



Analyses de sensibilité et d'incertitude de données nucléaires. Contribution à la validation d'une méthodologie utilisant la théorie des perturbations ; application à un concept innovant : réacteur à sels fondus thorium à spectre épithermique

Adrien Bidaud

► **To cite this version:**

Adrien Bidaud. Analyses de sensibilité et d'incertitude de données nucléaires. Contribution à la validation d'une méthodologie utilisant la théorie des perturbations ; application à un concept innovant : réacteur à sels fondus thorium à spectre épithermique. Physique Nucléaire Théorique [nucl-th]. Université Paris Sud - Paris XI, 2005. Français. NNT : . tel-00011573

HAL Id: tel-00011573

<https://theses.hal.science/tel-00011573>

Submitted on 9 Feb 2006

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

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

N° d'ordre :IPNO-T-05-10

UNIVERSITE PARIS XI

UFR SCIENTIFIQUE D'ORSAY

THÈSE

présentée

pour obtenir

Le GRADE de DOCTEUR EN SCIENCES DE
L'UNIVERSITE PARIS XI ORSAY

PAR

Adrien Bidaud

**Sujet : Analyses de sensibilité et d'incertitude de données
nucléaires. Contribution à la validation d'une méthodologie utilisant la théorie
des perturbations ; application à un concept innovant : réacteur à sels fondus
thorium à spectre épithermique**

Soutenue le 25 Octobre 2005 devant la commission d'examen

H. Doubre

Président

P. Reuss

Rapporteur

M. Salvatores

Rapporteur

B. Haas

Examineur

I. Kodeli

Examineur

V. Mastrangelo

Directeur de thèse

Remerciements

Je tiens à remercier tout d'abord Dominique Guillemaud-Mueller, directrice de l'Institut de Physique Nucléaire d'Orsay et Bernard Berthier, directeur de la Direction de la Recherche à l'IPN d'Orsay et directeur de mon école doctorale, pour m'avoir accueilli dans leur laboratoire et à Victor Mastrangelo pour m'avoir proposé ce sujet de thèse, et pour avoir su organiser si efficacement son déroulement.

Je remercie Massimo Salvatores et Paul Reuss pour m'avoir fait l'honneur d'être rapporteurs de ma thèse, et pour les intéressantes observations qu'ils ont pu faire à propos de mon travail. Je remercie également Hubert Doubre et Bernard Haas pour avoir accepté d'être membre du jury. Je souhaite exprimer ma gratitude à Ivo Kodeli qui, par toutes les remarques et discussions partagées sur les données et les incertitudes, sur les programmes et leur utilisation et qui a encadré ce travail de thèse dans la pratique, et sa présence dans le jury.

Je tiens à remercier les organismes qui ont contribué financièrement à ce travail et surtout les personnes qui dirigent ces organismes. Je remercie donc le Ministère de l'Education Nationale et de la Recherche et en particulier les universités Paris-XI Orsay et Paris-XIII Villetaneuse qui ont financé ma bourse de thèse et mon monitorat. Je remercie le GDR GEDEPEON et ses directeurs successifs

Je voudrais aussi remercier les différents collaborateurs de ce travail avec qui j'ai publié, en particulier les spécialistes des Sels Fondus et autres HTRs du CNRS Ludovic Matthieu et Daniel Heuer, et Oliver Köberl du CEA Cadarache. Je remercie en particulier David Lecarpentier travaillant à EdF R&D, pour sa disponibilité. J'ai beaucoup apprécié l'expérience étendue et la sympathie d'Enrico Sartori. Je tiens à remercier chaleureusement Tatiana Ivanova, dont la présence en France (au CNAM et à l'IPN d'Orsay) a permis à ma thèse de faire un grand bon en avant.

Je remercie les membres du groupe Physique de l'Aval du Cycle et Spallation pour avoir enrichi mes connaissances en physique nucléaire plus ou moins expérimentale. Je remercie d'abord les *permanents*, Charles-Olivier Bacri (le *Chef*), Fanny Rejmund (l'ex-*cheF*) mais aussi Sylvain David (dont un séminaire en DEA a affirmé ma vocation pour la physique des réacteurs), Claude

Stéphan (qui a gentiment relu ce document), Laurent Tassan-Got, Jonathan Wilson, Monique Bernas et le re-nouveau Laurent Audoin, puis les *transitoires* dans l'ordre inverse de la précarité : les post-docs Alexis Nuttin et Luc Perrot, les thésards Laure Ferrant, Paolo *Pampelmouss'* Napolitani, Abdel Lafriakh, Franco Michel-Sendis, et les stagiaires Kevin Rachor, Lise-Faustine(?) et Pierre Huu-Tai Chau, ainsi que tous les autres thésards du laboratoire et d'ailleurs.

