.0	$^{241}\text{Pu}(n, \gamma) \rightarrow ^{242}\text{Pu}(n, \gamma) \rightarrow ^{243}\text{Pu}(\beta^-) \rightarrow ^{243}\text{Am}(n, \gamma) \rightarrow ^{244}\text{MAm}(\beta^-) \rightarrow ^{244}\text{FCm}(n, \gamma) \rightarrow ^{245}\text{Cm}$
	~5.7	$^{242}\text{Pu}(n, \gamma) \rightarrow ^{243}\text{Pu}(\beta^-) \rightarrow ^{243}\text{Am}(n, \gamma) \rightarrow ^{244}\text{FAm}(\beta^-) \rightarrow ^{244}\text{FCm}(n, \gamma) \rightarrow ^{245}\text{Cm}$

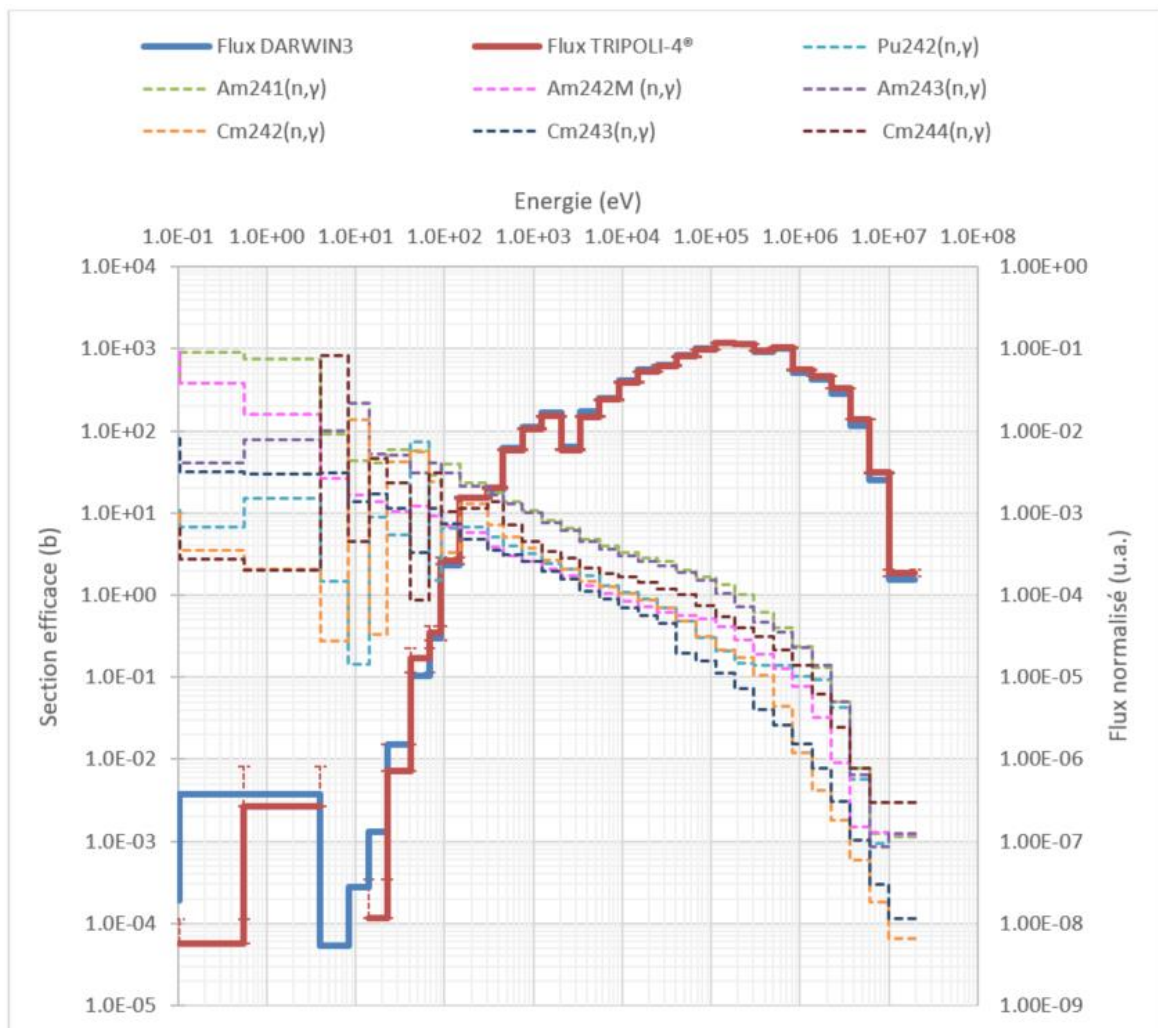
Tableau 18 : Extrait du Tableau 11 : provenance du curium 245

Sur les graphiques suivants (Graphique 12 et Graphique 13), on remarque que :

- La section efficace de capture du **curium 244** présente une importante **résonance** à basse énergie. Comme le curium 245 est produit, d'après les chaînes de production, par une capture sur le curium 244, la production de curium 245 va être impactée. De plus, le spectre neutronique de DARWIN3 est plus doux et celui de TRIPOLI-4® plus dur. Ainsi, il y a, avec DARWIN3, un taux de réaction dans cette résonance plus important qu'avec TRIPOLI-4®.
Ceci explique en partie les écarts observés entre DARWIN3 et TRIPOLI-4® pour la production du curium 245.
- L'américium 241 a une section de capture importante à basse énergie. De même, comme le spectre avec DARWIN3 est plus doux, les captures sont plus importantes et cela explique que la valeur de l'américium 242M obtenue avec DARWIN3 soit supérieure à celle obtenue à TRIPOLI-4®.
- La section de capture de l'américium 242M importante à basse énergie n'impacte pas les autres noyaux lourds. En effet, si la capture de l'américium 242M produit bien de l'américium 243, sa part dans la concentration finale de l'américium 243 est inférieure à 1%.
- La section de capture de l'américium 243 présente une petite résonance à basse énergie, qui va également venir contribuer aux écarts sur le curium 243 et 245 entre DARWIN3 et TRIPOLI-4®.



Graphique 12 : Sections efficaces et flux neutronique – échelle linéaire



Graphique 13 : Sections efficaces et flux neutroniques – échelle logarithmique

3.4.2.5 Conclusion partielle

DARWIN3 présente des résultats cohérents avec ceux de TRIPOLI-4®. Les isotopes de l'uranium et de plutonium présentent des excellents C/E pour les deux formulaires.

Les écarts observés sur certains isotopes, comme certains isotopes du curium ou de l'américium s'expliquent du fait du spectre plus doux de DARWIN3, induisant des taux de réactions plus importants à basse énergie qu'avec TRIPOLI-4® qui a un spectre plus dur. Inversement, pour le neptunium 237, qui est produit par la réaction à seuil (n,2n) de l'uranium 238, c'est avec TRIPOLI-4® que le taux de réaction est plus important.

3.4.3 Comparaison de DARWIN3 à DARWIN2

Afin de conclure quant à l'amélioration des performances des formulaires déterministes d'évolution, nous nous appuyons sur la comparaison au précédent formulaire déterministe DARWIN2. Pour cela, les options de DARWIN3 choisies doivent être comparables à celles de DARWIN2. Pour rappel, les hypothèses suivantes sont appliquées (tableau 9) :

- Le cœur est considéré comme « évoluant ».
- Le combustible est à 1227°C, les assemblages fertiles sont à 650°C.
- Une chaîne « RNR » est utilisée.
- La bibliothèque de données nucléaires JEFF-3.1.1 est utilisée.

Formulaire		Température de modélisation	Chaîne d'évolution	Données nucléaires	Evolution
DARWIN2		1227°C (Combustibles) + 627°C (Fertiles)	RNR	JEFF-3.1.1	Cœur complet
DARWIN3	Config 6	1227°C (Combustibles) + 650°C (Fertiles)	RNR	JEFF-3.1.1	Cœur Complet

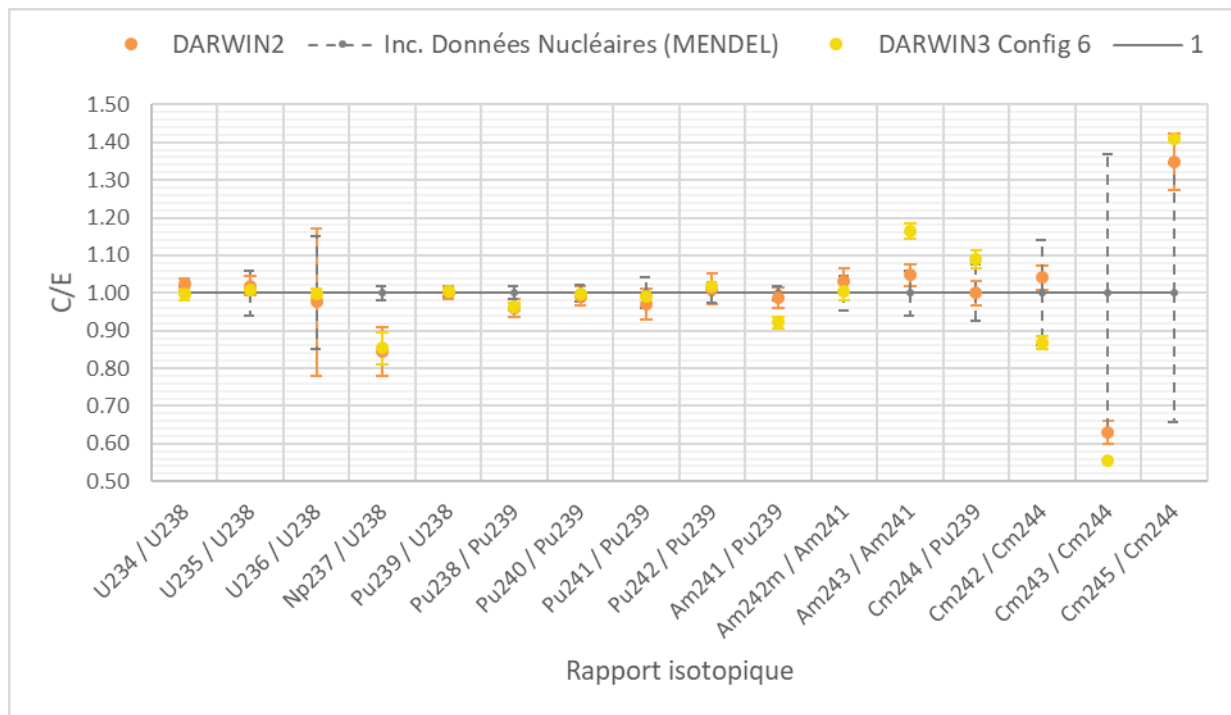
Tableau 19 : Extrait du Tableau 9 pour la comparaison DARWIN3 à DARWIN2

3.4.3.1 Analyse des C/E des rapports isotopiques

Le graphique ci-dessous (Graphique 14) présente les résultats obtenus avec DARWIN2 et DARWIN3 (dans sa configuration 6).

On remarque que :

- Les valeurs obtenues avec DARWIN3 sont similaires à celles de DARWIN2 pour les productions des isotopes de l'**uranium** et du **plutonium**, ce qui est cohérent avec les principales voies de formation des isotopes (Tableau 11). En effet, ces noyaux lourds qui proviennent essentiellement de leur concentration initiale sont moins sensibles aux variations d'historiques d'irradiation et de modélisation.
- Les valeurs obtenues sont également similaires pour le **neptunium 237**.
- La production d'américium 241 est sous-estimé avec DARWIN3, tandis qu'elle semble bien calculée avec DARWIN2.



Graphique 14 : TRAPU : Comparaison DARWIN2 et DARWIN3 (config. 6)

- La production de curium 244 est elle aussi mieux estimée avec DARWIN2 qu'avec DARWIN3, où elle est surestimée.
- Les productions des autres isotopes de l'**américium** et du **curium** présentent des disparités, qui ne peuvent cependant pas être analysées car leur rapport isotopique présente pour dénominateur l'américium 241 ou le curium 244, qui ne sont pas équivalents entre DARWIN2 et DARWIN3.

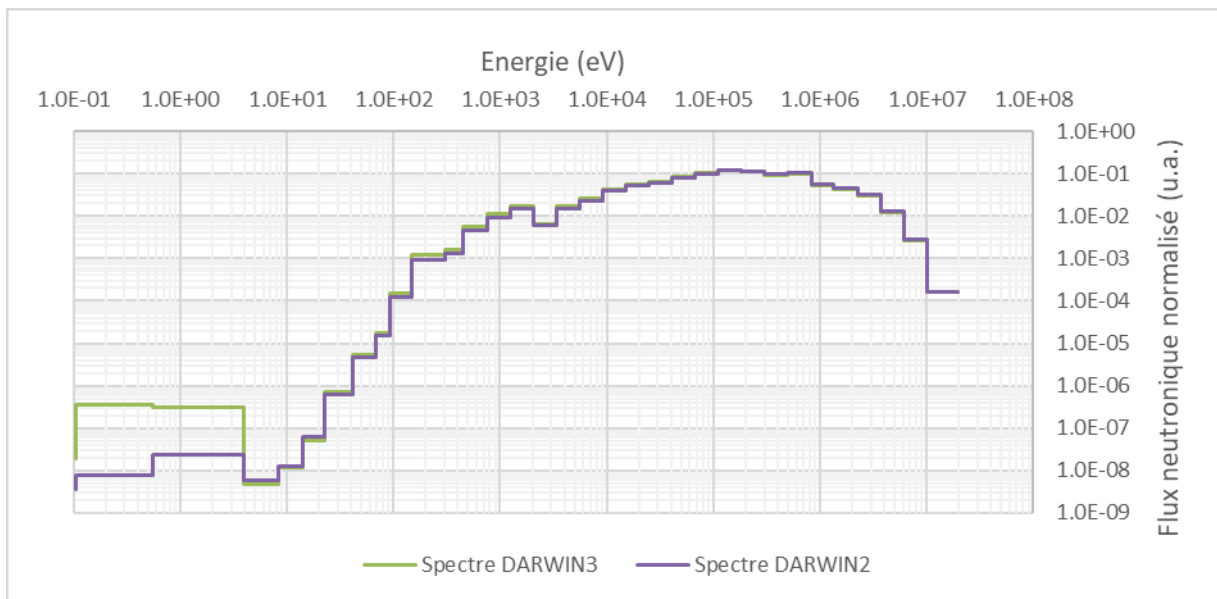
3.4.3.2 Analyse comparative des spectres neutroniques

Les graphiques suivants (**Erreur ! Source du renvoi introuvable.** et **Erreur ! Source du renvoi introuvable.**) présentent les spectres neutroniques calculés avec DARWIN2 et DARWIN3.

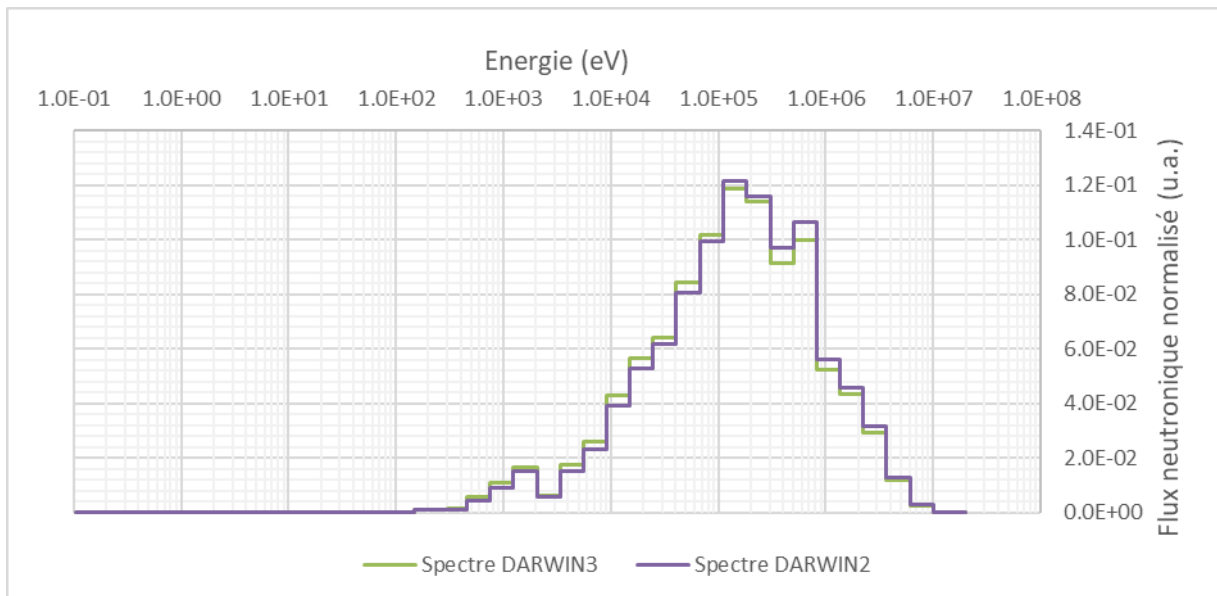
On remarque que :

- Le flux neutronique est 10 fois plus important à basse énergie (entre 0,1eV à quelques eV) avec DARWIN3 qu'avec DARWIN2.
- Jusqu'à 10^5 eV, le flux neutronique est plus important avec DARWIN3.
- Inversement, au-delà de 10^5 eV, le flux neutronique est plus important avec DARWIN2.

Le spectre obtenu avec DARWIN3 est donc plus doux que celui de DARWIN2, plus dur. Ces écarts de spectre neutronique peuvent entraîner des modifications non négligeables de certains taux de réaction et entraîner les disparités observées sur les concentrations isotopiques.



Graphique 15 : Spectres neutroniques dans DARWIN2 et DARWIN3 (échelle logarithmique pour l'analyse à basse énergie)

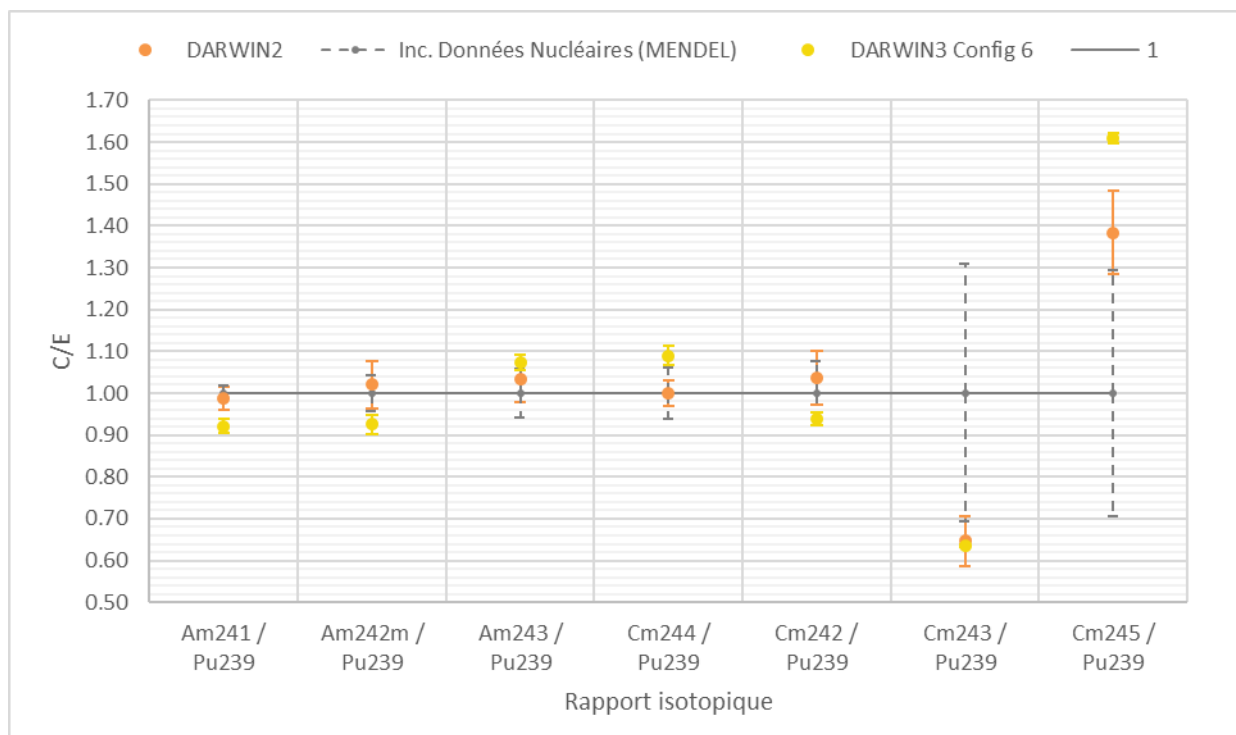


Graphique 16 : Spectres neutroniques dans DARWIN2 et DARWIN3 (échelle linéaire pour l'analyse à haute énergie)

Les spectres obtenus peuvent présenter des différences entre DARWIN2 et DARWIN3.

3.4.3.3 Analyse des américiums et des curiums

Afin de s'affranchir des biais qui se cumulent pour les isotopes de l'américium et du curium, nous avons là aussi « ramené » leurs rapports isotopiques sur le plutonium 239 (Graphique 17).



Graphique 17 : Comparaison DARWIN2 et DARWIN3 des américiums et curiums

On remarque que :

- La production d'**américium 241** est un peu moins bien calculé avec DARWIN3 qu'avec DARWIN2. La concentration finale d'américium 241 est sensible de manière quasi équivalente (Tableau 17) à sa concentration initiale (43,8%) et à la désintégration β^- du plutonium 241. Ses autres provenances concernent la production du plutonium 241 : la capture du plutonium 240 et 239.

• ²⁴¹Am	~ 43.8	²⁴¹Am
	~41.1	²⁴¹ Pu(β^-) → ²⁴¹ Am
	~13.4	²⁴⁰ Pu(n, γ) → ²⁴¹ Pu(β^-) → ²⁴¹ Am
	~1.5	²³⁹ Pu(n, γ) → ²⁴⁰ Pu(n, γ) → ²⁴¹ Pu(β^-) → ²⁴¹ Am

Tableau 20 : Extrait du Tableau 11 : provenance de l'américium 241

Cependant, les concentrations initiales utilisées sont identiques dans les deux calculs.

Les écarts pourraient alors provenir d'une sous-estimation des captures du ^{240}Pu et du ^{239}Pu par DARWIN3. Cependant, cette piste n'est pas confirmée : en effet, on remarque que les sections de capture sont importantes à basse énergie, avec notamment une importante résonance du ^{240}Pu à basse énergie. Or le spectre avec DARWIN3 est plus doux que celui de DARWIN2 : il y a davantage de neutrons à basse énergie qu'avec DARWIN2.

Il semblerait donc que ces écarts aient pour origine une sous-estimation de la voie de désintégration β^- du ^{241}Pu , ou bien les différences de modélisation entre DARWIN2 et DARWIN3.

- L'**américium 242M**, produit à plus de 65% par la capture de l'américium 241, présente le même biais que l'américium 241 : on peut donc conclure que DARWIN3 est performant pour prédire la production d'américium 242M.

$^{242\text{M}}\text{Am}$	~66.7	$^{241}\text{Am}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{242\text{M}}\text{Am}$
	~28.0	$^{241}\text{Pu}(\beta^-) \rightarrow ^{241}\text{Am}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{242\text{M}}\text{Am}$
	~5.0	$^{240}\text{Pu}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{241}\text{Pu}(\beta^-) \rightarrow ^{241}\text{Am}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{242\text{M}}\text{Am}$

Tableau 21 : Extrait du Tableau 11 : provenance de l'américium 242M

- Il en est de même pour le **curium 242**, produit essentiellement par la désintégration β^- (62%) de l'américium 242G, lui-même produit par la capture de l'américium 241.

^{242}Cm	~62.0	$^{241}\text{Am}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{242\text{F}}\text{Am}(\beta^-) \rightarrow ^{242}\text{Cm}$
	~31.2	$^{241}\text{Pu}(\beta^-) \rightarrow ^{241}\text{Am}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{242\text{F}}\text{Am}(\beta^-) \rightarrow ^{242}\text{Cm}$
	~6.1	$^{240}\text{Pu}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{241}\text{Pu}(\beta^-) \rightarrow ^{241}\text{Am}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{242\text{F}}\text{Am}(\beta^-) \rightarrow ^{242}\text{Cm}$

Tableau 22 : Extrait du Tableau 11 : provenance de l'américium 242M

- La production d'**américium 243** est surestimé à la fois avec DARWIN2 et légèrement davantage avec DARWIN3, mais leurs valeurs restent compatibles avec 1 au vu des incertitudes issues des données nucléaires. L'américium 243 provient à presque 80% de la capture du ^{242}Pu (Tableau 23). Le plutonium 242 présente un excellent C/E aussi bien avec DARWIN2 qu'avec DARWIN3.

^{243}Am	~78.8	$^{242}\text{Pu}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{243}\text{Pu}(\beta^-) \rightarrow ^{243}\text{Am}$
	~16.8	$^{241}\text{Pu}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{242}\text{Pu}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{243}\text{Pu}(\beta^-) \rightarrow ^{243}\text{Am}$
	~2.8	$^{240}\text{Pu}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{241}\text{Pu}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{242}\text{Pu}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{243}\text{Pu}(\beta^-) \rightarrow ^{243}\text{Am}$

Tableau 23 : Extrait du Tableau 11 : provenance de l'américium 242M

Le spectre DARWIN3 étant plus doux que celui de DARWIN2, et la section de capture du ^{242}Pu étant plus importante à basse énergie, il est donc cohérent que la valeur obtenue avec DARWIN3 soit davantage surestimée que celle de DARWIN2.

- Le curium 244 provient à presque 80% (Tableau 24) de la chaîne initiée par la capture du plutonium 242.

^{244}Cm	~78.4	$^{242}\text{Pu}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{243}\text{Pu}(\beta^-) \rightarrow ^{243}\text{Am}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{244\text{M}}\text{Am}(\beta^-) \rightarrow ^{244\text{F}}\text{Cm}$
	~11.4	$^{241}\text{Pu}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{242}\text{Pu}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{243}\text{Pu}(\beta^-) \rightarrow ^{243}\text{Am}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{244\text{M}}\text{Am}(\beta^-) \rightarrow ^{244\text{F}}\text{Cm}$
	~5.6	$^{242}\text{Pu}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{243}\text{Pu}(\beta^-) \rightarrow ^{243}\text{Am}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{244\text{F}}\text{Am}(\beta^-) \rightarrow ^{244\text{F}}\text{Cm}$
	~1.4	$^{240}\text{Pu}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{241}\text{Pu}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{242}\text{Pu}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{243}\text{Pu}(\beta^-) \rightarrow ^{243}\text{Am}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{244\text{F}}\text{Am}(\beta^-) \rightarrow ^{244\text{F}}\text{Cm}$

Tableau 24 : Extrait du Tableau 11 : provenance du curium 244

On remarque que les sections de capture du ^{242}Pu , ^{241}Pu et ^{240}Pu sont importantes à basse énergie. Comme le spectre neutronique est plus doux avec DARWIN3 qu'avec DARWIN2, il est cohérent que la valeur du ^{244}Cm soit surestimée avec DARWIN3.

- La production de curium 245 est très largement surestimée aussi bien avec DARWIN3 qu'avec DARWIN2. Le curium 245 provient lui aussi essentiellement de la chaîne initiée par le plutonium 242 (Tableau 25) par le biais de la capture du curium 244. Or la production de ce dernier est bien estimé avec DARWIN2 et légèrement surestimée avec DARWIN3.

^{245}Cm	~81.1	$^{242}\text{Pu}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{243}\text{Pu}(\beta^-) \rightarrow ^{243}\text{Am}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{244\text{M}}\text{Am}(\beta^-) \rightarrow ^{244\text{F}}\text{Cm}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{245}\text{Cm}$
	~9.0	$^{241}\text{Pu}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{242}\text{Pu}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{243}\text{Pu}(\beta^-) \rightarrow ^{243}\text{Am}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{244\text{M}}\text{Am}(\beta^-) \rightarrow ^{244\text{F}}\text{Cm}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{245}\text{Cm}$
	~5.7	$^{242}\text{Pu}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{243}\text{Pu}(\beta^-) \rightarrow ^{243}\text{Am}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{244\text{F}}\text{Am}(\beta^-) \rightarrow ^{244\text{F}}\text{Cm}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{245}\text{Cm}$

Tableau 25 : Extrait du Tableau 11 : provenance du curium 245

On remarque (Graphique 18 et Graphique 19) que le curium 244 présente une importante résonance à basse énergie, ce qui explique les écarts entre DARWIN2 et DARWIN3.

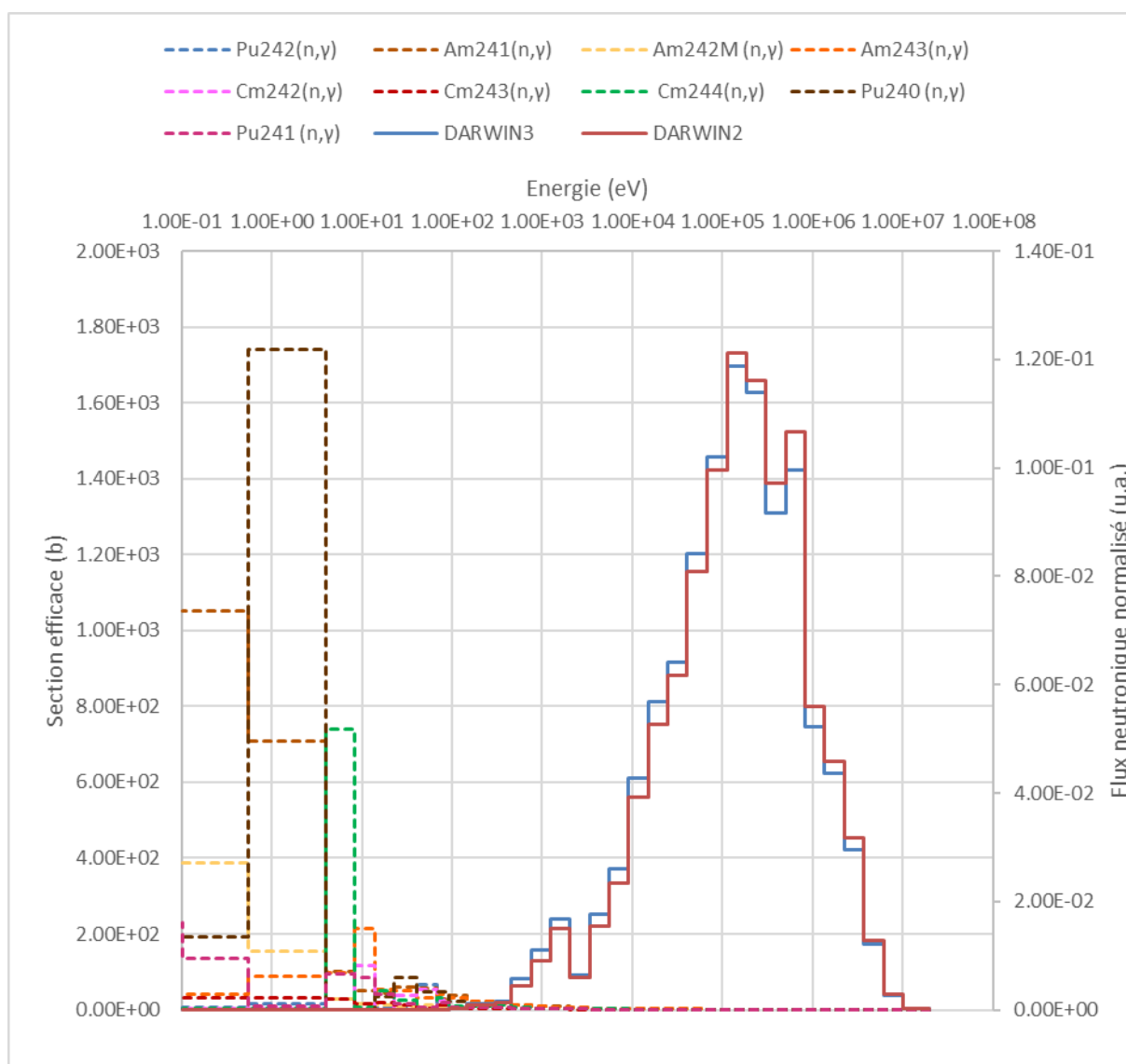
- La production de curium 243 est quant à elle largement sous-estimée, bien que compatible avec 1 au vu des incertitudes sur les données nucléaires. Le curium 243 est produit par la chaîne de la capture de l'américium 241 (Tableau 26), et notamment par la capture du ^{242}Cm . Ces derniers sont sous-estimés.

	~73.6	$^{241}\text{Am}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{242\text{F}}\text{Am}(\beta^-) \rightarrow ^{242}\text{Cm}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{243}\text{Cm}$
--	-------	--

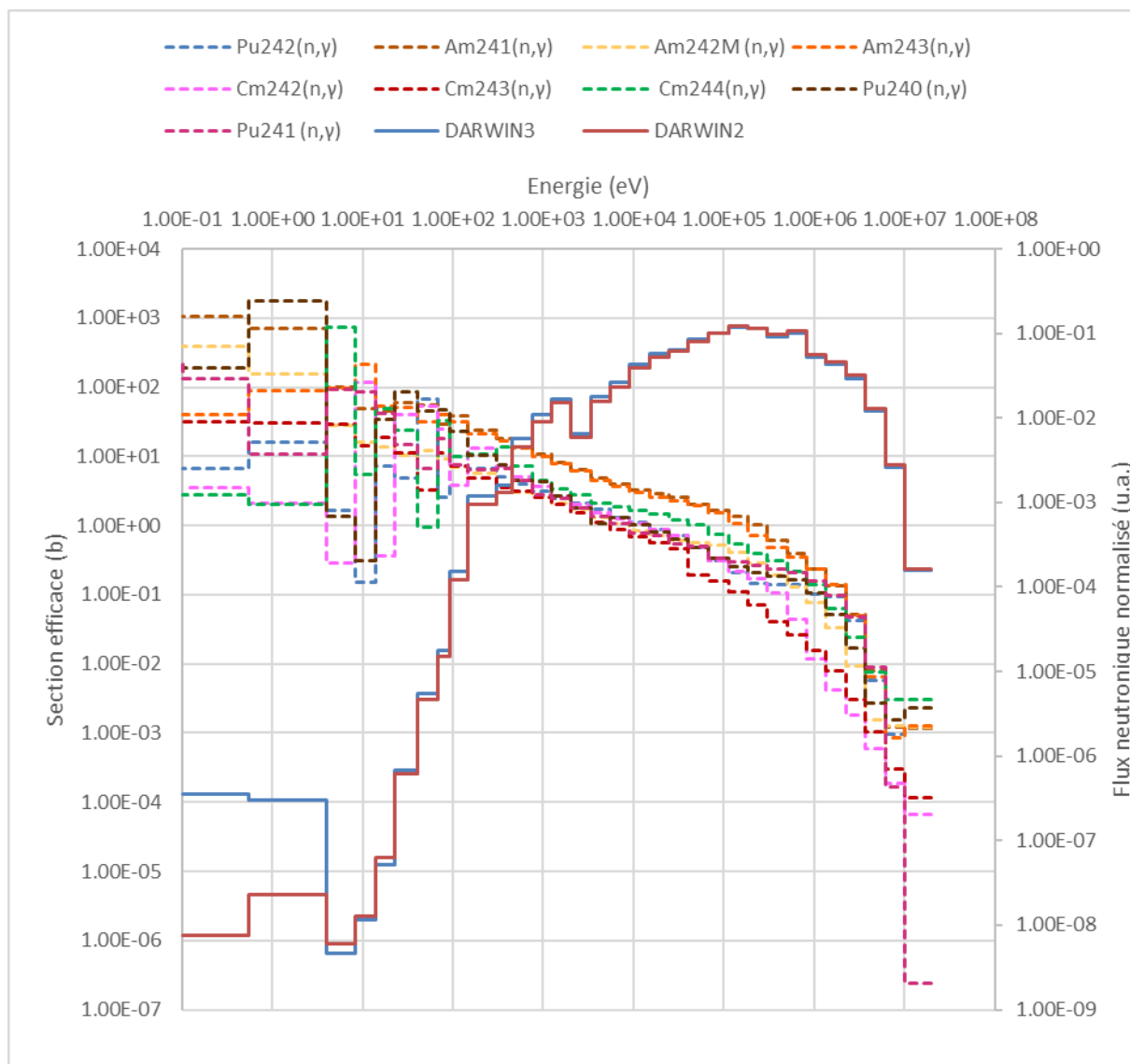
^{243}Cm	~ 22.9	$^{241}\text{Pu}(\beta^-) \rightarrow ^{241}\text{Am}(n, \gamma) \rightarrow ^{242}\text{Am}(\beta^-) \rightarrow ^{242}\text{Cm}(n, \gamma) \rightarrow ^{243}\text{Cm}$
	~ 3.2	$^{240}\text{Pu}(n, \gamma) \rightarrow ^{241}\text{Pu}(\beta^-) \rightarrow ^{241}\text{Am}(n, \gamma) \rightarrow ^{242}\text{Am}(\beta^-) \rightarrow ^{242}\text{Cm}(n, \gamma) \rightarrow ^{243}\text{Cm}$

Tableau 26 : Extrait du Tableau 11 : provenance du curium 243

La surestimation importante du curium 245 et la sous-estimation du curium 243, aussi bien avec DARWIN2 qu'avec DARWIN3 est a priori également liée à la bibliothèque de données nucléaires. Nous y reviendrons par la suite lors de la comparaison à JEFF-3.2.



Graphique 18 : Sections efficaces – échelle linéaire



Graphique 19 : Sections efficaces – échelle logarithmique

Les formulaires DARWIN2 et DARWIN3 sont tous les deux des formulaires déterministes, avec un découpage énergétique à 33 groupes. Les disparités observées entre ces deux codes proviennent donc du calcul du spectre énergétique des neutrons par le code neutronique associé (respectivement ERANOS2 et APOLLO3®). En effet, le spectre neutronique avec DARWIN2 est plus dur que celui obtenu avec DARWIN3.

3.4.3.4 Conclusion partielle

Les formulaires déterministes DARWIN2 et DARWIN3 offrent des résultats semblables pour calculer les productions des isotopes de l'uranium, de plutonium et du neptunium 237.

Les écarts observés pour les isotopes de l'américium et du curium s'expliquent notamment du fait des différences de spectre neutroniques. Le spectre obtenu avec DARWIN3 (c'est-à-dire avec APOLLO3) est en effet plus doux que celui obtenu avec DARWIN2, (c'est-à-dire avec ERANOS), induisant des taux de réactions plus importants à basse énergie, où certaines sections sont plus importantes. Cela induit des modifications des taux de réactions entre les deux codes.

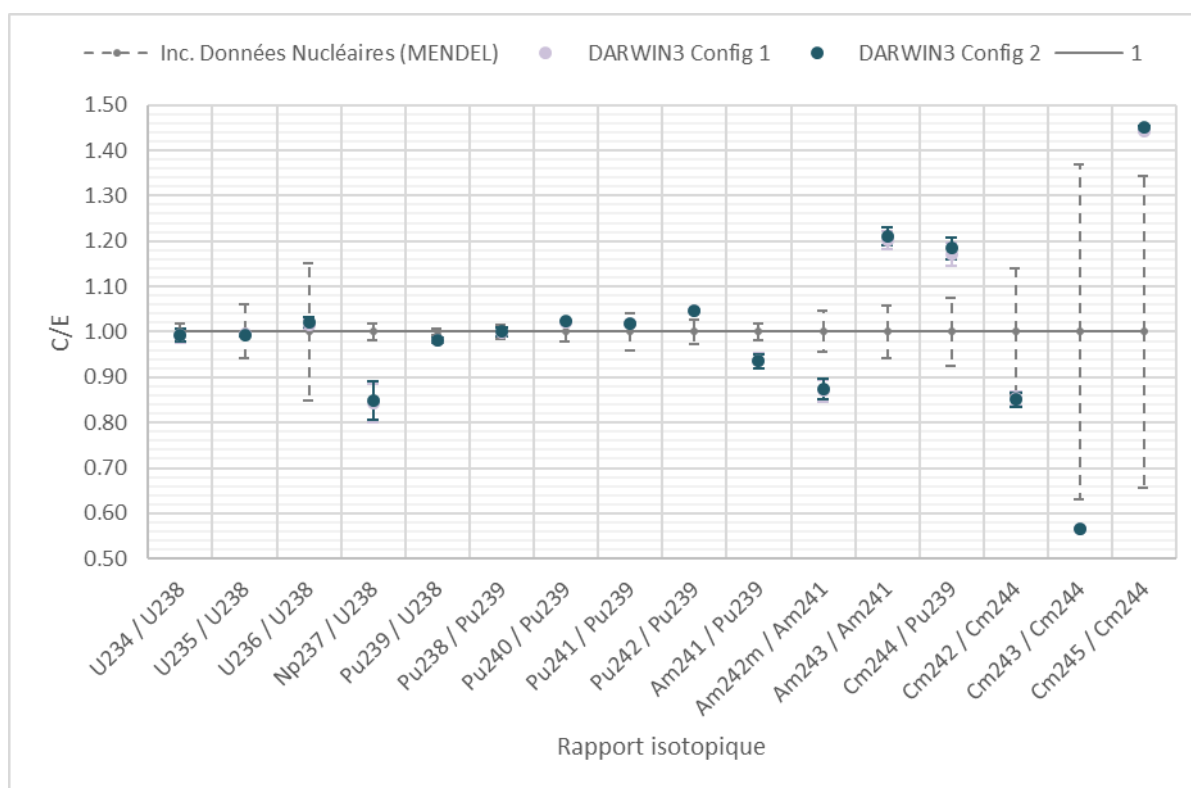
3.4.4 Impact de l'évolution du cœur

Afin de conclure quant à l'hypothèse utilisée avec TRIPOLI-4® de faire évoluer uniquement les concentrations des aiguilles TRAPU dans un souci de conserver des temps de calcul raisonnables, nous avons testé cette hypothèse avec DARWIN3, en comparant un cas où l'on ne fait évoluer que les aiguilles d'intérêt, et un cas où on fait évoluer le cœur complet (Tableau 27). Pour rappel, dans les deux cas, la modélisation est semi-hétérogène.

Formulaire		Température de modélisation	Chaîne d'évolution	Données nucléaires	Evolution dans notre calcul
DARWIN3	Config 1	20°C	REP	JEFF-3.1.1	<u>Aiguilles TRAPU</u>
DARWIN3	Config 2	20°C	REP	JEFF-3.1.1	<u>Cœur Complet</u>

Tableau 27 : Extrait du Tableau 9 pour l'impact de l'évolution du cœur

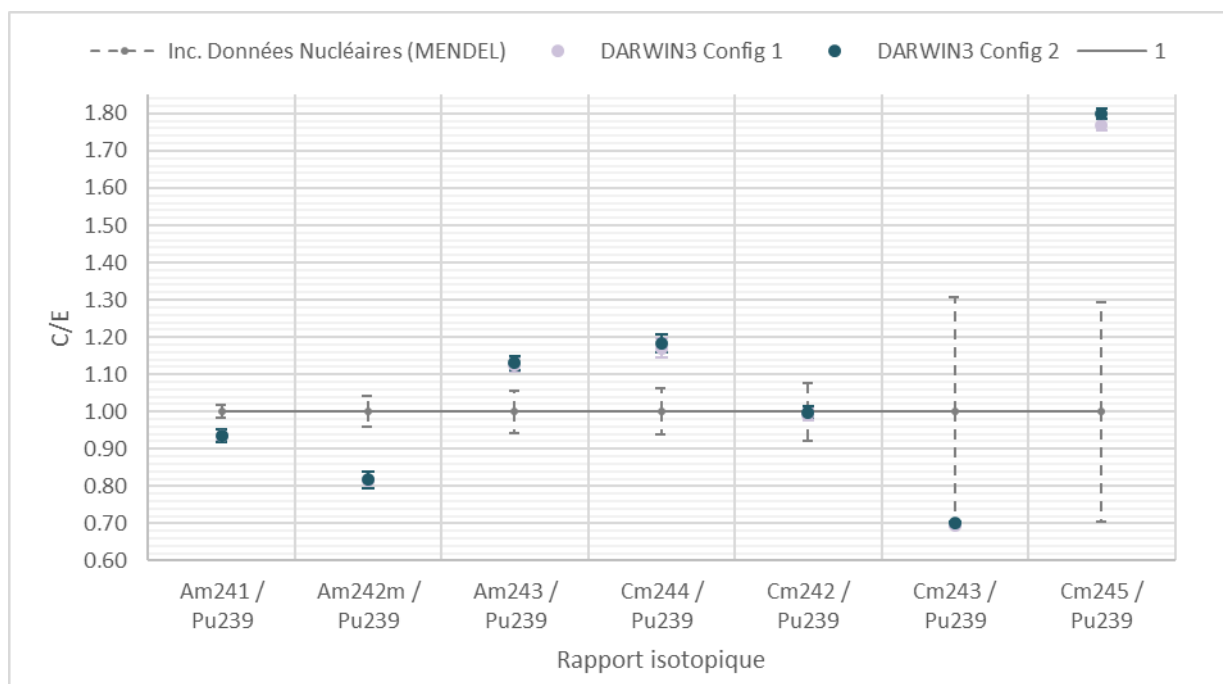
Le graphique ci-dessous (Graphique 20) montre les C/E des rapports isotopiques obtenus.



Graphique 20 : TRAPU : Impact de l'évolution du cœur

On remarque que les résultats sont identiques pour l'ensemble des rapports isotopiques. On peut donc conclure que l'hypothèse que seules les aiguilles d'intérêt évoluent pour la réalisation des calculs Monte Carlo est valable.

On retrouve des valeurs similaires pour les productions des américiums et les curiums en comparant avec le plutonium 239 (Graphique 21).



Graphique 21 : TRAPU : Impact de l'évolution du cœur – américiums et curiums

Faire des calculs en évolution en ne faisant évoluer que les concentrations des aiguilles d'intérêt, dans un souci de conserver des temps de calcul raisonnables, semble donc être une hypothèse valable.

Cette hypothèse est applicable notamment aux calculs Monte Carlo en évolution, extrêmement chronophages.

3.4.5 Impact de la chaîne de filiation

La chaîne d'évolution proposée par défaut est une chaîne pour l'évolution dans les réacteurs à eau pressurisée (REP), donc des réacteurs thermiques, au contraire des réacteurs à neutrons rapides (RNR) qui eux fonctionnent dans le spectre rapide.

Or, les rapports de branchement de l'américium 241 vers les américiums 242 métastable (242M) et stable (242G) sont sensibles au spectre des neutrons (*Bernard, 2012*)

- On estime qu'en spectre thermique, ces rapports de branchement sont respectivement de 11 et 89%.
- En spectre rapides, ils sont estimés à 15 et 85%.

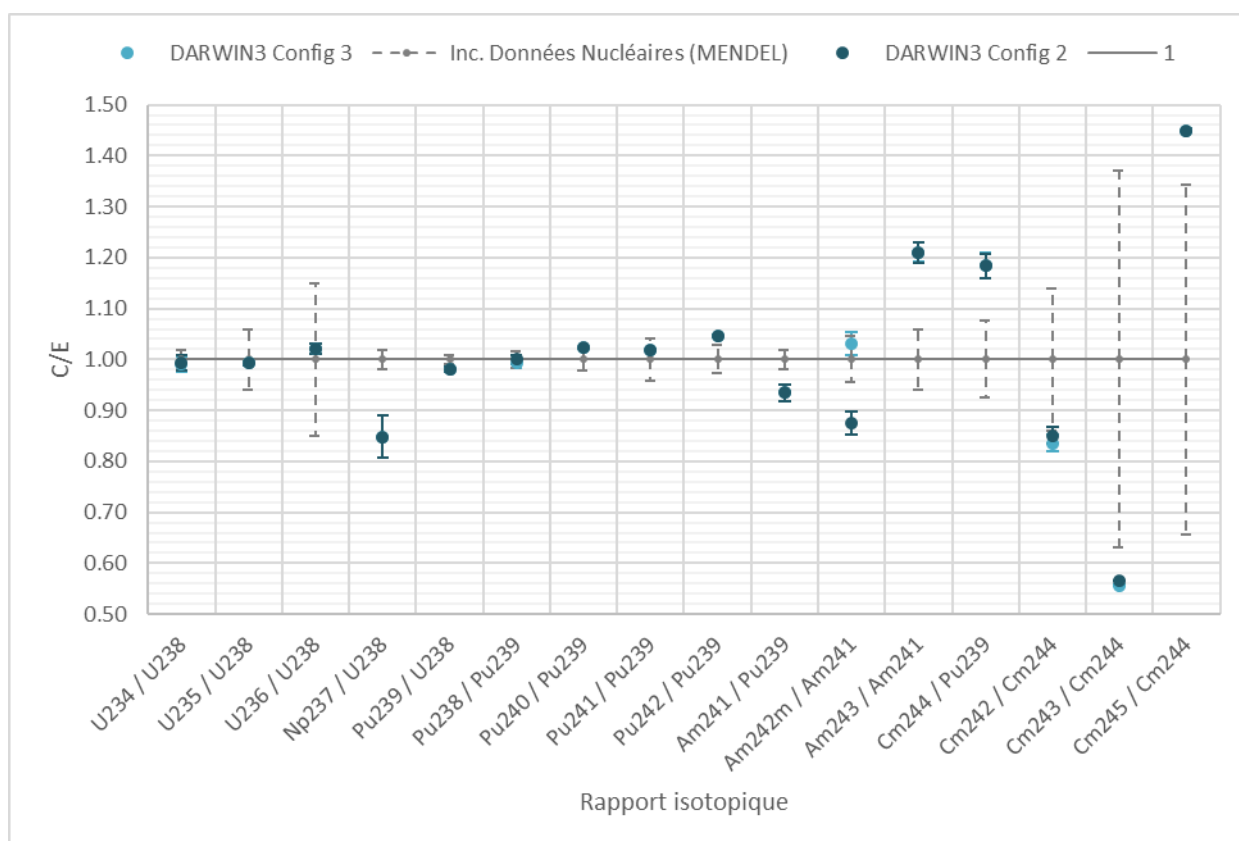
Cet ajustement a été réalisé à la suite du retour des interprétations des expériences PROFIL (*Tommasi, 2008*).

Formulaire		Température de modélisation	Chaîne d'évolution	Données nucléaires	Evolution dans notre calcul
DARWIN3	Config 2	20°C	<u>REP</u>	JEFF-3.1.1	Cœur Complet
DARWIN3	Config 3	20°C	<u>RNR</u>	JEFF-3.1.1	Cœur Complet

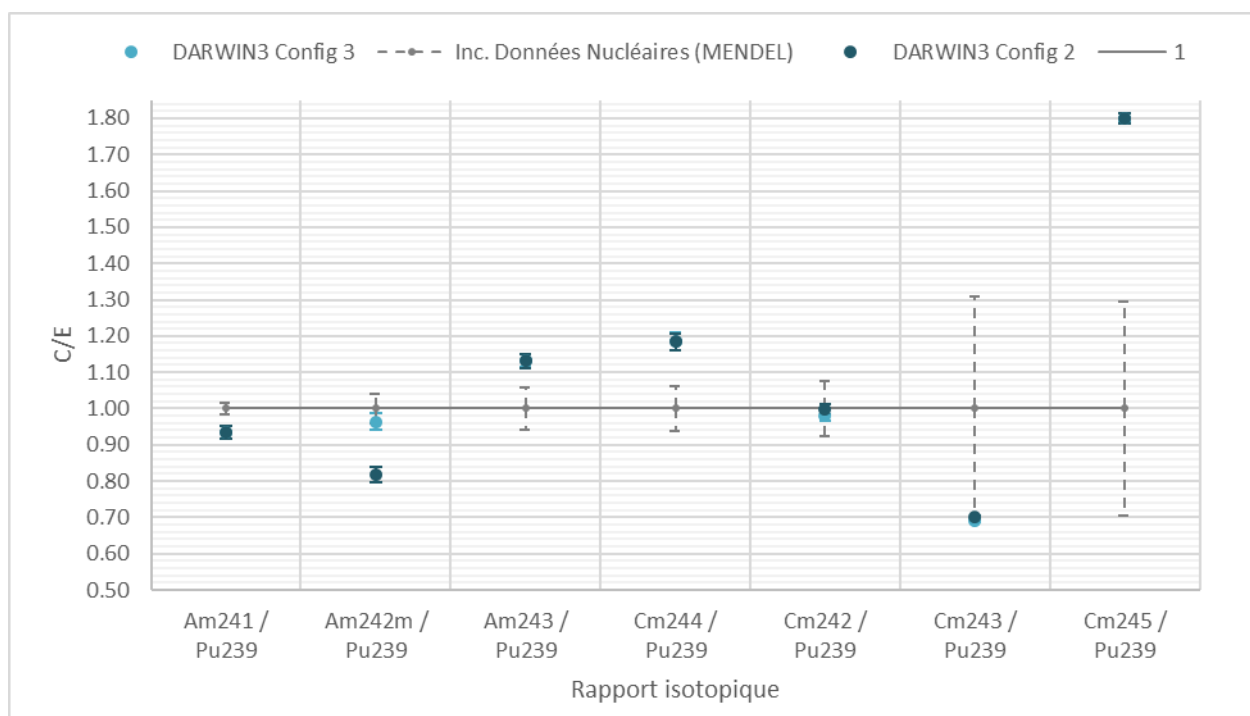
Tableau 28 : Extrait du Tableau 9 pour l'impact de la chaîne d'évolution

On remarque en effet sur les Graphique 22 et Graphique 23 que :

- le changement de chaîne n'a pas d'impact sur l'ensemble des productions des isotopes, sauf l'américium 242M. Le C/E obtenu est bien plus proche de 1, et appuie l'ajustement effectué à la suite des expériences PROFIL.
- Il semble que les productions des curiums présentent de légers écarts, mais trop faibles pour être interprétables.



Graphique 22 : TRAPU : Impact de la chaîne de filiation



Graphique 23 : TRAPU : Impact de la chaîne de filiation – américiums et curiums

Sur le Tableau 29 ci-dessous, présentant les écarts relatifs entre les résultats obtenus avec les différentes modélisations, on retrouve que :

- L'écart entre les deux modélisations est très marqué pour la **production de l'américium 242M**.
- Un léger écart s'observe pour la production du **curium 242**. C'est cohérent car la modification du rapport du branchement de l'américium 241 vers les américiums 242M et 242G impacte également la production du curium 242, produit par la désintégration β de l'américium 242G.
- Cet écart se retrouve également sur la production du **curium 243**, produit par la capture du curium 242.
- Un léger effet est visible sur la production du **plutonium 238**. En effet, une partie du plutonium 238 est produit par la désintégration α du curium 242.

$^{234}\text{U} / ^{238}\text{U}$	0.00	$^{241}\text{Am} / ^{239}\text{Pu}$	0.00	$^{241}\text{Am} / ^{239}\text{Pu}$	0.00
$^{235}\text{U} / ^{238}\text{U}$	0.00	$^{242\text{M}}\text{Am} / ^{241}\text{Am}$	0.15	$^{242\text{M}}\text{Am} / ^{239}\text{Pu}$	0.15
$^{236}\text{U} / ^{238}\text{U}$	0.00	$^{243}\text{Am} / ^{241}\text{Am}$	0.00	$^{243}\text{Am} / ^{239}\text{Pu}$	0.00
$^{237}\text{Np} / ^{238}\text{U}$	0.00	$^{244}\text{Cm} / ^{239}\text{Pu}$	0.00	$^{244}\text{Cm} / ^{239}\text{Pu}$	0.00
$^{239}\text{Pu} / ^{238}\text{U}$	0.00	$^{242}\text{Cm} / ^{244}\text{Cm}$	0.02	$^{242}\text{Cm} / ^{239}\text{Pu}$	0.02
$^{238}\text{Pu} / ^{239}\text{Pu}$	0.01	$^{243}\text{Cm} / ^{244}\text{Cm}$	0.02	$^{243}\text{Cm} / ^{239}\text{Pu}$	0.02
$^{240}\text{Pu} / ^{239}\text{Pu}$	0.00	$^{245}\text{Cm} / ^{244}\text{Cm}$	0.00	$^{245}\text{Cm} / ^{239}\text{Pu}$	0.00
$^{241}\text{Pu} / ^{239}\text{Pu}$	0.00				
$^{242}\text{Pu} / ^{239}\text{Pu}$	0.00				

Tableau 29 : Ecart $\left| \frac{C'}{C} - 1 \right|$ entre les chaînes d'évolution REP et RNR

L'utilisation de la **chaîne d'évolution spécifique au spectre rapide**, dont le rapport de branchement de l'américium 241 vers les américiums 242M et 242G a été ajusté, est nécessaire pour la bonne estimation de la **production de l'américium 242M et 242G**.

Son utilisation est donc nécessaire pour une bonne estimation du rapport isotopique de l'américium 242M et dans un deuxième ordre, pour la bonne estimation de la production du curium 242, du curium 243 et du plutonium 238.

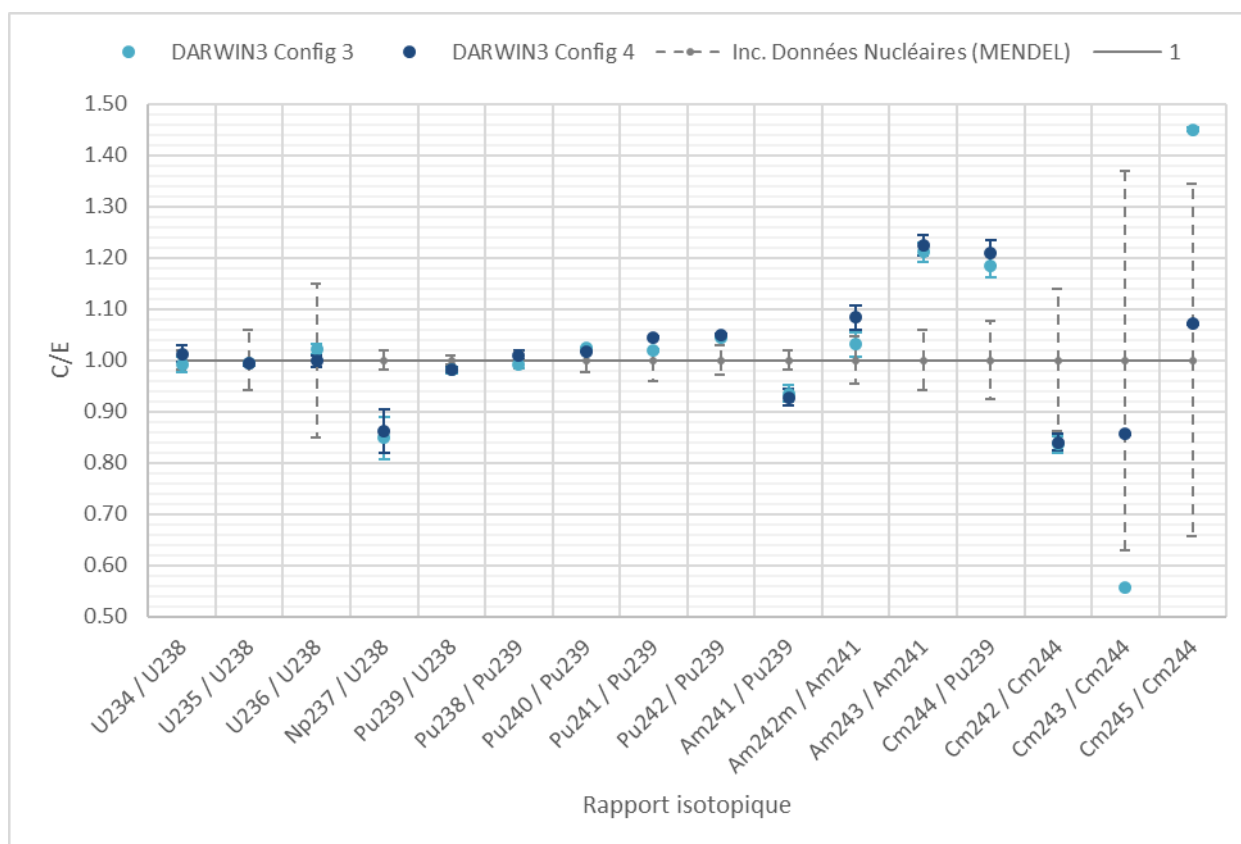
3.4.6 Impact de la bibliothèque de données nucléaires

Les données nucléaires utilisées sont celles de la bibliothèque JEFF-3.1.1. Or les données nucléaires sont continuellement améliorées. La bibliothèque de données nucléaires JEFF-3.2 inclut notamment de nouvelles données pour les **curiums 243 et 245**, issues de nouvelles évaluations du curium.

Formulaire		Température de modélisation	Chaîne d'évolution	Données nucléaires	Evolution
DARWIN3	Config 3	20°C	RNR	<u>JEFF-3.1.1</u>	Cœur Complet
DARWIN3	Config 4	20°C	RNR	<u>JEFF-3.2</u>	Cœur Complet

Tableau 30 : Extrait du Tableau 9 pour l'impact de la bibliothèque de données nucléaires

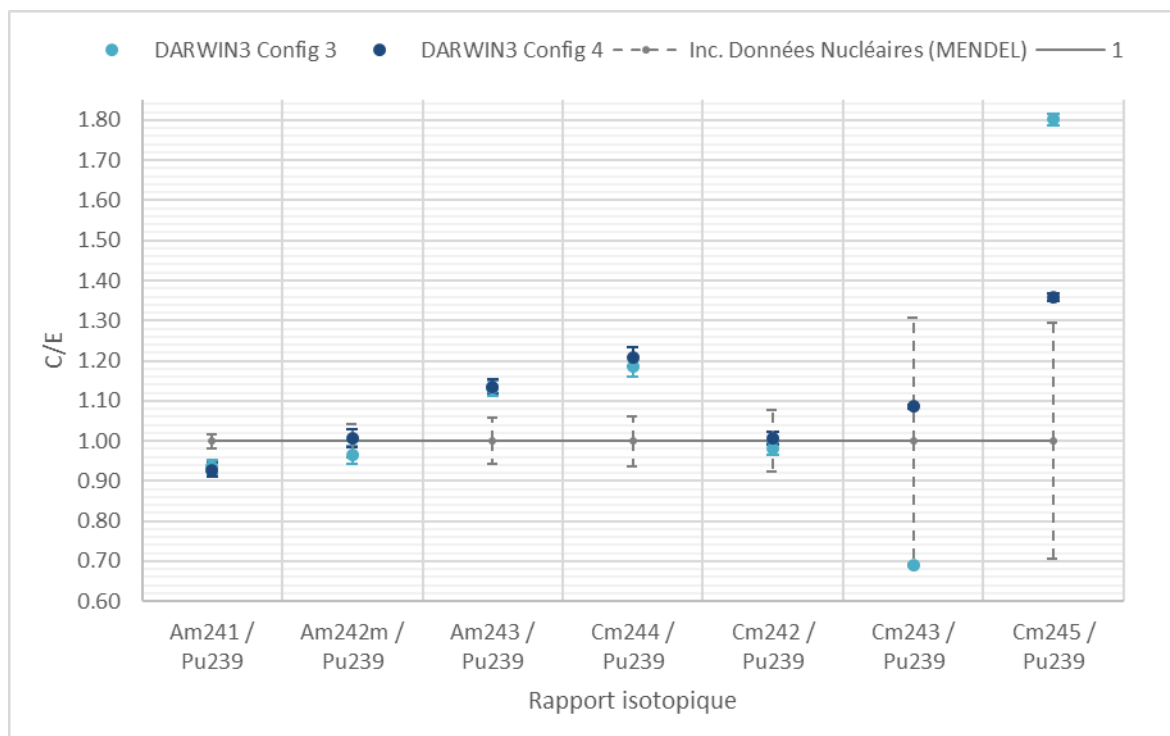
Les graphiques ci-dessous (Graphique 24 et Graphique 25) présentent les résultats obtenus en utilisant les deux bibliothèques (Tableau 30).



