

Validation expérimentale du code ALEPH2 d'évolution du combustible pour le calcul de chaleur résiduelle.

Mémoire présenté par
Damien GÉRARD

en vue de l'obtention du grade de Master
Ingénieur civil mécanicien

Promoteur(s)
Hamid AÏT ABDERRAHIM, Alexey STANKOVSKIY

Lecteur(s)
Peter BAETEN, Pierre-Etienne LABEAU

Année académique 2017-2018

Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier mon promoteur de l'université catholique de Louvain, le Professeur Hamid Aït Abderrahim qui m'a transmis sa passion de l'énergie nucléaire lors d'un cours d'introduction au nucléaire. Je le remercie également pour sa gentillesse et pour le temps qu'il m'a consacré.

Je remercie également mon promoteur du SCK•CEN, le Docteur Alexey Stankovskiy, pour sa patience, le temps qu'il m'a consacré et ses conseils avisés.

Enfin je remercie ma maman et mes amis Julien et Thibaut pour leur soutien durant toute cette période lors des moments stressants et de doute.

Abstract

Ce mémoire présente la validation du code d'évolution ALEPH v2 en utilisant un benchmark expérimental sur la chaleur résiduelle émise par des assemblages. Les mesures expérimentales des chaleurs résiduelles ont été réalisées récemment au CLAB en Suède. La validation inclut plusieurs modèles d'assemblages, temps de refroidissement, compositions isotopiques du combustible et une large gamme de combustion nucléaire.

This master thesis presents the validation of ALEPH v2 code decay heat using experimental benchmark on assembly decay heat. Experimental decay heat data have been carried out in Sweden, at the Swedish Central Interim Storage Facility for Spent Fuel (CLAB). The validation includes several assembly models, cooling times, fuel compositions and a wide range of burnup.

Mots-clés : ALEPH, MCNP, code d'évolution, code de déplétion, chaleur résiduelle, validation, combustion nucléaire, temps de refroidissement, combustible usé.

Table des matières

1	Introduction	1
2	Notions de neutronique	5
2.1	Caractéristiques d'un réacteur nucléaire	5
2.2	Les sections efficaces	5
2.3	Interactions des neutrons avec la matière	7
2.4	Les équations de Bateman	8
3	Description du cas d'étude	9
3.1	Description du dispositif expérimental	9
3.1.1	Méthode de mesure	9
3.2	Description générale des réacteurs	10
3.3	Modèles d'assemblages étudiés	10
3.3.1	PWR 15x15	11
3.3.2	PWR 17x17	12
3.3.3	BWR 8x8	13
3.3.4	BWR 9x9	16
3.3.5	SVEA-64 et SVEA-100	16
4	MCNP et ALEPH v2	19
4.1	Introduction à la méthode de Monte-Carlo	19
4.2	ALEPH v2	20
4.3	Structure d'un input ALEPH v2	22
4.3.1	Les entrées d'ALEPH v2	23
4.3.2	La carte des cellules	24
4.3.3	La carte des surfaces	27
4.3.4	La carte des données	27
4.4	Concepts physiques	34
4.4.1	Le poids	34
4.4.2	Le parcours des particules et leurs interactions	35
4.4.3	Tallies et calculs réalisés par ALEPH v2	39
4.4.4	Précision de la méthode de Monte-Carlo	42
4.4.5	Les surfaces limites	44
4.5	Analyse de l'exemple fourni à l'annexe A	45
4.5.1	La carte des cellules	45
4.5.2	Carte des surfaces	46
4.5.3	La carte des données	46
5	Résultats	47
5.1	Validation des mesures expérimentales	47
5.1.1	Détermination de l'incertitude totale des mesures expérimentales	48
5.2	Observations des résultats obtenus avec ALEPH v2	49

5.3	Les rendements de produits de fission	54
5.3.1	Observations de différents schémas d'interpolation pour les rendements de produits de fission	55
5.4	Comparaison avec d'autres codes de calculs	58
5.5	Considérations temporelles	62
5.6	Analyse de sensibilité	64
6	Conclusion	67
Annexes		I
A	Exemple d'input	II
B	Liste des différentes surfaces	V
C	Liste des tallies	VI
D	Profil de Breit-Wigner	VII

Table des figures

1.1	Chaleur résiduelle émise après l'arrêt d'un réacteur PWR classique [4]	1
2.1	Flux de neutrons bombardés sur une cible [5]	6
2.2	Section efficace microscopique pour la capture d'un neutron par l' U_{92}^{238} [3]	7
3.1	Modèle PWR 15x15 [13]	12
3.2	Modèle BWR 8x8 [13]	15
3.3	Modèle SVEA-64 [13]	18
4.1	Histoire d'un neutron lors d'une simulation Monte-Carlo [8]	20
4.2	Structure d'un input d'ALEPH v2 [11]	23
4.3	L'union et l'intersection d'une région A et d'une région B [9]	24
4.4	Exemple illustrant la géométrie de 2 cellules [30]	25
4.5	Incrémentation des indexes [9]	26
4.6	Différence entre précision et exactitude [29]	43
5.1	Comparaison entre les bibliothèques JEFF-3.3 et JEFF-3.2 [24] de l'erreur relative entre la chaleur résiduelle mesurée expérimentalement et celui calculé à l'aide d'ALEPH2	50
5.2	Comparaison entre les bibliothèques ENDF/B-VII-1 et ENDF/B-VIII de l'erreur relative entre la chaleur résiduelle mesurée expérimentalement et celui calculé à l'aide d'ALEPH2	50
5.3	Comparaison entre les bibliothèques ENDF/B-VIII.0 et ENDF/B-VIII + GEFY de l'erreur relative entre la chaleur résiduelle mesurée expérimentalement et celui calculé à l'aide d'ALEPH2	51
5.4	Comparaison entre les différentes bibliothèques de l'erreur relative entre la chaleur résiduelle mesurée expérimentalement et celui calculé à l'aide d'ALEPH2 pour les PWR	52
5.5	Comparaison entre les différentes bibliothèques de l'erreur relative entre la chaleur résiduelle mesurée expérimentalement et celui calculé à l'aide d'ALEPH2 pour les BWR	53
5.6	Le rendement de produit de fission pour l' U_{92}^{235} pour trois énergies de neutron incident [2]	54
5.7	Comparaison de l'erreur relative entre les différents schémas d'interpolation pour la bibliothèque ENDF/B-VIII.0 et pour les BWR	56
5.8	Comparaison de l'erreur relative entre les différents schémas d'interpolation pour la bibliothèque ENDF/B-VIII.0 et pour les PWR	57
5.9	Comparaison entre les résultats obtenus avec ALEPH v2 pour 3 bibliothèques récentes avec TRITON et SAS2H pour les assemblages des BWR	59
5.10	Comparaison entre les résultats obtenus avec ALEPH v2 pour 3 bibliothèques récentes avec TRITON et SAS2H pour les assemblages des PWR	60
5.11	Comparaison entre les résultats obtenus avec ALEPH v2 pour 3 bibliothèques récentes avec SAS2H pour les assemblages des PWR	61
5.12	Influence de N sur l'erreur relative	62
5.13	Influence de N sur le temps de calcul	62
5.14	Analyse de sensibilité pour le Y^{90}	64
5.15	Analyse de sensibilité pour le Ba^{137m}	65
5.16	Comparaison des trois analyses de sensibilité	65

Liste des tableaux

3.1	Caractéristiques des différents réacteurs [13]	10
3.2	Données du modèle d'assemblage PWR 15x15 [13]	11
3.3	Données du modèle d'assemblage PWR 17x17 [13]	13
3.4	Données du modèle d'assemblage BWR 8x8 [13]	14
3.5	Données du modèle d'assemblage BWR 9x9 [13]	16
3.6	Données du modèle d'assemblage SVEA-64 [13]	17
3.7	Données du modèle d'assemblage SVEA-100 [13]	17
4.1	Exemples de codes d'épuisement [6]	21
4.2	Composition de l'eau [14] [15]	28
4.3	Composition de l'hélium [16]	29
4.4	Composition du Zircaloy-4 [17] [18] [19] [20]	29
4.5	Composition des barres de gadolinium [21]	30
4.6	Interprétation de l'erreur relative R	44
5.1	Incertitudes sur les équipements de mesure	47
5.2	Constantes [10]	48
5.3	Ecart-types [10]	48
5.4	Incertitudes sur la puissance totale des assemblages [10]	49
5.5	Comparaison des codes de calcul	58
5.6	Temps de calculs pour un assemblage de chaque type en fonction de la bibliothèque utilisée.	63
5.7	Temps de calculs pour différents nombres d'étapes d'irradiation avec la bibliothèque <i>ENDF/B – VII.1.</i>	63
5.8	Liste des contributeurs majeurs	64

Liste des symboles

Abréviations

<i>BWR</i>	Boiling-Water Reactor
<i>CLAB</i>	Swedish Central Interim Storage Facility for Spent Fuel
<i>keV</i>	10^3 électron-volt
<i>MCNP</i>	Monte-Carlo N-Particle transport
<i>MeV</i>	10^6 électron-volt
<i>PWR</i>	Pressurized-Water Reactor
<i>SCK•CEN</i>	Centre d'étude de l'énergie nucléaire de Belgique
<i>TMI</i>	Three Mile Island

Grandeurs physiques

ϕ	Flux de neutrons
τ	Taux de réaction
ϕ_g	Flux de neutrons moyenné sur la plage d'énergie g
N_j	Concentration du nucléide j
$N_{j,k}$	Concentration du nucléide j du matériau k
$Q_{i,j,k}$	Energie récupérée d'une réaction de type i par un neutron interagissant avec un nucléide j d'un matériau k
$R_{i,j,k}$	Taux de réaction avec un nucléide j d'un matériau k

Données nucléaires

σ_r	Section efficace microscopique de réaction r
$\sigma_{i,j,g}$	Section efficace de la réaction i moyennée sur la plage d'énergie g
$\sigma_{i,j}$	Section efficace de la réaction i

Autres symboles

C	Constante qui converti les MW en $MeV.s$
-----	--

Chapitre 1

Introduction

La chaleur résiduelle émise par du combustible nucléaire ayant été irradié est un soucis qui est bien connu par les scientifiques depuis de nombreuses années. Lors de l'arrêt des réacteurs nucléaires après avoir descendu les barres de contrôle, ceux-ci émettent encore jusqu'à 8 % de la puissance thermique de fonctionnement. Cette chaleur va rapidement diminuer au début mais même après des centaines de milliers d'années, le combustible usé émettra encore une certaine quantité de chaleur. Cette évolution au cours du temps est présentée à la figure 1.1 pour un réacteur PWR classique. Après 4 mois, la chaleur résiduelle représente un millième de la chaleur émise en fonctionnement normal.

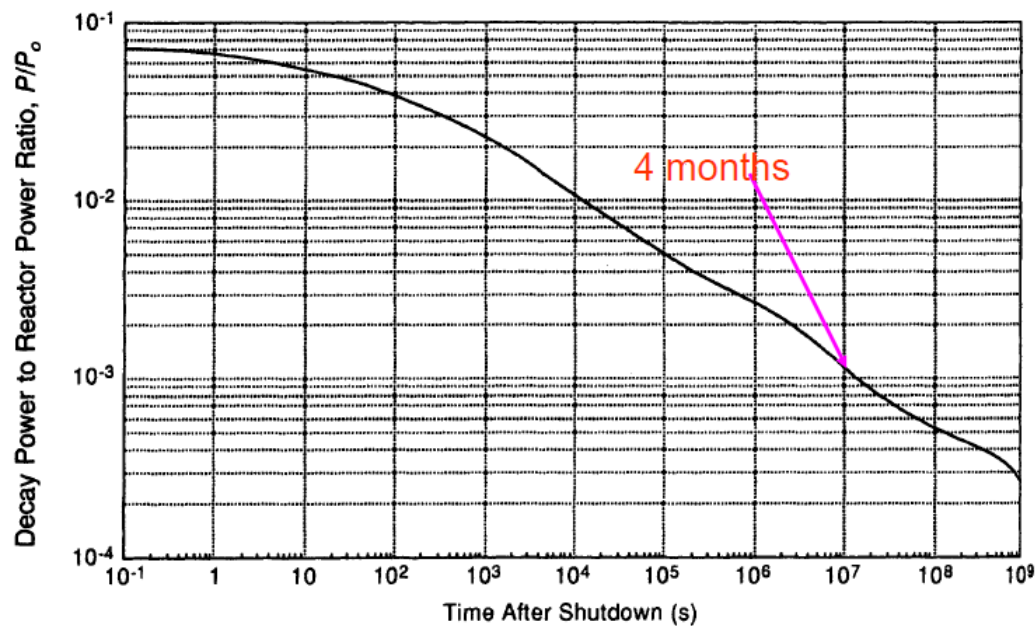


FIGURE 1.1 – Chaleur résiduelle émise après l'arrêt d'un réacteur PWR classique [4]

Une question légitime à se poser est de savoir pourquoi un réacteur émet-il encore de la chaleur après l'arrêt complet de celui-ci ? La réponse vient des éléments qui sont produits à chaque fission et par capture radiative. Ces éléments sont ce qu'on appelle des produits de fission et des actinides mineurs respectivement. Ceux-ci émettent de la chaleur par désintégration β , γ et α . Les produits de fission sont la source principale d'émission de chaleur pour des périodes courtes après l'arrêt du réacteur (quelques années). Ceux-ci ont une faible demi-vie mais une très haute activité¹, c'est pourquoi ils seront prépondérants au début. Les actinides mineurs, quant à eux, seront dominants lorsque les produits de fission à courte et

1. La demi-vie et l'activité d'une source sont inversement proportionnels via la relation : $T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda}$. Plus λ est grand et plus l'activité est grande.

moyenne durée de vie auront disparus (après 300 ans environ). [26]

Si la chaleur qui est encore émise après l'arrêt du réacteur n'est pas évacuée, cela provoquera l'augmentation de température du cœur pouvant aller jusqu'à la fonte du combustible ou du cœur et pouvant causer des dégâts à la cuve. Deux exemples très concrets sont les événements de Three Mile Island en 1979 et de Fukushima en 2011.

Lors de TMI, une fonte partielle du cœur a été occasionnée, à cause d'une série d'événements qui a démarré par la panne d'une pompe alimentant le circuit secondaire.

Lors de Fukushima, suite au séisme et au tsunami qui a suivi une heure plus tard, les groupes électrogènes de secours qui alimentait les pompes de refroidissement sont tombés en panne. Ceci couplé à des erreurs humaines ont provoqué la fonte totale du cœur d'au moins 2 réacteurs.

Ces événements sont donc bien évidemment la preuve que la chaleur résiduelle doit être quantifiée de manière précise pour pouvoir agir en conséquence. Ajouté à cela, depuis quelques années, il y a une augmentation du besoin de conteneurs pour entreposer le combustible usé et de sites indépendants de stockage. En effet, les piscines de refroidissement ont atteint tout doucement leur limite de stockage. En plus de ce besoin en augmentation, le combustible sortant des réacteurs nucléaires à l'heure actuelle a également évolué. Celui-ci a été irradié pendant une plus longue période grâce aux progrès réalisés dans la composition du combustible et il a été plus enrichi qu'à l'époque.

Ce challenge est donc une raison supplémentaire pour laquelle il est très important de calculer la chaleur résiduelle. C'est en effet un critère capital pour le design et la sûreté des sites de stockage du combustible usé.

Un gros programme expérimental avait été conduit par les Etats-Unis dans les années 1980 au laboratoire d'Hanford et sur le site de Morris Operation. Ce programme avait mesuré des chaleurs résiduelles pour environ 80 assemblages différents et pour des épuisements allant jusqu'à $39 \frac{GWd}{MTU}$. Plus récemment, des mesures de chaleurs résiduelles ont été réalisées au CLAB qui est le centre de stockage des déchets en Suède. Ce programme expérimental va permettre d'obtenir des données supplémentaires, pour des modèles d'assemblage récents et pour des hautes valeurs d'épuisement par rapport à ce qui existait jusque maintenant.

Dans le but d'obtenir des valeurs précises et exactes de la chaleur résiduelle et grâce à l'augmentation de la puissance des ordinateurs, des codes d'épuisement ont vu le jour. Ces codes d'épuisement font intervenir la dépendance temporelle des compositions isotopiques et ils sont couplés avec la méthode de Monte-Carlo ou un code déterministe pour simuler le transport des particules.

Au SCK•CEN en Belgique, un code d'épuisement a été créé pour évaluer notamment la chaleur résiduelle émise après un certain temps en fonction de l'historique d'irradiation du combustible. Il se dénomme ALEPH et ce mémoire a donc pour but de valider la version 2.7 de celui-ci pour le calcul des chaleurs résiduelles en se basant sur le programme expérimental réalisé en Suède.

Contenu du mémoire

Ce mémoire sera subdivisé en 5 parties :

1. Notions de neutroniques : Quelques notions importantes de la neutronique seront tout d'abord introduites.
2. Description du cas d'étude : Les caractéristiques principales des différents types de réacteurs et des différents modèles d'assemblage seront détaillés. Les compositions isotopiques, les gammes d'épuisement et les temps de refroidissement du combustible utilisé seront présentés de manière générale.
3. MCNP et ALEPH v2 : La méthode de Monte-carlo sera introduite et puis détaillée pour comprendre les concepts physiques qui se cachent derrière cette méthode probabiliste. Le code d'épuisement, ALEPH v2, sera également introduit et approfondi. La structure d'un input ALEPH v2 réalisé dans le cadre de ce mémoire sera détaillée pour comprendre comment implémenter un cas d'étude à l'aide du programme.
4. Résultats : Cette partie consistera d'abord à la validation des données expérimentales. Ensuite, les résultats des simulations numériques seront présentés et des observations par rapport à ceux-ci seront faites. Par après, une comparaison des résultats numériques sera réalisée avec des résultats obtenus via d'autres codes de calculs. Enfin, le chapitre se terminera par une analyse de sensibilité et par des considérations temporelles.
5. Conclusion : Des conclusions seront tirées par rapport aux observations émises lors de l'analyse des résultats.

Chapitre 2

Notions de neutronique

Quelques notions importantes de neutronique vont être abordées pour que certaines variables soient introduites et soient connues pour la suite du mémoire. Quelques notions générales de la neutronique dans un réacteur nucléaire seront d'abord présentées. Le concept crucial des sections efficaces sera expliqué. Les interactions possibles d'un neutron avec la matière seront listées et pour finir les équations de Bateman seront établies.

2.1 Caractéristiques d'un réacteur nucléaire

Le fonctionnement général d'un réacteur nucléaire est basé sur le principe de réaction en chaîne. Lorsqu'un noyau est fissionné par un neutron, 2 à 3 neutrons sont produits, des produits de fission sont générés ainsi que quelques autres particules et environ 200 MeV sont libérés lorsque le noyau ciblé est de l' U_{92}^{235} . Ces neutrons issus de la fission ont une haute énergie (environ 2 MeV), ils sont appelés les neutrons à spectre de haute énergie ou neutrons rapides. A cette énergie, le neutron a plus de chance de se faire absorber par U_{92}^{238} que par U_{92}^{235} . Pour entretenir la réaction en chaîne, les deux possibilités les plus courantes sont :

1. Soit l'uranium naturel est fortement enrichi et le réacteur utilise des neutrons rapides.
2. Soit l'uranium est légèrement enrichi (4-5% en général) et le réacteur utilise des neutrons thermiques ($\approx 0.025\text{eV}$) pour fissionner l' U_{92}^{235} .

La quasi totalité des réacteurs qui ont été construits sont des réacteurs utilisant des neutrons thermiques pour maintenir la réaction en chaîne. Il y a eu cependant des réacteurs qui se basaient sur les neutrons rapides et qui ont été créés à travers le monde. Notamment en France, où deux réacteurs se basaient sur les neutrons rapides : PHENIX et SUPERPHENIX. Pour pouvoir être ralentis, les neutrons issus de la fission doivent transmettre leur énergie lors d'interactions avec des noyaux, ils sont dits modérés. Généralement les réacteurs nucléaires utilisent de l'eau légère pour modérer les neutrons. Ces neutrons subissent donc un grand nombre d'interactions et il est intéressant de connaître leurs probabilités d'interaction avec les différents noyaux.

2.2 Les sections efficaces

Dans le but de quantifier les réactions nucléaires, le concept de sections efficaces microscopiques est introduit. Elles représentent la probabilité d'interaction du neutron avec les noyaux de la cible pour un certain type de réaction. Les sections efficaces sont généralement exprimées en BARN = $10^{-24}[\text{cm}^2]$.

Comme il est montré à la figure 2.1, si un faisceau de neutrons d'intensité $\phi \left[\frac{n}{cm^2 \cdot s} \right]$ bombarde une cible dont la densité volumique de noyaux est $N \left[\frac{\#}{cm^3} \right]$, alors le nombre d'interactions par seconde et par unité de volume est donné par :

$$\tau \left[\frac{\#}{cm^3 \cdot s} \right] = \phi \cdot N \cdot \sigma \quad (2.1)$$

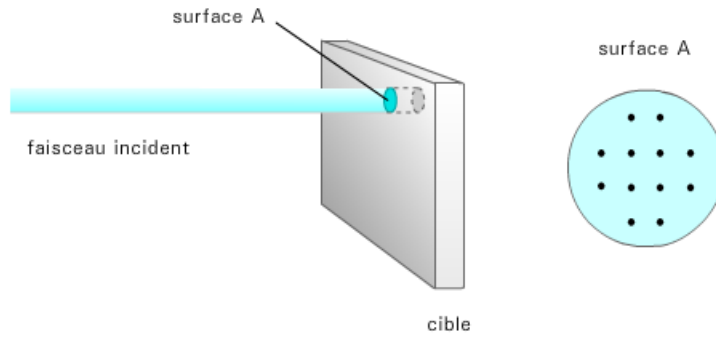


FIGURE 2.1 – Flux de neutrons bombardés sur une cible [5]

Dans l'équation (2.1), σ représente donc la section efficace microscopique et τ est appelé le taux de réaction, cette variable est également très importante comme il sera vu à la section 4.4.3.

Plusieurs types de sections efficaces peuvent être définis :

- σ_c : la section efficace microscopique de capture.
- σ_f : la section efficace microscopique de fission.
- σ_a : la section efficace microscopique d'absorption.
- σ_{in} : la section efficace microscopique de diffusion inélastique.
- σ_e : la section efficace microscopique de diffusion élastique.
- σ_t : la section efficace microscopique totale.

Les différents types d'interactions d'un neutron avec la matière et les relations qui existent entre eux seront identifiés à la section suivante. Les sections efficaces macroscopiques sont également souvent utilisées pour calculer des taux de réaction notamment, elles sont définies selon l'équation 2.2 :

$$\text{Pour la section efficace totale : } \Sigma_t = N \cdot \sigma_t \quad (2.2)$$

Les taux de réaction peuvent alors être calculés grâce à l'équation 2.3 :

$$\tau = \Sigma \cdot \phi \quad (2.3)$$

Les sections efficaces sont dépendantes de plusieurs paramètres : l'énergie des neutrons incidents, le type de la réaction, la nature du noyau ciblé et dans une moindre mesure la température. Pour un noyau lourd tel que l' U_{92}^{238} , quatre zones sont généralement distinguées pour la section efficace microscopique totale : [1]

1. Le domaine thermique, pour des énergies inférieures au centième de l'eV, pour lequel les sections efficaces varient lentement en $\frac{1}{v}$.
2. La région de diffusion potentielle.
3. Le domaine des résonances résolues, pour des énergies allant de l'eV jusqu'à quelques dizaines de keV, la section a généralement le profil de BREIT-WIGNER (Annexe D) mais il existe également d'autres approches telles que REICH-MOORE, ADLER-ADLER.
4. Le domaine des résonances non résolues à haute énergie, la largeur des résonances est plus grande que leur espacement et il n'est plus possible de les distinguer.

Les résonances sont généralement le nom qu'on donne à la formation d'un noyau composé (capture du neutron par le noyau). Les états énergétiques des noyaux sont quantifiés comme pour les couches électroniques d'un atome. Et si, lors d'une diffusion avec un noyau X_Z^A l'énergie apportée par le neutron incident est proche d'un niveau excité du noyau $(X_Z^A)^*$ alors la probabilité sera grande qu'il y ait formation d'un noyau composé par capture du neutron. Plus le nombre de masse A est grand et plus la densité des états énergétiques est grande et donc plus les résonances seront nombreuses. [1]

La figure 2.2 présente la section efficace de l' U_{92}^{238} pour le processus de capture radiative en fonction de l'énergie incidente du neutron. La figure permet de distinguer les zones qui ont été mentionnées juste avant. Il faut savoir que les limites d'énergie des différentes zones dépendent d'un noyau à l'autre.

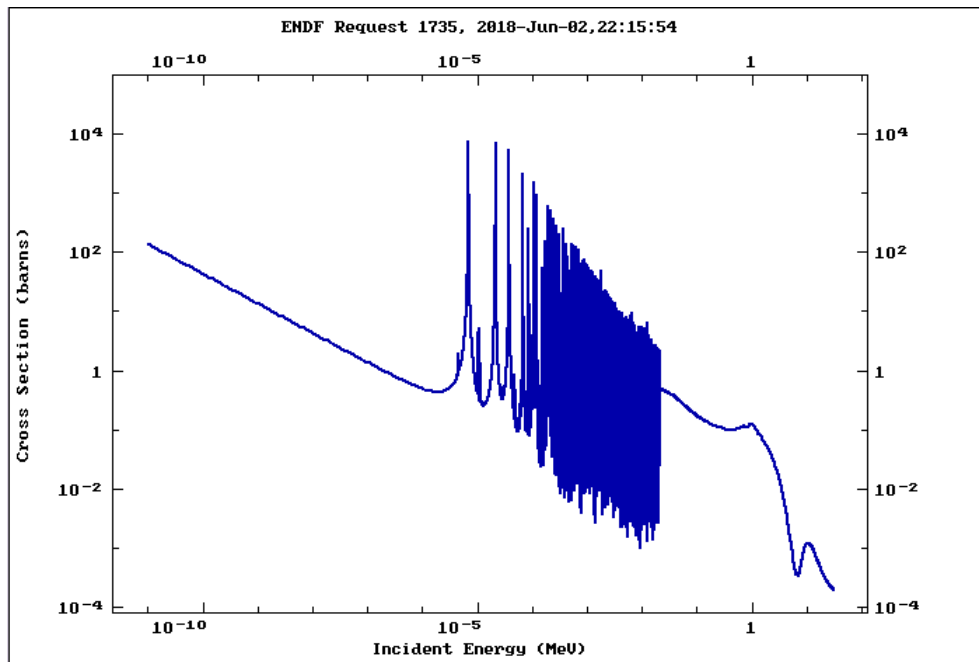


FIGURE 2.2 – Section efficace microscopique pour la capture d'un neutron par l' U_{92}^{238} [3]

2.3 Interactions des neutrons avec la matière

Deux types d'interaction neutron-noyaux vont être considérés : la diffusion potentielle et la formation d'un noyau composé.

La diffusion potentielle peut être comparée à deux boules de billard qui entrent en collision. Le neutron et le noyau s'entrechoquent sans subir de modifications internes.