Cette thèse, basée sur des simulations numériques, n'aurait pas été possible sans le soutien de la *technique*, c'est à dire les gens services informatiques de l'IPN Orsay et du CNAM-Paris, en particulier sans Michel Givort qui a permis le démarrage de ce travail en installant un certain nombre de programmes récalcitrants et Jean-Christophe Cazenave qui m'a, en particulier, repêché plusieurs fois des données en voie de perdition. Je remercie aussi tout ceux et celles qui huilent les rouages mystérieux de la recherche, au premier rang desquels Céline Hovaguimian qui nous assiste en toutes directions, Martine Lerin qui nous envoie en missions partout, et les secrétaires de groupe : à Orsay Annie Talbot, au CNAM Françoise Le Page et Brigitte Le Fur au GDR Gédépeon.

Je remercie ma famille, mes parents et ma grand-mère pour leur soutien affectueux sans limite. Je remercie aussi tous les membres du *clan*, certains se reconnaîtront plusieurs fois, les Cachanistes et ceux des squashes matinaux, ceux des sorties dominicales humides et ventées, ceux des vacances et weekends corses, bretons, bleuzards, provençaux ou montagnards, ceux de la recherche, celles qui corrigent les fautes, ceux des discussions sans fins sur l'énergie, la constitution, l'oenologie, l'avenir de la planète et surtout ceux avec qui l'on discute du Tétrafarmakon. Enfin, je ne remercierais jamais assez Véronique pour sa patience, avec qui je partage tant, jusqu'à cette passion pour les Synchros aquatiques...

Merci beaucoup à tous.

Table des matières

Introduction	1
1 Contexte énegétique	5
1.1 L'énergie	5
1.1.1 Quelques chiffres	5
1.1.2 Limitations des réserves	6
1.1.3 Effet de serre et combustibles fossiles	7
1.2 L'énergie nucléaire	8
1.2.1 Comment ça marche ?	8
1.2.2 Quels déchets ?	9
2 Données nucléaires	16
2.1 Différentes zones en énergie	17
2.1.1 Traitement des sections efficaces thermiques	17
2.1.2 Haute énergie ($E > 1\text{MeV}$)	18
2.1.3 Résonances résolues	19
2.1.4 Résonances non-résolues	20
2.2 Mesures des données	20
2.2.1 Mesures de sections efficaces différentielles	20
2.2.2 Mesures intégrales	22
2.3 Evaluation des données	22
2.3.1 Domaine des résonances : le programme SAMMY	23
2.3.2 Hautes énergies ($E > 10\text{ keV}$)	23
2.3.3 Bibliothèques évaluées	23
2.3.3.1 Le format ENDF	23
2.3.3.2 Le programme de traitement des données évaluées : NJOY	24
2.4 Evaluations des incertitudes	24

2.4.1	Format des incertitudes	24
2.4.2	Haute énergie	26
2.4.3	Résonances	26
2.4.4	Données disponibles	27
2.4.4.1	International Reactor Dosimetry File : IRDF	27
2.4.4.2	Données disponibles dans les évaluations japonaises JENDL3.2 et JENDL3.3	28
2.4.4.3	Autres incertitudes	30
3	Théorie des Perturbations et analyses de sensibilité	33
3.1	Equation du transport	33
3.1.1	Formulation générale	33
3.1.1.1	Transport	34
3.1.1.2	Disparitions	35
3.1.1.3	Source de diffusion	35
3.1.1.4	Autres sources	35
3.1.2	Problèmes pratiques indépendants du temps	36
3.1.2.1	Problèmes à source	36
3.1.2.2	Calculs de criticité	37
3.1.3	Problèmes pratiques dépendant du temps	39
3.1.3.1	Calculs de cinétique	39
3.1.3.2	Evolution du combustible	39
3.2	Résolution numérique	40
3.2.1	Approche stochastique	41
3.2.2	Approche déterministe	41
3.2.2.1	Discrétisation en énergie	41
3.2.2.2	Discrétisation angulaire : les méthodes S_n	43
3.2.2.3	Discrétisation spatiale	44
3.3	Théorie des Perturbations pour les analyses de sensibilité	45
3.3.1	Analyses de sensibilité	46
3.3.1.1	Théorie des perturbations pour les fonctionnelles linéaires avec le flux	46
3.3.1.2	Théorie simple : sensibilité du k_{eff}	47
3.3.1.3	Théorie des Perturbations Généralisées : sensibilités des rapports de taux de réaction	48
3.4	Analyses d'incertitude	50