Graphique 24 : TRAPU : Impact de la bibliothèque de données nucléaires

On remarque en effet que :

- Les productions des isotopes de l'uranium et du plutonium, ainsi que du neptunium 237, ont des valeurs semblables entre les deux modélisations : elles présentent de légers écarts, comme pour l'uranium 236, mais sont compatibles à leurs incertitudes.
- Les productions d'**américiums** sont également semblables, avec un léger écart pour la production d'américium 242M mais qui reste compatible à leurs incertitudes et aux incertitudes sur les données nucléaires. Si JEFF-3.1.1 paraît donner de meilleurs résultats pour le rapport $^{242M}\text{Am}/^{241}\text{Am}$ (Graphique 24), lorsque l'on s'intéresse au rapport $^{242M}\text{Am}/^{239}\text{Pu}$ (Graphique 25), on constate qu'en réalité, JEFF-3.2 offre de meilleurs résultats. Recalculer les rapports isotopiques des isotopes de l'américium et de curium sur des isotopes mieux connus semble indispensable pour s'affranchir de la cumulation possible de biais.
- Les productions de **curiums 243 et 245** présentent de meilleurs C/E avec JEFF-3.2, il semble donc indiqué d'utiliser cette bibliothèque de données nucléaires pour analyser les isotopes du curium. Les autres isotopes du curium sont cohérents à leurs incertitudes près.



Graphique 25 : TRAPU : Impact de la bibliothèque de données nucléaires – américiums et curiums

Utiliser la bibliothèque de **données nucléaires JEFF-3.2** est nécessaire pour **une estimation correcte de la production des curiums 243 et 245**. Elle semble également légèrement modifier les captures de l'américium 241 et a donc un impact sur l'ensemble du calcul de la production des américiums et des curiums.

L'importance de s'affranchir des biais cumulés sur certains rapports isotopiques, en utilisant des isotopes mieux connus et mieux calculés comme dénominateur, est mis en avant par les résultats obtenus de l'américium 242M.

En effet, en observant le rapport isotopique $^{242M}\text{Am}/^{241}\text{Am}$, les résultats paraissent meilleurs avec JEFF-3.1.1, mais lorsque l'on se penche sur le rapport $^{242M}\text{Am}/^{239}\text{Pu}$, on constate en réalité que les résultats sont meilleurs avec JEFF-3.2.

Ainsi, il peut y avoir une **compensation de biais** sur certains isotopes, et s'affranchir de la cumulation de biais est alors indispensable pour une interprétation plus juste des résultats obtenus.

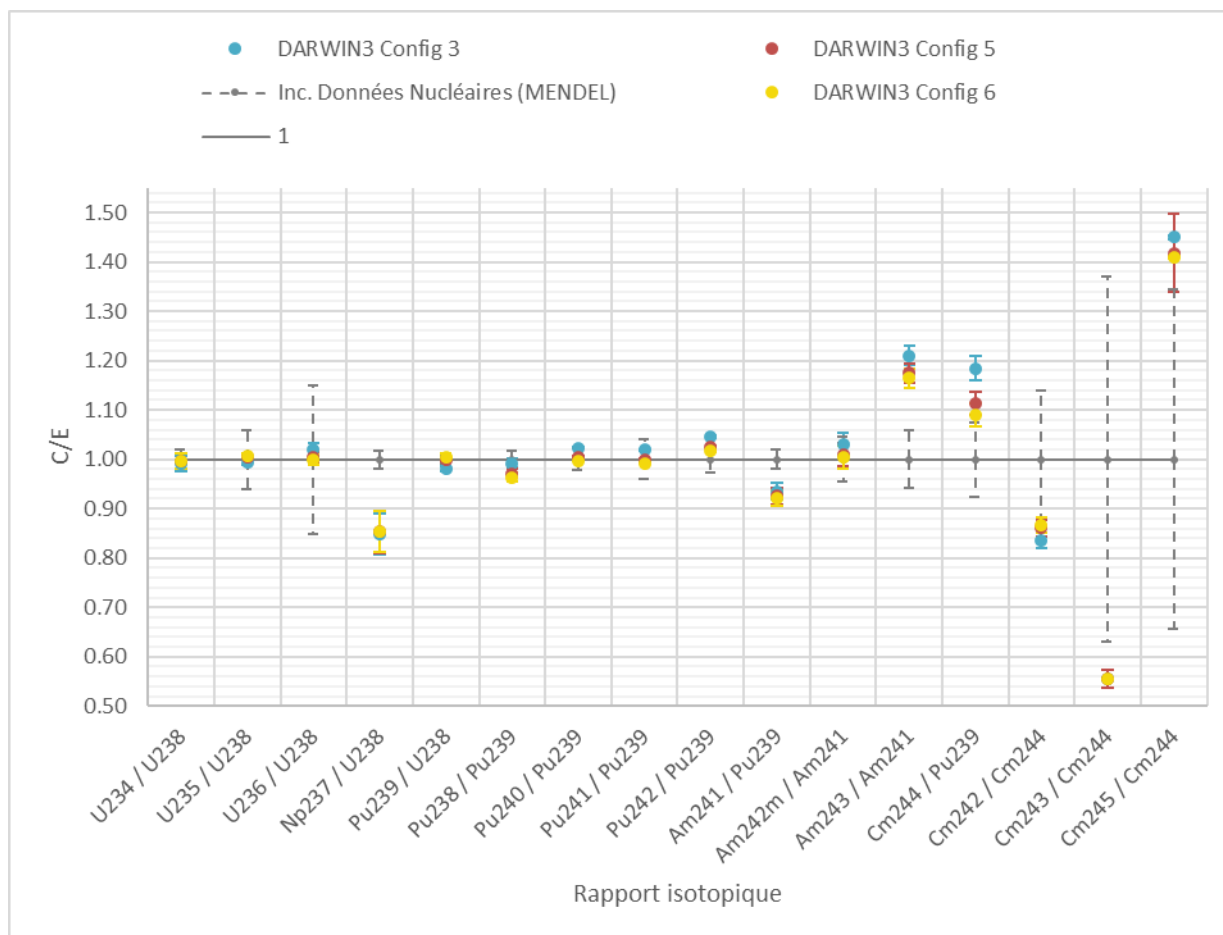
3.4.7 Impact de la température

La température du cœur en fonctionnement est modélisée avec DARWIN2 à 1227°C pour les assemblages combustibles, et 627°C pour les assemblages fertiles. La modélisation effectuée avec TRIPOLI-4® est à 20°C. En effet, nous sommes limités par les données disponibles et les temps de calcul, cependant certaines hypothèses de modélisation nécessitent d'être testées. Nous nous sommes donc intéressés à l'impact de la température de modélisation avec DARWIN3 (Tableau 31).

Formulaire		Température de modélisation	Chaîne d'évolution	Données nucléaires	Evolution
DARWIN3	Config 3	20°C	RNR	JEFF-3.1.1	Cœur Complet
DARWIN3	Config 5	650°C	RNR	JEFF-3.1.1	Cœur Complet
DARWIN3	Config 6	1227°C (Combustibles) + 650°C (Fertiles)	RNR	JEFF-3.1.1	Cœur Complet

Tableau 31 : Extrait du Tableau 9 pour l'impact de la température

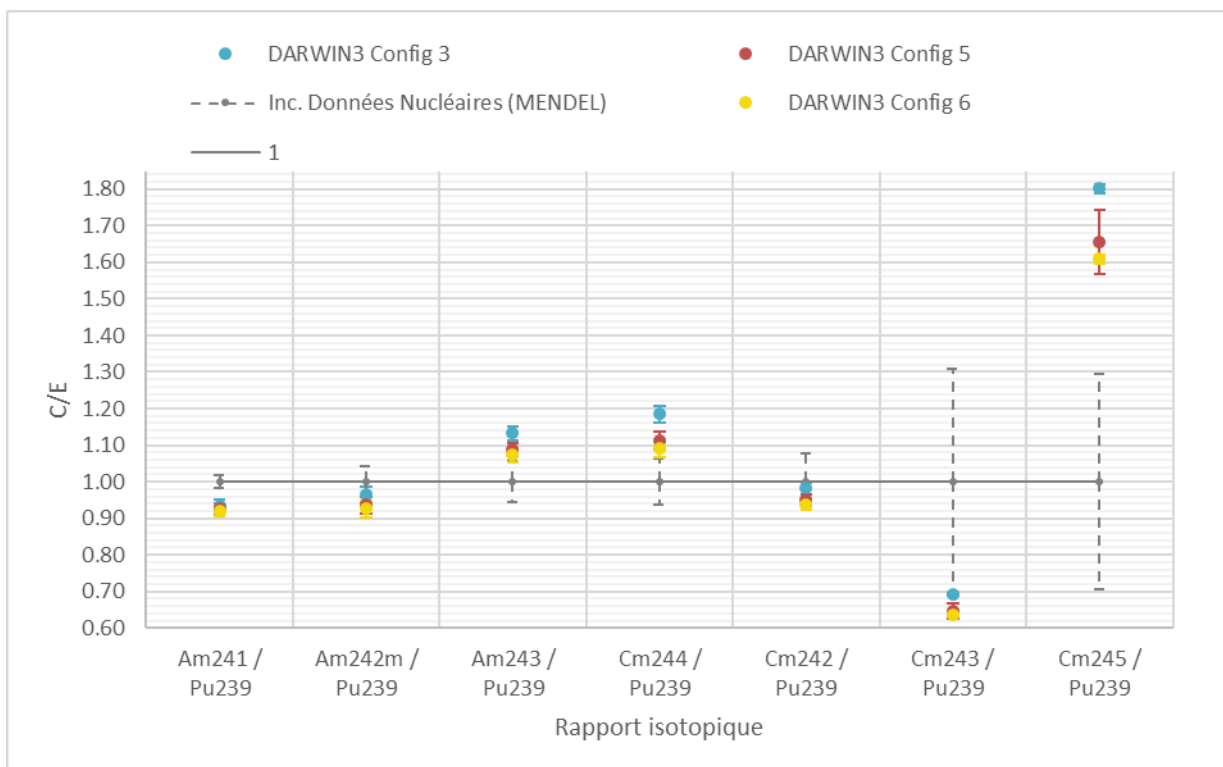
Les graphiques suivants (Graphique 26Graphique 24Graphique 24 et Graphique 27Graphique 25) présentent les résultats obtenus avec les différentes modélisations du Tableau 31.



Graphique 26 : TRAPU : Impact de la température de modélisation

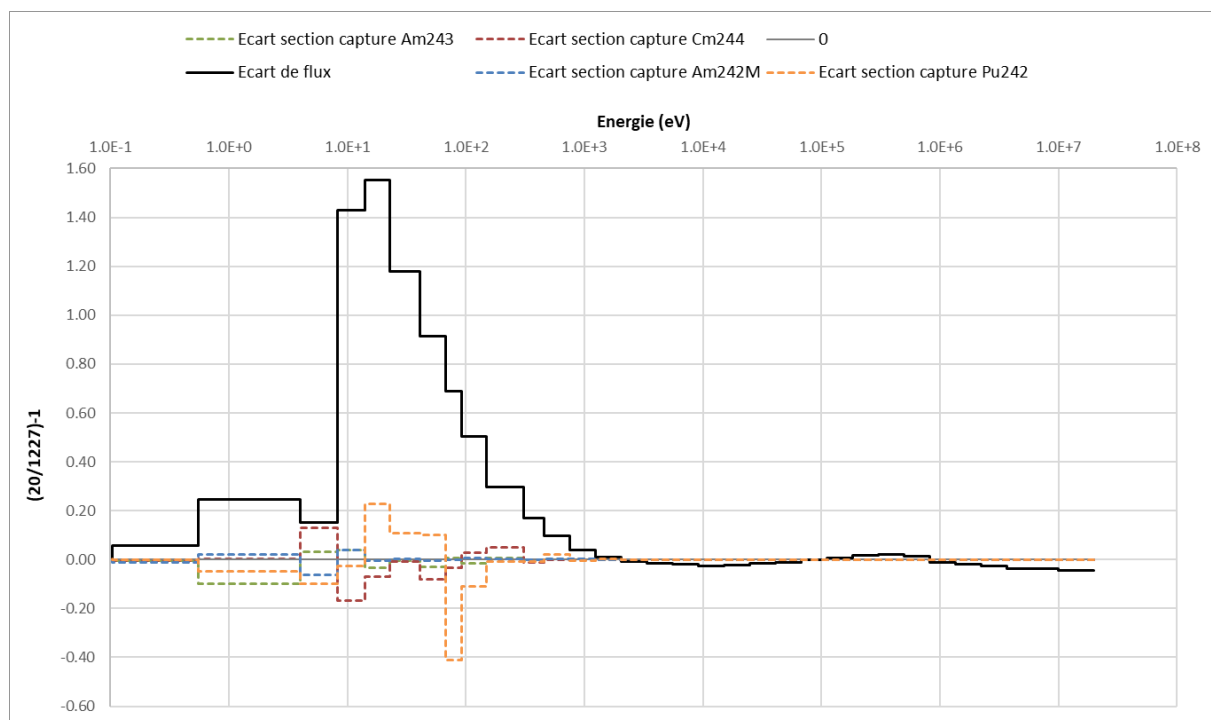
On remarque que :

- Pour les isotopes de l'**uranium** et le **neptunium 237**, l'impact est limité.
- De légers écarts sont visibles pour les productions des **plutoniums**, avec une amélioration lorsque la température augmente. Cependant, les écarts observés sont compatibles au regard de leurs incertitudes.
- Les productions des isotopes de l'**américium** sont elles aussi semblables, avec une amélioration lorsque la température augmente. Les écarts sont cependant compatibles avec les incertitudes.
- L'augmentation de la température a un impact non négligeable sur la production de **curium 244**, les valeurs sont compatibles lorsque l'on passe du cœur à 650°C (config 5) à celui à 1227°C + 650°C (config 6), mais la valeur est moins bien prédite à 20°C (config 3).
- L'impact est très marqué pour la production de **curium 245**, en effet les sections de capture du curium 244 sont sensibles à la température (Graphique 27 Graphique 26).



Graphique 27 : TRAPU : Impact de la température de modélisation – américiums et curiums

On remarque en effet sur le graphique suivant (Graphique 28) qui présente les écarts du calcul à 20°C (configuration 3) par rapport à celui à 1227°C (configuration 6) que les sections impliquées dans les productions de ces isotopes et le spectre neutronique subissent des variations avec la température.



Graphique 28 : Comparaison du calcul à 20°C par rapport à celui à 1227°C

On remarque notamment que le niveau de flux à basse énergie est bien plus important à 20°C qu'à 1227°C, ce qui explique pourquoi la température impacte grandement la production des isotopes des américiums et du curium, qui sont particulièrement sensibles au spectre à basse énergie.

L'utilisation dans notre modélisation de **températures représentatives** des températures réelles est donc nécessaire pour une estimation correcte de la production des isotopes de l'américium et du curium. En effet, les flux neutroniques sont sensibles à la température.

3.4.8 Conclusions concernant l'expérience TRAPU

Conclusions partielles concernant DARWIN3

Le formulaire DARWIN3 présente de nombreux avantages pour le calcul des bilans matières des noyaux lourds dans le cœur interne de PHENIX, réacteur à neutrons rapides (RNR) refroidi au sodium.

- DARWIN3 est performant pour estimer la production de la majorité des actinides majeurs, à la fois en comparaison à TRIPOLI-4® et à DARWIN2. Ces isotopes sont notamment importants pour modéliser le fonctionnement d'un réacteur. Ces résultats sont cohérents car la concentration finale des isotopes du plutonium et de l'uranium dépendent majoritairement de leur concentration initiale, qui est identique dans les différents outils de calcul.
- Le spectre neutronique obtenu avec DARWIN3 est plus doux que ceux de TRIPOLI-4® et de DARWIN2. Cela explique les écarts observés sur certains isotopes, notamment pour le neptunium 237 et pour les isotopes de l'américium et du curium. La concentration finale de ces isotopes dépend majoritairement de réactions de capture sur différents isotopes. Ainsi, les variations de spectre neutronique, qui impactent les taux de réactions, vont fortement impacter les productions de ces isotopes.
- Cependant, le spectre obtenu avec TRIPOLI-4®, reconstruit à 33 groupes pour permettre la comparaison à DARWIN3, est en réalité continu. Il n'est pas à négliger la possibilité d'un impact supplémentaire du découplage énergétique sur les écarts observés, notamment du fait de résonances à basse énergie.

Conclusions partielles concernant les hypothèses et les modélisations

DARWIN3 permet également, de par des temps de calculs raisonnables, de tester un certain nombre d'hypothèses et de modélisations.

- **L'hypothèse simplificatrice de l'évolution des concentrations des aiguilles d'intérêt uniquement est justifiée** : elle n'impacte pas les résultats obtenus.
- **L'utilisation d'une chaîne d'évolution spécifique** au spectre rapide, dont le rapport de branchement de l'américium 241 a été modifié, **est indispensable** pour une étude correcte des **actinides mineurs** (isotopes de l'américium, du curium) et également du plutonium 238.
- L'utilisation de la **bibliothèque de données nucléaires JEFF-3.2** est **nécessaire** pour l'analyse des **actinides mineurs** (surtout les curiums 243 et 245). Elle impacte en effet l'ensemble des américiums et des curiums de façon plus ou moins marquée.
- **L'utilisation dans notre modélisation de températures représentatives des températures réelles** est **nécessaire** pour une estimation correcte de la production des isotopes de l'américium et du curium. En effet, le spectre neutronique est sensible à la température.

3.5 ANALYSE DES RESULTATS DE L'EXPERIENCE DOUBLON

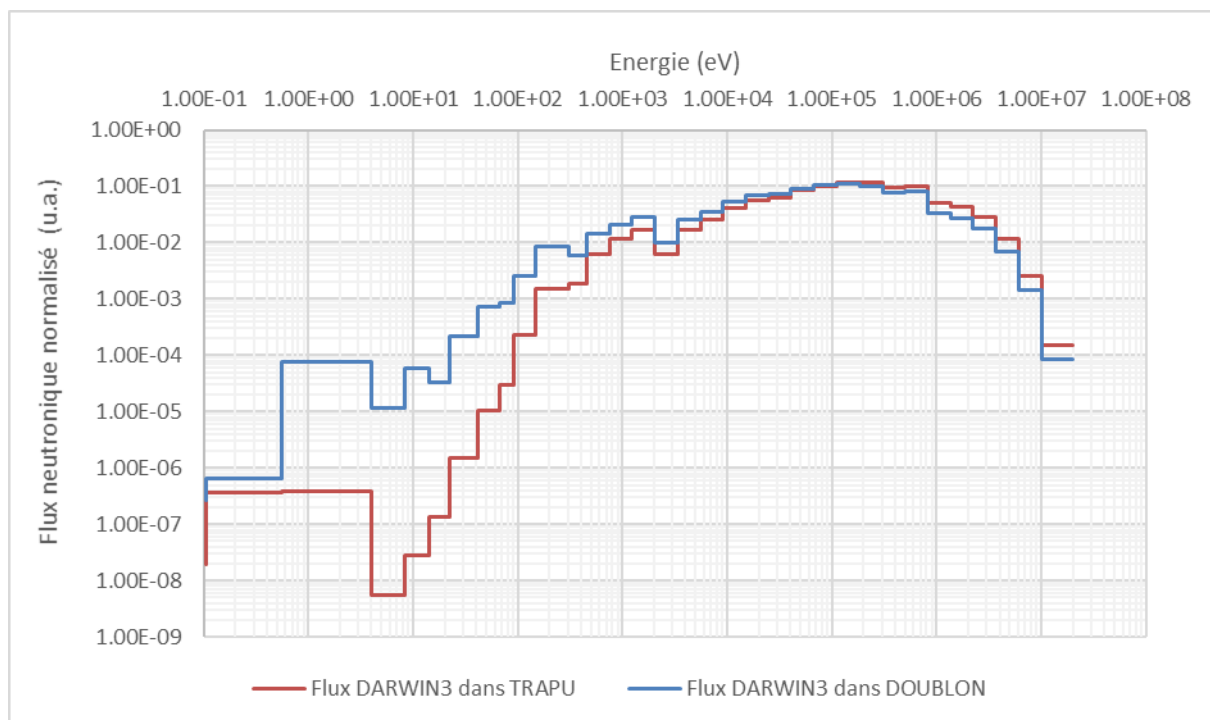
Pour rappel, l'expérience DOUBLON consiste en l'irradiation de deux assemblages fertiles radiaux, FEF79 et FEG58, durant des cycles réacteur légèrement différents. Pour la modélisation de l'expérience DOUBLON, deux « cœurs » sont modélisés par deux calculs différents, en respectant l'historique d'irradiation de chacun des assemblages FEF79 et FEG58 (Graphique 4 et Graphique 5, §3.2.3).

Le calcul des incertitudes – dont la méthodologie est développée dans l'Annexe B – se fonde sur la formule de l'Annexe B, partie IV. Les tableaux présentant les valeurs obtenues sont en Annexe F.

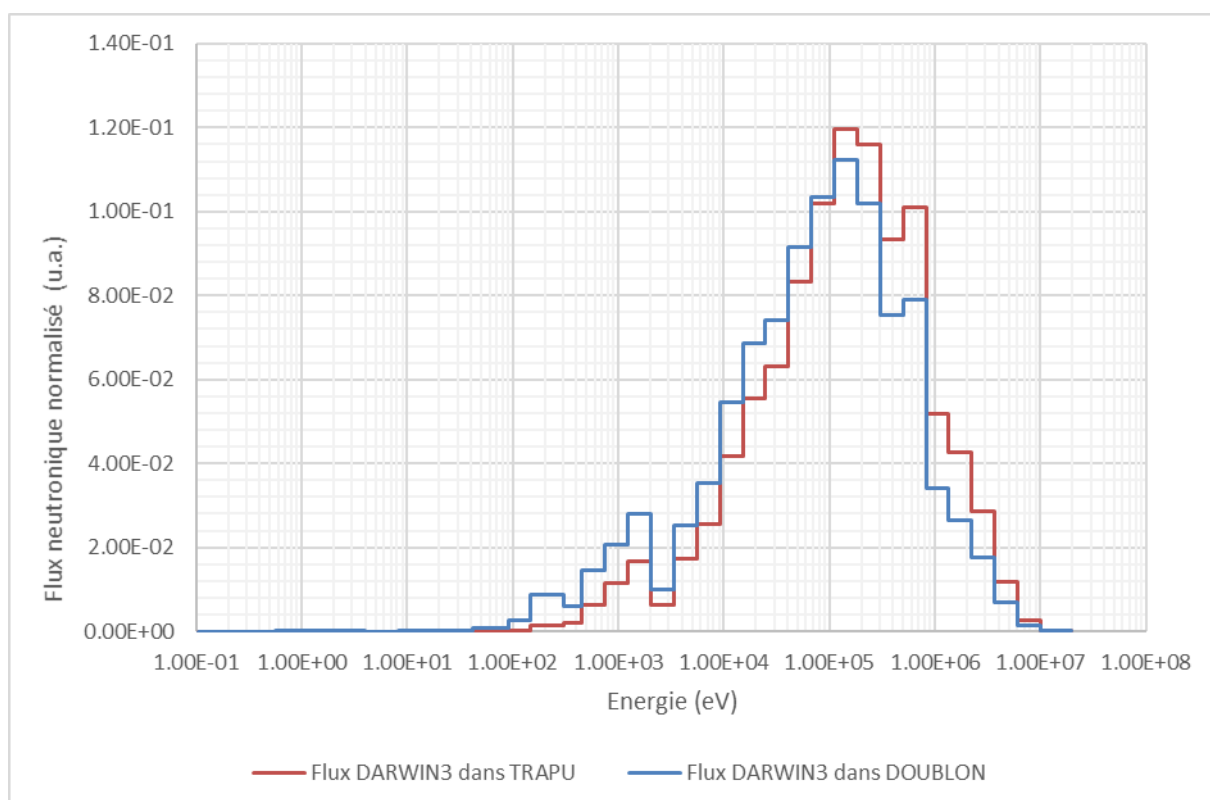
Les résultats présentés seront uniquement des rapports calcul / expérience (C/E). Les données brutes ne sont pas fournies pour des raisons de confidentialité de ces résultats.

3.5.1 Complexité du calcul du niveau de flux dans la couverture fertile

Prédire le niveau et le spectre énergétique du flux de neutrons dans la couverture fertile est complexe pour les codes de calculs. Entre le cœur interne et la couverture fertile, le spectre neutronique se dégrade ou « s'adoucit », i.e. la part des neutrons à des énergies thermiques et épithermiques augmente tandis que la part des neutrons à des énergies rapides diminue (Graphique 29 et Graphique 30).



Graphique 29 : Spectre neutronique dans DOUBLON (couverture fertile radiale) et dans TRAPU (fissile cœur interne) – Echelle logarithmique pour l'analyse à basse énergie



Graphique 30 : Spectre neutronique dans DOUBLON (couverture fertile radiale) et dans TRAPU (fissile cœur interne) – Echelle linéaire pour l'analyse à basse énergie

3.5.2 Impact du plan de chargement avec TRIPOLI-4®

Au cours de l'irradiation, l'environnement des assemblages FEF79 et FEG58 a été modifié :

- En position **25-14**, l'assemblage fertile initialement présent a été remplacé par un assemblage fissile aux **20^{ème} et 21^{ème}** cycles (du 23/06/1980 au 04/01/1980)
- En position **26-15**, l'assemblage fertile initialement présent a été remplacé par un assemblage fertile du **19^{ème} au 22^{ème}** cycles (du 11/01/1980 au 05/04/1981)

Cette modification peut impacter les assemblages de l'expérience DOUBLON, et notamment l'assemblage FEG58 comme on peut le voir sur la figure ci-dessous (Figure 26).

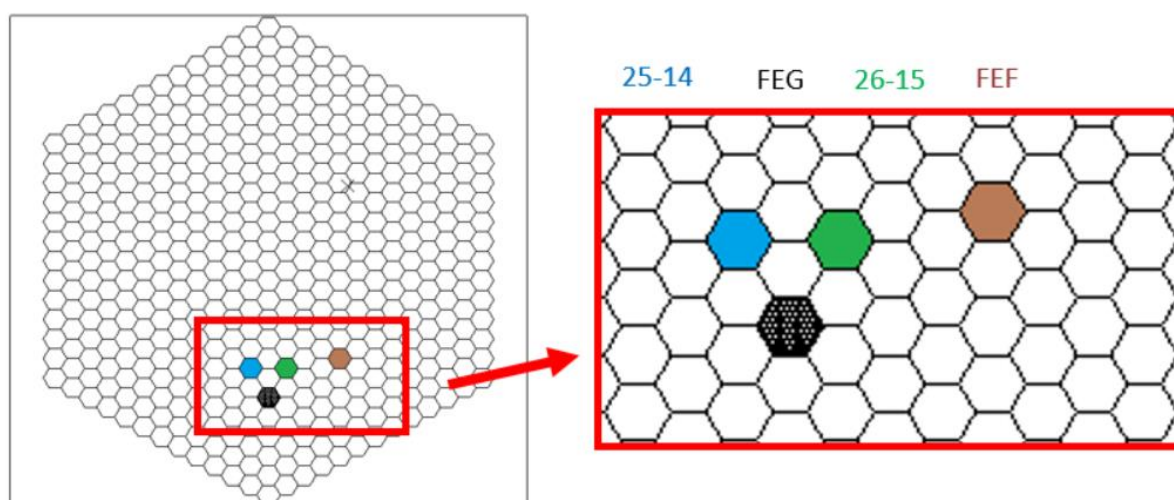


Figure 26 : Les positions 25-14 et 26-15 auxquelles ont lieu des changements d'assemblages durant l'expérience DOUBLON

L'assemblage FEG58 est directement impacté par ces modifications car il se situe dans l'axe de ces assemblages en partant du centre du cœur. On considère que l'assemblage FEF79 n'est que peu impacté par ce changement.

Ainsi, deux modélisations sont testées avec TRIPOLI-4® **pour l'assemblage FEG58** (Tableau 32) :

- 1) Sans prise en compte de ces modifications d'environnement (plan de chargement constant)
- 2) Avec prise en compte des modifications de l'environnement pour l'assemblage FEG58 (plan de chargement évoluant)

Hormis en ces deux positions, le reste du plan de chargement est considéré constant.

Formulaire	Température de modélisation	Chaîne d'évolution	Données nucléaires	Evolution	Plan de chargement
------------	-----------------------------	--------------------	--------------------	-----------	--------------------

TRIPOLI-4®	20°C	REP	JEFF-3.1.1	Aiguilles DOUBLON	<u>Constant</u>
TRIPOLI-4®	20°C	REP	JEFF-3.1.1	Aiguilles DOUBLON	<u>Evoluant</u> <u>(FEG58)</u>

Tableau 32 : Extrait du Tableau 10 – Impact du plan de chargement

3.5.2.1 Modélisation de la modification du plan de chargement dans l'environnement de l'assemblage FEG58

Pour modéliser la modification du plan de chargement avec TRIPOLI-4®, il a été nécessaire de générer plusieurs géométries (Figure 27+ Figure 28).

- Lorsque le plan de chargement n'est pas modifié au cours d'irradiation (« *plan de chargement constant* »), en position 25-14 et 26-15 sont positionnés des **assemblages fertiles** pendant toute la durée de l'irradiation (Figure 27)

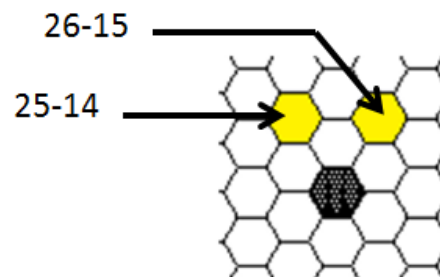


Figure 27 : Géométrie sans prise en compte des modifications du plan de chargement

- Lorsque le plan de chargement est modifié (« *plan de chargement évolutif* »), quatre étapes sont nécessaires au calcul (Figure 28) :
 - ➔ Une première étape, avant le cycle 19, où des assemblages fertiles sont en position 25-14 et 26-15
 - ➔ Au cycle 19, en position 26-15, l'assemblage fissile a remplacé le fertile, mais en position 25-14 il y a toujours un assemblage fertile
 - ➔ Aux cycles 20 et 21, aux positions 25-14 et 26-15, il y a des assemblages fissiles
 - ➔ Enfin, au cycle 22, en position 25-14, il y a de nouveau un assemblage fertile tandis qu'en position 26-15, il y a toujours l'assemblage fissile

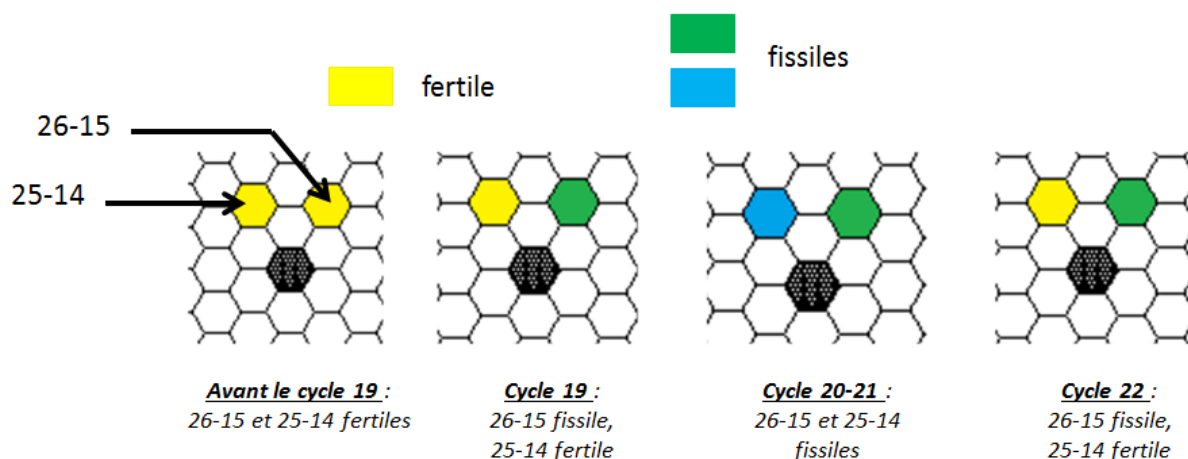


Figure 28 : Géométries avec prise en compte des changements aux positions 25-14 et 26-15.

3.5.2.2 Impact du plan de chargement sur l'assemblage FEG58

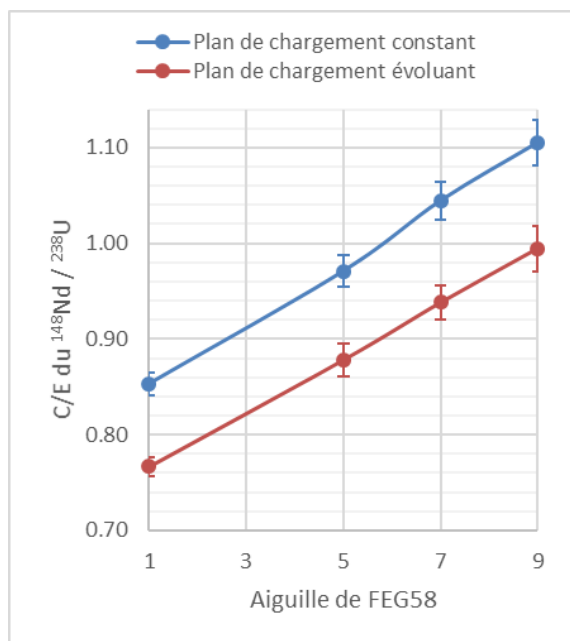
Nous nous intéressons au rapport isotopique du $^{148}\text{Nd} / ^{238}\text{U}$, témoin du niveau de flux dans les aiguilles d'intérêt de l'assemblage FEG58. Les graphiques ci-dessous (Graphique 31 et Graphique 32) montrent le C/E de ce rapport isotopique.

Les résultats sont présentés sans recalage, donc la moyenne des C/E du $^{148}\text{Nd} / ^{238}\text{U}$ n'est pas égale à 1. En effet, nous ne pouvons pas savoir a priori quel facteur de recalage utiliser, ni quelle est la meilleure façon d'effectuer un recalage : en se basant sur la valeur de la moyenne des C/E du $^{148}\text{Nd} / ^{238}\text{U}$ des aiguilles étudiées des assemblages de l'expérience DOUBLON, en se basant sur la valeur du C/E du $^{148}\text{Nd} / ^{238}\text{U}$ de la première aiguille de la couverture fertile, etc.

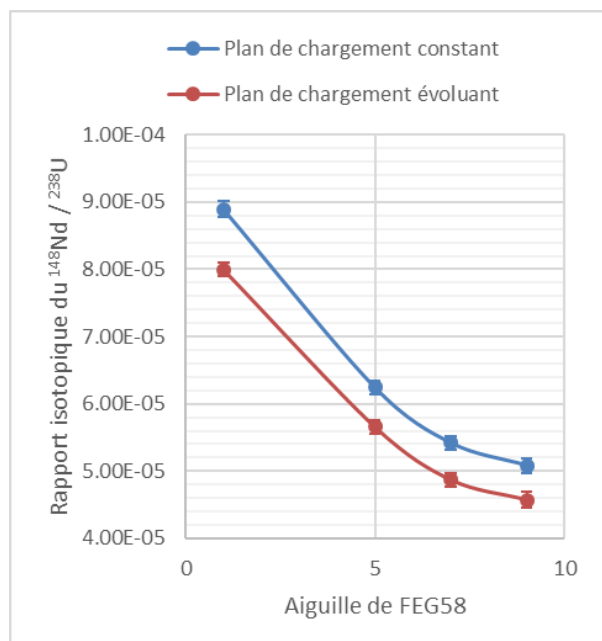
Cependant, les différents cas sont testés sur la même modélisation avec TRIPOLI-4®, avec les mêmes paramètres de calcul, et permettent donc, malgré l'absence de recalage, de conclure quant à l'impact du plan de chargement.

On remarque que (Graphique 31 et Graphique 32) :

- Il y a uniquement une translation entre les deux courbes, elles sont **identiques à un facteur multiplicatif près** ($\sim 1,11$).



Graphique 31 : C/E du $^{148}\text{Nd} / ^{238}\text{U}$ pour l'assemblage FEG58, avec plan de chargement constant et évoluant



Graphique 32 : Rapport isotopique $^{148}\text{Nd} / ^{238}\text{U}$ pour l'assemblage FEG58

3.5.2.3 Conclusion partielle

Il n'y a pas donc d'impact du plan de changement sur l'allure des rapports isotopiques du $^{148}\text{Nd} / ^{238}\text{U}$, ni sur l'allure de leurs C/E.

Une simple translation est visible, témoin d'une modification du niveau de flux, que l'on pourrait adapter en faisant simplement un **recalage**.

Par la suite, nous choisissons de conserver un plan de chargement constant.

3.5.3 Analyse du niveau de flux au cours de l'irradiation

Représenter dans les codes de calculs le niveau et le spectre énergétique du flux de neutrons dans la couverture fertile peut s'avérer complexe. En effet, le flux est moins important dans la couverture fertile radiale que dans le cœur interne et présente une variation énergétique importante qui le rend plus compliqué à calculer.

Nous nous intéressons à l'évolution du flux de neutrons au cours de l'irradiation dans les différentes couronnes d'assemblage du cœur PHENIX, pour chacun des « cœurs » modélisés pour les assemblages FEF79 et FEG58 (Tableau 33).

3.5.3.1 Présentation des résultats

Pour rappel, les assemblages FEF79 et FEG58 analysés pour l'expérience DOUBLON sont présents dans le cœur à des cycles différents (Graphique 4 et Graphique 5), et à des positions différentes non adjacentes (Figure 23) : les aiguilles analysées ne sont pas donc dans le même axe (Figure 21).

Cependant, les résultats seront présentés sur le **même graphique** lors de l'analyse, même il s'agit bien de **deux modélisations différentes** (que l'on nommera par soucis de facilité « FEF » et « FEG ») (Figure 29, Tableau 33).

Modélisation « FEF » : modélisation de l'assemblage FEF79 dans le cœur, historique d'irradiation des cycles 17 à 24

Modélisation « FEG » : modélisation de l'assemblage FEG dans le cœur, historique d'irradiation des cycles 13 à 22

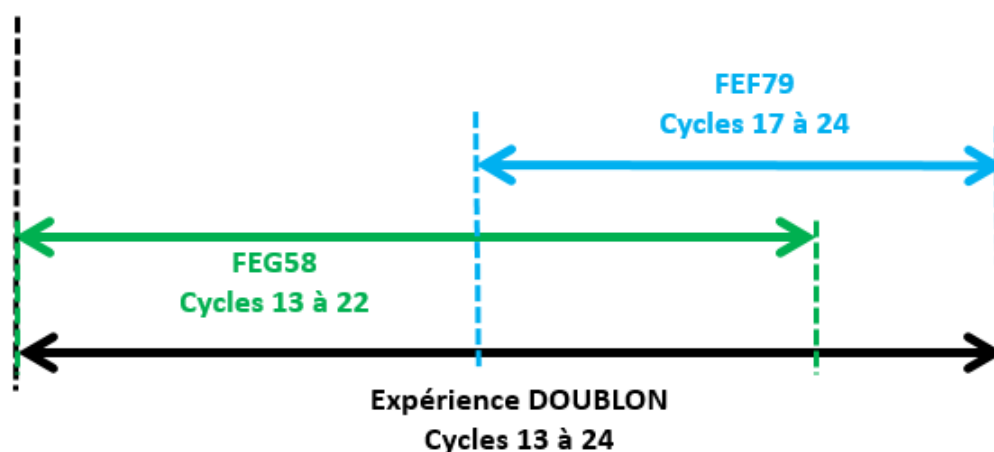


Figure 29 : Assemblages FEF58 et FEF79 en cœur pour l'expérience DOUBLON

Code de calcul	Nom de modélisation	Température	Assemblage analysé (historique d'irradiation correspondant)	Bibliothèque de données nucléaires
APOLLO3®	« FEF »	20°C	FEF79	JEFF-3.1.1

APOLLO3®	« FEG »	20°C	FEG58	JEFF-3.1.1
----------	---------	------	-------	------------

Tableau 33 : Nomenclature des modélisations « FEF » et « FEG » pour l'analyse du flux

En effet, malgré le fait que ces assemblages ne soient pas alignés dans le même axe et ne soient pas adjacents, ils sont à des **distances croissantes** du centre du cœur (Figure 30, Graphique 33). Les aiguilles analysées sont donc virtuellement alignées **dans l'axe du centre du cœur**.

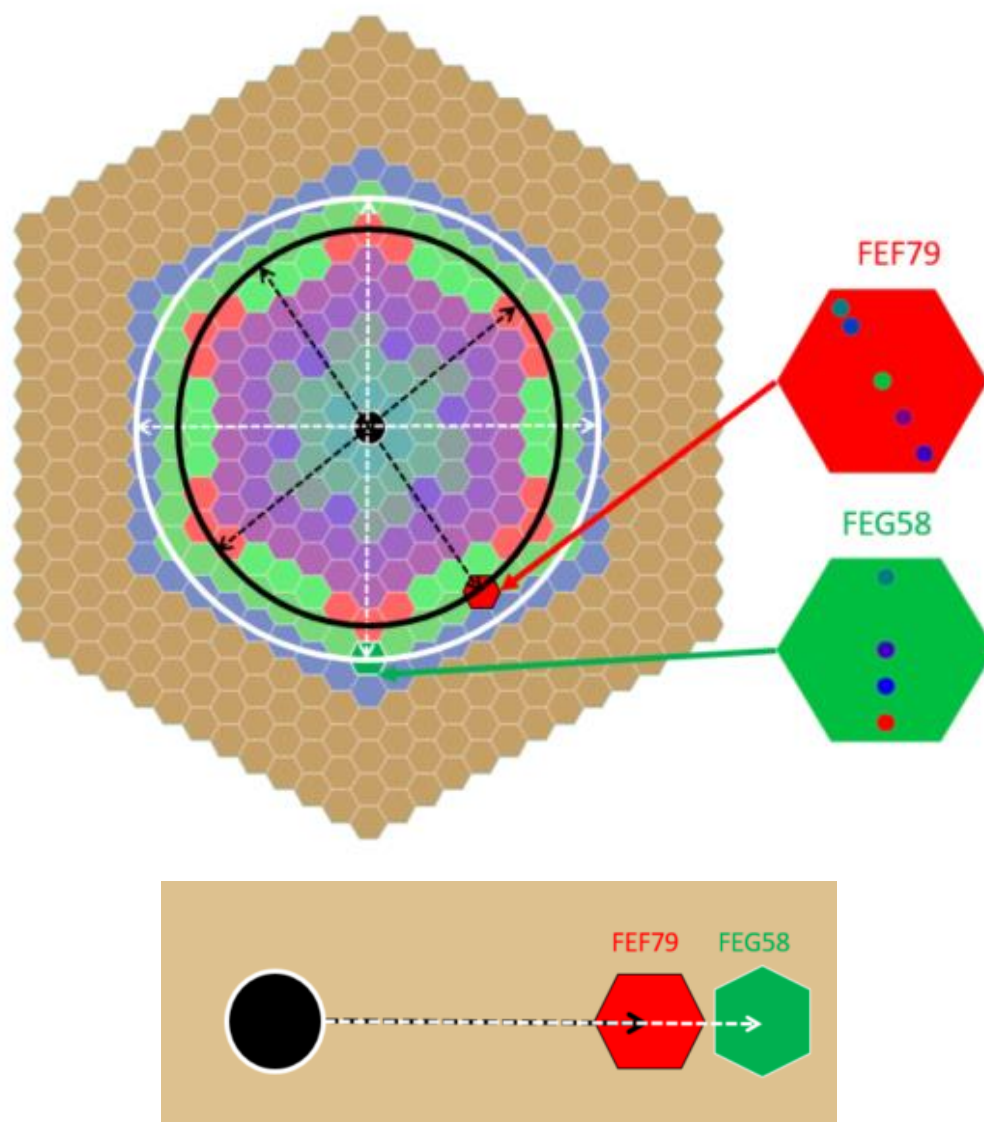
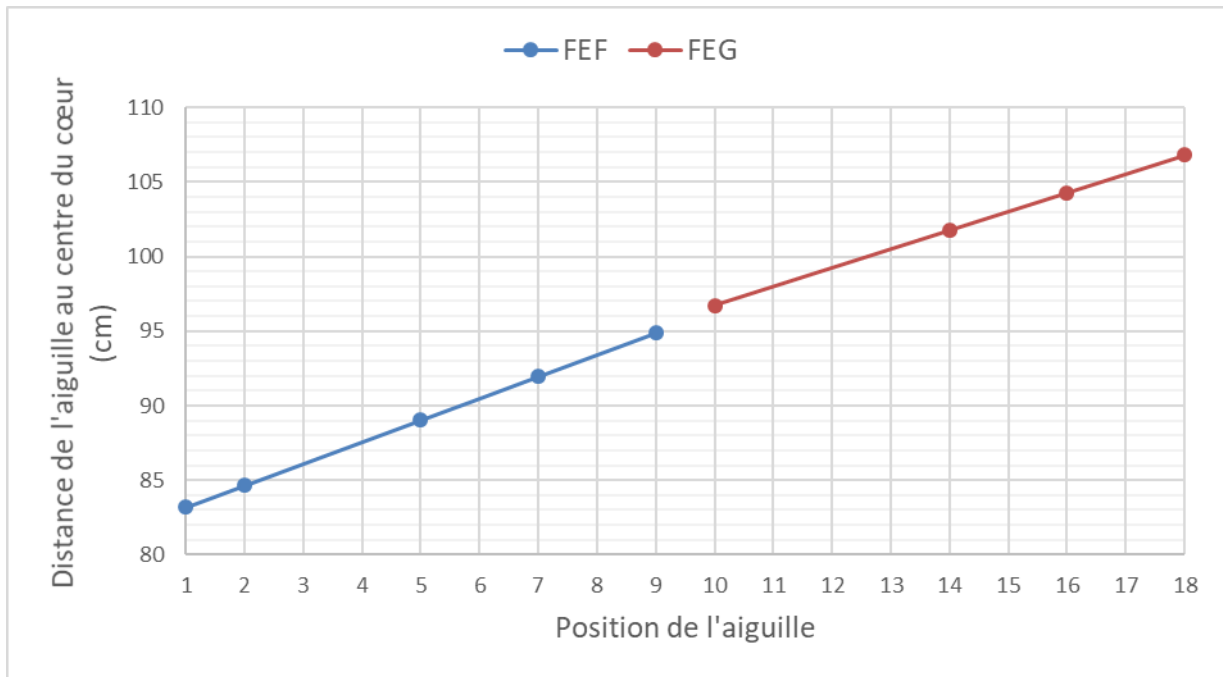


Figure 30 : Position des assemblages FEF79 et FEG58 dans le cœur et alignement des aiguilles



Graphique 33 : Distance de l'aiguille au centre du cœur (en cm) en fonction de sa position

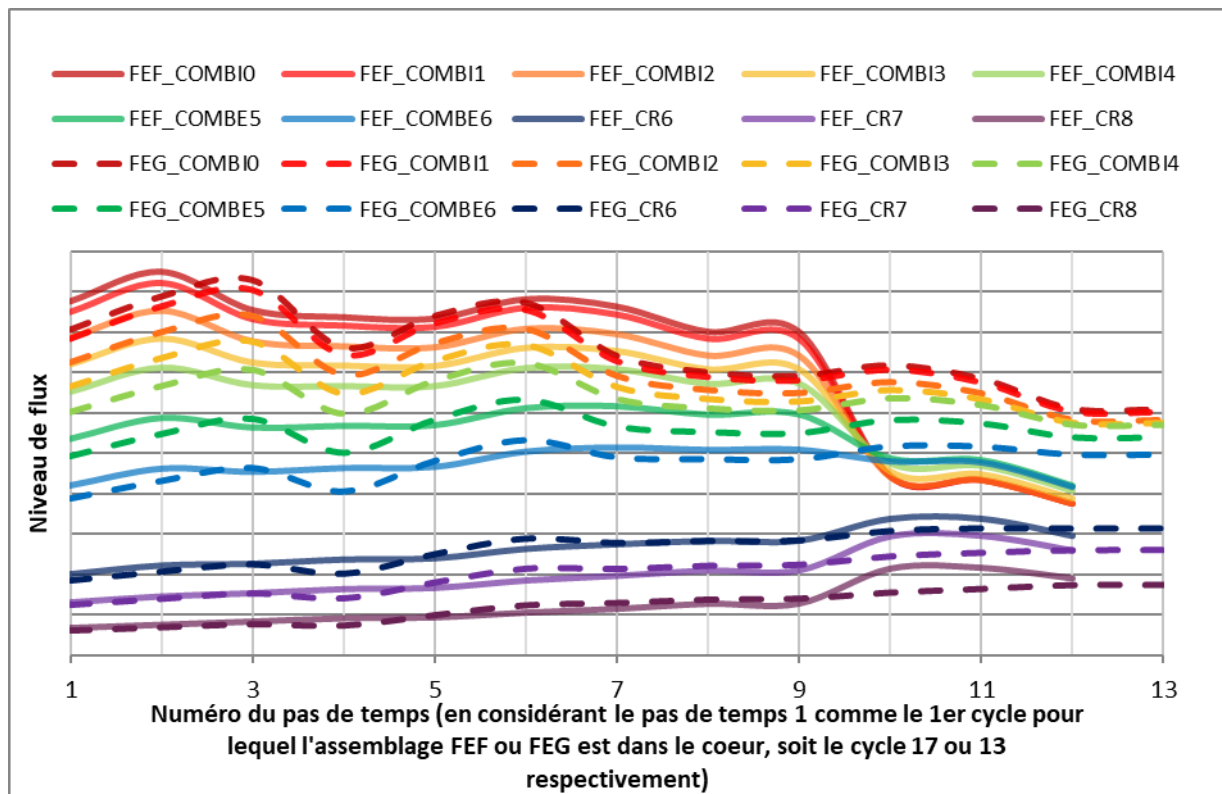
Ainsi, par symétrie et grâce aux distances croissantes des aiguilles, on peut considérer que les assemblages FEF79 et FEG58 et leurs aiguilles respectives peuvent être représentées alignées, comme si elles étaient sur le même plan.

Ces assemblages et leurs aiguilles permettent ainsi de rendre compte de l'évolution du niveau de flux et des bilans matières au sein de la couverture fertile pendant l'irradiation.

De plus, grâce au **recalage en fluence**, les valeurs calculées dans les deux assemblages peuvent être comparées malgré un temps d'irradiation différent.

3.5.3.2 Analyse du flux calculé avec APOLLO3®

Le graphique ci-dessous (Graphique 34) montre l'évolution du flux en fonction du pas de temps, pour chaque couronne d'assemblages, pour les modélisations « FEF » et « FEG ».



Graphique 34 : Niveau de flux dans les couronnes d'assemblages¹⁹ du cœur avec APOLLO3®

En comparant les flux obtenus entre les modélisations « FEF » et « FEG » en fonction du temps, on remarque que :

- Les flux au premier pas de temps sont similaires.
- Les flux dans le cœur interne et externe dans la modélisation « FEG » subissent des variations en fonction du pas de temps
- Il y a une baisse du niveau de flux avec dans la modélisation « FEF » à partir du 9^{ème} pas de temps dans les couronnes combustibles internes au profit de la couverture fertile.

Les assemblages FEF79 et FEG58 étant dans le réacteur quasiment durant les mêmes cycles, une grande partie de leur historique d'irradiation est commune. Ces variations de flux ainsi que l'importante bascule du flux entre les pas 9 et 10 de la modélisation « FEF » semblent donc incohérentes²⁰.

Ainsi, lors de la génération des MPOs, nous prenons le « flux initial » comme donnée d'entrée afin de ne pas biaiser les calculs d'évolution. Ce flux initial est le flux en début d'irradiation.

¹⁹ Légende = Nom de modélisation (FEF / FEG) + nom du milieu + numéro de la couronne

COMB + I / E = Combustible Interne / Externe

CR = Couverture Radiale

²⁰ Nous n'avons pas d'explication quant à ce phénomène, qui ne suit pas les variations de la puissance. Cependant, cela dépasse le cadre de cette thèse.

Néanmoins, les **concentrations isotopiques** sont sensibles à l'historique d'irradiation : il est donc important de conserver l'information de l'historique. Pour cela, nous suivons le niveau de puissance : la puissance du cœur varie autour de la puissance nominale du réacteur. Il est donc nécessaire d'effectuer une **renormalisation en puissance** à chaque cycle : ainsi, la forme initiale du flux est conservée, mais son amplitude est modifiée en tenant compte du diagramme de marche.

Cette hypothèse est valide du fait de l'approximation quasi-statique dans les formulaires d'évolution : le niveau du flux varie plus rapidement que sa forme (§1.4).

3.5.3.3 Impact de la renormalisation en puissance

Nous souhaitons conserver la forme du flux initial en nous appuyant sur l'approximation quasi-statique.

Le flux ϕ est considéré comme étant le produit de deux composantes, la forme du flux \mathcal{F} et l'amplitude (ou niveau de flux) \mathcal{N} (§1.4). Ainsi, le flux ϕ à l'instant i peut s'écrire de la façon suivante :

$$\phi_i = \mathcal{F}_i \times \mathcal{N}_i \quad \text{Équation 28 : Flux à l'instant } i \text{ factorisé sous la forme forme} \times \text{amplitude}$$

Nous souhaitons, en faisant une renormalisation à la puissance, conserver la forme du flux \mathcal{F} et agir uniquement sur l'amplitude (ou niveau de flux) \mathcal{N} . Ainsi, notre « nouveau » flux ϕ' pourrait s'écrire de la façon suivante :

$$\phi'_i = \mathcal{F}_0 \times \mathcal{N}_i = \phi_0 \times \frac{\mathcal{N}_i}{\mathcal{N}_0} \quad \text{Équation 29 : Flux à l'instant } i \text{ factorisé sous la forme forme initiale} \times \text{amplitude}$$

Nous souhaitons analyser l'impact de cette hypothèse, nous testons ainsi le cas où la forme initiale du flux est conservée avec une renormalisation à la puissance, et le cas où le forme évolue (Tableau 34).

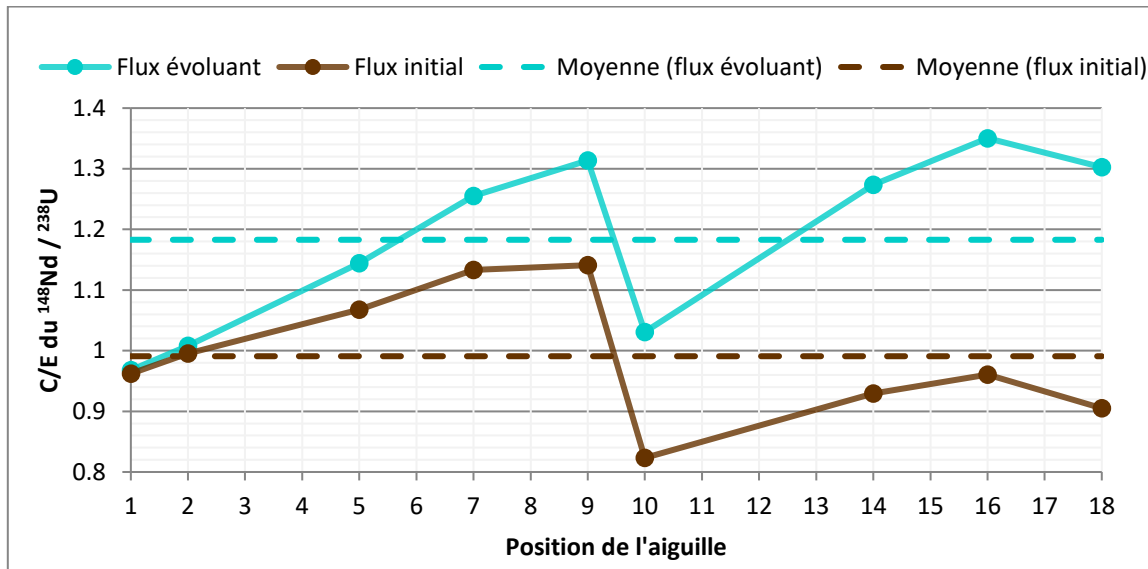
Formulaire	Nom de la modélisation	Température	Forme du flux utilisée pour la génération de la MPO :
DARWIN3	Flux initial	20°C	Forme initiale du flux conservée (\mathcal{F}_0) $\phi'_i = \mathcal{F}_0 \times \mathcal{N}_i = \phi_0 \times \frac{\mathcal{N}_i}{\mathcal{N}_0}$
DARWIN3	Flux évoluant	20°C	Forme du flux évoluant (\mathcal{F}_i) $\phi_i = \mathcal{F}_i \times \mathcal{N}_i$

Tableau 34 : Test de renormalisation en puissance

Le graphique et les tableaux suivants (Graphique 35, Tableau 35, Tableau 36) ci-dessous présentent les résultats obtenus sur le C/E du rapport isotopique $^{148}\text{Nd}/^{238}\text{U}$, qui montre notre capacité à reproduire le burnup dans les assemblages.

Nous remarquons que :

- Les résultats ne sont pas recalés, d'où la différence de moyenne entre les modélisations.



Graphique 35 : Impact du flux considéré

- La dispersion entre aiguilles est plus grande lorsque le flux ϕ_i de chaque cycle d'irradiation est conservé ($\pm 0,15$) que lorsque le flux initial est conservé avec uniquement une renormalisation en puissance ($\pm 0,11$).
- Le recalage en fluence à effectuer serait nettement moins important pour la modélisation « flux initial » (facteur de recalage $f = \frac{1}{0,99} = 1,01$) que pour la modélisation « flux évoluant » ($f = \frac{1}{1,18} = 0,85$).

Modélisation	Moyenne des C/E
<i>Flux évoluant</i>	$1,18 \pm 0,15$
<i>Flux initial</i>	$0,99 \pm 0,11$

Tableau 35 : Impact du flux considéré sur le C/E moyen

- Dans la modélisation « flux initial », le rapport isotopique du $^{148}\text{Nd} / ^{238}\text{U}$ est systématique supérieur à la moyenne pour l'assemblage FEF79 et inférieur pour FEG58.

Ainsi, la dispersion assemblage par assemblage est moindre (tableau 20) ce qui n'est pas le cas pour la modélisation « flux évoluant ».

Modélisation	Moyenne des C/E dans FEF79	Moyenne des C/E dans FEG58
« <i>Flux évoluant</i> »	1,14 ± 0,15	1,24 ± 0,14
« <i>Flux initial</i> »	1,06 ± 0,08	0,90 ± 0,06

Tableau 36 : Impact du flux considéré sur le C/E par assemblage

- Dans le cas où le flux est évoluant, on a une surestimation du C/E plus importante pour l'assemblage FEG58 que pour FEF79. C'est cohérent avec le fait que la bascule de flux du cœur interne au profit de la couverture fertile impacte davantage la couverture fertile aux couronnes les plus éloignées.

Par la suite, lors des calculs DARWIN3 pour l'expérience DOUBLON, nous génèrerons les MPOs – utilisées pour le calcul d'évolution avec MENDEL – en conservant le flux initial calculé par APOLLO3® et en effectuant seulement une renormalisation en puissance.

3.5.4 Provenance et voies de formation des isotopes analysés

Comme nous l'avons vu (3.2.3), la mesure du bilan-matière final dans l'expérience DOUBLON se fait par le biais de la mesure des rapports isotopiques suivants : $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$, $^{235}\text{U}/^{238}\text{U}$, $^{236}\text{U}/^{238}\text{U}$, $^{239}\text{Pu}/^{238}\text{U}$, $^{238}\text{Pu}/^{239}\text{Pu}$, $^{240}\text{Pu}/^{239}\text{Pu}$, $^{241}\text{Pu}/^{239}\text{Pu}$, $^{242}\text{Pu}/^{239}\text{Pu}$ et $^{148}\text{Nd}/^{238}\text{U}$

Grâce à des calculs effectués avec le module INVERSION du formulaire DARWIN2, on peut retracer l'origine des différents isotopes et leurs éventuelles voies de formations. Le Tableau 37 Tableau 11 montre les principales provenances (>1%) des noyaux lourds analysés.