Lors de la formation d'un noyau composé, le neutron est absorbé par le noyau qui va être amené à un état d'énergie excité (indiqué par un astérisque dans l'équation 2.4). Il va ensuite se désexciter pour revenir à un état d'énergie stable. Plusieurs schémas de sortie sont possibles après la désexcitation : [1]

$$(X_Z^{A+1})^* \rightarrow \begin{cases} n_0^1 + X_Z^A & \text{Diffusion élastique} \\ n_0^1 + (X_Z^A)^* & \text{Diffusion inélastique} \\ X_Z^{A+1} + \gamma + 6 \text{ MeV} & \text{Capture radiative} \\ X_{Z_1}^{A_1} + X_{Z_2}^{A_2} + \nu n_0^1 + 200 \text{ MeV} & \text{Fission} \end{cases} \quad (2.4)$$

Il existe également d'autres types d'interactions telles que l'émission de plusieurs neutrons sans causer de fission et l'émission de particules chargées (particule α , proton,...)

2.4 Les équations de Bateman

Le point central de ce mémoire est de déterminer la chaleur résiduelle qui est encore émise par du combustible nucléaire usé et qui a été refroidi. Pour déterminer cette chaleur, il faut connaître l'évolution isotopique du combustible. Les équations permettant de déterminer la concentration des différents radio-nucléides au cours du temps sont donc présentées dans cette section. Elles se présentent sous la forme d'équations différentielles de décroissance radioactive, dites de Bateman.

Si un système physique est soumis à un flux de neutrons, cela provoque des modifications de la composition isotopique du milieu étudié :

- Par des réactions nucléaires entre les particules et les noyaux du système.
- Par des décroissances radioactives.

Pour chacune des deux modifications, les nucléides peuvent apparaître ou disparaître. Le bilan des 4 termes est donc réalisé pour établir les équations de Bateman :

$$\frac{dN_j}{dt} = \sum_{l \neq j} \tau_{l \rightarrow j} N_l + \sum_{l \neq j} \lambda_{l \rightarrow j} N_l - \tau_j N_j - \lambda_j N_j \quad (2.5)$$

où

- N_j est la concentration atomique de l'isotope j
- N_l est la concentration atomique de l'isotope l
- $\tau_{l \rightarrow j}$ est le taux de réaction microscopique de création de l'isotope j par l'isotope l
- $\lambda_{l \rightarrow j}$ est la constante de décroissance de l'isotope l vers l'isotope j
- τ_j est le taux de réaction de disparition microscopique de l'isotope j
- λ_j est la constante de décroissance de l'isotope j .

Dans la suite de ce mémoire, les seules particules qui seront traitées sont les neutrons. Le terme particule n'apparaîtra donc que lorsque certaines généralités pourront être faites.

Chapitre 3

Description du cas d'étude

3.1 Description du dispositif expérimental

Des mesures calorimétriques et des mesures des radiations γ ont été faites au CLAB sur du combustible usé, 25 assemblages de BWR (Boiling-Water Reactor) et 34 assemblages de PWR (Pressurized-Water Reactor) sont concernés. Pour réaliser ces mesures, un calorimètre a été créé pour les types d'assemblages de BWR et PWR utilisés. Les chaleurs résiduelles comprises entre 50 et 1000 [W] peuvent être mesurées.

Le calorimètre est placé dans une piscine. Il fait 5 mètres de hauteur et est composé de deux tubes concentriques. Le plus petit tube forme la chambre de test et le volume entre les deux tubes concentriques est rempli par de la mousse de polyuréthane. Cette mousse permet d'avoir une isolation entre la chambre de test et l'eau de la piscine. Une pompe centrifuge fait circuler de l'eau dans le calorimètre afin que la température dans la chambre de test soit homogène. Un flux peut être établi dans la chambre de test à l'aide d'une pompe à débit de mesure qui a un débit contrôlable. Le débit de mesure est mesuré par une unité de mesure de débit qui peut être calibrée à l'aide d'un réservoir de calibration, pour lequel la masse d'eau est mesurée par une balance. [10]

Seize capteurs assurent les mesures de température dans le calorimètre. A l'extérieur du calorimètre, 5 détecteurs de radiations γ sont placés sur un bras amovible pour mesurer la distribution radiale des radiations γ qui s'échappent du calorimètre.

3.1.1 Méthode de mesure

Le principe des mesures est simple, cela consiste à mesurer l'augmentation de la température de l'eau dans le calorimètre due à la chaleur résiduelle émise par le combustible usé. La chaleur résiduelle dégagée est déterminée en comparant l'augmentation de température avec une courbe de calibration. En effet, avant chaque série de mesure, une courbe de calibration est obtenue en utilisant un chauffage électrique. L'augmentation de température est mesurée pour plusieurs niveaux de puissance du chauffage électrique. En fonction de ces mesures, la courbe de calibration est établie.

Il existe trois méthodes pour mesurer l'augmentation de température : [10]

1. La méthode d'augmentation de température
2. La méthode de recirculation
3. La méthode d'équilibre

C'est la première qui a été retenue pour réaliser les différentes mesures expérimentales car les autres méthodes demandaient beaucoup de temps.

La méthode d'augmentation de température

Un assemblage est placé dans le calorimètre et le couvercle est fermé. Pour s'assurer que le calorimètre est complètement rempli d'eau, la pompe de mesure de débit est actionnée jusqu'à ce que de l'eau sorte du réservoir de calibration. La pompe est alors arrêtée et l'eau peut circuler librement vers le calorimètre, créant une surpression dans le calorimètre. La pompe de circulation est alors enclenchée et la mesure de l'augmentation de température est enregistrée. Après une augmentation de 4 °C, la mesure est arrêtée. Le taux d'augmentation de la température est alors comparé à la courbe de calibration et la puissance résiduelle est alors déterminée. Le champ de radiation γ est mesuré et la puissance émise par ces radiations est déterminée. La puissance totale est donc la somme de la puissance qui s'échappe par radiation γ et de la puissance résiduelle mesurée par le calorimètre. [10]

3.2 Description générale des réacteurs

Les assemblages pour lesquels les mesures de chaleurs résiduelles ont été effectuées proviennent de 10 réacteurs suédois différents. Le tableau 3.1 présente quelques caractéristiques générales concernant les 10 réacteurs.

TABLE 3.1 – Caractéristiques des différents réacteurs [13]

Réacteur	Type	Pression (MPa)	Température d'entrée (K)	Température de sortie (K)	Nombre d'assemblages dans le coeur	Nombre d'assemblages mesurés
Barsebäck 1	BWR	6.86	545	559	444	2
Barsebäck 2	BWR	6.86	545	559	444	1
Forsmark 1	BWR	6.86	547	559	676	2
Forsmark 2	BWR	6.86	547	559	676	1
Forsmark 3	BWR	6.86	551	559	700	2
Oskarshamn 2	BWR	6.86	547	559	444	7
Oskarshamn 3	BWR	6.86	550	561	700	1
Ringhals 1	BWR	6.86	545	559	648	9
Ringhals 2	PWR	15.1	559	595	157	16
Ringhals 3	PWR	15.3	557	595	157	14

3.3 Modèles d'assemblages étudiés

Plusieurs modèles d'assemblages ont été utilisés lors du programme expérimental. Chacun des modèles présentent des différences par rapport aux autres, elles seront donc mises en évidence dans la description des différents modèles. Deux modèles d'assemblages de PWR et 4 modèles d'assemblages de BWR ont été étudiés. Ces modèles sont :

1. PWR 15x15
2. PWR 17x17
3. BWR 8x8
4. BWR 9x9
5. SVEA-64
6. SVEA-100

L'historique d'irradiation de chaque assemblage était fourni. Chaque cycle d'irradiation était composé d'une période d'irradiation, qui était généralement d'un an, et d'une période d'arrêt du réacteur durant laquelle le combustible irradié subissait une décroissance radioactive, généralement de quelques mois. Les temps de refroidissement étaient également donnés pour chaque assemblage, calculés entre le moment où ils étaient sortis du réacteur et le jour de la mesure expérimentale. Les temps de refroidissement des assemblages des PWR et BWR étaient tous compris entre 5818-8468 jours et 4170-8211 jours respectivement. Tous les assemblages ont été irradiés entre 1974 et 1992 et chacun a été irradié pendant environ 4-5 ans.

3.3.1 PWR 15x15

Ce type d'assemblage est composé de 204 crayons de combustible, 20 tubes de guidage et 1 tube d'instrumentation. La figure 3.1 illustre ce type d'assemblage avec ses différents types de crayons. La gamme de combustion nucléaire est comprise entre 28-51 GWd/MTU , l'enrichissement en U_{92}^{235} est compris entre 3.095 et 3.252 % et la masse d'uranium initiale est comprise entre 429-456 kg. [23]

Deux configurations de ce type d'assemblage ont été étudiées. La différence principale entre ces deux types d'assemblage est le diamètre des pastilles de combustible. Les caractéristiques principales des deux types d'assemblage sont présentées dans le tableau 3.2. Aucune exposition à des absorbeurs consommables n'a été reportée.

TABLE 3.2 – Données du modèle d'assemblage PWR 15x15 [13]

Paramètres	Données	
Données du réacteur et de l'assemblage	Type 1	Type 2
Longueur active de crayon de combustible (cm)	365.8	365.8
Le pas d'assemblage (cm)	21.5	21.5
Le pas de crayon de combustible (cm)	1.43	1.43
Densité du liquide de refroidissement (g/cm^3)	0.72	0.72
Température du liquide de refroidissement (K)	552	552
Concentration moyenne du Bore soluble (ppm)	650	650
Nombre de crayons de combustible	204	204
Nombre de tubes de guidage	20	20
Nombre de tubes d'instrumentation	1	1
Données des crayons de combustibles		
Densité du combustible effective (g/cm^3)	10.227	10.137
Température effective du combustible (K)	900	900
Diamètre des pastilles de combustible (cm)	0.929	0.911
Diamètre extérieur des crayons de combustible (cm)	1.072	1.075
Matériau de gaine utilisé	Zr-4	Zr-4
Epaisseur de la gaine	0.0618	0.0725
Température effective de la gaine (K)	573	573

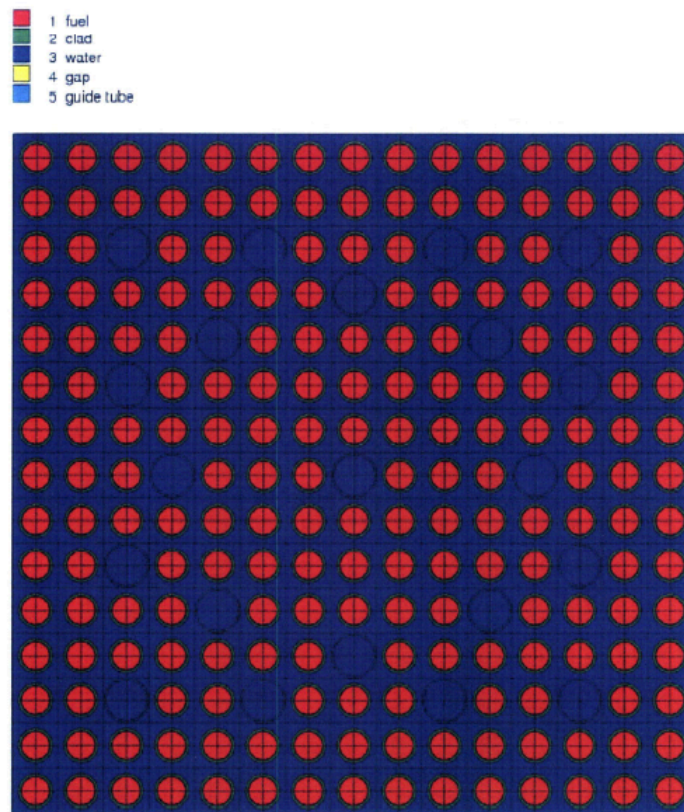


FIGURE 3.1 – Modèle PWR 15x15 [13]

3.3.2 PWR 17x17

Ce type d'assemblage est sensiblement le même que le PWR 15x15, il possède plus de crayons mais le pas entre les crayons est plus faible. Alors que le modèle précédent n'avait pas été soumis à la présence de barres d'absorbant consommable, quatre assemblages de ce type ont été soumis à leur présence durant le premier cycle d'irradiation. Ces barres d'absorbant ont été insérées dans 12 des 24 tubes de guidage. La gamme de combustion nucléaire de ces assemblages est comprise entre 20-42 GWd/MTU , l'enrichissement en U_{92}^{235} est compris entre 2.1 et 3.103 % et la masse d'uranium initiale est comprise entre 457-464 kg. Un seul type de PWR 17x17 a été étudié et ses principales caractéristiques sont reprises dans le tableau 3.3. [23]

TABLE 3.3 – Données du modèle d'assemblage PWR 17x17 [13]

Paramètres	Données
Données du réacteur et des assemblages	
Longueur active de crayon de combustible (cm)	365.8
Le pas d'assemblage (cm)	21.5
Le pas de crayon de combustible (cm)	1.26
Densité du liquide de refroidissement (g/cm^3)	0.72
Température du liquide de refroidissement (K)	552
Concentration moyenne du Bore soluble (ppm)	650
Nombre de crayons de combustible	264
Nombre de tubes de guidage	24
Nombre de tubes d'instrumentation	1
Données des crayons de combustibles	
Densité du combustible effective (g/cm^3)	10.27
Température effective du combustible (K)	900
Diamètre des pastilles de combustible (cm)	0.8191
Diamètre extérieur des crayons de combustible (cm)	0.95
Matériau de gaine utilisé	Zr-4
Epaisseur de la gaine	0.0571
Température effective de la gaine (K)	573
Données des tubes de guidage	
Matériau du tube	Zr-4
Diamètre extérieur (cm)	1.224
Epaisseur (cm)	0.0406
Données des crayons absorbant consommables	
Nombre de crayons insérés	12
Matériau de l'absorbant	$B_2O_3 - SiO_2$
Densité du matériau (g/cm^3)	2.299
Contenu du poison consommable (wt % B_2O_3)	12.5

3.3.3 BWR 8x8

Quatre types d'assemblage 8x8 ont été étudié et les caractéristiques de chacun sont reprises dans le tableau 3.4. Trois type sur quatre contiennent des crayons de coin qui possèdent des dimensions différentes par rapport aux crayons normaux, ils ont un diamètre plus petit. Ces trois types d'assemblage contiennent 3 crayons de coin à chaque coin de l'assemblage. [23]

Un canal d'écoulement encercle l'assemblage et les dimensions extérieur et intérieur de ce canal sont fournies. La dimension intérieur est légèrement plus grande que le réseau de crayons et cela résulte donc en une couche supplémentaire d'eau assez fine. La figure 3.2 montre la géométrie et les différentes couches de ce type d'assemblage.

Ce type d'assemblage contient généralement des barres d'eau. Ce sont des tubes de Zircaloy qui contiennent de l'eau à une plus grande densité pour apporter une plus grande modération dans la zone du réseau de crayons. Certains assemblages 8x8 possèdent également des barres de Zircaloy et une majorité possèdent des barres de poison consommable. Celles-ci contiennent de l'oxyde de gadolinium (Gd_2O_3) qui est mélangé avec l'oxyde d'uranium et font partie intégrante de l'assemblage, elles ne sont pas retirées durant l'irradiation de l'assemblage. Le nombre de ces barres varie en fonction d'un assemblage à l'autre. [23]

La gamme de combustion nucléaire de ces assemblages est comprise entre 20-42 GWd/MTU , l'enrichissement en U_{92}^{235} est compris entre 2.1 et 3.103 % et la masse d'uranium initiale est comprise entre 457-464 kg. [23]

TABLE 3.4 – Données du modèle d'assemblage BWR 8x8 [13]

Paramètres	Données			
Données du réacteur et de l'assemblage	Type 1	Type 2	Type 3	Type 4
Longueur active de crayon de combustible (cm)	365	368	371.2	368
Le pas d'assemblage (cm)	15.33	15.33	15.3	15.38
Le pas de crayon de combustible (cm)	1.63	1.63	1.63	1.625
Température du modérateur (K)	552	552	552	552
Densité du modérateur (g/cm^3)	0.75	0.75	0.75	0.75
Température du liquide de refroidissement (K)	552	552	552	552
Nombre de crayons de combustible normaux	51	51	51	62
Nombre de crayons de combustible de coin	12	12	12	N/A
Nombre de crayons d'eau	1	1	0	1
Nombre de crayons de Zr	0	0	1	1
Dimension extérieur du canal de l'assemblage (cm)	13.9	13.9	13.86	13.9
Epaisseur du mur du canal de l'assemblage (cm)	0.2	0.23	0.23	0.23
Données des crayons de combustibles				
Densité du combustible effective (g/cm^3)	10.168	10.316	10.621	10.171
Température effective du combustible (K)	900	900	900	900
Diamètre des pastilles de combustible, crayons normaux (cm)	1.058	1.044	1.044	1.044
Diamètre des pastilles de combustible, crayons de coin (cm)	1.008	0.994	0.994	N/A
Diamètre extérieur des crayons de combustible, crayons normaux (cm)	1.225	1.225	1.225	1.23
Diamètre extérieur des crayons de combustible, crayons de coin (cm)	1.175	1.175	1.175	N/A
Matériau de gaine utilisé	Zr-4	Zr-4	Zr-4	Zr-4
Epaisseur de la gaine, crayons normaux	0.074	0.08	0.08	0.082
Epaisseur de la gaine, crayons de coin	0.074	0.08	0.08	N/A
Température effective de la gaine (K)	573	573		
Données des crayons d'eau				
Matériau des crayons	Zr-4	Zr-4	Zr-4	Zr-4
Diamètre extérieur (cm)	1.225	1.225	1.225	1.5
Epaisseur (cm)	0.074	0.074	0.074	0.08

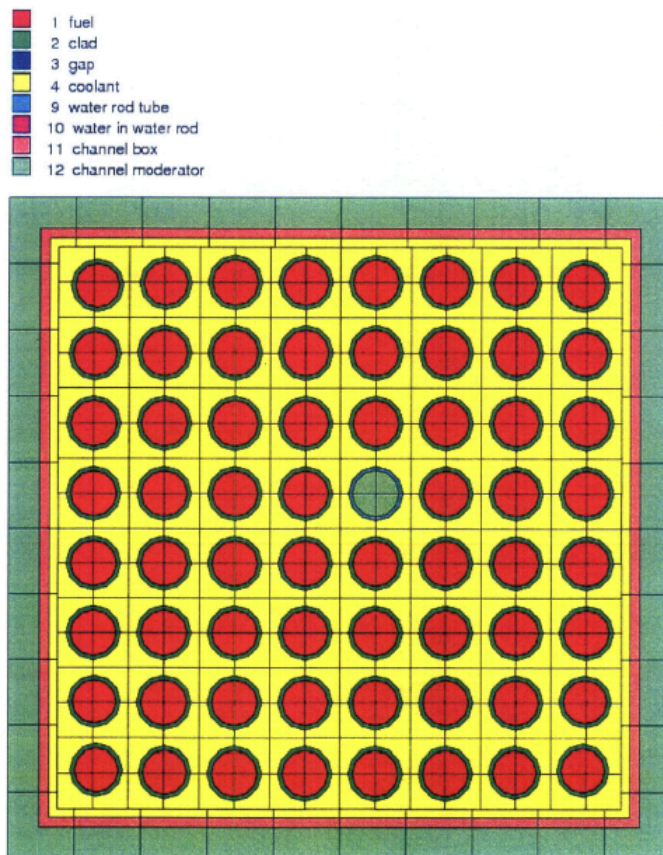


FIGURE 3.2 – Modèle BWR 8x8 [13]

3.3.4 BWR 9x9

Les BWR 9x9 utilisés lors de cette étude étaient tous du même type. La géométrie et le type de barres utilisées sont quasiment identiques au type d'assemblage 8x8. Les différentes caractéristiques des assemblages 9x9 sont présentées au tableau 3.5.

TABLE 3.5 – Données du modèle d'assemblage BWR 9x9 [13]

Paramètres	Données
Données du réacteur et des assemblages	
Longueur active de crayon de combustible (cm)	368
Le pas d'assemblage (cm)	15.38
Le pas de crayon de combustible (cm)	1.445
Température du modérateur (K)	552
Densité du modérateur du canal (g/cm^3)	0.75
Température du liquide de refroidissement (K)	552
Nombre de crayons de combustible	76
Nombre de crayons d'eau	4
Nombre de crayons de Zr	1
Dimension extérieur du canal de l'assemblage (cm)	13.9
Epaisseur du mur du canal de l'assemblage (cm)	0.23
Nombre de crayons absorbant	6
Gd_2O_3 wt % dans les crayons absorbant	2.5
Données des crayons de combustibles	
Densité du combustible effective (g/cm^3)	10.144
Température effective du combustible (K)	900
Diamètre des pastilles de combustible (cm)	0.95
Diamètre extérieur des crayons de combustible (cm)	1.1
Matériau de gaine utilisé	Zr-4
Epaisseur de la gaine	0.0665
Température effective de la gaine (K)	573
Données des crayons d'eau	
Matériau des crayons	Zr-4
Diamètre extérieur (cm)	1.445
Epaisseur (cm)	0.08

3.3.5 SVEA-64 et SVEA-100

Les assemblages de type SVEA-64 et SVEA-100 se différencient des BWR 8x8 et 10x10 par le fait qu'ils possèdent 4 quadrants de crayons ou autrement dit 4 sous-assemblages. Ces sous-assemblages sont séparés par une région assez large qui contient de l'eau modératrice à une densité plus élevée que l'eau de refroidissement, cette région est appelée la croix d'eau. La figure 3.3 illustre la géométrie des assemblages SVEA-64 et qui est la même que celle des assemblages SVEA-100 mis à part que ceux-ci possèdent 4 sous-assemblages de 5x5 crayons au lieu de 4x4. [23]

Le type SVEA-64 possède une barre d'eau alors que le type SVEA-100 n'en possède pas. Cependant ils contiennent tous les deux des barres intégrées de poison consommable. Les caractéristiques principales des SVEA-64 et SVEA-100 sont reprises respectivement aux tableaux 3.6 et ???. [23]

TABLE 3.6 – Données du modèle d'assemblage SVEA-64 [13]

Paramètres	Données
Données du réacteur et des assemblages	
Longueur active de crayon de combustible (cm)	368
Le pas d'assemblage (cm)	15.4
Le pas de crayon de combustible (cm)	1.58
Température du modérateur (K)	552
Densité du modérateur du canal (g/cm^3)	0.72
Température du liquide de refroidissement (K)	552
Nombre de crayons de combustible	63
Nombre de crayons d'eau	1
Dimension extérieur du canal de l'assemblage (cm)	14
Epaisseur du mur du canal de l'assemblage (cm)	0.11
Epaisseur de la séparation par le mur d'eau (cm)	0.08
Mesure intérieur de la longueur du sous-assemblage (cm)	6.59
Données des crayons de combustibles	
Densité du combustible effective (g/cm^3)	10.367
Température effective du combustible (K)	900
Diamètre des pastilles de combustible (cm)	1.044
Diamètre extérieur des crayons de combustible (cm)	1.225
Matériau de gaine utilisé	Zr-4
Epaisseur de la gaine	0.08
Température effective de la gaine (K)	573
Données des crayons d'eau	
Matériau des crayons	Zr-4
Diamètre extérieur (cm)	1.225
Epaisseur (cm)	0.08

TABLE 3.7 – Données du modèle d'assemblage SVEA-100 [13]

Paramètres	Données
Données du réacteur et des assemblages	
Longueur active de crayon de combustible (cm)	368
Le pas d'assemblage (cm)	15.5
Le pas de crayon de combustible (cm)	1.24
Température du modérateur (K)	552
Densité du modérateur du canal (g/cm^3)	0.75
Température du liquide de refroidissement (K)	552
Nombre de crayons de combustible	100
Dimension extérieur du canal de l'assemblage (cm)	13.96
Epaisseur du mur du canal de l'assemblage (cm)	0.11
Epaisseur de la séparation par le mur d'eau (cm)	0.11
Mesure intérieur de la longueur du sous-assemblage (cm)	6.56
Données des crayons de combustibles	
Densité du combustible effective (g/cm^3)	10.392
Température effective du combustible (K)	900
Diamètre des pastilles de combustible (cm)	0.819
Diamètre extérieur des crayons de combustible (cm)	0.962
Matériau de gaine utilisé	Zr-4
Epaisseur de la gaine	0.063
Température effective de la gaine (K)	573

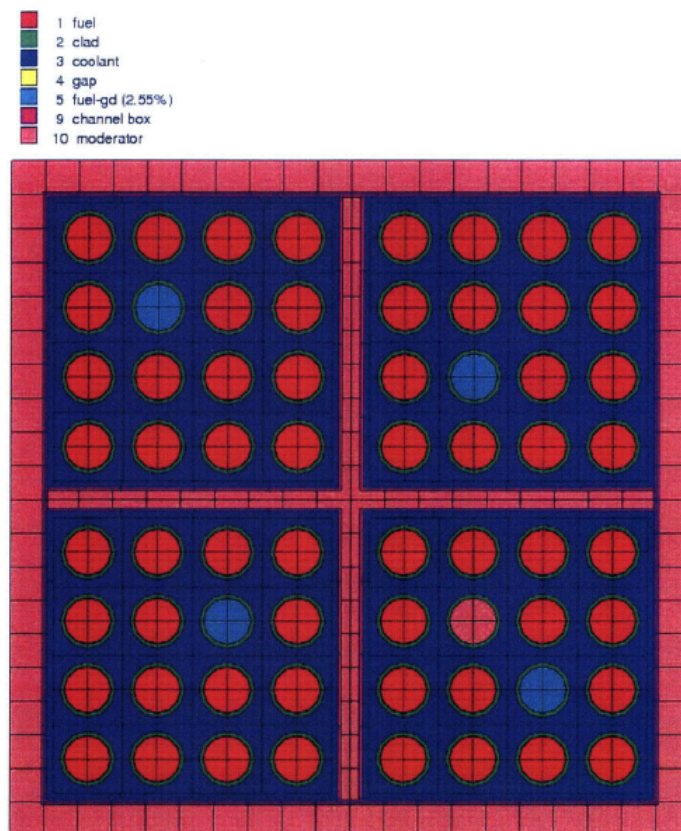


FIGURE 3.3 – Modèle SVEA-64 [13]

Chapitre 4

MCNP et ALEPH v2

4.1 Introduction à la méthode de Monte-Carlo

Les méthodes de Monte-Carlo ont vu le jour après la seconde guerre mondiale lorsque les premiers ordinateurs ont fait leur apparition. Depuis lors, la méthode de Monte-Carlo n'a cessé d'être améliorée par l'équipe de Los Alamos. Un peu avant les années 60, les codes Monte-Carlo étaient écrits en langage machine et résolvaient uniquement des problèmes spécifiques. Avec l'apparition de Fortran, les codes ont pu être rendus plus généraux.

C'est en 1963 que le premier code Monte-Carlo pour le transport de particules a vu le jour, appelé MCS. Il a ensuite été suivi par MCN qui pouvait résoudre le problème 3D des neutrons interagissant avec la matière et pouvait utiliser des données physiques contenues dans des bibliothèques séparées.

En 1973, MCN a été fusionné avec MCG (un code Monte-Carlo pour les hautes énergies de photons) pour former MCNG, un code pour le couplage neutron-gamma. Ce code a ensuite été fusionné avec MCG (code Monte-Carlo pour les photons) pour modéliser correctement les interactions photon-neutron. Depuis lors le code se dénomme MCNP et continue à être amélioré encore aujourd'hui grâce aux progrès des modèles physiques et en architecture de programmation. [29].