4	Validation des méthodes	51
4.1	Présentation du réacteur VENUS	51
4.2	Présentation des outils	53
4.2.1	Chaîne disponible à l'OCDE/AEN	53
4.2.2	Description de SUS3D	54
4.3	Présentation de nos résultats	56
4.3.1	Effet de la mise en groupe	56
4.3.1.1	Utilisation de BUGLE	56
4.3.1.2	Utilisation de bibliothèques spécifiques	59
4.3.1.3	Taux de réaction	59
4.4	Calcul des sensibilités du k_{eff}	60
4.4.1	Autoprotection des sections efficaces partielles	62
4.4.1.1	Effets de la mise en groupe	66
4.4.1.2	Effets géométriques	69
4.4.2	Analyse d'incertitude	72
4.5	Calculs des sensibilités des taux de réaction	74
4.5.1	Impossibilité de résoudre une équation à source négative	75
4.5.2	Schéma numérique proposé	76
4.6	Conclusion	78
5	Application	84
5.0.1	Historique des réacteurs à sels fondus	85
5.0.2	Détails de neutronique	86
5.1	Présentation du schéma de calcul	90
5.2	Calcul de sensibilité du k_{eff}	91
5.2.1	Sensibilités	91
5.2.2	Effet des facteurs d'autoprotection	94
5.2.3	Analyses d'incertitude	97
5.3	Analyses de sensibilité des coefficients de température	98
5.3.1	Présentation des effets de température	98
5.3.2	Sensibilités du coefficient de température	99
5.3.3	Propagation des incertitudes de la section efficace de capture du ^{232}Th . .	103
5.4	Analyse de sensibilité du taux de régénération	104
5.4.1	Impact de l'ajustement de la concentration d'uranium sur celle du protactinium	107

5.4.2	Conservation du k_{eff} et de la régénération : impact sur le besoin en retraitement	108
6	Conservation des neutrons à l'équilibre des cycles fermés	111
6.1	Fermeture des cycles	112
6.2	Equilibre des noyaux lourds	113
6.3	Bilan de neutrons	118
6.3.1	Exemple sur le calcul du bilan de l' ^{234}U	118
6.3.2	Application numérique	119
6.4	Gain de régénération	122
6.4.1	Lien avec le $\bar{\nu} - 2(1 + \alpha)$	124
6.4.2	Détails sur les termes supplémentaires	124
6.4.3	Application au calcul de la régénération en fonction de la stratégie du retraitement chimique	126
6.4.3.1	Extraction du ^{233}Pa	126
6.4.3.2	Extraction du ^{237}Np	127
6.4.3.3	Calcul des marges apportées par les choix de stratégie	127
6.4.3.4	Conclusions	129
6.4.4	Calcul des sensibilités	129
6.4.5	Incertitudes	132
6.4.6	Conclusions sur l'utilisation des outils développés	134
6.4.7	Conclusions sur les calculs d'incertitude de la régénération à l'équilibre . .	135
A	Calculs de coin de table, de dos d'enveloppe, de fin de thèse	143
A.1	Sensibilité du k_{eff}	143
A.2	Sensibilité de la régénération	144
A.3	Applications numériques	145
B	apollo2fido	147
C	Programme Endf2cov	150
	Table des figures	161
	Liste des tableaux	163

Introduction

Dans un contexte global de crise énergétique latente, et de prise de conscience de l'amorce d'un changement climatique lié à la consommation de combustibles fossiles, le nucléaire apparaît de nouveau comme une source d'énergie électrique compétitive. Pour convaincre de son opportunité, le nucléaire du futur devra s'inscrire dans une démarche de développement durable. C'est-à-dire utiliser au mieux les ressources en minerais et gérer sa production de déchets. Contrairement aux réacteurs actuels, qui consomment essentiellement l' ^{235}U présent à 0,7% dans l'uranium naturel, ces réacteurs devraient régénérer leurs isotopes fissiles. Il faudra pour cela utiliser des réacteurs à spectre rapide si l'on continue à utiliser le cycle uranium, ou utiliser le cycle thorium. Dans les deux cas, les réacteurs du futur utiliseront de nouveaux combustibles, et probablement des spectres de neutrons différents de ceux des Réacteurs à Eau sous Pression (REP) qui constituent l'essentiel de la flotte mondiale de réacteurs depuis des décennies.