Noyau lourd	Proportion (%)	Provenance (et voies de formation) après refroidissement
^{238}Pu	~58.6	$^{238}\text{U}(\text{n}, 2\text{n}) \rightarrow ^{237}\text{U}(\beta^-) \rightarrow ^{237}\text{Np}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{238}\text{Np}(\beta^-) \rightarrow ^{238}\text{Pu}$
	~32.4	$^{236}\text{U}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{237}\text{U}(\beta^-) \rightarrow ^{237}\text{Np}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{238}\text{Np}(\beta^-) \rightarrow ^{238}\text{Pu}$
	~6.7	$^{235}\text{F}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{236}\text{U}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{237}\text{U}(\beta^-) \rightarrow ^{237}\text{Np}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{238}\text{Np}(\beta^-) \rightarrow ^{238}\text{Pu}$
	~2.2	$^{238}\text{U}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{239}\text{U}(\beta^-) \rightarrow ^{239}\text{Np}(\beta^-) \rightarrow ^{238}\text{Pu}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{238}\text{Pu}$
^{239}Pu	~100	$^{238}\text{U}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{239}\text{U}(\beta^-) \rightarrow ^{239}\text{Np}(\beta^-) \rightarrow ^{239}\text{Pu}$
^{240}Pu	~97.0	$^{238}\text{U}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{239}\text{U}(\beta^-) \rightarrow ^{239}\text{Np}(\beta^-) \rightarrow ^{239}\text{Pu}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{240}\text{Pu}$
	~1.9	$^{238}\text{U}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{239}\text{U}(\beta^-) \rightarrow ^{239}\text{Np}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{240\text{M}}\text{Np}(\beta^-) \rightarrow ^{240}\text{Pu}$
	~1.1	$^{238}\text{U}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{239}\text{U}(\beta^-) \rightarrow ^{239}\text{Np}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{240\text{F}}\text{Np}(\beta^-) \rightarrow ^{240}\text{Pu}$
^{241}Pu	~95.7	$^{238}\text{U}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{239}\text{U}(\beta^-) \rightarrow ^{239}\text{Np}(\beta^-) \rightarrow ^{239}\text{Pu}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{240}\text{Pu}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{241}\text{Pu}$
	~2.7	$^{238}\text{U}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{239}\text{U}(\beta^-) \rightarrow ^{239}\text{Np}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{240\text{M}}\text{Np}(\beta^-) \rightarrow ^{240}\text{Pu}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{241}\text{Pu}$
	~1.6	$^{238}\text{U}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{239}\text{U}(\beta^-) \rightarrow ^{239}\text{Np}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{240\text{F}}\text{Np}(\beta^-) \rightarrow ^{240}\text{Pu}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{241}\text{Pu}$
^{242}Pu	~93.4	$^{238}\text{U}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{239}\text{U}(\beta^-) \rightarrow ^{239}\text{Np}(\beta^-) \rightarrow ^{239}\text{Pu}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{240}\text{Pu}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{241}\text{Pu}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{242}\text{Pu}$
	~3.5	$^{238}\text{U}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{239}\text{U}(\beta^-) \rightarrow ^{239}\text{Np}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{240\text{M}}\text{Np}(\beta^-) \rightarrow ^{240}\text{Pu}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{241}\text{Pu}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{242}\text{Pu}$
	~2.1	$^{238}\text{U}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{239}\text{U}(\beta^-) \rightarrow ^{239}\text{Np}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{240\text{F}}\text{Np}(\beta^-) \rightarrow ^{240}\text{Pu}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{241}\text{Pu}(\text{n}, \gamma) \rightarrow ^{242}\text{Pu}$

Tableau 37 : Principales voies de formation des noyaux lourds analysés de DOUBLON

3.5.5 Comparaison entre TRIPOLI-4® et DARWIN3

Afin de conclure quant aux performances de DARWIN3 pour les calculs d'évolution dans la couverture radiale, nous nous appuyons sur la comparaison au code stochastique TRIPOLI-4®. Pour cela, les hypothèses de calcul de DARWIN3 doivent être similaires à celles de TRIPOLI-4®. Pour rappel, les hypothèses utilisées sont les suivantes (Tableau 38) :

- Le cœur est considéré comme « statique », seules les concentrations des aiguilles DOUBLON évoluent.
- Le cœur est à 20°C.
- Une chaîne d'évolution « REP » est utilisée.
- La bibliothèque de données nucléaires JEFF-3.1.1 est utilisée.

Formulaire		Température de modélisation	Chaîne d'évolution	Données nucléaires	Evolution	Plan de chargement
TRIPOLI-4®		20°C	REP	JEFF-3.1.1	Aiguilles DOUBLON	Constant
DARWIN3	Config 1	20°C	REP	JEFF-3.1.1	Aiguilles DOUBLON	Constant

Tableau 38 : Extrait du Tableau 10 – Comparaison TRIPOLI-4® / DARWIN3

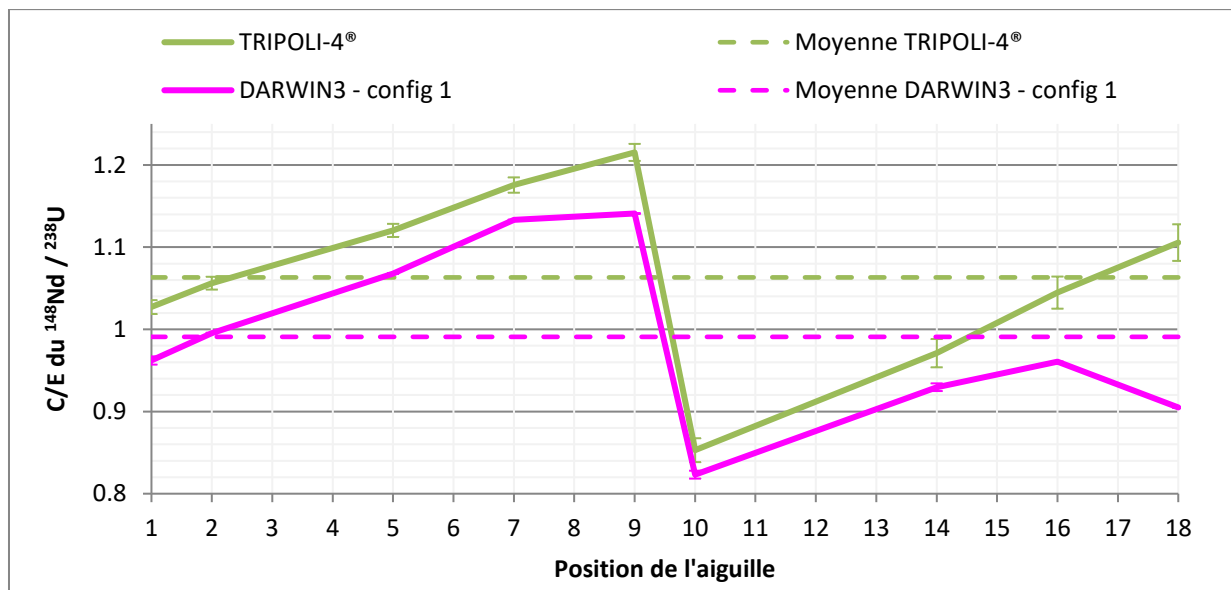
3.5.5.1 Analyse de la production du néodyme 148

Sur le graphique suivant (Graphique 36), le C/E du rapport isotopique $^{148}\text{Nd} / ^{238}\text{U}$ est analysé. On peut observer que :

- Les courbes TRIPOLI-4® et DARWIN3 ont sensiblement la même allure, à un facteur de recalage²¹ près. On observe uniquement un décrochage de DARWIN3 pour la dernière aiguille.
Cela montre que DARWIN3 semble calculer le flux de façon semblable à TRIPOLI-4®, à un facteur de recalage près.
- Le C/E du $^{148}\text{Nd} / ^{238}\text{U}$ varie énormément selon l'aiguille, il est bas en entrée d'assemblage et augmente au sein de l'assemblage. Il y a également une chute du C/E au niveau de la « zone de transition », c'est-à-dire entre les deux assemblages. Cela

²¹ Là encore, les données sont présentées non recalées car nous ne connaissons pas a priori le facteur de recalage. De plus, nous ne savons pas non plus a priori quelle est la manière façon d'effectuer le recalage (en se basant sur la moyenne des aiguilles, sur une seule aiguille, etc.). Les calculs effectués avec TRIPOLI-4® sont de plus très coûteux en termes de temps de calculs, et effectuer la démarche itérative de recalage peut vite induire des coûts de calculs conséquents.

montre la complexité de reproduire l'évolution des taux de fission au sein de la couverture radiale fertile.



Graphique 36 : DOUBLON : Comparaison TRIPOLI-4® / DARWIN3 - C/E du $^{148}\text{Nd} / ^{238}\text{U}$

DARWIN3 modélise le flux neutronique de façon semblable à TRIPOLI-4® au sein de la couverture radiale fertile, à un facteur de recalage près. On observe une divergence pour la dernière aiguille.

En comparaison avec la mesure, les deux formulaires de calcul, déterministes et stochastiques, semblent avoir des difficultés à reproduire l'évolution spatiale des taux de fissions au sein de la couverture fertile radiale.

3.5.5.2 Analyse des autres rapports isotopiques

Pour la comparaison des autres isotopes, nous choisissons l'aiguille en 14^{ème} position (2^{ème} aiguille de l'assemblage FEG58). En effet, la valeur obtenue pour le C/E du rapport $^{148}\text{Nd} / ^{238}\text{U}$ avec TRIPOLI-4®, pour lequel effectuer une démarche itérative de recalage demande des temps de calculs très importants, est la plus proche de 1.

Un recalage avec DARWIN3 permet d'obtenir le même C/E pour cette aiguille²², comme on peut le voir dans le tableau suivant (Tableau 39).

<i>FEG 58, aiguille 31</i> « FEG-14 » 2 ^{ème} aiguille de FEG58, 14 ^{ème} aiguille de DOUBLON	Facteur de recalage	C/E du ¹⁴⁸ Nd / ²³⁸ U
TRIPOLI-4®	—	0.97
DARWIN3 – config 1 (sans recalage)	—	0.93
DARWIN3 – config 1 (recalage moyen)	$f = \frac{1}{\left(\frac{C}{E}\right)_{\text{moyen}}}$	0.96
DARWIN3 – config 1 (recalage sur l'aiguille d'intérêt)	$f = \frac{1}{\left(\frac{C}{E}\right)_{14^{\text{ème}} \text{ aiguille}}}$	1.03

Tableau 39 : DOUBLON : Comparaison TRIPOLI-4® / DARWIN3 - Valeur des C/E du ¹⁴⁸Nd / ²³⁸U

Le graphique suivant (Graphique 37) compare les résultats de DARWIN3 après recalage, à ceux de TRIPOLI-4®, pour la 14^{ème} aiguille de la couverture fertile, dans l'assemblage FEG58. En effet, cette aiguille présente un C/E du ¹⁴⁸Nd / ²³⁸U similaire avec TRIPOLI-4® et DARWIN3.

- Les C/E des rapports isotopiques des isotopes de l'**uranium** présentent des valeurs identiques.
- C'est également le cas pour le **plutonium 239**.
- Des disparités sont observées pour les autres isotopes du **plutonium**.
- La production de **plutonium 238, 240 et 242** sont compatible entre les deux formulaires, mais n'est pas non plus compatible avec l'expérience.

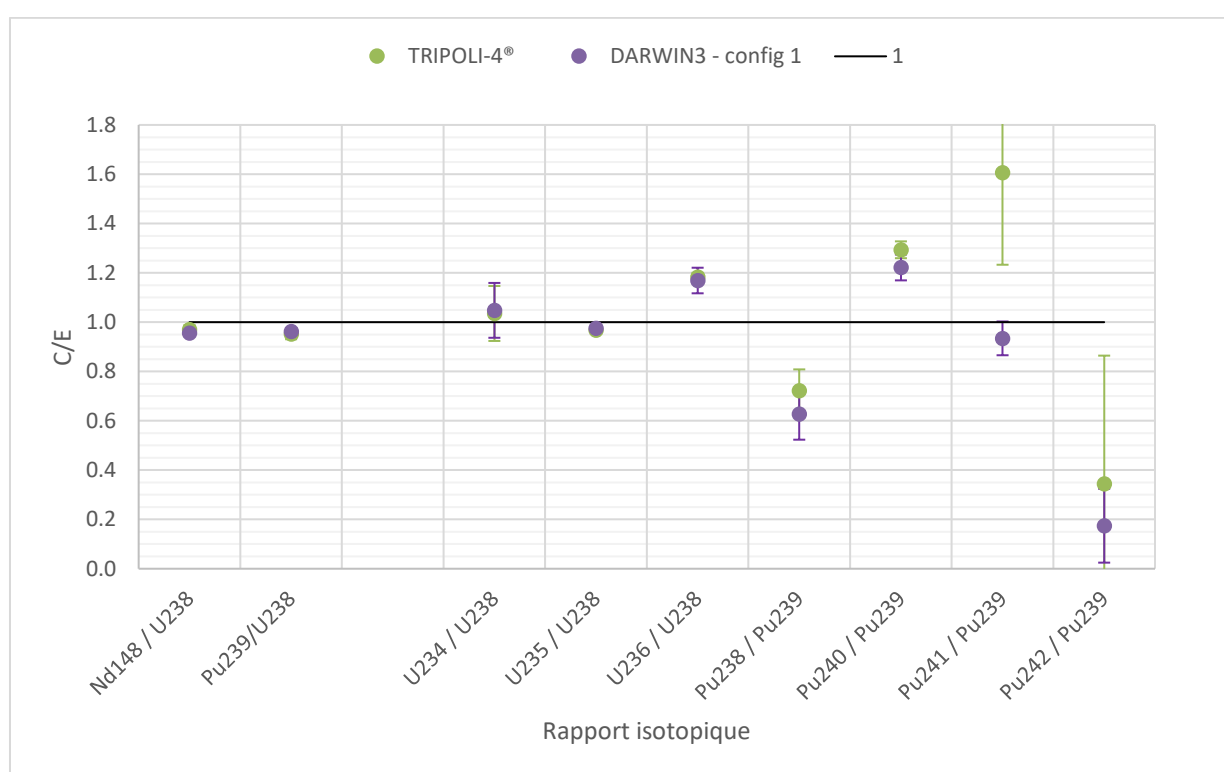
Le plutonium 238 est un isotope dont est sensible aux spectres neutroniques. En effet, il est produit il provient majoritairement pas la réaction ($n, 2n$) de l'uranium 238 (3.5.4), qui, comme nous l'avons vu avec TRAPU (3.4.2.3), est une réaction à seuil significative à haute énergie uniquement (> 6 MeV).

L'analyse de la production du ²³⁷Np avec l'expérience TRAPU (3.4.2.3) nous avait permet de conclure quant à une potentielle sous-estimation de cette section ($n, 2n$) de l'uranium 238,

²² Nous ne savons pas en amont quel recalage est optimal pour ce type d'analyse. Après avoir réalisé plusieurs tests pour choisir le facteur de recalage (Tableau 39), nous nous sommes arrêtés sur le facteur qui permet d'obtenir à la fois le C/E du ¹⁴⁸Nd / ²³⁸U le plus proche de celui de TRIPOLI-4® et le plus proche de 1.

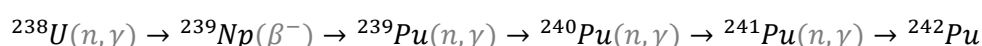
appuyée par des publications qui vont dans ce sens. Il semble ainsi que la sous-estimation du plutonium 238 dans DOUBLON pour les deux OCS TRIPOLI-4® et DARWIN3 soit expliquée par cette réaction.

- La production de **plutonium 240** semble compatible dans les deux formulaires à leurs incertitudes près, mais ne sont pas compatibles avec 1.
- Des disparités importantes sont observées pour la production du **plutonium 241**, les valeurs fournies par TRIPOLI-4® et DARWIN3 ne sont pas compatibles même en tenant compte de leurs incertitudes respectives. Cependant, la valeur obtenue avec DARWIN3 est compatible avec l'expérience.
- La production de **plutonium 242** est là encore compatible entre les deux formulaires, mais n'est pas compatible avec l'expérience.



Graphique 37 : Comparaison des C/E avec DARWIN3 après recalage et TRIPOLI-4® pour la 14^{ème} aiguille de la couverture fertile (dans FEG58) (les incertitudes sont données à 1σ)

On notera que les isotopes du plutonium sont produits en petite quantité : ils ne sont pas présents dans la composition initiale des aiguilles fertiles, et sont principalement produits par les réactions de captures successives suivantes (Équation 30 **Erreur ! Source du renvoi introuvable.**), Tableau 37) :



Équation 30 : Production des isotopes 240, 241 et 242 du plutonium

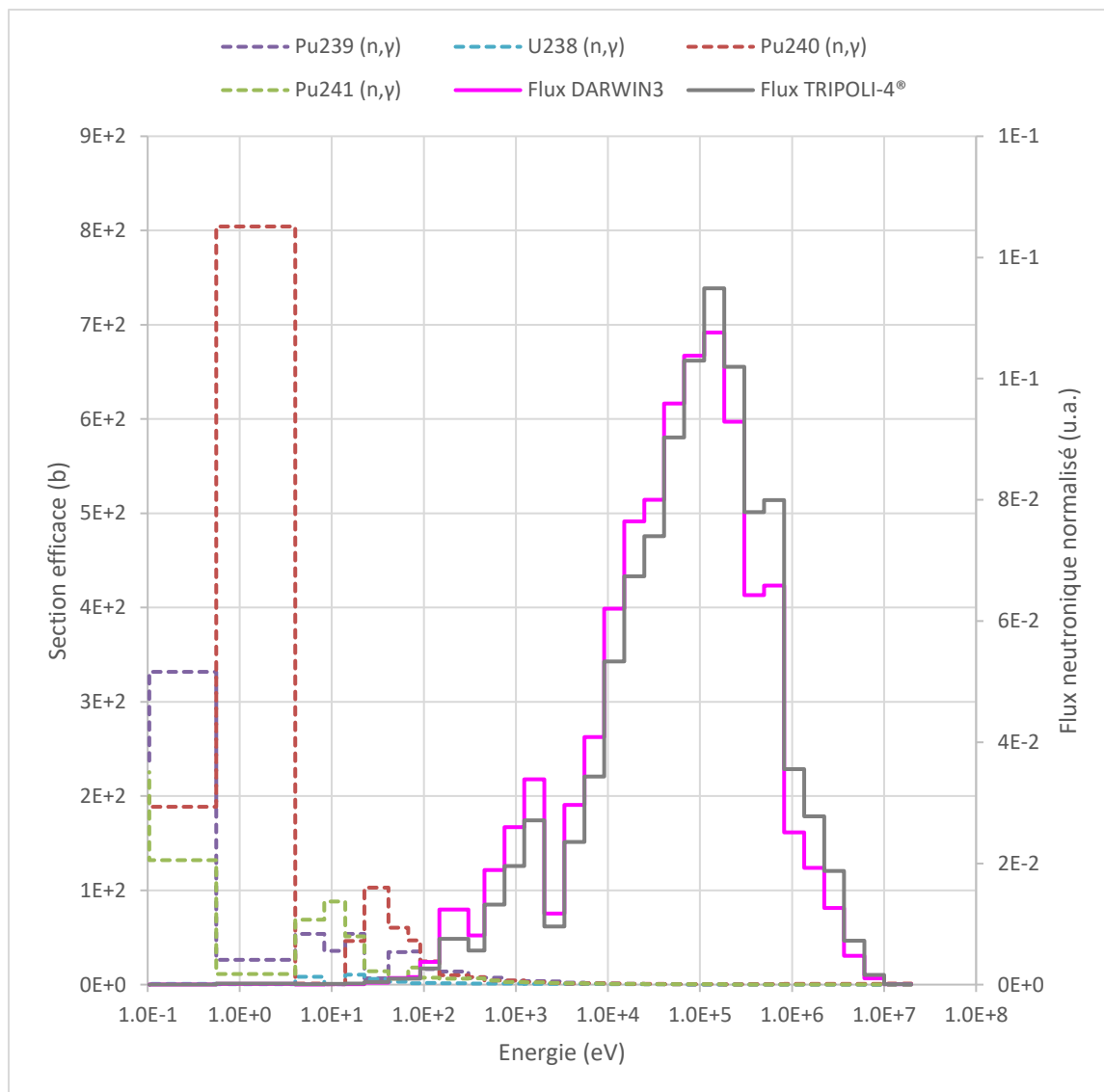
Ces nucléides sont donc présents en très petite quantité dans le bilan matière final. Le tableau suivant (*Tableau 40*) présente l'ordre de grandeur des rapports isotopiques. Comme on peut le voir, la concentration du ^{240}Pu , mais surtout du ^{241}Pu et du ^{242}Pu , sont très faibles.

$^{239}\text{Pu}/^{238}\text{U}$	$^{240}\text{Pu}/^{239}\text{Pu}$	$^{241}\text{Pu}/^{239}\text{Pu}$	$^{242}\text{Pu}/^{239}\text{Pu}$
$\sim 3.5 \cdot 10^{-2}$	$\sim 4.5 \cdot 10^{-2}$	$\sim 1.0 \cdot 10^{-3}$	$\sim 5.0 \cdot 10^{-5}$

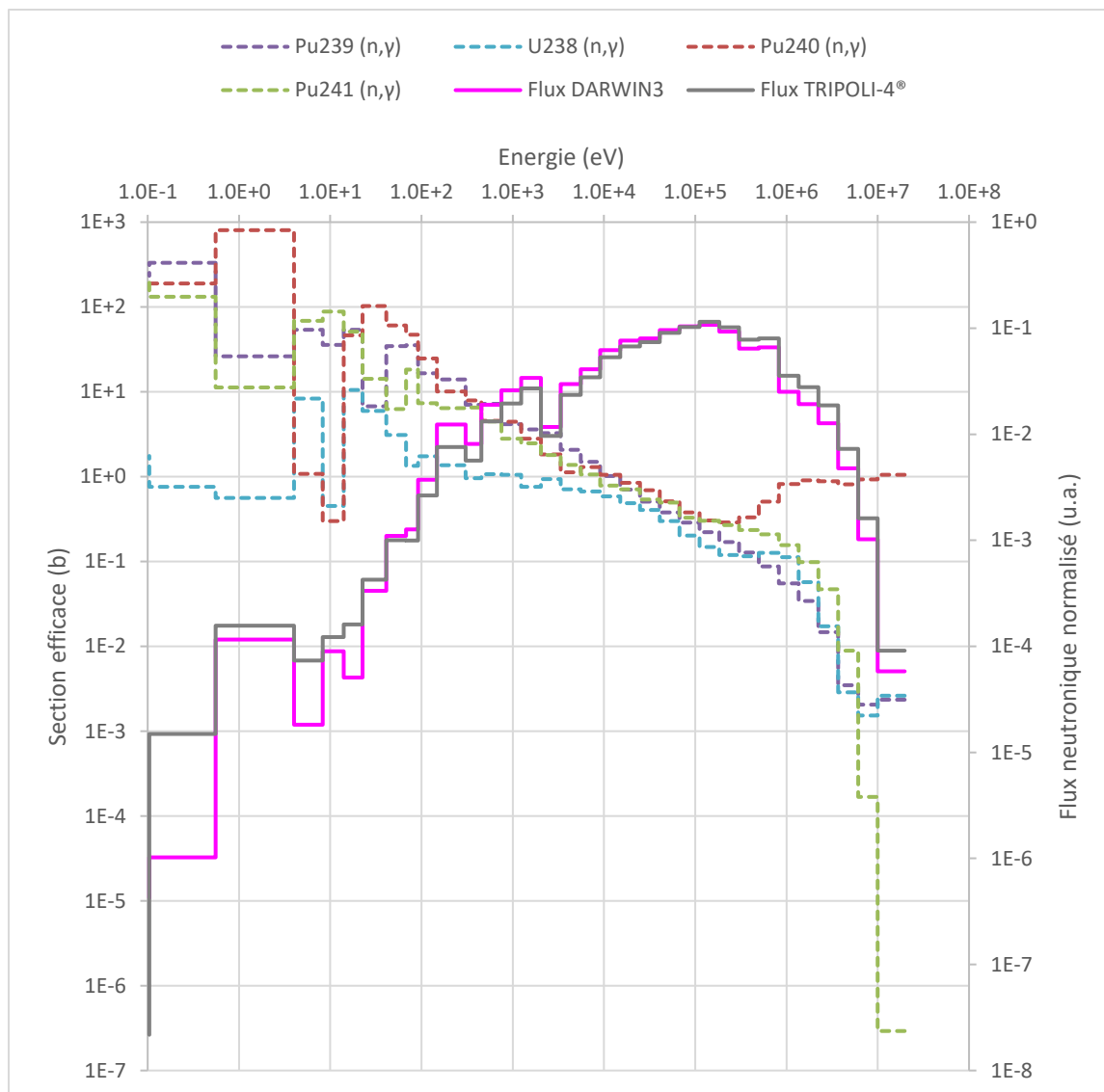
Tableau 40 : Ordre de grandeur des rapports isotopiques

Cela induit une difficulté des **formulaires de calcul** à prédire correctement la concentration de ces isotopes.

Les écarts observés entre TRIPOLI-4® et DARWIN3 pour les isotopes 241 et 242 du plutonium s'expliquent par leurs différences de spectre neutronique. En effet, on remarque que le flux à basse énergie est plus important avec TRIPOLI-4® que celui de DARWIN3, où le plutonium 240 présente une section de capture très importante (Graphique 38). Cela entraîne des taux de réactions différents calculés entre ces deux codes, et cela impacte les productions des plutoniums 241 et 242.



Graphique 38 : DOUBLON : Flux neutronique et sections efficaces de capture avec DARWIN3 – échelle linéaire



Graphique 39 : DOUBLON : Flux neutronique et sections efficaces de capture avec DARWIN3 – échelle logarithmique

3.5.5.3 Conclusion partielle

DARWIN3 permet de produire des résultats identiques à TRIPOLI-4® pour la production des isotopes de l'uranium et les plutoniums 238, 239 et 240.

Les résultats sur les plutoniums 238 et 240 ne sont cependant pas compatibles avec la mesure.

Les résultats observés pour le plutonium 238 s'expliquent par la sous-estimation de la réaction (n,2n) de l'uranium 238, que nous avons mis en évidence avec l'expérience TRAPU.

Les disparités observées pour les plutoniums 241 et 242 s'expliquent notamment parce que le spectre neutronique est plus important à basse énergie avec TRIPOLI-4®, où les sections de capture sont importantes, induisant des **taux de capture** plus importants.

3.5.6 Comparaison entre DARWIN3 et DARWIN2

Afin de conclure quant à l'amélioration des formulaires déterministes, nous nous appuyons sur la comparaison au précédent formulaire déterministe DARWIN2. Pour cela, les options de calcul de DARWIN3 choisies doivent être comparables à celles de DARWIN2. Pour rappel, les hypothèses suivantes sont appliquées (Tableau 41) :

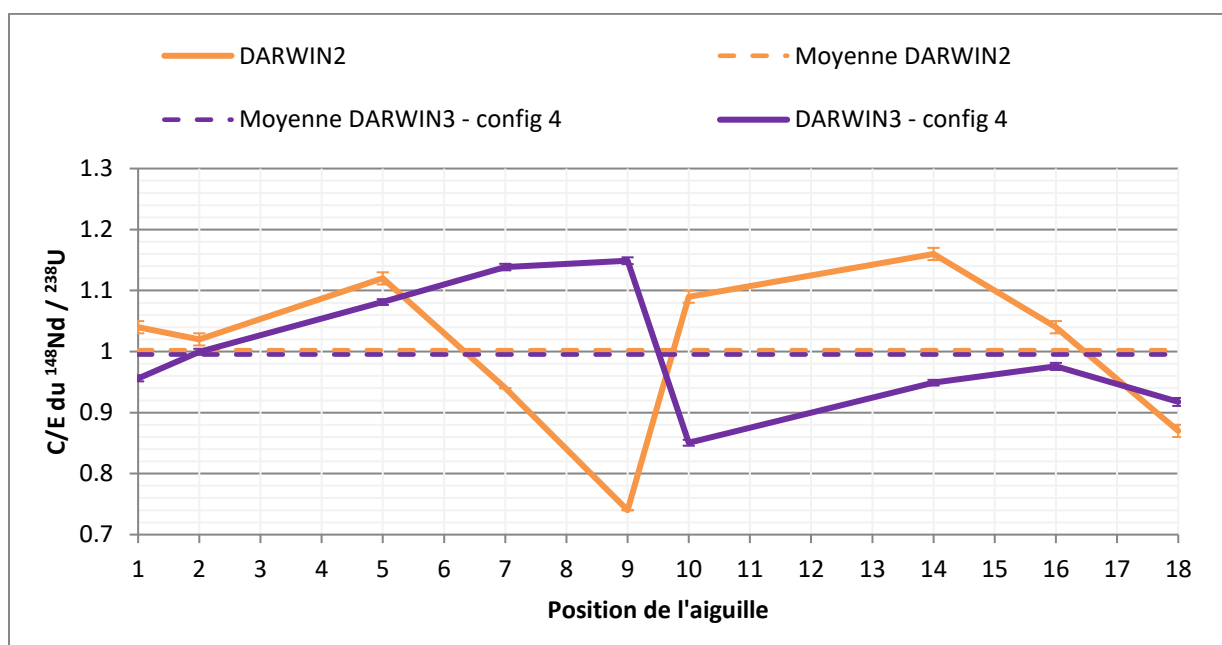
Formulaire		Température de modélisation	Chaîne d'évolution	Données nucléaires	Evolution
DARWIN2		627°C (Fertiles)	RNR	JEFF-3.1.1	Cœur complet
DARWIN3	Config 4	650°C	RNR	JEFF-3.1.1	Aiguilles DOUBLON

Tableau 41 : Extrait du Tableau 10 pour la comparaison DARWIN3 à DARWIN2

3.5.6.1 Analyse de la production du néodyme 148

Les résultats concernant le C/E du rapport isotopique $^{148}\text{Nd} / ^{238}\text{U}$ sont présentés dans le graphique suivant (Graphique 40). On peut observer que :

- La moyenne des C/E du $^{148}\text{Nd} / ^{238}\text{U}$ est similaire entre DARWIN2 et DARWIN3 : en moyenne, le niveau de burnup (donc de flux) calculé par les deux formulaires est semblable dans la couverture fertile.



Graphique 40 : DOUBLON : Comparaison du C/E du $^{148}\text{Nd} / ^{238}\text{U}$ DARWIN2 et DARWIN3

- Il y a cependant une très importante variation spatiale du C/E d'une aiguille à l'autre.
- L'allure de la courbe des C/E du ^{148}Nd / ^{238}U est très différente entre DARWIN2 et DARWIN3.
- La production du néodyme 148 est élevée en entrée d'assemblage et chute au sein de chaque assemblage avec DARWIN2, tandis qu'on observe plutôt l'inverse avec DARWIN3, avec une production de néodyme 148 plutôt basse en entrée d'assemblage et qui augmente au sein de l'assemblage. Cela pourrait laisser supposer que le spectre neutronique dans DARWIN2 s'adoucit davantage que dans DARWIN3. S'il y a davantage de neutrons dans les domaines thermique et épithermique que rapide, le plutonium 239 fissionne plus et produit plus de néodyme 148.

Cela laisse supposer qu'il y peut y avoir des biais de calculs dans le formulaire DARWIN2 pour le calcul du spectre neutronique.

DARWIN3 et DARWIN2 sont en moyenne performants pour calculer le niveau de burnup (c'est-à-dire du flux neutronique) : le C/E moyen du rapport ^{148}Nd / ^{238}U avoisine en effet 1 avec les deux formulaires.

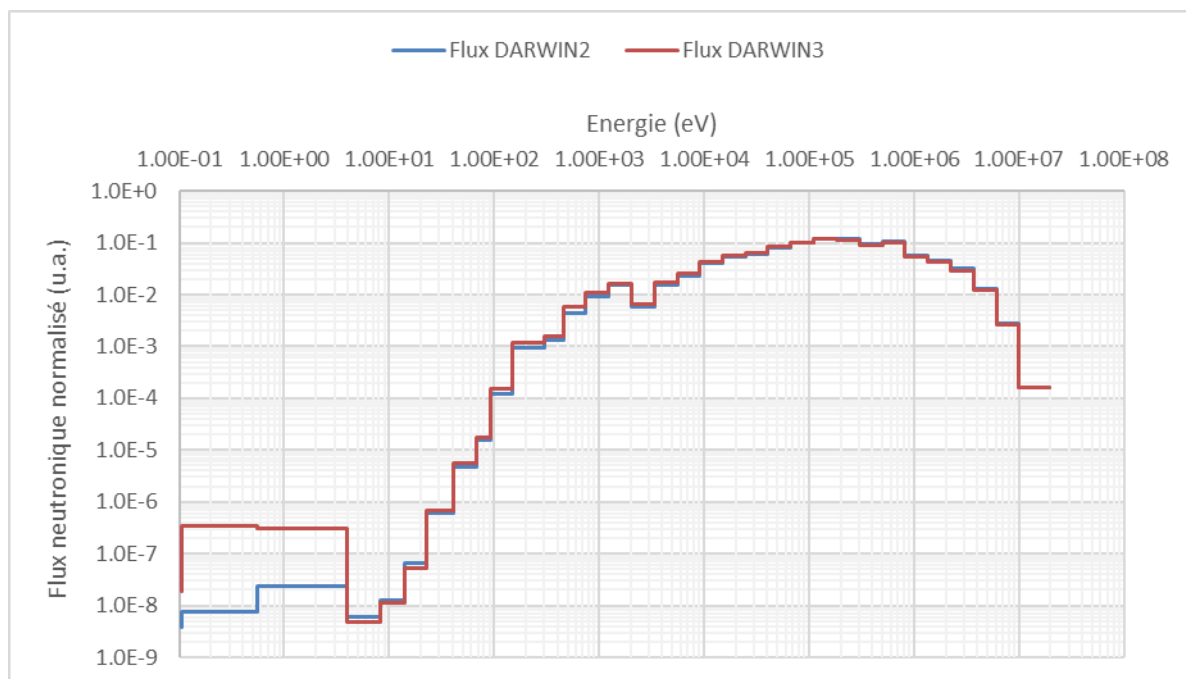
Cependant, les deux formulaires présentent une forte dispersion aiguille par aiguille, donnant des courbes aux allures très différentes. Ceci pourrait s'expliquer par la difficulté des formulaires neutroniques à décrire correctement le gradient et le spectre neutronique au sein de la couverture fertile radiale.

3.5.6.2 Analyse comparative du spectre neutronique entre DARWIN2 et DARWIN3

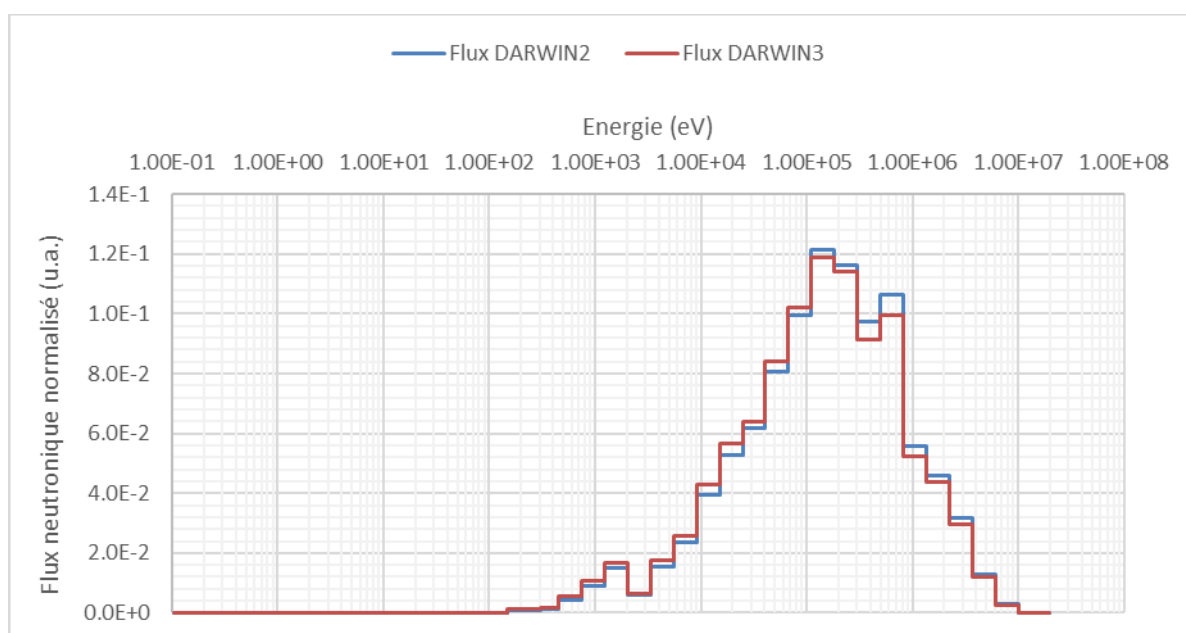
Pour analyser le spectre neutronique à 33 groupes d'énergie, nous calculons les flux normalisés. Le flux neutronique normalisé du groupe d'énergie g $\phi_{norm.}^g$ est le flux neutronique du groupe d'énergie g ϕ^g divisé par la somme de tous les flux (sur l'ensemble des groupes d'énergies ϕ^{33g}) (Équation 31).

$$\phi_{norm.}^g = \frac{\phi^g}{\phi^{33g}} \quad \text{Équation 31 : Normalisation du flux}$$

Nous nous intéressons aux spectres neutroniques moyens dans chacun des assemblages FEF79 et FEG58, mais aussi dans la couverture fertile (Graphique 41, Graphique 42).



Graphique 41 : DOUBLON – Comparaison DARWIN2 / DARWIN3 – Spectre moyen dans la couverture fertile – Echelle logarithmique pour l'analyse à basse énergie



Graphique 42 : DOUBLON – Comparaison DARWIN2 / DARWIN3 – Spectre moyen dans la couverture fertile – Echelle linéaire pour l'analyse à basse énergie

On remarque sur les graphique ci-dessus (Graphique 41, Graphique 42), présentant les spectres moyens dans DARWIN2 et DARWIN3 dans la couverture fertile, que :

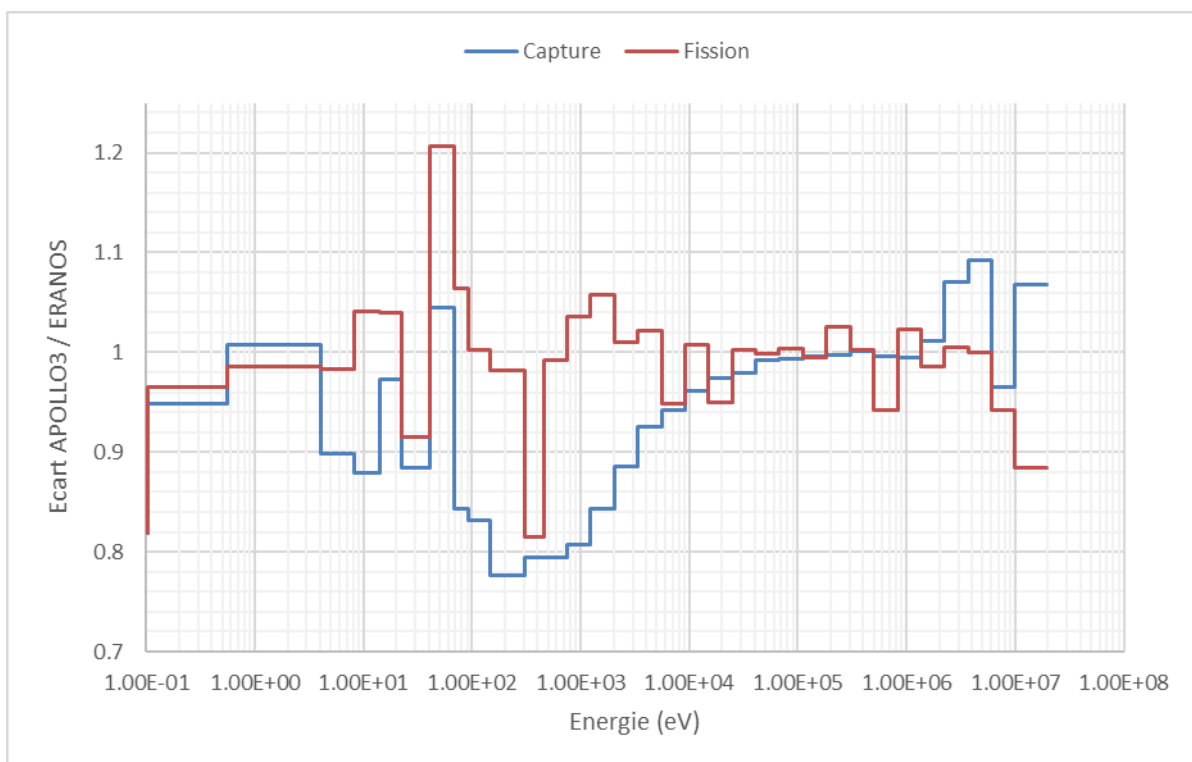
- Le spectre neutronique obtenu avec DARWIN2 est globalement similaire à celui de DARWIN3, cependant il semble qu'avec DARWIN3, le spectre s'adoucisse davantage

que dans DARWIN2 : le spectre à basse énergie est proportionnellement plus élevé avec DARWIN3 qu'avec DARWIN2, et inversement à plus haute énergie.

Le spectre neutronique calculé avec DARWIN3 s'adoucit davantage que celui de DARWIN2.

3.5.6.3 Analyse de la section de l'uranium 238

En raison des différences du spectre neutronique, on s'intéresse aux sections de l'uranium 238, notamment à sa capture et à sa fission. Pour cela, on compare la valeur obtenue avec DARWIN3 à celle de DARWIN2 (Graphique 43).



Graphique 43 : Ecart DARWIN3 / DARWIN2 pour les sections de l'uranium 238

On remarque des écarts importants sur toute la plage énergétique entre DARWIN3 et DARWIN2, à la fois pour la section de capture et celle de fission de l'uranium 238. La section de capture est notamment plus faible avec DARWIN3 qu'avec DARWIN2.

Ces écarts peuvent expliquer les disparités du niveau de flux calculé dans la couverture fertile.

En ce qui concerne les milieux sous-critiques, ERANOS2 (code neutronique de l'OCS DARWIN2 pour les RNR) utilise un schéma de calcul basé sur de nombreuses approximations (calcul à source homogène, mode fondamental, imposition d'un laplacien ad hoc, etc..) qui peut induire des biais sur l'obtention des sections à 33 sections utilisées au niveau cœur.

A contrario, un gros travail d'amélioration des schémas de calcul pour les milieux sous-critiques a été effectué avec APOLLO3®. Ces schémas ont été validés au niveau des calculs réseau (cluster) via la comparaison des taux de réaction de référence TRIPOLI4 sur les isotopes d'intérêt (U et Pu) sur les découpages à 1968 et 33 groupes. Un travail d'extension de la validation est nécessaire pour couvrir les configurations cœur plus réalistes en prenant en compte des interfaces multiples cœur/fertile/réacteur où les courants de neutrons sont sensiblement différents de ceux pris en compte dans la modélisation cluster. De plus, les calculs réseaux ont été validés grâce à des calculs statiques, qui ne prennent donc pas en compte les problématiques de l'évolution que nous abordons dans ce travail.

Dans le cas de l'expérience TRAPU, située dans le cœur interne, on se rapproche des conditions de « milieu infini » généralement utilisées pour les générations des sections efficaces. Ainsi, les valeurs obtenues avec les différents formulaires neutroniques sont cohérentes. En revanche, pour DOUBLON, dans la couverture fertile, les conditions d'irradiation sont nettement différentes.

Il pourrait ainsi sembler judicieux de se poser la question de la modélisation nécessaire, au moment de l'étape « réseau », pour générer les sections efficaces utilisées pour des calculs d'évolution, et notamment dans les couvertures fertiles où nous avons utilisé des clusters pour la génération des sections efficaces des milieux sous-critiques.

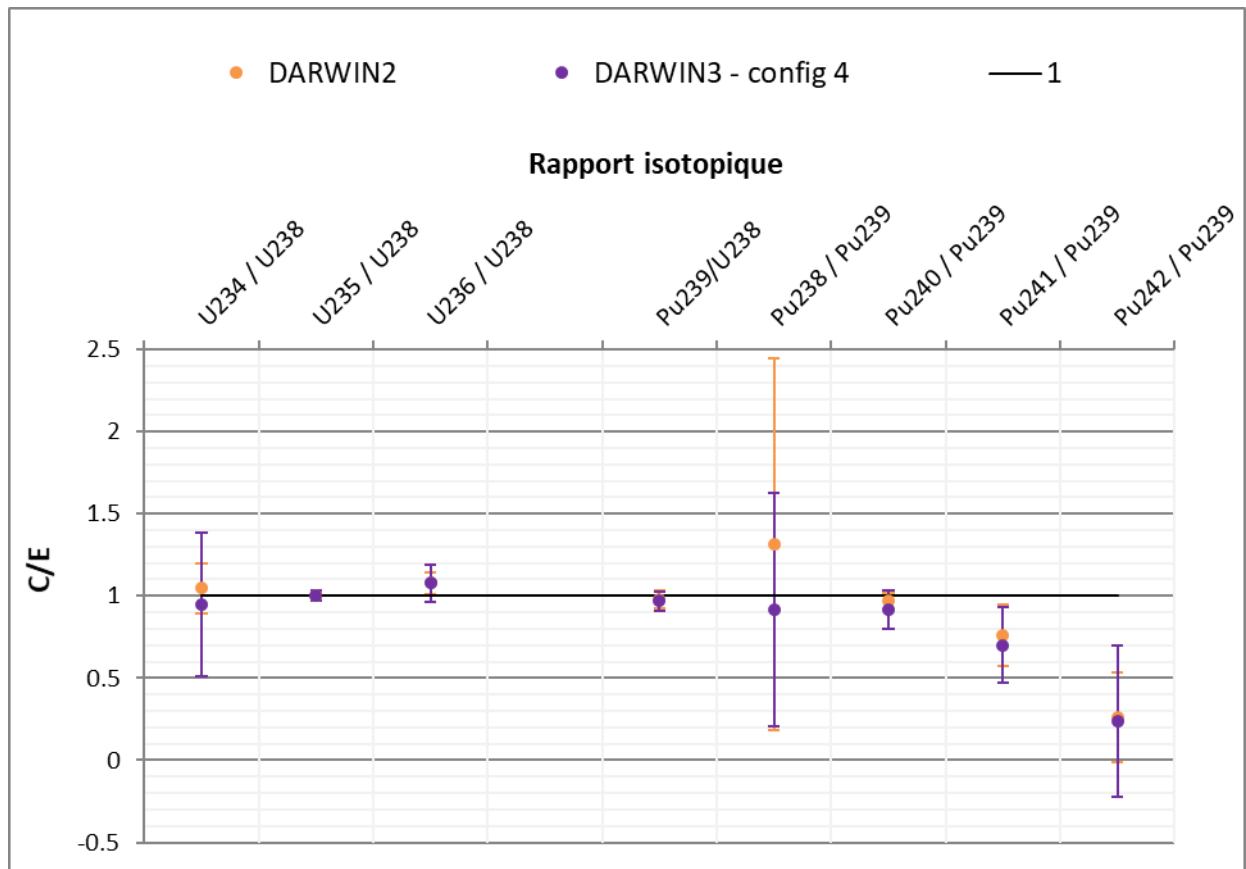
Cependant, ces problématiques ne sont pas traitées le cadre de la thèse, elles seront nécessairement revisitées dans les prochaines versions des schémas de calculs de référence d'APOLLO3®.

3.5.6.4 Analyse de la production des autres isotopes

Malgré des disparités importantes sur chaque aiguille, la moyenne des C/E du $^{148}\text{Nd} / ^{238}\text{U}$ est de 1 sur l'ensemble de la couverture fertile radiale, nous permettant d'interpréter les autres rapports isotopiques (en moyennant les valeurs obtenues de chaque aiguille pour chaque isotope). Le graphique suivant montre les rapports isotopiques moyens de DARWIN2 et DARWIN3 (Graphique 44).

- La production des **isotopes de l'uranium** montre un bon accord.
- La production de **plutonium 239** est très bien reproduite, ce qui est cohérent avec le fait que le rapport isotopique du néodyme 148 vaille 1.
- La production de **plutonium 240** est très bien calculée également. Ce dernier est en effet produit par la capture du plutonium 239.
- La production de **plutonium 238** présente de meilleurs résultats avec DARWIN3 qu'avec DARWIN2. Les incertitudes sont très importantes et sont liées à l'importante dispersion des valeurs des C/E du rapport isotopique du $^{238}\text{Pu} / ^{239}\text{Pu}$ pour chaque aiguille.
- Les productions des **plutoniums 241 et 242** sont cohérentes entre DARWIN2 et DARWIN3. Cependant, elles ne sont pas compatibles avec la mesure. Cela confirme

que les formulaires ont des difficultés à reproduire les concentrations de ces isotopes dans la couverture fertile.



Graphique 44 : DOUBLON : Comparaison entre DARWIN2 et DARWIN3

DARWIN3 permet de produire des résultats identiques à DARWIN2 pour le calcul de la production de la majorité des isotopes analysés (uraniums, plutoniums 239 et 240).

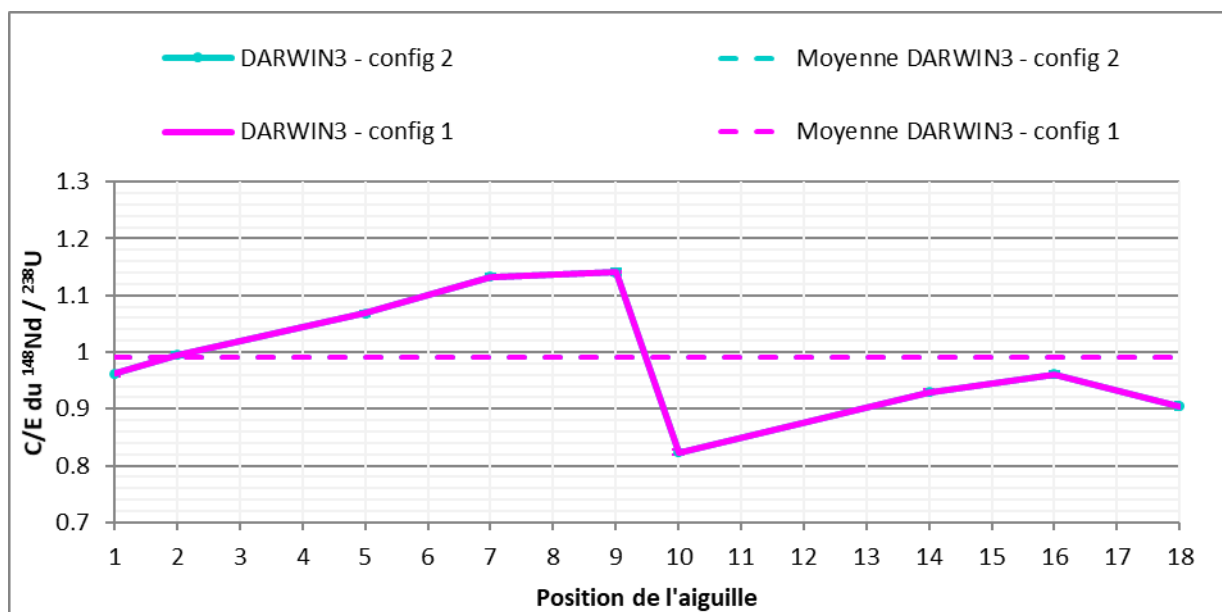
3.5.7 Impact de la chaîne d'évolution

Nous nous intéressons à l'impact de la chaîne d'évolution sur les résultats de nos calculs, pour cela nous comparons deux cas suivants avec DARWIN3 (Tableau 42).

Formulaire		Température de modélisation	Chaîne d'évolution	Données nucléaires	Evolution	Plan de chargement
DARWIN3	Config 1	20°C	REP	JEFF-3.1.1	Aiguilles DOUBLON	Constant
DARWIN3	Config 2	20°C	RNR	JEFF-3.1.1	Aiguilles DOUBLON	Constant

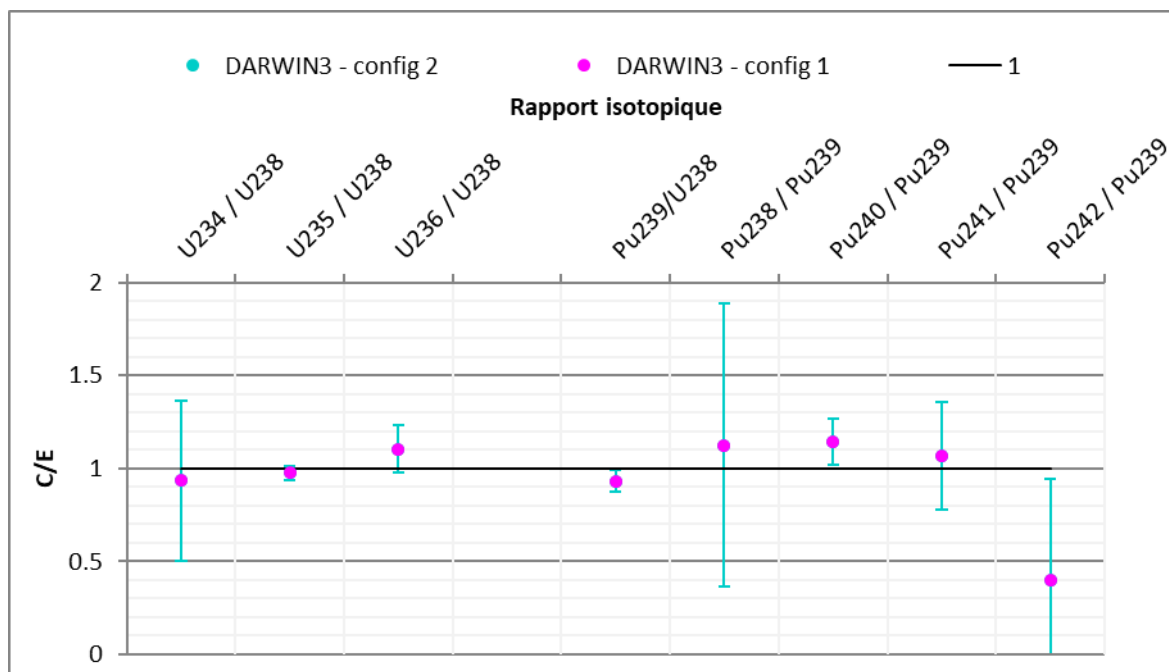
Tableau 42 : Extrait du Tableau 10 pour l'impact de la chaîne d'évolution

Les résultats du C/E du rapport isotopique $^{148}\text{Nd} / ^{238}\text{U}$ sont présentés dans le graphique suivant (Graphique 45). On peut observer que les résultats sont **identiques**.



Graphique 45 : DOUBLON : Impact de la chaîne sur le C/E du $^{148}\text{Nd} / ^{238}\text{U}$

Les résultats des C/E des autres rapports isotopique sont présentés dans le graphique suivant (Graphique 46). On peut observer que là encore les résultats sont **identiques**.



Graphique 46 : DOUBLON : Impact de la chaîne sur le C/E des autres isotopes

L'impact de la chaîne d'évolution est négligeable sur les C/E obtenus. C'est cohérent car la chaîne d'évolution « RNR » a un impact sur les américiums et leurs fils, qui ne sont pas analysés dans l'expérience DOUBLON.

3.5.8 Impact de la bibliothèque de données nucléaires

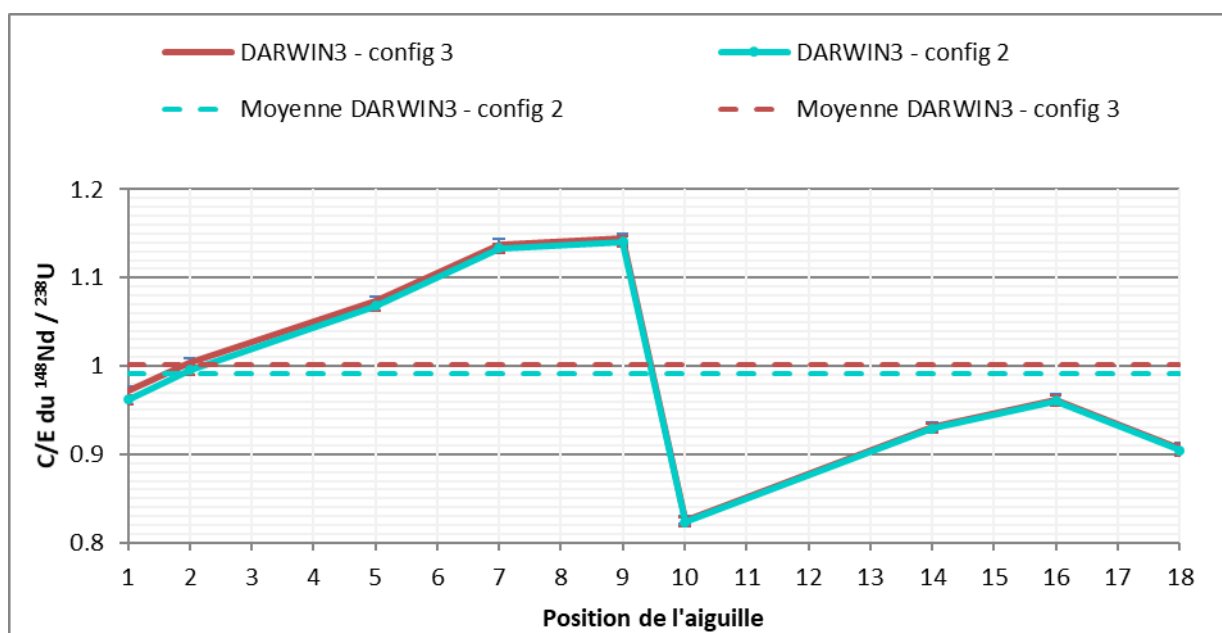
Nous nous intéressons à l'impact sur nos résultats de calculs de la bibliothèque de données nucléaires utilisée, pour cela nous comparons deux cas avec DARWIN3 (Tableau 43).

Formulaire		Température de modélisation	Chaîne d'évolution	Données nucléaires	Evolution	Plan de chargement
DARWIN3	Config 2	20°C	RNR	<u>JEFF-3.1.1</u>	Aiguilles DOUBLON	Constant
DARWIN3	Config 3	20°C	RNR	<u>JEFF-3.2</u>	Aiguilles DOUBLON	Constant

Tableau 43 : Extrait du Tableau 10 pour l'impact de la bibliothèque de données nucléaires

Les résultats du C/E du rapport isotopique $^{148}\text{Nd} / ^{238}\text{U}$ sont présentés dans le graphique suivant (Graphique 47). On peut observer que :

- Il y a une très légère dispersion que l'on peut observer sur les premières aiguilles de la couverture fertile, dans l'assemblage FEF79 (aiguilles 1 à 9).
- Les résultats sont **identiques** pour l'assemblage FEG58 (aiguilles 10 à 18).

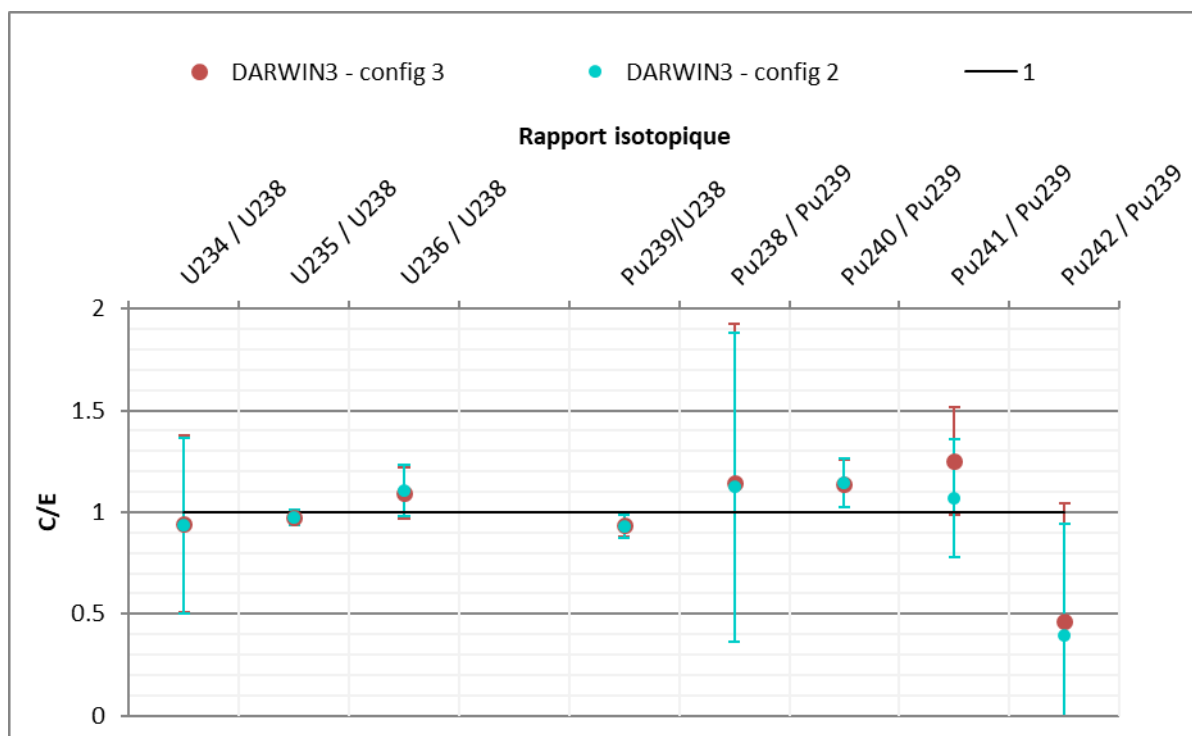


Graphique 47 : DOUBLON : Impact de la bibliothèque de données nucléaires sur le C/E du $^{148}\text{Nd} / ^{238}\text{U}$

- La légère augmentation de la valeur du C/E dans l'assemblage FEF79 avec JEFF-3.2 (config. 3) permet d'obtenir une valeur moyenne du C/E très légèrement supérieure et plus proche de 1.