Les codes probabilistes requièrent une grande capacité de calcul, c'est pourquoi ils sont de plus en plus utilisés depuis le développement de la puissance des ordinateurs. Les codes de Monte-Carlo ont l'avantage de pouvoir résoudre des problèmes à géométrie complexe par rapport à des codes déterministes qui ne pourraient pas modéliser ce genre de problème. Cependant le temps de calcul est plus grand que pour des codes déterministes car il faut simuler un grand nombre de particules pour réduire au maximum l'écart-type de la grandeur physique calculée.

La technique utilisée par la méthode de Monte-Carlo est simple et réaliste. Elle consiste à suivre la vie de nombreux neutrons issus d'une source depuis leur naissance jusqu'à leur disparition (capture, fission, fuite) à travers une série d'événements aléatoires, alternativement de type transport et de type collision. Ces événements sont caractérisés par une répartition de probabilités et vont être tirés au sort. Ces tirages concernent plusieurs variables aléatoires [12] :

- La position, la direction et la vitesse du neutron
- La longueur du parcours du neutron entre deux interactions
- La nature de l'interaction du neutron avec le noyau (diffusion, capture, fission, fuite)

En plus de ces tirages au sort, il faut tenir compte de la dépendance énergétique de la probabilité d'interaction d'un neutron avec un noyau. La probabilité d'interaction est connue via les sections efficaces et varie en fonction de l'énergie du neutron. L'histoire d'un neutron est décrite et synthétisée à la figure 4.1.

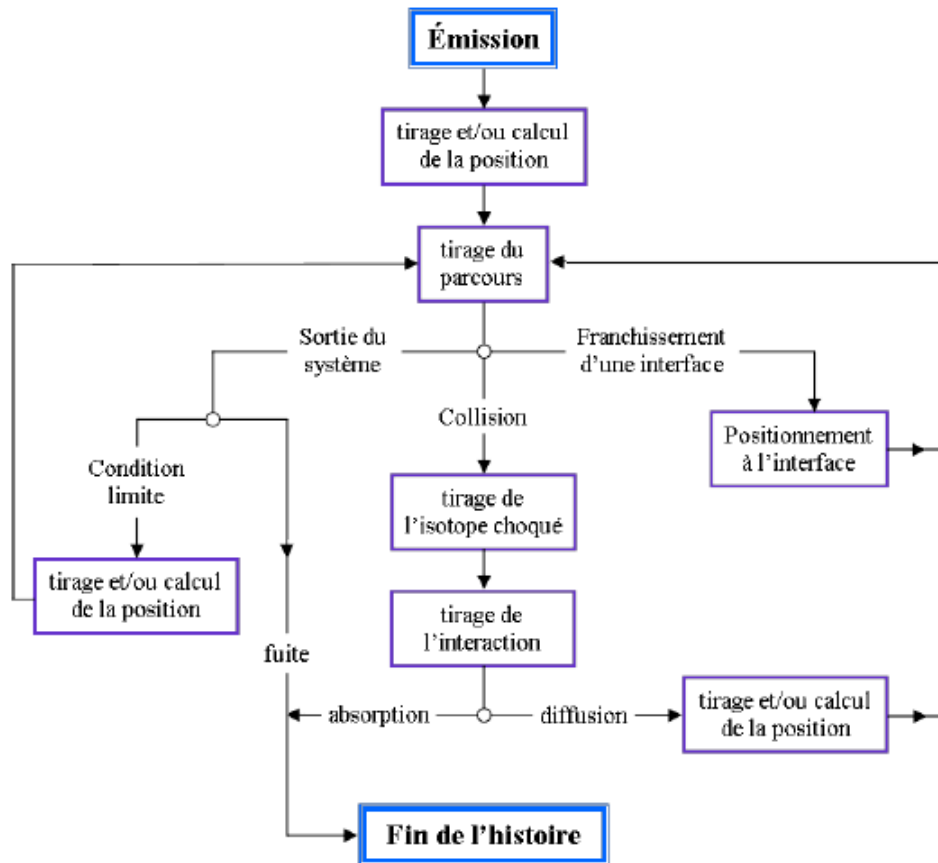


FIGURE 4.1 – Histoire d'un neutron lors d'une simulation Monte-Carlo [8]

MCNP utilise des bibliothèques de données atomiques et nucléaires d'énergie continue. Elles contiennent notamment les sections efficaces pour les interactions avec un neutron. Les utilisateurs peuvent choisir la table de données qu'ils veulent en spécifiant un identificateur qui est appelé ZAID. Il contient le numéro atomique Z, le nombre de masse A et l'ID de la bibliothèque choisie.

4.2 ALEPH v2

ALEPH v2 est un code Monte-Carlo d'épuisement, il est développé au SCK•CEN depuis 2004. Les codes d'épuisement couplent la simulation du transport des particules par la méthode de Monte-Carlo et l'évolution des compositions de nucléides sous flux neutronique par une méthode déterministe de type Runge-Kutta ou exponentielle de matrices. Le principe de ces codes d'épuisement est toujours le même [11] :

1. Le calcul du flux et du spectre neutronique via la méthode de Monte-Carlo qui ne dépend pas du temps (stationnaire).
2. La résolution d'un système d'équations différentielles ordinaires à coefficients constants pour un intervalle de temps donné en utilisant les taux de réactions calculés à l'aide du flux et du spectre neutronique.

Les concentrations des nucléides sont alors mises à jour et données à MCNP pour trouver le nouveau flux et spectre. Cela continuera jusqu'à la fin du processus d'irradiation.

Plusieurs codes Monte-Carlo d'épuisement vont maintenant être présentés et les avantages de ALEPH v2 par rapport à ces autres codes seront mis en avant.

Il existe une grande variété de codes Monte-Carlo d'épuisement développés à travers le monde. Une partie de ceux-ci sont présentés au tableau 4.1. Comme il peut être remarqué, la plupart de ces logiciels couplés utilisent MCNP ou MCNP(X) pour simuler le transport de particules et utilisent ORIGEN2 ou CINDER comme code d'épuisement.

TABLE 4.1 – Exemples de codes d'épuisement [6]

Nom du logiciel couplé	Code couplé	
	Code Monte-Carlo	Code d'épuisement
MOCUP (Idaho National Engineering Laboratory, USA), 1995.	MCNP	ORIGEN2
MCB (Royal Institute of Technology, Suède), 1999.	MCNP	CINDER
MCWO (Idaho National Engineering & Environmental Laboratory, USA), 1999	MCNP	ORIGEN2
MONTEBURNS (Los Alamos National Laboratory, USA),1999.	MCNP	ORIGEN2
MURE (Laboratoire de Physique Subatomique et de Cosmologie de Grenoble, Institut de Physique Nucléaire d'Orsay, France),2000.	MCNP(X)	Module d'épuisement propre
MCODE (MIT, USA), 2002.	MCNP	ORIGEN2
MCNP-ACAB (Universidad Politecnica de Madrid, UPM, Espagne), 2005.	MCNP	ACAB
MCNPX (Los Alamos National Laboratory, USA), 2006.	MCNP(X)	CINDER90
MCOR (Pennsylvania State University, USA, AREVA, Eriangen, Allemagne), 2006.	MCNP	ORIGEN-S puis KORIGEN
VESTA (IRSN, France), 2008.	MCNP, MORET	ORIGEN2, PHOENIX
TRIPOLI-4 (CEA, Saclay, France), 2003.	TRIPOLI-4	MENDEL
SERPENT (VTT, Technical Research Centre of Finland, Ltd), 2009.	SERPENT	Module d'épuisement propre

ALEPH, créé au SCK•CEN appartient à la même catégorie de codes d'épuisement que ceux présentés précédemment. En effet, il couple la méthode de Monte-Carlo pour le transport et un code de déplétion déterministe. La première version de ALEPH couplait MCNP(X) pour le transport et ORIGEN2.2 pour la déplétion.

ALEPH possède cependant des propriétés qui le différencie totalement des autres codes d'épuisement. La plus grosse différence est la consistance complète des bases de données de sections efficaces. Pour un nucléide, les mêmes bases de données de sections efficaces sont utilisées par MCNP(X) et par le code d'épuisement. Les taux de réactions sont calculés au début de chaque pas de temps via les flux et spectres calculés par MCNP(X). L'utilisateur peut changer des températures, des matériaux et même la géométrie pour refléter au mieux le processus d'irradiation. La facilité d'utilisation d'ALEPH est également une autre différence majeure par rapport aux autres codes d'épuisement.

Par contre, étant donné que ALEPH utilise ORIGEN2.2, il possède également toutes les limitations inhérentes à ce code d'épuisement. Les principales limitations sont les suivantes [11] :

1. La précision de la méthode d'exponentielle de matrice pour trouver la concentration en nucléides.
2. Une quantité limitée de données nucléaires.

Pour éviter ces limitations, le SCK•CEN a donc décidé d'implémenter une nouvelle version d'ALEPH : ALEPH v2 (et plus récemment ALEPH v2.7). Cette nouvelle version inclut un module avancé de calcul d'épuisement qui remplace ORIGEN2.2. Il est basé sur la méthode implicite de Runge-Kutta, RADAU5. D'autres améliorations ont également été faites [11] :

1. Augmentation du nombre de données nucléaires.
2. La méthode de prédicteur-correcteur a été implémentée.
3. Le calcul de la chaleur dégagée durant l'irradiation et durant la désintégration naturelle.
4. Le calcul des sources de neutrons dûs à la désintégration naturelle.
5. La diminution du nombre d'entrées requis par ALEPH v2 (16 $\rightarrow$ 5).

Toutes ces améliorations font de ALEPH v2 un outil très puissant et flexible. Il peut être utilisé pour n'importe quelle géométrie désirée, que ce soit un crayon de combustible ou un réacteur complet. De plus le calcul de certaines valeurs physiques est plus précis par rapport aux autres codes d'épuisements. Certains exemples peuvent être cités : La chaleur dégagée par un certain type de radiation, la dose biologique causée par la radiation α , les radiations β et γ . [11]

La conclusion suivante peut donc être tirée : ALEPH v2, grâce à ces améliorations, est donc supérieur à tous les autres codes du même type.

4.3 Structure d'un input ALEPH v2

Dans cette section, nous présenterons d'abord la structure générale d'un input ALEPH v2 classique. Nous détaillerons ensuite de plus en plus cette structure pour comprendre exactement comment fonctionne un input ALEPH v2.

Lorsqu'une simulation est lancée avec ALEPH v2, celui-ci va commencer par analyser l'input que l'utilisateur lui a fourni. Cet input se compose d'un input MCNP(X) classique et de quelques commandes supplémentaires qui se trouvent en haut de l'input MCNP(X). Il y a un minimum de commandes à fournir pour lancer une simulation avec ALEPH v2. Elles sont énumérées ci-dessous :

1. L'historique d'irradiation
2. Les matériaux dont l'évolution sera suivie ainsi que leur volume associé.
3. Les nombres des tallies qui contiennent des données sur les flux et les spectres et que l'utilisateur a sélectionné dans son input MCNP(X).
4. Les bibliothèques de données nucléaires à utiliser.
5. Le chemin d'accès vers la version de MCNP à utiliser.

La structure classique d'un input ALEPH v2 est présentée à la figure 4.2 et un exemple concret est présenté à l'annexe A. La partie encadrée en jaune de l'annexe A représente les commandes supplémentaires et l'input MCNP(X) est représenté par les 3 autres encadrés. Cet exemple sera analysé à la fin de ce chapitre, une fois que les concepts auront été abordés.

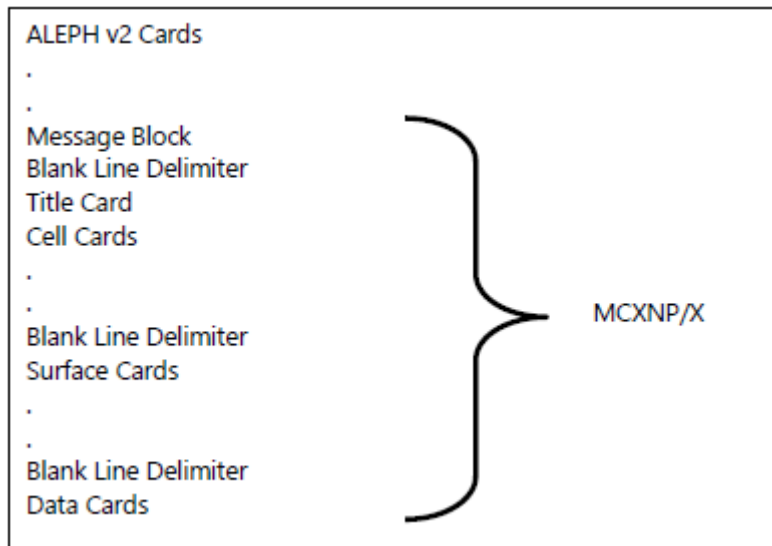


FIGURE 4.2 – Structure d'un input d'ALEPH v2 [11]

4.3.1 Les entrées d'ALEPH v2

Comme il a été dit à la section 4.3, l'encadré jaune de l'annexe A représente les commandes propres à ALEPH v2. L'analyse de ces commandes va être faite et quelques concepts vont être expliqués.

1. **DATN** : Ce mot clé indique le chemin d'accès à la bibliothèque de données nucléaires utilisée. Dans cet exemple c'est la bibliothèque JEFF-3.2
2. **MCNP** : Ce mot clé spécifie le chemin d'accès à la version MCNP utilisée et le nombre de CPU à utiliser en parallèle est indiqué par le dernier nombre. La version 5 de MCNP est utilisée pour tous les inputs et 16 CPU sont mis en oeuvre.
3. **BURN** : Mot clé spécifiant les matériaux pour lesquels la déplétion devra être effectuée.
4. **VOL** : Mot clé spécifiant les volumes de toutes les cellules contenant les matériaux indiqués par le mot clé BURN. L'ordre dans lequel ces volumes est spécifié correspond à l'ordre dans lequel les matériaux sont spécifiés par l'entrée BURN.
5. **TAL** : Mot clé spécifiant le nombre du tally qui sera utilisé pour déterminer les taux de réaction.
6. **IRP** : Ce mot clé sert à désigner une étape d'irradiation à puissance constante ainsi que le temps d'irradiation. La puissance est fournie en MW après la lettre *t* qui signifie que la puissance fournie est la puissance totale du système. Le temps d'irradiation est donné juste après la lettre *d* qui signifie que l'unité de temps sera des jours. D'autres unités de temps peuvent être spécifiées : secondes, minutes, heures, années, 10^3 années, 10^6 années, 10^9 années.
7. **DEC** : Ce mot clé est utilisé lorsque le système n'est plus sous flux neutronique. Les matériaux vont alors subir une décroissance naturelle. Les temps de décroissance sont fournis de la même manière que les temps d'irradiation, les unités de temps sont également les mêmes.
8. **PPM** : Ce mot clé permet d'ajuster la concentration d'un isotope ou d'un groupe d'isotopes à chaque étape d'irradiation. Dans le cas présent et dans de nombreuses spécifications de benchmark de PWR en burnup, la concentration de Bore soluble est fournie en fonction du temps. Le mot clé PPM permet donc d'adapter la concentration du Bore à chaque étape d'irradiation. Il faut fournir le nombre du matériau auquel il faut ajouter le Bore, l'identifiant du Bore et la quantité de celui-ci exprimée en parts par million (ppm). Dans l'exemple de l'annexe, le matériau 4 représente l'eau, le nombre 50000 est l'identifiant du Bore et le nombre précédé d'un signe négatif signifie que c'est une concentration massique.

4.3.2 La carte des cellules

La partie MCNP de l'input de ALEPH v2 démarre à partir du mot clé MESSAGE comme il est montré à la figure 4.2. L'input MCNP est constitué de 3 parties, chacune délimitée par un espace blanc. Ces trois parties sont : La carte des cellules, des surfaces et des données. Elles sont respectivement représentées par les couleurs bleue, rouge et verte à l'annexe A.

Un blanc et l'entrée du titre suivent la ligne contenant le mot clé MESSAGE. La carte des cellules vient après l'entrée du titre et a la structure générale suivante :

j m d geom params

1. j = numéro de la cellule, il doit commencer dans les 5 premières colonnes.
2. m = numéro du matériau.
3. d = la densité du matériau :
Pas d'entrée si la cellule est composée de vide
Entrée positive = densité atomique [$\text{atomes}/b \cdot \text{cm}$]
Entrée négative = densité volumique [g/cm^3]
4. geom = liste de toutes les surfaces avec leur signe et tous les opérateurs booléens. Les concepts du signe et des opérateurs seront abordés dans les deux prochaines sous-sections.
5. params = Spécification des paramètres relatifs à la cellule. Optionnel.

Intersections, unions et complémentaire

MCNP utilise un système de coordonnées cartésiennes (x,y,z). Tout l'espace est défini par des volumes contigus appelés cellules. La carte des cellules est composée d'une ou plusieurs cellules qui servent à décrire la forme et le matériau d'un espace physique. Ces différentes cellules sont définies par l'union, l'intersection ou le complémentaire de certaines régions. Ces trois opérateurs peuvent être vus comme les opérateurs logiques : OR, AND et NOT respectivement. La figure 4.3 montre l'union et l'intersection d'une région A et d'une région B. Le complémentaire de l'union entre A et B serait la région extérieure à l'union de A et B. Dans MCNP, l'intersection de deux régions est définie par un blanc entre A et B, l'union par un ":" et le complémentaire par #.

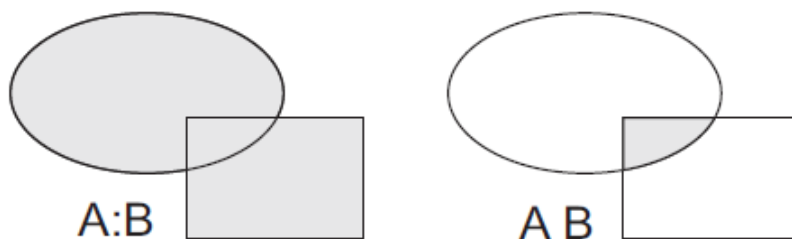


FIGURE 4.3 – L'union et l'intersection d'une région A et d'une région B [9]

Sens relatif à une surface

Chaque cellule est en fait délimitée soit par une ou plusieurs surfaces soit par l'infini. Tous les points (x,y,z) de l'espace doivent appartenir à une cellule ou être sur une surface délimitant une cellule. Ces surfaces sont définies dans la partie encadrée en rouge à l'annexe A.

Un exemple simple va illustrer les concepts d'union, d'intersection et de sens par rapport à une surface. La figure 4.4(a) montre deux plans infinis qui se rejoignent et forment deux cellules. La cellule 1 est définie comme étant tout ce qu'il y a à droite du plan 1 qui est en commun avec tout ce qu'il y en dessous du plan 2. Avant d'aller plus loin, il faut savoir que : Un plan, qui est situé à droite ou au dessus par rapport à un autre plan, aura un signe positif. Tandis qu'un plan, qui est situé à gauche ou en dessous par rapport à un autre plan, aura un signe négatif. La cellule 1 est une intersection entre la surface 1 et 2 et sera donc définie par : 1 -2.

La cellule 2 est définie par tout ce qui est à gauche de la surface 1 plus tout ce qui est au dessus de la surface 2. Il faut comprendre ici que l'union entre les deux surfaces est d'application. La cellule 2 sera donc définie par : -1 :2. Si la cellule 2 avait été définie comme une intersection : -1 2, seulement la partie commune aurait été définie (représentée par la région hachurée dans les 2 sens à la figure 4.4(b)).

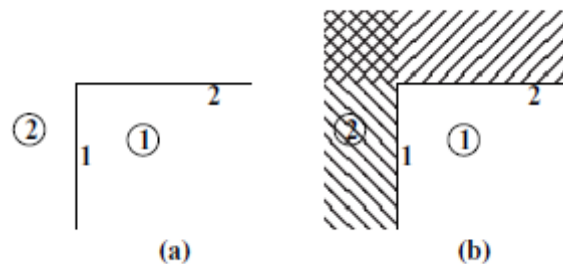


FIGURE 4.4 – Exemple illustrant la géométrie de 2 cellules [30]

Les structures répétées et les univers

MCNP permet à l'utilisateur de créer une certaine géométrie qui pourra être reproduite à un autre endroit de l'espace avec des propriétés différentes s'il le souhaite. Pour créer ces structures répétées, deux concepts importants vont devoir être introduits : Les univers et les réseaux (lattice).

Un univers peut être un réseau ou un certain nombre de cellules. Une fois qu'il est défini, il peut être utilisé pour remplir d'autres cellules. Une analogie peut être faite pour comprendre le concept. Un humain regarde le ciel par sa fenêtre, il ne voit qu'une partie du ciel car la fenêtre limite sa vue. Le ciel est infini mais l'humain est limité par ce que la fenêtre lui permet de voir. La fenêtre peut être vue comme la cellule qui sera remplie par le ciel qui est un univers. Il existe une règle à respecter lorsqu'un univers est employé :

La cellule d'un univers peut être de taille finie ou infinie mais l'univers doit remplir complètement l'espace de la cellule qu'il est censé remplir.[28]

Le mot clé utilisé par MCNP pour définir un univers est simplement "u=" et est spécifié dans la partie params de la cellule. L'utilisateur rentre un nombre de son choix après le signe d'égalité. Pour définir une cellule qui devra être remplie par un univers X, l'utilisateur utilisera le mot clé `FILL=X` dans la section params également.

Les réseaux sont des maillages qui permettent à l'utilisateur de définir autant d'éléments qu'il le souhaite dans son réseau. Il existe deux types de réseaux : Ceux constitués d'éléments carrés ou ceux constitués d'éléments hexagonaux. L'utilisateur peut utiliser les réseaux en employant le mot clé `LAT=` dans la section `params` de la cellule. L'utilisateur fait suivre le chiffre 1 ou 2 après le signe d'égalité s'il veut un réseau d'éléments carrés ou hexagonaux respectivement. Une fois que le réseau est défini, l'utilisateur peut faire le choix de remplir certains éléments par des matériaux, des tailles d'objets différents ou même laisser des éléments vides.

Pour définir un réseau d'éléments carrés, MCNP a besoin qu'au moins 4 côtés soient spécifiés. Les côtés opposés doivent évidemment être identiques et parallèles. L'ordre dans lequel l'utilisateur va rentrer ces surfaces est très important car cela déterminera dans quelles directions les indices du réseau augmenteront ou diminueront. Le premier index augmentera au-delà de la première surface listée et diminuera au-deçà de la deuxième surface listée. Le deuxième index augmentera au-delà de la troisième surface listée et diminuera au-deçà de la quatrième, etc. Voilà pourquoi il est très important de lister les surfaces parallèles par paire. La figure 4.5 illustre ce concept d'incrémentation des indexes.

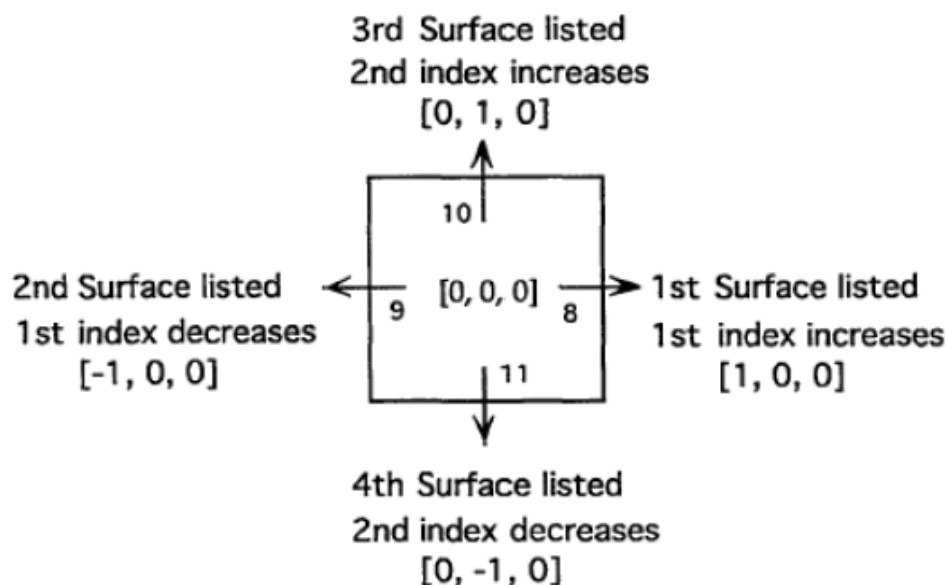


FIGURE 4.5 – Incrémentation des indexes [9]

Maintenant que les concepts sont introduits, il est possible de créer une structure répétée. Les deux lignes suivantes vont permettre de créer cette structure et sont données à titre d'exemple.

```
5 0 -8 9 -10 11 lat=1 fill=1 u=2 imp:n=1 $Reseau
6 0 9 -12 11 -14 3 -4 fill=2 imp:n=1 $Fenetre
```

La cellule 5 crée un réseau d'éléments carrés qui seront tous remplis par l'univers 1 et ce réseau sera défini comme l'univers 2. Les 4 surfaces ont bien été fournies par paires. Les éléments définis par les quatre surfaces vont donc se répéter de manière infinie en x et y. La cellule du réseau est d'elle-même infinie en z. La cellule 6 va avoir pour but de limiter l'univers 2 à une certaine fenêtre comme il a été expliqué précédemment. Six surfaces sont fournies pour créer cette fenêtre. Il faut noter que les deux cellules ont des numéros de matériau égaux à zéro. L'explication vient du fait que les matériaux ont déjà été définis dans les cellules qui composent l'univers 1.

Un réseau d'éléments carrés de taille finie est donc créé mais ce réseau contient uniquement des éléments de même géométrie et composés des mêmes matériaux. Pour pouvoir décrire chaque élément de la manière dont l'utilisateur le souhaite, une autre façon d'utiliser le mot clé `FILL` va être introduite.

Le mot clé `FILL` peut être suivi par les plages du réseau et ensuite par les univers qui vont remplir chaque élément individuellement. Trois paires de valeurs qui définissent les plages pour les trois indices (x,y et z) doivent être fournies. Chaque élément aura donc un identifiant de trois indices déterminés par rapport à l'élément [0 0 0]. La limite supérieure et la limite inférieure de la plage doivent être données et séparées par " : " pour chaque indice. La plage doit inclure tous les éléments qui apparaissent dans la cellule qui est remplie par le réseau. Par exemple, -5 :5 ou 0 :10 définissent une plage de 11 éléments et 0 :0 définit une plage de 1 élément. Une cellule contenant ce type d'entrée est présentée ci-après :

```
1 0 numeros de surface u=1 lat=1 fill= -1:0 0:1 0:0 3 4 5 6
```

Cet exemple illustre un réseau contenant une plage de 2 éléments pour l'indice x, de 2 éléments pour l'indice y et de 1 élément pour l'indice z. Le réseau contient au total 4 éléments et donc l'utilisateur doit spécifier 4 univers, différents ou non. Dans cet exemple, chaque élément aura un univers différent (3,4,5 et 6).

4.3.3 La carte des surfaces

La carte des surfaces contient la liste de toutes les surfaces nécessaires pour définir la géométrie des cellules. Elle possède la structure générale suivante :

j a list

1. j = Le numéro de la surface compris entre 1 et 99999, il démarre entre la première et la cinquième colonne.
2. a = Le mnémonique de la surface.
3. list = Les nombres qui décrivent la surface. (rayon, dimensions, etc)

Les surfaces utilisées dans le cadre de ce mémoire sont uniquement des plans et des cylindres. L'analyse, à la section 4.5.2, de la partie encadrée en rouge dans l'exemple fourni à l'annexe A permettra de comprendre comment définir ces deux types de surfaces.