Les grands pays du nucléaire ont mené une étude prospective des concepts dont le potentiel correspond aux objectifs du développement à long terme du nucléaire : c'est le forum "Génération IV". Ce groupe d'experts internationaux a sélectionné six concepts particuliers qui pourraient devenir les réacteurs de quatrième génération [1].

En France, les recherches sur ces réacteurs innovants sont stimulées par la loi du 30 décembre 1991 [2] relative à la gestion des déchets nucléaires. Cette loi définit 3 axes de recherche et donne un délai de 15 ans aux chercheurs pour avancer sur ces voies privilégiées. Nous sommes concerné par le premier axe : l'étude de solutions permettant la séparation et la transmutation des noyaux radioactifs à vie longue présents dans les déchets. Dans ce cadre, les acteurs de la recherche et de l'industrie concernés (CNRS, Université, CEA, EdF, AREVA) participent au groupement de recherche Gestion des Déchets et Production d'Energie par les Options Nouvelles (GEDEPEON). Le développement de réacteurs innovants demande de gros efforts dans beaucoup de domaines auxquels le CNRS apporte son expertise : la physique nucléaire pour la neutronique, la radiochimie pour le retraitement du combustible et le stockage des déchets, mais aussi la métallurgie et la chimie pour l'étude de matériaux de structure innovants.

L'Institut National de Physique Nucléaire et de Physique des Particules (IN2P3) du CNRS a

rejoint la thématique des réacteurs innovants, en valorisant son savoir faire en physique nucléaire, en particulier en mesure de données nucléaires. Il a développé par la suite, une composante d'étude des réacteurs nucléaires. *L'objectif de ce travail de thèse est de calculer l'impact des incertitudes des données nucléaires sur les simulations de Réacteurs à Sels Fondus (RSF) thorium à spectre épithermique.* Nous faisons ainsi le lien entre la communauté des expérimentateurs qui mesure ces données et celle, émergente au CNRS, des physiciens des réacteurs, qui utilise ces données pour simuler ces réacteurs.

La connaissance des incertitudes sur les simulations est importante à tous les stades de développement d'un concept. Lors des études préliminaires, il est important d'avoir une idée de la confiance que l'on peut avoir dans les simulations, de façon à tracer un tableau réaliste des marges de manœuvre. Dans des étapes avant-projet plus avancées, la connaissance précise des incertitudes permet de définir les marges de sécurité à conserver au plus juste. On évite alors de surdimensionner les installations, et on peut travailler au plus près des points de fonctionnement optimaux. Connaître les incertitudes permet donc d'améliorer les concepts et de gagner en compétitivité.

Le chapitre 2 de ce travail présente les principaux liens entre, la physique nucléaire, les mesures expérimentales et les données utilisées pour la simulation des réacteurs. Le durcissement des contraintes de sûreté ayant nettement augmenté la difficulté de mise en place des expériences critiques, il n'est plus possible aujourd'hui de construire en série des maquettes permettant de valider les données nucléaires. La connaissance des incertitudes permet d'anticiper les besoins et de cibler les efforts tant en terme d'expériences de physique nucléaire qu'en terme de traitement de ces données. Dans ce chapitre, l'accent est mis sur l'obtention des incertitudes sur ces données et sur l'état des lieux de la disponibilité de ces informations sous forme de matrices de covariances.

Dans le chapitre 3, les outils fournis pour les calculs de sensibilité et d'incertitudes par la Théorie des Perturbations sont présentés succinctement. Ce n'est pas la première fois que les physiciens des réacteurs imaginent des réacteurs innovants et rencontrent la problématique de l'incertitude apportée par les données nucléaires. Les outils basés sur la Théorie des Perturbations pour le calcul de la sensibilité d'une observable à une donnée nucléaire, c'est à dire la variation relative d'un paramètre intégral de simulation par rapport à une variation relative d'une donnée de base, ont été développés théoriquement quasiment en même temps que les réacteurs. L'essentiel de ce travail de thèse est : de valider un système de programmes complet, utilisant la Théorie des Perturbations pour les calculs de sensibilité et d'incertitude, et d'appliquer cette méthodologie au calcul des incertitudes des RSF thorium à spectre épithermique.