Les résultats des C/E des autres rapports isotopiques sont présentés dans le graphique suivant (Graphique 48). On peut observer que :

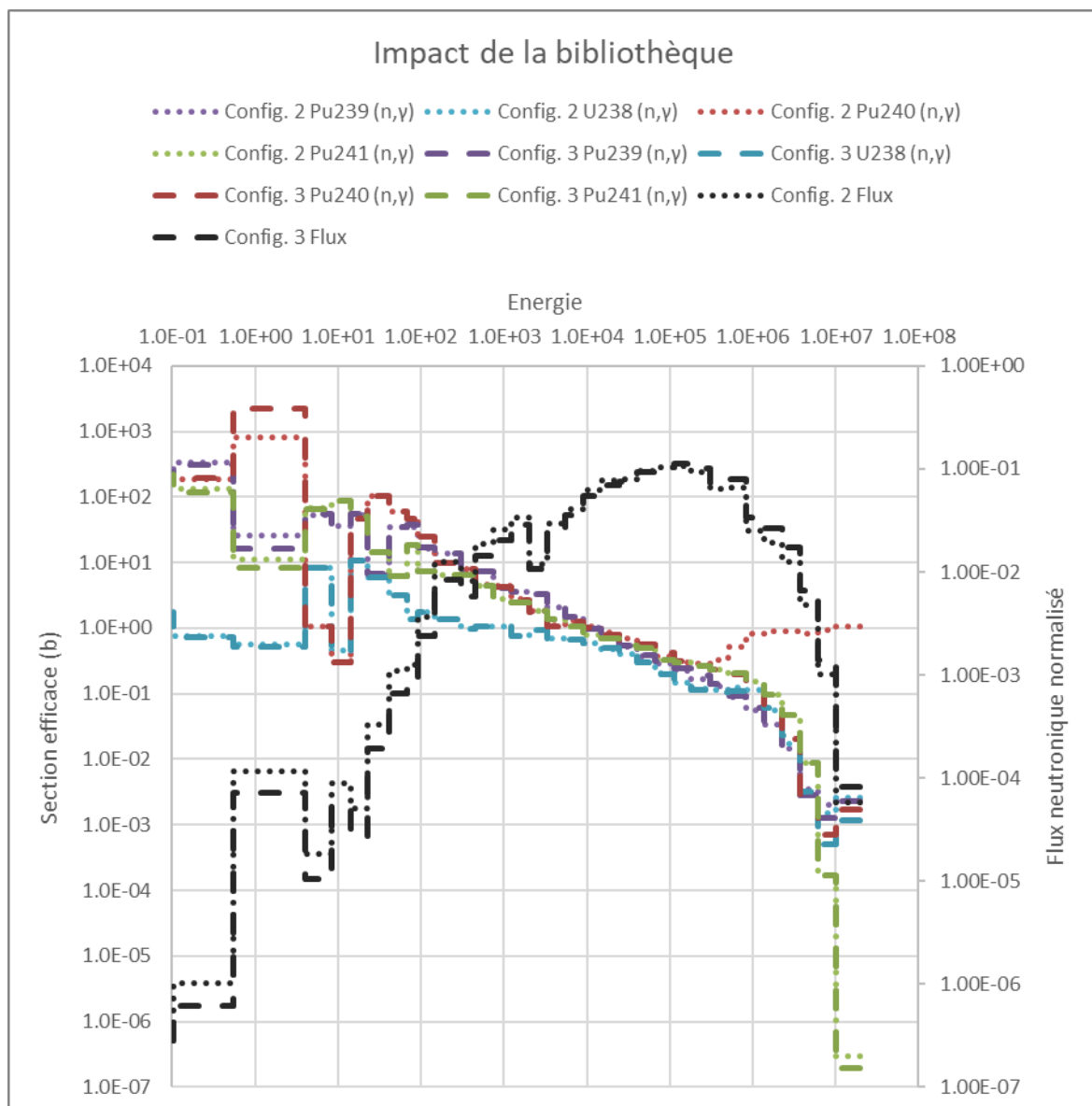
- Les résultats sont similaires pour la majorité des isotopes.
- Quelques écarts sont observés pour certains isotopes du plutonium : les plutoniums 238, 241 et 242. Les écarts observés pour la production des plutoniums 238 et 242 sont compatibles aux incertitudes. Ceux du plutonium 241 sont compatibles à 2σ .



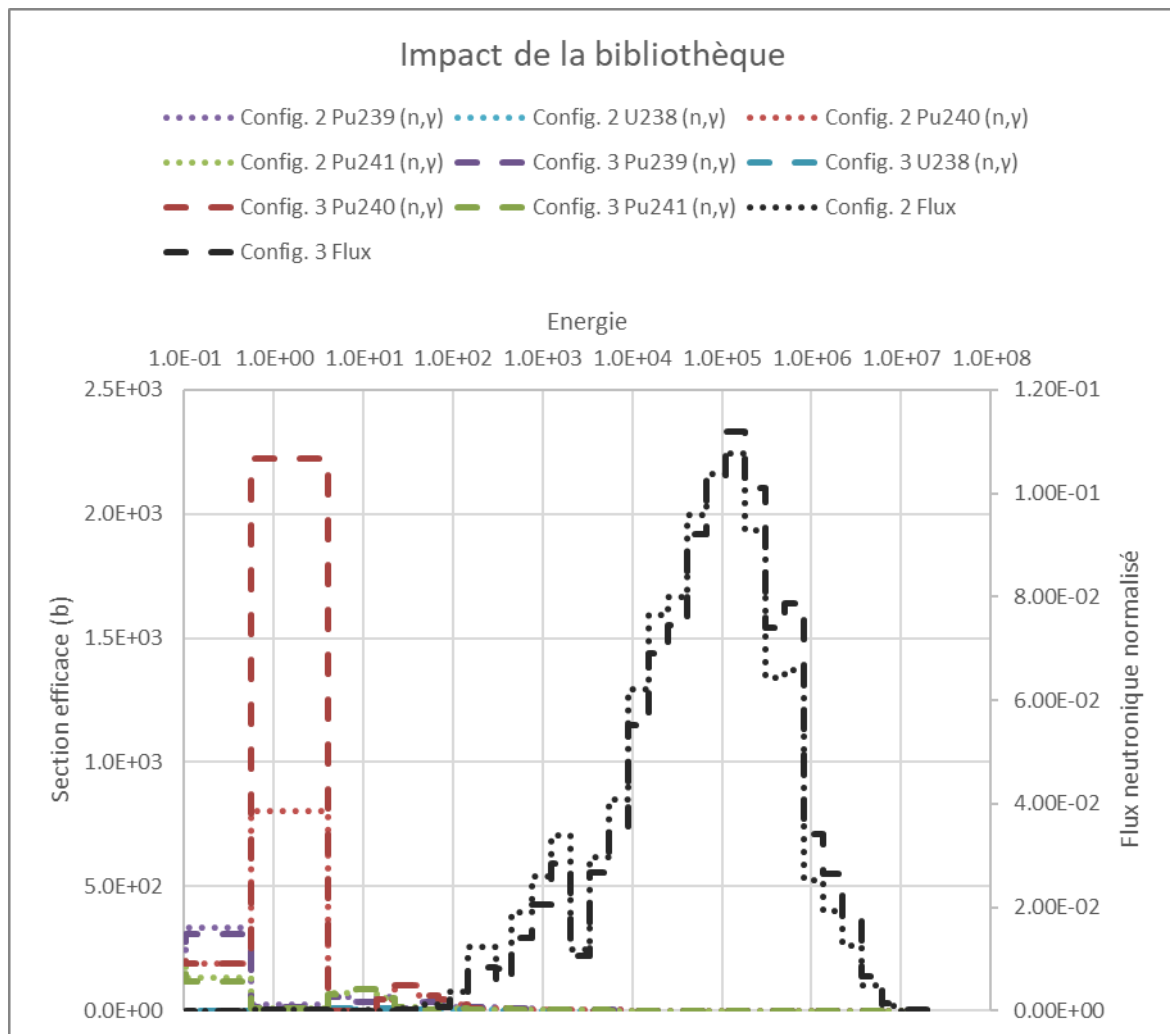
Graphique 48 : Impact de la bibliothèque de données nucléaires sur les autres isotopes

On remarque en effet sur le graphique suivant (Graphique 54) qu'il y a des variations importantes des sections de capture du plutonium 240 avec la bibliothèque de données nucléaires. En effet, celle-ci est présente une résonance bien plus importante avec JEFF-3.2 qu'avec JEFF-3.1.1.

On remarque également un effet sur le spectre neutronique : il semble plus doux avec JEFF-3.1.1 qu'avec JEFF-3.2.



Graphique 49 : DOUBLON : Impact de la bibliothèque de données nucléaires sur le flux neutronique et les sections efficaces – échelle logarithmique



Graphique 50 : DOUBLON : Impact de la bibliothèque de données nucléaires sur le flux neutronique et les sections efficaces – échelle linéaire

Utiliser la bibliothèque de **données nucléaires JEFF-3.2** modifie le calcul de la production des isotopes du plutonium 241 et 242. En effet, la bibliothèque de données nucléaires a un impact sur les sections efficaces, notamment les sections de capture du plutonium 240, ainsi que sur le spectre neutronique.

3.5.9 Impact de la température

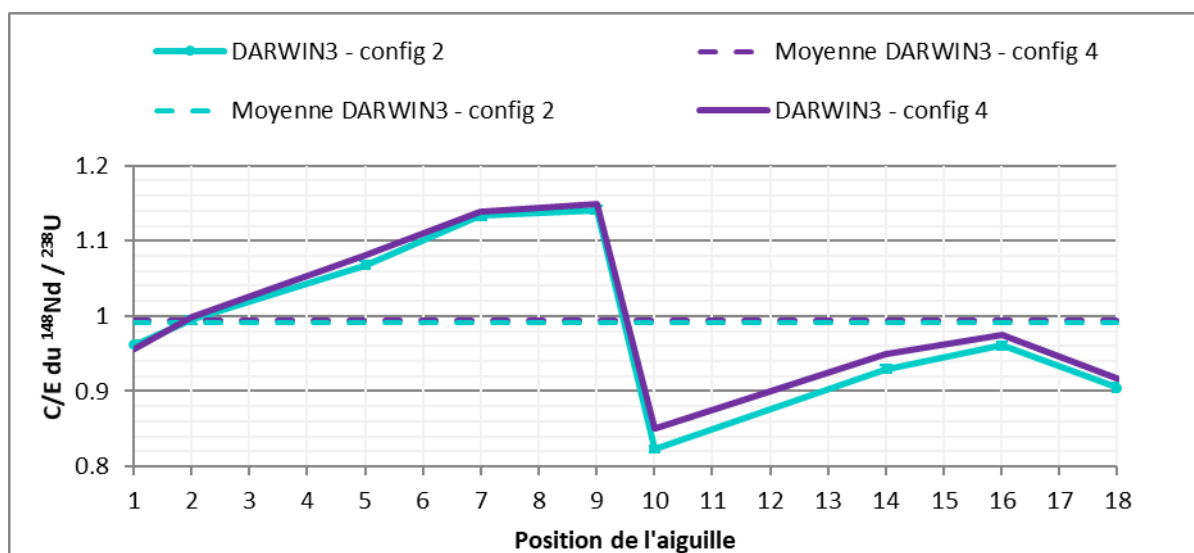
Nous nous intéressons à l'impact de la température sur nos résultats de calculs, pour cela nous comparons deux cas avec DARWIN3 (Tableau 44).

Formulaire		Température de modélisation	Chaîne d'évolution	Données nucléaires	Evolution	Plan de chargement
DARWIN3	Config 2	20°C	RNR	JEFF-3.1.1	Aiguilles DOUBLON	Constant
DARWIN3	Config 4	650°C	RNR	JEFF-3.1.1	Aiguilles DOUBLON	Constant

Tableau 44 : Extrait du Tableau 10 pour l'impact de la température

Les résultats du C/E du rapport isotopique $^{148}\text{Nd} / ^{238}\text{U}$ sont présentés dans le graphique suivant (Graphique 51). On peut observer que :

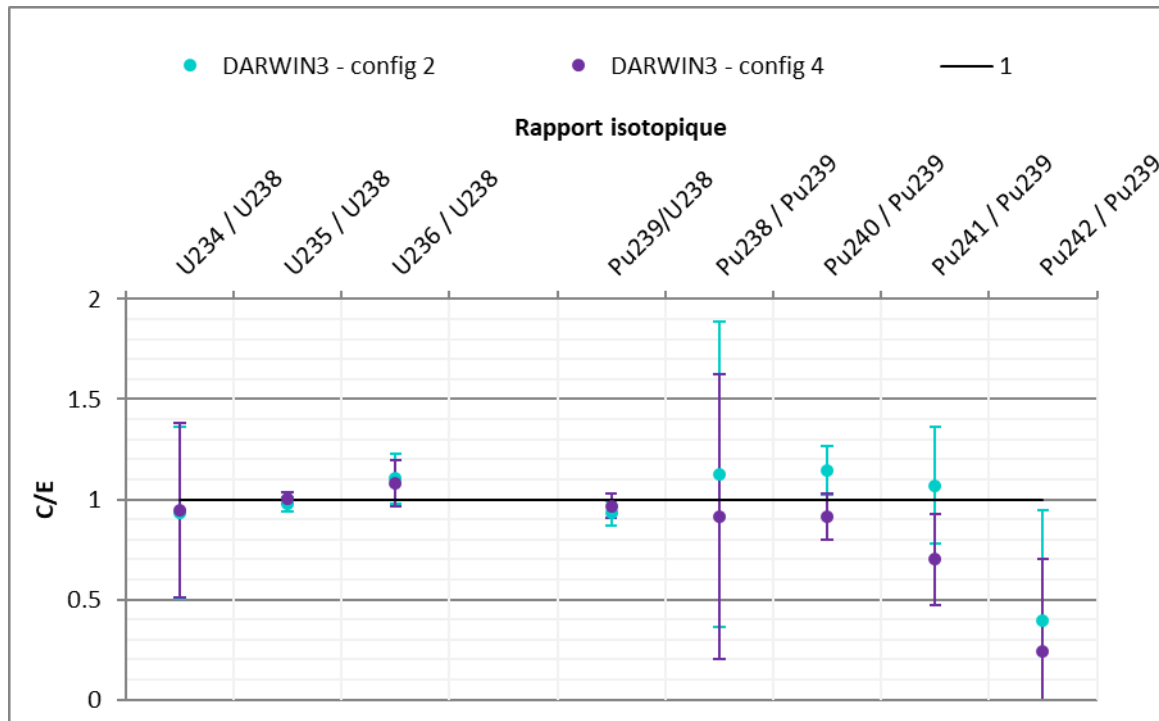
- Les résultats sont **identiques** pour l'assemblage de première couronne fertile FEF79 (aiguilles 1 à 9).
- La température a un impact sur l'assemblage de deuxième couronne FEG58 (aiguilles 10 à 18).



Graphique 51 : DOUBLON : Impact de la température sur le C/E du $^{148}\text{Nd} / ^{238}\text{U}$

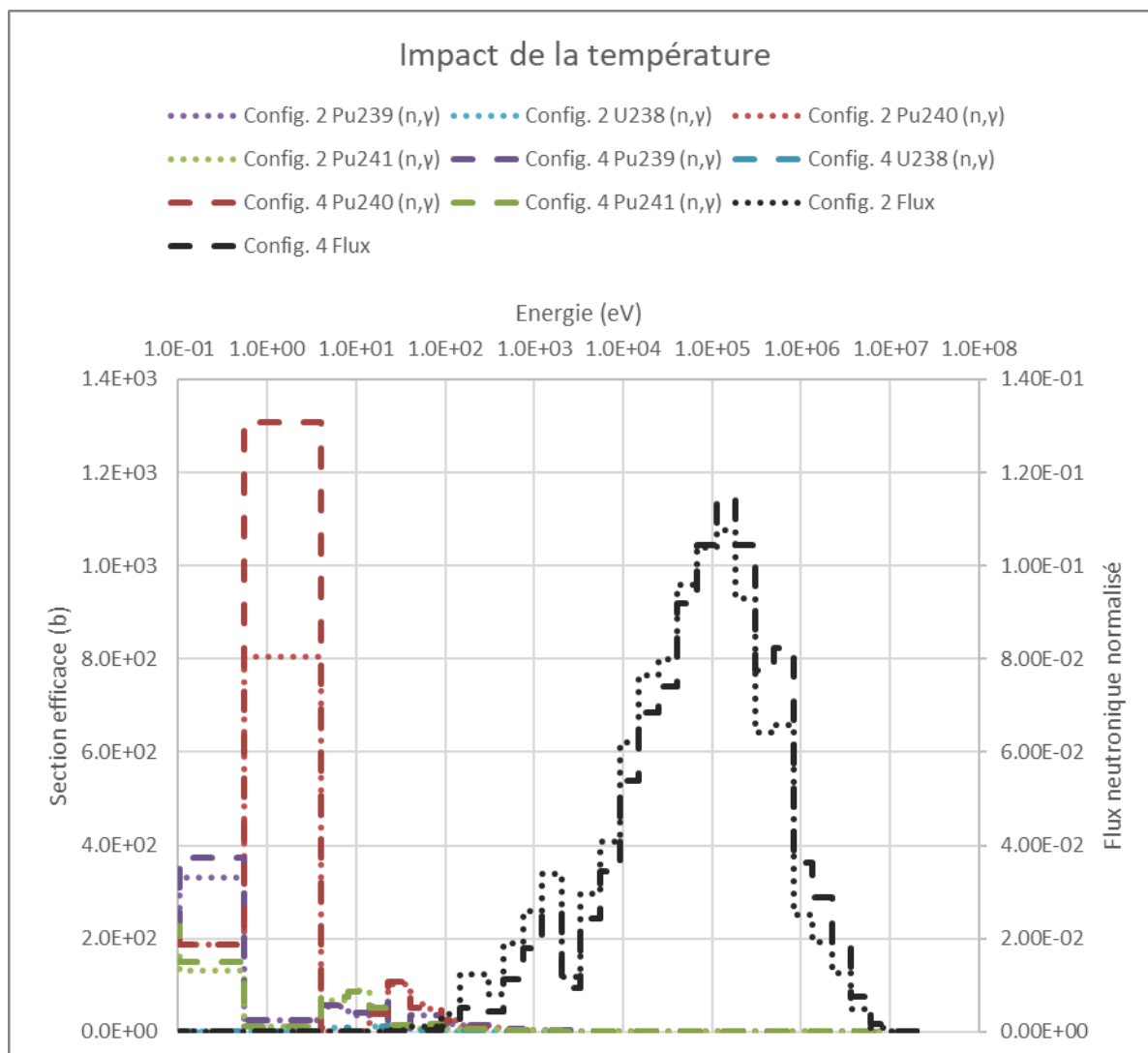
Les résultats des C/E des autres rapports isotopiques sont présentés dans le graphique suivant (Graphique 52). On peut observer que :

- Les résultats sont similaires pour les isotopes de l'**uranium**.
- Des écarts sont observés pour les isotopes du plutonium (excepté pour le plutonium 239).

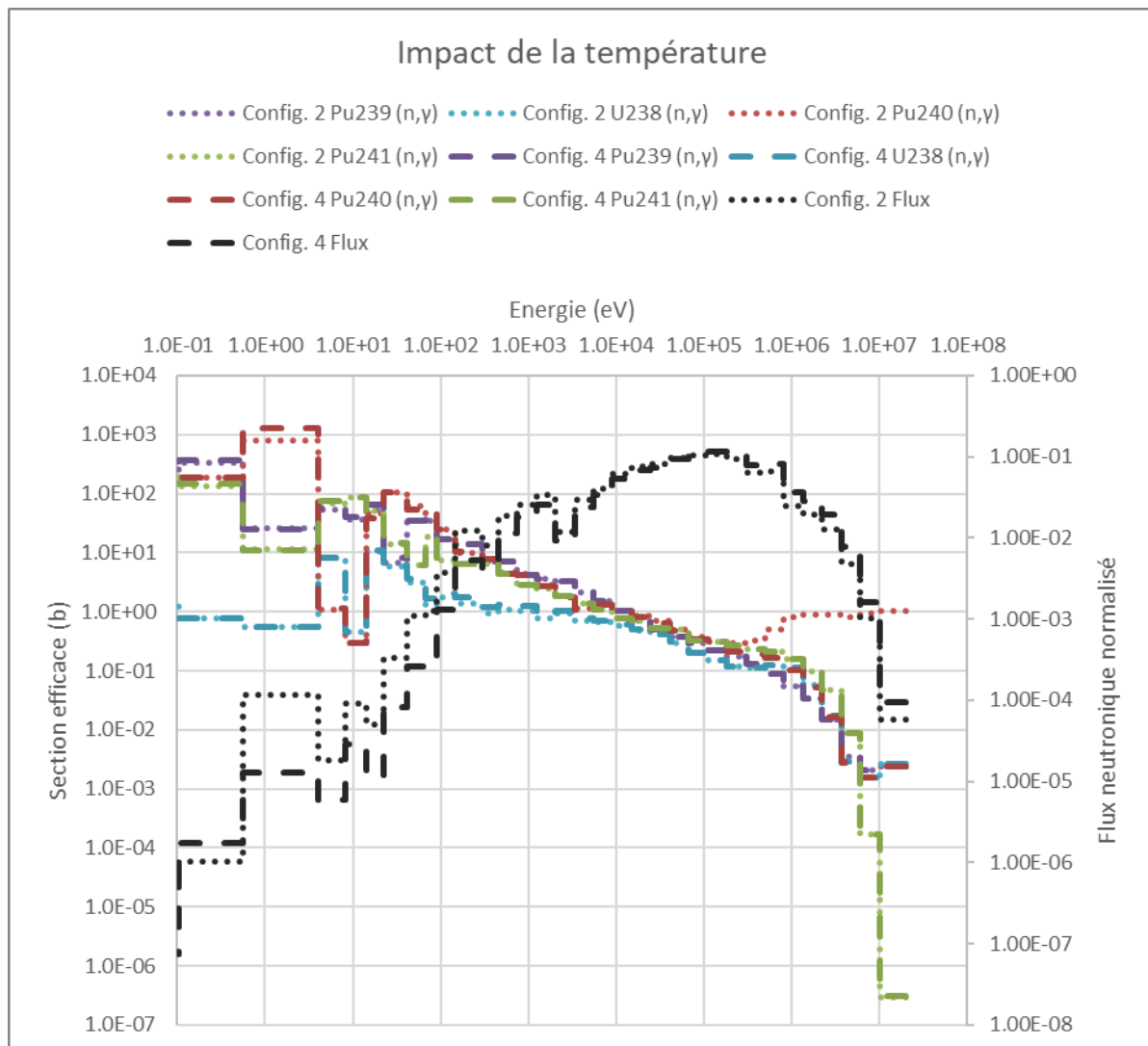


Graphique 52 : DOUBLON : Impact de la température sur les autres isotopes

Le graphique suivant (Graphique 54) montre en effet l'impact du changement de température sur certaines sections efficaces et sur le flux neutronique (en tiret, config. 2 (20°C), en pointillés, config. 4 (650°C)).



Graphique 53 : DOUBLON : Impact de la température sur le flux neutronique et les sections efficaces – échelle linéaire



Graphique 54 : DOUBLON : Impact de la température sur le flux neutronique et les sections efficaces – échelle logarithmique

On remarque :

- Il y a un impact léger de la température sur le flux neutronique
- On remarque surtout un effet important sur la section de capture du **plutoniums 240**.

La température a un impact sur le calcul de la production de l'ensemble des isotopes du plutonium. En effet, elle impacte notamment le niveau de flux – on remarque que le spectre est plus doux à 20°C qu'à 650°C -, et fortement la section de capture du plutonium 240.

3.5.10 Conclusions concernant l'expérience DOUBLON

TRIPOLI-4® est le code stochastique utilisé comme référence pour de nombreux calculs. Cependant, pour les calculs d'évolution, les temps de calculs nécessaires deviennent vite rédhibitoires pour une utilisation « en routine ».

- Avec TRIPOLI-4®, l'utilisation d'un **plan de chargement constant** est valable. En effet, il n'y a pas d'impact sur l'allure des rapports isotopiques du ^{148}Nd / ^{238}U et sur leurs C/E. Une simple translation est visible, témoin d'une modification du niveau de flux, que l'on pourrait adapter en faisant simplement un **recalage**.

Le formulaire DARWIN3, formulaire déterministe d'évolution, bénéficie d'un temps de calcul raisonnable. Pour le calcul des bilans matières dans la couverture fertile des réacteurs à neutrons rapides, il présente de nombreux avantages.

- L'utilisation indépendante des deux codes formant DARWIN3 (le formulaire neutronique APOLLO3® suivi du module d'évolution MENDEL) permet de gérer la génération des MPOs facilement et d'effectuer renormalisation et recalage en fluence sans refaire le calcul neutronique plus chronophage.
- DARWIN3 modélise le flux neutronique de façon semblable à TRIPOLI-4® au sein de la couverture radiale fertile, à un facteur de recalage près. Les deux formulaires de calcul, déterministes et stochastiques, semblent avoir des difficultés à reproduire les taux de fissions au sein de la couverture fertile radiale.
- DARWIN3 permet de produire des résultats identiques à TRIPOLI-4® pour la production de la majorité des isotopes analysés (uraniums, plutoniums 238, 239 et 240).

Les disparités sont observées pour les plutoniums 241 et 242 s'expliquent notamment parce que le spectre neutronique est plus important avec TRIPOLI-4® où les sections de capture sont particulièrement importantes, induisant des taux de réactions plus importants avec TRIPOLI-4®.

- DARWIN3 et DARWIN2 sont en moyenne performants pour calculer le niveau du flux neutronique sur l'ensemble de la couverture fertile. Cependant, les deux formulaires présentent une forte dispersion aiguille par aiguille, donnant des courbes aux allures très différentes. En effet, dans DARWIN3, le spectre neutronique s'adoucit davantage que dans DARWIN2. On remarque également des écarts au niveau des sections de capture et de fission de l'uranium 238.
- Comme pour l'expérience TRAPU, l'impact de la chaîne d'évolution est négligeable sur les C/E obtenus pour la production des isotopes de l'uranium et du plutonium. Ceci est cohérent, car la chaîne d'évolution « RNR » a un impact sur les américiums et leurs fils, qui ne sont pas analysés dans l'expérience DOUBLON.
- La température a un impact sur le calcul de la production de l'ensemble des isotopes du plutonium, car elle impacte notamment légèrement le niveau de flux, mais surtout la section de capture du plutonium 240.
- La bibliothèque de données nucléaires a un impact sur le calcul de la production des plutoniums 241 et 242, car elle impacte notamment fortement la section de capture du plutonium 240.

3.6 CONCLUSIONS DU CHAPITRE 3 – PERFORMANCES DE DARWIN3 POUR LE CALCUL DES BILANS-MATIERE

La première étape de la validation du formulaire DARWIN3 pour le calcul de la puissance résiduelle consiste en la **validation du calcul des bilans-matière**, car la puissance résiduelle dépend des concentrations isotopiques.

3.6.1 Conclusions sur les hypothèses de modélisation

Au cours de cette thèse, un certain nombre d'hypothèses ont été testées, afin de simplifier les calculs d'évolution, et de conclure quant aux modélisations optimales.

Grâce à l'expérience TRAPU, nous avons montré que l'hypothèse simplificatrice de ne faire évoluer que les concentrations des aiguilles d'intérêt est valable : elle n'impacte pas les résultats obtenus. Cette hypothèse permet notamment d'obtenir des résultats plus rapidement, et est nécessaire pour la réalisation de calculs stochastiques en évolution (TRIPOLI-4®) du fait de temps de calculs rédhibitoires.

La chaîne d'évolution n'a que peu d'impact pour le calcul de la production des isotopes de l'uranium, en revanche, dans le cœur interne, du fait de la modification du rapport de branchement de l'américium 241, elle a des impacts non négligeables sur les actinides mineurs et le plutonium 238. L'utilisation d'une chaîne d'évolution spécifique au spectre neutronique des réacteurs à neutrons rapides est ainsi nécessaire pour l'interprétation de la formation de ces isotopes dans ce type de spectre. Dans la couverture fertile, l'impact n'a pas été quantifié parce que les productions des américiums et leurs fils ne sont pas mesurés.

La bibliothèque de données nucléaires JEFF-3.2 améliore la prédiction des rapports isotopiques des curiums 243 et 245 grâce aux nouvelles évaluations. Elle impacte d'une manière générale le calcul de l'ensemble des productions des américiums et des curiums de façon plus ou moins marquée. Son utilisation est nécessaire pour l'interprétation de la production de ces isotopes.

Pour les plutoniums, si son impact n'est pas trop marqué dans le cœur interne, en revanche, on remarque une différence dans la couverture fertile. Elle impacte notamment la section de capture du plutonium 240, rendant ainsi son impact quantifiable sur les plutoniums 241 et 242.

Dans le cœur interne, la température impacte les estimations des productions des curiums 244 et 245. Une température représentative de la température « réelle » de fonctionnement est nécessaire pour la bonne estimation des productions des isotopes. Dans la couverture fertile, la

température a un impact sur l'ensemble des isotopes du plutonium : elle impacte notamment légèrement le niveau de flux, mais surtout les sections de capture des plutoniums 240 et 241.

Avec TRIPOLI-4® est le code stochastique utilisé comme référence pour de nombreux calculs, nous avons montré qu'utiliser un **plan de chargement constant** est valable. En effet, il n'y a pas d'impact sur l'allure des rapports isotopiques du ^{148}Nd / ^{238}U et sur leurs C/E. Une simple translation est visible, témoin d'une modification du niveau de flux, que l'on pourrait adapter en faisant simplement un **recalage en fluence**.

3.6.2 Conclusions concernant la performance de DARWIN3 dans le cœur interne (expérience TRAPU)

DARWIN3 présente de nombreux avantages pour le calcul des bilans matières dans le cœur interne de PHENIX, réacteur à neutrons rapides (RNR) refroidi au sodium.

Il est performant pour estimer la production de la majorité des noyaux lourds, en comparaison avec le code stochastique TRIPOLI-4®.

DARWIN3 est performant pour estimer la production de la majorité des actinides majeurs, à la fois en comparaison à TRIPOLI-4® et à DARWIN2. Ces isotopes sont notamment importants pour le fonctionnement d'un réacteur. Ces résultats sont cohérents car la concentration finale des isotopes du plutonium et de l'uranium dépendent majoritairement de leur concentration initiale, qui est identique dans les différents outils de calcul.

Le spectre neutronique obtenu avec DARWIN3 est plus doux que ceux de TRIPOLI-4® et de DARWIN2. Cela explique les écarts observés sur certains isotopes, notamment pour le neptunium 237 et pour les isotopes de l'américium et du curium. La concentration finale de ces isotopes dépend majoritairement de réactions de capture sur différents isotopes. Ainsi, les variations de spectre neutronique, qui impactent les taux de réactions, vont fortement impacter les productions de ces isotopes.

Cependant, le spectre obtenu avec TRIPOLI-4®, reconstruit à 33 groupes pour permettre la comparaison à DARWIN3, est en réalité continu. Il n'est pas à négliger la possibilité d'un impact supplémentaire du découplage énergétique sur les écarts observés, notamment du fait de résonances à basse énergie.

3.6.3 Conclusions concernant la performance de DARWIN3 dans la couverture fertile (expérience DOUBLON)

Dans la couverture fertile radiale, DARWIN3 modélise le flux neutronique de façon semblable à TRIPOLI-4®, à un facteur de recalage près. Cependant, les deux formulaires de calcul, déterministes et stochastiques, semblent avoir une difficulté à reproduire les taux de fissions au sein de la couverture fertile radiale, où le niveau et le spectre du flux de neutron varie beaucoup sur une distance faible

DARWIN3 permet de produire des résultats identiques à TRIPOLI-4® pour la majorité des isotopes analysés (uraniums, plutoniums 238, 239 et 240). Les disparités sont observées pour les plutoniums 241 et 242 s'expliquent notamment parce que le spectre neutronique est plus important avec TRIPOLI-4® où les sections de capture sont particulièrement importantes, induisant des taux de réactions plus important avec TRIPOLI-4®.

DARWIN3 et DARWIN2 sont en moyenne performants pour calculer le niveau du flux neutronique sur l'ensemble de la couverture fertile. Cependant, les deux formulaires présentent une forte dispersion aiguille par aiguille, donnant des courbes aux allures très différentes. En effet, dans DARWIN3, le spectre neutronique s'adoucit davantage que dans DARWIN2. Cependant, DARWIN3 permet de produire des résultats identiques à DARWIN2 pour le calcul de la production de la majorité des isotopes analysés.

3.6.4 Problématiques soulevées et réponses apportées

Nous avons vu en introduction un certain nombre de problématiques liées au calcul de la puissance résiduelle. L'étude des expériences TRAPU et DOUBLON permet de répondre à une partie de ces interrogations.

3.6.4.1 Problématiques spatiales

Pour le calcul du flux, DARWIN3 permet d'obtenir des valeurs cohérentes avec TRIPOLI-4®. Bien que le résultat DARWIN3 reste biaisé, avec une tendance marquée à une augmentation du rapport $^{148}\text{Nd} / ^{238}\text{U}$ au sein de chaque assemblage de la couverture fertile, celles-ci sont cohérentes avec TRIPOLI-4®. On peut ainsi conclure que DARWIN3, malgré son biais

résiduel, fournit une meilleure prédiction du niveau de flux que son prédécesseur DARWIN2, pour lequel le biais semble très différent.

Après une correction (recalage) effectuée grâce à l'indicateur de fluence (le rapport isotopique du $^{148}\text{Nd} / ^{238}\text{U}$), DARWIN3 est en mesure de reproduire les valeurs des bilans matière à la fois dans le cœur interne et dans la couverture fertile. Les disparités restantes s'expliquent par des écarts de calcul de spectre neutronique.

3.6.4.2 Problématiques temporelles

Avec DARWIN3, l'historique d'irradiation peut être pris en compte dès l'étape du calcul neutronique grâce à APOLLO3® avec le diagramme de marche. Ainsi, l'évolution réalisée à l'étape neutronique tient compte des temps et des puissances réelles. Ce n'était pas le cas dans ERANOS2, qui faisait l'évolution en JEPP.

Cependant, les expériences TRAPU et DOUBLON ne permettent pas de prendre en compte les histoires des assemblages car ces expériences ont eu lieu à des cycles où les données n'ont pas été informatisées et restent très difficilement exploitables. En effet, les outils de gestion des histoires des assemblages ont été développés, mais retracent des informations à partir du cycle 35, soit plusieurs cycles après la fin des expériences TRAPU et DOUBLON.

Ainsi, il semblerait judicieux d'avoir la possibilité de réinterpréter des expériences ayant eu lieu dans PHÉNIX après le cycle 35, afin de prendre en compte les histoires des assemblages.

Il est également complexe de prendre en compte les modifications des plans de chargement du cœur de façon aisée. En effet, les données issues de rapports d'expériences sont difficilement exploitables, car même si nous disposons des plans de chargements du cœur, nous ne disposons pas des outils de calcul pour modifier aisément le plan de chargement en cours d'irradiation avec les OCS actuels. Cela a pu être fait avec TRIPOLI-4® manuellement, mais cela est extrêmement chronophage et source d'erreurs, car tout doit être pensé et géré avec différents calculs et différentes géométries.

3.6.4.3 Problématiques méthodologiques

Les OCS actuels ne permettent pas de prendre en compte de façon aisée l'ensemble des termes des sensibilités couplées Boltzmann-Bateman, cependant, le premier terme de ces sensibilités est calculé grâce à MENDEL et est intégré aux calculs d'incertitudes.

Cependant, la prise en compte de l'ensemble des termes des sensibilités couplées Boltzmann-Bateman permettrait de mettre en évidence des liens entre des isotopes en apparence éloignés entre eux, i.e. qui sont reliés par un nombre important de réactions, et notamment avec les noyaux qui sont importants pour le fonctionnement d'un réacteur (pour piloter sa puissance et la réactivité) comme l'uranium 238 et le plutonium 239.

4. CHAPITRE 4 :

ANALYSE D'EXPERIENCES DE MESURE DE LA PUISSANCE RESIDUELLE

Après avoir analysé le calcul de la production des principaux noyaux lourds, qui sont contributeurs à la puissance résiduelle aux temps longs, on s'intéresse maintenant à une expérience de mesure de la puissance résiduelle aux temps courts, qui dépend essentiellement des produits de fission.

4.1 LA PUISSANCE RESIDUELLE

La puissance résiduelle est la « **puissance thermique** émise par un réacteur à l'arrêt. Celle-ci provient de la radioactivité du combustible irradié, de l'activation du caloporteur et des structures soumises au flux neutronique, et des fissions résiduelles aux temps courts. » (ASN, *définition*).

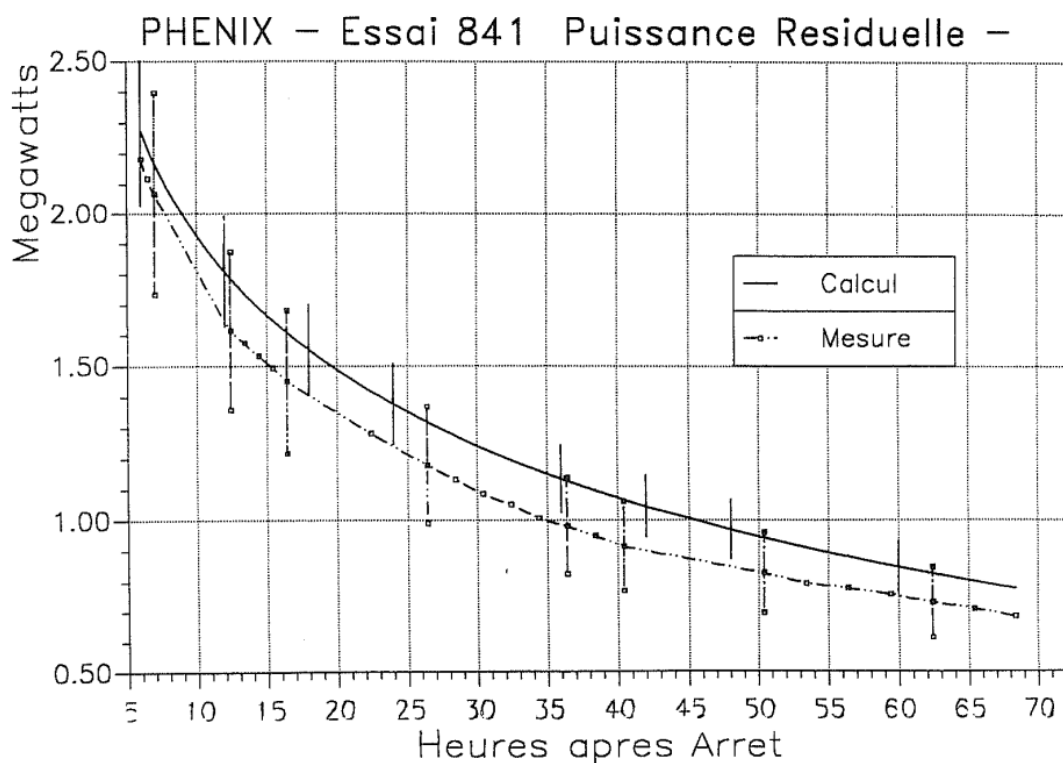


Figure 31 : Evolution de la Puissance Résiduelle en fonction du temps de refroidissement

Au moment de la chute des barres, cette puissance résiduelle représente environ 7%²³ de la puissance nominale dans un réacteur à neutrons rapides (RNR), et elle décroît ensuite de façon exponentielle avec le temps de refroidissement (Figure 31).

4.1.1 Décomposition de la puissance résiduelle

Les principaux contributeurs à la puissance résiduelle dans un RNR caloporté au sodium ont été identifiés grâce à des calculs effectués avec DARWIN2 (*Tsilanizara, 2000*). Ces calculs avaient été effectués pour l'expérience de mesure de la puissance résiduelle PUIREX ayant eu lieu dans PHENIX en 2008 (*Benoit, 2012*).

Cependant, le réacteur PHENIX et SUPERPHENIX, tous deux réacteurs à neutrons rapides refroidis au sodium, devraient présenter les mêmes contributeurs à la puissance résiduelle car ils ont des enrichissements et des vecteurs Pu comparables (Tableau 45).

	PHENIX	SUPERPHENIX
Puissance	563 MW thermiques (réduit à 350 MW thermiques en 1993) 250 MW électriques	3000 MW thermiques 1240 MW électriques
Période de fonctionnement	1974 – 2010	1985 – 1997
Enrichissement en plutonium du combustible	Cœur 1 : 18-21% Cœur 2 : 25-28%	>20% de plutonium 239

Tableau 45 : Caractéristiques des réacteurs à neutrons rapides refroidis au sodium PHENIX et SUPERPHENIX

Aux temps courts, les **produits de fission** sont essentiellement responsables de la puissance émise. Au fur et à mesure du temps, cette contribution diminue tandis que celle des **noyaux lourds** augmente.

²³ Sans prise en compte des fissions résiduelles

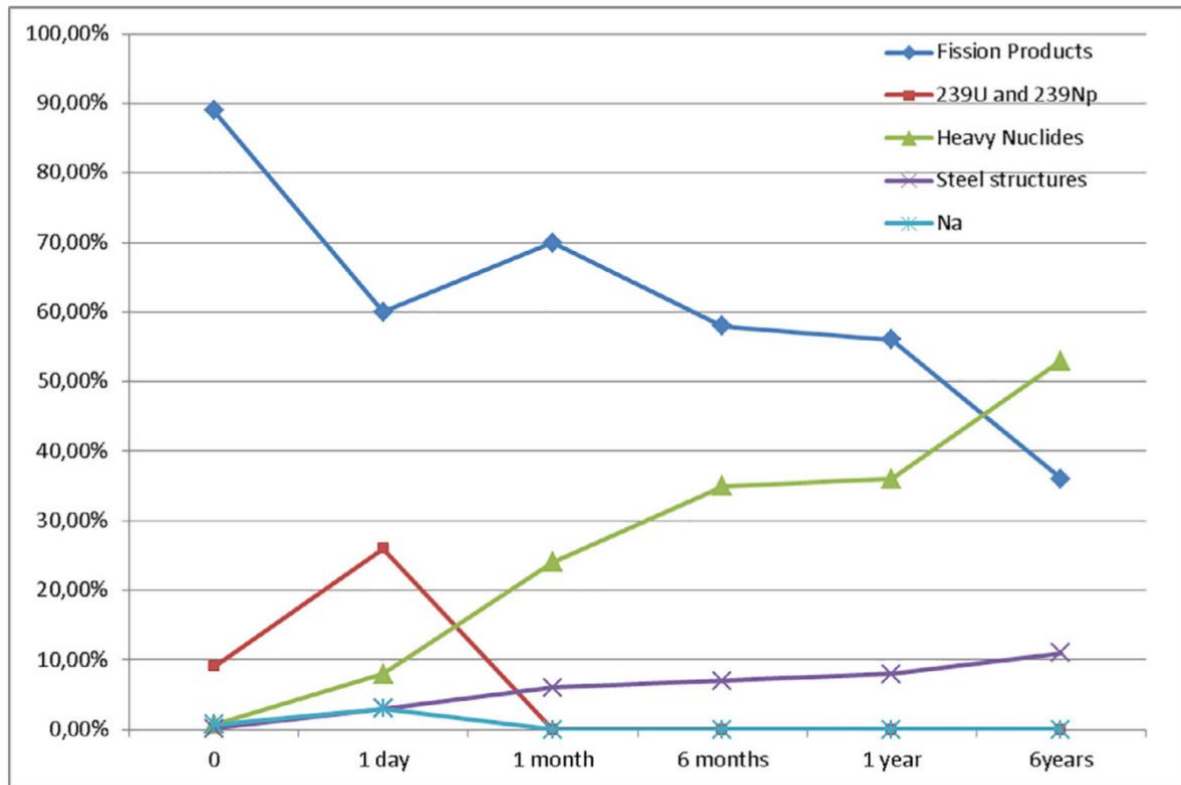


Figure 32 : Contributeurs à la puissance résiduelle dans un RNR en fonction du temps (Lebrat, 2018). Pour chaque temps, la somme des contributions vaut 100%

4.1.2.1 Fissions résiduelles

Les fissions résiduelles sont des fissions issues des *neutrons retardés*.

- Dans un réacteur à eau pressurisée (REP), l'impact de celles-ci est négligeable après une vingtaine de secondes (Lebrat, 2018) (Figure 32)
- Dans les réacteurs à neutrons rapides (RNR), il n'y a moins de neutrons retardés que dans un REP : la fission rapide du plutonium 239 génère moins de neutrons retardés que la fission thermique de l'uranium 235. Ainsi, *l'effet des fissions résiduelles est moins important dans un RNR que dans un REP*.

Il est en pratique difficile d'obtenir des mesures de la puissance résiduelle à des temps très courts, ainsi l'impact des puissances résiduelles n'est pas accessible à la mesure. Elles ne sont généralement pas considérées lors des calculs (Figure 33).

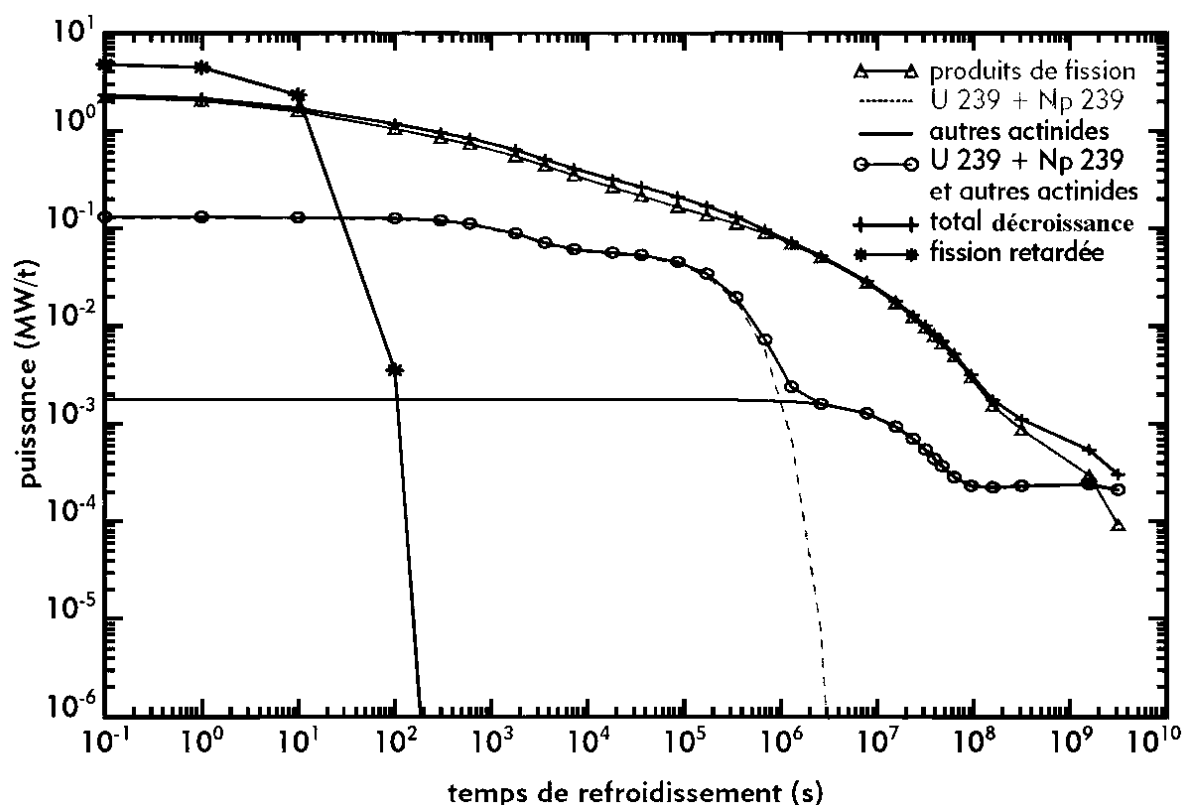


Figure 33 : Différentes contribution à la puissance résiduelle calculées pour un REP (Benoit, 2012)

Dans la suite de ce travail de thèse, les fissions résiduelles ne seront donc pas étudiées.

4.1.3.2 Les noyaux lourds (NL)

Pendant l'irradiation, plusieurs noyaux lourds participent à la puissance. Ces noyaux sont très majoritairement des émetteurs alpha. Au début de l'irradiation, ce sont les noyaux de **plutonium 238, 239 et 240** ainsi que l'**américium 241** qui sont majoritairement responsables de la puissance alpha.

A l'arrêt de l'irradiation, le **curium 242** devient prédominant. Le curium reste très majoritaire aux temps courts, jusqu'à 89% des émissions alpha un mois après l'arrêt.

Puis, bien que toujours prédominant durant les premières années, la proportion de curium 242 diminue et les noyaux lourds tendent à s'équilibrer vers une proportion plus grande de plutonium 238, 239 et 240 et d'américium 241 comme en début d'irradiation.

4.1.3.3 Les produits de fission (PF)

Les produits de fission contribuent à la puissance résiduelle par leurs émissions bêta et gamma. Ils sont très majoritaires aux temps courts (Figure 32 et Figure 33) : ils représentent en effet de 90% à 60% de la puissance résiduelle la première année.

Ainsi, leur connaissance est essentielle pour calculer la puissance résiduelle. Cependant, au vu de leur nombre très important, leur connaissance ainsi que la modélisation de leur concentration dans les codes de calculs actuels peuvent s'avérer particulièrement complexe.

Les produits de fissions participent, en plus de la puissance résiduelle, au **bilan neutronique** du cœur. En effet, un certain nombre d'entre eux sont des absorbeurs de neutrons de par leurs réactions de captures. Ainsi, leur modélisation est essentielle au calcul de la **réactivité** dans le cœur.

Lors des calculs de bilans matières ou de puissance résiduelle, on utilise ainsi deux chaînes d'évolution avec le formulaire DARWIN3.

- Une première chaîne d'évolution simplifiée²⁴ est utilisée avec le code déterministe neutronique APOLLO3® permet de reproduire la **réactivité** du réacteur. Elle contient ainsi les principaux produits de fissions qui impactent la réactivité. Elle permet ainsi notamment d'obtenir les burnups et les flux à chaque pas de temps qui sont stockés sous format de MPO.
- Une deuxième chaîne d'évolution, cette fois-ci complète²⁵ est utilisée pour le calcul des bilans matières et de la puissance résiduelle avec le code d'évolution MENDEL.

²⁴ Environ 150 isotopes (~26 NL (noyaux lourds), ~130 PF (produits de fissions))

²⁵ Quelques milliers d'isotopes

4.1.2 Les différentes expériences de mesures de la puissance résiduelle dans PHENIX et SUPERPHENIX et leurs interprétations

Entre 1979 et 2008, plusieurs expériences de mesure de la puissance résiduelle ont été effectuées au sein des réacteurs à neutrons rapides refroidis au sodium Phénix et Superphénix. Quatre essais sont comptabilisés dans Phénix (en 1979, 1982, 1993 et 2008), et deux dans Superphénix (en 1987 et 1996). Ces expériences de mesure de la puissance résiduelle ont par la suite été réinterprétées grâce à divers formulaires de calculs et à l'aide de différentes bibliothèques de données nucléaires.

Le Tableau 46 ci-dessous (*Benoit, 2012*) retrace rapidement les différentes interprétations et résultats obtenus sur les différentes expériences de mesure de la puissance résiduelle.

Essais	Temps de refroidissement	Ecart en % <i>C/E -1</i>	Incertitudes expérimentales et calculées à 1σ en %	Code et bibliothèque	Interprétation (Date)
PHENIX 1979	7 à 35h	+6 à + 18	4,5 à 5 3	Code développé pour SPX ²⁶	1979
		+6 à + 20	8,9 à 9,8 13,5 à 7	MECCYCO + JEF1	1992
PHENIX 1982	6 à 34h	-8,5 à - 9	4 ?	?	1983
PHENIX 1993	6 à 72h	+5 à + 17	10 8	MECCYCO + JEF1	1993
PHENIX 2008	1h30 à 12jours	+8 à - 8	5 à 11 5	DARWIN2.3 + JEFF3.1.1	2010
SUPERPHENIX 1987	3 à 24h	-9 à - 5	2,4 à 6,5 5,4 à 3,9	MECCYCO + JEF1	1988
		-15 à - 10	6,7 à 12,5 4,8 à 3,8		1996
SUPERPHENIX 1996	3 à 52h	+3 à - 2	3,8 à 6,8 4,6 à 3,5	MECCYCO + JEF1	2002

Tableau 46 : Interprétations des différentes expériences de mesure de la puissance résiduelle
(*Benoit, 2012*)

²⁶ SPX est une abréviation pour « Superphénix »

Les interprétations de PUIREX 2008

Les interprétations les plus récentes concernent l'expérience qui a eu lieu dans PHENIX en 2008, « PUIREX 2008 », qui ont eu lieu respectivement en 2012 (Benoit, 2012) puis 2017 (Widawski, 2017). Néanmoins, il semble intéressant de réinterpréter une expérience de mesure de la puissance résiduelle avec le nouveau formulaire DARWIN3 et des données nucléaires récentes. En effet, l'interprétation de PUIREX 2008 présente des disparités inexplicables. De plus, le formulaire DARWIN3 doit être validé pour le calcul de la puissance résiduelle.

La figure ci-dessous (Figure 34) présente les C/E de la puissance résiduelle calculée pour l'expérience PUIREX 2008 (Lebrat, 2018) effectués avec DARWIN2.

- On remarque une **surestimation** de la puissance résiduelle aux temps courts.
- Les incertitudes sur le niveau de flux ne sont pas considérées.
- Il n'y a pas de données permettant un recalage sur un indicateur de fluence.

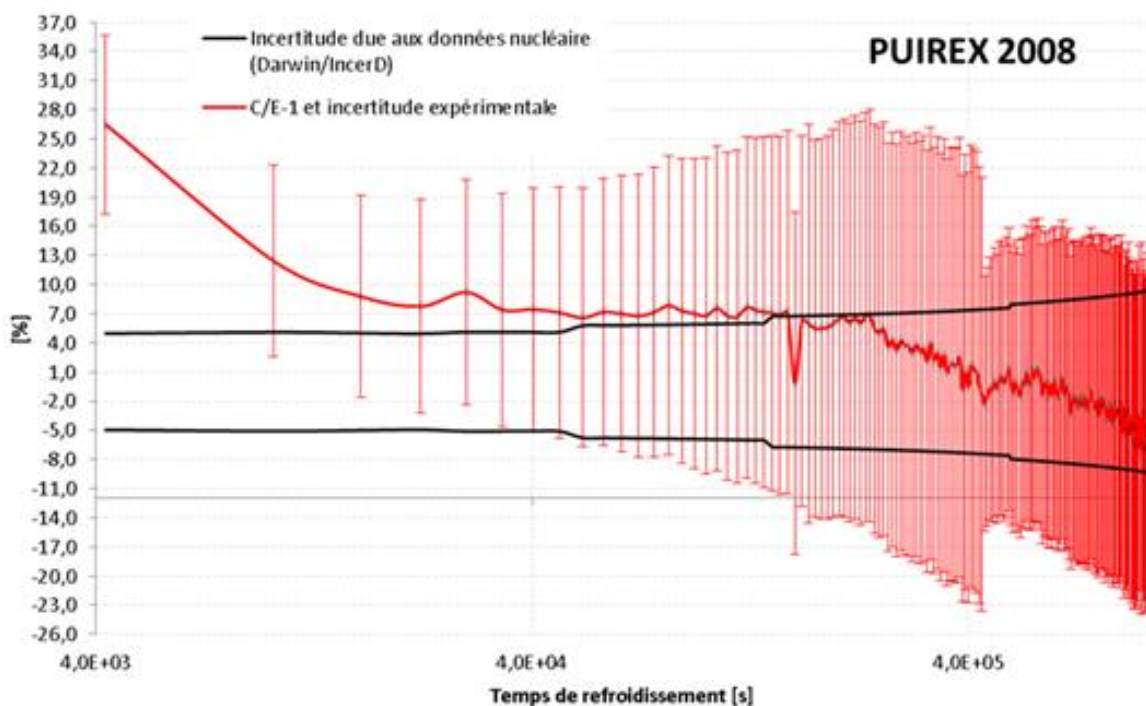


Figure 34 : C/E de la puissance résiduelle calculée pour PUIREX 2008 (Lebrat, 2018)

Choix de l'expérience réinterprétée avec DARWIN3

Nous nous intéressons à l'expérience de mesure ayant eu lieu dans Superphénix en 1987. Déjà interprétée deux fois, en 1988 et en 1996, elle n'a pas été réinterprétée depuis avec des outils plus récents.

De plus, le cœur de Superphénix à ce moment est quasi-neuf (cœur « CMP » - Cœur de Montée en Puissance), permettant de simplifier considérablement la modélisation de l'expérience. Il n'y a en effet pas à prendre en compte l'histoire des assemblages (plan de chargement).

Enfin, il sera intéressant de voir si une réinterprétation de cette expérience avec des outils de calculs plus modernes conclut toujours à une sous-estimation de la puissance résiduelle calculée aux temps courts, ce qui semble contradictoire avec les résultats de PUIREX 2008.

4.2 L'EXPERIENCE DE MESURE DE LA PUISSANCE RESIDUELLE DE 1987 (SPX 87)

4.2.1 Le réacteur SUPERPHÉNIX

Le réacteur Superphénix (*Gourdon, 1990*) (Figure 35) appartient à la lignée des réacteurs français à neutrons rapides refroidis au sodium. Ce réacteur a fonctionné de 1985 à 1997. C'est un réacteur plus grand et plus puissant que Phénix : il permet d'accéder à une puissance de 3000MWth, contre 563MWth pour Phénix.

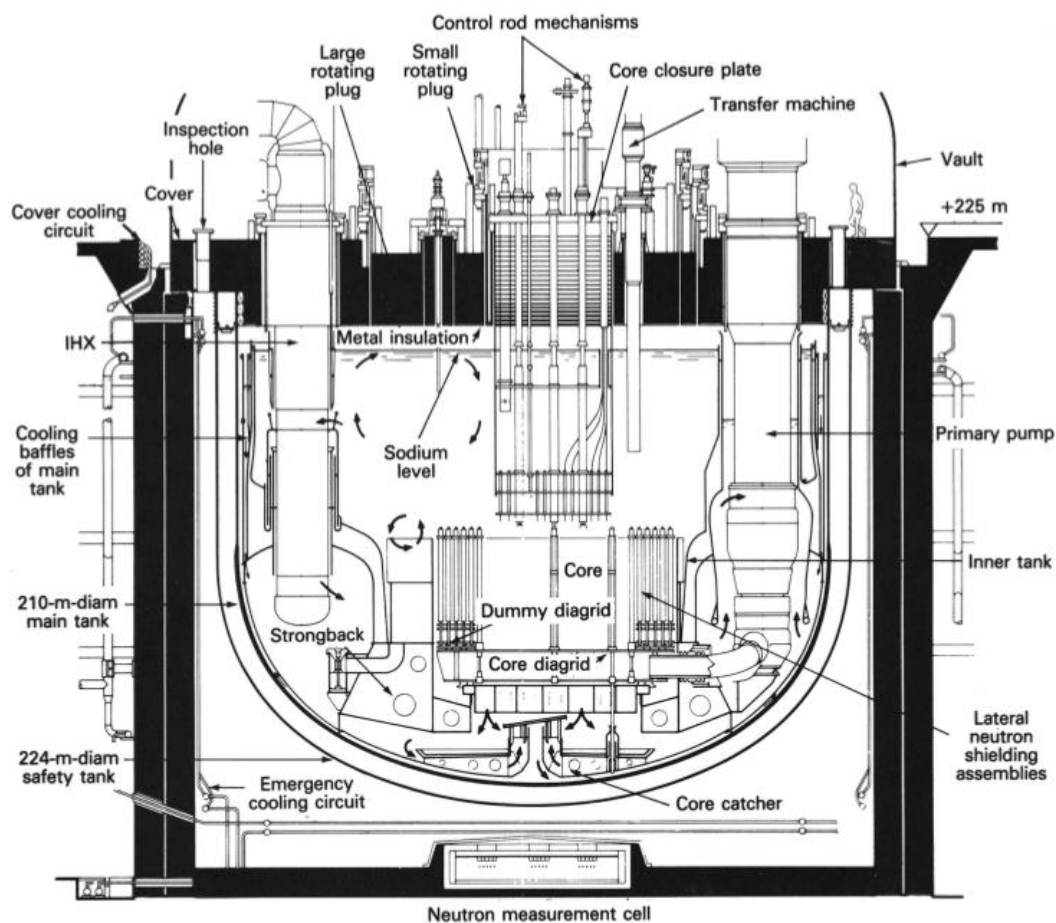


Figure 35 : Le circuit primaire de Superphénix (*Gourdon, 1990*)

Le cœur de Superphénix est composé de quatre zones principales (Figure 36) composées d'assemblages : les assemblages fissiles, situés dans le cœur interne et externe, les assemblages fertiles situés dans la couverture fertile radiale, les réflecteurs et les protections neutroniques.

Les fissiles internes et externes se différencient par leur enrichissement en plutonium.

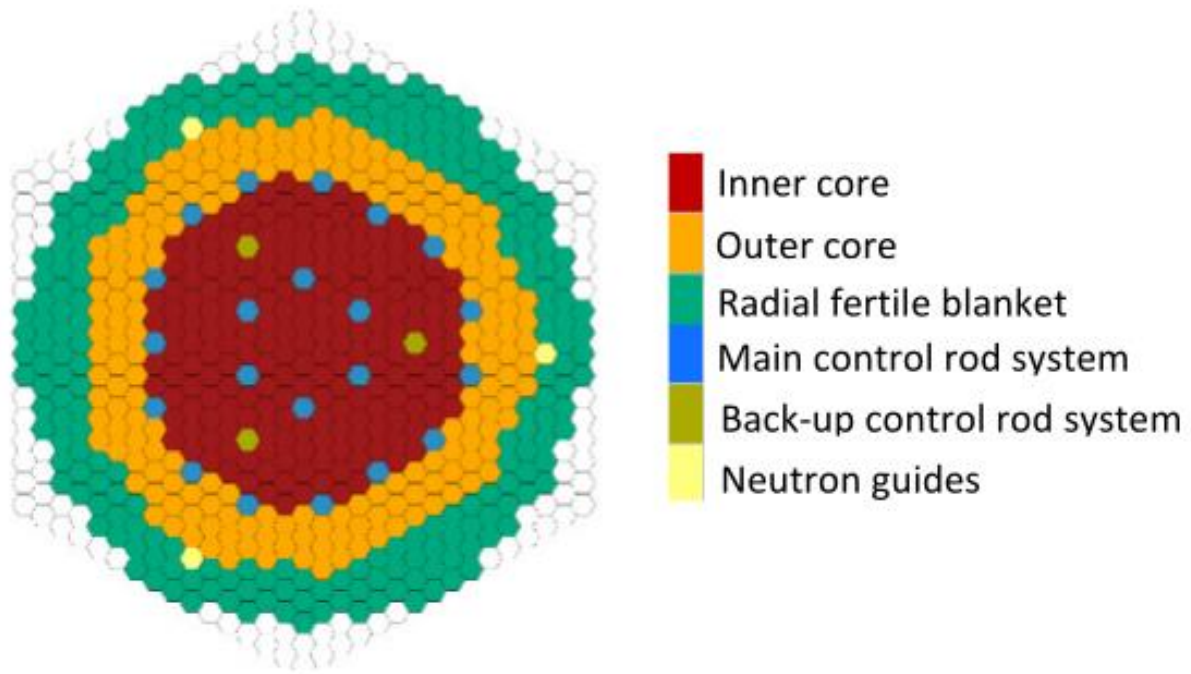


Figure 36: Cœur de Superphénix – assemblages fissiles et fertiles (Garcia, 2019)

La réactivité du cœur est contrôlée par 21 barres absorbantes : un rideau interne de 6 barres et un rideau externe de 15 barres.