Une table complète, contenant les différents types de surfaces, se trouve à l'annexe B.

4.3.4 La carte des données

Cette partie de l'input de MCNP est utilisée pour définir le type de particules, les matériaux rencontrés dans la spécification du problème, les sources de radiation, les valeurs physiques qui doivent être calculées (tallies), les bibliothèques de sections efficaces utilisées, le nombre et le type de output, les techniques de réduction de variance (concept abordé dans la section 4.4) et bien d'autres choses encore. En résumé ce bloc de commandes fournit toutes les spécifications du problème à part la géométrie.

La spécification des matériaux

Pour définir un matériau dans MCNP, il faut fournir trois informations :

1. Un nombre unique pour chaque matériau
2. La composition isotopique
3. La bibliothèque de section efficaces à utiliser

La densité n'est pas spécifiée ici mais elle l'est dans la partie de la carte des cellules. Cela permet de définir plusieurs cellules contenant le même matériau mais possédant différentes densités. Les isotopes sont spécifiés à l'aide d'un nombre appelé ZAID (Z A IDentification). Il contient 6 chiffres qui correspondent au numéro atomique Z et au nombre de masse A. L' U^{235} se notera par exemple 092235 ou plus simplement 92235. L'ID qui suit ces 6 chiffres correspond à la bibliothèque de section efficace employée.

Les différents matériaux utilisés dans les différents types d'assemblages sont décrits dans la suite de cette sous-section. La description des matériaux comprend une explication de leur rôle et un tableau reprenant leur composition et les identifiants associés à chaque isotope.

Le combustible

Le combustible utilisé dans les réacteurs nucléaires étudiés est du dioxyde d'uranium, UO_2 . Il faut noter que pour chaque assemblage, l'enrichissement en ^{235}U variait et certains assemblages ne contenaient que de l' ^{235}U et de l' ^{238}U . Ceci est valable aussi pour les barres de gadolinium.

L'eau

L'eau a un double rôle dans les réacteurs nucléaires. Elle permet de refroidir le coeur en évacuant la chaleur produite et elle agit comme modérateur. La modération consiste à ralentir les neutrons rapides lors de collisions sans toutefois absorber ceux-ci. L'hydrogène contenu dans l'eau permet une très bonne modération car il possède une section efficace de diffusion élastique élevée. Cependant il possède également une section efficace d'absorption élevée et c'est pourquoi les PWR fonctionnent avec de l'uranium enrichi. La composition naturelle de l'eau est fournie au tableau 4.2 :

TABLE 4.2 – Composition de l'eau [14] [15]

Élément	Isotope	Identifiant	Composition [%]
Hydrogène	^1H	1001	66.659
	^2H	1002	0.00766
Oxygène	^{16}O	8016	33.254
	^{17}O	8017	0.0126
	^{18}O	8018	0.066

L'hélium

Ce gaz a été choisi pour remplir le vide qui existe entre les pastilles de combustible et la gaine en zircaloy. Le choix s'est porté sur l'hélium car il n'est pas activable et prévient ainsi la formation de produits radioactifs gazeux dans l'interstice. La composition naturelle de l'hélium est fournie au tableau 4.3 :

TABLE 4.3 – Composition de l'hélium [16]

Élément	Isotope	Identifiant	Composition [%]
He	^3He	2003	0.000137
	^4He	2004	99.999863

Le zircaloy

Le zircaloy est le matériau employé pour les gaines du combustible et représente la première barrière de confinement. Les raisons pour lesquelles ce matériau a été choisi sont multiples : Le zircaloy possède une faible section efficace d'absorption des neutrons thermiques, il possède une bonne résistance thermique ainsi qu'une très bonne résistance à la corrosion par l'eau de mer. La composition naturelle du zircaloy est fournie au tableau 4.4 :

TABLE 4.4 – Composition du Zircaloy-4 [17] [18] [19] [20]

Élément	Isotope	Identifiant	Composition [%]
Zirconium	^{90}Zr	40090	50.5239
	^{91}Zr	40091	11.01804
	^{92}Zr	40092	16.8413
	^{94}Zr	40094	17.06716
	^{96}Zr	40096	2.7496
Chrome	^{50}Cr	24050	$4.31 \cdot 10^{-3}$
	^{52}Cr	24052	$8.3789 \cdot 10^{-2}$
	^{53}Cr	24053	$9.501 \cdot 10^{-3}$
	^{54}Cr	24054	$2.365 \cdot 10^{-3}$
Fer	^{54}Fe	26054	$1.169 \cdot 10^{-2}$
	^{56}Fe	26056	$1.8344 \cdot 10^{-1}$
	^{57}Fe	26057	$4.4 \cdot 10^{-3}$
	^{58}Fe	26058	$4.56 \cdot 10^{-4}$
Étain	^{112}Sn	50112	$1.455 \cdot 10^{-2}$
	^{114}Sn	50114	$9.75 \cdot 10^{-3}$
	^{115}Sn	50115	$5.1 \cdot 10^{-3}$
	^{116}Sn	50116	$2.181 \cdot 10^{-1}$
	^{117}Sn	50117	$1.152 \cdot 10^{-1}$
	^{118}Sn	50118	$3.6345 \cdot 10^{-1}$
	^{119}Sn	50119	$1.2885 \cdot 10^{-1}$
	^{120}Sn	50120	$4.8885 \cdot 10^{-1}$
	^{122}Sn	50122	$6.945 \cdot 10^{-2}$
	^{124}Sn	50124	$8.685 \cdot 10^{-2}$

Les barres de Gadolinium

Certains crayons des assemblages étudiés contiennent parfois quelques barres de combustible composées de Gadolinium. Cet élément est ajouté à l'oxyde d'uranium sous forme métallique pour réguler le flux de neutron en absorbant des neutrons. En effet, les sections efficaces de capture du ^{155}Gd et du ^{157}Gd sont très élevées, ce qui permet de contrôler la réactivité du coeur.

TABLE 4.5 – Composition des barres de gadolinium [21]

Élément	Isotope	Identifiant	Composition [%]
Uranium	^{235}U	92235	0.863
	^{238}U	92238	31.8
Oxygène	^{16}O	8016	66.53
Gadolinium	^{152}Gd	64152	0.001568
	^{154}Gd	64154	0.0170912
	^{155}Gd	64155	0.116032
	^{156}Gd	64156	0.1604848
	^{157}Gd	64157	0.122696
	^{158}Gd	64158	0.1947456
	^{160}Gd	64160	0.1713824

La spécification des sources

Il existe quatre façons différentes de définir une source à l'aide de MCNP : une source générale (définie par l'entrée SDEF, une source surfacique (SSR), une source de criticité (KCODE) et une source importée par l'utilisateur. Dans le cas de ce mémoire, seule une méthode a été utilisée et sera détaillée dans cette sous-section : la source de criticité.

Calculs de criticité

La criticité nucléaire est caractérisée par k_{eff} , qui est la valeur propre pour l'équation de transport des neutrons. En théorie des réacteurs, k_{eff} est le ratio du nombre de neutrons entre deux générations de neutrons successives. Lorsque $k_{eff} = 1$, la réaction en chaîne se maintient toute seule. Si $k_{eff} < 1$ alors la réaction en chaîne s'arrêtera au bout d'un certain temps. Par contre si $k_{eff} > 1$, le nombre de fissions va augmenter avec le temps, ce qui pourrait causer la fonte du coeur si le processus n'était pas maîtrisé. Le calcul de ce paramètre consiste à estimer le nombre moyen de neutrons produits pendant une génération pour chaque neutron initialement produit.

Pour réaliser un calcul de criticité avec MCNP, l'utilisateur doit fournir au moins 4 paramètres à l'entrée KCODE :

1. Le nombre d'histoires de sources de neutrons.
2. La prédiction initiale de k_{eff} .
3. Le nombre de cycles à ignorer avant le calcul de k_{eff} .
4. Le nombre de cycles total à réaliser.

Il faut savoir que pour faire un calcul de k_{eff} , il faut fournir une source de criticité qui est différente des problèmes à source fixe. En effet, dans un problème à source fixe, la source qui est échantillonnée pendant tout le processus ne change jamais. Alors que dans un calcul de criticité, la source varie de cycle en cycle. A chaque cycle, les neutrons issus de la fission sont capturés pour fournir les nouvelles sources de fission du prochain cycle. Une source surfacique ou une source importée par l'utilisateur ne seront donc pas compatibles. Pour définir une source initiale de fission, l'utilisateur devra donc soit fournir une entrée KSRC composée d'un ou plusieurs jeux de coordonnées spatiales (x, y et z), soit une entrée SDEF pour définir des points répartis uniformément dans un volume, ou fournir un fichier SRCTP contenant les sources d'un calcul de criticité déjà effectué.

Pour chaque cycle du calcul de k_{eff} , les neutrons provenant de M sources sont émis de manière isotrope. Le nombre de sources, M, varie évidemment de cycle en cycle. Les neutrons sont transportés à travers toute la géométrie du problème via le processus de parcours aléatoire (expliqué à la section 4.4.2) à l'exception du fait que la fission est traitée comme une capture. Dès qu'une collision se produit, quatre étapes sont suivies par MCNP :

1. Les trois estimateurs de durée de vie des neutrons prompts sont accumulés.
2. Si la fission est possible, les trois estimateurs de k_{eff} sont accumulés.
3. Si la fission est possible, les $n \geq 0$ sites de fission de chaque collision sont sauvegardés pour servir de sources de neutrons au prochain cycle.

Avec n qui est calculé de la manière suivante :

$$n = [W \vec{V} \left(\frac{\sigma_f}{\sigma_t} \right) \left(\frac{1}{k_{eff}} \right) + \text{random number}] \quad (4.1)$$

où

- W = Poids des neutrons
- $\vec{V}$ = Nombre moyen de neutrons produits par la fission à l'énergie incidente de la collision.
- σ_f = La section efficace microscopique de fission du matériau.
- σ_t = La section efficace microscopique totale du matériau.
- k_{eff} = L'estimation du k_{eff} provenant du cycle précédent ou de la seconde entrée de KCODE si c'est le premier cycle.

4. Le nucléide qui est entré en collision avec le neutron et la réaction entre les deux sont échantillonnés. Seule la réaction de fission n'est pas permise car elle est traitée comme une capture. Les neutrons qui auraient été créés sont déterminés par trois méthodes différentes pour estimer k_{eff} durant le cycle en cours. Les trois estimateurs sont : L'estimateur de collision, l'estimateur d'absorption et l'estimateur de longueur de parcours.

Estimateur de collision

$$k_{eff}^C = \frac{1}{N} \sum_i W_i \frac{\sum_k \sigma_{f_k} f_k \bar{v}_k}{\sum_k f_k \sigma_{T_k}} \quad (4.2)$$

où

- i est sommé pour toutes les collisions d'un cycle actif pour lequel la fission est possible.
- k est sommé pour tous les nucléides du matériau impliqués dans la i^{me} collision.
- σ_{T_k} = La section efficace microscopique totale.
- σ_{f_k} = La section efficace microscopique de fission.
- $\bar{v}_k$ = Le nombre de neutrons prompts moyens produits par la fission du nucléide rencontré pour une certaine énergie incidente.
- f_k = La fraction atomique du nucléide k .
- N = La taille nominale de la source de neutrons pour chaque cycle.
- W_i = Le poids des neutrons entrant en collision.

k_{eff}^C représente le nombre de neutrons de fission moyen créés par cycle. L'estimation de collision de la durée de vie des neutrons prompts est le temps moyen requis pour qu'un neutron de fission, issu d'une source, soit sorti du système par une capture, une fission ou une fuite. Il est calculé via la formule suivante :

$$\tau_r^C = \frac{\sum W_e T_e + \sum (W_c + W_f) T_x}{\sum W_e + \sum (W_c + W_f)} \quad (4.3)$$

où T_e et T_x sont respectivement les temps entre la naissance d'un neutron jusqu'à sa fuite hors du système et jusqu'à sa collision. W_e est le poids perdu à chaque fuite et $W_c + W_f$ est le poids perdu par capture ou fission à chaque collision.

$$W_c + W_f = W_i \frac{\sum_k (\sigma_{f_k} + \sigma_{c_k}) f_k}{\sum_k f_k \sigma_{T_k}} \quad (4.4)$$

où σ_{c_k} est la section efficace microscopique de capture ($n, 0n$).

Estimateur d'absorption

L'estimateur d'absorption de k_{eff} pour chaque cycle actif entre en compte lorsqu'un neutron interagit avec un nucléide fissile. Selon que ce soit une absorption analogue ou implicite (concepts abordés à la section 4.4.2), l'estimateur diffère légèrement. Pour une absorption analogue, l'estimateur est donné par :

$$k_{eff}^A = \frac{1}{N} \sum_i W_i \bar{v}_k \frac{\sigma_{f_k}}{\sigma_{f_k} + \sigma_{c_k}} \quad (4.5)$$

où i est sommé pour toutes les absorptions analogues du $k^{ième}$ nucléide.

Pour les absorptions implicites, l'estimateur est donné par :

$$k_{eff}^A = \frac{1}{N} \sum_i W_i' \bar{v}_k \frac{\sigma_{f_k}}{\sigma_{f_k} + \sigma_{c_k}} \quad (4.6)$$

où i est sommé pour toutes les collisions pour lesquelles la fission est possible et $W_i' = W_i (\sigma_{c_k} + \sigma_{f_k}) / \sigma_{T_k}$ représente le poids absorbé par l'absorption implicite.

La seule différence entre l'estimateur d'absorption implicite et l'estimateur de collision est que le premier utilise uniquement le nucléide impliqué dans la collision pour réaliser l'estimation de k_{eff} alors que le second fait une moyenne sur tous les nucléides présents dans le matériau rencontré pour réaliser l'estimation de k_{eff} .

L'estimation d'absorption de la durée de vie des neutrons prompts est, comme pour l'estimation de collision, le temps moyen requis pour qu'un neutron de fission issu d'une source soit sorti du système par une capture, une fission ou une fuite. Il est calculé via la formule suivante pour l'absorption analogue :

$$\tau_r^A = \frac{\sum W_e T_e + \sum W_c T_c + \sum W_f T_f}{\sum W_e + \sum W_c + \sum W_f} \quad (4.7)$$

Avec T_c et T_f , les temps entre la naissance d'un neutron jusqu'à sa capture et sa fission respectivement. Pour l'absorption implicite :

$$\tau_r^A = \frac{\sum W_e T_e + \sum (W_c + W_f) T_x}{\sum W_e + \sum W_c + \sum W_f} \quad (4.8)$$

Estimateur de longueur de parcours

Cet estimateur est accumulé à chaque fois qu'un neutron parcourt une distance d dans une cellule contenant un matériau fissible.

$$k_{eff}^{TL} = \frac{1}{N} \sum_i W_i \rho d \sum_k f_k \bar{v}_k \sigma_{f_k} \quad (4.9)$$

où

- i est sommé pour toutes les trajectoires des neutrons.
- ρ est la densité atomique de la cellule.
- d est la longueur du parcours suivi par un neutron lors d'un évènement précédent.

Etant donné que $\rho d \sum_k f_k \bar{v}_k \sigma_{f_k}$ représente le nombre attendu de neutrons de fission produits durant la distance d , k_{eff}^{TL} est le troisième estimateur du nombre moyen de neutrons de fission produits durant un cycle et exprimé par rapport au nombre nominal de neutrons issus des sources de fission.

L'estimateur de longueur de parcours pour la durée de vie des neutrons prompts est accumulé à chaque fois que le neutron parcourt une distance d dans n'importe quel matériau de n'importe quelle cellule. Il est donné par :

$$\tau_r^{TL} = \frac{\sum_i W_i d / v}{W_s} \quad (4.10)$$

avec W_s le poids de la source sommé pour tous les historiques du cycle et v la vitesse.

MCNP permet également de combiner les trois estimateurs individuels de k_{eff} et τ_r , que ce soit en combinant 2 ou 3 de ceux-ci à la fois. L'estimateur combiné est calculé en utilisant une estimation de vraisemblance maximale. Ces trois estimateurs combinés pour k_{eff} et τ_r représentent les meilleurs estimations finales pour un calcul MCNP.

La spécification des Tallies

Les tallies sont des mesures des grandeurs physiques réelles. Ce concept sera abordé également dans la section 4.4. Le seul type de tally utilisé dans ce mémoire est la mesure du flux neutronique dans les cellules qui ont un intérêt.

Quatre valeurs doivent être fournies pour calculer un tally : le type de tally, le type de particule, les cellules dans lesquelles il doit être évalué et les volumes de ces cellules. La façon de définir un tally se présente sous la forme suivante :

$$\begin{array}{l} Fn : pl \ C_i \\ SDn \ V_i \end{array}$$

La première ligne décrit le type de tally F_n , le type de particule (pl) et les cellules dans lesquelles la grandeur physique doit être prise en compte C_i . La deuxième ligne décrit les volumes des différentes cellules mentionnées V_i . Ces volumes ne doivent pas forcément être renseignés mais dans le cas d'un réseau de cellules, il vaut mieux les fournir pour éviter que MCNP les calcule de façon erronée.

4.4 Concepts physiques

Après avoir décrit les concepts relatifs à la géométrie de MCNP, la physique qui se cache derrière ce programme va être décortiquée pour comprendre comment elle est modélisée en code informatique.

La physique des interactions des neutrons, photons et électrons est l'essence même de MCNP. Deux concepts très importants seront d'abord abordés : le poids et le parcours des particules. Les tallies et le processus de calcul employé par ALEPH pour déterminer les concentrations des nucléides seront ensuite expliqués. Le théorème central limite, qui est à la base de MCNP, sera abordé lors de la partie consacrée à la précision de la méthode de Monte Carlo. Enfin, la présentation des différentes surfaces limites terminera cette section. Tous les concepts décrits dans cette section sont une base pour la compréhension de la méthode de Monte-Carlo.

4.4.1 Le poids

Le poids est un outil qui sert à ajuster la différence qui existe entre la simulation directe du processus physique de transport réel et la simulation mise en oeuvre. Si un code Monte-Carlo était toujours exécuté avec la même distribution de probabilités que la nature, sa variance et sa moyenne seraient les mêmes que celles de la nature. La variance naturelle étant souvent trop élevée, les codes Monte-Carlo utilisent des techniques de réduction de variance.

Si MCNP était utilisé pour simuler le transport des particules de manière tout à fait exacte, alors chaque particule MCNP serait une particule physique réelle. Pour réduire les temps de calcul, MCNP ne simule pas exactement le phénomène réel. Par exemple, chaque particule MCNP pourrait représenter w particules réelles émises depuis une source. Ces w particules auraient normalement toutes des parcours aléatoires mais la particule MCNP représentant ces w particules aura un seul parcours aléatoire. Ce n'est donc pas une simulation exacte mais le vrai nombre de particules physiques est préservé du point de vue des moyennes statistiques. Chaque particule MCNP est multipliée par le poids (ici w) pour que les résultats de toutes les particules physiques soient affichés dans les résultats finaux. Cela permet à l'utilisateur de normaliser ses calculs par rapport à une source de n'importe quelle intensité.[29]

En plus de cet avantage, le poids des particules permet également de ne pas affecter les résultats physiques moyens attendus lorsque l'utilisateur utilise des méthodes de biaisage. Une telle technique

serait, par exemple, l'augmentation du nombre de particules à échantillonner à certains endroits d'intérêt sans toute fois augmenter le nombre de particules aux endroits de faible intérêt. En faisant cela, l'utilisateur biaise les évènements en augmentant leur probabilité de se produire, il faut donc diviser le poids des particules par ce facteur d'augmentation pour conserver les résultats physiques moyens attendu. [29]

En résumé, le poids permet de réaliser un tirage uniquement une partie du problème tout en gardant les mêmes résultats et la même précision mais surtout en réduisant les temps de calcul par rapport à une simulation exacte.

4.4.2 Le parcours des particules et leurs interactions

Quand une particule est émise depuis une source, un chemin est créé pour suivre cette particule. Si le parcours d'une particule subit une collision, un autre parcours est créé. Si un des deux parcours subit une réaction ($n, 2n$) alors un autre parcours est créé, pour un total de trois parcours. Il est important de connaître les longueurs de ces parcours à l'intérieur d'une cellule car elles seront utilisées pour calculer des grandeurs physiques telles que des flux ou des apports d'énergie. Les parcours qui traversent une surface ou qui subissent une collision permettront également de déterminer des grandeurs physiques bien connues telles que la criticité. [29]

Il est donc tout d'abord intéressant de savoir comment le tirage au sort d'une collision est effectué. Pour une cellule de composition fixe donnée, la probabilité qu'une particule subisse une première collision durant sa trajectoire, entre l et $l + dl$, est donnée par la formule suivante :

$$p(l)dl = e^{-\Sigma_t l} \Sigma_t dl \quad \text{avec } \Sigma_t = \text{section efficace macroscopique totale du milieu} \quad (4.11)$$

En définissant un nombre aléatoire ξ sur l'intervalle $[0,1]$:

$$\xi = \int_0^l e^{-\Sigma_t s} \Sigma_t ds = 1 - e^{-\Sigma_t l} \quad (4.12)$$

Et en isolant l :

$$l = -\frac{1}{\Sigma_t} \ln(1 - \xi) \quad (4.13)$$

Etant donné que $1 - \xi$ est distribué de la même manière que ξ , la formule précédente devient :

$$l = -\frac{1}{\Sigma_t} \ln(\xi) \quad (4.14)$$

Cette équation représente la distance par rapport à la collision. MCNP va donc générer un nombre aléatoire compris entre 0 et 1 pour chaque étape de la vie d'un neutron afin de déterminer la longueur de chaque parcours.

Une fois que la longueur d'un parcours jusqu'à la collision est connue, la collision en elle-même doit être analysée. Lorsqu'une interaction entre une particule MCNP et un noyau se produit, MCNP va agir de la manière séquentielle suivante : [29]

1. Le nucléide, avec lequel le neutron a interagi, est identifié.
2. Soit un traitement $S(\alpha, \beta)$ (concept abordé plus tard dans cette sous-section) est utilisé soit la vitesse du noyau est tirée, pour de faibles énergies neutroniques.
3. Les photons sont générés pour un futur transport possible
4. La capture neutronique est modélisée.
5. La diffusion élastique ou une réaction inélastique est sélectionnée, la nouvelle direction ainsi que la nouvelle énergie de la particule sortante sont déterminées.
6. Si l'énergie du neutron est assez faible pour que le traitement $S(\alpha, \beta)$ soit applicable et si la table existe, alors la collision est modélisée par ce traitement et remplace l'étape 5.

1. Selection du nuclide

Pour déterminer le nuclide avec lequel le neutron a interagi dans le milieu considéré, MCNP va déterminer un nombre aléatoire, ϵ , appartenant à l'intervalle $[0,1]$. Pour un matériau constitué de n nuclides alors le k^{eme} sera sélectionné si :

$$\sum_{i=1}^{k-1} \Sigma_{ti} < \epsilon \sum_{i=1}^n \Sigma_{ti} < \sum_{i=1}^k \Sigma_{ti} \quad (4.15)$$

L'analyse de cette relation permet de dire que plus un nuclide aura une section efficace macroscopique totale élevée et plus il aura de chance d'être sélectionné. Ce qui est conforme à la réalité. Pour que les sections efficaces soient les plus précises possible, un traitement thermique est appliqué pour ajuster les sections efficaces des tables classiques si jamais la température fournie diffère de celle qui a été utilisée pour évaluer les sections efficaces.

2. Traitement thermique des gaz libres

Une collision entre un neutron et un atome est affectée par le mouvement thermique de l'atome et aussi par la présence d'autres atomes aux alentours. Il faut donc prendre cet effet en compte dans MCNP pour éviter de trop grosses approximations. MCNP utilise un traitement thermique basé sur l'approximation des gaz libre pour en tenir compte. Il existe également un traitement $S(\alpha, \beta)$ qui tient compte des liaisons chimiques et de la structure cristalline pour des énergies neutroniques faibles. Cependant ce traitement n'est disponible que pour une quantité limitée de substances et de températures.

Le traitement thermique des gaz libre se base sur quelques hypothèses :

1. Le milieu est un gaz libre de l'ordre du poids atomique et pour des énergies neutroniques telles que les effets thermiques sont significatifs.
2. La section efficace de diffusion élastique à une température de 0 est quasi indépendante de l'énergie du neutron incident.
3. Les sections efficaces de réaction sont quasi indépendantes de la température.

Ces hypothèses permettent à MCNP de simuler des problèmes avec un traitement thermique de manière presque aussi rapide que des problèmes sans aucun traitement thermique.

Le traitement thermique des gaz libre va donc consister à ajuster les sections efficaces de diffusion élastique et à prendre en compte la vitesse du noyau ciblé.

Le premier aspect consiste à augmenter d'un certain facteur F les sections efficaces élastiques qui sont évaluées à une température de zéro sauf si les sections efficaces fournies dans la table ont été calculées pour la même température que celle requise par le problème. Si toutes les cellules qui contiennent un nuclide ont toutes la même température et que celle-ci ne varie pas avec le temps, alors l'ajustement des sections efficaces se fera avant la simulation. Si ce n'est pas le cas, les sections efficaces seront réduites à la valeur qu'elles possèdent à une température de 0 avant la simulation et puis elles seront ajustées au moment où elles seront utilisées pendant la simulation.

Le deuxième aspect du traitement thermique des gaz libres consiste à prendre en compte la vitesse du noyau ciblé. Cette dernière est tirée au sort et soustraite de la vitesse du neutron pour obtenir la vitesse relative. La collision est tirée au sort dans le repère au repos du noyau ciblé et les vitesses des neutrons obtenues après la collision sont transformées dans le repère du laboratoire en ajoutant la vitesse du noyau ciblé. Pour tirer au sort la vitesse du noyau ciblé, MCNP va se baser sur la distribution Maxwellienne des vitesses du noyau ciblé suivante : [29]

$$p(V) = \frac{4}{\pi^{1/2}} \beta^3 V^2 e^{-\beta^2 V^2} \quad \beta = \left(\frac{AM_n}{2kT} \right)^{1/2} \quad (4.16)$$

A représente la masse du noyau ciblé exprimé en unité de masse de neutron, M_n est la masse d'un neutron en $\frac{MeV \cdot sh^2}{cm^2}$, kT est la température d'équilibre du noyau ciblé en MeV et V est la vitesse scalaire du noyau ciblé.

Il faut cependant également tenir compte de la direction des particules. C'est pourquoi MCNP va tirer au sort la valeur du cosinus, μ_t , de l'angle entre la vitesse du neutron incident et la vitesse du noyau ciblé sur l'intervalle $[-1 \ 1]$. La distribution de probabilités des vitesses et des directions du noyau ciblé, sur laquelle va se baser MCNP pour tirer au sort la vitesse du noyau ciblé, sera la suivante :

$$P(V, \mu_t) \propto \frac{\sqrt{v_n^2 + V^2 - 2Vv_n\mu_t}}{v_n + V} \left(V^3 e^{-\beta^2 V^2} + v_n V^2 e^{-\beta^2 v_n^2} \right) \quad (4.17)$$

A l'aide d'un algorithme, MCNP va finalement pouvoir déterminer la vitesse du noyau ciblé.