Nous présentons dans le chapitre 4, le travail de validation effectué sur le réacteur expérimental VENUS chargé partiellement en combustible MOX. Les mesures de criticité et de distribution

de puissance, effectuées sur cette maquette de Réacteur à Eau sous Pression de puissance nulle, situé au SCK•CEN en Belgique, ont permis à la banque de données de l'Agence de l'Energie Nucléaire de l'OCDE de définir un exercice de calcul international. Ce genre d'exercice est très intéressant puisque les participants peuvent comparer leurs outils, non seulement par rapport à ceux des autres participants, mais aussi par rapport aux résultats expérimentaux. Nous avons pris en main , en collaboration avec la banque de données de l'AEN/OCDE, les outils éprouvés pour les calculs de protection qu'elle distribue, en étudiant les sensibilités puis les incertitudes du k_{eff} du réacteur. Ainsi, nous pouvons mieux connaître l'impact des hypothèses de calcul (modélisation géométrique, origine et traitement des données nucléaires, schéma numérique) sur les résultats des simulations. Mais surtout, nous pouvons connaître l'impact de ces hypothèses sur les calculs de sensibilités. Ces sensibilités seront combinées aux incertitudes sur les données pour obtenir l'incertitude sur la simulation. Nous montrons que l'incertitude sur les imprécisions des données de base est grande devant l'application visée : les analyses d'incertitude de réacteurs innovants.

Dans le chapitre 5, nous analysons les sensibilités et les incertitudes du k_{eff} et des coefficients de température d'un Réacteur à Sels Fondus (RSF) au thorium à spectre épithermique avec les outils validés précédemment. Ce type de réacteur présente beaucoup d'avantages en termes de réduction de la production de déchets et de capacité de déploiement à grande échelle. Nous profitons de la comparaison de nos résultats avec ceux obtenus par Tatiana Ivanova de l'IPPE/Obninsk lors de son séjour à l'IPN/Orsay et au CNAM/Paris au moyen d'une méthodologie très différente de la notre, pour en étudier les détails.

La régénération des matériaux fissiles est la clef du développement du nucléaire à grande échelle et à long terme. Nous proposons dans le chapitre 6, une étude innovante des sensibilités de la régénération des réacteurs maintenus critiques dont le combustible est à l'équilibre. L'hypothèse de l'équilibre est importante parce que l'incertitude liée à une réaction sur un noyau se propage à tous les descendants de ce noyau. Ainsi, certaines réactions voient leurs sensibilités augmentées, alors que d'autres deviennent presque négligeables. Nous utilisons des outils, servant habituellement à estimer le potentiel d'incinération et de régénération de concepts de réacteur, pour quantifier les contributions des différentes réactions à la régénération. Ces outils ne donnent pas accès systématiquement à tous les détails des profils de sensibilités, mais ils permettent cependant de calculer l'ordre de grandeur des contributions des principales réactions, avec une confiance relativement bonne par rapport à celle que nous avons dans les incertitudes sur les données de base.

Nous pouvons dresser un tableau complet des incertitudes dues aux données des RSF thorium en spectre épithermique. Non seulement, nous pouvons estimer les incertitudes sur des paramètres

clefs du concept, mais en plus nous pouvons construire une liste des données à améliorer en priorité pour limiter l'impact de l'incertitude des données sur les simulations.

Chapitre 1

Contexte énergétique, effet de serre et énergie nucléaire

Une définition communément admise du développement durable est de dire que c'est "un développement qui répond aux besoins du présent sans compromettre la possibilité, pour les générations à venir, de pouvoir répondre à leur propres besoins". Notre consommation d'énergie actuelle ne correspond évidemment pas à une telle définition. Non seulement est-elle basée sur la combustion de ressources fossiles, qui ne seront plus disponibles pour les générations suivantes. Mais en plus, cette combustion s'accompagne de l'émission massive de gaz à effet de serre, confrontant nos descendants à un changement climatique, qui ne devrait pas les aider à subvenir à leurs besoins.

Nous faisons dans ce chapitre un rapide tour d'horizon des différentes sources d'énergies, de leur probable développement au cours de ce siècle et de leur impact sur le climat. L'accent est mis sur la place que pourrait prendre le nucléaire du futur. Ces considérations expliquent les efforts récents de développement de filières de réacteurs nucléaires innovants, dont les Réacteurs à Sels Fondus (RSF) au Thorium, objet de cette thèse.