4.2.2 La mesure de la puissance résiduelle

L'expérience de mesure de la puissance résiduelle a eu lieu dans le réacteur Superphénix le 26 mai 1987 (Gillet, 1990). L'arrêt a eu lieu après 3,6 jours d'irradiation à 90% de la puissance nominale.

Le cœur a été en fonctionnement pendant un équivalent de 83 jours à puissance nominale (JEPN²⁷). Après l'arrêt, la puissance résiduelle a été mesurée entre 3 et 26 heures de refroidissement.

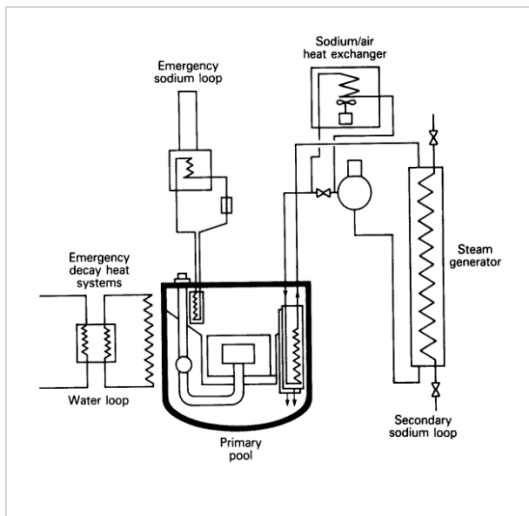


Figure 37: Systèmes d'évacuation de la chaleur (Gillet, 1990)

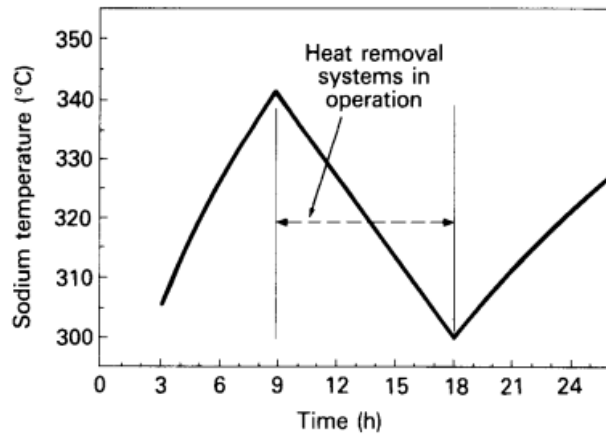


Figure 38: Température du sodium dans Superphénix pendant la mesure de la puissance résiduelle (Gillet, 1990)

Grâce aux systèmes d'évacuation de la chaleur (Figure 37), le réacteur a pu être refroidi. Sa température est maintenue entre 300 et 340°C pendant toute la durée de la mesure (Figure 38). Deux cycles sont utilisés pour mesurer la puissance résiduelle (Figure 38). Celle-ci est obtenue grâce à une méthode calorimétrique à partir des mesures effectuées par les thermocouples, selon l'équation ci-dessous :

$$PR(t) = I \cdot \frac{dT}{dt} - A(t) + F(t) + Extr(t)$$

Avec : $PR(t)$ la puissance résiduelle à l'instant t , I l'inertie du réacteur, F les fuites, A les contributions des pompes et des systèmes de préchauffage, $Extr$ les extractions de puissance dûe aux trappes froides et aux systèmes d'évacuation de la puissance.

Équation 32 : Calcul de la puissance résiduelle par méthode calorimétrique

Pour résoudre cette équation (Equation Équation 32)), le réacteur est considéré comme un **système isolé**. Cela est possible parce que la mesure émise par les thermocouples dépend uniquement de la température locale et de son gradient.

La puissance résiduelle est alors la valeur moyenne des valeurs fournies par les thermocouples. Cette moyenne est calculée par moyenne mobile afin de réduire les fluctuations statistiques. Le biais dû au gradient de température et à sa dispersion est évalué par le calcul de l'écart quadratique moyen.

²⁷ Jours Equivalent Puissance Nominale

La figure ci-dessous (Figure 39) montre la puissance résiduelle obtenue par la mesure, grâce aux valeurs des thermocouples.

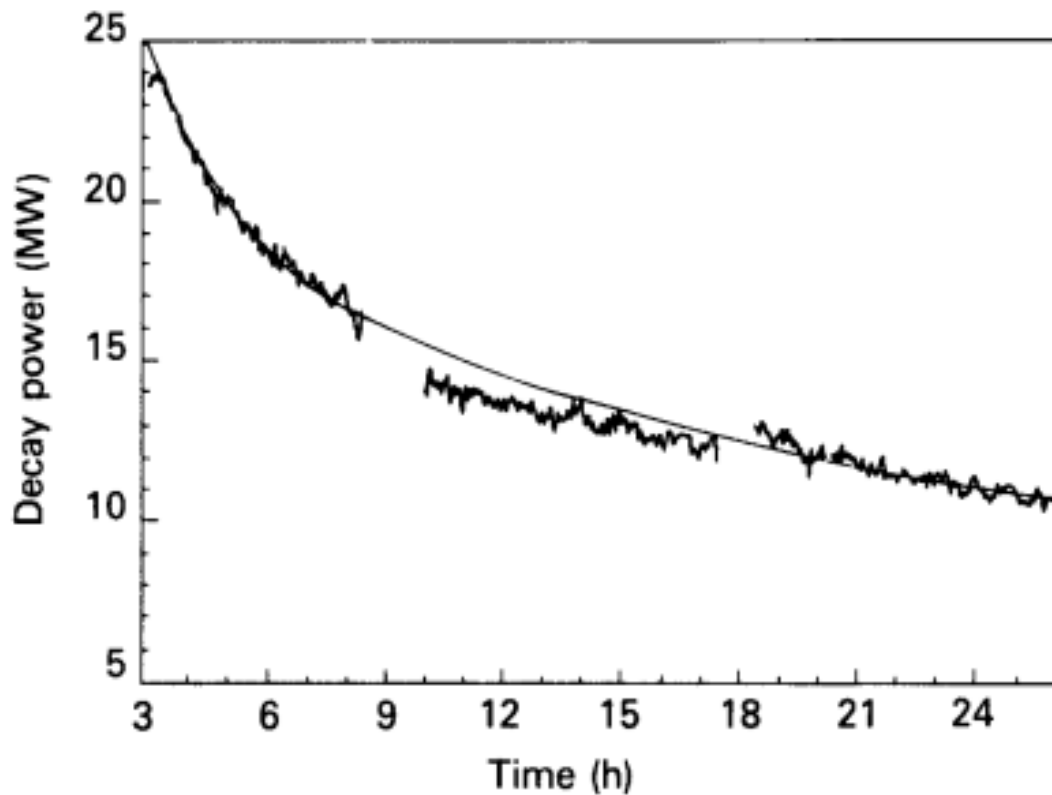


Figure 39 : Valeur expérimentales de la mesure de la puissance résiduelle et moyenne mobile (Gillet, 1990)

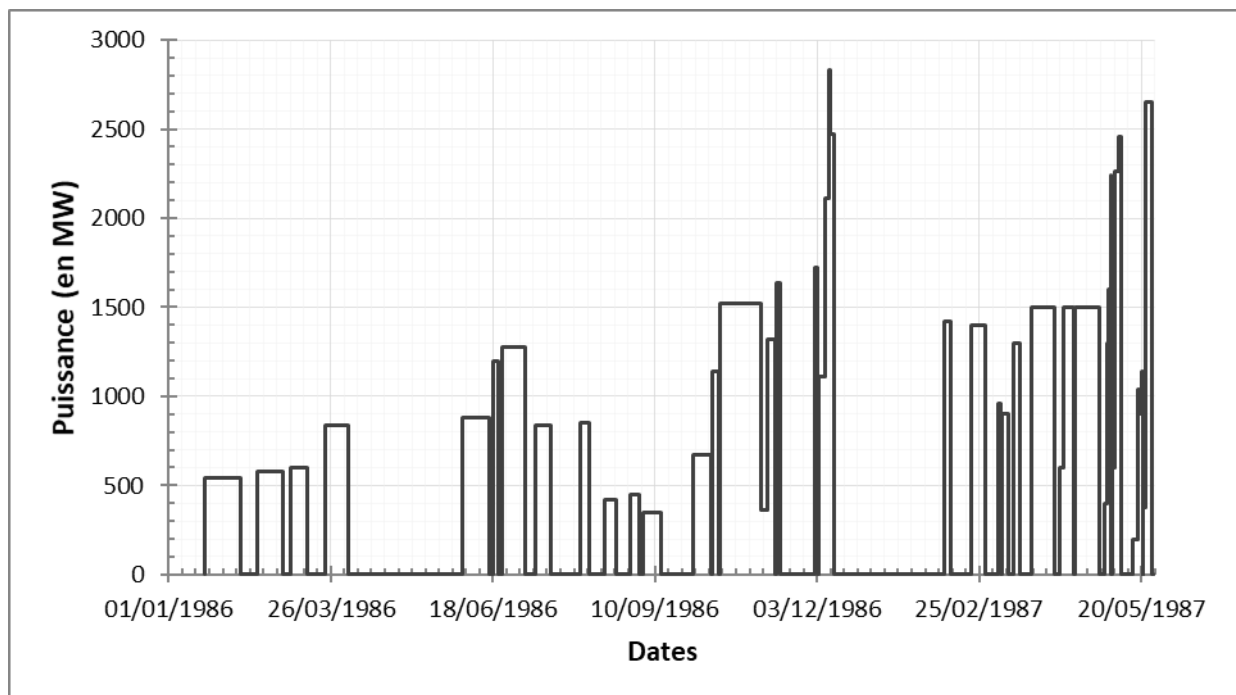
On remarque sur la courbe des valeurs expérimentales de la puissance résiduelle (Figure 39) que les valeurs de la puissance résiduelle sont « lissées », tandis que les valeurs fournies par les thermocouples oscillent. La courbe obtenue est le résultat de l'ajustement par une somme d'exponentielles de la série de points obtenus.

Cependant, les valeurs fournies par les thermocouples présentent des discontinuités (discontinuité à 9h et à 18h). Le décalage observé entre 9 et 18h est dû à l'action des systèmes d'évacuation de la puissance (Figure 38). Les points de cette période n'ont pas été pris en compte lors de l'ajustement.

Cependant, les valeurs expérimentales ne sont pas revisitées ici, les valeurs données sont considérées comme la référence. Ainsi, les problématiques thermo-hydrauliques ne sont pas l'objet de la thèse et ne sont pas considérées comme des variables, elles sont utilisées comme telles. L'objet ici est uniquement de revisiter le calcul de cette expérience avec les codes et données nucléaires actualisées et de les comparer aux précédentes interprétations réalisées en 1988 et en 1996.

4.2.3 Historique d'irradiation

L'historique d'irradiation de l'expérience de mesure de la puissance résiduelle dans Superphénix en 1987 s'étale sur une période de début 1986 à fin mai 1987 avec une alternance de période d'irradiation et de refroidissement. Cela correspond à un équivalent de 83 JEPN²⁸. La mesure de la puissance résiduelle débute après l'arrêt du 26 mai 1987.



Il prenait en compte les décroissances α , β et γ du combustible, et l'activation des aciers et du sodium. Il prenait aussi en compte la décroissance des produits de fissions grâce à l'intégration des courbes de fissions élémentaires.

Cependant, le formalisme implanté dans MECCYCO ne permet pas le traitement des produits de fission ni le calcul des sensibilités aux concentrations initiales.

Il était associé à un code neutronique : l'outil « SUIVIX », qui correspond à une version précoce et préliminaire d'ERANOS, et à la bibliothèque de données nucléaires CARNAVAL IV (Czernecki, 1998).

4.4.2.2 L'interprétation de 1988

L'interprétation de 1988 a été réalisée avec le code MECCYCO. L'historique d'irradiation (Graphique 55) utilisé – de 77 pas – a été divisé en quatre parties principales, délimitées par les arrêts du réacteur du 13 septembre 1986, du 12 décembre 1986, du 28 avril 1987 et du 26 mai 1987.

Des approximations et des simplifications avaient été réalisées :

- L'activation du sodium n'a été considérée que du 17 mai au 26 mai 1987
- L'activation des aciers ne considère qu'un historique d'irradiation simplifié sous la forme d'un unique pas de temps
- La puissance résiduelle induite par les produits de fission et provenant des 3 premiers arrêts du réacteur est ajoutée manuellement

Les incertitudes utilisées, à un niveau de confiance de 90%, sont de :

- 10% pour les produits de fission
- 6% dans le cœur interne à 30,6% dans la couverture fertile radiale pour la décroissance du neptunium 239
- 11% pour les décroissances α , provenant essentiellement du curium 242
- 20% pour la désactivation du sodium
- 100% pour la désactivation des aciers

Les constantes de décroissances proviennent de la bibliothèque de données nucléaires ENSDF (Sonzogni, 2005).

4.4.2.3 L'interprétation de 1996

L'interprétation de 1996 a aussi été réalisée avec le code MECCYCO. Les données nucléaires et d'évolution (constantes de décroissances, énergies de décroissances, rendements de fission et courbes de fission élémentaires) sont tirées de la « nouvelle » bibliothèque JEF-1.

L'historique d'irradiation utilisé est le même que celui de l'interprétation de 1988 avec 77 pas (Graphique 55).

4.3 CALCUL DE LA PUISSANCE RESIDUELLE AVEC DARWIN3

4.3.1 Modélisation du cœur Superphénix avec APOLLO3®

Dans les codes déterministes, comme nous l'avons vu précédemment, une première étape de « calcul cellule » ou « calcul réseau » doit être réalisée.

Cette étape permet de produire des sections efficaces représentatives au niveau de l'assemblage. Celles-ci seront ensuite utilisées lors de l'étape du « calcul cœur ».

La modélisation du cœur Superphénix avec APOLLO3® a déjà été réalisée (Figure 40 et Figure 41) et nous en rappelons ici les grandes lignes. Une approche classique en deux temps, étape réseau et étape cœur, est réalisée.

4.3.1.1 Etape réseau

Un schéma de « cluster » standard est réalisé, permettant de générer les sections efficaces au niveau de l'assemblage qui seront par la suite utilisées dans l'étape cœur.

- Le solveur TDT est utilisé pour la production de ces sections efficaces représentatives, avec un découpage en énergie de 1968 groupes, par la suite homogénéisées en sections efficaces multigroupes.
- L'autoprotection est réalisée avec la méthode des Probabilités de Collisions (P_{ij}) avec le formalisme de Tone (*Mao, 2017*).
- Le calcul du flux multigroupe est réalisé par la méthode des caractéristiques (TDT-MOC).

La figure ci-dessous présente la géométrie utilisée pour la génération des sections efficaces (*Garcia, 2019*).

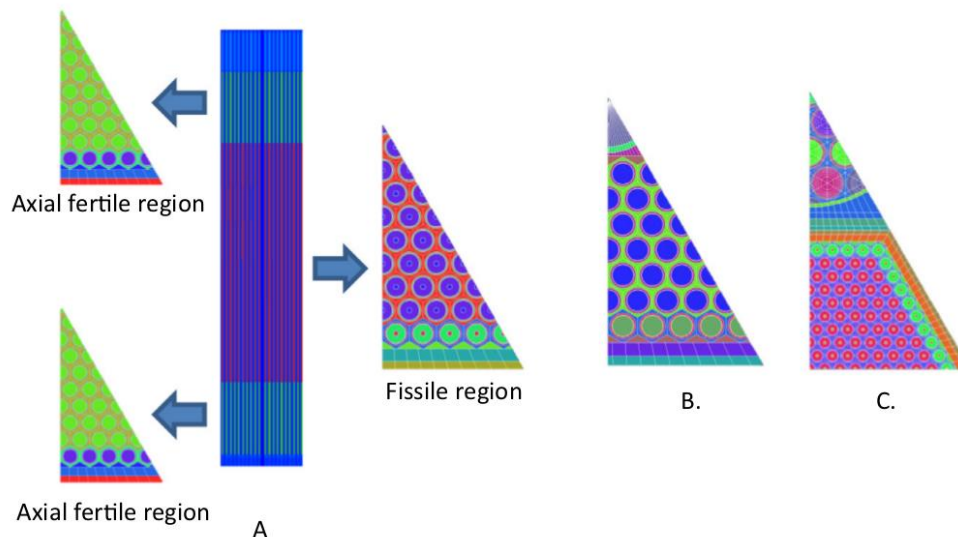


Figure 40 : Géométries pour la génération des sections efficaces (Garcia, 2019)

4.3.1.2 Etape cœur

Le calcul de cœur est réalisée avec le solveur MINARET (Moller, 2011). Grâce à la symétrie du cœur, le calcul a pu être réalisé en mettant à profit un « découpage » selon une géométrie « $2\pi/3$ », en introduisant des conditions de symétrie par rotation. Cela permet de réduire considérablement les temps de calcul.

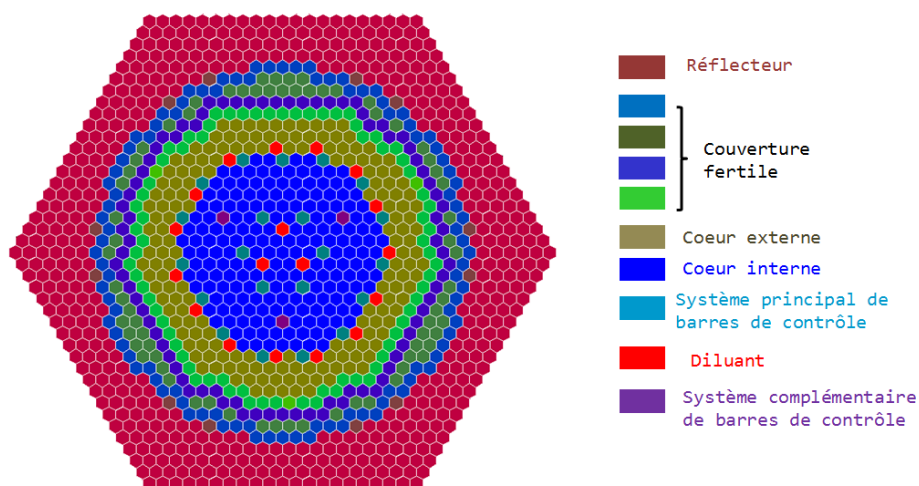
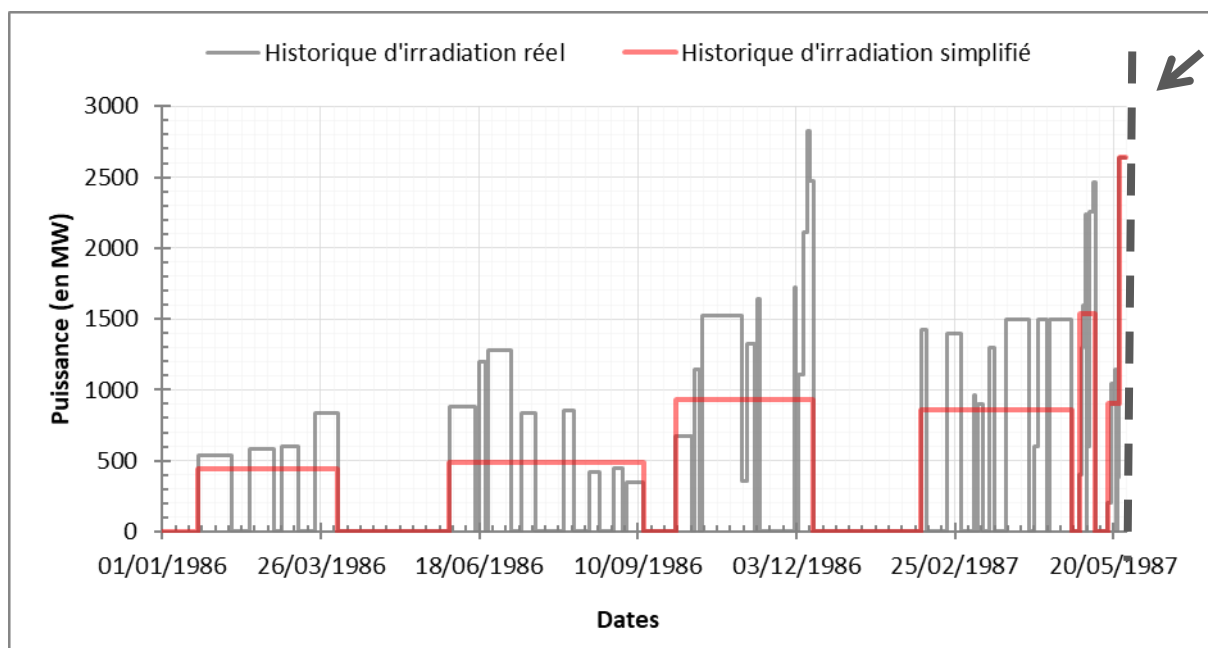


Figure 41 : Modélisation de Superphénix

4.3.2 Description de l'historique d'irradiation

Modéliser 77 pas de temps peut être très pénalisant en termes de temps de calcul, c'est pourquoi on utilise un modèle représentatif en 7 étapes (Graphique 56).

Il comprend les principaux pas de temps de refroidissement délimitées par les arrêts des réacteurs, et la puissance nominale réelle juste avant la mesure de la puissance résiduelle.



Graphique 56 : Historique d'irradiation de Superphénix, historique simplifié en 7 pas

(La flèche représente le début de l'expérience de mesure de la puissance résiduelle, à la fin de l'irradiation, après l'arrêt du 26 mai 1987)

En effet, le niveau de flux (donc la puissance) de ce dernier pas de temps est très important, car il détermine directement la quantité de produits de fissions à vie courte qui domineront la puissance résiduelle aux temps courts.

4.3.3 Propagation à la puissance résiduelle des incertitudes sur les données nucléaires

Les données nucléaires issues de JEFF-3.1.1 qui servent de données d'entrée à nos calculs sont entachées d'incertitudes, qui donnent lieu à une incertitude sur la puissance résiduelle calculée.

La propagation de ces incertitudes est réalisée avec MENDEL, en perturbant tous les paramètres p (les données nucléaires) impliqués dans le calcul de la puissance résiduelle : les sections efficaces σ , les constantes de décroissances λ , les énergies E , les rendements de fissions Y et

les rapports de branchements br . Ces perturbations sont ensuite propagées sur la puissance résiduelle (PR) via les coefficients de sensibilité adéquats.

La première étape est d'obtenir les sensibilités S de la puissance résiduelle à chaque paramètre p (Équation 33).

$$S = \frac{\Delta PR / PR}{\Delta p / p} \quad \text{Équation 33 : Sensibilité de la puissance résiduelle}$$

Les incertitudes ε sont ensuite calculées grâce aux matrices de covariances V (Equation Équation 34)), générées par le code MENDEL sur la base des données COMAC (Archier, 2014).

$$\varepsilon = S^T V S \quad \text{Équation 34 : Calcul des incertitudes via les matrices}$$

L'incertitude totale est finalement obtenue en combinant les incertitudes – supposées décorréliées - de chaque paramètre par le biais d'une somme quadratique (Equation Équation 35)).

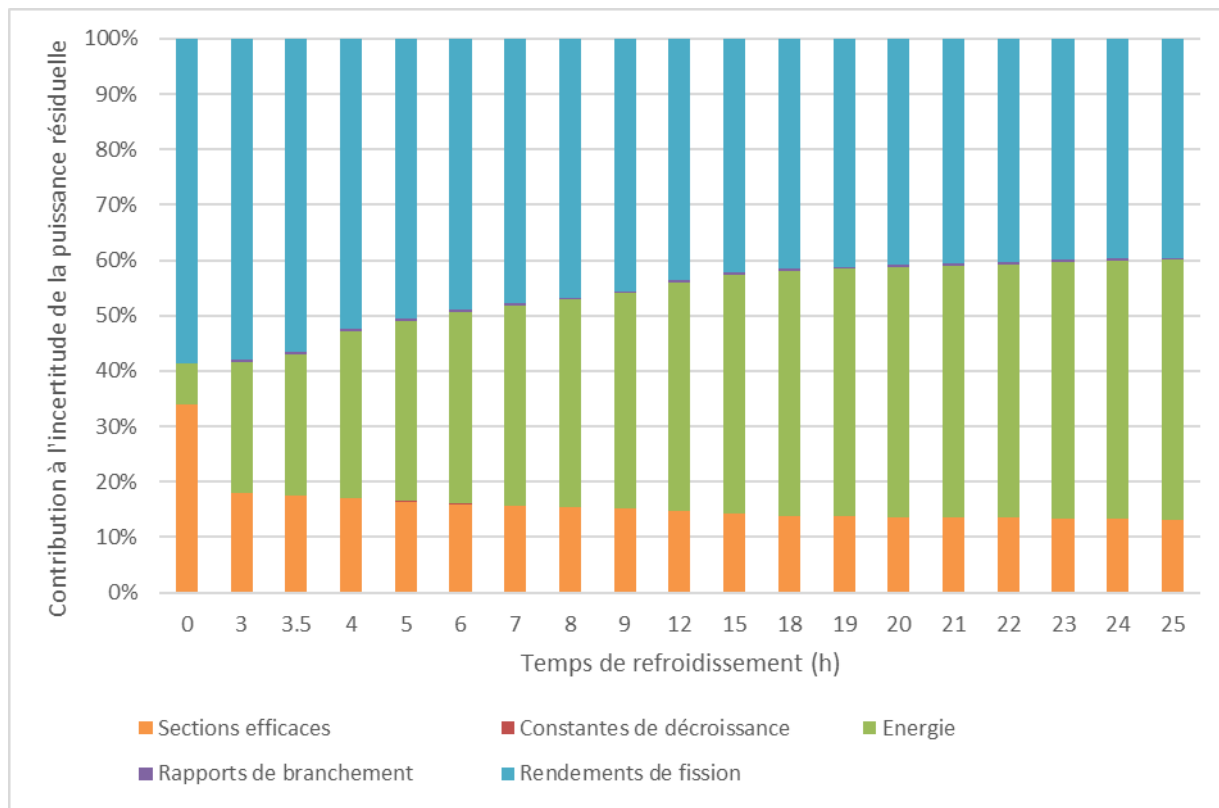
$$\varepsilon_{total} = \sqrt{\varepsilon_E^2 + \varepsilon_\lambda^2 + \varepsilon_\sigma^2 + \varepsilon_Y^2 + \varepsilon_{br}^2} \quad \text{Équation 35 : Incertitude totale de la puissance résiduelle}$$

Ces calculs d'incertitudes sont réalisés à partir du calcul des **sensibilités directes** (§2.2.2), et ne prennent pas en compte le **couplage Boltzmann-Bateman** (§2.2.4). En effet, les outils de calcul des sensibilités couplées Boltzmann-Bateman sont encore en cours de développement et ne sont pas disponibles pour une propagation sur le calcul de la puissance résiduelle.

Au moment de la chute des barres, les rendements de fissions et les sections efficaces représentent les principales contributions à l'incertitude sur la puissance résiduelle (Graphique 57).

Après 3 heures, les principaux contributeurs à l'incertitude sur la puissance résiduelle (sans prise en compte du couplage complet Boltzmann-Bateman, uniquement du premier terme (Sensibilité directe, Sensibilité de Boltzmann)) sont les rendements de fissions Y et les énergies E , à part quasiment égale. Les sections efficaces σ contribuent à l'incertitude sur la puissance résiduelle uniquement au second ordre.

Les contributions à l'incertitude de la puissance résiduelle des constantes de décroissances λ et rapports de branchement br sont quant à elles négligeables.



Graphique 57 : Contributions à l'incertitude en fonction du temps de refroidissement

4.3.4 Autres incertitudes de calcul

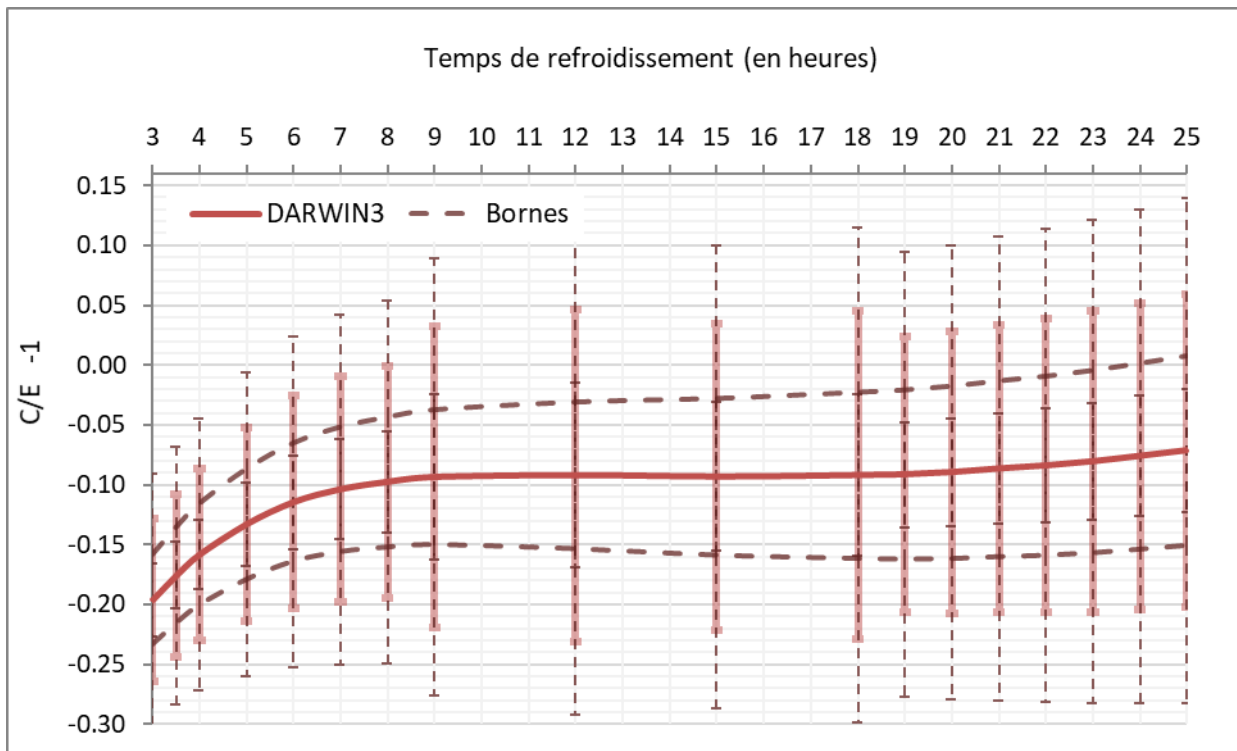
La puissance du réacteur lors de l'irradiation est une donnée d'entrée cruciale de notre calcul et il est important d'en maîtriser l'incertitude.

La sensibilité de la puissance résiduelle à la puissance nominale du dernier pas d'irradiation a été évaluée avec DARWIN3, pour une perturbation de +1% et -1%. A partir de ces deux perturbations, la sensibilité maximale a été choisie. La sensibilité obtenue est plus élevée pour des temps courts (jusqu'à 1,31% /%), puis elle diminue jusqu'à atteindre 1,07% /% à 25 heures.

De plus, l'incertitude sur la puissance du réacteur fournie par la centrale est estimée autour de **3%**, du fait d'un intervalle systématique entre les résultats de la puissance nominale estimée du cœur (fournie par bilan thermique) et les résultats fournis par la bilan eau-vapeur.

L'analyse de sensibilité à la puissance du réacteur et la connaissance de l'incertitude de la puissance nominale permettent de définir les **bornes** du C/E de la puissance résiduelle estimée avec DARWIN3 (Graphique 58).

Ces limites représentent le **biais possible** du calcul de la puissance résiduelle avec DARWIN3 en raison de l'incertitude sur la puissance du dernier pas d'irradiation.



Graphique 58 : C/E-1 entre la valeur calculée avec DARWIN3 et la valeur expérimentale (les incertitudes sont données à 1σ)

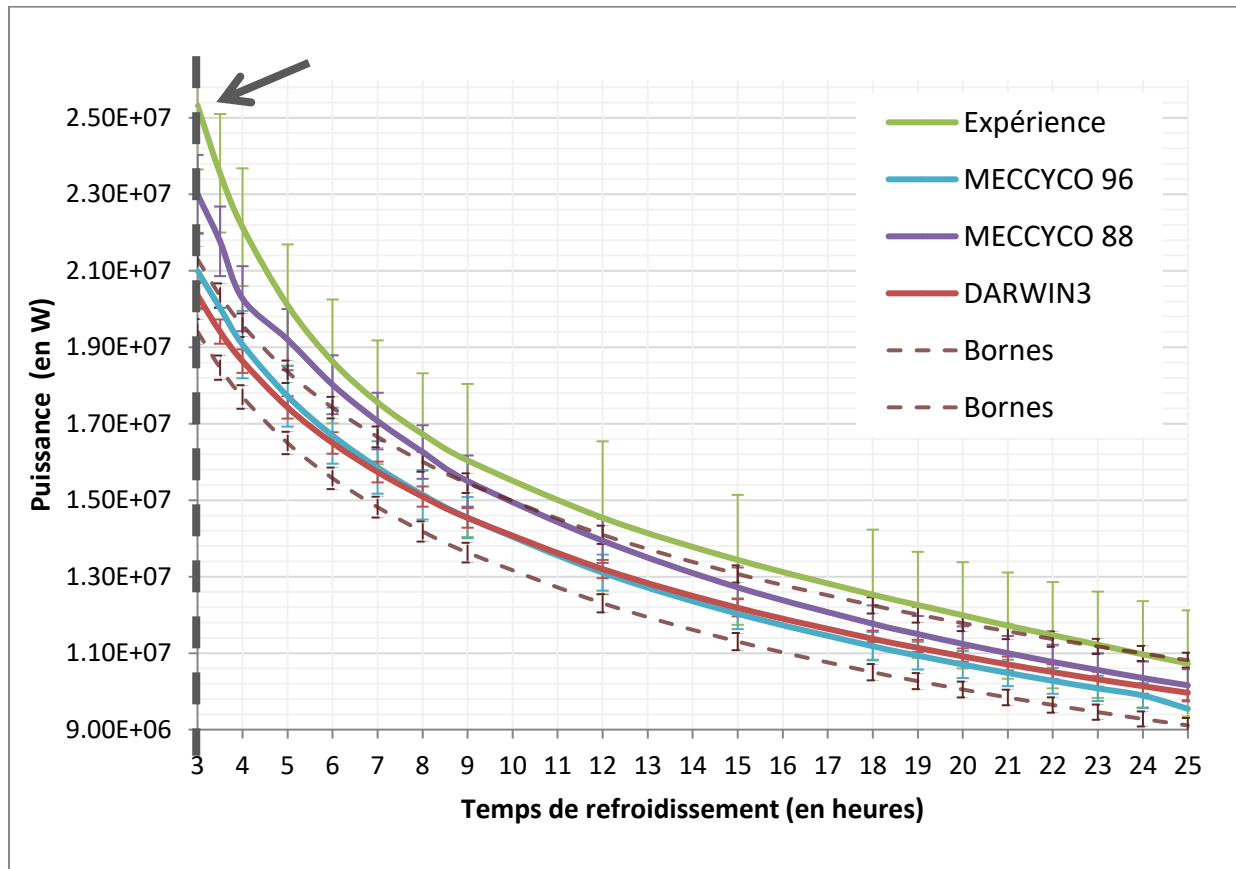
4.4 ANALYSE DES RESULTATS

Le graphique suivant (Graphique 59) présente les résultats du calcul de la puissance résiduelle avec DARWIN3, comparés à ceux obtenus avec MECCYCO en 1988 et 1996, et aux valeurs expérimentales.

Les incertitudes sont la somme quadratique entre l'incertitude expérimentale de la mesure de la puissance résiduelle et les incertitudes des données nucléaires calculées avec DARWIN3. On note que :

- Il y a une sous-estimation systématique de la puissance résiduelle calculée, mais à mesure que le temps de refroidissement augmente, la valeur calculée se rapproche de la valeur expérimentale.

- Compte tenu du biais de calcul évalué en 4.3.4, les valeurs sont compatibles avec 0 à 1σ à partir de 6 heures, et à 2σ dès 4 heures.
- Les résultats fournis par **DARWIN3** sont très cohérents avec ceux obtenus avec **MECCYCO** en 1996.
- La forme de la courbe de la puissance résiduelle est assez similaire dans tous les cas, mais avec **DARWIN3**, elle est légèrement plus proche des valeurs expérimentales à mesure que les temps de refroidissement augmentent.

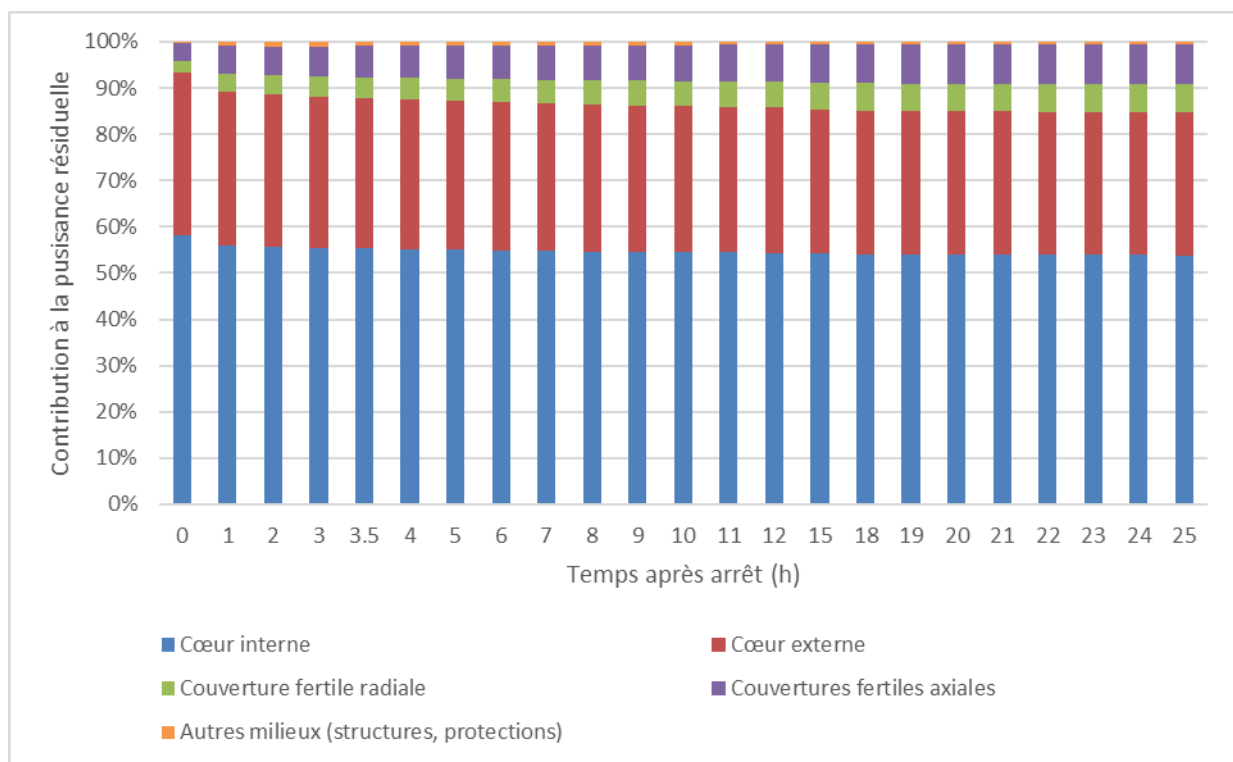


*Graphique 59 : Puissance résiduelle (les incertitudes sont données à 1σ)
(La flèche représente le début de l'expérience de mesure de la puissance résiduelle, 3 heures après l'arrêt du 26 mai 1987)*

- **DARWIN3** obtient de meilleurs résultats que l'interprétation réalisée avec **MECCYCO** en 1996 après 9 heures, et des résultats similaires à l'interprétation de 1988 après 18 heures.
- Néanmoins, **tous les codes sous-estiment la puissance résiduelle.**
- Les résultats de l'interprétation de 1988 avec **MECCYCO** semble être plus précis que les autres codes pour le calcul de la puissance résiduelle par rapport à l'expérience, mais les approximations de code et de données ont probablement induit une compensation de biais, conduisant à un résultat « faussement meilleur ».

- DARWIN3 présente des **incertitudes plus faibles et mieux maîtrisées**, grâce à l'amélioration des outils de perturbations et de propagations et à une meilleure connaissance des données nucléaires. Ainsi, les incertitudes de DARWIN3 ne résultent que de données nucléaires et des données technologiques. Cependant, ces dernières ne sont pas prises en compte dans les formulaires de calcul car nous ne disposons pas des données nécessaires pour les estimer et les propager au calcul de la puissance résiduelle.
- Les incertitudes expérimentales et calculées avec DARWIN3 sont compatibles à 1σ après 8 heures, et à 2σ entre 5 heures et 8 heures. Avant 4 heures, 3σ sont nécessaires. En effet, la puissance résiduelle aux temps très courts de refroidissement est extrêmement sensible à la puissance nominale juste avant l'arrêt du réacteur (Graphique 58).

Le Graphique 60 ci-dessous montre les milieux contributeurs à la puissance résiduelle avec DARWIN3.



Graphique 60 : Milieux contributeurs à la puissance résiduelle (avec DARWIN3)

On remarque que :

- Les contributions à la puissance résiduelle du cœur interne et externe sont dominantes (plus de 90% au moment de la chute des barres à 82% après 25 heures).

- Les couvertures fertiles radiale et axiale représentent quant à elles, entre moins de 5% et 15% de la puissance résiduelle. Au temps courts, la part des fertiles est faible (<5%) et augmente progressivement avec le temps (jusqu'à 15%).

DARWIN3 permet de calculer l'ensemble des isotopes (noyaux lourds et produits de fission) qui contribuent à la puissance résiduelle. Au moment de la chute des barres, il y a énormément de produits de fission impliqués : ils sont impossibles à tous représenter graphiquement.

Cependant, dès 3 heures et jusqu'à 25 heures de refroidissement, certains isotopes ont un impact conséquent sur la puissance résiduelle. Pendant cette période de refroidissement, on retrouve notamment le ^{239}Np qui représente à lui seul plus de 20 jusqu'à presque 40% de la puissance résiduelle. Les isotopes de l'iode sont également conséquents, ils représentent environ 15% de la puissance résiduelle (notamment 7 à 10% pour ^{132}I , 3 à 4% pour ^{133}I). On retrouve ensuite le ^{140}La , qui contribue à la puissance résiduelle de 4 à 8%. Plusieurs autres isotopes contribuent à hauteur de quelques pourcents à la puissance résiduelle (^{242}Cm , ^{135}Xe , ^{99}Mo ...) (*Annexe G*).

4.5 CONCLUSIONS DU CHAPITRE 4 – PERFORMANCES DE DARWIN3 POUR LE CALCUL DE LA PUISSANCE RESIDUELLE

Conclusions

La seconde étape de la validation du formulaire DARWIN3 pour le calcul de la puissance résiduelle consiste en la réinterprétation d'une expérience de mesure de la puissance résiduelle.

Nous nous sommes intéressés à l'expérience de mesure ayant eu lieu dans SUPERPHENIX en 1987. En effet, cette dernière, déjà interprétée deux fois, en 1988 et en 1998, n'a pas été réinterprétée depuis avec des outils plus récents. De plus, le cœur de Superphénix est quasi-neuf en 1987 (cœur « CMP » - Cœur de Montée en Puissance), permettant de simplifier considérablement la modélisation de l'expérience.

Avec DARWIN3, on retrouve une **sous-estimation** quasi systématique de la puissance résiduelle calculée, comme avec les précédentes interprétations réalisées avec MECCYCO. Cependant, avec le temps de refroidissement, DARWIN3 offre de meilleurs résultats. Les valeurs obtenues sont cohérentes avec l'interprétation la plus récente avec MECCYCO en 1996.

Dans des études similaires réalisés sur le réacteur PHENIX avec de formulaire DARWIN2 (et CYRUS pour la propagation des incertitudes des données nucléaires), **la puissance résiduelle était au contraire surestimée**. Les études des bilans matières montrent que DARWIN2 et DARWIN3 obtiennent des résultats semblables dans le cœur interne, et malgré des disparités aiguille par aiguille, en moyenne, les bilans matières obtenus sont équivalents dans la couverture fertile.

PHENIX et SUPERPHENIX étant des réacteurs très similaires en termes de caractéristiques neutroniques, les contributeurs à la puissance résiduelle sont sensiblement les mêmes.

Ainsi, il semble incohérent que la puissance résiduelle soit sous-estimée pour l'expérience de mesure de la puissance résiduelle analysée ici (SUPERPHENIX 1987), et surestimée dans des études semblables dans PHENIX. Il paraît donc peu probable qu'il y ait un biais de calcul.

Dans l'expérience de mesure de la puissance résiduelle SUPERPHENIX 1987, un certain nombre de valeurs mesurées par les thermocouples ont été écartées, du fait de l'ouverture des systèmes d'évacuation de la chaleur entre 9 et 18h. En effet, les valeurs mesurées semblent en effet « décalées » pendant cette période. Mais la prise en compte de ces valeurs pour tracer la courbe expérimentale de la puissance résiduelle en ferait probablement baisser son niveau, et pourrait ainsi diminuer voire supprimer la sous-estimation apparente des formulaires de calculs. **Ainsi, la présence d'un biais induisant une surestimation de la puissance résiduelle expérimentale ou une sous-estimation de l'incertitude expérimentale ne sont pas à exclure.**

L'analyse des contributeurs à l'incertitude sur la puissance résiduelle montre qu'au moment de la chute des barres, les rendements de fissions et les sections efficaces sont majoritaires. Cependant, dès 3 heures, les sections efficaces ne contribuent plus à l'incertitude de la puissance résiduelle qu'au deuxième ordre : les rendements de fissions Y et les énergies E , à part quasiment égale, sont majoritaires. Les contributions à l'incertitude de la puissance résiduelle des constantes de décroissances λ et rapports de branchement br sont quant à elles négligeables.

La puissance résiduelle est sensible à la puissance nominale avant arrêt, essentiellement aux temps courts : jusqu'à 1,31% /% puis elle atteint 1,07% /% à 25 heures.

Cependant, les **incertitudes liées à la puissance nominale avant arrêt et celles liées aux données nucléaires ne suffisent pas à expliquer** les écarts entre la puissance résiduelle expérimentale et les puissances résiduelles calculées avec les différents formulaires de calcul.

Ainsi, plusieurs pistes peuvent expliquer les disparités observées entre les valeurs expérimentales et calculées de la puissance résiduelle. La présence de biais expérimentaux ou une sous-estimation de l'incertitude expérimentale ne sont pas à exclure. Les incertitudes liées à la puissance nominale avant arrêt et celles liées aux données nucléaires ne suffisent en effet pas à expliquer les écarts calculs – mesure.

Il semblerait ainsi justifié d'avoir accès à des mesures croisées de la puissance résiduelle et des bilans matières pour la validation des formulaires actuels.

Problématiques soulevées et réponses apportées

Nous avons vu en introduction un certain nombre de problématiques liées au calcul de la puissance résiduelle. L'étude de l'expérience de la mesure de la puissance résiduelle ayant eu lieu dans SUPERPHÉNIX en 1987 permet de répondre à une autre partie de ces questions.

Problématiques spatiales

Contrairement aux expériences de bilans matières, les expériences de mesures de la puissance résiduelle ne permettent pas de s'affranchir des incertitudes liées au niveau de flux. En effet, nous n'avons pas de mesure corrélée d'un indicateur de fluence.

Problématiques temporelles

Avec DARWIN3, l'historique d'irradiation peut être pris en compte grâce au diagramme de marche. L'évolution tient donc compte des temps et des puissances réelles. Néanmoins, du fait des temps de calculs, le diagramme de marche est simplifié en respectant les puissances réelles avant la chute des barres, pour reproduire correctement les produits de fission à vie courte, et ainsi la puissance résiduelle aux temps courts.

L'expérience de SUPERPHÉNIX en 1987 a été choisie pour s'affranchir de la prise en compte des « histoires » des assemblages et des modifications des plans de chargements.

Aux temps longs, l'ensemble des OCS semblent en mesure de prédire la puissance résiduelle, et c'est également le cas avec DARWIN3. En effet, les écarts calcul / mesure sont compatibles avec 1 aux incertitudes près. Cependant, aux temps courts (inférieurs à un jour), l'ensemble des codes semblent avoir des difficultés à prédire la puissance résiduelle.

A cette échelle de temps, la puissance résiduelle dépend d'un très grand nombre de produits de fission qu'il semble complexe de mesurer et d'analyser.

Problématiques méthodologiques

Les OCS actuels ne permettent pas de prendre en compte de façon aisée l'ensemble des termes des sensibilités couplées Boltzmann-Bateman, cependant, le premier terme de ces sensibilités est calculé grâce à MENDEL et est intégré aux calculs d'incertitudes.

Cependant, la prise en compte de l'ensemble des termes permettrait de mettre en évidence des liens entre des isotopes en apparence éloignés entre eux (i.e. qui sont reliés entre eux par un

nombre relativement important de réactions), et notamment avec les noyaux qui sont essentiels au fonctionnement d'un réacteur (pour piloter sa puissance et sa réactivité).

5. CHAPITRE 5 : CONCLUSIONS GENERALES ET PERSPECTIVES

La puissance résiduelle est la puissance émise par un réacteur après son arrêt. Cette puissance est produite par la radioactivité du combustible irradié et de l'activation des matériaux de structure. La connaissance de cette dernière est importante à diverses étapes du cycle du combustible, et représente un intérêt majeur pour la sûreté et le coût des réacteurs nucléaires.

Le formulaire DARWIN3 a vocation à devenir le nouveau code déterministe multifilière de calcul des bilans matière et de la puissance résiduelle. Composé du formulaire neutronique APOLLO3® et du module d'évolution MENDEL, et associé aux données nucléaires JEFF-3.1.1 ou JEFF-3.2, il nécessite d'être validé par des comparaisons à des mesures expérimentales, à son prédécesseur (DARWIN2), et à un code de calcul de référence Monte Carlo (TRIPOLI-4®).

- ➔ Le but de la thèse est de participer à la **validation** de ce formulaire et de son incertitude pour le calcul de la puissance résiduelle dans les réacteurs à neutrons rapides.

5.1 CONCLUSIONS CONCERNANT LA VALIDATION DU CALCUL DES BILANS-MATIERE

La première étape de la validation du formulaire DARWIN3 pour le calcul de la puissance résiduelle consiste en la **validation du calcul des bilans-matière**, car la puissance résiduelle dépend des concentrations isotopiques en fin d'irradiation.

5.1.1 Validation des schémas de calculs : comparaison de DARWIN3 à TRIPOLI-4®

La comparaison de DARWIN3 au formulaire stochastique TRIPOLI-4® permet de conclure quant aux **schémas de calculs** utilisés dans DARWIN3. En effet, dans TRIPOLI-4®, il n'y a pas d'approximation de modèle.

DARWIN3 présente des capacités de modélisation importantes pour une meilleure estimation du calcul des bilans matières dans le cœur interne de PHENIX, réacteur à neutrons rapides (RNR) refroidi au sodium.

Il est performant pour estimer la production de la majorité des noyaux lourds, contributeurs à la puissance résiduelle aux temps longs. Ces isotopes sont notamment importants pour le fonctionnement d'un réacteur (pour piloter sa puissance et la réactivité) comme l'uranium 238 et le plutonium 239. Ces résultats sont cohérents car la concentration finale des isotopes du plutonium et de l'uranium dépendent majoritairement de leur concentration initiale, qui est identique dans les différents outils de calcul.

Le spectre neutronique obtenu avec DARWIN3 est plus doux que ceux de TRIPOLI-4® et de DARWIN2. Cela explique les écarts observés sur la production de certains isotopes, notamment le neptunium 237 et les isotopes de l'américium et du curium. La concentration finale de ces isotopes dépend majoritairement de réactions de capture sur différents isotopes. Ainsi, les variations de spectre neutronique, qui impactent les taux de réactions, vont fortement impacter les productions de ces isotopes.

Dans la couverture fertile radiale, DARWIN3 modélise le **flux neutronique** de façon semblable à TRIPOLI-4®, à un facteur de recalage près. Cependant, les deux formulaires de calcul, déterministes et stochastiques, semblent avoir des difficultés à reproduire les taux de fissions au sein de la couverture fertile radiale, où le niveau et le spectre du flux de neutron varient beaucoup sur une distance faible. DARWIN3 permet de produire des résultats identiques à TRIPOLI-4® pour la majorité des isotopes analysés (uraniums, plutoniums 238, 239 et 240). Les disparités sont observées pour les plutoniums 241 et 242 s'expliquent notamment parce que le spectre neutronique est plus élevé avec TRIPOLI-4® là où les sections de capture sont particulièrement importantes, induisant des taux de réactions plus grands avec TRIPOLI-4®.

5.1.2 Amélioration des formulaires déterministes d'évolution : comparaison de DARWIN3 à DARWIN2

La comparaison de DARWIN3 à son prédécesseur DARWIN2 permet de conclure quant à l'amélioration des formulaires déterministes d'évolution.

Dans le cœur interne, DARWIN3 est aussi performant que DARWIN2 pour estimer la production de la majorité des actinides majeurs. Ces isotopes sont notamment importants pour le fonctionnement d'un réacteur. Ces résultats sont cohérents car la concentration finale des isotopes du plutonium et de l'uranium dépendent majoritairement de leur concentration initiale, qui est identique dans les différents outils de calcul.

Dans la couverture fertile, DARWIN3 et DARWIN2 sont en moyenne de performance équivalente pour calculer le niveau du flux neutronique. Cependant, ils présentent une forte dispersion aiguille par aiguille, donnant des courbes aux allures très différentes. En effet, dans DARWIN3, le spectre neutronique s'adoucit davantage que dans DARWIN2. Cependant, la production de la majorité des isotopes analysés a des résultats semblables avec DARWIN2 et DARWIN3.

5.1.3 Validité des hypothèses utilisées

Nous sommes limités par certaines hypothèses simplificatrices, même avec le formulaire stochastique TRIPOLI-4®. En effet, même si TRIPOLI-4® ne présente pas d'approximation de modèles, certaines hypothèses sont nécessaires afin de conserver des temps de calculs raisonnables. Certaines hypothèses ont été testées directement avec TRIPOLI-4®, mais pour d'autres, cela n'était pas possible : ainsi, la souplesse permise par DARWIN3 nous a permis de tester la validité de ces hypothèses.

Evolution des concentrations des aiguilles

Grâce à l'expérience TRAPU, nous avons montré avec le formulaire DARWIN3 que l'hypothèse simplificatrice de ne faire évoluer que les concentrations des aiguilles d'intérêt est valable : elle n'impacte pas les résultats obtenus. Cette hypothèse a notamment été utilisée pour la réalisation de calculs stochastiques en évolution (avec TRIPOLI-4®) du fait de temps de calculs rédhibitoires.

Plan de chargement constant

Nous avons montré, avec TRIPOLI-4®, que l'hypothèse de conserver un plan de chargement constant au cours de l'irradiation est valable. En effet, il n'y a pas d'impact sur l'allure des rapports isotopiques du $^{148}\text{Nd} / ^{238}\text{U}$ et sur leurs C/E. Une simple translation est visible, témoin d'une modification du niveau de flux, que l'on pourrait adapter en faisant simplement un **recalage en fluence**.

Impact de la chaîne d'évolution

La **chaîne d'évolution** n'a que peu d'impact pour le calcul de la production des isotopes de l'uranium, en revanche, dans le cœur interne, du fait de la modification du rapport de branchement de l'américium 241, elle a des impacts non négligeables sur les actinides mineurs et le plutonium 238. L'utilisation d'une chaîne d'évolution spécifique au spectre neutronique des réacteurs à neutrons rapides est ainsi nécessaire pour l'interprétation de la formation de ces

isotopes en spectre rapide. Dans la couverture fertile, l'impact n'a pas été quantifié parce que les productions des américiums et leurs fils ne sont pas mesurés.

Impact de la bibliothèque de données nucléaires

La **bibliothèque de données nucléaires JEFF-3.2** améliore la prédiction des rapports isotopiques des curiums 243 et 245 grâce aux nouvelles évaluations. Elle impacte d'une manière générale l'ensemble des productions des américiums et des curiums de façon plus ou moins marquée. Son utilisation est nécessaire pour l'interprétation du calcul de la production de ces isotopes.

Pour les plutoniums, si son impact n'est pas trop marqué dans le cœur interne, en revanche, on remarque une différence dans la couverture fertile. Elle impacte notamment la section de capture du plutonium 240 ainsi que le spectre neutronique, rendant ainsi son impact quantifiable sur le calcul de la production des plutoniums 241 et 242.

Impact de la température

Dans le cœur interne, **la température** impacte les estimations des productions des curiums 244 et 245. Une température représentative de la température « réelle » de fonctionnement est nécessaire pour la bonne estimation des productions de ces isotopes. Dans la couverture fertile, la température a un impact sur le calcul de la production de l'ensemble des isotopes du plutonium : elle impacte notamment légèrement le niveau de flux, mais surtout les sections efficaces de capture des plutoniums 240 et 241.

5.2 CONCLUSIONS CONCERNANT LE CALCUL DE LA PUISSANCE RESIDUELLE

La seconde étape de la validation du formulaire DARWIN3 pour le calcul de la puissance résiduelle consiste en la réinterprétation d'une expérience de mesure de la puissance résiduelle aux « temps courts », où la puissance résiduelle est dominée par une multitude de produits de fission.

Nous nous sommes intéressés à l'expérience de mesure ayant eu lieu dans SUPERPHENIX en 1987. En effet, cette dernière, déjà interprétée deux fois, en 1988 et en 1998, n'a pas été réinterprétée depuis avec des outils plus récents. De plus, le cœur de Superphénix est quasi-neuf en 1987 (cœur « CMP » - Cœur de Montée en Puissance), permettant de simplifier considérablement la modélisation de l'expérience.

Avec DARWIN3, on retrouve une **sous-estimation** quasi systématique de la puissance résiduelle calculée, comme avec les précédentes interprétations réalisées avec le code MECCYCO. Cependant, avec le temps de refroidissement, DARWIN3 offre de meilleurs résultats. Les valeurs obtenues sont cohérentes avec l'interprétation la plus récente, avec MECCYCO en 1996.

Dans des études similaires réalisés sur le réacteur PHENIX avec le formulaire DARWIN2 (et le code CYRUS pour la propagation des incertitudes des données nucléaires), **la puissance résiduelle était au contraire surestimée**. PHENIX et SUPERPHENIX étant des réacteurs très similaires en termes de caractéristiques neutroniques, les contributeurs à la puissance résiduelle sont sensiblement les mêmes. Cependant, les études des bilans matières avec DARWIN2 et DARWIN3 ne permettent pas d'expliquer cette différence obtenue sur la puissance résiduelle. Il semble donc incohérent que la puissance résiduelle soit sous-estimée pour l'expérience de mesure de la puissance résiduelle analysée ici (SUPERPHENIX 1987), et surestimée dans des études semblables dans PHENIX. Il paraît donc peu probable qu'il y ait un biais de calcul.

Dans l'expérience de mesure de la puissance résiduelle SUPERPHENIX 1987, un certain nombre de valeurs mesurées par les thermocouples ont été écartées, du fait de l'ouverture des systèmes d'évacuation de la chaleur entre 9 et 18h. En effet, les valeurs mesurées semblent « décalées » pendant cette période. Mais la prise en compte de ces valeurs pour tracer la courbe expérimentale de la puissance résiduelle en ferait probablement baisser son niveau, et pourrait ainsi diminuer voire supprimer la sous-estimation apparente des formulaires de calculs. **Ainsi, la présence d'un biais induisant une surestimation de la puissance résiduelle expérimentale ou une sous-estimation de l'incertitude expérimentale ne sont pas à exclure.**

L'analyse des contributeurs à l'incertitude de la puissance résiduelle montre qu'au moment de la chute des barres, les rendements de fissions et les sections efficaces sont majoritaires. Cependant, dès 3 heures, les sections efficaces ne contribuent plus à l'incertitude de la puissance résiduelle qu'au deuxième ordre : les rendements de fissions Y et les énergies E , à part quasiment égale, sont majoritaires. Les contributions à l'incertitude de la puissance résiduelle des constantes de décroissances λ et rapports de branchement br sont quant à elles négligeables.

La puissance résiduelle est sensible à la puissance nominale avant arrêt, essentiellement aux temps courts : jusqu'à 1,31% /% puis elle atteint 1,07% /% à 25 heures.

Cependant, les **incertitudes liées à la puissance nominale avant arrêt et celles liées aux données nucléaires ne suffisent pas à expliquer** les écarts entre la puissance résiduelle expérimentale et les puissances résiduelles calculées avec les différents formulaires de calcul.

Plusieurs pistes peuvent expliquer les disparités observées entre les valeurs expérimentales et calculées de la puissance résiduelle.

La présence de biais expérimentaux ou d'une sous-estimation de l'incertitude expérimentale ne sont pas à exclure.

Les incertitudes liées à la puissance nominale avant arrêt et celles liées aux données nucléaires ne suffisent en effet pas à expliquer les écarts calculs – mesure.

5.3 PERSPECTIVES

Dans l'objectif de contribuer à la validation du formulaire déterministe DARWIN3 pour le calcul de la puissance résiduelle, nous avons montré qu'il donnait des résultats équivalents – ou dont les disparités s'expliquent – à TRIPOLI-4® et DARWIN2 pour le calcul des bilans matières dans le cœur interne et la couverture fertile du réacteur à neutrons rapides PHENIX, grâce aux expériences TRAPU et DOUBLON.

Nous avons également confronté les résultats fournis par DARWIN3 à l'expérience de mesure de la puissance résiduelle SUPERPHENIX 1987 et aux précédentes interprétations réalisées avec le code MECCYCO. Une tendance à la sous-estimation, comme lors des précédentes interprétations, est constatée. Cependant, plusieurs pistes peuvent expliquer les disparités observées entre les valeurs expérimentales et calculées de la puissance résiduelle et ne peuvent pas être discriminées. En effet, la présence de biais expérimentaux ou d'une sous-estimation de l'incertitude expérimentale ne sont pas à exclure. Les incertitudes liées à la puissance nominale avant arrêt et celles liées aux données nucléaires ne suffisent en effet pas à expliquer les écarts calculs – mesure.