3. Génération des photons

Les photons ne sont générés que si le problème MCNP est un problème couplé pour les neutrons et photons et que si le nucléide, qui entre en collision avec le neutron, possède une section efficace de production de photons non nulle. Dans le cas de ce mémoire, seuls les problèmes MCNP pour le transport des neutrons sont étudiés, cette étape ne sera donc pas prise en considération.

4. Capture neutronique

Une fois que le nucléide est identifié et que le traitement thermique a été effectué ou pas, il faut s'intéresser au type de réaction qui peut se produire durant une collision. La première réaction envisagée par MCNP est donc la capture du neutron. Deux cas vont être traités : la capture analogue et implicite.

La capture analogue consiste à tuer la particule incidente avec une probabilité $\frac{\sigma_c}{\sigma_t}$, où σ_c représente la section efficace de capture et σ_t est la section efficace totale du nucléide rencontré. Dans ce processus, toute l'énergie et tout le poids apportés par la particule incidente sont déposés dans la cellule où la collision a eu lieu.

La capture implicite consiste à réduire le poids du neutron incident de la manière suivante :

$$W_n = (1 - \frac{\sigma_c}{\sigma_t})W_n \quad (4.18)$$

Dans ce processus, seulement une partie de l'énergie et du poids de la particule incidente sont transférés à la cellule où la collision s'est produite. Cette partie correspond à la partie de la particule qui a été capturée. C'est cette méthode qui est utilisée par MCNP par défaut.

5. Diffusion élastique ou inélastique

Après avoir considéré la probabilité de capture du neutron, MCNP va analyser les deux dernières possibilités : la diffusion élastique ou la diffusion inélastique. Lors d'une collision élastique, l'énergie du système est conservée après collision alors que ce n'est pas le cas lors d'une collision inélastique. Si une collision inélastique se produit, alors le noyau ciblé sera amené à un état d'énergie excité. Il va rapidement se stabiliser en émettant un certain type de radiation ou en créant une réaction de fission. Le choix de la diffusion élastique se fait via la probabilité suivante :

$$\frac{\sigma_{el}}{\sigma_{el} + \sigma_{inel}} = \frac{\sigma_{el}}{\sigma_t - \sigma_c} \quad (4.19)$$

Avec :

1. σ_{el} = la section efficace microscopique de diffusion élastique.
2. σ_{inel} = la section efficace microscopique de diffusion inélastique qui comprend tous les processus générant des neutrons.
3. σ_c = la section efficace microscopique de capture qui est la somme de toutes les sections efficaces faisant disparaître le neutron incident et qui n'en produit pas
4. σ_t est évidemment la section efficace microscopique totale, qui est la somme des trois autres sections efficaces.

Etant donné que la probabilité de capture du neutron a déjà été traitée par MCNP, la probabilité restante totale vaut : $\sigma_t - \sigma_c$. C'est pourquoi la probabilité d'avoir une collision élastique ou inélastique se calcule par rapport à cette probabilité totale là.

La sélection de la section efficace inélastique est évidemment donnée par la probabilité complémentaire de la relation 4.19 :

$$\frac{\sigma_{inel}}{\sigma_t - \sigma_c} \quad (4.20)$$

Si la collision est inélastique, alors le choix du type de réaction inélastique se fait de la même manière que le choix du nucléide qui interagit avec un neutron. Un nombre aléatoire ξ est déterminé sur l'intervalle $[0, 1]$ et sachant qu'il existe N types de réactions inélastiques alors le k^{eme} type de réaction sera choisi si :

$$\sum_{i=1}^{k-1} \sigma_i < \xi \sum_{i=1}^N \sigma_i < \sum_{i=1}^k \sigma_i \quad (4.21)$$

Avec σ_i la section efficace de la i^{eme} réaction inélastique.

Les directions et les énergies des particules émises après une collision avec un neutron sont tirées au sort dans les bases de données des sections efficaces appropriées. Un tirage au sort est effectué dans les distributions angulaires données pour un neutron diffusé après un évènement de type élastique ou inélastique. L'énergie du neutron est alors déduite de la cinématique à deux corps (neutron/noyau). Les autres types de réaction sont représentés par différentes données. Il existe deux types de représentation : Soit l'énergie et l'angle post-collision sont tirées au sort de manière indépendante soit ils sont corrélés. Les détails de ces représentations ne seront pas abordés ici.

6. Traitement $S(\alpha, \beta)$

Comme il a été mentionné dans la partie du traitement thermique des gaz libres, le traitement thermique $S(\alpha, \beta)$ est une représentation complète de la diffusion d'un neutron thermique par des molécules et par la structure cristalline lorsque l'énergie du neutron incident est faible. Les paramètres α β représentent respectivement la quantité de mouvement et le transfert d'énergie. Deux types de réactions sont compatibles avec ce traitement :

1. La diffusion inélastique avec une représentation couplée énergie/angle provenant d'une loi de diffusion.
2. La diffusion élastique avec un traitement angulaire provenant des paramètres du réseau cristallin.

Grâce à toutes ces étapes, MCNP est capable de déterminer tous les paramètres (énergie, direction de propagation et vitesse) qui caractérisent un neutron après une collision. MCNP est désormais également capable de déterminer toutes les longueurs des parcours de toutes les particules dans chaque cellule. C'est cette grandeur physique qui aura le plus d'intérêt dans le cadre de ce mémoire car elle permettra de calculer les flux neutroniques à travers toutes les cellules qui ont de l'importance d'un point de vue neutronique. Ces grandeurs physiques seront affichées si l'utilisateur demande à MCNP de le faire, à l'aide d'un concept appelé : les Tallies.

4.4.3 Tallies et calculs réalisés par ALEPH v2

Il existe 7 types de tally pour les neutrons. Ils sont tous normalisés pour être exprimés par particule émise sauf dans le cas d'un calcul de criticité. Le type de tally qui est intéressant pour ce mémoire est le tally de flux ($F4$). La suite de cette sous-section présente la méthodologie de MCNP pour calculer ce flux.

Le flux de neutrons moyen dans une cellule peut être exprimé de la façon suivante :

$$\begin{aligned}
\bar{\phi}_V &= \frac{1}{V} \int dE \int dt \int dV \int d\Omega \Psi(\vec{r}, \Omega, E, t) \\
&= \frac{1}{V} \int dE \int dV \int d\Omega \int dt v n(\vec{r}, \Omega, E, t) \\
&= \frac{1}{V} \int dE \int dV \int dt v N(\vec{r}, E, t)
\end{aligned}$$

Avec $N(\vec{r}, E, t) = \int d\Omega n(\vec{r}, \Omega, E, t)$ la densité de neutrons en un point et qui ne dépend pas de leur trajectoire. En définissant un élément infinitésimal de longueur de parcours, ds , qui est équivalent à $ds = vdt$, l'équation du flux de neutrons moyen peut être réécrite :

$$\bar{\phi}_V = \frac{1}{V} \int dE \int dV \int ds N(\vec{r}, E, t) \quad (4.22)$$

$N(\vec{r}, E, t)ds$ peut être vu comme la densité de longueur de parcours et donc le flux moyen dans une cellule peut être estimé en sommant toutes les longueurs de parcours à l'intérieur de cette cellule. Ceci explique pourquoi MCNP calcule le flux moyen en sommant toutes les longueurs de parcours : T_l . MCNP multiplie ce résultat par le poids des particules et le normalise par rapport au volume de la cellule : $\frac{WT_l}{V}$. $\bar{\phi}_V$ est subdivisé en plusieurs parties qui dépendent du temps et de l'énergie des neutrons. Cette subdivision est réalisée de manière à ce que les longueurs des parcours soient découpées en intervalles de temps et d'énergie appropriés.

Il faut noter que l'utilisateur a la possibilité de normaliser le flux des cellules par un autre volume que celui calculé par MCNP. Il faut alors fournir une entrée `SD` à MCNP. C'est d'ailleurs ce qui a été fait lors de ce mémoire parce que l'utilisation de structures répétées peut empêcher MCNP de calculer correctement les volumes des cellules. La liste des 7 tallies est fournie à l'annexe C pour information.

Une fois que les flux sont calculés par MCNP dans toutes les cellules requises par l'utilisateur via les tallies, ALEPH v2 va calculer les taux de réaction en utilisant ces flux. La façon de calculer ces taux de réaction est décrite par l'équation suivante :

$$R_{i,j} = N_j \int \sigma_{i,j}(E) \phi_k^{MCNP}(E) dE = N_j \sum_{g=1}^n \sigma_{i,j,g} \phi_{k,g}^{MCNP} \quad (4.23)$$

avec N_j la concentration du nucléide j , $\sigma_{i,j}$ la section efficace de la réaction i qui est dépendante de l'énergie E du neutron incident, ϕ_g le flux de neutrons moyenné sur la plage d'énergie g , $\sigma_{i,j,g}$ la section efficace de la réaction i moyennée sur la plage d'énergie g .

[11]

Il faut ensuite multiplier les taux de réaction obtenus par l'intensité de la source, S exprimée en $\frac{\text{nombre de particules sources}}{s}$. S est calculé via l'équation suivante :

$$S = \frac{P_{tot}}{C \cdot \sum_k \sum_j N_{j,k} \sum_i R_{i,j,k} Q_{i,j,k}} \quad (4.24)$$

avec k le type de matériau, j le type de nucléide et i le type de réaction. P_{tot} correspond à la puissance fournie par l'utilisateur et qui est constante tout au long de la période d'irradiation fournie. $Q_{i,j,k}$ est l'énergie cédée par le processus de type i qui a été déclenché par un neutron avec un nucléide j du matériau

k . $R_{i,j,k}$ est le taux de réaction du processus en question, qui est calculé selon l'équation (4.23). $N_{j,k}$ est la concentration du nucléide j dans le matériau k et C est une constante qui convertit les MW en $MeV.s$. [11]

Les valeurs des énergies libérées par toutes les réactions et pour tous les matériaux, $Q_{i,j,k}$, sont obtenues dans les bases de données qui contiennent toutes les énergies d'activation par un neutron. Les types de réaction, autres que celle de fission et de capture, ont une contribution négligeable pour l'énergie récupérable. Il n'y a également pas de différence d'énergie récupérée en fonction des différents matériaux, l'équation (4.24) peut donc être réécrite :

[11]

$$S = \frac{P_{tot}}{C \cdot \sum_k \sum_j N_{j,k} (R_{f,j,k} Q_{f,j} + R_{c,j,k} Q_{c,j})} \quad (4.25)$$

La puissance pour chaque matériau sera calculée comme suit :

$$P_k = S \cdot C \cdot \sum_j N_{j,k} (R_{f,j,k} Q_{f,j} + R_{c,j,k} Q_{c,j}) \quad (4.26)$$

Maintenant que l'intensité de la source est connue, ALEPH v2 va utiliser le produit de cette source et des taux de réactions pour pouvoir réaliser la déplétion des matériaux, choisis par l'utilisateur, avec le solveur RADAU5. Les équations à résoudre par le solveur sont les équations de Bateman (décrites à la section 2.4) :

$$\frac{dN_j}{dt} = \sum_{l \neq j} \tau_{l \rightarrow j} N_l + \sum_{l \neq j} \lambda_{l \rightarrow j} N_l - \tau_j N_j - \lambda_j N_j \quad (4.27)$$

Lorsque le système n'est plus soumis à un flux neutronique, les équations se simplifient et il ne reste que les termes de décroissance naturelle. C'est le cas dans le cadre de ce mémoire, lorsque le fuel est refroidi pendant une vingtaine d'année après avoir été irradié pendant 1 ou 2 ans. L'utilisateur utilise alors un autre mot-clé : DEC pour préciser que le système va subir une décroissance naturelle. Grâce à ça, ALEPH v2 ne devra pas calculer les taux de réaction et le système d'équations devient alors :

$$\frac{dN_j}{dt} = \sum_{l \neq j} \lambda_{l \rightarrow j} N_l - \lambda_j N_j \quad (4.28)$$

Les équations (4.27) et (4.28) peuvent être exprimées sous la forme matricielle suivante : [11]

$$\frac{d\vec{N}}{dt} = A\vec{N} \quad (4.29)$$

où

- A est la matrice d'évolution constituée des taux de réactions et des constantes de décroissance.
- $\vec{N}$ est le vecteur isotopique.

Si cette matrice est triagonalisable, alors elle peut être résolue de manière analytique. Sinon il faut employer le solveur RADAU5 qui fait appel à une méthode de Runge-Kutta d'ordre 5 (3 étages) à pas de temps variable et d'output continu.

Ces concentrations sont ensuite fournies en input de MCNP pour le prochain pas de temps et les flux seront calculés à nouveau. Ce processus s'arrêtera à la fin du temps d'irradiation spécifié par l'utilisateur.

4.4.4 Précision de la méthode de Monte-Carlo

Les résultats de la méthode de Monte-Carlo représentent une moyenne des contributions d'un grand nombre d'histoires de neutrons tirées au sort. Une quantité qui va donc de paire avec ces résultats est l'erreur statistique commise ou autrement dit l'incertitude de ces résultats. Cette quantité est très importante car elle permet à l'utilisateur d'avoir une meilleur qualité de résultat mais ça lui permet également de savoir si un tally se comporte de façon normale. Si ce n'est pas le cas, l'erreur associée aux résultat ne reflétera pas le vrai intervalle de confiance des résultats et ceux-ci seront complètement faux. MCNP offre donc la possibilité à l'utilisateur de détecter ces erreurs via certains critères.

Quelques notions de statistiques

Les résultats MCNP sont obtenus en tirant au sort parmi les histoires possibles des neutrons et en attribuant un score x_i pour chaque histoire possible. Si on suppose que $f(x)$ est la fonction de densité de probabilité de l'historique des scores. Le vrai résultat est la valeur attendue de x , $E(x)$ définie comme :

$$E(x) = \int x f(x) dx \quad (4.30)$$

$f(x)$ n'est pas souvent connue et donc MCNP fait le tirage implicite de $f(x)$ via le tirage des histoires des neutrons. Le vrai résultat est donc estimé par la moyenne des scores tirés :

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i \quad (4.31)$$

La variance de la population des scores tirés représente une mesure de l'étendue que les valeurs des scores peuvent prendre, elle est donnée par la formule suivante :

$$\sigma^2 = \int (x - E(x))^2 f(x) dx = E(x^2) - (E(x))^2 \quad (4.32)$$

La racine carrée de la variance est l'écart-type mais il n'est généralement pas connu non plus. Il peut cependant être estimé par MCNP pour un grand nombre d'histoires de neutrons :

$$S \approx \sqrt{\bar{x^2} - \bar{x}^2} \quad (4.33)$$

Et l'écart-type de $\bar{x}$ est donné par :

$$S_{\bar{x}} = \frac{S}{\sqrt{N}} \quad (4.34)$$

A l'aide de l'équation 4.34, il peut être noté que pour diminuer l'écart-type et donc l'incertitude sur la vraie valeur, il faut augmenter N (le nombre d'histoires de neutrons). Ceci explique pourquoi le temps de calcul augmente fortement pour avoir des résultats précis. Il est également possible de réduire S pour N fixé à l'aide des techniques de réduction de variance.

Différence entre précision et exactitude

Il faut être vigilant quand on parle de la précision d'un résultat avec MCNP. La précision et l'exactitude d'un résultat MCNP sont deux choses totalement différentes. La précision d'un résultat MCNP est l'incertitude sur $\bar{x}$ à cause des fluctuations statistiques des x_i pour la portion de l'espace des phases mise en jeu. L'exactitude d'un résultat, quant à elle, est la mesure d'à quel point la valeur attendue de $\bar{x}$ ($E(x)$) est proche de la vraie valeur physique estimée. Comme le montre la figure 4.6, la différence entre la vraie valeur et $E(x)$ est appelée l'erreur systématique. Il est donc possible d'obtenir un résultat très précis mais qui n'est pas exact car la physique réelle n'a pas été modélisée correctement.

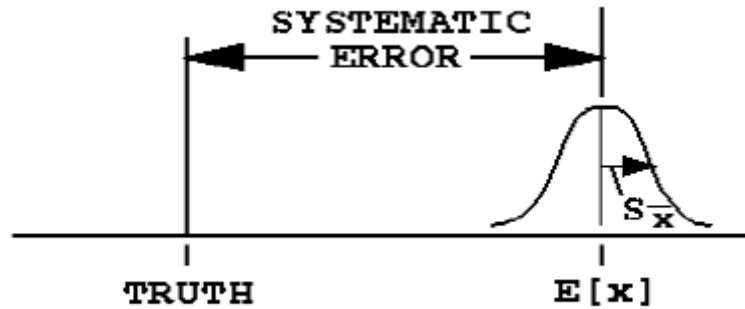


FIGURE 4.6 – Différence entre précision et exactitude [29]

Le théorème central limite

Ce théorème est utilisé pour avoir des intervalles de confiance pour la précision des résultats de la méthode de Monte-Carlo. Ce théorème stipule que lorsque N tend vers l'infini, pour des variables aléatoires indépendantes identiquement distribuées x_i , la distribution des $\bar{x}$ sera normalement distribuée. Donc pour n'importe quelle distribution de probabilité des tallies, la distribution des $\bar{x}$ sera normalement distribuée. Si S est approximativement égal à σ (ce qui est le cas pour un grand N) alors :

$$\bar{x} - S_{\bar{x}} < E(x) < \bar{x} + S_{\bar{x}} \quad 68\% \text{ du temps} \quad (4.35)$$

$$\bar{x} - 2S_{\bar{x}} < E(x) < \bar{x} + 2S_{\bar{x}} \quad 95\% \text{ du temps} \quad (4.36)$$

Si, par exemple, un parcours important de la géométrie du problème ou si une plage de sections efficaces n'ont pas été correctement tirées au sort alors $\bar{x}$ et $S_{\bar{x}}$ ne seront pas corrects et les résultats seront faux. C'est pourquoi deux autres valeurs statistiques vont être introduites pour aider à savoir si les intervalles de confiance sont correctement formés.

L'erreur relative et la figure de mérite

L'erreur relative est définie comme :

$$R = \frac{S_{\bar{x}}}{\bar{x}} \quad (4.37)$$

Grâce à des années d'expérience des utilisateurs de MCNP, la table 4.6 présente les interprétations recommandées de l'intervalle de confiance d'un écart-type pour différentes valeurs de R associées à un tally.

TABLE 4.6 – Interprétation de l'erreur relative R

R	Qualité du tally
0.5 à 1	nulle
0.2 à 0.5	Pas bonne
0.1 à 0.2	Incertaine
< 0.1	Généralement fiable sauf pour les détecteurs
< 0.05	Généralement fiable pour les détecteurs

La figure de mérite est définie comme :

$$FOM = \frac{1}{R^2 T} \quad (4.38)$$

C'est un bon indicateur de fiabilité qui permet à l'utilisateur de savoir si les tally se comportent de façon normale. Si le tally se comporte de façon normale, alors la FOM devrait être constante à l'exception de petites fluctuations au début du problème.

4.4.5 Les surfaces limites

Les surfaces réfléchives

Une surface peut être définie comme une surface réfléchive si un astérisque précède le nombre de la surface. Les neutrons arrivant en contact avec une telle surface sont réfléchis de manière spéculaire. Ce type de surface peut permettre de ne modéliser qu'une partie de la géométrie d'un problème.

Les interfaces blanches

Une surface peut aussi être désignée comme interface blanche en faisant précéder le nombre de la surface par un "+". Les neutrons qui entrent en contact avec ce genre de surface, subissent une réflexion isotrope.

Les interfaces périodiques

Une surface peut également être une surface périodique. Elles sont utilisées pour simuler un réseau infini et donc pour simuler un nombre infini de crayons. L'utilisateur fournit la surface par laquelle la particule doit ré-entrer.

Des surfaces réfléchives ont été utilisées pour toutes les surfaces extérieurs de chaque assemblage étudié. Ce choix permet de modéliser le fait que chaque assemblage est normalement entouré de plusieurs autres assemblages et donc qu'il reçoit des neutrons provenant de l'extérieur. Autrement dit, si aucune surface réfléchive n'avait été utilisée, il n'y aurait que des sorties de neutrons hors de l'assemblage et aucune entrée.

4.5 Analyse de l'exemple fourni à l'annexe A

4.5.1 La carte des cellules

Maintenant que tous les concepts ont été introduits, un exemple général qui a été créé dans le cadre de ce mémoire va pouvoir être présenté.

La partie de la carte des cellules de l'exemple fourni à l'annexe A est représentée par l'encadré bleu. La première cellule de cet encadré va être analysée pour comprendre ce que chaque entrée représente.

1 1 -10.18 -7 -1 2 tmp= 7.7553e-8 u=1 imp:n=1

1. La première entrée : "1" représente l'identifiant de la cellule. C'est un entier compris entre 1 et 99999.
2. La deuxième entrée : "1" représente l'identifiant du matériau contenu dans cette cellule. Cet identifiant est défini dans l'encadré vert de l'annexe A. Dans ce cas-ci il correspond au matériau numéro 1. C'est également un entier compris entre 1 et 99999.
3. La troisième entrée : "-10.18" représente la densité du matériau. Comme il a été mentionné à la section 4.3.2, le signe négatif signifie que c'est une densité volumique.
4. Les trois entrées suivantes : "-7 -1 2" représentent la géométrie de la cellule. Les espaces blancs entre les chiffres signifient que l'intersection entre ces trois surfaces est appliquée en tenant compte de leur signe respectif. Ces entrées représentent la partie *geom* de la structure générale, mentionnée à la section 4.3.2

Les trois entrées suivantes font partie des *params* de la structure générale.

5. L'entrée suivante : $tmp = 7.7553e - 8$ représente la température du matériau 1, exprimée en [MeV].
6. L'entrée $u = 1$ signifie que la cellule appartient à l'univers 1 comme il a été dit précédemment.
7. La dernière entrée : $imp : n=1$ signifie que les neutrons de cette cellule auront une importance de 1. Si l'importance avait été de 0, l'histoire des neutrons entrant dans cette cellule aurait été terminée.

L'étude de la cellule 5 est réalisée pour mettre en pratique certains concepts vus à la section 4.3.2.

1. Le numéro du matériau est mis à zéro étant donné que les matériaux des univers 1 et 3 ont déjà été définis.
2. Les quatre surfaces sont fournies par paires.
3. Le réseau est constitué d'éléments carrés car il est défini par $lat=1$.
4. La cellule 5 est définie comme étant l'univers 2 qui remplira une fenêtre de la taille de l'assemblage.
5. Chaque élément du réseau qui est défini par l'univers 1 représente en fait un crayon de combustible. Chaque élément défini par l'univers 3 représente un tube de guidage. Les plages du réseau s'étendent de 0 à 14 pour les indices x et y. Ces plages ont été choisies pour représenter les 15x15 éléments d'un assemblage de PWR. L'élément [0 0 0] se trouve donc en bas à gauche de l'assemblage étant donné que les indices ne peuvent qu'augmenter.

4.5.2 Carte des surfaces

La carte des surfaces comprend tout l'encadré rouge et chaque ligne de cet encadré représente une surface qui définit la géométrie du problème (excepté les lignes de commentaires démarrant par "c").

1. La première entrée est l'identifiant de la surface, comme dit précédemment. Il peut être noté que certains identifiants sont précédés d'une étoile, cela signifie que ce sont des surfaces réfléchissantes (voir section 4.4.5).
2. Les mnémoniques des plans définis par px, py et pz sont des plans normaux aux axes x, y et z respectivement. Les mnémoniques des cylindres définis par cz représentent des cylindres dont l'axe est sur l'axe z.
3. Les nombres apparaissant en troisième entrée représentent la coordonnée sur l'axe x, y ou z pour px, py et pz respectivement. Pour les cylindres, le nombre correspond à son rayon.

4.5.3 La carte des données

La carte des sources

La carte des données démarre avec la carte des sources qui définit une source de criticité. Le nombre d'histoires de neutrons par cycle a été choisi à 5000 pour assurer une bonne précision des résultats tout en garantissant des temps de calculs raisonnables. La première estimation du coefficient de multiplication a été fixée à 1. Au total, 250 cycles seront effectués et 50 ne seront pas pris en compte lors de la création des intervalles de confiance des trois estimateurs du coefficient de multiplication. La source initiale de fission est définie au centre d'un crayon de combustible qui est lui-même au centre de l'assemblage. Dans cet exemple, la source initiale se situe donc en (x=10.725 ; y=10.725 ; z=0).

La carte des tallies

La deuxième partie de l'encadré vert de l'annexe A est la carte des tallies.

```
f4 : n 1 (4 23)
sd4 1 1
```

La première ligne définit le tally à calculer. Pour spécifier que le calcul du flux dans les cellules est requis, le numéro 4 est employé : f4. Pour spécifier que c'est un problème qui concerne les neutrons uniquement, la lettre "n" est utilisée. Deux groupes de cellules sont ensuite spécifiés : 1 et (4 23). Cela veut dire que le flux sera calculé pour la cellule 1 et pour le total entre la cellule 4 et 23. La commande suivante : sd4 fournit les volumes de la cellule 1 et de la somme des cellules 4 et 23. Ces volumes sont normalement calculés par MCNP mais il se peut qu'il ne les calcule pas correctement. L'utilisateur peut donc les fournir pour éviter une mauvaise surprise. Etant donné que les volumes sont déjà donnés dans la partie jaune de l'annexe A à l'aide du mot-clé VOL, l'utilisateur n'est pas obligé de les re-noter et peut simplement les remplacer par des 1.

La carte des matériaux

La carte des matériaux est définie après la carte des sources et des tallies de l'encadré vert. Le mot clé nlib fournit la même base de données des sections efficaces pour un même matériau à une température définie. Tous les isotopes qui font partie de la composition du matériau sont détaillés, chaque ligne représente un isotope et est constituée de l'identifiant (ZAID) et de la fraction atomique de l'isotope. La seule particularité de la carte des matériaux est la dernière ligne. Elle applique un traitement $S(\alpha, \beta)$ à l'eau via la commande mt4 qui signifie qu'un traitement thermique est effectué pour le matériau 4.

Chapitre 5

Résultats

Dans ce chapitre, les incertitudes sur les mesures expérimentales seront identifiées et quantifiées. Ensuite les résultats des calculs de simulation avec ALEPH v2 seront observés et commentés. Enfin une comparaison entre ces résultats et d'autres codes de calculs sera faite.

5.1 Validation des mesures expérimentales

L'objectif pour le design des calorimètres était de pouvoir déterminer la chaleur résiduelle avec une incertitude de $\pm 2\%$. Cela veut dire, par exemple, que si la chaleur mesurée sur un assemblage est de 200W alors la probabilité que la vraie chaleur résiduelle soit entre 196 et 204 W sera de 95 %.

Les incertitudes pourraient provenir d'erreurs dans les équipements de mesures ou des chaines de mesures. Trois catégories d'incertitude existent :

1. Les erreurs systématiques sont des erreurs qui restent les mêmes pour toutes les répétitions de mesure pour un même point de mesure.
2. Les erreurs variables sont des erreurs qui changent systématiquement lorsqu'une répétition de mesure est faite pour le même point de mesure. Elles sont interprétées comme des erreurs qui surviennent à cause des conditions de mesure qui ont changé pour une répétition de mesures.
3. Les erreurs aléatoires peuvent apparaître de manière aléatoire lors d'une répétition de mesures pour un même point de mesure.

Il faut tout d'abord tenir compte de l'incertitude sur les équipements de mesure. Celles ci sont répertoriées dans le tableau 5.1, elles tiennent compte de la somme de tous les équipements de mesure. Ces erreurs font partie des erreurs aléatoires.