1.1 L'énergie

1.1.1 Quelques chiffres

Toute activité humaine suppose une consommation d'énergie. Que ce soit pour se déplacer, se chauffer, construire une maison, ou tout simplement manger, de l'énergie est dépensée. Depuis le début de la révolution industrielle, le travail animal tend à être remplacé par celui des machines. La figure 1.1 montre la répartition de l'utilisation de l'énergie en France en 2000 entre les différents usages. Il est intéressant de remarquer l'importance du comportement de chacun d'entre-nous

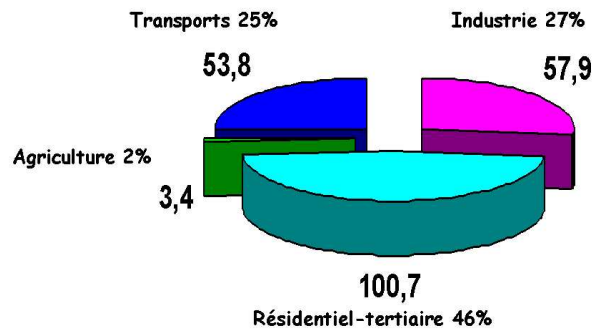


FIG. 1.1 – Répartition de la consommation d'énergie en France en 2000 en million de tonne-équivalent-pétrole.

dans la consommation totale, puisque en modifiant nos comportements, nous pouvons avoir un impact direct sur la moitié de l'énergie que nous consommons chez nous ou au travail, plus sur le quart que nous consommons pour nous transporter, nous et nos marchandises. Les industries ne sont qu'une contribution minoritaire. De plus, c'est la seule part à avoir diminué (de presque un tiers) depuis les chocs pétroliers, malgré une production de richesse en hausse [3].

Cette énergie consommée a été produite par différentes sources : principalement des fossiles : pétrole, gaz, charbon, renouvelables (hydraulique et biomasse, essentiellement la combustion de bois) et par le nucléaire. La figure 1.2 donne les contributions de chacune de ces sources dans le monde en 2001 [4].

1.1.2 Limitations des réserves

Nous avons vu que la majorité de l'énergie consommée dans le monde était basée sur l'utilisation des combustibles fossiles. De plus, l'industrie pétrolière est capable de transformer n'importe quel combustible à base de carbone (charbon, gaz mais aussi produits issus de la biomasse : alcools, huiles végétales) en un combustible liquide utilisable dans un moteur à explosion standard. Ce raffinage consomme souvent une partie non négligeable du contenu énergétique du combustible de base, mais il permet d'obtenir un produit utilisable avec des technologies classiques pour lequel les infrastructures de stockage, de transport et de distribution existent déjà. Ainsi pour certains auteurs[5], le développement d'une économie de l'hydrogène est peu probable au cours de ce siècle.

Le pétrole étant le combustible le plus facile à extraire, à transporter et à stocker, toutes les autres sources primaires pouvant être transformées en un produit équivalent, il est particulière-

ment pertinent de s'intéresser à ses réserves puisque c'est son prix qui impose le développement des énergies alternatives. La figure 1.3 montre bien sûr que ces ressources sont finies. On remarque que les auteurs font la différence entre le pétrole conventionnel et le reste des combustibles liquides : les pétroles "non-conventionnels" (huiles extra-lourdes et sables bitumineux), mais aussi carburants issus de la biomasse sont déjà exploités couramment depuis longtemps. Ils le seront d'autant plus que le baril de produits "légers" est cher. On remarque aussi que le "pic" de production de pétrole conventionnel est probablement quasiment atteint, et que tous les auteurs du milieu pétrolier prévoient une saturation de la production dans la décennie 2020-2030.

Ainsi, quelle que soit l'efficacité des politiques d'économies d'énergies, la raréfaction progressive des ressources d'énergies fossiles au cours de ce siècle devrait favoriser le développement à grande échelle des énergies alternatives, dont le nucléaire.

1.1.3 Effet de serre et combustibles fossiles

La présence dans l'atmosphère terrestre, de gaz retenant une partie de l'énergie lumineuse reçue par sa surface permet à cette surface d'avoir une température propice au développement de la vie.