De plus, les expériences de bilans-matière étudiées ne tiennent compte que des noyaux lourds, or la puissance résiduelle aux temps courts quant à elle dépend essentiellement des produits de fission. Les noyaux lourds quant à eux sont majoritaires aux temps longs (quelques années).

Dans l'objectif de continuer à contribuer à la validation des formulaires de calcul de la puissance résiduelle, il semble nécessaire d'avoir accès à des **mesures croisées** de la puissance résiduelle et des bilans matières.

De telles expériences pourraient par exemple être :

- Des mesures de la puissance résiduelle du réacteur avec sortie du réacteur d'assemblages représentatifs des zones du cœur après la mesure (cœur interne, cœur externe, couverture fertile) et analyse de ces assemblages.
- Des mesures de la puissance résiduelle d'assemblages uniques et analyse de ceux-ci.
- Des mesures des bilans-matière avec mesure des **produits de fissions**.

De telles mesures croisées permettraient de **contraindre le système** lors des analyses. La puissance résiduelle pourrait ainsi être analysée en parallèle des bilans-matière : nous pourrions effectuer si nécessaire un recalage en ayant accès à des indicateurs de fluence, et éventuellement mettre en évidence les éventuelles faiblesses des codes de calculs sur certaines zones du cœur.

Certaines expériences de ce type ont été réalisées – notamment l'expérience de mesure de la puissance résiduelle des éléments combustibles de Rapsodie (Devillers, 1973) – et les

réinterpréter serait en pratique possible. Cela nécessiterait d'avoir accès aux historiques d'irradiations et plans de chargements de Rapsodie.

REFERENCES

<i>Algora, 2010</i>	ALGORA, A., JORDAN, D., TAIN, J.L., RUBIO, B., AGRAMUNT, J., PEREZ-CERDAN, A.B., MOLINA, F., CABALLERO, L., NACHER, E., KRASZNAHORKAY, A., ET AL., “ <i>Reactor decay heat in ^{239}Pu: solving the γ discrepancy in the 4–3000-s cooling period</i> ”, Phys. Rev. Lett. 105, 202501 (2010)
<i>Archier, 2014</i>	P.ARCHIER, C.DE SAINT JEAN, G.NOGUÈRE, O.LITAIZE, P.LECONTE, C.BOURET, “ COMAC : Nuclear Data Covariances Matrices Library for Reactor Application”, PHYSOR 2014 , Kyoto, Japan, 2014
<i>Askew, 1972</i>	J. R. ASKEW, “ <i>A characteristics formulation of the neutron transport equation in complicated geometries</i> ”, Winfirth, United Kingdom, 1972
<i>ASN, définition</i>	https://www.asn.fr/Lexique/P/puissance-residuelle2
<i>ASN, référence 2</i>	https://www.asn.fr/Media/Files/00-Publications/Risque-de-perte-de-la-source-froide-de-29-reacteurs-nucleaires-note-technique
<i>Baudron, 2007</i>	A.-M. BAUDRON and J.-J. LAUTARD, “ <i>MINOS: a Simplified Pn Solver for Core Calculations</i> ”, Nuclear Science and Engineering, vol. 155, pp. 250-263, 2007
<i>Benoit, 2012</i>	J.-C. BENOIT, « <i>Développement d’un code de propagation des incertitudes des données nucléaires sur la puissance résiduelle dans les réacteurs à neutrons rapides</i> », Thèse de Doctorat, Université Paris-Sud, 2012
<i>Benoit, 2012 (2)</i>	J.-C. BENOIT, P. BOURDOT, R. ESCHBACH, L. BOUCHER, V. PASCAL, B. FONTAINE, L. MARTIN, O. SEROT, <i>Decay heat of sodium fast reactor : comparison of experimental measurements on the PHENIX reactor with calculations performed with the French DARWIN package</i> , PHYSOR 2012 – Advances in Reactor Physics – Linking Research, Industry and Education, Knoxville, Tennessee, USA, April 15-20, 2012, on CD-ROM, American Nuclear Society, LaGrange Park, IL (2010)
<i>Bernard, 2012</i>	D. BERNARD and O. BOULAND, “ <i>Americium-241 phase I: Reevaluation for JEFF-3.1.1 and a step forward</i> ”, Journal of Nuclear Science and Technology 49(1):132-166 (2012)

<i>Blanchard, 2018</i>	J.-B. BLANCHARD, G. DAMBLIN, J.-M. MARTINEZ, G. ARNAUD, F. GAUDIER, “ <i>The URANIE platform: an open-source software for optimization, meta-modelling and uncertainty analysis</i> ” (2008)
<i>Brun, 2015</i>	E. BRUN ET AL., “ <i>TRIPOLI4®, CEA, EDF and AREVA reference Monte-Carlo code</i> ”, Annals of Nuclear Energy, 82, 151-160, 2015
<i>Buiron, 2017</i>	L.BUIRON, D. PLISSON-RIEUNIER, “ <i>Nuclear Data Propagation with Burnup: Impact on SFR reactivity coefficient</i> ”, Proceedings of ICAPP 2017, April 24-28, 2017, Fukui and Kyoto (Japan)
<i>Calame, 2017</i>	A. CALAME, Mémoire de stage (2017)
<i>Chartier, 2014</i>	F. CHARTIER, H. ISNARD, A. NONELL, « <i>Analyses isotopiques par spectrométrie de masse – Méthodes et applications</i> », <u>Techniques de l'ingénieur</u> , p3740 (2014)
<i>Czernecki, 1998</i>	S.CZERNECKI, “ <i>Avancées dans le calcul neutronique des réacteurs à neutrons rapides – Démonstration sur le réacteur Super-Phénix</i> ”, PhD thesis (1998)
<i>Devillers, 1973</i>	C. DEVILLERS, G. LHIAUBET, M. LOTT, N’GUYEN VAN DAT et F. DUFRECHE, « <i>Mesure de la puissance résiduelle des éléments combustibles de Rapsodie – Fortissimo par calorimétrie</i> », Bulletin d’informations scientifiques et techniques, no. 181, Mai 1973
<i>Faure, 2019</i>	B. FAURE, « <i>Development of Neutronic Calculation Scheme for Heterogeneous Sodium-cooled Nuclear Cores in APOLLO3® code – Application to the ADSTRID Prototype</i> », Thèse de doctorat, Aix-Marseille Université, 2019
<i>Fermi, 1952</i>	Enrico FERMI , “ <i>Experimental Production of a Divergent Chain Reaction</i> ”, American Journal of Physics 20, 536 (1952)
<i>Garcia, 2019</i>	E. GARCIA, P. SCIORA, T. KOOYMAN, G. RIMPAULT, H. GUO, B. FAURE, <i>Flux distribution of the Superphénix start-up core for the validation of neutronic codes</i> , Annals of Nuclear Energy 133 (2019) 889-899
<i>Garcia-Cervantes, 2019</i>	E.-Y. GARCIA-CERVANTES, « <i>Analyse des essais Superphénix avec le formulaire APOLLO-3®-RNR en vue de l’évaluation neutronique d’ASTRID : estimation des biais et incertitudes associées aux différentes caractéristiques du cœur</i> », Thèse de doctorat, Aix-Marseille Université, 2019

<i>Gastaldo, 2004</i>	L. GASTALDO, C. DE SAINT JEAN ET J. RUGGIERI, « <i>Notice théorique du code de calcul PASTIS</i> », Rapport Interne CEA, 2004
<i>Gillet, 1990</i>	G. GILLET, M. FAVET, M. PAULIN, <i>Measurement of decay heat and comparison with predictions</i> , Nuclear Sciences and Engineering: 106, 94-97 (1990)
<i>Golfier, 2009</i>	H. GOLFIER, R. LENAIN, C. CALVIN, J.-J. LAUTARD, A.-M. BAUDRON, P. FOUGERAS, P. MAGAT, E. MARTINOLLI and Y. DUTHEILLET, “ <i>APOLLO3: a common project of CEA, AREVA and EDF for the development of a new deterministic multi-purpose code for core physics analysis</i> ”, in International Conference on Mathematics, Computational Methods & Reactor Physics (M&C 2009), New York, 2009.
<i>Gourdon, 1990</i>	J. GOURDON, B. MESNAGE, J.L. VOITELLIER, M. SUESCUN, <i>An Overview of Superphénix commissioning Tests</i> , Nuclear Science and Engineering: 106, 1-10 (1990)
<i>Grouiller, 1990</i>	J-P. GROUILLER et al., “ <i>Fast Breeder Reactor Fuel Cycle – Code System MECCYCO</i> ”, Int. Conf. Physics of Reactor Operations Design and Computation (PHYSOR 1990), Marseille, France, April 2-26, 1990.
<i>Hahn, 1939</i>	O. HAHN AND F. STRASSMANN, « <i>Über den Nachweis und das Verhalten der bei der Bestrahlung des Urans mittels Neutronen entstehenden Erdalkalimetalle</i> » (<i>Sur la détection et les caractéristiques des métaux alcalino-terreux formés par irradiation de l'uranium avec des neutrons</i>), Naturwissenschaften Volume 27, Numéro 1, 11-15 (1939).
<i>Hardy, 1977</i>	HARDY, J.C., CARREZ, L.C., JONSON, B., HANSEN, P.G., “ <i>The essential decay of pandemonium: a demonstration of errors in complex beta-decay schemes</i> ”, Phys. Lett. 71B, 307 (1977)
<i>Henry, 1958</i>	A.F. HENRY, “ <i>The application of reactor kinetics to the analysis of experiments</i> ”, Nuclear Science and Engineering, 3(1) :52–70, 1958.
<i>Henry, 1958 (2)</i>	A.F. HENRY AND N.J. CURLEE, “ <i>Verification of a method for treating neutron space-time problems</i> ”, Nuclear Science and Engineering, 4(6): 727–744, 1958
<i>Huy, 2018</i>	V. HUY, “ <i>Contribution to nuclear data improvement by assimilation of integral experiments for the ASTRID core neutronic characterization</i> ”, Thèse, Aix-Marseille Université, 2018
<i>Image, 1</i>	https://user.oc-static.com/files/275001_276000/275647.jpg
<i>Image, 2</i>	https://images.schoolmouv.fr/1s-pc-c10-img02.png

<i>Image, 3</i>	http://slideplayer.fr/slide/454390/1/images/11/PHENIX+(+le+bloc-r%C3%A9acteur).jpg
<i>Janis OECD</i>	https://www.oecd-nea.org/janisweb/
<i>JEFF Report 21, 2006</i>	<i>The JEFF-3.1 Nuclear Data Library</i> , JEFF Report 21, Nuclear Energy Agency Data Bank, Organisation for Economic Cooperation and Development (2006)
<i>JEFF-3.2</i>	The JEFF-3.2 nuclear data library, https://www.oecd-nea.org/dbforms/data/eva/evatapes/jeff_32/
<i>Jouault, 2017</i>	V. JOUAULT, “ <i>Amélioration de la démarche de Vérification & Validation du nouveau code neutronique APOLLO3®</i> ”, Thèse de Doctorat de l’Université d’Aix-Marseille (2017)
<i>Krivtchik, 2014</i>	Guillaume KRIVTCHIK, “ <i>Analysis of uncertainty propagation in nuclear fuel cycle scenarios</i> ”, Chemical and Process Engineering, Thèse de Doctorat de l’Université de Grenoble, 2014.
<i>Lahaye, 2014</i>	S. LAHAYE, P. BELLIER, H. MAO, A. TSILANIZARA, Y. KAWAMOTO, “ <i>First verification and validation steps of MENDEL release 1.0 cycle code system</i> ”, PHYSOR 2014, Kyoto, Japan, 2014
<i>Lahaye, 2018</i>	S. LAHAYE, J. LUO, P. BELLIER, Td. HUYNH, A. TSILANIZARA, “ <i>Uncertainty quantification of isotopic densities in depleted fuel</i> ”, ANS Best Estimate Plus Uncertainty International Conference (BEPU 2018), May 2018, Lucca, Italy.
<i>Lautard, 1992</i>	J.J. LAUTARD, S. LOUBIÈRE, C. MAGNAUD, “ <i>CRONOS a modular computational system for neutronic core calculations</i> ”, Specialist IAEA meeting, Advanced Computational Methods for power reactors, Cadarache, France, pp 42-50 (1992)
<i>Lebrat, 2015</i>	J-F. LEBRAT, J. TOMMASI, V. PASCAL, R. ESCHBACH, “ <i>Analysis of the TRAPU and DOUBLON irradiations in PHENIX for the experimental validation of the DARWIN package for Fast Reactors</i> ”, Proceedings of Global 2015, September 20-24, 2015, Paris (France), Paper 5278
<i>Lebrat, 2018</i>	J-F. LEBRAT, V. VALLET, C. COQUELET-PASCAL, C. VENARD, R. ESCHBACH, <i>Uncertainty assessment in the calculated decay heat of the ASTRID basic design core based on the DARWIN-2.3 package</i> , Annals of Nuclear Energy 120 (2018) 378-391

<i>Légifrance, Loi n°91-181</i>	Loi n°91-181 du 30 décembre 1991 relative aux recherches sur la gestion des déchets radioactifs https://www.legifrance.gouv.fr/jorf/id/JORFTEXT000000356548
<i>Lewis, 1984</i>	E. E. LEWIS and W. F. MILLER Jr., “ <i>Computational Methods for Neutron Transport</i> ”, John Wiley & Sons Inc., 1984.
<i>Lewis, 1986</i>	E. E. LEWIS and I. DILBER, “ <i>Finite Element, Nodal and Response Matrix Methods: a Variational Synthesis for Neutron Transport</i> ”, Progress in Nuclear Energy, vol. 18, n° 11/2, pp. 63-74, 1986.
<i>Maillot, 2016</i>	M. MAILLOT, « <i>Caractérisation des Effets Spatiaux dans les Grands Cœurs RNR : Méthodes, Outils et Etudes</i> », Thèse, Aix-Marseille Université, 2016
<i>Mao, 2017</i>	L.MAO, I.ZWIJAREVIC, “ <i>A new Tone’s method in APOLLO3® and its application to fast and thermal reactor calculations</i> ”, Nucl. Eng. Technol, vol.49, pp.1269-1286 (2017)
<i>Moller, 2011</i>	J.-Y. MOLLER, J.-J. LAUTARD and D. SCHNEIDER, “ <i>MINARET, a deterministic neutron transport solver for nuclear core calculations</i> ”, in M&C 2011, Rio de Janeiro, Brésil, May 8-12, 2011
<i>Monographie DEN</i>	Monographie de la DEN – La neutronique http://www.cea.fr/Documents/monographies/La%20neutronique%20-%20Qualification%20et%20neutronique%20exp%C3%A9rimentale.pdf
<i>Noguère, 2015</i>	G.NOGUÈRE et al, <i>Partial-wave analysis of $n + {}^{241}\text{Am}$ reaction cross section in the resonance region</i> , Physical Review C 92, 014607 (2015)
<i>Noguère, 2016</i>	G.NOGUÈRE et al, <i>Improved mixed oxide fuel calculations with the evaluated nuclear data library JEFF-3.2</i> , Nuclear Science and Engineering, Vol.182 (no.2), pp.135-150, February 2016
<i>Odry, 2016</i>	N. ODRY, « <i>Méthode de Décomposition de Domaine avec Parallélisme Hybride et Accélération non Linéaire pour la Résolution de l'équation du transport S_n en géométrie non-structurée</i> », Thèse, Aix-Marseille Université, 2016
<i>Palmiotti, 2005</i>	G. PALMIOTTI, G. ALIBERTI, M. SALVATOIRES, J. TOMMASI, <i>Integral experiments analysis for validation and improvement of minor actinide data for transmutation needs</i> , CP797, International Conference on Nuclear Data for Science and Technology, edited by R. C. HAIGHT, M. B. CHADWICK, T. KAWANO, and P. TALOU © 2005 American Institute of Physics 0-7354-0254-X/05/\$22.50

<i>Patricot, 2016</i>	Cyril PATRICOT, « <i>Couplages multi-physiques : évaluation des impacts méthodologiques lors de simulations de couplages neutronique/thermique/mécanique</i> », Université Paris-Saclay, 2016.
<i>Raviart, 1977</i>	P. A. RAVIART and J. P. THOMAS, “A Mixed Dual Finite Element Method for the 2nd Elliptic Problems. <i>Mathematical Aspects of the Finite Element Method</i> ”, Lecture Notes in Mathematics, vol. 606, 1977
<i>Reed, 1973</i>	W. H. REED and T. R. HILL, “ <i>Triangular Mesh Methods for Neutron Transport Equation</i> ”, 1973.
<i>Reuss, 2003</i>	<u>Précis de neutronique</u>
<i>Rimpault, 1995</i>	G. RIMPAULT, “ <i>Algorithmic features of the ECCO cell code for treating heterogeneous fast react subassemblies</i> ”, Proc. Int. Top. Meet. on Reactor Physics and Computations, Portland, Oregon, May 1-5, 1995
<i>Rimpault, 2002</i>	G.RIMPAULT, D.PLISSON, J.TOMMASI, R.JACQMIN, J-M.RIEUNIER, D.BIRON, “ <i>The ERANOS code and data system for fast reactor neutronic analysis</i> ”, <i>PHYSOR2002</i> , Seoul, Korea
<i>Ruggieri, 2006</i>	J.M. RUGGIERI, J. TOMMASI, J.-F. LEBRAT, C. SUTEAU, D. PLISSON-RIEUNIER, C. DE SAINT-JEAN, G. RIMPAULT, J.C. SUBLET, “ <i>ERANOS 2.1 : International Code System for GEN IV Fast Reactor Analysis</i> ”, ICAPP '06, Reno, NV USA, June 4-8, 2006
<i>Sanchez, 1999</i>	R. SANCHEZ AND A. CHETAINE, “ <i>Synthetic acceleration for a 2D characteristic method in non-regular meshes</i> ”, in M&C 1999, Madrid, Espagne, September 27-30, 1999.
<i>Sanchez, 2010</i>	R.SANCHEZ et al., “ <i>APOLLO2 Year 2010</i> ”, Nucl. Eng. Technol., vol.12 (2010)
<i>Santamarina, 2009</i>	A. SANTAMARINA et al, “ <i>The JEFF-3.1.1 Nuclear Data Library</i> ”, JEFF Report 22, NEA 6807, Organization for Economic Cooperation and Development, 2009
<i>Sonzogni, 2005</i>	A.A.SONZOGNI, “The ENSDF Java Package”, (2005)
<i>Tommasi, 2008</i>	J. TOMMASI and G. NOGUERE, “ <i>Analysis of the PROFIL and PROFIL-2 sample irradiation experiments in Phénix for the JEFF-3.1 nuclear data validation</i> ”, Nuclear Science and Engineering, 160, 232-241 (2008)
<i>Tsilanizara, 2000</i>	A. TSILANIZARA, CM DIOP, B. NIMAL, M. DETOC, L. LUNEVILLE, M. CHIRON, TD HUYHN, I. BRESARD, M. EID, and JC KLEIN, “ <i>DARWIN: an Evolution Code System for a Large Range of Applications</i> ”, J. Nucl. Sci. Technol., Supplement, 1:845-849, 2000.

<i>Vallet, 2014</i>	V. VALLET, S. LAHAYE, A. TSILANIZARA, L. SAN FELICE, R. ESCHBACH, “ <i>Deterministic approach of the decay heat uncertainty due to JEFF-3.1.1 nuclear data uncertainties with the CYRUS tool and the DARWIN-2.3 depletion code</i> ”, PHYSOR 2014, Kyoto, Japan, 2014
<i>Walters, 1981</i>	W. F. WALTERS and R. D. O'DELL, “ <i>Nodal Methods for Discrete-Ordinates Transport Problems in (X,Y) Geometry</i> ”, Int. Top. Meet. on Advances in Math. Methods for the Solution of Nuclear Engineering Problems, Munich, Allemagne, 1981
<i>Tone,</i>	T.TONE, “A numerical study of heterogeneity effects in fast critical reactor assemblies”, <i>Nucl. Sci. Technol.</i> , vol.12, pp 467-481
<i>Widawski, 2016</i>	William WIDAWSKI, Rapport de stage (2016)
<i>Zmijarevic, 1999</i>	I. ZMIJAREVIC, “ <i>Multidimensional discrete ordinates nodal and characteristics methods for the APOLLO2 code</i> ”, M&C 1999, Madrid, Espagne, September 27-30, 1999
<i>Yoshida, 1999</i>	YOSHIDA, T., TACHIBANA, T., STORRER, F., OYAMATSU, K., KATAKURA, J.I., “ <i>Possible origin of the gamma-ray discrepancy in the summation calculations of fission product decay heat</i> ” <i>J. Nucl. Sci. Technol.</i> 36 (2), 135–142 (1999)
<i>Zu, 2016</i>	Zu, Tiejun & Yang, Chao & Cao, Liangzhi & Wu, Hongchun, « <i>Nuclear data uncertainty propagation analysis for depletion calculation in PWR and FR pin-cells</i> ». <i>Annals of Nuclear Energy.</i> 94. 399-408. 10.1016/j.anucene.2016.04.006.

ANNEXES

ANNEXE A : RAPPELS DE PHYSIQUE²⁹

I. Le noyau

Dans une description très simplifiée, un noyau est composé de nucléons, les protons de charge positive, et les neutrons de charge neutre. L'atome, lui, comprend le noyau autour duquel gravitent les électrons de charge négative (Figure A.1).

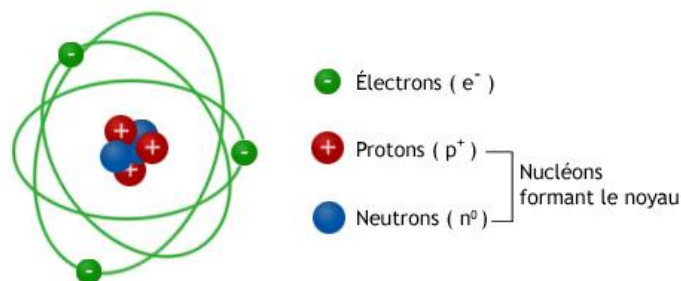


Figure A.1 : Composition de l'atome (Image, 1)

II. Radioactivité et stabilité

Dans la nature, il existe des noyaux stables et des noyaux instables (Figure A.2), aussi appelés radioactifs, qui présentent un excès de protons ou de neutrons. Ces noyaux vont se désintégrer dans le but de perdre cet excès et redevenir stable. L'endroit où sont situés les noyaux stables est appelé la « vallée de la stabilité ».

En se désintégrant, ces noyaux émettent de l'énergie et/ou des particules. Le temps nécessaire pour retourner à la stabilité va dépendre de leur **période radioactive** notée **T**.

Cette période radioactive est liée à la **constante de décroissance radioactive** λ par la relation ci-dessous (Equation A.1) :

²⁹ Ces rappels ne sont pas destinés aux personnes travaillant dans le domaine de la physique et ayant des connaissances en physique nucléaire, mais aux personnes n'ayant pas ou peu de connaissance dans ce domaine. Cette partie est pensée pour leur permettre une meilleure compréhension du manuscrit. Les termes principaux utilisés par la suite y sont définis de manière très simplifiée et illustrés à l'aide de nombreux schémas.

$$\lambda = \frac{\ln(2)}{T}$$

Equation A.1

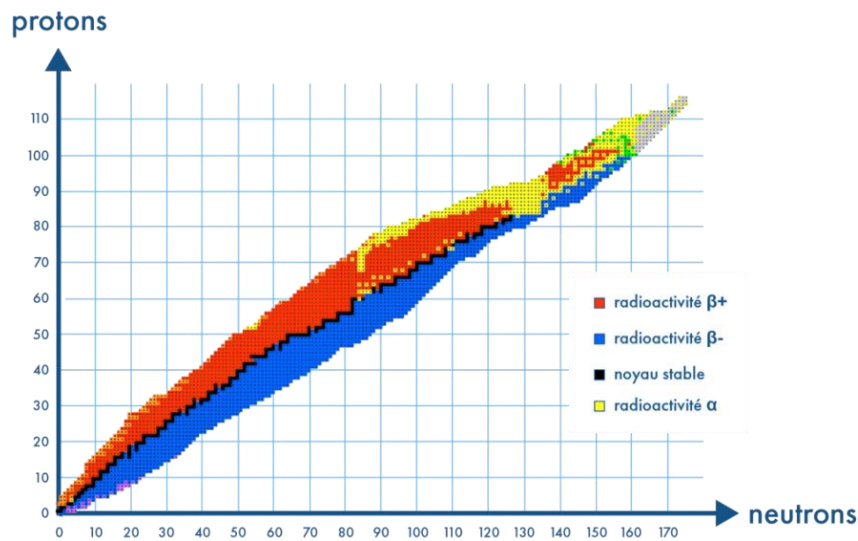


Figure A.2 : Vallée de la stabilité et radioactivité (Image, 2)

III. Fission du noyau

Pour « casser » un noyau, il faut pouvoir séparer les nucléons qui le constituent, et pour cela, il faut fournir une énergie supérieure à l'énergie moyenne de liaison par nucléon. Plus cette énergie de liaison est élevée, plus le noyau est stable.

Dans le cas de la fission nucléaire, on « bombarde » des neutrons sur des noyaux fissiles ; ces noyaux vont se casser en plusieurs fragments³⁰.

Ceux-ci sont appelés des **produits de fission** (Figure A.3). Leur énergie cinétique va être convertie en chaleur. Ils sont généralement instables et vont émettre des rayonnements β et/ou γ (i.e. ils vont subir une ou des désintégration(s) β et/ou γ) pour retourner à la stabilité.

Chaque produit de fission est caractérisé par son **rendement de fission**, noté y , qui représente sa probabilité d'obtention lors d'une fission. Le **rendement cumulatif de la fission**, noté Y (Figure A.4), représente les probabilités d'obtention des éléments de nombre de masse A .

³⁰ Découverte du phénomène de fission induite : (Hahn, 1939)

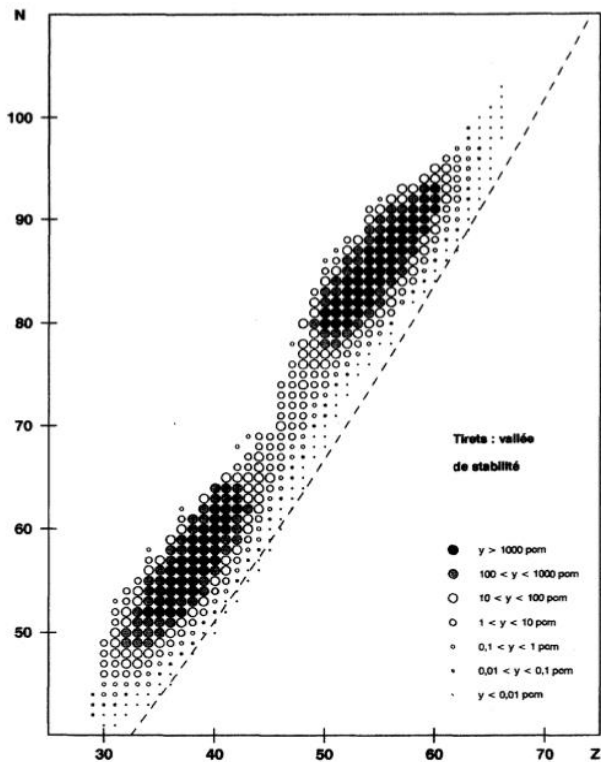


Figure A.3 : Répartition des fragments de la fission de l'uranium 235 induite par un neutron thermique³¹

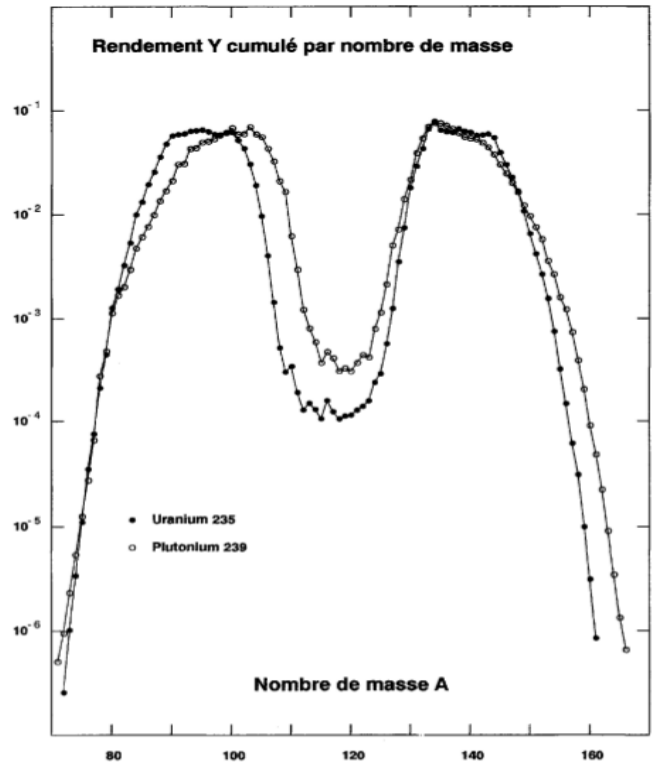


Figure A.4 : Rendements cumulés de la fission de l'uranium 235 et du plutonium 239 induite par un neutron thermique³²

Dans un réacteur, la réaction en chaîne est entretenue car lors de la fission, de nouveaux neutrons sont émis, induisant eux-mêmes des fissions³³.

IV. Réactions nucléaires au sein d'un réacteur

Dans un réacteur nucléaire, il y a des noyaux fissiles, i.e. pouvant fissionner, mais aussi des noyaux non fissiles. La fission est une réaction possible pour les noyaux fissiles, mais d'autres réactions sont possibles entre les neutrons et les noyaux du milieu.

³¹ L'image est issue de (Reuss, 2003).

³² L'image est issue de (Reuss, 2003).

³³ Réaction en chaîne : (Fermi, 1952)

Les neutrons peuvent donc interagir de différentes manières avec les noyaux du milieu (Figure A.5) :

- La **diffusion élastique** se produit lorsque le neutron se « cogne » dans le noyau. C'est classiquement traité comme un choc entre deux billes.
- La **formation d'un noyau composé** se produit lorsque qu'il y a **absorption** du neutron incident. Le noyau reçoit donc une énergie complémentaire par le neutron : il est alors dans un **état excité**. Pour retourner à un état non excité, il a plusieurs solutions :
 - Il peut émettre un neutron, et la paire neutron-noyau conserve la même énergie cinétique que le neutron incident : c'est la **diffusion élastique résonnante**.
 - Il peut aussi émettre un neutron accompagné d'un rayonnement γ (la paire neutron-noyau ne conserve pas la même énergie cinétique) : c'est la **diffusion inélastique**.
 - Il peut également émettre l'énergie excédentaire uniquement sous la forme de rayonnement γ : c'est la **capture radiative**³⁴.
 - Enfin, le neutron peut induire une **fission** (dans le cas d'un noyau fissile) : le noyau fissionne alors en plusieurs fragments, accompagné d'un ou plusieurs neutrons de fissions. Ces neutrons émis au moment de la fission sont appelés **neutrons prompts**.

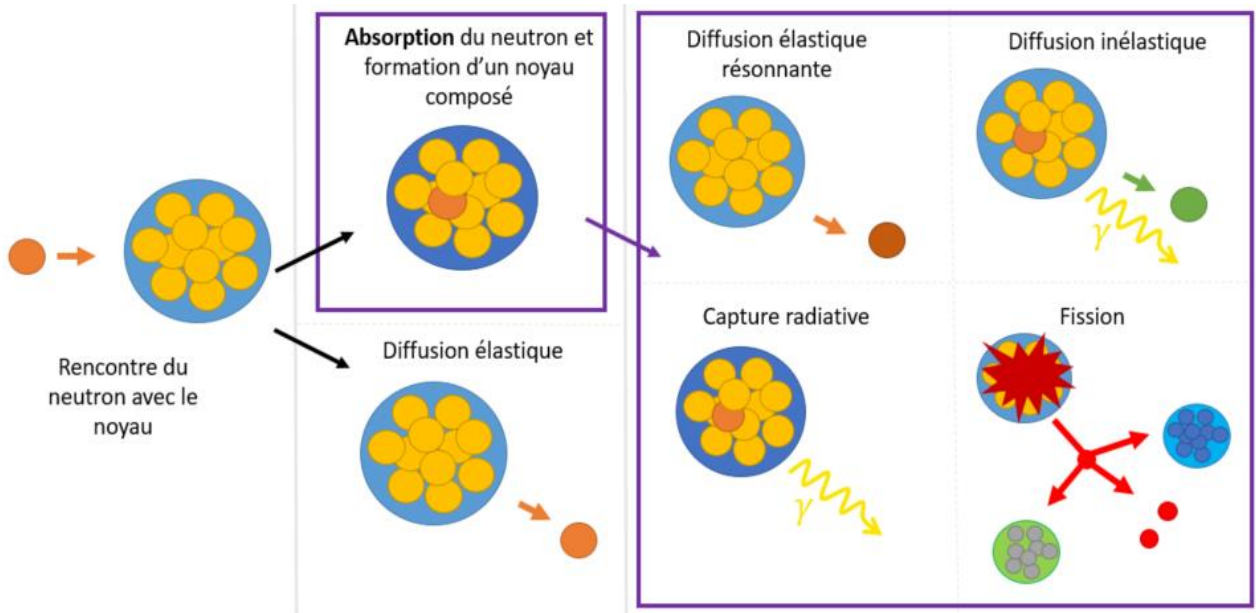


Figure A.5 : Interaction du neutron avec la matière

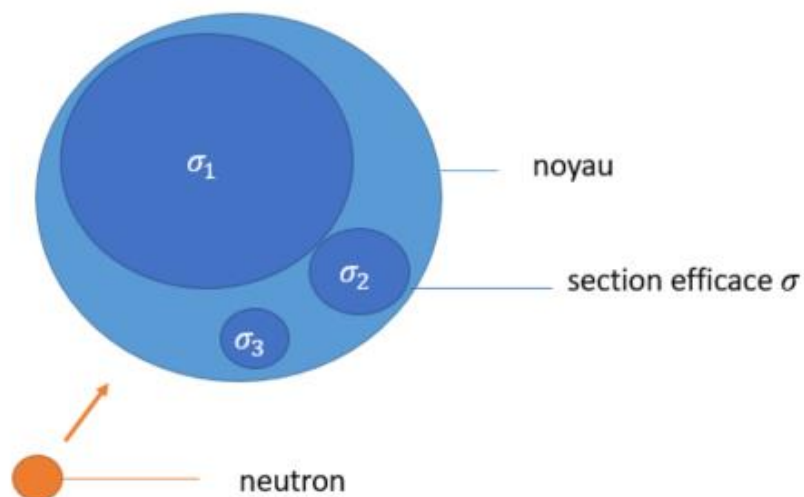
³⁴ que l'on appelle simplement « capture » ou réaction (n, γ)

On appelle **précurseurs** les produits de fission qui sont émetteurs de neutrons. Les neutrons qui seront émis après la fission sont appelés des **neutrons retardés**.

V. Notion de section efficace σ

La probabilité que le neutron incident induise une réaction plutôt qu'une autre est représentée par la notion de **section efficace**. Schématiquement, le neutron évoluant dans la matière peut être représenté comme une bille dans un milieu de boules. Plus la boule est grosse (i.e. plus la section efficace est grande), plus la bille aura une probabilité importante d'interagir avec elle (Figure A.6).

L'unité de la section efficace est homogène à une surface. Elle se mesure en barn (notée b) (10^{-24} cm^2).



Le neutron peut interagir avec le noyau de 3 façons différentes plus ou moins probables (1, 2 et 3), le noyau a donc une section efficace correspondant à chaque réaction ($\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$) plus ou moins importante.

Figure A.6 : représentation schématique de la section efficace

On différencie la section efficace microscopique notée σ de la section efficace macroscopique notée Σ qui vaut $N \times \sigma$, avec N le nombre de noyaux du milieu.

VI. Facteur de multiplication effectif et réactivité

Dans un réacteur, le matériau fissile se fissionne sous l'action d'un neutron. C'est cette réaction de fission qui est **source d'énergie**. A chaque fission, un certain nombre de neutrons peut potentiellement être émis. Les neutrons de fission sont émis à une énergie importante, et peuvent à leur tour générer des fissions. On parle de **réaction en chaîne**. Ainsi, l'auto-entretien du fonctionnement d'un réacteur dépend du nombre de neutrons émis.

La grandeur qui permet de rendre compte de cette réaction neutronique est le **facteur de multiplication effectif** k_{eff} , qui rend compte de l'évolution de la population neutronique (Equation A.2).

$$k_{eff} = \frac{\text{nombre de neutrons de la } (i + 1)^{\text{ème}} \text{ génération}}{\text{nombre de neutrons de la } i^{\text{ème}} \text{ génération}}$$

Equation A.2 : Facteur de multiplication effectif k_{eff}

On parle parfois de **réactivité** ρ (Equation A.3)) :

$$\rho = \frac{k_{eff} - 1}{k_{eff}} \qquad \text{Equation A.3 : Réactivité } \rho$$

Avec la connaissance de la réactivité (ou du facteur de multiplication effectif), on est en mesure de différencier trois types de régimes.

- On est en **régime critique** lorsque $k_{eff} = 1 \leftrightarrow \rho = 0$. La population neutronique est constante, la réaction en chaîne est entretenue.
- On parle de **régime sous-critique** lorsque $k_{eff} < 1 \leftrightarrow \rho < 0$. La population neutronique diminue, on a une extinction de la réaction en chaîne.
- On parle de **régime sur-critique** lorsque $k_{eff} > 1 \leftrightarrow \rho > 0$. La population neutronique augmente, on est dans une situation de **divergence** du réacteur.

ANNEXE B : CALCUL DE PROPAGATION DES INCERTITUDES AUX RAPPORTS ISOTOPIQUES ET AUX RAPPORTS CALCUL / EXPERIENCE (C/E)

Lorsque nous calculons des rapports isotopiques, par exemple le rapport des bilans-matière du $^{239}\text{Pu} / ^{238}\text{U}$, la concentration de chaque isotope a sa propre incertitude ($\sigma_{^{239}\text{Pu}}$ et $\sigma_{^{238}\text{U}}$) calculée précédemment (grâce aux méthodes de calcul d'incertitudes). Ainsi, **l'incertitude du rapport isotopique est une combinaison des incertitudes de chaque isotope**.

De la même manière, lorsque nous calculs des rapports calcul / expérience (notés C/E), l'incertitude d'un tel rapport est dépendante de l'incertitude de calcul σ_C et de l'incertitude expérimentale σ_E .

I. Formule générale de propagation des incertitudes

Pour une fonction donnée $f(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$ qui dépend des variables x_i , l'incertitude de f (notée σ_f) suit la **formule générale du calcul de propagation des incertitudes** suivante :

$$(\sigma_f)^2 = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \right)^2 (\sigma_{x_i})^2 + 2 \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \right) \left(\frac{\partial f}{\partial x_j} \right) \sigma_{x_i x_j}$$

Le terme $\sigma_{x_i x_j}$ représente la **covariance** entre x_i et x_j . Celle-ci peut se calculer en fonction de la corrélation x_i et x_j , notée $\delta_{x_i x_j}$:

$$\sigma_{x_i x_j} = \delta_{x_i x_j} \sigma_{x_i} \sigma_{x_j}$$

II. Cas des fonctions de type $f = a / b$

Dans le cas des rapports isotopiques ou des rapports C/E, nous avons des fonctions de la forme $f = \frac{a}{b}$. Nous allons donc calculer leur incertitude.

$$(\sigma_f)^2 = \left(\frac{\partial f}{\partial a} \right)^2 (\sigma_a)^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial b} \right)^2 (\sigma_b)^2 + 2 \left(\frac{\partial f}{\partial a} \right) \left(\frac{\partial f}{\partial b} \right) \sigma_{ab}$$

Avec :

$$\sigma_{ab} = \delta_{ab} \sigma_a \sigma_b$$

$$\frac{\partial f}{\partial a} = \frac{1}{b}$$

$$\frac{\partial f}{\partial b} = \frac{-a}{b^2}$$

On a donc :

$$\begin{aligned} (\sigma_f)^2 &= \left(\frac{1}{b}\right)^2 (\sigma_a)^2 + \left(\frac{-a}{b^2}\right)^2 (\sigma_b)^2 + 2 \left(\frac{1}{b}\right) \left(\frac{-a}{b^2}\right) \delta_{ab} \sigma_a \sigma_b \\ (\sigma_f)^2 &= \frac{1}{b^2} (\sigma_a)^2 + \frac{a^2}{b^4} (\sigma_b)^2 - 2 \frac{a}{b^3} \delta_{ab} \sigma_a \sigma_b \end{aligned}$$

Pour simplifier les termes, on décide de calculer l'incertitude relative, c'est-à-dire de diviser σ_f par la fonction f . On obtient donc :

$$\left(\frac{\sigma_f}{f}\right)^2 = \left(\frac{b}{a}\right)^2 \times \left(\frac{1}{b^2} (\sigma_a)^2 + \frac{a^2}{b^4} (\sigma_b)^2 - 2 \frac{a}{b^3} \delta_{ab} \sigma_a \sigma_b\right)$$

$$\left(\frac{\sigma_f}{f}\right)^2 = \frac{(\sigma_a)^2}{a^2} + \frac{(\sigma_b)^2}{b^2} - \frac{2}{ab} \delta_{ab} \sigma_a \sigma_b$$

$$\left(\frac{\sigma_f}{f}\right)^2 = \left(\frac{\sigma_a}{a}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_b}{b}\right)^2 - 2 \left(\frac{\sigma_a}{a}\right) \left(\frac{\sigma_b}{b}\right) \delta_{ab}$$

A partir de cette équation, plusieurs démarches s'offrent à nous.

1) Calcul exact des corrélations δ_{ab}

On peut choisir de calculer, pour chaque couple d'isotopes (a, b) , la corrélation δ_{ab} à partir des matrices de variances et de covariances.

C'est un travail laborieux, mais qui est techniquement réalisable.

2) Calcul avec estimation des corrélations δ_{ab}

On peut également choisir, pour chaque couple d'isotopes (a, b) , d'estimer leur corrélation sur des critères physiques, par exemple de la façon suivante :

(Anti-) Corrélation	Positive		Négative		Nulle
Intensité	Faible	Forte	Faible	Forte	/
Coefficient de corrélation δ_{ab}	+0,5	+1	-0,5	-1	0

3) Calcul avec absence de corrélation

Lorsqu'il n'y a pas de corrélation, par exemple pour les **rapports calcul / expérience (C/E)**, où lorsque l'on fait une hypothèse simplificatrice d'absence de corrélation, l'équation devient simplement :

$$\left(\frac{\sigma_f}{f}\right)^2 = \left(\frac{\sigma_a}{a}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_b}{b}\right)^2$$

$$\frac{\sigma_f}{f} = \sqrt{\left(\frac{\sigma_a}{a}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_b}{b}\right)^2}$$

4) Calcul enveloppe

Dans le cas où on cherche à avoir une incertitude enveloppe, par exemple pour calculer l'incertitude des **rapports isotopiques**, on va chercher à maximiser l'incertitude. On choisit donc le cas où le δ_{ab} donne l'incertitude la plus élevée.

Dans notre cas, c'est lorsque $\delta_{ab} = -1$:

$$\left(\frac{\sigma_f}{f}\right)^2 \Big|_{max} = \left(\frac{\sigma_a}{a}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_b}{b}\right)^2 + 2 \left(\frac{\sigma_a}{a}\right) \left(\frac{\sigma_b}{b}\right)$$

$$\left(\frac{\sigma_f}{f}\right)^2 \Big|_{max} = \left(\frac{\sigma_a}{a} + \frac{\sigma_b}{b}\right)^2$$

On obtient donc une incertitude relative :

$$\frac{\sigma_f}{f} \Big|_{max} = \left| \frac{\sigma_a}{a} \right| + \left| \frac{\sigma_b}{b} \right|$$

Que l'on peut aussi noter de la façon suivante :

$$\frac{\sigma_f}{f} \leq \left| \frac{\sigma_a}{a} \right| + \left| \frac{\sigma_b}{b} \right|$$

III. Cas des fonctions de type $f = Aa + Bb + Cc$

Dans le cas des fonctions de la forme $f = Aa + Bb + Cc$, avec a, b, c les variables et A, B, C des constantes, la formule de propagation des incertitudes nous donne :

$$\frac{\partial f}{\partial a} = A, \quad \frac{\partial f}{\partial b} = B, \quad \frac{\partial f}{\partial c} = C$$

$$(\sigma_f)^2 = A^2(\sigma_a)^2 + B^2(\sigma_b)^2 + C^2(\sigma_c)^2 + 2AB\sigma_a\sigma_b\delta_{ab} + 2BC\sigma_b\sigma_c\delta_{bc} + 2AC\sigma_a\sigma_c\delta_{ac}$$

En prenant $\delta_{ab} = \delta_{bc} = \delta_{ac} = 1$ pour être enveloppe, on a :

$$(\sigma_f)^2 \Big|_{max} = (A\sigma_a + B\sigma_b + C\sigma_c)^2$$

$$\sigma_f \leq |A\sigma_a| + |B\sigma_b| + |C\sigma_c|$$

IV. Calcul des incertitudes sur les rapports isotopiques et les C/E

1) Calcul de l'incertitude du rapport isotopique

Pour le calcul de l'incertitude du rapport isotopique, l'incertitude est calculée de sorte à être « enveloppe », c'est-à-dire en considérant que les corrélations sont maximales. Ainsi, l'incertitude du rapport isotopique (Ri) se calcule de la façon suivante :

$$Ri = \frac{Iso1}{Iso2} \qquad \frac{\sigma_{Ri}}{Ri} \leq \left| \frac{\sigma_{Iso1}}{Iso1} \right| + \left| \frac{\sigma_{Iso2}}{Iso2} \right|$$

2) Calcul de l'incertitude du C/E du rapport isotopiques

On considère qu'il n'y a pas de corrélation entre les valeurs calculées (C) et expérimentales (E). Ainsi, l'incertitude du rapport Calcul / Expérience s'écrit de la façon suivante :

$$\frac{C}{E} = \frac{Ri \left(\frac{Iso1}{Iso2} \right)_C}{Ri \left(\frac{Iso1}{Iso2} \right)_E}$$

$$\frac{\sigma_{C/E}}{C/E} = \sqrt{\left(\frac{\sigma_{(Ri)_C}}{(Ri)_C} \right)^2 + \left(\frac{\sigma_{(Ri)_E}}{(Ri)_E} \right)^2}$$

ANNEXE C : DESCRIPTION DETAILLEE DES MODELISATIONS AVEC TRIPOLI-4® ET APOLLO3®

Annexe C.1 : Description détaillée de la modélisation avec TRIPOLI-4®

Les géométries assemblages ont été homogénéisés radialement mais leur structure axiale est complètement décrite, comme on peut le voir sur la figure suivante (figure C.1.1). La zone axiale de chaque assemblage est décrite comme un milieu homogène. En effet, une description aiguille par aiguille aurait induit des temps de calculs excessivement longs. Cet effet d'homogénéisation est démontré comme étant négligeable sur le facteur de multiplication k_{eff} et sur le spectre neutronique de l'aiguille irradiée.

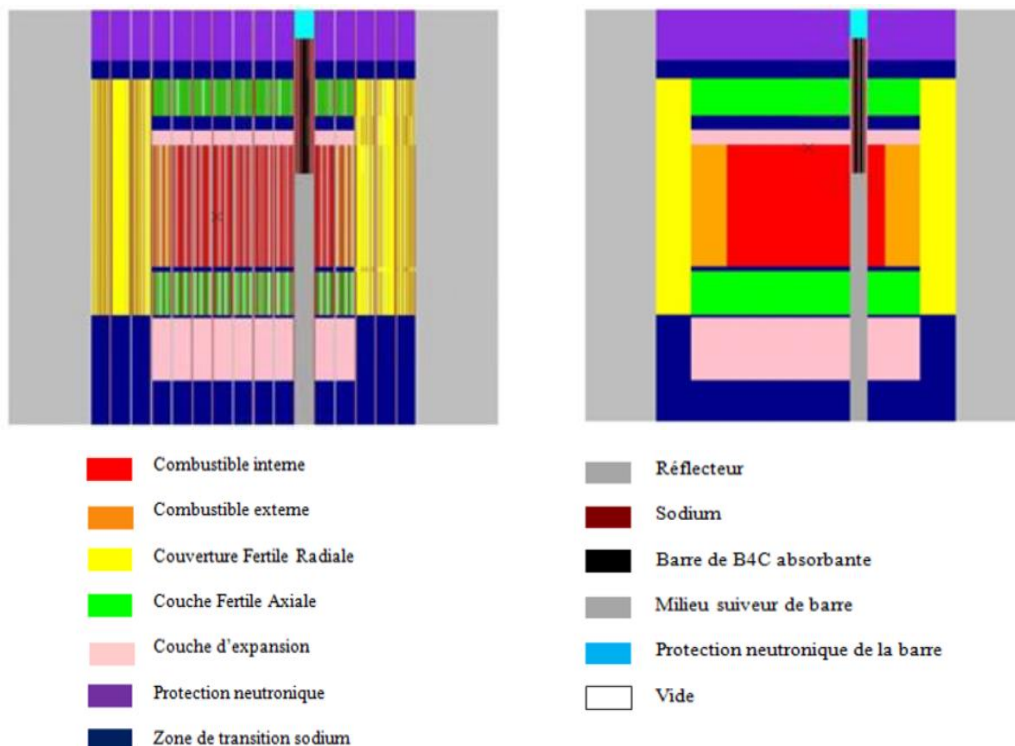


Figure C.1.1: Modélisation hétérogène (à gauche) vs « semi-hétérogène » (à droite) du réacteur PHENIX avec TRIPOLI-4®

Cependant, les assemblages TRAPU et DOUBLON ont conservé leur structure hétérogène dans leur zone d'intérêt, c'est à dire dans toute leur zone fissile (pour TRAPU) ou fertile (pour

DOUBLON). Au sein de cette description hétérogène des zones d'intérêt, seule une partie des aiguilles d'intérêt est considérée comme « évolutive », partie correspondant à la zone qui a été analysée lors des mesures spectrométriques. En effet, faire évoluer le cœur entier rendrait les temps de calcul rédhibitoires.

En première approximation, les modifications du plan de chargement (déplacements d'assemblages à des positions différentes au sein du cœur) ne sont pas considérées : le plan de chargement est **considéré constant** pendant toute la durée de l'irradiation. Cela revient à considérer une irradiation moyenne continue avec les conditions du cœur en début de cycle équilibre (distribution spatiale constante pour la puissance et le flux).

Annexe C.2 : Description détaillée de la modélisation avec DARWIN3

APOLLO3® permet l'utilisation de géométries non structurées, c'est ce qui a été utilisé pour modéliser les aiguilles d'intérêt des expériences TRAPU et DOUBLON.

Grâce au code d'évolution MENDEL, couplé au code neutronique APOLLO3® (« DARWIN3 »), il est possible de faire évoluer l'ensemble du cœur, ce qui n'est pas raisonnablement réalisable avec TRIPOLI-4® (associé à MENDEL pour l'évolution) dû à des temps de calculs conséquents.

Comme nous l'avons vu précédemment, APOLLO3® nécessite deux étapes de calcul, une **étape « réseau »** et une **étape « cœur »**. L'étape réseau permet d'obtenir des sections efficaces homogénéisées qui seront par la suite utilisées pour le calcul cœur, stockées sous un format « MPO » (Multi-Parameter Output).

Etape de calcul « réseau »

Les calculs réseau sont effectués avec un découpage à 1760 groupes, puis homogénéisés à 33 groupes, avec 10 itérations internes et 200 itérations externes.

Assemblages « standards »

Le schéma de calcul de référence est utilisé pour le calcul réseau. La modélisation des assemblages du cœur suit une modélisation standard avec une modélisation des cellules fissiles hexagonales et de clusters fissile / structure ou fissile / fertile (Figure C.2.1). Les calculs réseaux sont réalisés sur ces cellules et clusters. Grâce aux symétries des assemblages, ces géométries peuvent être « découpées » sur 1/12 d'assemblage et avec introduction de condition de réflexion. Ceci permet de simplifier les géométries et donc d'accélérer les calculs.

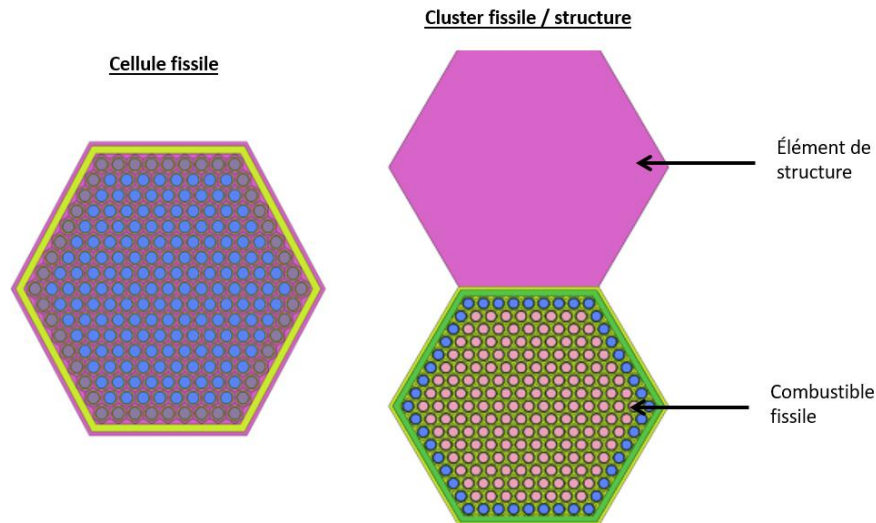


Figure C.2.1 : Cellule fissile et cluster fissile / structure

Assemblages d'intérêt (TRAPU, DOUBLON) avec aiguilles individualisées

Une adaptation de ces géométries standards doit être réalisée afin de tenir compte des spécificités des assemblages TRAPU et DOUBLON. En effet, nous cherchons à obtenir des bilans matières dans des aiguilles précises.

Il faut donc que l'on puisse les **individualiser** au moment de l'étape réseau. Il sera aussi nécessaire, au moment de l'étape cœur, de les modéliser de façon indépendante de l'assemblage (figure C.2.2) pour qu'elles restent individualisées.

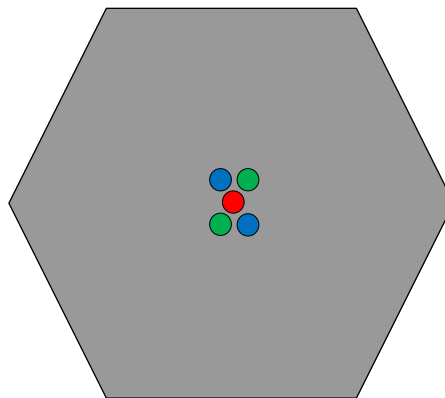


Figure C.2.2 : Représentation schématique de la modélisation de l'étape cœur pour TRAPU

PRINCIPE GENERAL

Cette adaptation se répercute sur le calcul réseau : les assemblages TRAPU et DOUBLON sont modélisés en tenant compte de ces aiguilles.

Le but est d'obtenir des sections efficaces spécifiques à chaque aiguille d'intérêt individualisée, et une section efficace homogénéisée sur le reste de l'assemblage « moins » les aiguilles concernées, comme schématisé sur la figure ci-dessous (figure C.2.3).

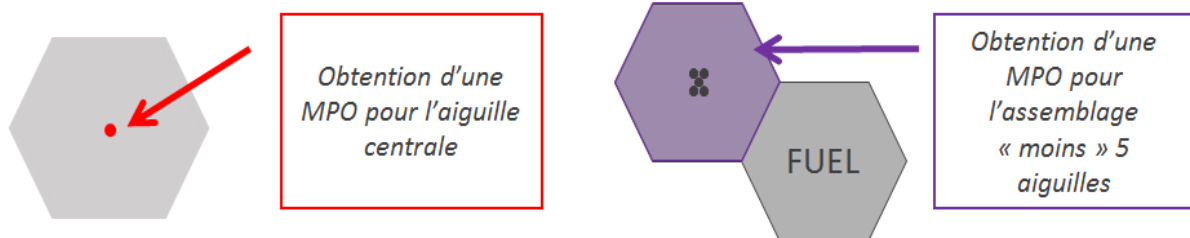


Figure C.2.3 : Représentation schématique de la démarche pour obtenir des MPO pour les aiguilles d'intérêt et le reste de l'assemblage

Là encore, on profite des symétries inhérentes aux assemblages afin de ne réaliser le calcul que sur une partie « découpée » de l'assemblage réel, comme on peut le voir sur la figure suivante (figure C.2.4).

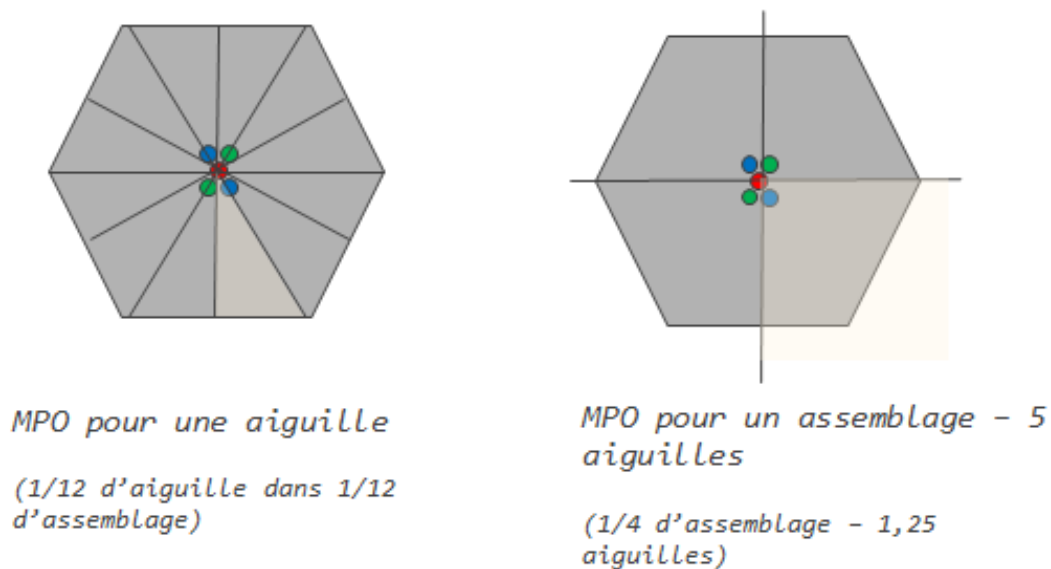


Figure C.2.4 : Représentation schématique du « découpage » de la géométrie

MODELISATION DES AIGUILLES D'INTERET INDIVIDUALISEES

Pour obtenir des sections efficaces pour les aiguilles concernées, on modélise l'assemblage avec, en position centrale, l'aiguille d'intérêt, que ce soit TRAPU-1, TRAPU-2 ou TRAPU-3. On considère en effet que le flux subit par les aiguilles est identique quel que soit leur position, c'est pourquoi toutes les aiguilles sont, à cette étape, toutes modélisée dans une position centrale (figure 30).

La géométrie obtenue est celle présentée ci-dessous (figure C.2.5) :

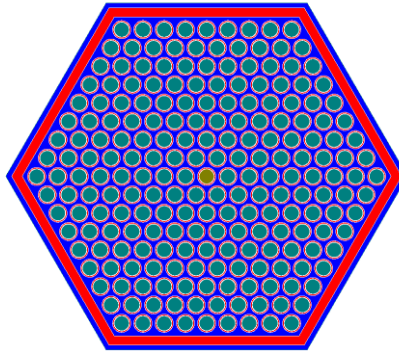


Figure C.2.5 : Modélisation d'une aiguille TRAPU d'intérêt dans l'assemblage

Une fois cette géométrie obtenue, celle-ci est « découpée » afin de réaliser le calcul sur 1/12 d'assemblage comme précédemment. Nous obtenons alors la géométrie ci-dessous (figure C.2.6) :

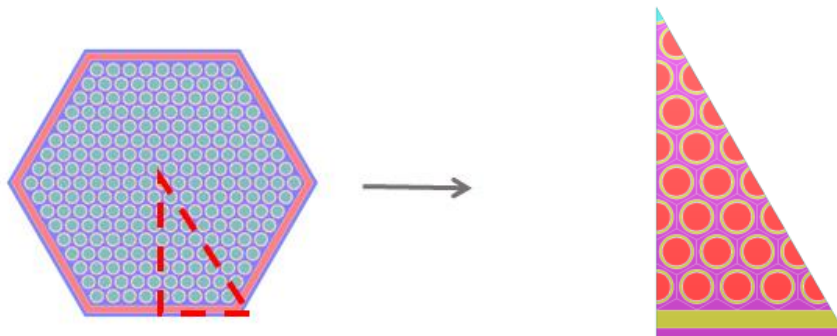


Figure C.2.6 : Modélisation de 1/12 d'aiguille TRAPU dans 1/12 d'assemblage

MODELISATION POUR LE RESTE DE L'ASSEMBLAGE

La démarche est similaire pour l'obtention de la MPO du reste de l'assemblage, quoiqu'un peu plus complexe du fait de l'impossibilité de réaliser le calcul sur un douzième d'assemblage. En effet, le « découpage » doit être réalisé de telle sorte à obtenir 1/4 d'assemblage – (1+1/4) d'aiguilles.

Pour cela, on va modéliser un cluster un peu particulier, car 2 assemblages sont nécessaires pour obtenir une géométrie correcte (figure C.2.7). Il est en effet impossible de conserver un milieu vide pour découper 1/4 de géométrie.