TABLE 5.1 – Incertitudes sur les équipements de mesure

	Température	Débit de masse	Puissance du heater électrique	Taux de dose γ
Incertitude sur tout le dispositif de mesure	$\pm 0.02^\circ\text{C}$	$\pm 0.5\%$	$\pm 0.25\%$	$\pm 10\%$

Il y a également des incertitudes sur les volumes des assemblages. Une étude de sensibilité a été menée pour les PWR et BWR. Les résultats de cette étude ont montré que pour les PWR, une erreur de 10% sur le volume des assemblages induit une erreur de 2.1% sur la valeur de la puissance mesurée. Pour les BWR, une erreur de 10% implique une erreur de seulement 0.7% sur la puissance mesurée. L'incertitude

sur les volumes est donc faible.

Une incertitude existe aussi sur les mesures de chaleur émises par les radiations γ . Cependant le manque de données expérimentales n'a pas permis de calculer correctement ces incertitudes et elles ont donc été estimées. Pour l'assemblage 9329, par exemple, la puissance des radiations γ a été calculée à 5.2 W avec une incertitude de $\pm 9\%$. La valeur de la puissance calorimétrique a été mesurée à 217.4 W et la puissance totale était donc de 222.6 W. La proportion de la puissance γ est donc de 2.3% par rapport à la puissance totale et l'incertitude sur cette puissance est de 0.2% par rapport à la puissance totale. L'incertitude sur la puissance γ est donc négligeable. [10]

5.1.1 Détermination de l'incertitude totale des mesures expérimentales

L'équation qui donne la puissance en fonction de l'augmentation de température est : [10]

$$P = P_{cal} + P_{\gamma} = P_{cal}(1 + \alpha) \quad (5.1)$$

$$P = (a + b k \frac{dt}{dT})(1 + \alpha) \quad (5.2)$$

où P_{cal} est la puissance mesurée par le calorimètre et P_{γ} est la puissance émise par les radiations γ qui n'ont pas été détectées par le calorimètre. Ces deux puissances sont supposées proportionnelles via un coefficient α qui est une constante au même titre que a, b et k . Ces constantes ont été déterminées et l'écart-type sur chacune d'entre elles également. Les valeurs de ces constantes et de leur écart-type sont répertoriés à la table 5.2 et 5.3 respectivement.

TABLE 5.2 – Constantes [10]

Constantes	BWR	PWR
a	-89.98	-86.36
b	$1.729644 \cdot 10^6$	$1.716819 \cdot 10^6$
k	0.963	0.915
α	0.024	0.024

TABLE 5.3 – Ecart-types [10]

Paramètres	BWR	PWR
S_a	1.9	3.5
S_b	6938	6442
S_k	0.003	0.007
S_{α}	0.002	0.002

Pour obtenir l'écart-type de la puissance totale, les écarts-types de tous les paramètres ont été combinés de la façon suivante :

$$S_p = \sqrt{[(S_{\alpha}(1 + \alpha))^2 + (S_b k (1 + \alpha) \frac{dt}{dT})^2 + (S_k b (1 + \alpha) \frac{dt}{dT})^2 + (S_a b k \frac{dt}{dT})^2]} \quad (5.3)$$

Pour chaque mesure de chaleur résiduelle, cet écart-type doit être évalué. Les incertitudes totales sur la puissance totale émise par des assemblages provenant de PWR et de BWR ont donc été finalement déterminées pour plusieurs niveaux de puissance, comme la figure 5.4 le montre.

TABLE 5.4 – Incertitudes sur la puissance totale des assemblages [10]

	Puissance (W)	Incertitude (W)	Incertitude (%)
BWR	50	4.2	8.4
BWR	350	6.2	1.8
PWR	250	9.2	3.7
PWR	900	18.8	2.1

5.2 Observations des résultats obtenus avec ALEPH v2

Les résultats principaux obtenus sont présentés dans cette section. Une comparaison des résultats est d’abord faite entre les deux ou trois bibliothèques de données les plus récentes. Ces graphes permettront principalement de faire des observations quantitatives sur les résultats. Ensuite une comparaison des résultats est présentée pour toutes les bibliothèques de données pour avoir une vue d’ensemble. Ces graphes permettront de faire des observations qualitatives sur les résultats. Enfin une étude sera menée sur les assemblages qui présentent une erreur relative élevée pour essayer de comprendre d’où peuvent provenir ces écarts par rapport à la moyenne des résultats. Dans cette section, lorsque les erreurs relatives seront mentionnées, cela signifiera que ce sont les erreurs relatives entre les mesures expérimentales et les résultats des simulations effectuées avec le code d’évolution ALEPH v2.

Les figures 5.1, 5.2 et 5.3 présentent les erreurs relatives pour les versions de bibliothèque de données les plus récentes. Les deux versions les plus récentes de JEFF et les trois versions les plus récentes de ENDF sont comparées. Les évaluations de données sont à chaque fois comparées pour tous les assemblages, c’est à dire pour les assemblages provenant des BWR et des PWR.

1. La figure 5.1 montre que la bibliothèque de données la plus récente (JEFF-3.3 [25]) présente des résultats qui ont en moyenne une erreur relative 1% plus élevée que les résultats obtenus avec la version précédente. Ces résultats sont donc meilleurs car une sous-estimation de la chaleur résiduelle peut causer des problèmes alors qu’une surestimation ne causera pas de problèmes du point de vue physique. Le graphe montre également que les extrema sont plus importants pour les plus faibles chaleurs résiduelles, c’est à dire pour les assemblages provenant des BWR.
2. La figure 5.2 montre que la bibliothèque de données ENDF/B-VIII.0 [7] présente des résultats qui ont en moyenne une erreur relative d’environ 1.5 % plus faible que les résultats obtenus avec la version précédente (ENDF/B-VII.1 [22]). On remarque donc que les chaleurs calculées pour les PWR sont quasiment sous-estimées pour chaque assemblage simulé. Les résultats sont donc moins bons pour la nouvelle bibliothèque. Les extrema sont également plus importants pour les chaleurs résiduelles plus faibles.
3. La figure 5.3 présente les mêmes symptômes que la figure précédente. La bibliothèque couplée ENDF/B-VIII.0 + GEFY détériore davantage les résultats. Cette bibliothèque utilise en fait les sections efficaces de ENDF/B-VIII.0 et les rendements de produits de fission de GEFY [27]. GEFY contient en effet beaucoup plus que trois points de rendement de produits de fission contrairement à ENDF/B-VIII.0.

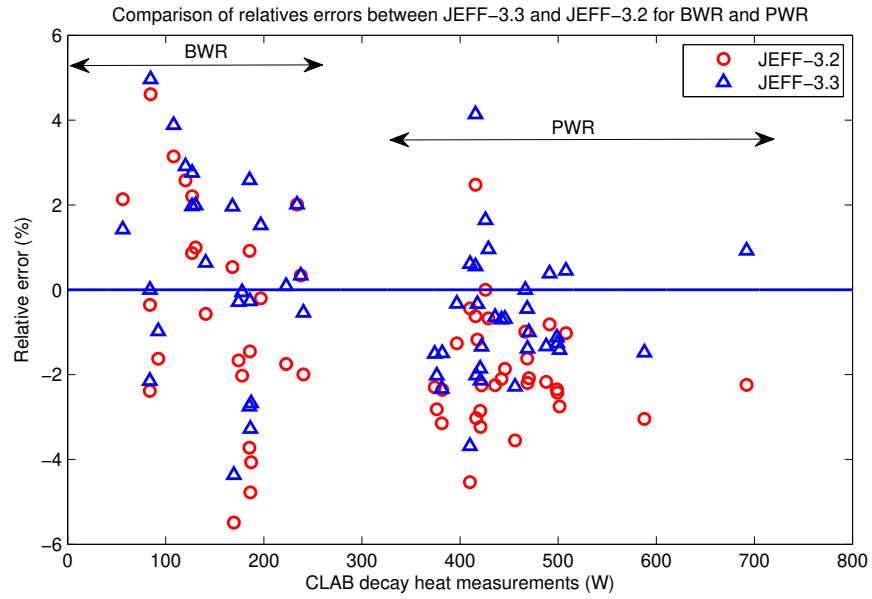


FIGURE 5.1 – Comparaison entre les bibliothèques JEFF-3.3 et JEFF-3.2 [24] de l'erreur relative entre la chaleur résiduelle mesurée expérimentalement et celui calculé à l'aide d'ALEPH2

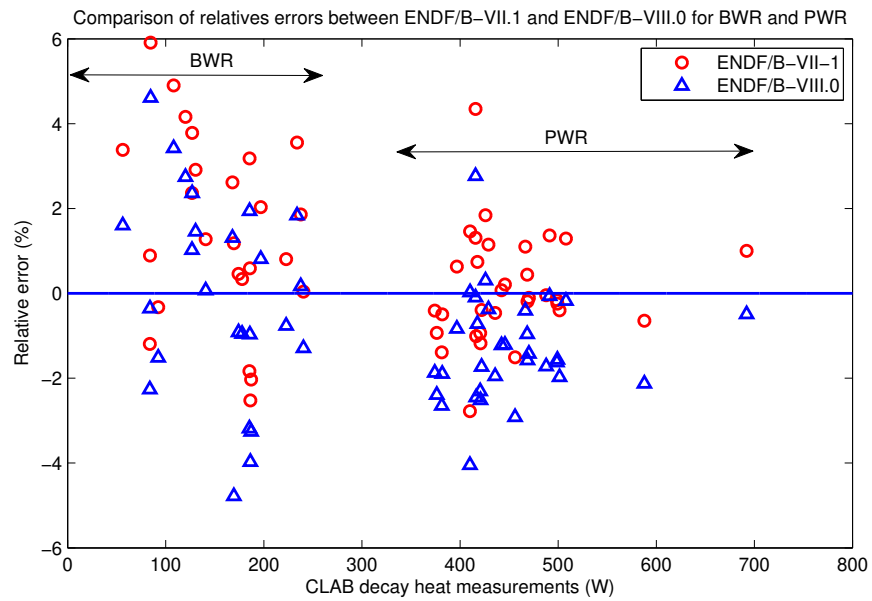


FIGURE 5.2 – Comparaison entre les bibliothèques ENDF/B-VII-1 et ENDF/B-VIII de l'erreur relative entre la chaleur résiduelle mesurée expérimentalement et celui calculé à l'aide d'ALEPH2

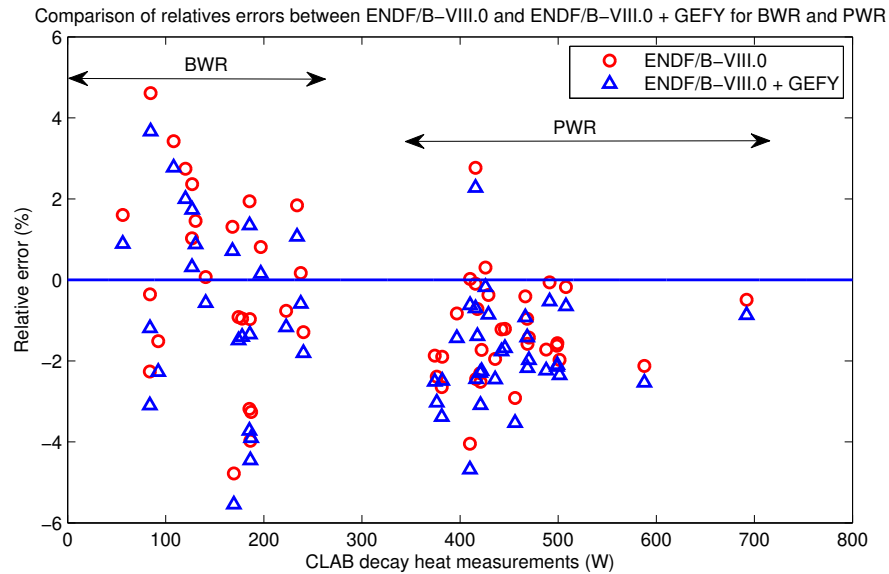


FIGURE 5.3 – Comparaison entre les bibliothèques ENDF/B-VIII.0 et ENDF/B-VIII + GEFY de l'erreur relative entre la chaleur résiduelle mesurée expérimentalement et celui calculé à l'aide d'ALEPH2

Les figures 5.4 et 5.5 présentent les résultats de toutes les bibliothèques qui ont été utilisées pour les calculs des chaleurs résiduelles sur les assemblages de BWR et PWR.

1. La figure 5.4 montre que la chaleur résiduelle émise par les assemblages des PWR ont tendance à être sous-estimée par la plupart des bibliothèques de données. Les bibliothèques donnant les meilleurs résultats sont : JEFF-3.3 et ENDF/B-VII.1. La première des deux a quand même tendance à sous-estimer la chaleur mais l'erreur relative ne dépasse jamais les -4%. L'erreur relative de la deuxième bibliothèque est beaucoup mieux répartie et la sous-estimation ne dépasse jamais les -3%. De manière générale, toutes les bibliothèques ne dépassent jamais les -4% de sous-estimation sauf pour un assemblage (I24).
2. La figure 5.5 montre que l'erreur relative commise sur les assemblages de BWR est beaucoup mieux répartie entre surestimation et sous-estimation par rapport aux PWR. Une nouvelle fois, la bibliothèque ENDF/B-VII.1 présente les meilleurs résultats avec une sous-estimation de maximum -3% et la bibliothèque JEFF-3.3 arrive en deuxième position avec un seul assemblage dépassant les -4% (8338).

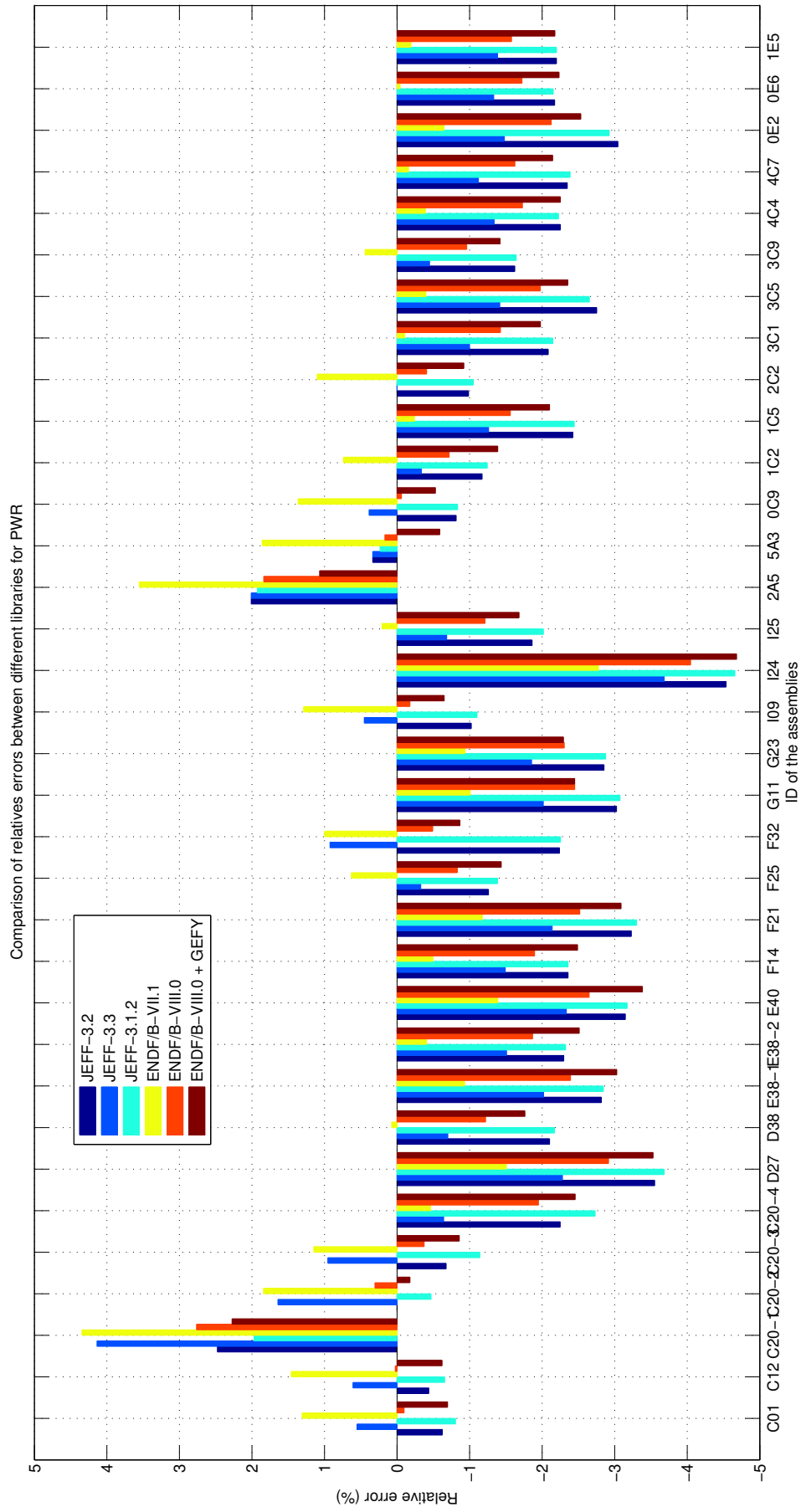


FIGURE 5.4 – Comparaison entre les différentes bibliothèques de l'erreur relative entre la chaleur résiduelle mesurée expérimentalement et celui calculé à l'aide d'ALEPH2 pour les PWR

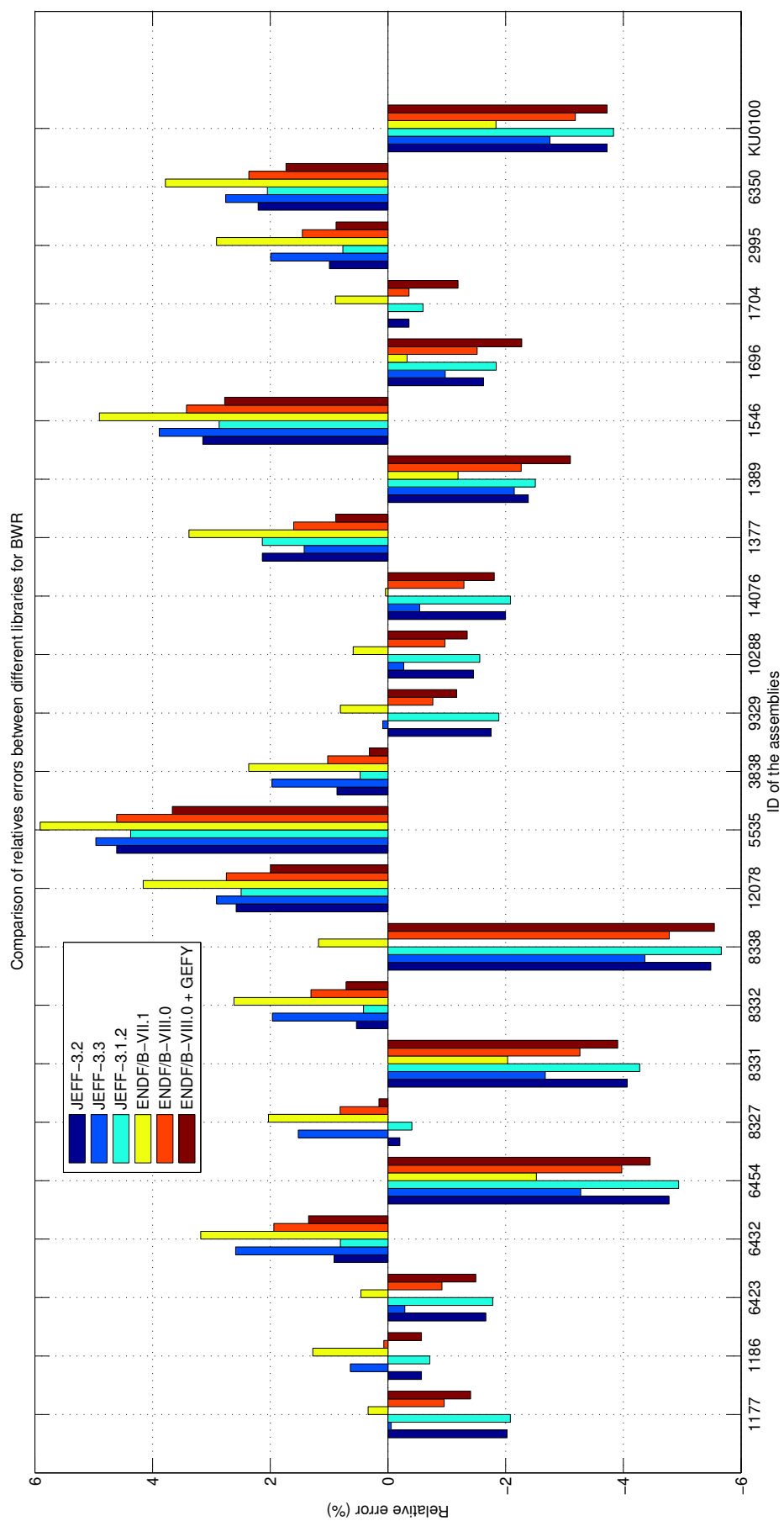


FIGURE 5.5 – Comparaison entre les différentes bibliothèques de l'erreur relative entre la chaleur résiduelle mesurée expérimentalement et celui calculé à l'aide d'ALEPH2 pour les BWR

5.3 Les rendements de produits de fission

Lors d'une fission, un noyau lourd se sépare en deux produits de fission plus légers. Le rendement de produits de fission désigne la proportion de produit de fission qui est produite pour chaque fission. Ce rendement peut être défini pour chaque isotope ou par élément chimique. Le rendement est généralement donné en pourcentage par fission, cela veut donc dire que le rendement total vaut 200 % car 2 produits de fission sont générés à chaque fission. La normalisation des données des bibliothèques de rendement de produits de fission se fait donc par rapport à 2. Un exemple de la distribution statistique des produits de fission pour l' U_{92}^{235} en fonction du nombre de masse A et pour trois énergies de neutron incident est donné à la figure 5.6.

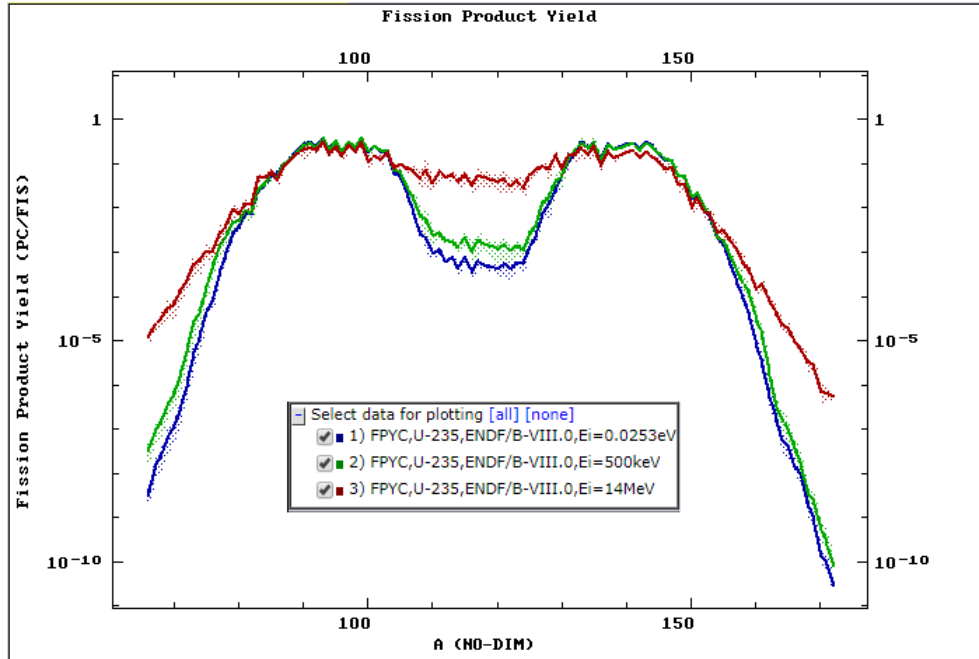


FIGURE 5.6 – Le rendement de produit de fission pour l' U_{92}^{235} pour trois énergies de neutron incident [2]

La plupart des codes de déplétion calculent la moyenne du spectre des rendements de produits de fission induits par les neutrons de manière indépendante du calcul des sections efficaces. La moyenne des rendements de produits de fission, des sections efficaces et des flux sont multipliés ensemble pour obtenir le taux de production des produits de fission : [11]

$$PR_{PF} = \langle Y \rangle \langle \sigma_f \rangle \langle \phi \rangle = \frac{\int Y(E) \sigma_f(E) \phi(E) dE}{\int \sigma_f(E) \phi(E) dE} \cdot \frac{\int \sigma_f(E) \phi(E) dE}{\int \phi(E) dE} \cdot \int \phi(E) dE \quad (5.4)$$

où Y est le rendement de produits de fission induit par les neutrons, σ_f est la section efficace totale de fission de l'isotope parent et ϕ est le flux moyenné sur le volume du matériau déplété.[11].

Les rendements de produits de fission, indépendants pour chaque énergie, sont normalisés à 2 dans les bibliothèques de rendements de produits de fission. Hélas, les rendements de produits de fission induits par des neutrons sont uniquement représentés par quelques valeurs d'énergie (généralement une valeur de spectre thermique, une valeur de spectre rapide et une valeur de très haute énergie).[11]

Lors du calcul du membre de droite, le problème qui survient est le suivant : les sections efficaces sont définies pour toute la plage d'énergie sur laquelle il faut intégrer (spectre thermique jusqu'au spectre rapide voir très rapide) alors que les rendements de produits de fission sont définis pour seulement 2 ou 3 points d'énergie dans les bibliothèques de données nucléaires. Il faut donc interpoler les rendements de produits de fission entre ces 3 points d'énergie pour avoir des valeurs pour tous les points d'énergie comme pour les sections efficaces. Il existe plusieurs façons d'interpoler entre ces différents niveaux d'énergie car une interpolation linéaire n'est pas forcément la plus exacte si par exemple les 3 points n'étaient pas du tout alignés. [11]

Etant donné que l'interpolation peut être une source d'erreur, ALEPH v2 permet de modifier le schéma d'interpolation pour qu'il corresponde au mieux à la réalité et donc que le résultat soit plus précis. ALEPH v2 permet notamment de fixer le niveau de transition entre énergie thermique et rapide. C'est à dire que si l'énergie des neutrons incidents est inférieur à ce seuil alors les rendements de produits de fission seront définis à 0.0253eV et si l'énergie de ceux-ci est supérieur alors les rendements de produits de fission seront définis à $400 - 500\text{keV}$.

Une étude a donc été réalisée pour plusieurs seuils pour voir l'influence du schéma d'interpolation sur la valeur finale des chaleurs résiduelles.

5.3.1 Observations de différents schémas d'interpolation pour les rendements de produits de fission

Les figures 5.7 et 5.8 présentent les résultats pour plusieurs niveaux de transition entre l'énergie thermique et l'énergie rapide. On voit que les niveaux de transition n'ont presque pas d'influence sur les valeurs de chaleurs résiduelles calculées. La raison pourrait venir du fait que la plupart des neutrons sont thermiques et que par conséquent les spectres de rendement de produits de fission à haute énergie sont peu utilisés. Le seuil, auquel les spectres d'énergie rapide de rendement de produits de fission sont considérés, n'a donc pas beaucoup d'influence. En effet les deux graphes montrent que si les rendements de produits de fission sont évalués uniquement à l'énergie thermique (0.0253 eV), la chaleur résiduelle calculée ne présente qu'une erreur relative de 5 % par rapport au cas par défaut.