La consommation massive de combustibles fossiles depuis le début de l'ère industrielle fait que les concentrations de ces gaz ont beaucoup augmenté au cours du dernier siècle : environ +30% pour le dioxyde de carbone et +150% pour le méthane par exemple. Ces augmentations constituent ce que les climatologues appellent un *forçage radiatif positif* qui a un effet sur le climat à l'échelle de la planète. La figure 1.4 montre qu'il n'est pas possible d'expliquer l'augmentation de la température moyenne dans le monde sans prendre en compte dans les modèles le forçage positif induit par les activités humaines[7].

Ces changements climatiques vont induire à leur tour des modifications de notre environnement. Il n'y a pas de raison pour que nos sociétés s'adaptent facilement à ces modifications rapides à grande échelle, surtout dans un monde où l'énergie devient rare. Les scénarios prenant pour hypothèse la mise en place de politiques ambitieuses de contrôle des émissions, estiment l'augmentation de température moyenne en 2100 à environ 2°C. Soit autant de différence qu'entre notre climat d'aujourd'hui et celui d'un épisode de glaciation, pendant lequel la moitié de l'Europe est sous la glace.

Le nucléaire, ne produisant pas de gaz à effet de serre, est souvent proposé comme une substitution aux énergies fossiles pour la production massive et centralisée d'électricité. La production d'électricité correspondant environ à la moitié des besoins en énergie primaire, la substitution des centrales thermiques par des centrales nucléaires est un levier important¹ dans la lutte contre

¹mais très nettement insuffisant si il n'est pas associé à une diminution massive de la consommation d'énergie,

le réchauffement climatique.

1.2 L'énergie nucléaire

1.2.1 Comment ça marche ?

L'énergie utilisée dans les réacteurs nucléaires est produite lors de la fission de noyaux lourds² provoquée par leur interaction avec un neutron. On dit qu'il y a une réaction nucléaire en chaîne puisqu'en plus d'une grande quantité d'énergie³, une fission libère un peu plus de 2 neutrons. Si, en moyenne, exactement un de ces neutrons déclenche à nouveau une fission, la réaction s'auto-entretient, et le nombre de fissions par unité de temps et donc la puissance sont constantes.

Pour que ce fonctionnement en régime *critique*⁴ soit possible, il faut que la probabilité du noyau lourd de fissionner sous l'impact d'un neutron soit plus grande que celle de capturer le neutron : on dit alors qu'il est *fissile*. Parmi les noyaux lourds présents naturellement sur terre (²³²Th, ²³⁵U et ²³⁸U), seul l'²³⁵U est fissile. Les réacteurs utilisant l'uranium, et en particulier la fission de l'²³⁵U se sont donc développés en premier et produisent aujourd'hui l'énergie nucléaire.

L'uranium naturel contenant seulement 0,7% de ²³⁵U, pour que la réaction en chaîne soit possible, il faut enrichir l'uranium en ²³⁵U pour limiter les captures sur l'²³⁸U. Une solution pour ne pas avoir besoin de beaucoup enrichir⁵ est de ralentir les neutrons, car avec des "neutrons lents", le rapport entre la probabilité de fission de l'²³⁵U et celle de capture du ²³⁸U est plus favorable à la fission. Les neutrons sont ralentis par chocs sur des matériaux légers *modérateurs*⁶.

Les autres noyaux lourds sont dits *fertiles*, parce que suite à une capture neutronique, ils peuvent donner un noyau *fissile* qui aura une grande probabilité de fissionner et donc produire à leur tour de l'énergie. On dit que le réacteur est régénérateur lorsque les matériaux fissiles, produisant l'énergie et les neutrons nécessaires à l'entretien de la réaction en chaîne, sont régénérés par capture neutronique sur un noyau fertile. Les figures 6.1 et 6.2 représentent les principaux noyaux intervenant dans les 2 cycles possibles : le cycle thorium/uranium et le cycle uranium/plutonium. Ces figures présentent aussi les contributions de chaque noyau au total des

en particulier si cette énergie émet des gaz à effet de serre

²C'est-à-dire de noyau dont le nombre de nucléons est très grand, supérieur à 230 environ, du ²³²Th ou de l'²³⁵U par exemple.