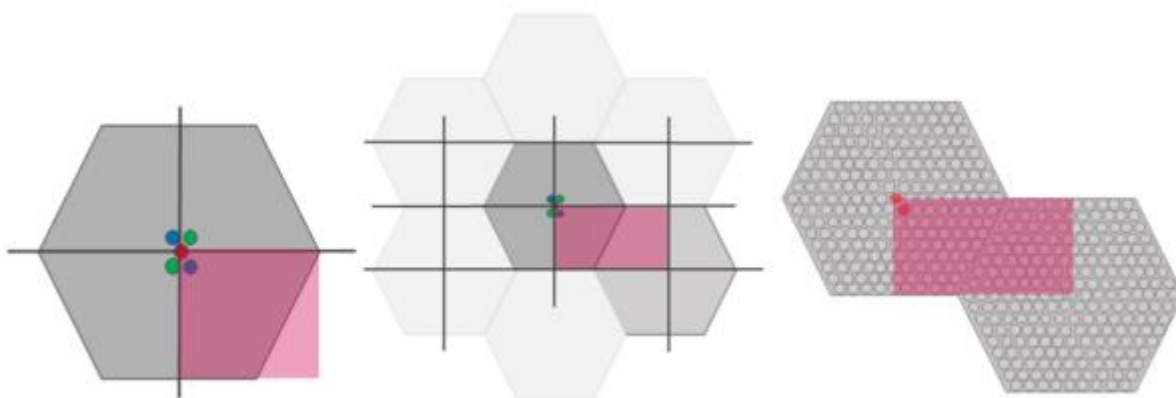


Figure C.2.7 : Représentation schématique du cluster pour $\frac{1}{4}$ de géométrie

Cela nous permet d'obtenir la géométrie suivante (figure C.2.8) :

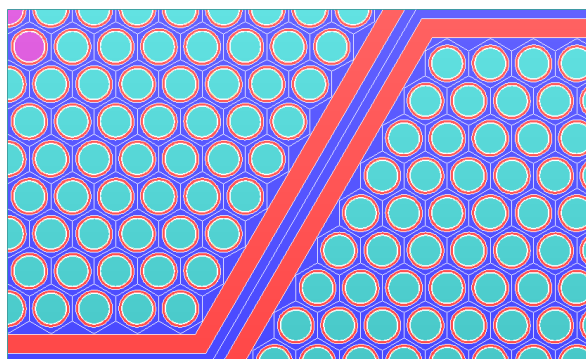


Figure C.2.8 : Géométrie pour obtenir la MPO de l'assemblage restant

La même démarche est utilisée pour obtenir les sections efficaces des aiguilles concernées et des assemblages DOUBLON.

Etape de calcul « cœur »

Une fois les MPO réseau obtenues pour les différents assemblages composant le cœur, celui-ci peut être modélisé. APOLLO3®, contrairement à ses prédécesseurs, permet d'utiliser des géométries non structurées. Celles-ci sont utilisées pour modéliser l'assemblage TRAPU dans le cœur interne et les assemblages FEF et FEG de l'expérience DOUBLON dans la couverture fertile. En effet, on y positionne nos aiguilles d'intérêt individualisées au sein d'un assemblage homogène.

On obtient le type de géométrie ci-dessous (figures C.2.9 à C.2.11) :

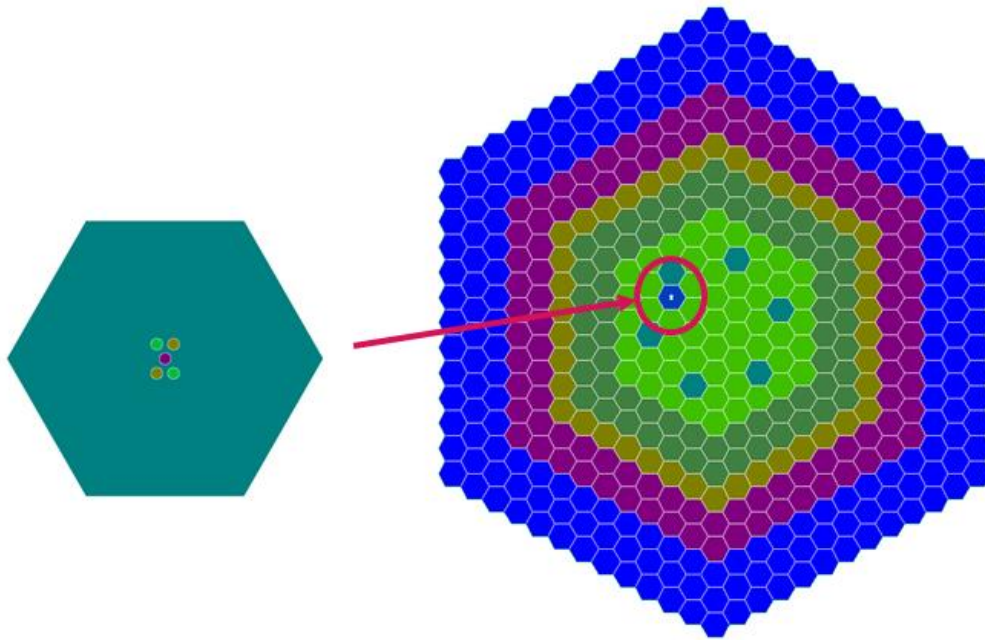


Figure C.2.9 : Modélisation de l'assemblage TRAPU dans PHENIX

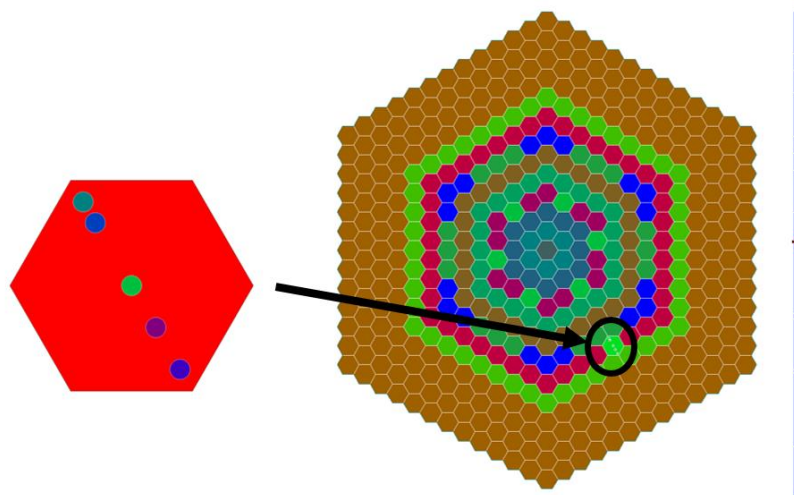


Figure C.2.10: Modélisation de l'assemblage FEF79 de première couronne fertile radiale de l'expérience DOUBLON dans PHENIX

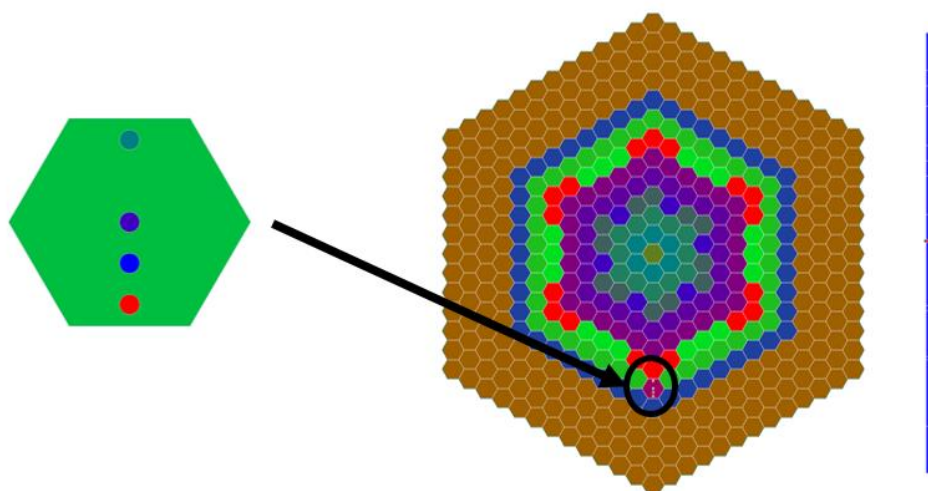


Figure C.2.11 : Modélisation de l'assemblage FEG58 de deuxième couronne fertile radiale de l'expérience DOUBLON dans PHENIX

Cette géométrie reprend les différents plans axiaux de la géométrie du cœur, que l'on peut voir sur la figure ci-dessous (figure C.2.12).

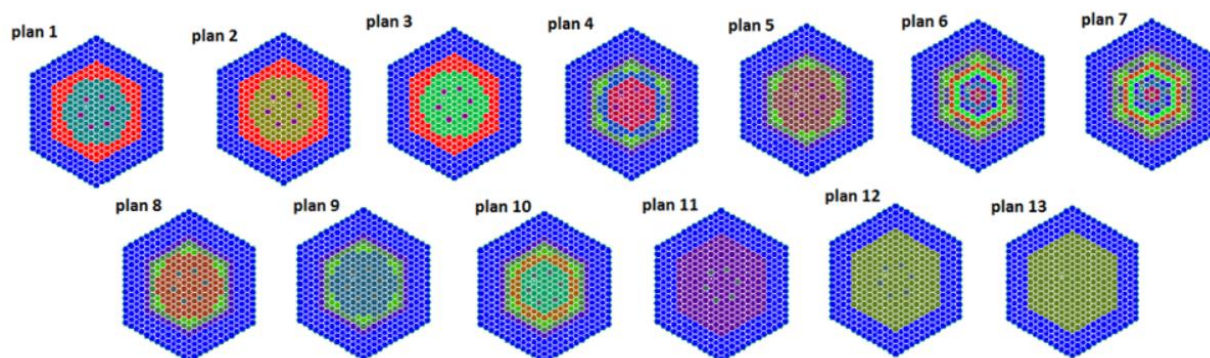


Figure C.2.12: Différents plans axiaux de la géométrie modélisée pour l'analyse de l'expérience TRAPU dans PHENIX avec APOLLO3®

Historique d'irradiation et plans de chargement

Les historiques d'irradiations sont modélisés de façon précise avec l'aide du code d'évolution MENDEL. En première approximation, les modifications du plan de chargement ne sont pas considérées : le plan de chargement est **considéré constant** pendant toute la durée de l'irradiation.

ANNEXE D : FACTEUR DE RENORMALISATION / DE RECALAGE

L'indicateur de flux utilisé est le rapport calcul / expérience (C/E) du rapport isotopique du néodyme 148 sur l'uranium 238. Le facteur correctif pour effectuer le recalage se calcule de la façon suivante :

$$f = \frac{1}{C/E \text{ du } ^{148}\text{Nd}/^{238}\text{U}}$$

ANNEXE E : C/E DES RAPPORTS ISOTOPIQUES DE TRAPU

1) Facteurs de recalage

Facteur de recalage	TRIPOLI-4®	DARWIN3 Config 1	DARWIN3 Config 3	DARWIN3 Config 2	DARWIN3 Config 5	DARWIN3 Config 4	DARWIN3 Config 6
	~0.88	~0.90	~0.89	~0.89	~0.88	~0.91	~0.88

2) Valeurs des C/E

Moyenne TRAPU	TRIPOLI-4®		DARWIN2		DARWIN3 Config 1		DARWIN3 Config 3		DARWIN3 Config 2		DARWIN3 Config 5		DARWIN3 Config 4		DARWIN3 Config 6	
	$\frac{C}{E}$	$\sigma_{\frac{C}{E}}$	$\frac{C}{E}$	$\sigma_{\frac{C}{E}}$	$\frac{C}{E}$	$\sigma_{\frac{C}{E}}$	$\frac{C}{E}$	$\sigma_{\frac{C}{E}}$	$\frac{C}{E}$	$\sigma_{\frac{C}{E}}$	$\frac{C}{E}$	$\sigma_{\frac{C}{E}}$	$\frac{C}{E}$	$\sigma_{\frac{C}{E}}$	$\frac{C}{E}$	$\sigma_{\frac{C}{E}}$
²³⁴ U / ²³⁸ U	0.99	1.68%	1.02	1.57%	0.99	1.53%	0.99	1.53%	0.99	1.53%	1.00	1.53%	1.01	1.53%	1.00	1.53%
²³⁵ U / ²³⁸ U	1.01	0.46%	1.02	2.60%	0.99	0.46%	0.99	0.44%	0.99	0.44%	1.00	0.44%	0.99	0.44%	1.01	0.44%
²³⁶ U / ²³⁸ U	0.99	1.08%	0.98	19.46%	1.02	1.08%	1.02	1.06%	1.02	1.06%	1.00	1.06%	1.00	1.06%	1.00	1.06%
²³⁷ Np / ²³⁸ U	0.92	5.87%	0.85	6.42%	0.84	4.22%	0.85	4.18%	0.85	4.18%	0.85	4.19%	0.86	4.19%	0.85	4.19%
²³⁹ Pu / ²³⁸ U	0.99	3.65%	1.00	1.70%	0.98	0.56%	0.98	0.56%	0.98	0.56%	1.00	0.55%	0.98	0.56%	1.01	0.55%
²³⁸ Pu / ²³⁹ Pu	0.97	1.05%	0.96	2.37%	1.00	0.94%	0.99	0.92%	1.00	0.92%	0.97	0.92%	1.01	0.92%	0.96	0.92%

²⁴⁰ Pu / ²³⁹ Pu	1.01	0.50%	0.99	2.51%	1.02	0.15%	1.02	0.15%	1.02	0.15%	1.00	0.14%	1.02	0.15%	1.00	0.14%
²⁴¹ Pu / ²³⁹ Pu	0.99	0.49%	0.97	4.11%	1.02	0.19%	1.02	0.19%	1.02	0.19%	1.00	0.18%	1.05	0.18%	0.99	0.18%
²⁴² Pu / ²³⁹ Pu	1.04	0.50%	1.01	4.17%	1.05	0.22%	1.05	0.22%	1.05	0.22%	1.02	0.21%	1.05	0.22%	1.02	0.21%
²⁴¹ Am / ²³⁹ Pu	0.93	1.85%	0.99	2.72%	0.94	1.66%	0.94	1.65%	0.94	1.65%	0.93	1.65%	0.93	1.65%	0.92	1.65%
^{242m} Am / ²⁴¹ Am	0.86	1.93%	1.03	3.34%	0.87	2.31%	1.03	2.31%	0.87	2.28%	1.01	2.31%	1.08	2.32%	1.00	2.31%
²⁴³ Am / ²⁴¹ Am	1.14	2.09%	1.05	2.92%	1.20	2.00%	1.21	1.95%	1.21	1.95%	1.18	1.95%	1.22	1.96%	1.16	1.94%
²⁴⁴ Cm / ²³⁹ Pu	1.05	2.97%	1.00	3.19%	1.17	2.49%	1.18	2.41%	1.18	2.41%	1.11	2.38%	1.21	2.42%	1.09	2.37%
²⁴² Cm / ²⁴⁴ Cm	0.86	2.16%	1.04	3.23%	0.85	1.63%	0.84	1.59%	0.85	1.59%	0.86	1.60%	0.84	1.60%	0.87	1.60%
²⁴³ Cm / ²⁴⁴ Cm	0.60	2.23%	0.63	3.16%	0.57	0.08%	0.56	0.06%	0.57	0.06%	0.56	1.88%	0.86	0.07%	0.56	0.06%
²⁴⁵ Cm / ²⁴⁴ Cm	1.39	8.18%	1.35	7.47%	1.44	0.41%	1.45	0.34%	1.45	0.34%	1.42	7.84%	1.07	0.23%	1.41	0.34%
¹⁴⁸ Nd / ²³⁸ U	1.00	2.24%	1.00	6.73%	1.01	1.29%	1.01	1.23%	1.01	1.23%	1.01	1.24%	1.01	1.24%	1.01	1.23%
¹⁴³ Nd / ¹⁴⁸ Nd	0.97	0.73%	0.97	13.43%	0.97	0.55%	0.97	0.55%	0.97	0.55%	0.97	0.55%	0.97	0.55%	0.97	0.55%
¹⁴⁴ Nd / ¹⁴⁸ Nd	0.61	0.75%	1.06	13.54%	1.06	0.53%	1.06	0.54%	1.06	0.54%	1.06	0.53%	1.06	0.53%	1.06	0.53%
¹⁴⁵ Nd / ¹⁴⁸ Nd	0.98	0.67%	0.99	12.98%	0.98	0.43%	0.98	0.43%	0.98	0.43%	0.99	0.43%	0.98	0.43%	0.99	0.43%
¹⁴⁶ Nd / ¹⁴⁸ Nd	1.00	0.64%	1.00	12.59%	1.00	0.38%	1.00	0.38%	1.00	0.38%	1.00	0.38%	1.00	0.38%	1.00	0.38%
¹⁵⁰ Nd / ¹⁴⁸ Nd	0.98	0.64%	0.98	14.91%	0.98	0.38%	0.98	0.38%	0.98	0.38%	0.98	0.38%	0.98	0.38%	0.98	0.38%

* Les calculs montrent qu'il faut prendre en compte le ¹⁴⁴Ce dans le rapport isotopique du ¹⁴⁴Nd (cela n'a pas été fait pour les calculs avec TRIPOLI-4®).

Moyenne TRAPU	TRIPOLI-4®		DARWIN2		DARWIN3 Config 1		DARWIN3 Config 3		DARWIN3 Config 2		DARWIN3 Config 5		DARWIN3 Config 4		DARWIN3 Config 6	
	$\frac{C}{E}$	$\frac{\sigma_C}{E}$	$\frac{C}{E}$	$\frac{\sigma_C}{E}$	$\frac{C}{E}$	$\frac{\sigma_C}{E}$	$\frac{C}{E}$	$\frac{\sigma_C}{E}$	$\frac{C}{E}$	$\frac{\sigma_C}{E}$	$\frac{C}{E}$	$\frac{\sigma_C}{E}$	$\frac{C}{E}$	$\frac{\sigma_C}{E}$	$\frac{C}{E}$	$\frac{\sigma_C}{E}$
²⁴¹ Am / ²³⁹ Pu	0.93	1.85%	0.99	2.72%	0.94	1.66%	0.94	1.65%	0.94	1.65%	0.93	1.65%	0.93	1.65%	0.92	1.65%
^{242m} Am / ²³⁹ Pu	0.86	1.93%	1.02	5.74%	0.82	2.23%	0.96	2.23%	0.82	2.22%	0.94	2.23%	1.01	2.24%	0.93	2.23%
²⁴³ Am / ²³⁹ Pu	1.14	2.09%	1.03	5.58%	1.12	1.89%	1.13	1.86%	1.13	1.86%	1.09	1.85%	1.14	1.86%	1.07	1.84%
²⁴⁴ Cm / ²³⁹ Pu	1.05	2.97%	1.00	3.19%	1.17	2.49%	1.18	2.41%	1.18	2.41%	1.11	2.38%	1.21	2.42%	1.09	2.37%
²⁴² Cm / ²³⁹ Pu	0.86	2.16%	1.04	6.39%	0.99	1.59%	0.98	1.56%	1.00	1.56%	0.95	1.55%	1.01	1.56%	0.94	1.55%
²⁴³ Cm / ²³⁹ Pu	0.60	2.23%	0.65	6.04%	0.69	0.34%	0.69	0.30%	0.70	0.30%	0.65	2.10%	1.09	0.47%	0.63	0.27%
²⁴⁵ Cm / ²³⁹ Pu	1.39	8.18%	1.38	10.03%	1.77	1.57%	1.80	1.34%	1.80	1.33%	1.66	8.76%	1.36	1.00%	1.61	1.21%

ANNEXE F : C/E DES RAPPORTS ISOTOPIQUES DE DOUBLON

1) Facteurs de recalage

Facteurs de recalage	DARWIN3 Config 3	DARWIN3 Config 4	DARWIN3 Config 2	DARWIN3 Config 1
	~0.99	/	~0.98	~0.98

2) C/E du ^{148}Nd / ^{238}U

Assemblage Aiguille		TRIPOLI-4®		DARWIN2		DARWIN3 Config 3		DARWIN3 Config 4		DARWIN3 Config 2		DARWIN3 Config 1		DARWIN3 Config 1 (recalé)	
		C/E	σ	C/E	σ	C/E	σ	C/E	σ	C/E	σ	C/E	σ	C/E	σ
FEF	1	1.027	1%	1.040	1%	0.972	0%	0.956	0%	0.962	0%	0.962	0.5%	0.988	0.5%
	2	1.056	1%	1.020	1%	1.004	0%	1.000	0%	0.995	0%	0.995	0.1%	1.022	0.1%
	5	1.120	1%	1.120	1%	1.074	0%	1.081	0%	1.068	0%	1.068	0.0%	1.097	0.0%
	7	1.176	1%	0.940	0%	1.138	1%	1.139	1%	1.133	1%	1.133	0.0%	1.164	0.0%
	9	1.215	1%	0.740	0%	1.144	1%	1.149	1%	1.141	1%	1.141	0.0%	1.173	0.0%
FEG	10	0.853	1%	1.090	1%	0.826	0%	0.851	0%	0.823	0%	0.823	0.5%	0.847	0.5%
	14	0.971	2%	1.160	1%	0.931	0%	0.949	0%	0.930	0%	0.930	0.5%	0.956	0.5%
	16	1.045	2%	1.040	1%	0.962	1%	0.976	1%	0.961	1%	0.961	0.0%	0.988	0.0%
	18	1.106	2%	0.870	1%	0.906	1%	0.917	1%	0.905	1%	0.905	0.0%	0.930	0.0%

3) C/E des autres rapports isotopiques

FEG, aiguille 14	TRIPOLI-4®		DARWIN3 Config 1		DARWIN3 Config 1 Recalé (assemblage)		DARWIN3 Config 1 Recalé (aiguille)	
	C/E	σ	C/E	σ	C/E	σ	C/E	σ

$^{148}\text{Nd} / ^{238}\text{U}$	0.97	2%	0.93	0%	0.96	0%	1.03	0%
$^{239}\text{Pu} / ^{238}\text{U}$	0.95	2%	0.95	1%	0.96	1%	1.01	1%
$^{234}\text{U} / ^{238}\text{U}$	1.04	11%	1.05	11%	1.05	11%	1.04	11%
$^{235}\text{U} / ^{238}\text{U}$	0.97	1%	0.98	1%	0.98	1%	0.96	1%
$^{236}\text{U} / ^{238}\text{U}$	1.18	2%	1.16	5%	1.17	5%	1.19	6%
$^{238}\text{Pu} / ^{239}\text{Pu}$	0.72	9%	0.61	10%	0.63	10%	0.67	11%
$^{240}\text{Pu} / ^{239}\text{Pu}$	1.29	3%	1.20	5%	1.22	5%	1.29	5%
$^{241}\text{Pu} / ^{239}\text{Pu}$	1.61	37%	0.90	7%	0.93	7%	1.04	7%
$^{242}\text{Pu} / ^{239}\text{Pu}$	0.34	52%	0.16	15%	0.17	15%	0.20	15%

Moyenne sur l'ensemble des aiguilles	TRIPOLI-4®		DARWIN2		DARWIN3 Config 3		DARWIN3 Config 4		DARWIN3 Config 2	
	C/E	σ	C/E	σ	C/E	σ	C/E	σ	C/E	σ
$^{234}\text{U} / ^{238}\text{U}$	0.93	43%	1.05	15%	0.95	43%	0.95	43%	0.93	43%
$^{235}\text{U} / ^{238}\text{U}$	0.96	2%	1.00	2%	0.98	3%	1.00	3%	0.98	4%
$^{236}\text{U} / ^{238}\text{U}$	1.12	8%	1.08	7%	1.09	13%	1.08	11%	1.10	13%
$^{239}\text{Pu} / ^{238}\text{U}$	0.98	7%	0.98	6%	0.93	6%	0.97	6%	0.93	6%
$^{238}\text{Pu} / ^{239}\text{Pu}$	1.20	78%	1.31	113%	1.14	78%	0.92	71%	1.12	76%
$^{240}\text{Pu} / ^{239}\text{Pu}$	1.21	15%	0.97	5%	1.14	12%	0.92	11%	1.14	12%
$^{241}\text{Pu} / ^{239}\text{Pu}$	1.61	90%	0.76	19%	1.25	26%	0.70	23%	1.07	29%
$^{242}\text{Pu} / ^{239}\text{Pu}$	0.56	73%	0.26	27%	0.46	58%	0.24	46%	0.40	55%
$^{148}\text{Nd} / ^{238}\text{U}$	1.06	13%	1.00	14%	1.00	1%	1.00	1%	0.99	1%

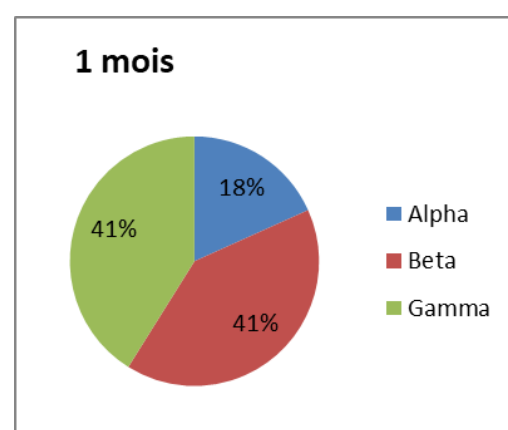
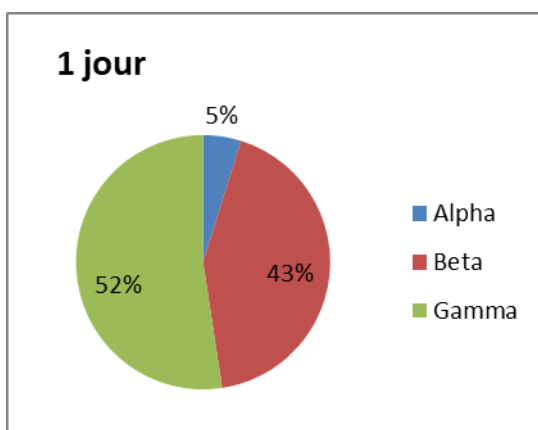
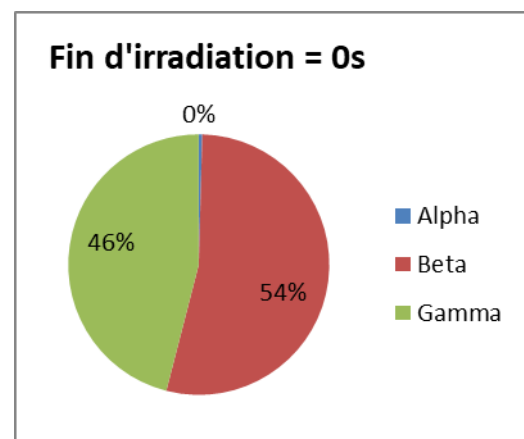
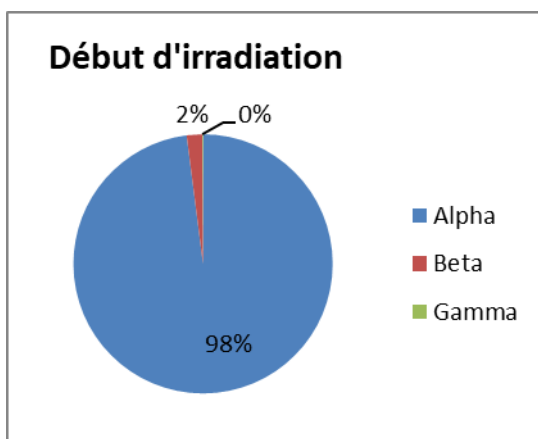
ANNEXE G : CONTRIBUTEURS A LA PUISSANCE RESIDUELLE

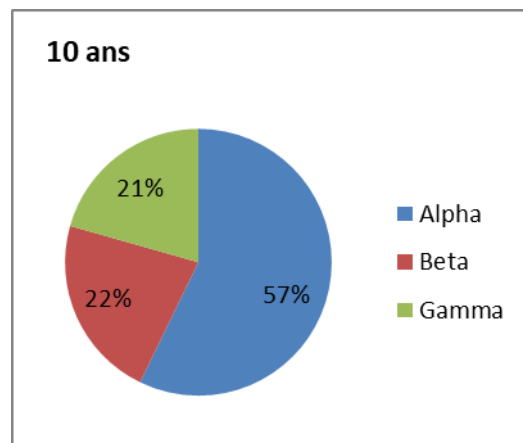
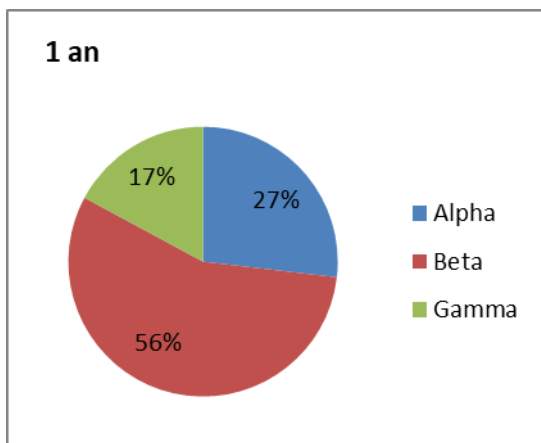
Annexe G.1 : Expérience PUIREX 2008, calculs DARWIN2

Ces calculs ont été effectués grâce au formulaire DARWIN2 pour l'expérience de mesure de la puissance résiduelle ayant eu lieu dans PHENIX en 2008 (expérience PUIREX 2008).

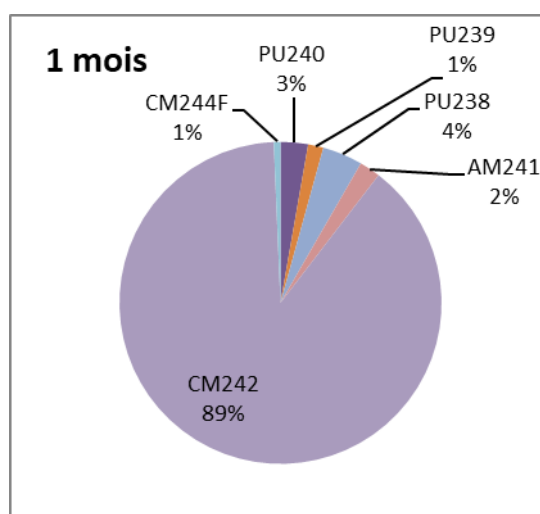
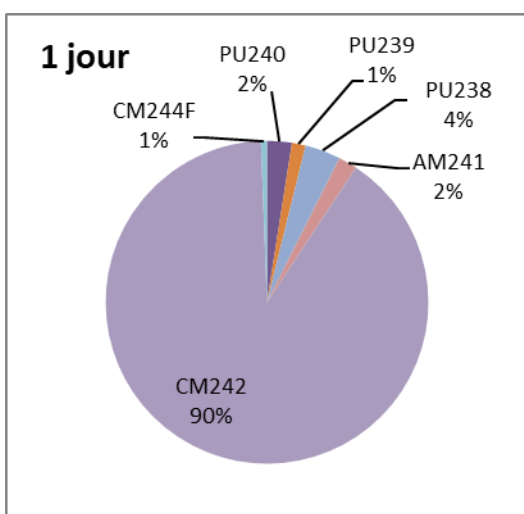
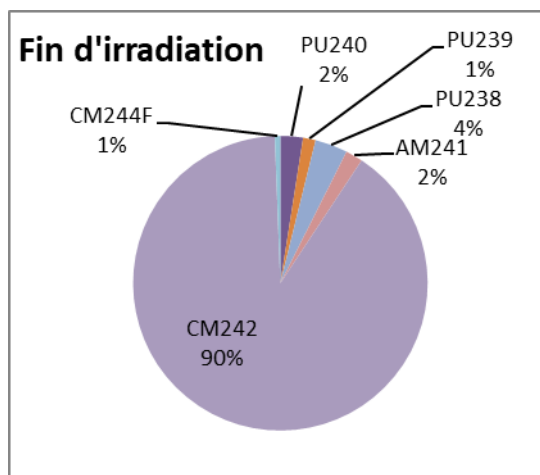
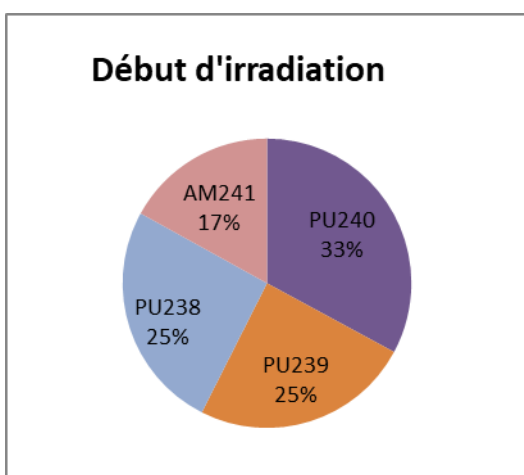
Ils permettent d'avoir les contributeurs à la puissance résiduelle dans un RNR-Na.

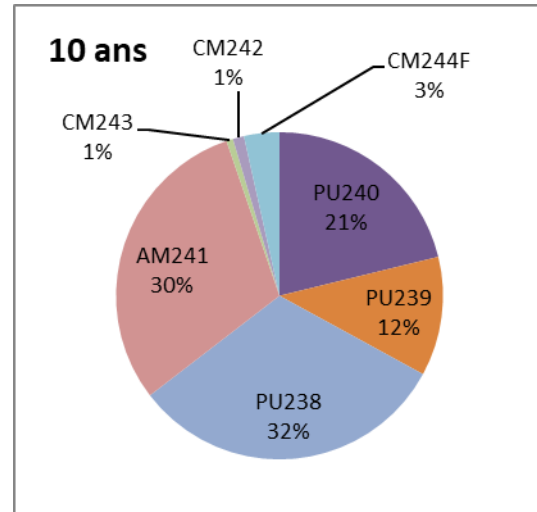
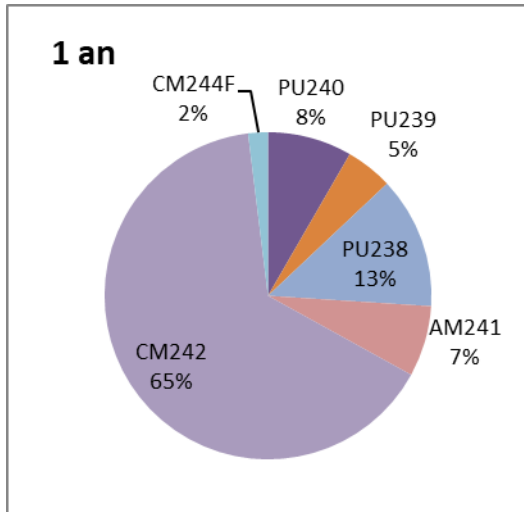
1) Puissance résiduelle totale



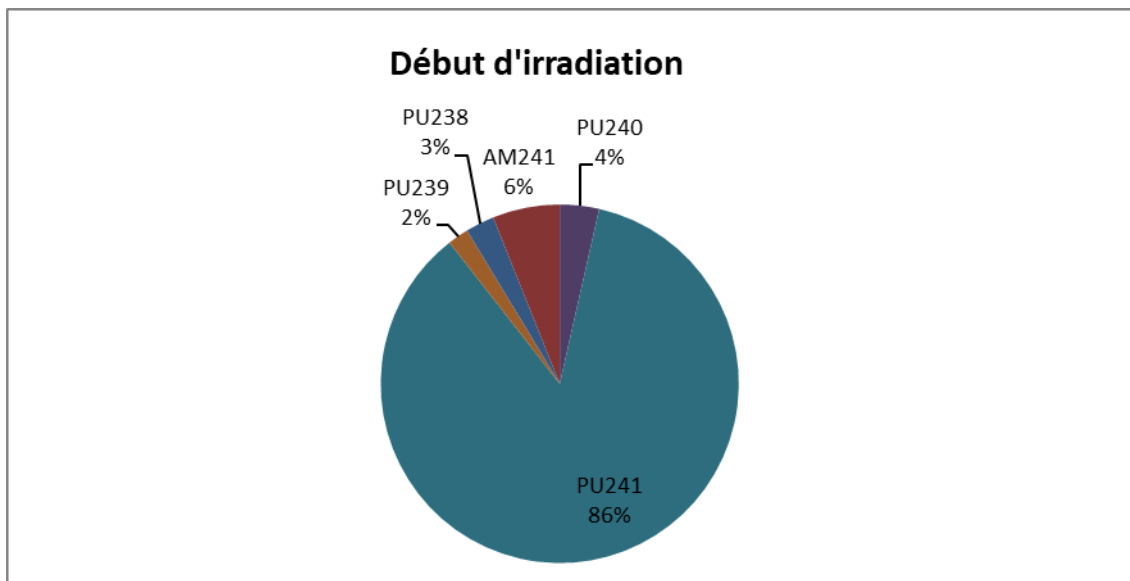


2) Puissance résiduelle due aux émissions α

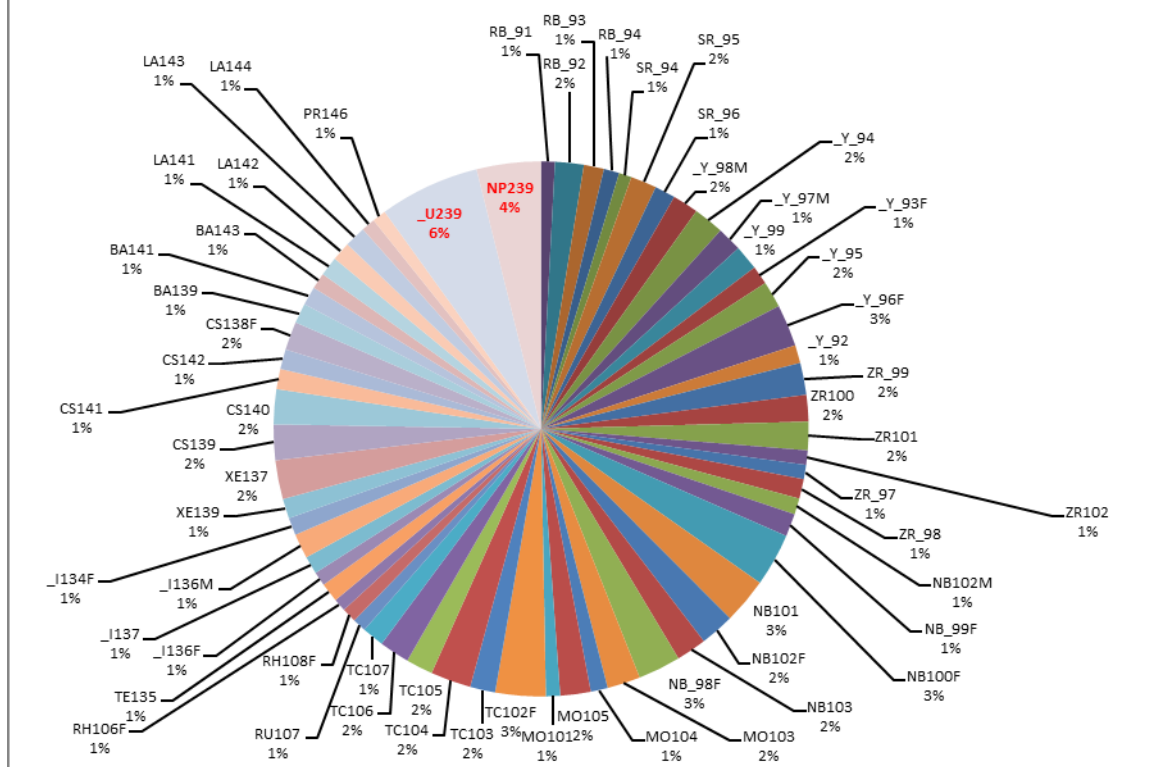




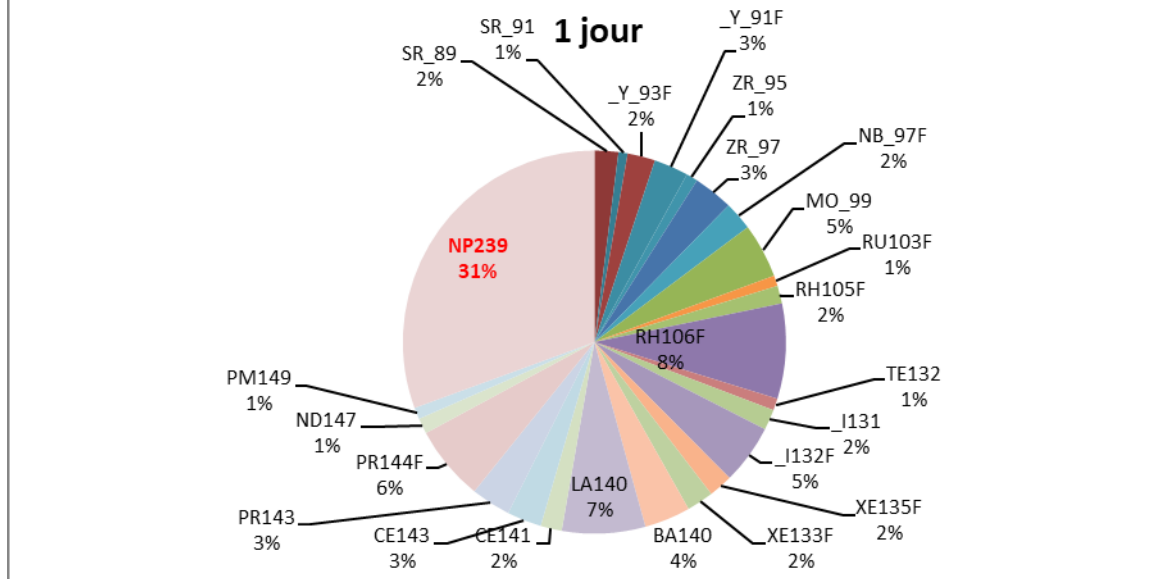
3) Puissance résiduelle due aux émissions β

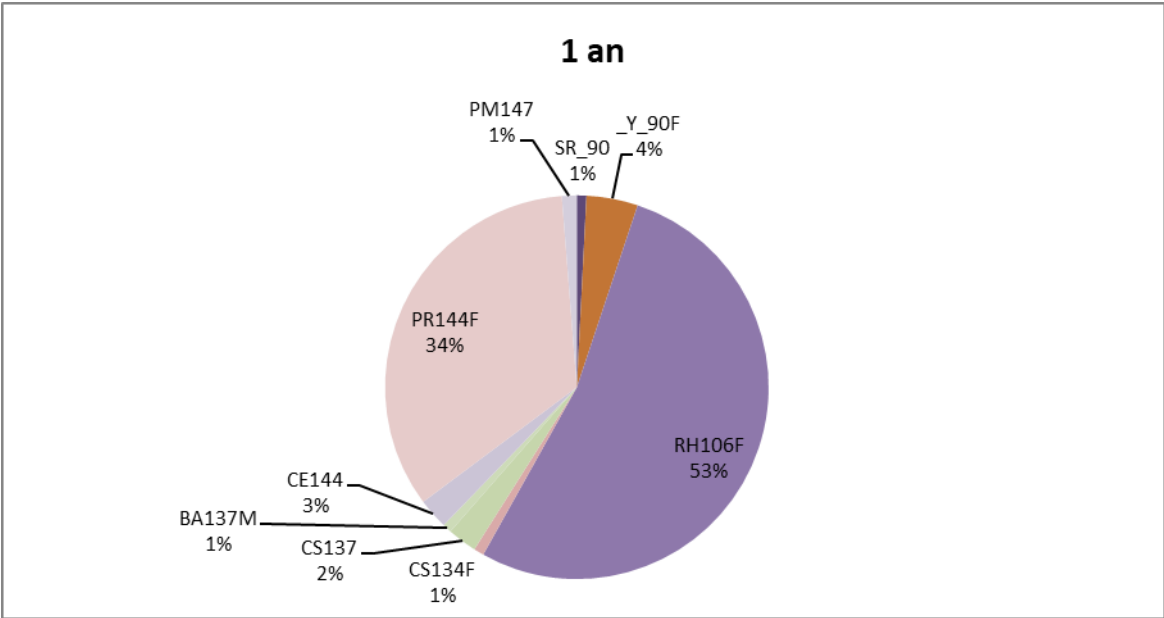
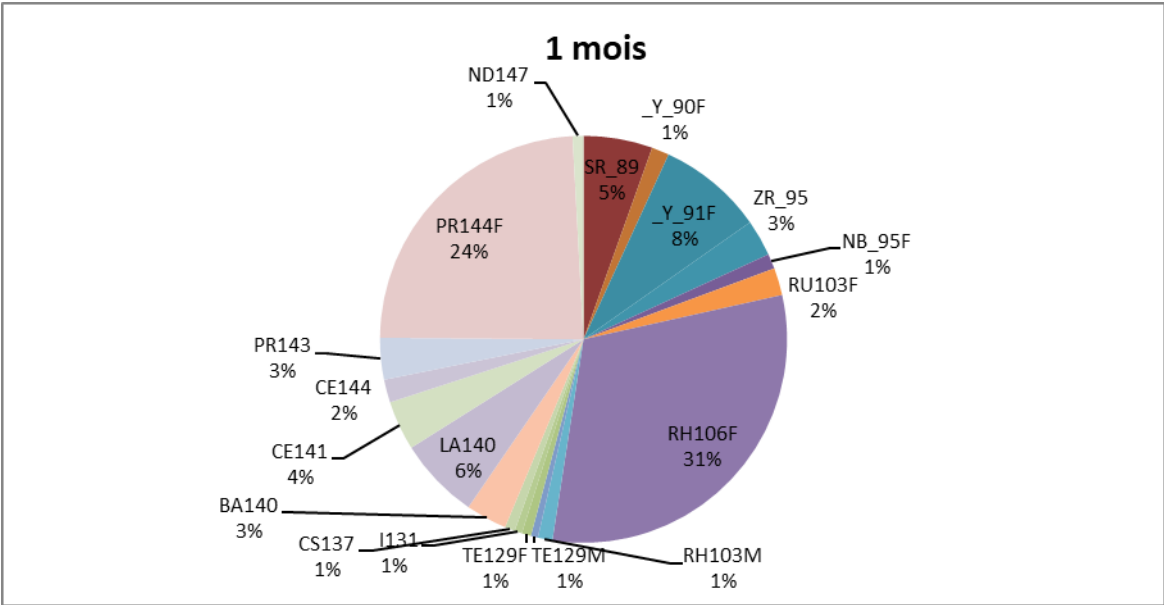


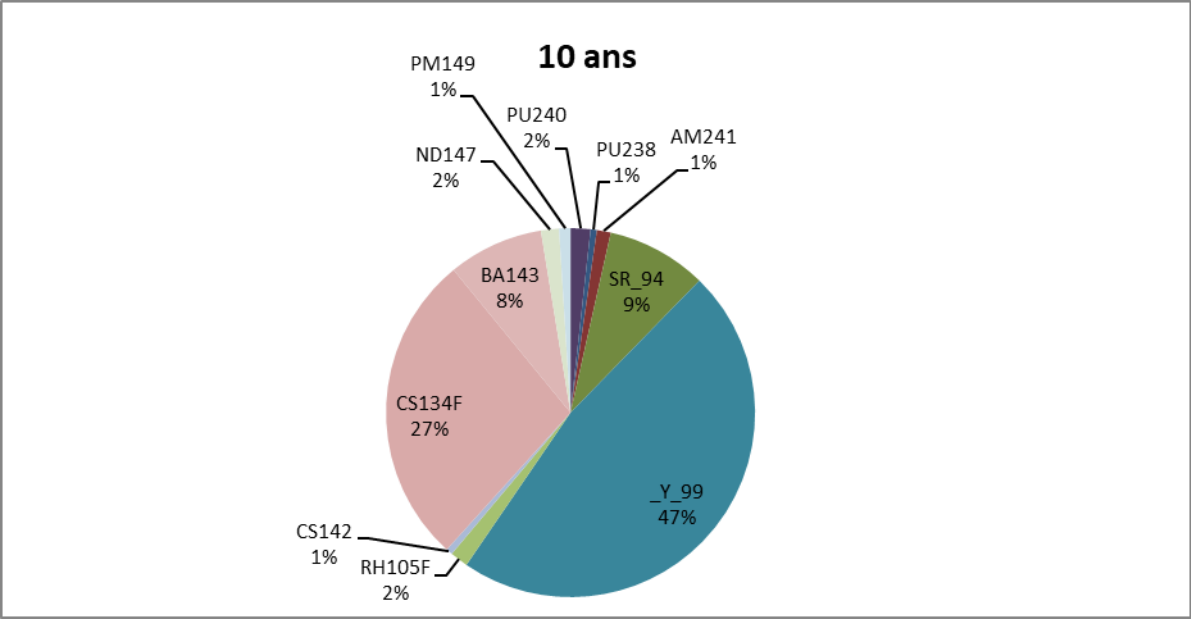
Fin d'irradiation = 0s



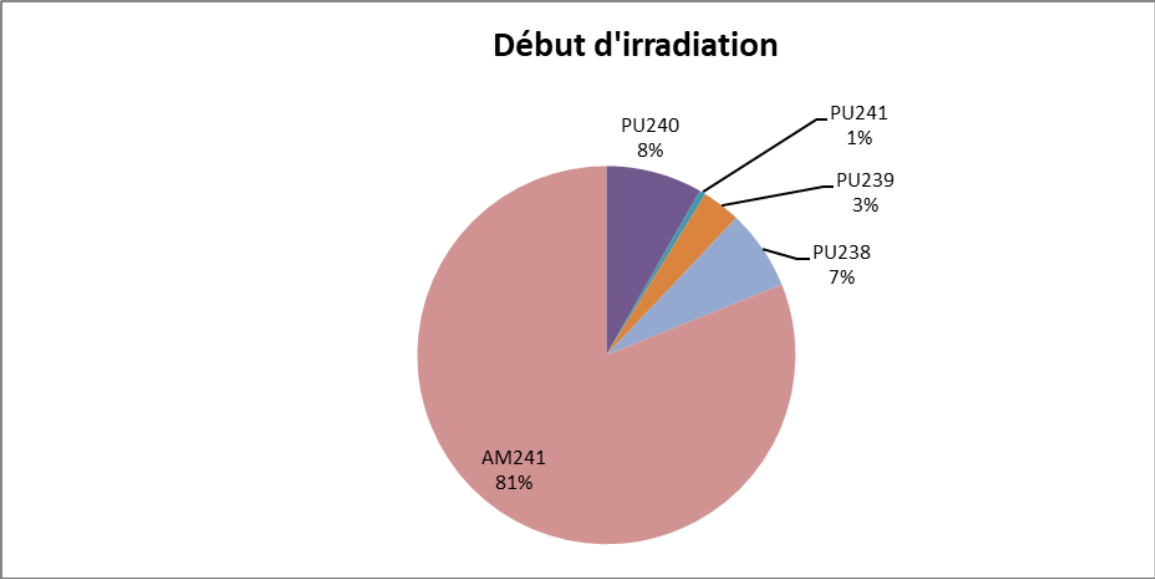
1 jour

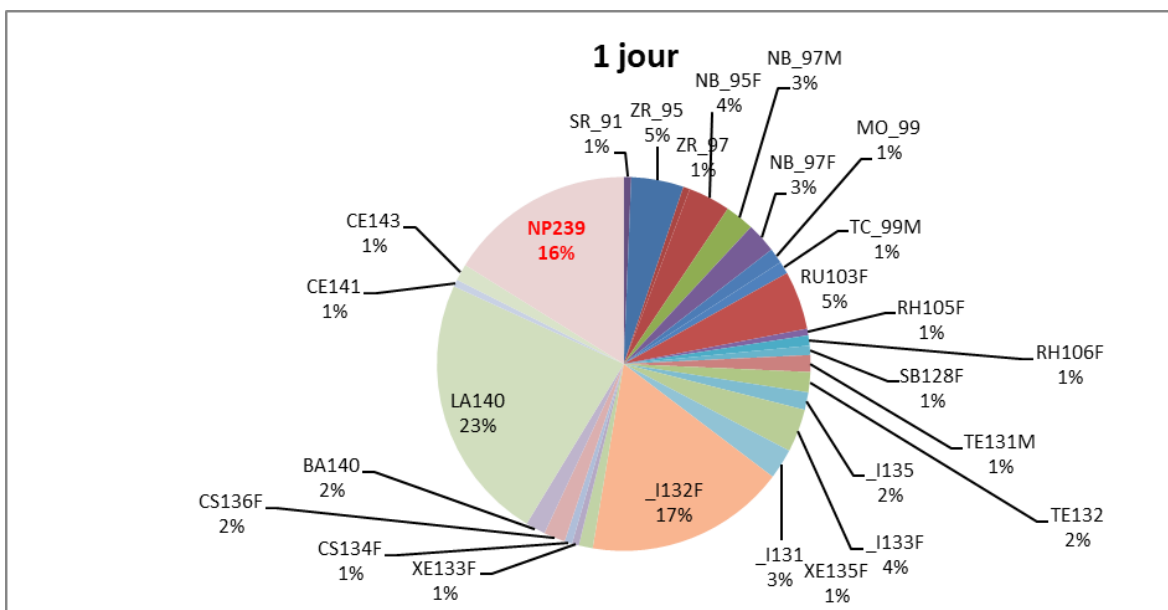
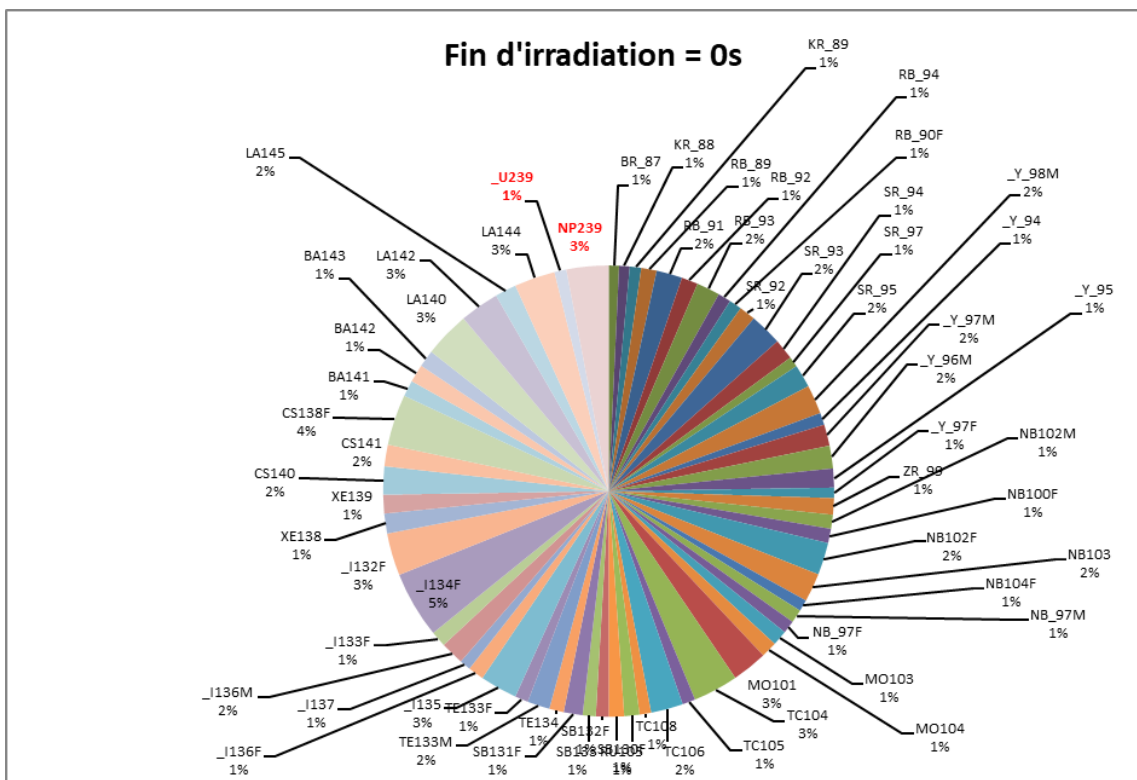




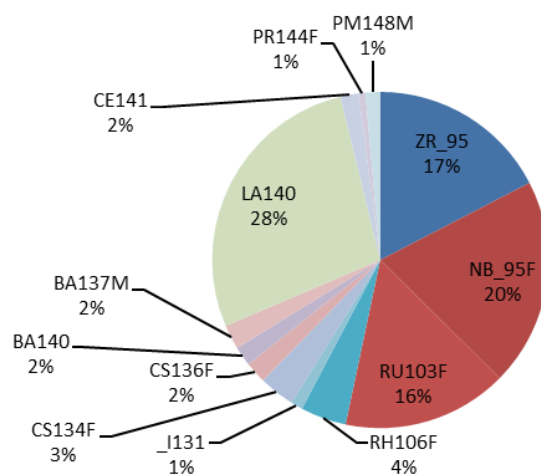


4) Puissance résiduelle due aux émissions γ

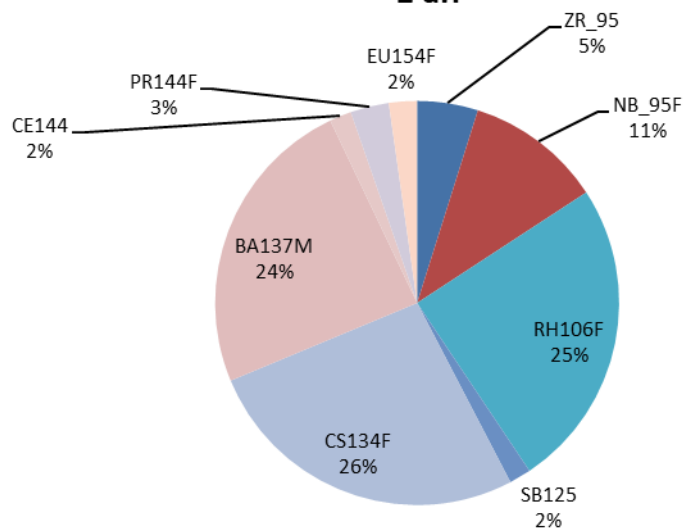




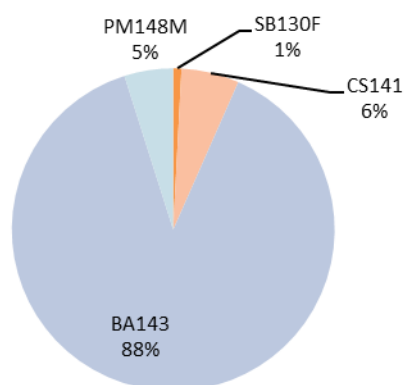
1 mois



1 an

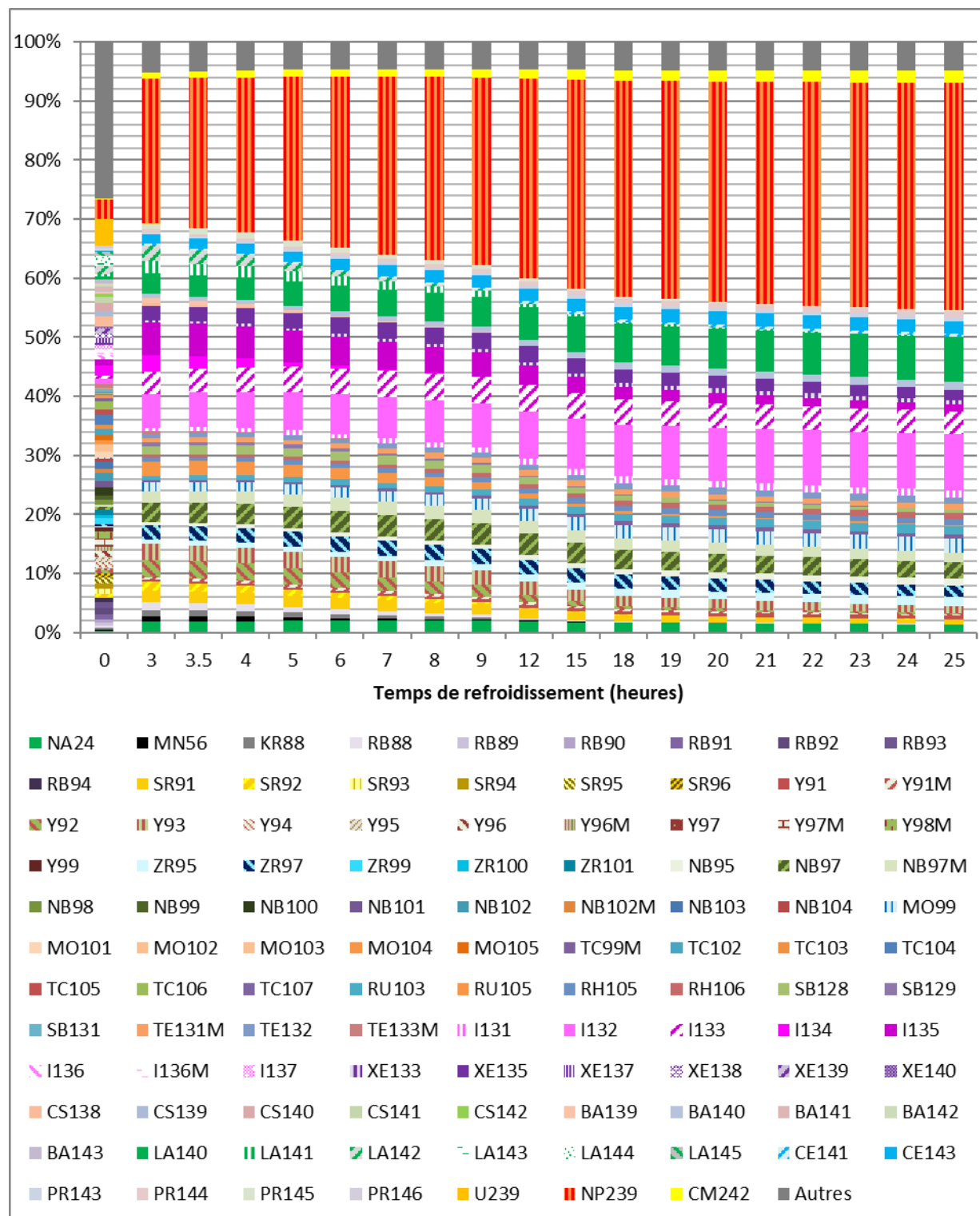


10 ans



Annexe G.2 : Expérience SPX 87, calculs DARWIN3

Ces calculs ont été effectués grâce à l'OCS DARWIN3 pour l'expérience de mesure de la puissance résiduelle ayant eu lieu dans SUPERPHÉNIX en 1987.



ANNEXE H : DISCUSSION SUR LES SECTIONS EFFICACES REPRESENTÉES

I. Sections efficaces multigroupes

Les sections efficaces représentées au chapitre 3 sont des sections efficaces telles que calculées pour les milieux considérés : ce sont les sections efficaces « effectives » calculées à « l'étape réseau ». En effet, à ce stade du calcul on modifie la valeur des sections efficaces de sorte à conserver des taux de réaction.

Plusieurs étapes ont lieu au moment du calcul réseau, notamment :

- L'homogénéisation spatiale, durant laquelle le milieu décrit de façon hétérogène est homogénéisé,
- La condensation, durant laquelle le découpage énergétique à 1760 groupes est condensé à 33 groupes d'énergie,
- Les calculs d'autoprotection³⁵ des noyaux lourds.

Les sections efficaces générées à cette étape sont des **sections efficaces multigroupes**.