Il semblerait donc que le seuil de transition entre l'énergie thermique et rapide n'ait pas une influence considérable pour le cas d'un assemblage.

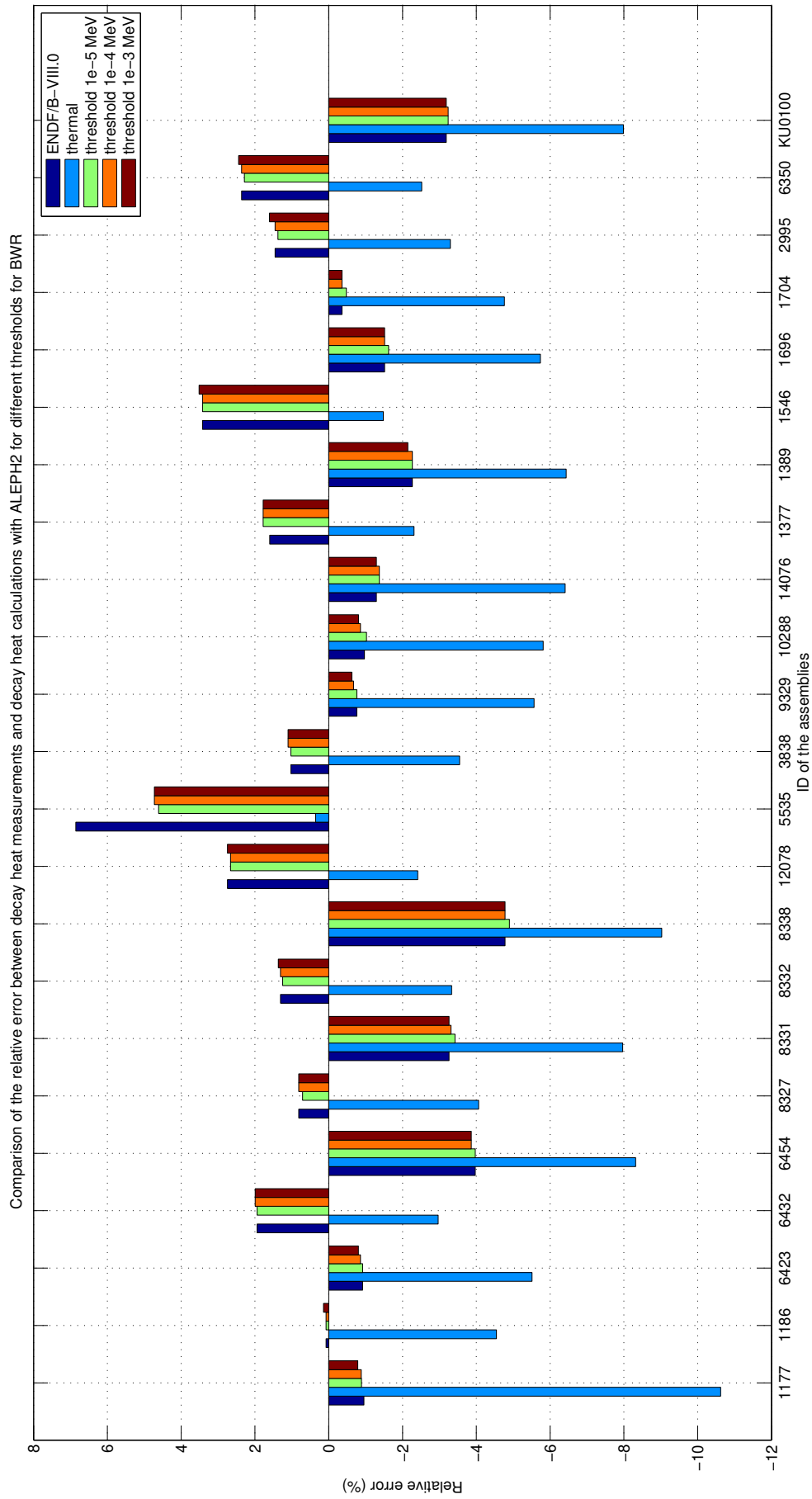
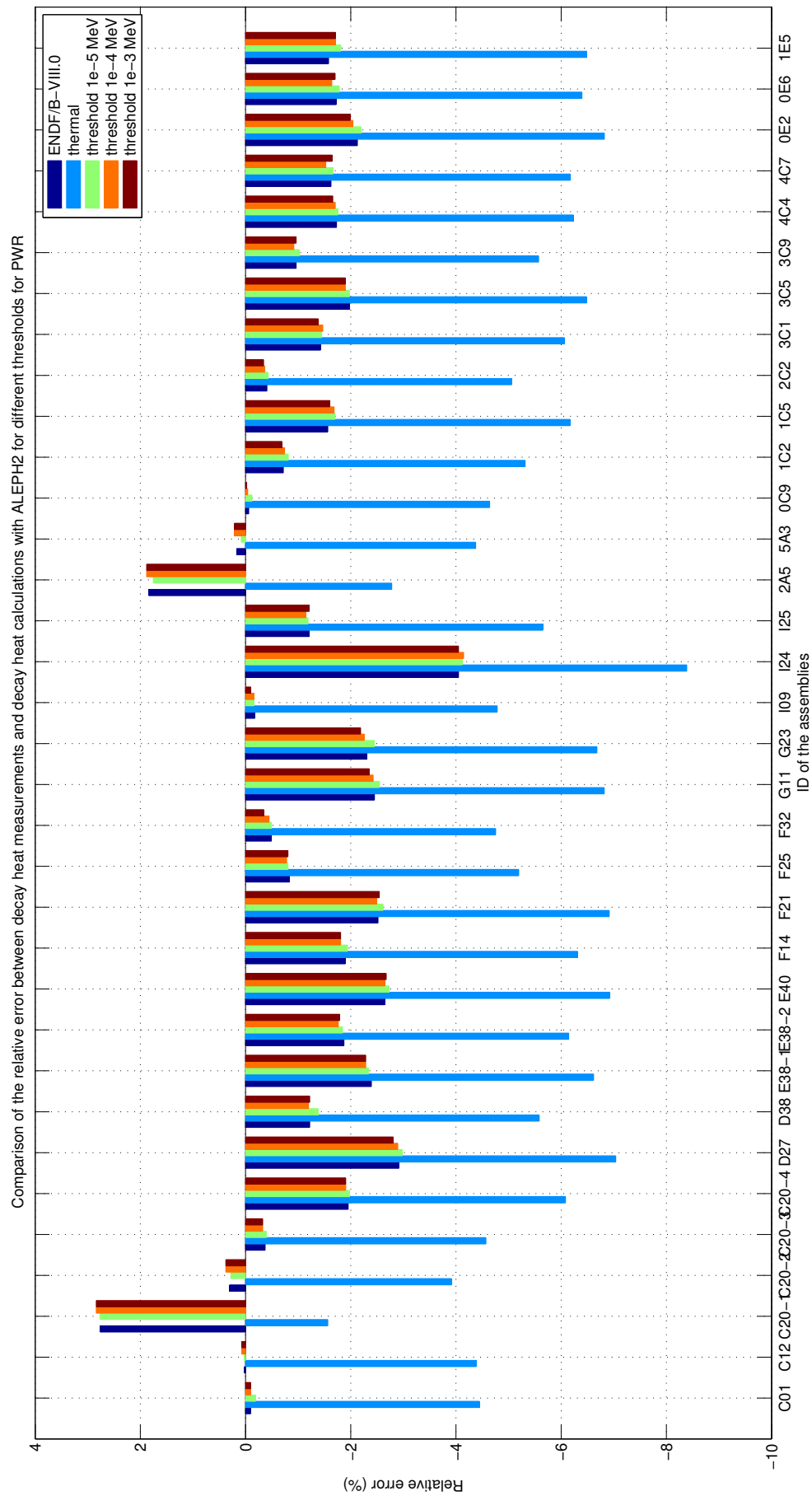


FIGURE 5.7 – Comparaison de l'erreur relative entre les différents schémas d'interpolation pour la bibliothèque ENDF/B-VIII.0 et pour les BWR



5.4 Comparaison avec d'autres codes de calculs

Les résultats obtenus avec les différentes bibliothèques ont finalement été comparé avec deux autres codes de calcul : TRITON et SAS2H [13]. La figure 5.9 et 5.10 présentent la comparaison entre les résultats obtenus en utilisant les trois bibliothèques les plus récentes et les résultats obtenus avec TRITON et SAS2H. Il faut noter que la figure 5.11 indique les mêmes résultats que la figure 5.10 mais pour tous les assemblages de PWR. En effet, les résultats obtenus avec TRITON n'étaient disponible que pour une partie des assemblages.

1. On observe à la figure 5.9 que les résultats entre les différents codes de calculs sont plus ou moins similaires. La différence des résultats entre TRITON et SAS2H est vraiment très faible. Il faut tout de même noter que ALEPH v2, utilisé avec la bibliothèque *ENDF/B – VII.1*, présente les meilleurs résultats.
2. On observe aux figures 5.10 et 5.11 que TRITON et SAS2H surestime presque à chaque fois la chaleur résiduelle des assemblages des PWR. TRITON présente d'énormes erreurs, qui atteignent souvent les 10 %. A contrario, ALEPH v2 a tendance à sous-estimer la chaleur résiduelle pour les trois bibliothèques. La bibliothèque *ENDF/B – VII.1* semble toutefois présenter les meilleurs résultats, étant donné que ceux-ci sont mieux répartis entre surestimation et sous-estimation.

Deux critères sont introduits pour comparer les différentes techniques de calcul sur l'ensemble des mesures :

1. $|C/E|$
2. $\chi = \sum_{i=1}^n \frac{(C_i - E_i)^2}{C_i}$

Avec E_i la chaleur résiduelle mesurée expérimentalement sur l'assemblage i et C_i la chaleur résiduelle de l'assemblage i calculée avec un code de calcul.

Le premier critère est l'erreur relative moyenne entre les résultats expérimentaux et les résultats obtenus par code de calcul. Le deuxième critère accentue la différence entre les deux en la mettant au carré. Il faut donc évidemment que ces deux critères soient les plus proches possible de 0 pour pouvoir dire que les résultats sont bons. La table 5.5 présente l'évaluation de ces deux variables pour SAS2H, TRITON et ALEPH v2 utilisé avec plusieurs bibliothèques.

L'erreur relative moyenne ne nous apprend pas beaucoup d'informations supplémentaires. La bibliothèque *ENDF/B – VII.1* présente une meilleur erreur relative que SAS2H et TRITON pour les PWR mais est un tout petit peu moins bonne pour les BWR. *JEFF – 3.3* présente une meilleur erreur relative que les deux autres codes pour l'ensemble des assemblages mais a tendance à sous-estimer la chaleur résiduelle pour les PWR. La variable χ nous apprend par contre que *ENDF/B – VII.1* et *JEFF – 3.3* sont meilleurs que les deux autres codes de calcul.

TABLE 5.5 – Comparaison des codes de calcul

	<i>ENDF/B – VII.1</i>	<i>ENDF/B – VIII.0</i>	<i>ENDF/B – VIII.0 + GEFY</i>	<i>JEFF – 3.1.2</i>	<i>JEFF – 3.2</i>	<i>JEFF – 3.3</i>	SAS2H	Triton
$ C/E _{PWR}$	0.27	-1.18	-1.70	-1.85	-1.75	-0.61	1.17	4.48
$ C/E _{BWR}$	1.43	-0.03	-0.76	-0.77	-0.61	0.41	0.88	1.11
χ^2_{PWR}	2.61	4.57	6.79	7.97	7.72	3.65	3.86	27.38
χ^2_{BWR}	1.93	2.09	2.14	2.5	2.4	1.78	2.45	2.4

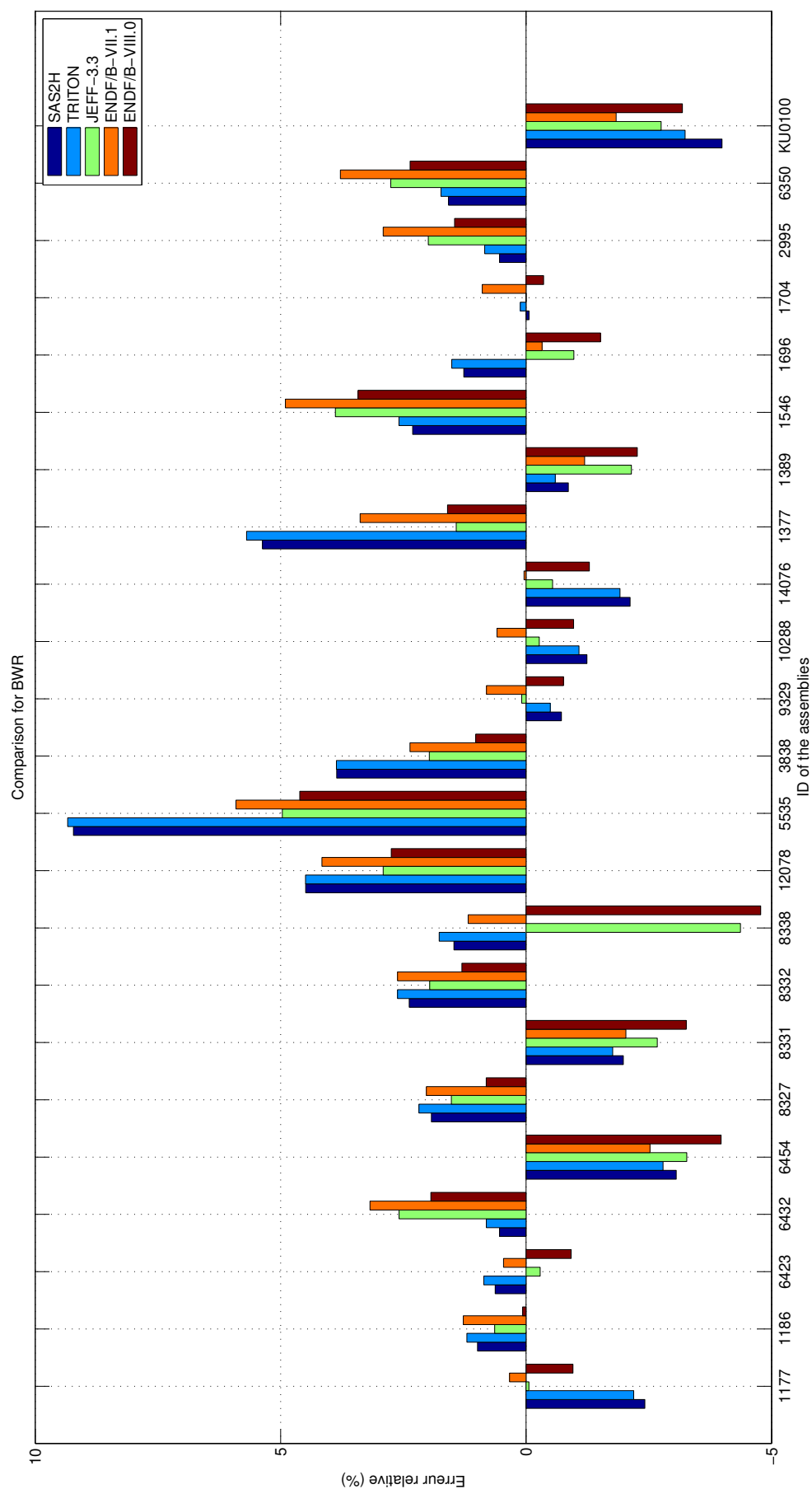


FIGURE 5.9 – Comparaison entre les résultats obtenus avec ALEPH v2 pour 3 bibliothèques récentes avec TRITON et SAS2H pour les assemblages des BWR

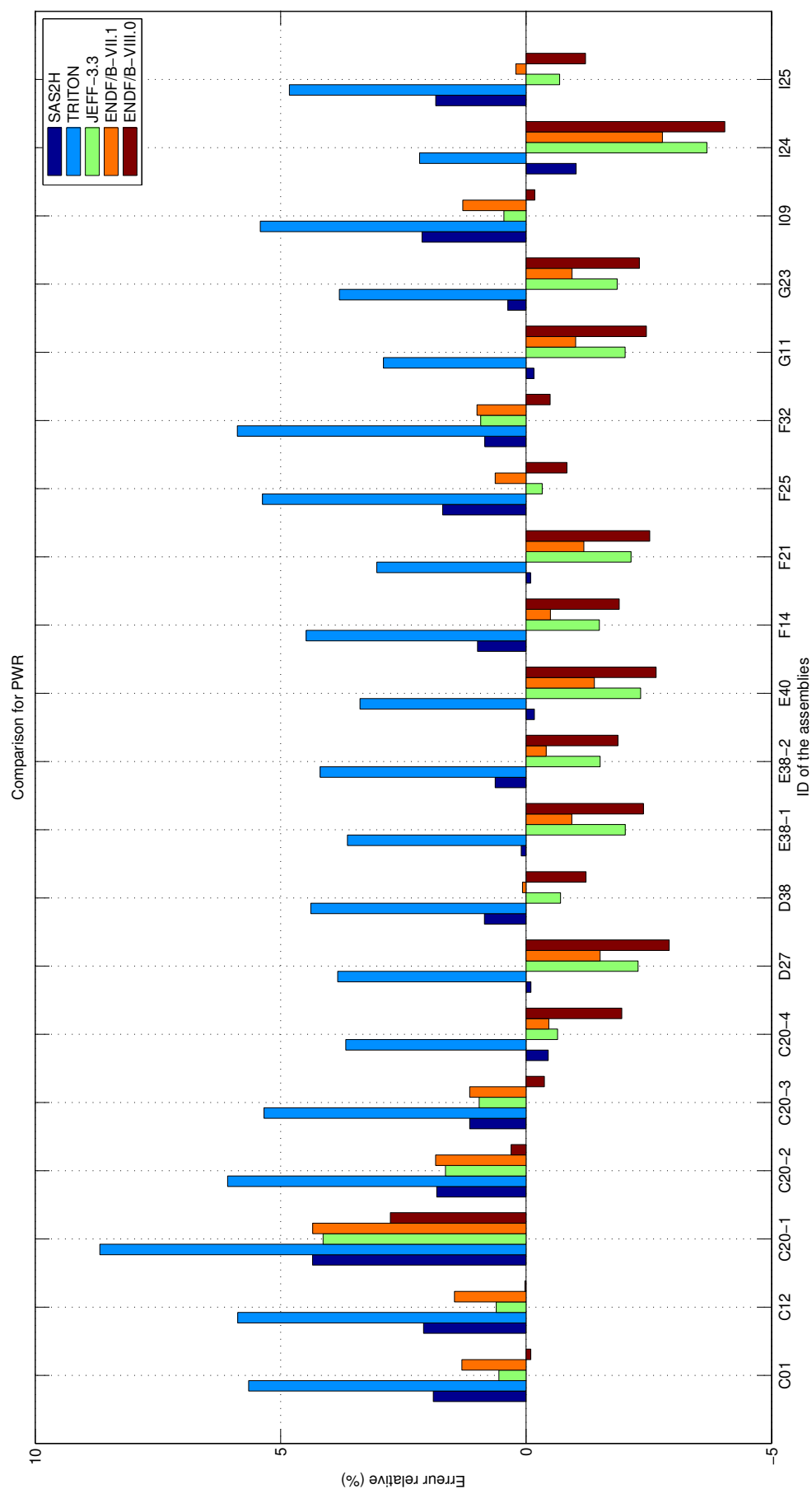


FIGURE 5.10 – Comparaison entre les résultats obtenus avec ALEPH v2 pour 3 bibliothèques récentes avec TRITON et SAS2H pour les assemblages des PWR

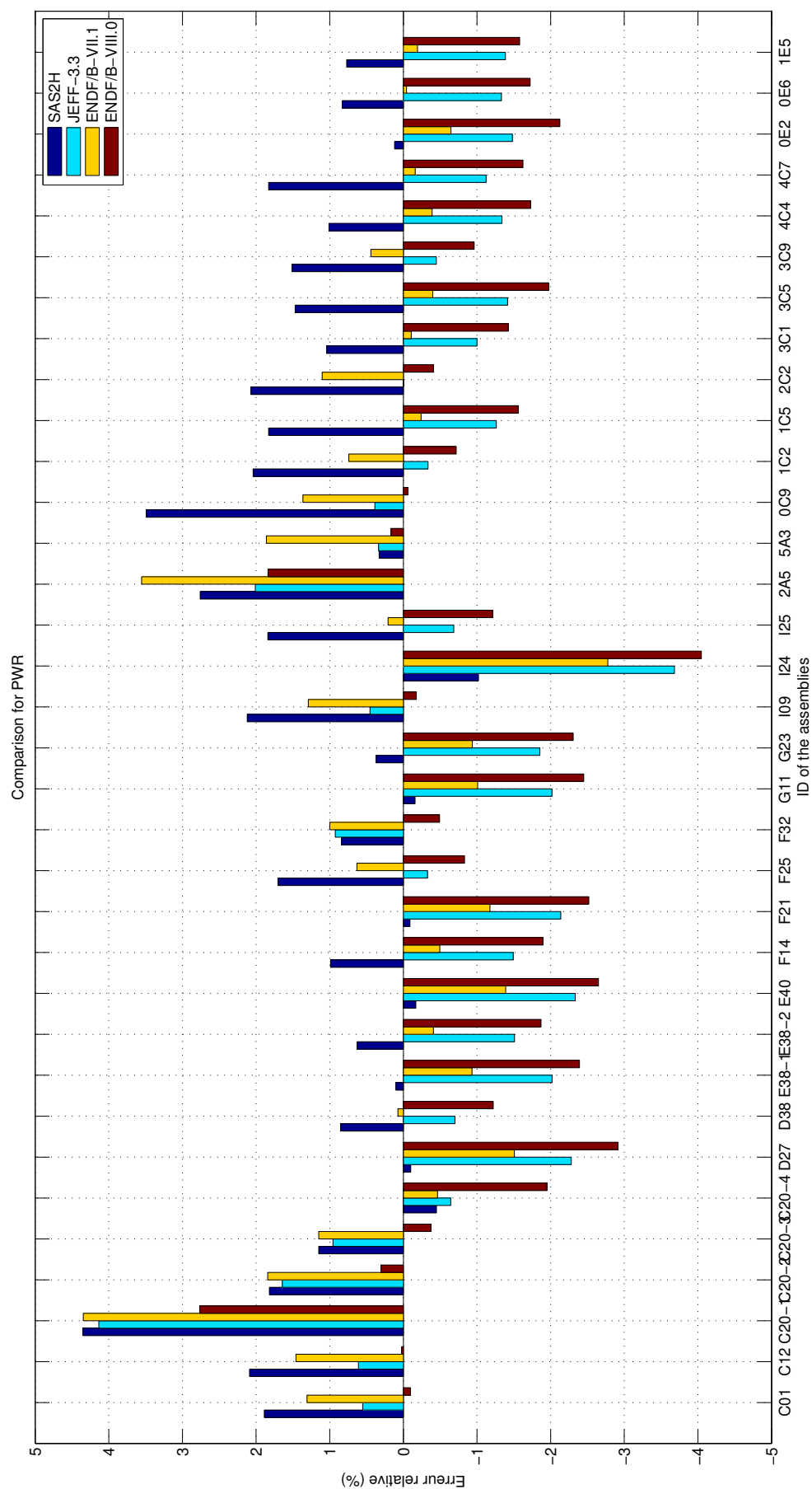


FIGURE 5.11 – Comparaison entre les résultats obtenus avec ALEPH v2 pour 3 bibliothèques récentes avec SAS2H pour les assemblages des PWR

5.5 Considérations temporelles

Dans un premier temps, une analyse est réalisée pour déterminer l'influence du nombre d'histoires de neutrons, N , sur la précision des résultats. Évidemment plus N est grand et plus l'incertitude sur le résultat sera faible. Cependant cela signifie également que le temps de calcul augmente. Il faut donc trouver le nombre d'histoires de neutron qui garantit une bonne précision tout en minimisant le temps de calcul. La figure 5.12 présente l'influence de N sur la précision des résultats et la figure 5.13 l'influence sur le temps de calcul réel pour un assemblage de PWR 15x15. Les calculs ont été réalisés par 16 CPU en parallèle. Le graphique montre clairement que le temps de calcul réel augmente de façon linéaire avec le nombre d'histoires de neutron. Il montre aussi que l'erreur relative sur cet assemblage ne varie pratiquement pas au delà de $N = 2500$. Cette valeur aurait donc pu être choisie pour réaliser les différentes analyses mais par sécurité le choix s'est porté sur : $N = 5000$. Choisir une valeur supérieure aurait considérablement augmenté les temps de calcul pour une précision à peine supérieure.

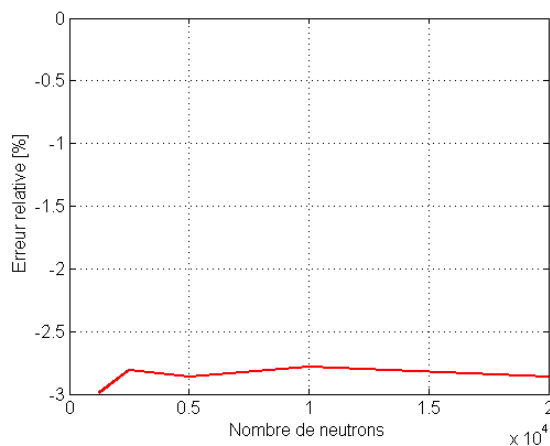


FIGURE 5.12 – Influence de N sur l'erreur relative

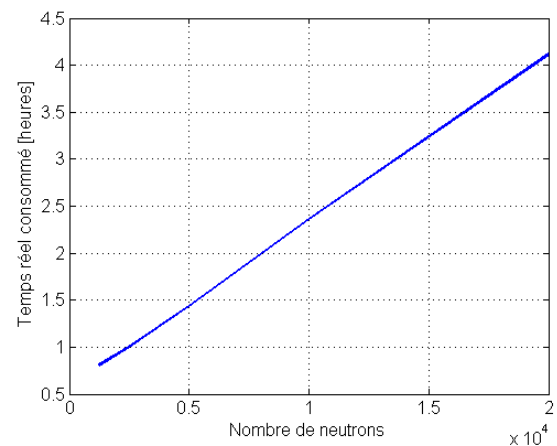


FIGURE 5.13 – Influence de N sur le temps de calcul

Pour terminer cette section, les temps de calculs sont présentés en fonction du modèle d'assemblage étudié, de la bibliothèque utilisée et du nombre d'étapes d'irradiation. Cela permet de mettre en évidence les analyses qui ont été les plus coûteuses en temps. De plus, de futurs utilisateurs de ALEPH v2 pourraient bénéficier de ces considérations et pourraient se faire une idée du temps requis pour des calculs de chaleurs résiduelles.

Avant de présenter les valeurs chiffrées des temps de calculs, il faut savoir que le temps consommé pour obtenir chaque résultat est la somme de trois contributions :

1. Le temps de calcul pour le transport des neutrons.
2. Le temps pour traiter les données nucléaires des différentes bibliothèques utilisées et pour générer un groupe de sections efficaces.
3. Le temps nécessaire pour obtenir les concentrations des nucléides à la fin de chaque étape d'irradiation en résolvant les équations de Bateman.

Le tableau 5.6 présente les temps de calcul réels pour les différentes bibliothèques utilisées en fonction du type d'assemblage étudié. Un assemblage a été choisi avec un nombre moyen d'étapes d'irradiation pour chaque modèle d'assemblage. Deux observations peuvent être faites :

1. Les temps sont plus importants pour les différents modèles de BWR par rapport aux PWR. Cela

est dû à un plus grand nombre moyen d'étapes d'irradiation. Les temps de calculs pour le transport des neutrons par MCNP est donc plus élevé.

2. Plus les bibliothèques sont récentes et plus les temps de calculs sont élevés. C'est évidemment le cas étant donné que plus une bibliothèque est récente et plus elle contient des données nucléaires. Le temps pour traiter ces données est donc forcément plus important.

TABLE 5.6 – Temps de calculs pour un assemblage de chaque type en fonction de la bibliothèque utilisée.

	<i>PWR</i> 15x15	<i>PWR</i> 17x17	<i>BWR</i> 8x8 – 1	<i>BWR</i> 8x8 – 2	<i>BWR</i> 8x8 – 3	<i>BWR</i> 8x8 – 4
<i>JEFF</i> – 3.1.2	1h18'55"	57'10"	2h27'42"	2h03'08"	1h39'49"	1h22'58"
<i>JEFF</i> – 3.2	1h38'07"	1h07'09"	2h55'05"	2h24'11"	1h51'30"	1h35'44"
<i>JEFF</i> – 3.3	1h45'33"	1h20'16"	3h14'40"	2h42'23"	2h09'29"	1h45'33"
<i>ENDF/B</i> – VII.1	1h26'47"	1h05'17"	2h41'56"	2h18'	1h47'05"	1h31'53"
<i>ENDF/B</i> – VIII	1h32'01"	1h10'01"	2h52'	2h23'54"	1h53'52"	1h37'14"

Le tableau 5.7 présente les temps de calculs réels en fonction du nombre d'étapes d'irradiation qui ont été employées pour les *PWR* et les *BWR*. Il montre évidemment que les temps de calculs augmentent lorsque le nombre d'étapes augmente.

TABLE 5.7 – Temps de calculs pour différents nombres d'étapes d'irradiation avec la bibliothèque *ENDF/B* – VII.1.

	2	3	4	5	6	7	8
<i>PWR</i>	42'04"	1h05'17"	1h26'47"	1h49'17"	2h17'51"	/	/
<i>BWR</i>	39'52"	1h05'30"	1h31'53"	1h47'05"	2h18'	2h41'56"	3h06'15"

5.6 Analyse de sensibilité

Afin de réaliser une étude de sensibilité, les nucléides qui contribuaient majoritairement à la chaleur résiduelle ont été identifiés et sont repris dans le tableau 5.8. L'analyse a été faite pour les six assemblages qui donnaient les moins bons résultats avec la bibliothèque *ENDF/B-VIII.0 + GEFY*.

TABLE 5.8 – Liste des contributeurs majeurs

	<i>D27</i>	<i>I24</i>	8331	8338	6454	<i>KU0100</i>
$Y_{39}^{90}(\%)$	25.75	28.44	27.59	28.96	27	27.47
$Ba_{56}^{137m}(\%)$	26.2	27.85	26.68	28.74	27.64	27.63
$Pu_{94}^{238}(\%)$	12.39	9.42	10.67	9.69	10.42	9.45
$Am_{95}^{241}(\%)$	10.96	10.06	7.77	7.56	9.72	7.42
$Cs_{55}^{137}(\%)$	7.5	7.98	7.64	8.23	7.92	7.92
$Sr_{38}^{90}(\%)$	5.4	5.97	5.79	6.08	5.67	5.76
$Cm_{95}^{244}(\%)$	6.93	4.77	7.2	5.12	5.8	7.02
$Pu_{94}^{240}(\%)$	1.67	1.66	1.71	1.81	1.92	1.58
$Eu_{63}^{154}(\%)$	1.24	1.45	2.03	1.47	1.53	1.97
$Cs_{55}^{134}(\%)$	0.13	0.35	0.82	0.54	0.37	1.55

L'analyse de sensibilité a donc ensuite été réalisée pour les deux plus gros contributeurs : le Ba_{56}^{137m} et le Y_{39}^{90} . Premièrement, une augmentation de 10 % a été effectuée sur ces deux nucléides de manière indépendante. Deuxièmement, la même augmentation a été réalisée pour les deux nucléides mais de façon simultanée.

Les figures 5.14 et 5.15 montrent les résultats de la première expérience pour les différentes valeurs de chaleur résiduelles mesurées expérimentalement. Ces deux graphes montrent qu'une augmentation individuelle de 10 % pour chaque nucléide induit une amélioration d'environ 3 % de l'erreur relative.

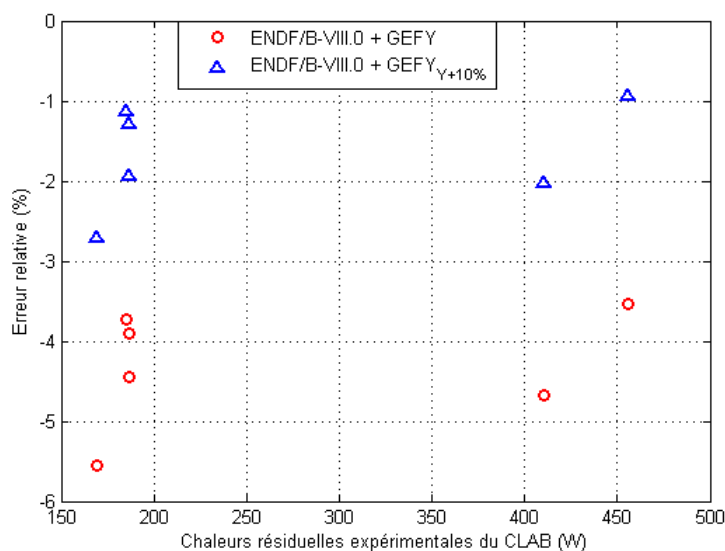


FIGURE 5.14 – Analyse de sensibilité pour le Y^{90}

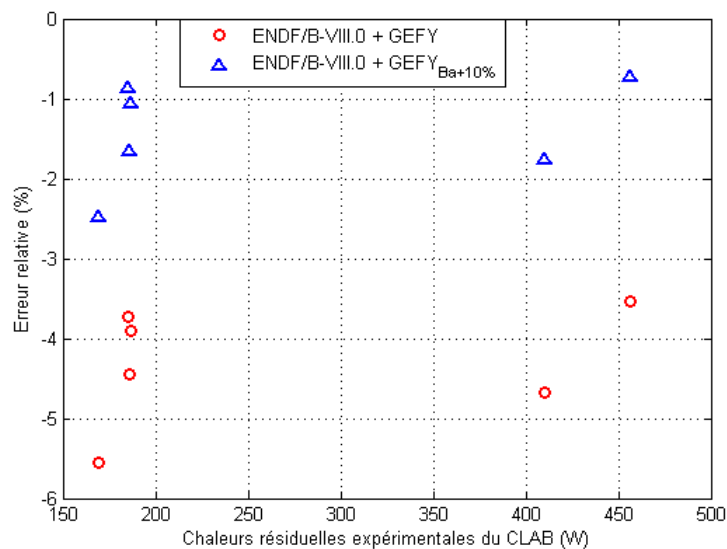


FIGURE 5.15 – Analyse de sensibilité pour le Ba^{137m}

Pour terminer ce chapitre, la figure 5.16 montre une comparaison entre l'augmentation individuelle et l'augmentation simultanée des deux nucléides. Elle illustre le fait que l'augmentation simultanée équivaut à la somme des augmentations individuelles. Une augmentation simultanée de 10 % implique donc une amélioration d'environ 5-6 % sur les erreurs relatives.

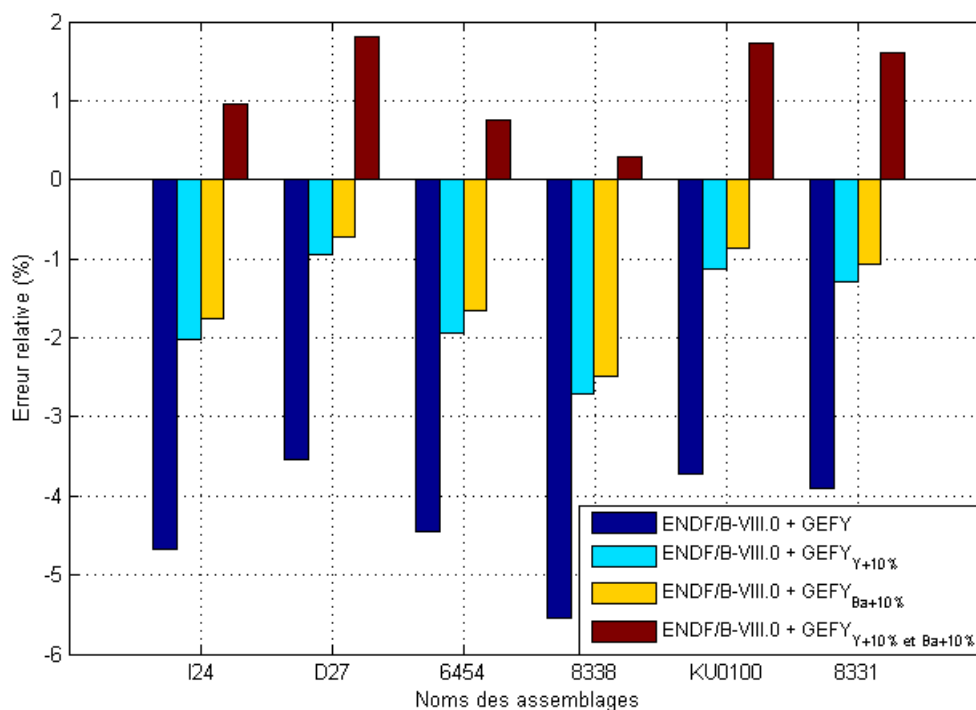


FIGURE 5.16 – Comparaison des trois analyses de sensibilité

Chapitre 6

Conclusion

Le but de ce mémoire était de comparer les mesures expérimentales réalisées au CLAB par un calorimètre avec les calculs des chaleurs résiduelles réalisés par le code d'épuisement ALEPH v2.

La validation des résultats expérimentaux a d'abord été réalisée pour être sûr de se baser sur des valeurs fiables. Celle-ci a montré que les résultats expérimentaux présentaient une incertitude de 2 %.

Une comparaison des chaleurs résiduelles calculées par ALEPH entre six bibliothèques de données nucléaires a ensuite été réalisée pour les PWR et les BWR étudiés. La comparaison comprenait au total 34 calculs de chaleurs résiduelles sur les PWR et 23 sur les BWR. Les erreurs relatives pour les six bibliothèques étaient inférieures à -4 % pour les PWR excepté une valeur comprise entre -4 et -5 %. Pour les BWR, les erreurs relatives de toutes les bibliothèques étaient inférieures à -6 %. Parmi toutes les bibliothèques, celle qui a présenté les meilleurs résultats est : ENDF/B-VII.1. Les erreurs relatives étaient inférieures à -2.7 % pour les PWR et inférieures à -2.5 % pour les BWR.

Notons qu'une étude de l'influence de la limite de transition entre l'énergie thermique et l'énergie rapide a également été menée. Cette étude n'a hélas montré que de très légères différences par rapport à la limite de transition par défaut et n'a donc pas pu être exploitée.

Par après, une comparaison des résultats obtenus avec ALEPH a été faite avec deux autres codes de calcul : TRITON et SAS2H. ALEPH montre de meilleurs résultats avec les bibliothèques JEFF-3.3 et ENDF/B-VII.1.

Ensuite des considérations temporelles ont été discutées. Une optimisation du nombre d'histoires de neutrons a abouti à la valeur de $N = 5000$. L'augmentation des temps de calculs a été chiffrée en fonction des bibliothèques de données nucléaires utilisées et du nombre d'étapes d'irradiation.

Enfin une analyse de sensibilité des deux contributeurs majeurs (Ba^{137m} et Y^{90}) pour la chaleur résiduelle a été effectuée. Elle a montré qu'une augmentation individuelle de 10 % de la concentration des deux nucléides provoquait une amélioration d'environ 3 % de l'erreur relative. Lorsque l'ajout de 10 % était fait de manière simultanée pour les deux nucléides, l'augmentation était de 5 à 6 %.

Bibliographie

- [1] Hamid Aït Abderrahim. Chapitre 1 - éléments de physique nucléaire, 2016.
- [2] International Atomic Energy Agency. Fission product yield for u^{235} , 2018. <https://www-nds.iaea.org/exfor/servlet/E4sMakeE4>.
- [3] International Atomic Energy Agency. u^{238} cross section for radiative capture, 2018. <https://www-nds.iaea.org/exfor/servlet/E4sMakeE4>.
- [4] Yann Bartosiewicz. Thermal hydraulics, lecture 2– chapter 3 : Reactor heat distribution, 2017.
- [5] D. DUMORA C. MICHELET. Section efficace : définition microscopique. http://res-nlp.univ-lemans.fr/NLP_C_M13_G04/co/grain02-04-02.html.
- [6] Christophe CALVIN. Les codes de calcul de la neutronique et le calcul haute performance. Technical report, CEA, 2012.
- [7] R. Capote et al. D.A. Brown, M. B. Chadwick. Endf/b-viii.0 : The 8th major release of the nuclear reaction data library with cielo-project cross sections, new standards and thermal scattering data. 148 :1–142, Février 2018.
- [8] Cyril Dieudonné. *Accélération de la simulation Monte-Carlo du transport des neutrons dans un milieu évoluant par la méthode des échantillons corrélés*. PhD thesis, Université Paris-Sud, 2013.
- [9] J. K. Shultis et R. E. Faw. An mcnp primer. Technical report, Dept. of Mechanical and Nuclear Engineering Kansas State University, 2004-2011.
- [10] Otasowie Osifo Fredrik Sturek, Lennart Agrenius. Measurements of decay heat in spent nuclear fuel at the swedish interim storage facility, clab, 2006.
- [11] A. Stankovskiy G. Van den Eynde. Advanced method for calculations of core burn-up, activation of structural materials, and spallation products accumulation in accelerator-driven systems. *Science and Technology of Nuclear Installations, Volume 2012, Article ID 545103*, 2012.
- [12] Adrien GRUEL. *Développement et validation de schémas de calcul dédiés à l'interprétation des mesures par oscillation pour l'amélioration des données nucléaires*. PhD thesis, Université de Grenoble, Octobre 2011.
- [13] B.D. Murphy I.C. Gauld, G. Illas and C.F. Weber. Validation of scale 5 decay heat predictions for lwr spent nuclear fuel, 2010.
- [14] Wolfram Research Inc. Mathematica's elementdata function, 2014. <http://www.periodictable.com/Elements/001/data.html>.
- [15] Wolfram Research Inc. Mathematica's elementdata function, 2014. <http://www.periodictable.com/Elements/008/data.html>.
- [16] Wolfram Research Inc. Mathematica's elementdata function, 2014. <http://www.periodictable.com/Elements/002/data.html>.
- [17] Wolfram Research Inc. Mathematica's elementdata function, 2014. <http://www.periodictable.com/Elements/040/data.html>.
- [18] Wolfram Research Inc. Mathematica's elementdata function, 2014. <http://www.periodictable.com/Elements/050/data.html>.

- [19] Wolfram Research Inc. Mathematica's elementdata function, 2014. <http://www.periodictable.com/Elements/026/data.html>.
- [20] Wolfram Research Inc. Mathematica's elementdata function, 2014. <http://www.periodictable.com/Elements/024/data.html>.
- [21] Wolfram Research Inc. Mathematica's elementdata function, 2014. <http://www.periodictable.com/Elements/064/data.html>.
- [22] M. Herman et al. M. B. Chadwick, P. Obložinský. Endf/b-vii.1 nuclear data for science and technology : Cross sections, covariances, fission product yields and decay data. *Nuclear Data Sheets*, 112 :2887–2996, Décembre 2011.
- [23] B. D. Murphy and I. C. Gauld. Spent fuel decay heat measurements performed at the swedish central interim storage facility, 2010.
- [24] NEA-OECD. Jeff-3.2 evaluated data library - neutron data, Mars 2014. https://www.oecd-nea.org/dbforms/data/eva/evatapes/jeff_32/.
- [25] NEA-OECD. Jeff-3.3, Novembre 2017. <https://www.oecd-nea.org/dbdata/jeff/jeff33/index.html>.
- [26] Nuclear Power. Decay heat – decay energy, 2018. <https://www.nuclear-power.net/nuclear-power/reactor-physics/reactor-operation/residual-heat/decay-heat-decay-energy/>.
- [27] K.-H. Schmidt and B. Jurado. Gefy : Gef-based fission-fragment yield library in endf-format. <http://www.cenbg.in2p3.fr/GEFY-GEF-based-fission-fragment?lang=en>.
- [28] Roger Brewer X-1 TA. *Criticality Calculations with MCNP5 : A Primer*. Los Alamos National Laboratory, Janvier 2009.
- [29] X-5 Monte Carlo Team. *MCNP — A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5 Volume I : Overview and Theory*. Los Alamos National Laboratory, April 2003.
- [30] X-5 Monte Carlo Team. *MCNP — A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5 Volume II : User's Guide*. Los Alamos National Laboratory, April 2003.

Annexes

A Exemple d'input

```

c Irradiation history
DATN /srv/clu/sci/pack/mcnp/xs_aleph_testing/aleph2/libn/jeff32a
MCNP /srv/clu/sci/bin/mcnp5_c740.sh 16          $ 16 CPU
OUT tpd inv act abs

BURN 1 4
VOL 48640.777 88935.43882
TAL 4

IRP t 7.87195857 d 281
PPM 4 50000 -530
DEC d 78
IRP t 16.1837531 d 290
PPM 4 50000 -350
DEC d 80
IRP t 13.6255806 d 317
PPM 4 50000 -395
DEC d 84
IRP t 13.2465115 d 273
PPM 4 50000 -308
DEC d 91
DEC d 7722

```

MESSAGE: xsdir=xsdir32a

PWR, assembly 15x15 ID=F14 type 2

c cell card

1 1 -10.18 -7 -1 2	tmp= 7.7553e-8	u=1 imp:n=1 \$uranium(900K)
2 2 1.00000e-4 7 -8 -1 2	tmp= 4.937541e-8	u=1 imp:n=1 \$helium(573K)
3 3 -6.56 -9 8 -1 2	tmp= 4.937541e-8	u=1 imp:n=1 \$zircaloy(573K)
4 4 -0.72 9 -1 2	tmp=4.756584e-8	u=1 imp:n=1 \$eau(552K)
21 3 -6.56 -22 21 -1 2	tmp=4.937541e-8	u=3 imp:n=1 \$guide tubes(573K)
22 0 -21 -1 2		u=3 imp:n=1
23 4 -0.72 22 -1 2	tmp=4.937541e-8	u=3 imp:n=1 \$guide tubes(573K)
5 0 -3 4 -5 6 lat=1		u=2 imp:n=1 fill=0:14 0:14 0:0
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1		
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1		
1 1 3 1 1 3 1 1 1 3 1 1 3 1 1		
1 1 1 1 1 1 1 3 1 1 1 1 1 1 1		
1 1 1 1 3 1 1 1 1 1 3 1 1 1 1		
1 1 3 1 1 1 1 1 1 1 1 1 3 1 1		
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1		
1 1 1 3 1 1 1 3 1 1 1 3 1 1 1		
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1		
1 1 3 1 1 1 1 1 1 1 1 1 3 1 1		
1 1 1 1 3 1 1 1 1 1 3 1 1 1 1		
1 1 1 1 1 1 1 3 1 1 1 1 1 1 1		
1 1 3 1 1 3 1 1 1 3 1 1 3 1 1		
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1		

```

      1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
6 0 -10 4 -11 6 -1 2      fill=2      imp:n=1 $window
7 0 #6      imp:n=0

```

```

c surface card
c Lattice surfaces
3 px 0.715
*4 px -0.715
5 py 0.715
*6 py -0.715
c Crayon surfaces
7 cz 0.4555
8 cz 0.465
9 cz 0.5375
c Window
*1 pz 182.9
*2 pz -182.9
*10 px 20.735
*11 py 20.735
c Guides tubes
21 cz 0.6515
22 cz 0.6945

```

```

c data card
c -----
c Source card
kcode 5000 1 50 250
ksrc 10.725 10.725 0
c -----
c Tally card
f4:n 1 (4 23)
sd4 1 1
c -----
c Material card
m1 nlib=09c
      8016 0.04541034
      92238 0.02196884
      92235 0.00072588
      92236 3.632827e-6
      92234 6.584499e-6
c Helium
m2      2003.06c 0.000137
      2004.06c 0.999863
c Zircaloy -4
m3 nlib=06c
      40090 0.505239
      40091 0.1101804
      40092 0.168413
      40094 0.1706716
      40096 0.027496
      26054 1.169e-4

```

```
26056 0.0018344
26057 4.4e-5
26058 5.6e-6
24050 4.31e-5
24052 8.3789e-4
24053 9.501e-5
24054 2.365e-5
50112 1.455e-4
50114 9.75e-5
50115 5.1e-5
50116 0.002181
50117 0.001152
50118 0.0036345
50119 0.0012885
50120 0.0048885
50122 6.945e-4
50124 8.685e-4
m4 nlib=55c
8016 0.33254
8017 0.000126
8018 0.000666
1001 0.66659
1002 0.0000766
mt4 lwtr .26 t
```

B Liste des différentes surfaces

Mnemonic	Type	Description	Equation	Card Entries
P PX PY PZ	plane	general normal to x -axis normal to y -axis normal to z -axis	$Ax + By + Cz - D = 0$ $x - D = 0$ $y - D = 0$ $z - D = 0$	$A \ B \ C \ D$ D D D
SO S SX SY SZ	sphere	centered at origin general centered on x -axis centered on y -axis centered on z -axis	$x^2 + y^2 + z^2 - R^2 = 0$ $(x - \bar{x})^2 + (y - \bar{y})^2 + (z - \bar{z})^2 - R^2 = 0$ $(x - \bar{x})^2 + y^2 + z^2 - R^2 = 0$ $x^2 + (y - \bar{y})^2 + z^2 - R^2 = 0$ $x^2 + y^2 + (z - \bar{z})^2 - R^2 = 0$	R $\bar{x} \ \bar{y} \ \bar{z} \ R$ $\bar{x} \ R$ $\bar{y} \ R$ $\bar{z} \ R$
C/X C/Y C/Z CX CY CZ	cylinder	parallel to x -axis parallel to y -axis parallel to z -axis on x -axis on y -axis on z -axis	$(y - \bar{y})^2 + (z - \bar{z})^2 - R^2 = 0$ $(x - \bar{x})^2 + (z - \bar{z})^2 - R^2 = 0$ $(x - \bar{x})^2 + (y - \bar{y})^2 - R^2 = 0$ $y^2 + z^2 - R^2 = 0$ $x^2 + z^2 - R^2 = 0$ $x^2 + y^2 - R^2 = 0$	$\bar{y} \ \bar{z} \ R$ $\bar{x} \ \bar{z} \ R$ $\bar{x} \ \bar{y} \ R$ R R R
K/X K/Y K/Z KX KY KZ	cone	parallel to x -axis parallel to y -axis parallel to z -axis on x -axis on y -axis on z -axis	$\sqrt{(y - \bar{y})^2 + (z - \bar{z})^2} - t(x - \bar{x}) = 0$ $\sqrt{(x - \bar{x})^2 + (z - \bar{z})^2} - t(y - \bar{y}) = 0$ $\sqrt{(x - \bar{x})^2 + (y - \bar{y})^2} - t(z - \bar{z}) = 0$ $\sqrt{y^2 + z^2} - t(x - \bar{x}) = 0$ $\sqrt{x^2 + z^2} - t(y - \bar{y}) = 0$ $\sqrt{x^2 + y^2} - t(z - \bar{z}) = 0$ ± 1 used only for 1-sheet cone	$\bar{x} \ \bar{y} \ \bar{z} \ t^2 \ \pm 1$ $\bar{x} \bar{y} \ \bar{z} \ t^2 \ \pm 1$ $\bar{x} \bar{y} \ \bar{z} \ t^2 \ \pm 1$ $\bar{x} \ t^2 \ \pm 1$ $\bar{y} \ t^2 \ \pm 1$ $\bar{z} \ t^2 \ \pm 1$
SQ	ellipsoid hyperboloid paraboloid	axis parallel to x -, y -, or z -axis	$A(x - \bar{x})^2 + B(y - \bar{y})^2 + C(z - \bar{z})^2 + 2D(x - \bar{x}) + 2E(y - \bar{y}) + 2F(z - \bar{z}) + G = 0$	$A \ B \ C \ D \ E$ $F \ G \ \bar{x} \ \bar{y} \ \bar{z}$
GQ	cylinder, cone ellipsoid paraboloid hyperboloid	axis not parallel to x -, y -, or z -axis	$Ax^2 + By^2 + Cz^2 + Dxy + Eyz + Fzx + Gz + Hy + Jz + K = 0$	$A \ B \ C \ D \ E$ $F \ G \ H \ J \ K$
TX TY TZ	elliptical or circular torus. Axis is parallel to x -, y -, or z -axis		$(x - \bar{x})^2/B^2 + (\sqrt{(y - \bar{y})^2 + (z - \bar{z})^2} - A)^2/C^2 - 1 = 0$ $(y - \bar{y})^2/B^2 + (\sqrt{(x - \bar{x})^2 + (z - \bar{z})^2} - A)^2/C^2 - 1 = 0$ $(z - \bar{z})^2/B^2 + (\sqrt{(x - \bar{x})^2 + (y - \bar{y})^2} - A)^2/C^2 - 1 = 0$	$\bar{x} \ \bar{y} \ \bar{z} \ A \ B \ C$ $\bar{x} \ \bar{y} \ \bar{z} \ A \ B \ C$ $\bar{x} \ \bar{y} \ \bar{z} \ A \ B \ C$
XYZP	surfaces defined by points – see pages 3-15 to 3-17			

C Liste des tallies

Tally Quantities Scored			
<u>Tally</u>	<u>Score</u>	<u>Physical Quantity</u>	<u>Units</u>
F1	W	$J = \int dE \int dt \int dA \int d\Omega \hat{\Omega} \cdot \hat{n} \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E, t)$	particles
F2	$\frac{W}{ \mu A}$	$\bar{\phi}_S = \frac{1}{A} \int dE \int dt \int dA \int d\Omega \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E, t)$	particles/cm ²
F4	$W \frac{T_l}{V}$	$\bar{\phi}_V = \frac{1}{V} \int dE \int dt \int dV \int d\Omega \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E, t)$	particles/cm ²
F5	$\frac{W \cdot p(\Omega_p) e^{-\lambda}}{R^2}$	$\phi_p = \int dE \int dt \int d\Omega \psi(\vec{r}_p, \hat{\Omega}, E, t)$	particles/cm ²
F6	$W T_l \sigma_t(E) H(E) \frac{\rho_a}{m}$	$H_t = \frac{\rho_a}{m} \int dE \int dt \int dV \int d\Omega \sigma_t(E) H(E) \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E, t)$	MeV/g
F7	$W T_l \sigma_f(E) Q \frac{\rho_a}{m}$	$I_f = \frac{\rho_a}{m} Q \int dE \int dt \int dV \int d\Omega \sigma_f(E) \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E, t)$	MeV/g
F8	W_C put in bin E_D	pulses	pulses

D Profil de Breit-Wigner