Ces sections sont définies de telle sorte que pour chaque groupe g , le taux de réaction multigroupe soit égal à la valeur intégrée sur le groupe g du taux de réaction « ponctuel ». Ainsi, pour chaque groupe g , sont conservés le nombre de réactions observées entre un neutron et un noyau par unité de temps et de volume, ce qui est assuré par l'équation H.1.

La valeur moyenne sur chaque groupe g de ces sections efficaces est obtenue en pondérant sur le groupe g la section efficace ponctuelle par un flux de pondération ϕ_w « représentatif » du spectre neutronique du système nucléaire à modéliser.

La section efficace du groupe g se calcule de la façon suivante :

$$\sigma_g = \frac{\int_g \sigma(E) \phi_w(E) dE}{\int_g \phi_w(E) dE}$$

Equation H.1 : Calcul de la section efficace condensée du groupe g

Ces sections sont indépendantes de l'espace et sont calculées une fois pour toute, lors de la création des bibliothèques multigroupes.

³⁵ L'autoprotection est un phénomène physique qui se caractérise par une chute du flux en regard d'une importante section efficace de capture. Les taux de réactions, qui sont le produit du flux neutronique et des sections efficaces macroscopiques, subissent des variations plus lentes que le flux et les sections. Cette compensation des effets est l'autoprotection.

Cependant, le spectre de pondération ϕ_w n'est pas connu en amont dans le cas d'un milieu précis avec une géométrie définie. Le flux réel est ainsi utilisé et permet d'obtenir des **sections efficaces multigroupes autoprotégées**.

De plus, les sections efficaces varient avec la température du milieu. En effet, lorsque la température du milieu augmente, les noyaux du milieu ont une certaine **agitation thermique**. Cette agitation thermique est perçue par les neutrons comme un élargissement des résonances (voir Figure H.1).

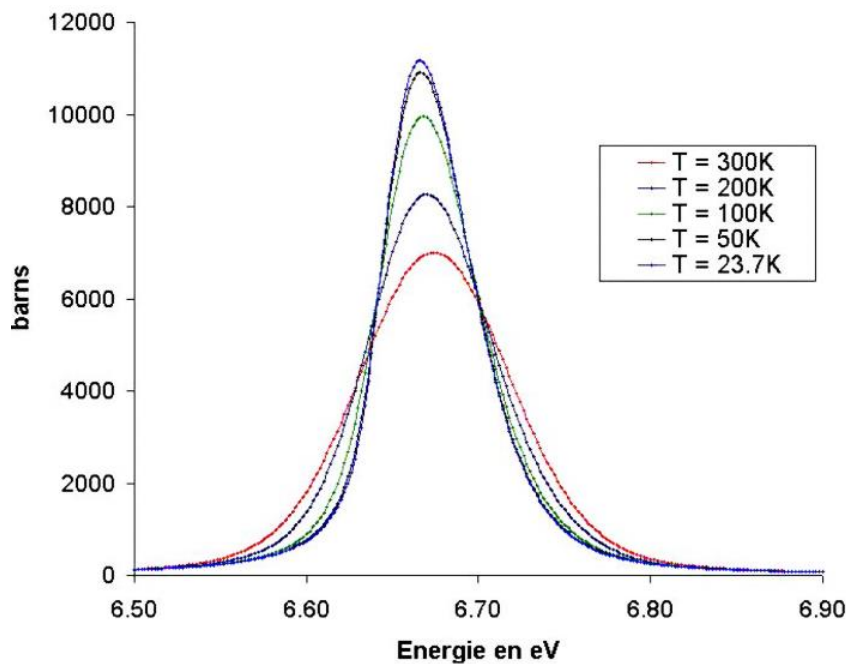


Figure H.1 : Section efficace de capture de l'uranium 238 à différentes températures (résonance à 6,67 eV)

Ainsi, en fonction des différentes modélisations choisies, les sections efficaces effectives calculées seront différentes.

Cet effet s'observe notamment sur la section efficace de capture du ^{240}Pu autour de 1 eV.

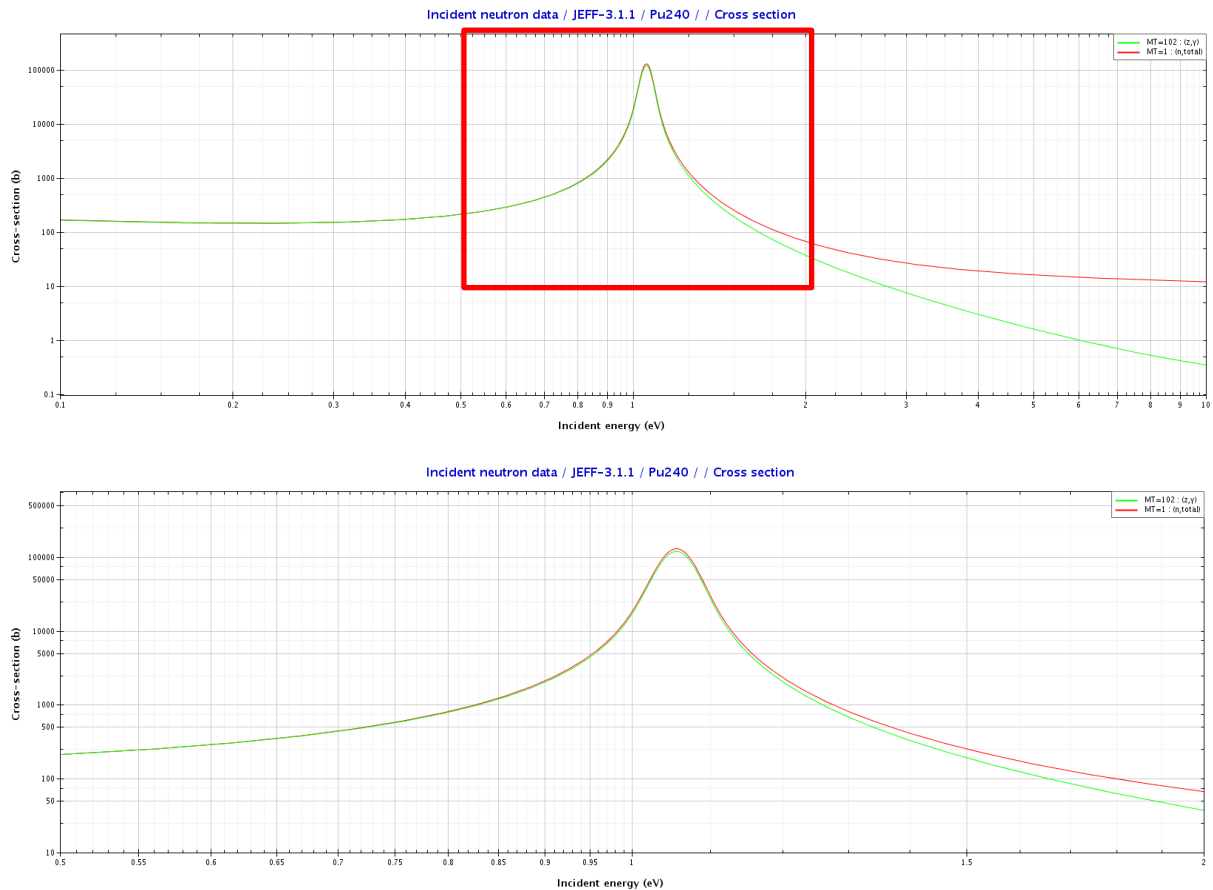


Figure H.2 : Section totale et de capture du ^{240}Pu avec JEFF-3.1.1 autour de 1 eV

On remarque qu'avec JEFF-3.1.1, le ^{240}Pu présente une résonance autour de 1 eV (Figure H.2). C'est également le cas avec JEFF-3.2 (Figure H.3).³⁶

Ainsi, autour de 1 eV, la section de capture du ^{240}Pu sera impactée par la température et les phénomènes d'autoprotection. Lors de la mise en 1760, puis 33 groupes, le flux de condensation impactera ainsi grandement la section efficace « apparente » utilisée dans les codes neutroniques.

³⁶ Ces figures sont issues de JANIS (Janis, OECD)

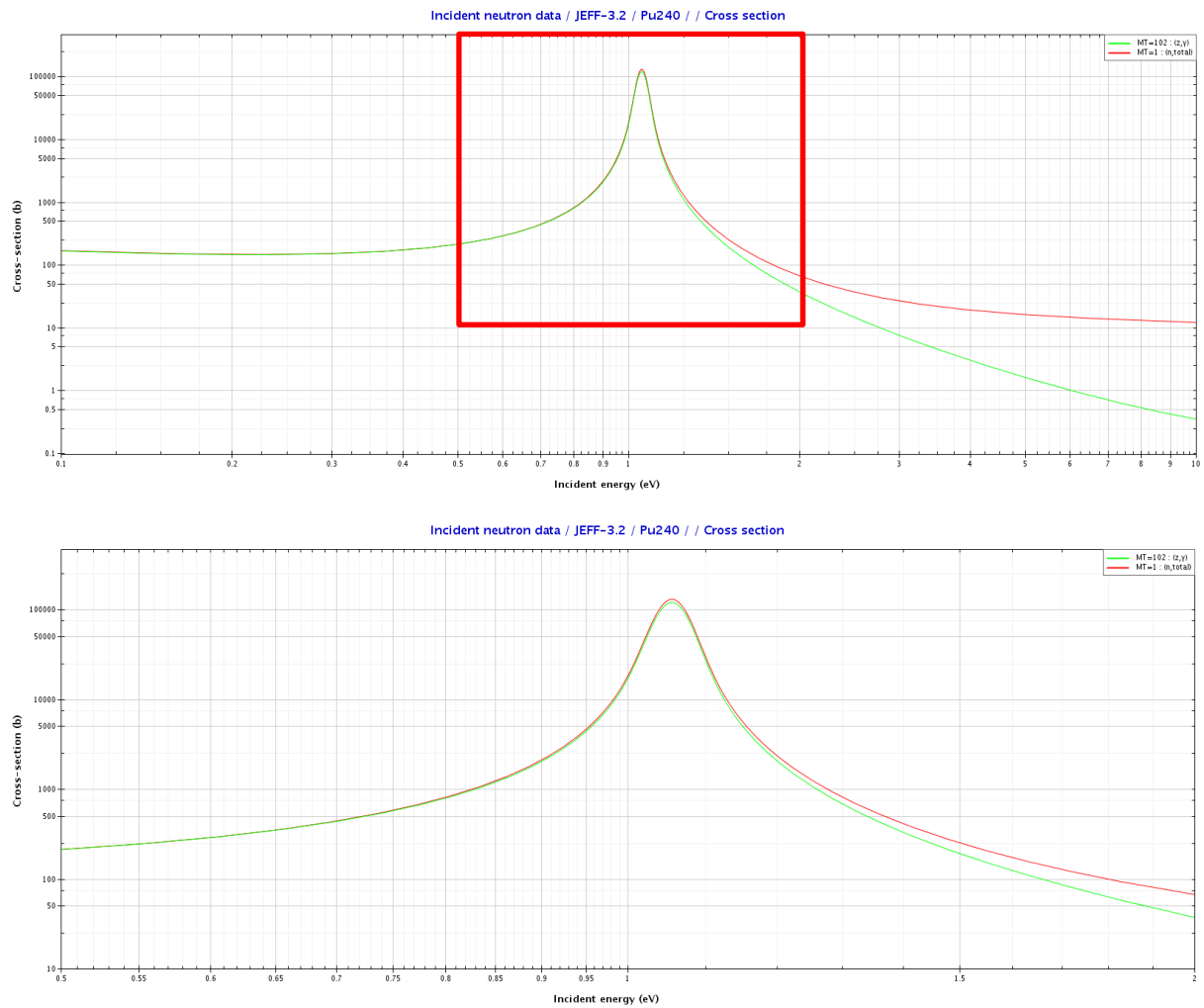


Figure H.3 : Section totale et de capture du ^{240}Pu avec JEFF-3.2 autour de 1 eV

II. Impact des paramètres de modélisation sur la section efficace multigroupe du ^{240}Pu autour de 1eV (calcul cœur)

Les sections efficaces « effectives » sont représentées à la fin de l'irradiation.

II.1 Impact de l'évolution sur la section efficace « effective » de capture du ^{240}Pu

Formulaire		Température de modélisation	Chaîne d'évolution	Données nucléaires	Evolution dans notre calcul
DARWIN3	Config 1	20°C	REP	JEFF-3.1.1	<u>Aiguilles TRAPU</u>
DARWIN3	Config 2	20°C	REP	JEFF-3.1.1	<u>Cœur Complet</u>

Tableau H.1 : Extrait du Tableau 9 pour l'impact de l'évolution du cœur

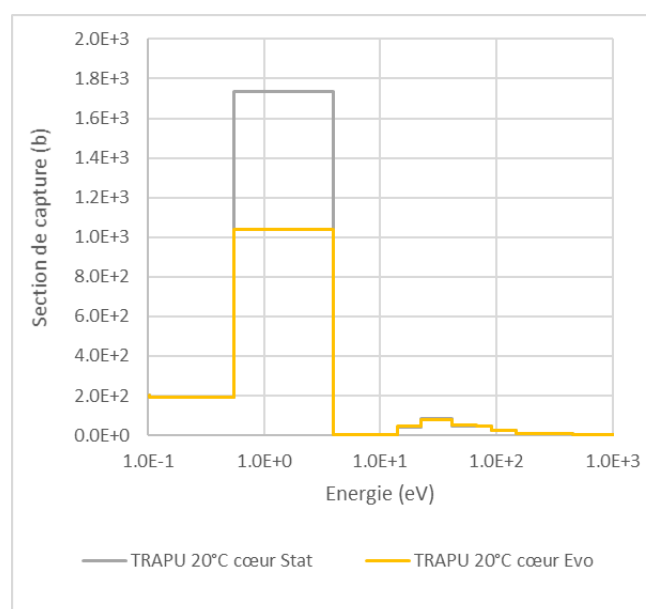


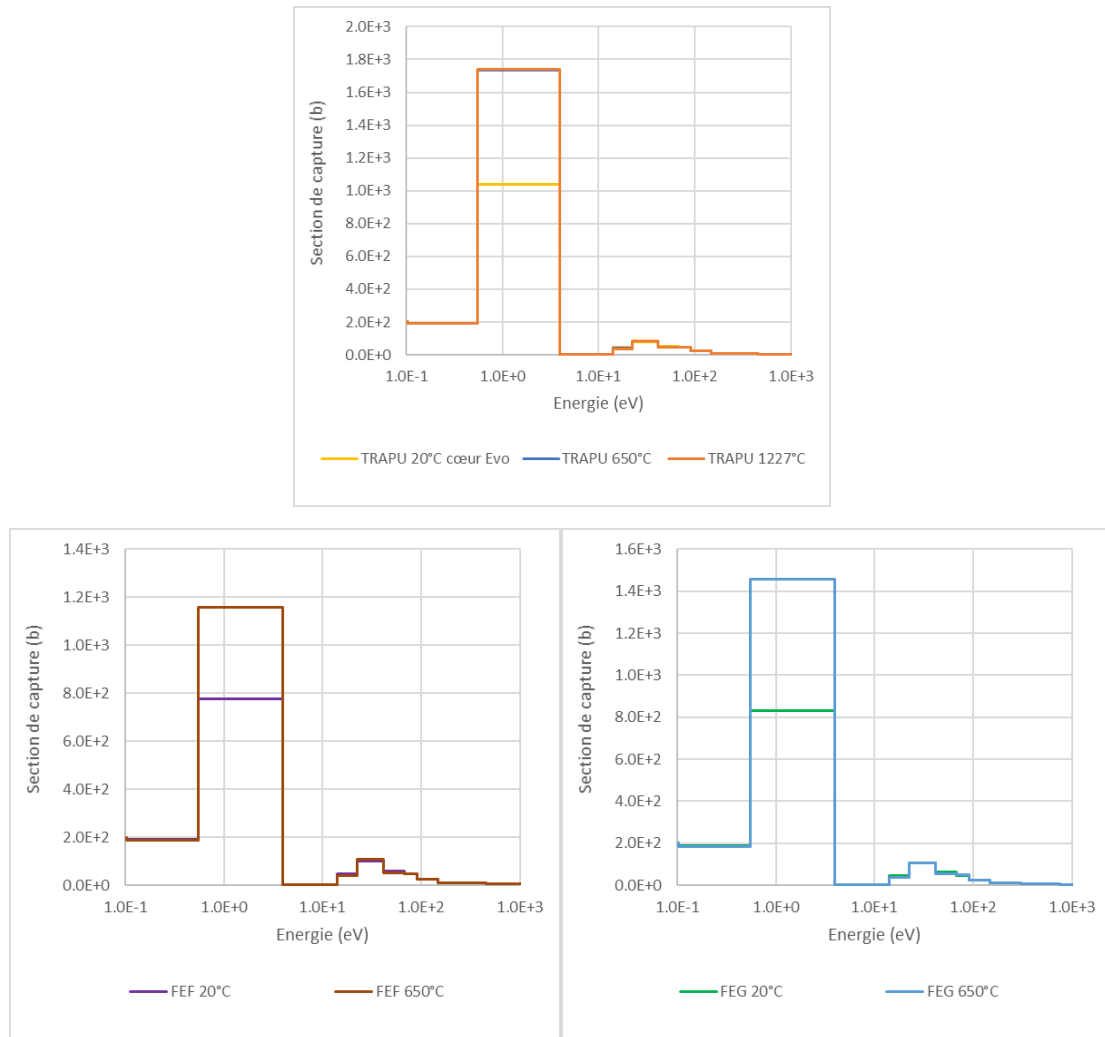
Figure H.4 : Impact de l'évolution du cœur sur la section efficace multigroupe de capture du ^{240}Pu (33 groupes)

Les sections efficaces utilisées sont dépendantes de l'évolution du cœur, au moment du calcul cœur (Figure H.4).

En effet, le cœur n'est considéré « statique » (on ne fait évoluer que les aiguilles TRAPU (configuration 1)) ou « évoluant » (on fait évoluer le cœur complet (configuration 2)) qu'au moment de l'étape de calcul cœur : les sections efficaces utilisées issues de l'étape réseau sont les mêmes.

Ainsi, la prise en compte de l'évolution des milieux alentours impacte les sections efficaces « effectives ».

II.2 Impact de la température sur la section efficace « effective » de capture du ^{240}Pu

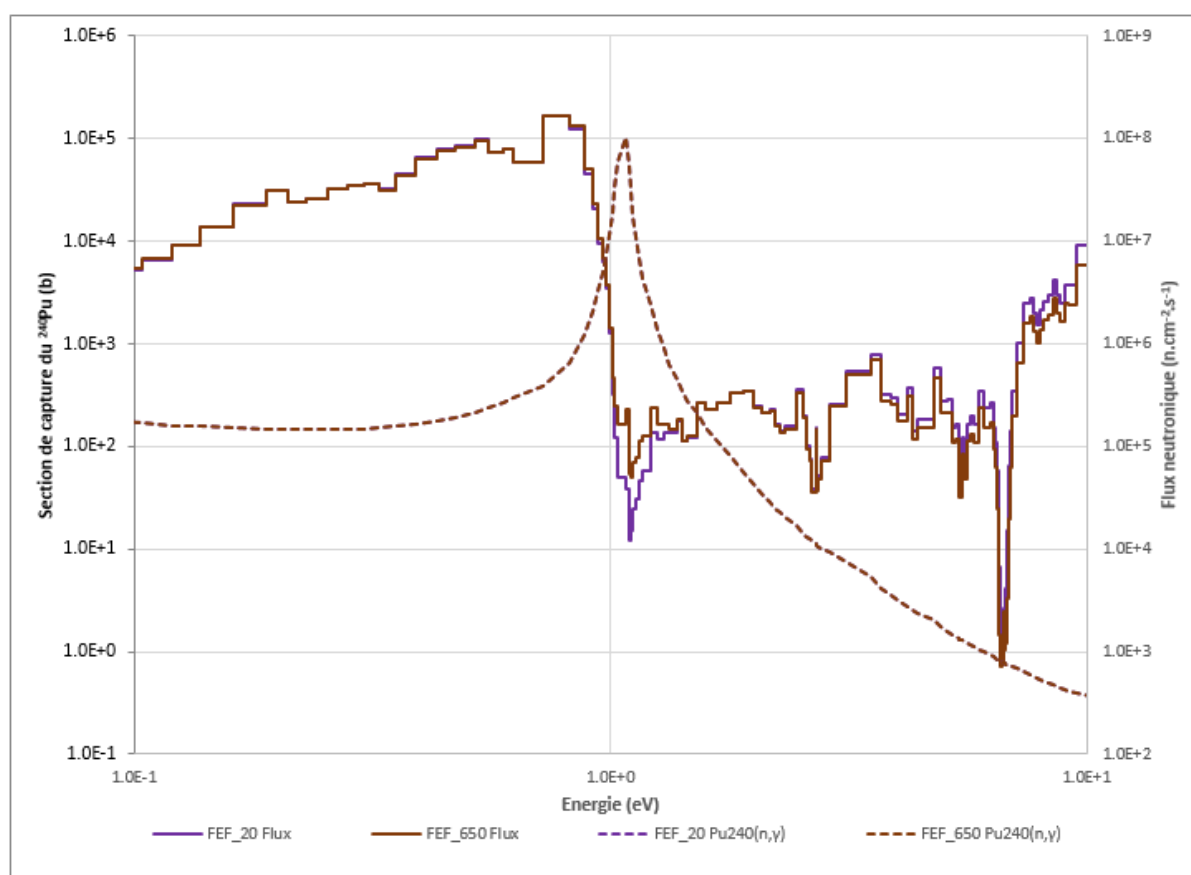
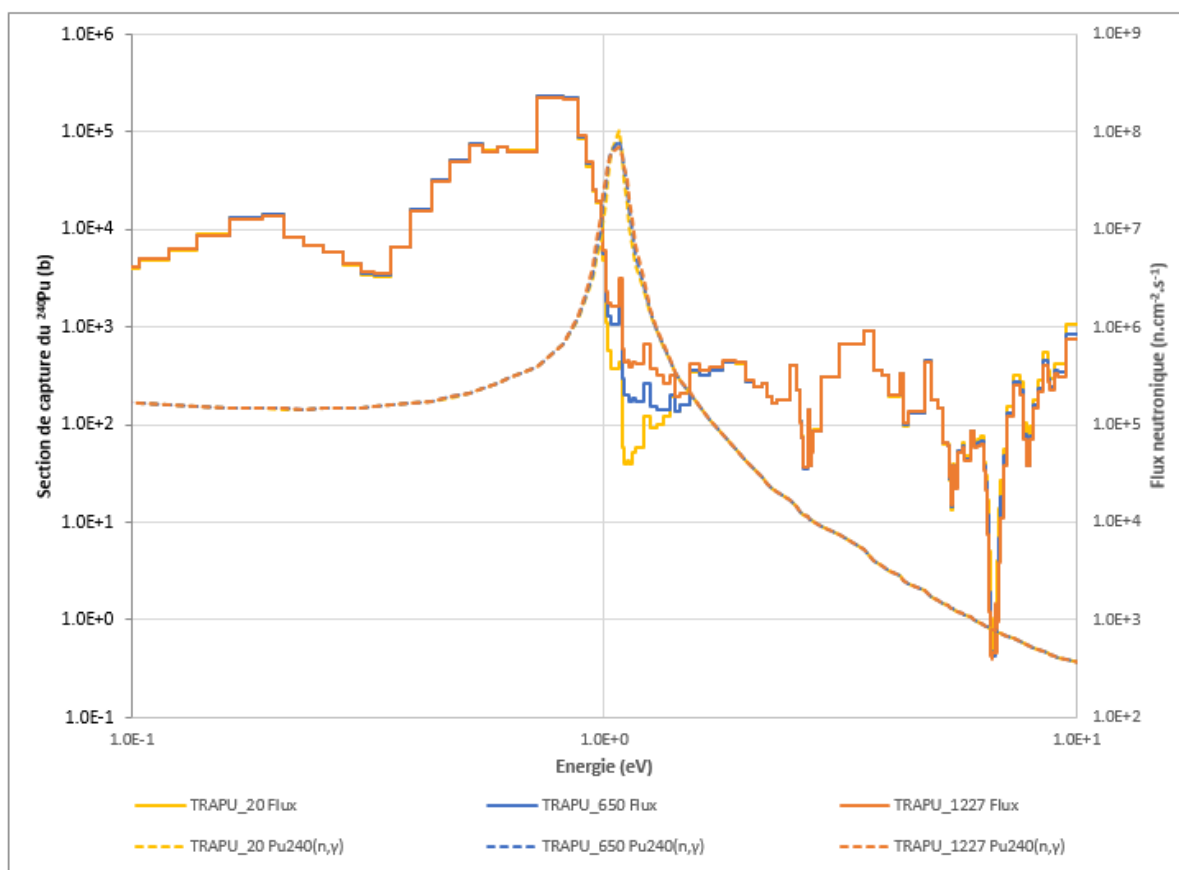


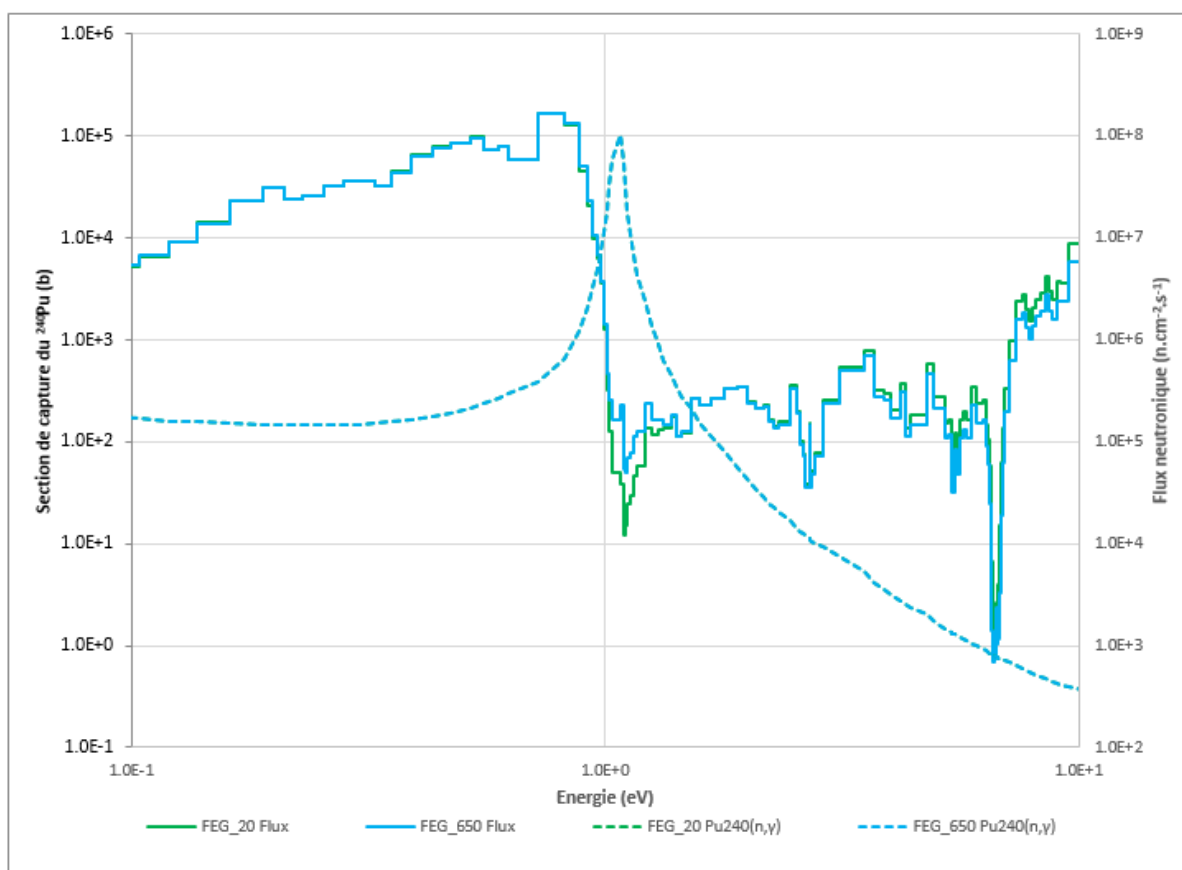
Figures H.5 : Impact de la température sur la section efficace multigroupe de capture du ^{240}Pu (33 groupes, calcul cœur)

On remarque (Figures H.5) que la température impacte les sections efficaces. Plus la température est élevée, plus la section efficace de capture est importante. Ce phénomène s'observe aussi bien dans TRAPU que dans les deux assemblages de DOUBLON, FEF79 et FEG58.

C'est cohérent avec ce que l'on observe au niveau de calcul réseau : les flux à 1760 groupes (Figures H.6) sont plus importants autour de 1eV lorsque la température augmente. La section efficace à 1760 groupes, de son côté, ne varie que très légèrement avec la température au niveau de la résonance à 1eV. Cette variation s'observe très légèrement avec les aiguilles combustibles TRAPU, où la température varie dans nos cas de 20°C à 1227°C, mais est négligeable pour les aiguilles fertiles de FEF et FEG.

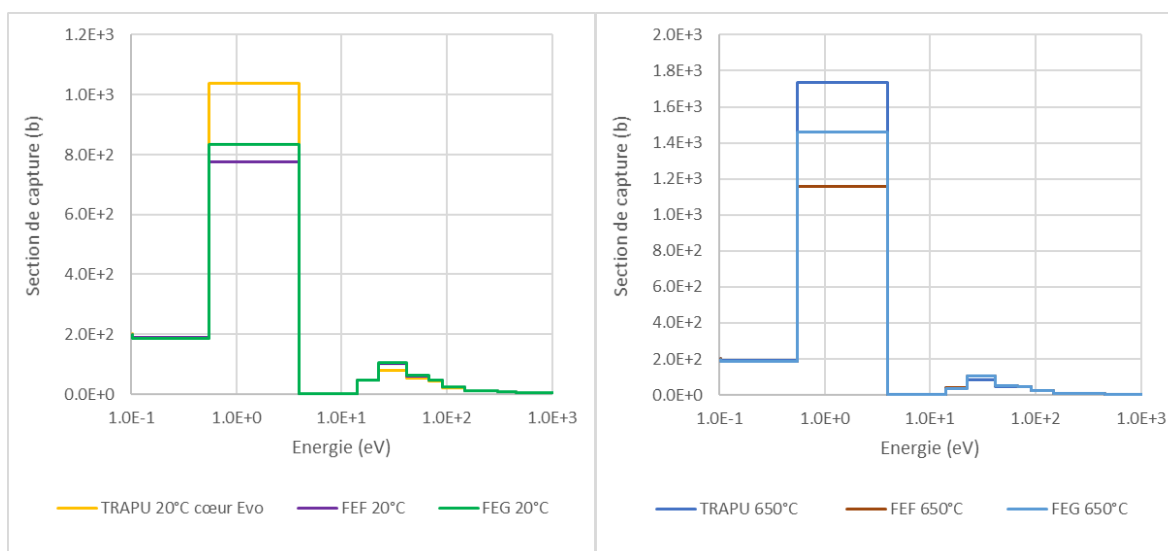
Ainsi, lors de la mise en 33 groupes, les flux neutroniques vont impacter fortement la section efficace effective à 33 groupes, tandis que les sections à 1760 groupes restent très semblables.

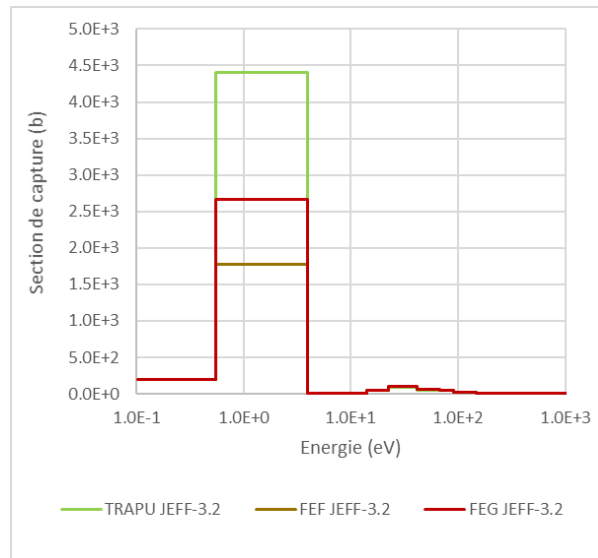




Figures H.6 : Impact de la température sur les flux neutroniques et la section efficace de capture du ^{240}Pu à 1760 groupes (calcul réseau).

II.3 Impact du milieu sur la section efficace « effective » de capture du ^{240}Pu

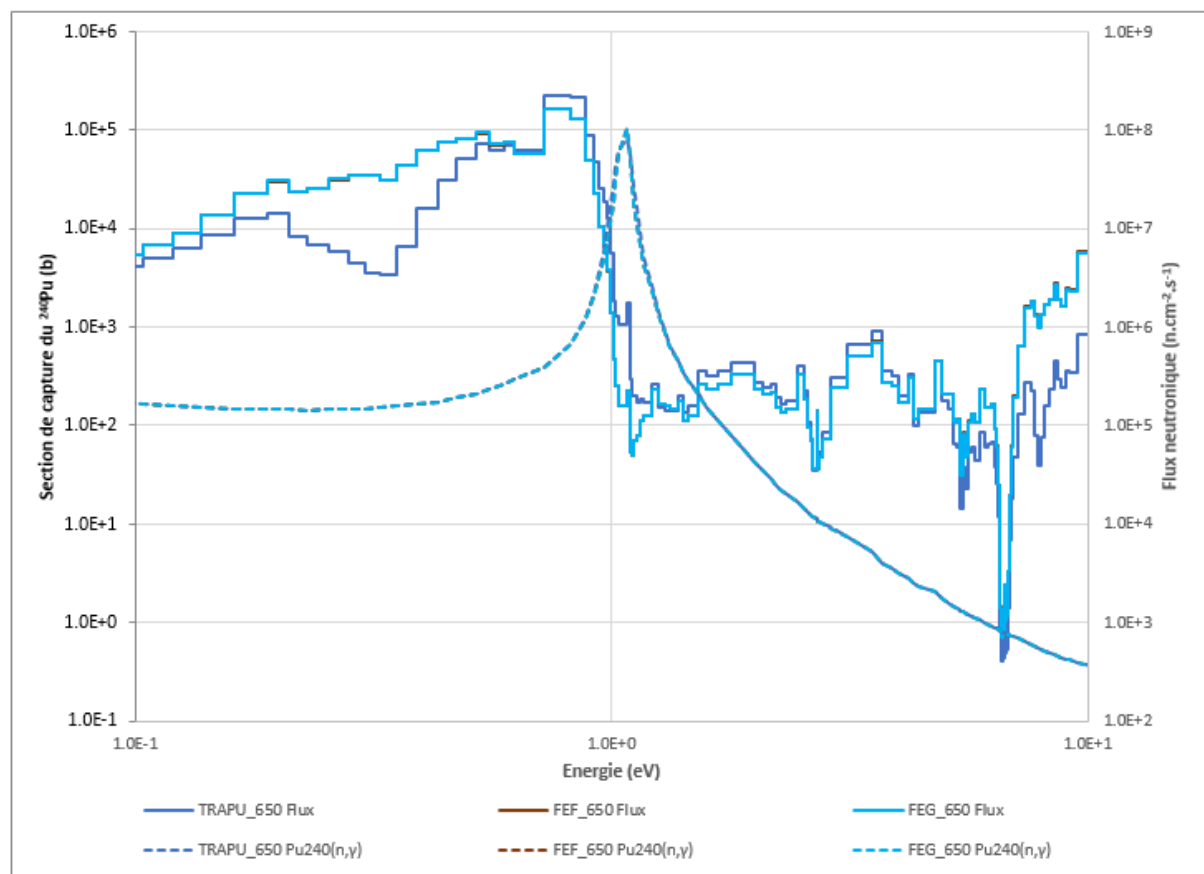
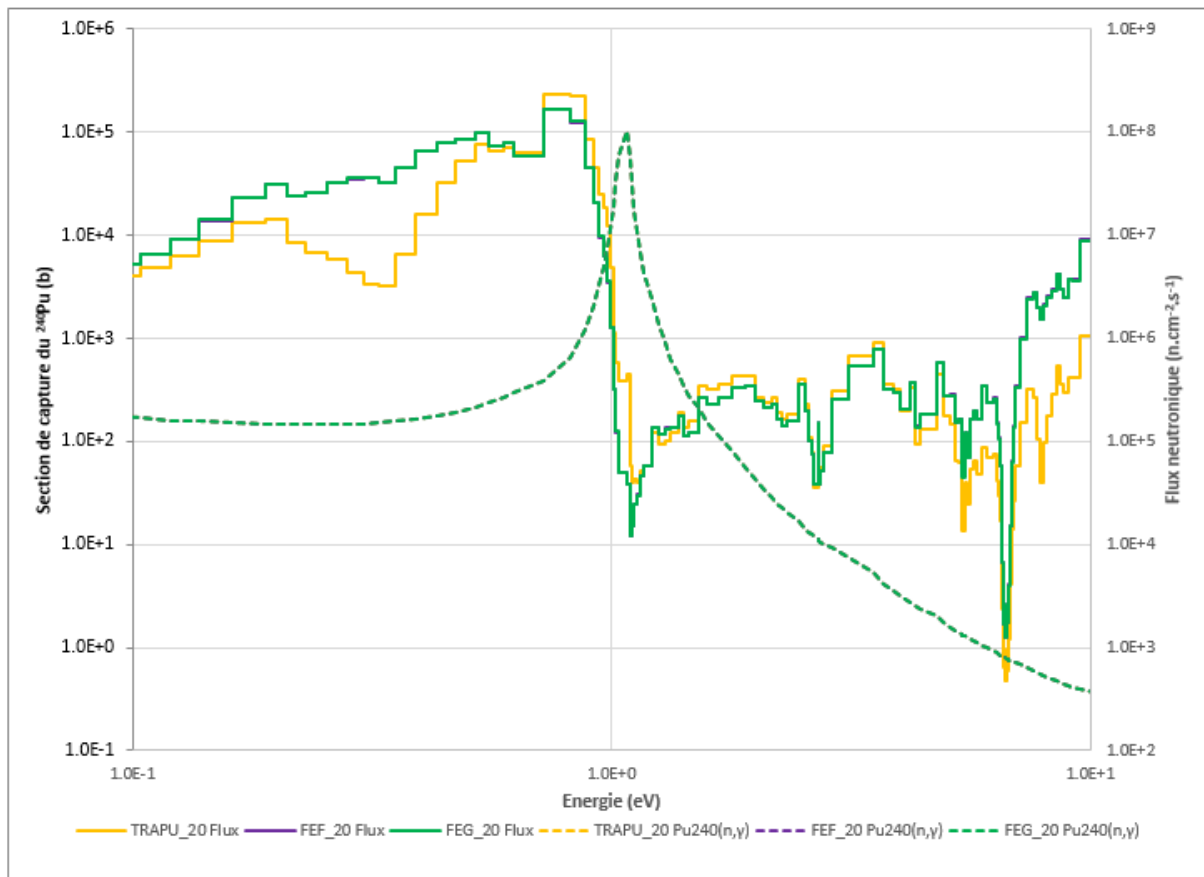


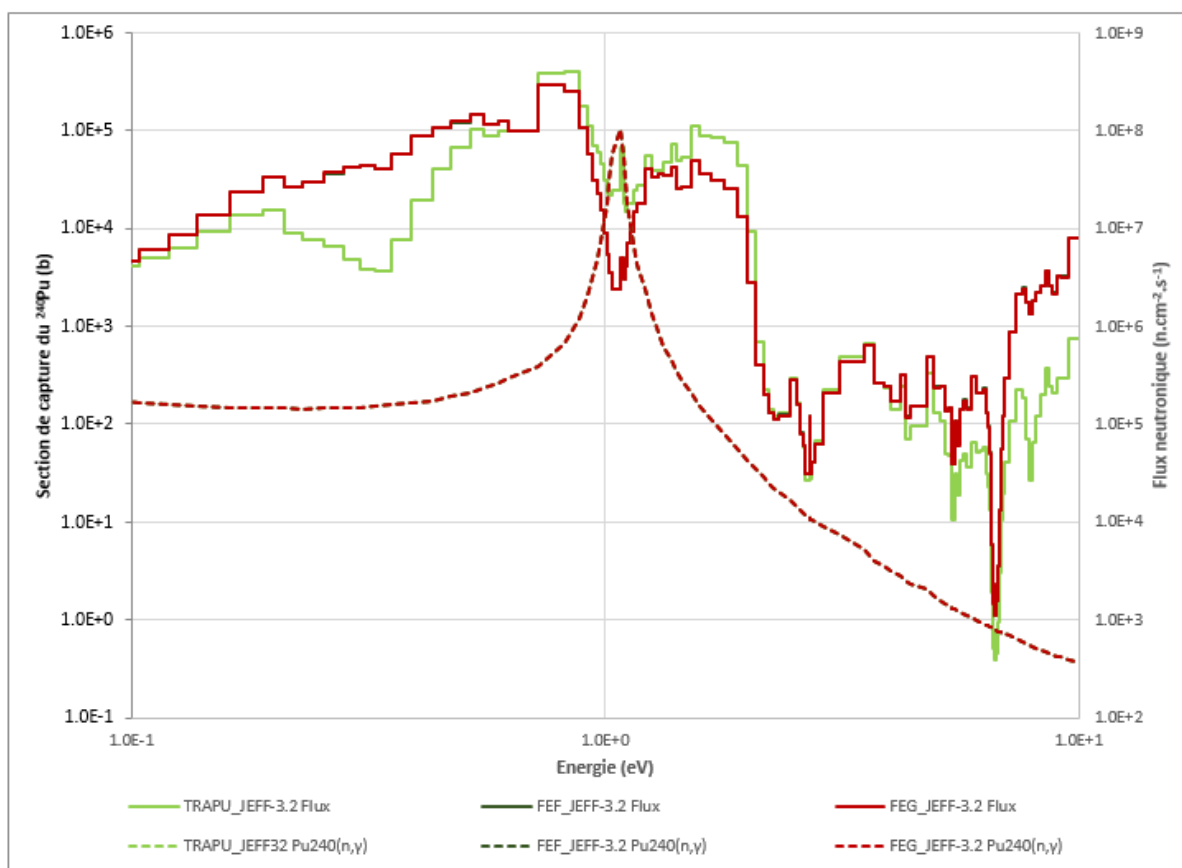


Figures H.7 : Impact du milieu sur la section efficace multigroupe de capture du ^{240}Pu (33 groupes, calcul cœur)

On remarque (Figures H.7) que le milieu impacte les sections efficaces « effectives » : la section efficace « effective » de capture du ^{240}Pu est plus importante avec TRAPU qu'avec DOUBLON. C'est cohérent avec ce que l'on observe au niveau de calcul réseau : les flux à 1760 groupes (Figures H.8) sont plus importants autour de 1eV avec TRAPU qu'avec DOUBLON, tandis que les sections efficaces ne varient quasiment pas. Cependant, les différences observées entre FEF et FEG ne s'expliquent pas par le flux neutronique issu de l'étape réseau : en effet, celui-ci est identique avec FEF et FEG.

Ces différences proviennent ainsi plus probablement de l'étape cœur : du fait de la résonance du ^{240}Pu autour de 1eV, la section apparente à la fin de l'irradiation, à 33 groupes, sera dépendante du flux.





Figures H.8 : Impact du milieu sur les flux neutroniques et la section efficace de capture du ^{240}Pu à 1760 groupes (calcul réseau).

II.4 Impact de la bibliothèque de données nucléaires sur la section efficace de capture du ^{240}Pu

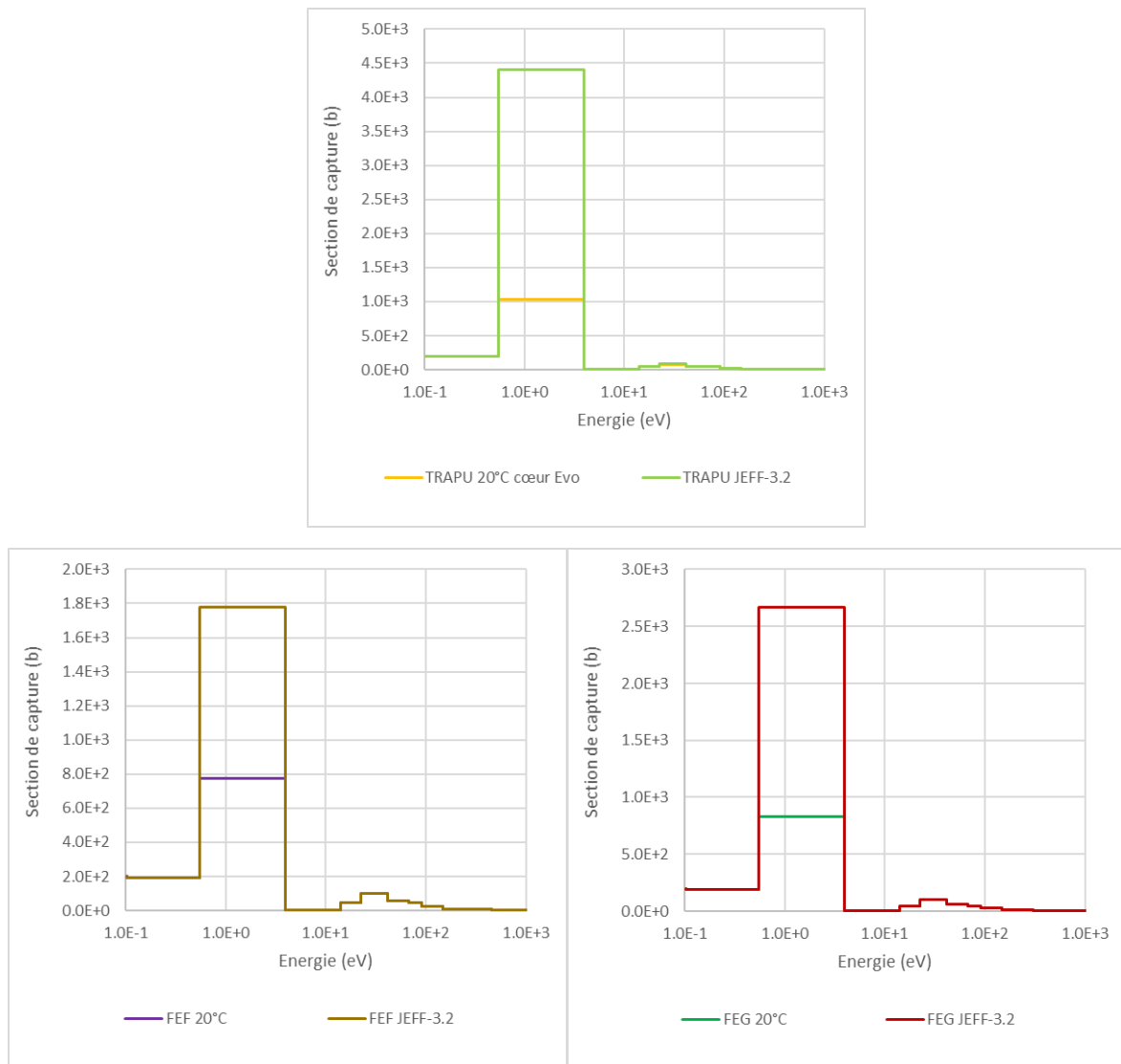
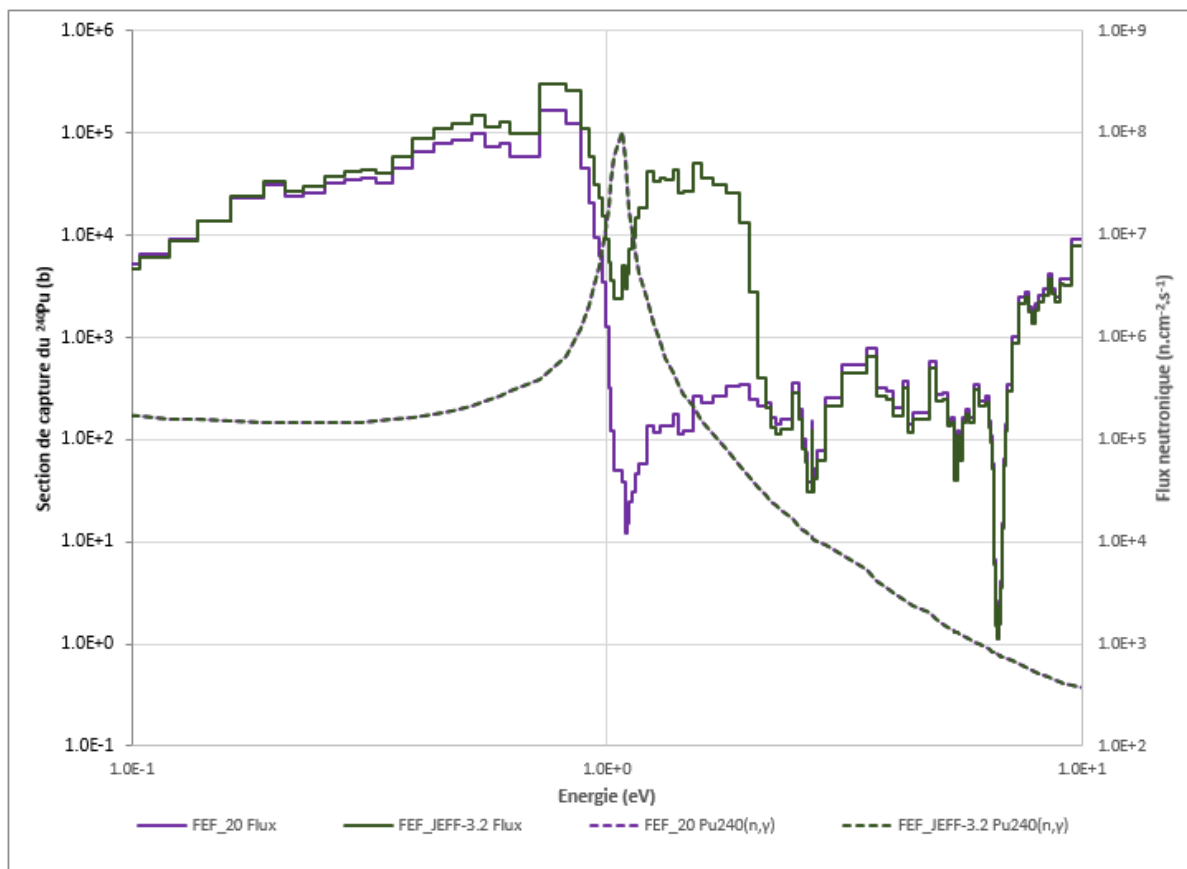
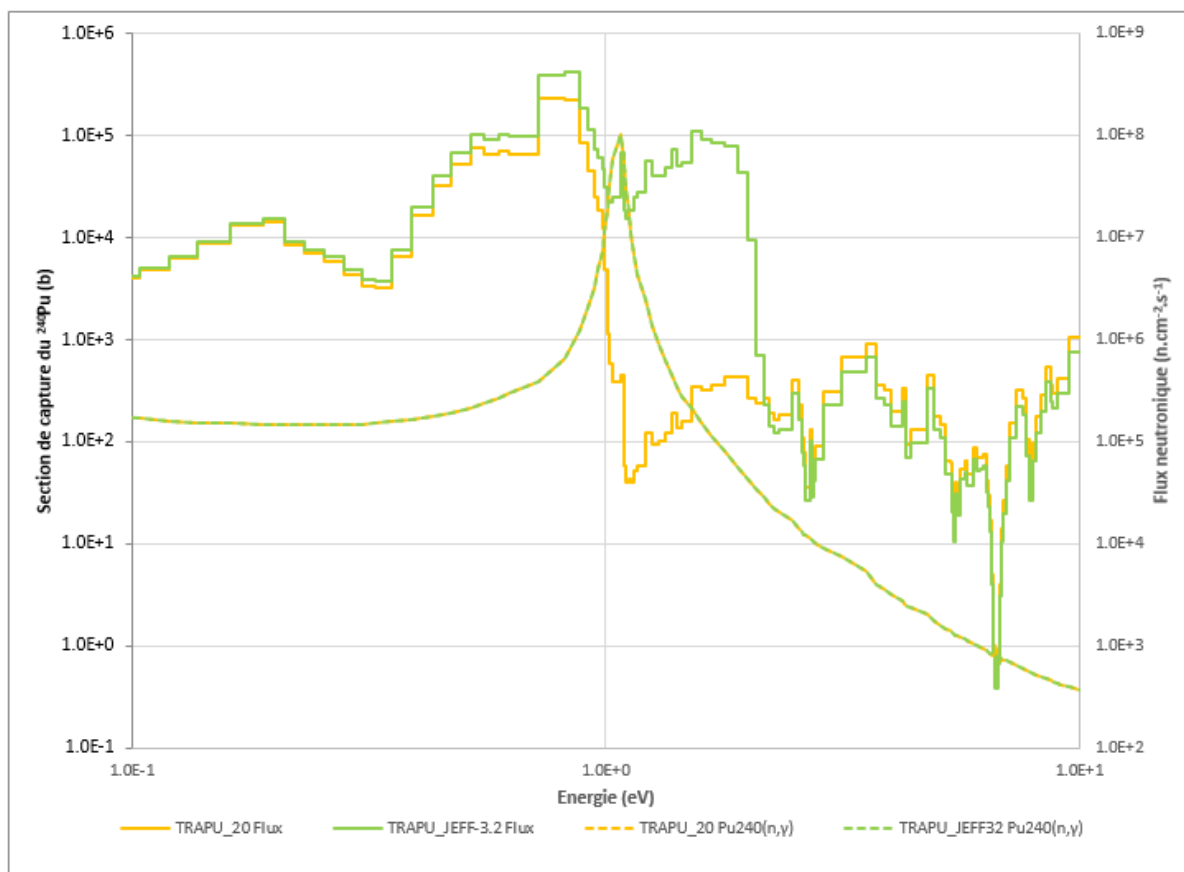
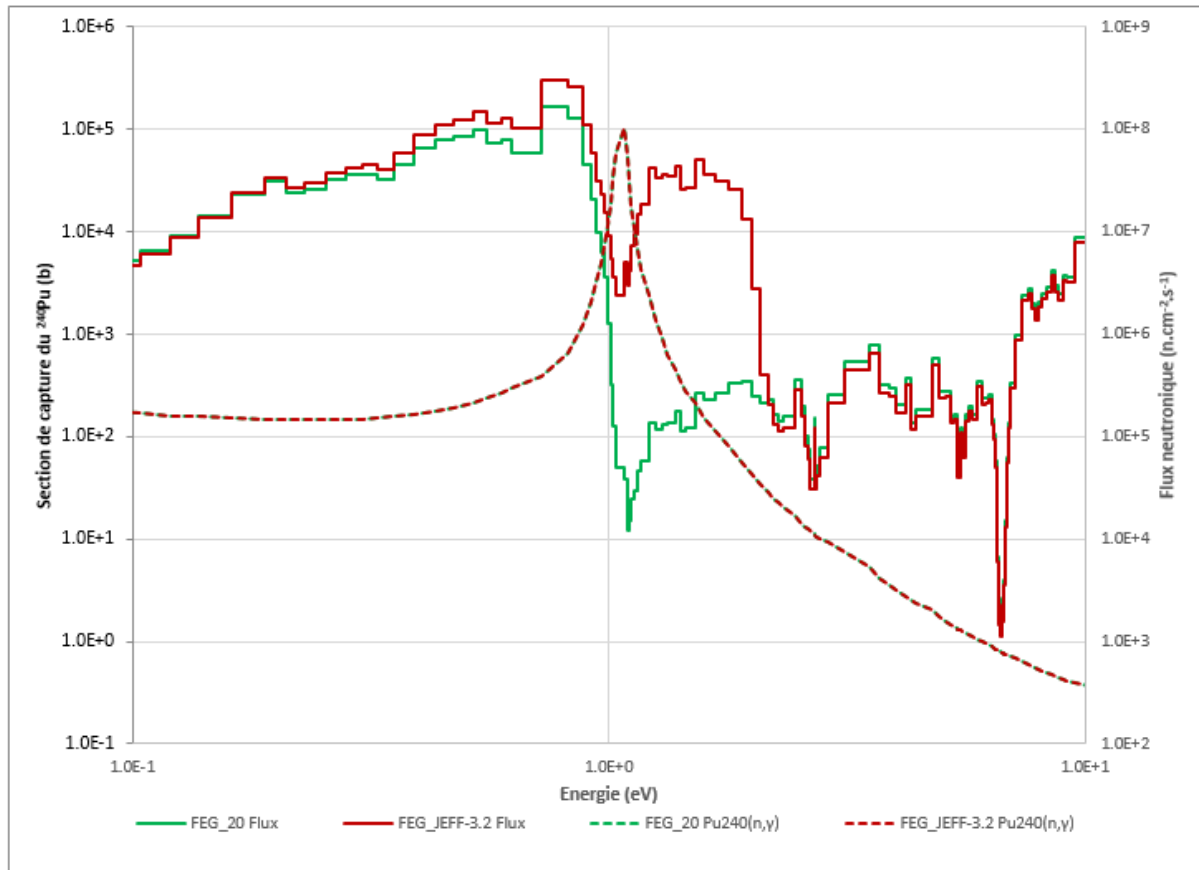


Figure H.9 : Impact de la bibliothèque de données nucléaires sur la section efficace multigroupe de capture du ^{240}Pu (33 groupes, calcul cœur)

On remarque (Figures H.9) que la bibliothèque de données nucléaires impacte fortement les sections efficaces : la section efficace de capture du ^{240}Pu est plus importante avec JEFF-3.2 qu'avec JEFF-3.1.1.

C'est cohérent avec ce que l'on observe au niveau de calcul réseau : les flux à 1760 groupes (Figures H.10) sont plus importants autour de 1eV avec JEFF-3.2 qu'avec JEFF-3.1.1, tandis que les sections efficaces ne varient quasiment pas.





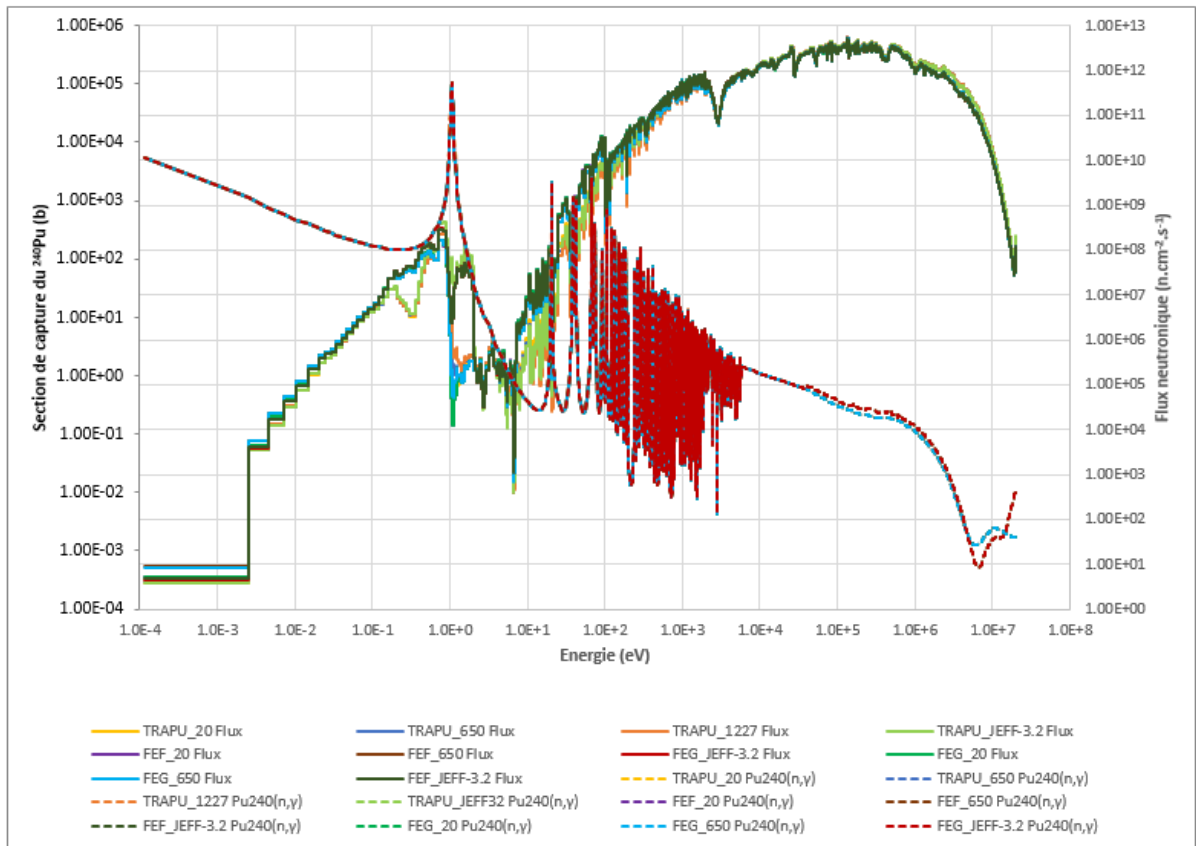
Figures H.10 : Impact de la bibliothèque de données nucléaires sur les flux neutroniques et la section efficace de capture du ^{240}Pu à 1760 groupes (calcul réseau).

III. Sections efficaces et flux à 1760 groupes (calcul réseau)

Après avoir présenté les résultats autour de 1eV, la figure ci-dessous (Figure H.11) représente les résultats à 1760 groupes sur l'ensemble de la gamme énergétique pour les flux neutroniques dans les différents milieux et les sections efficaces de capture du ^{240}Pu .

On remarque que les **flux neutroniques** dans les différents milieux varient bien de façon importante selon la modélisation autour de 1eV, où le ^{240}Pu présente une **importante résonance de capture**.

La section efficace de capture du ^{240}Pu , quant à elle, varie peu selon la modélisation choisie, sauf à haute énergie : au-delà de 10^4 eV. En effet, au-delà de 10^4 eV, on observe des différences selon la bibliothèque de données nucléaires choisie : avec JEFF-3.2, la section est plus importante à $\sim 4 \cdot 10^4$ eV, puis présente une chute aux alentours de $\sim 6 \cdot 10^6$ eV plus importante qu'avec JEFF-3.1.1. Entre $\sim 6 \cdot 10^6$ eV et $2 \cdot 10^7$ eV, la section de capture du ^{240}Pu varie de façon importante entre JEFF-3.1.1 et JEFF-3.2.



Figures H.11 : Flux neutroniques et sections efficaces de capture du ^{240}Pu à 1760 groupes (calcul réseau) selon les différentes modélisations