³Environ 200 MeV, $3,2 \cdot 10^{-11}$ Joules

⁴Où l'équilibre est atteint, c'est-à-dire qu'une fission redonne une fission exactement

⁵Il est possible de ne pas enrichir du tout en utilisant des modérateurs peu capturants comme l'eau lourde ou le graphite

⁶Tout simplement l'hydrogène de l'eau qui sert aussi à extraire la chaleur produite dans les Réacteurs à Eau sous Pression (REP), la filière de réacteurs qui représente environ la moitié des réacteurs nucléaires sur terre et celle utilisée en France

fissions. Le ^{233}U (produit suite à une capture neutronique sur le ^{232}Th) et le ^{239}Pu (produit suite à une capture neutronique sur le ^{238}U) assurent plus des 2/3 des fissions dans leur cycle respectif, d'où la dénomination des cycles.

En utilisant des réacteurs *surgénérateurs*, on pourrait utiliser non seulement les 0,7% fissiles de l'uranium naturel, mais surtout les noyaux fertiles, c'est-à-dire l' ^{238}U mais aussi le ^{232}Th dont les réserves dans la croûte terrestre sont environ 4 fois plus abondantes que celles d'uranium. Malgré une production d'énergie relativement limitée aujourd'hui, le nucléaire utilise mal sa matière première et est donc limité par ses réserves. La mise au point de filières régénératrices permettrait de multiplier par un facteur 100 ces réserves, rendant possible un développement massif et pérenne de cette source d'énergie. C'est un des objectifs du forum Génération IV [1].

1.2.2 Quels déchets ?

Les déchets et les risques d'accident, sont inhérents à la production d'énergie. Jusqu'à présent, seul le développement de l'énergie nucléaire a été freiné.

Les déchets produits par l'énergie nucléaire de fission peuvent être séparés en trois catégories en fonction de leur origine :

- les produits d'activation ;
- les produits de fission ;
- les noyaux lourds : plutonium et actinides mineurs.

Parmi les neutrons qui ne déclenchent pas une nouvelle fission, une partie est absorbée par les matériaux de structure comme les gaines de combustible ou les structures du réacteur comme la cuve en acier et les murs de protection en béton. Les noyaux ayant eu une réaction nucléaire peuvent devenir radioactifs. Les durées de vie de ces déchets sont relativement courtes (quelques dizaines d'années au maximum). Etant donnés les faibles flux de neutrons concernés, comparés aux volumes de matières irradiées, l'activité volumique de ces déchets est faible. Il existe aujourd'hui une solution définitive pour ces déchets à vie courte de faible à moyenne activité sur le site de stockage de l'Aube [8]. Ainsi, la gestion de l'essentiel des déchets issu du démantèlement futur des réacteurs est déjà assurée aujourd'hui.

Quel que soit le noyau qui fissionne, la quantité d'énergie produite et le nombre de produits de fission sont quasiment constants. Ainsi, toutes les filières produisent plus ou moins la même quantité de produits de fission, à production d'énergie égale. Le tableau 1.1 montre que sur la tonne de produits de fission produite par un réacteur de 1 GWe pendant 1 an⁷, 100 kg environ

⁷C'est la puissance moyenne des 58 réacteurs du parc nucléaire français. On produit l'électricité pour 60 millions de français avec 60 Gwe. 1 Gwe.an est donc la quantité d'électricité consommée par un million de personnes en un an.

sont radioactifs. Ces déchets sont les cendres "ultimes" de la production d'énergie nucléaire. Il n'est pas possible de réduire cette quantité, la transmutation des produits de fission à vie longue semble extrêmement complexe par rapport au danger qu'ils représentent et est quasiment abandonnée aujourd'hui. En France, le combustible est retraité et donc près de 90% de ces déchets sont déjà séparés et immobilisés par vitrification, en attente d'une solution de stockage définitif en site géologique profond.

Nous avons vu que les noyaux lourds, même fissiles, peuvent capturer des neutrons, devenant des noyaux encore plus lourds : plutonium, américium, curium... Ces noyaux ont souvent des durées de vie plus courtes que celles de leurs prédécesseurs et donc des radioactivités plus intenses. De plus, comme ils sont plus lourds, leurs chaînes de décroissance vers un noyau stable sont plus longues et émettent plus de particules. Ils présentent donc une radiotoxicité plus importante que le noyau d'Uranium ou de Thorium dont ils sont issus. Dans le cas de l'utilisation du cycle du thorium, il faut un plus grand nombre de captures avant d'obtenir de tels noyaux, ce qui limite leur production et rend ce cycle relativement propre.

Le tableau 1.1 compare les inventaires de noyaux au chargement et au déchargement d'un Réacteur à Eau sous Pression moyen français. On voit que les masses de déchets produits sont très faibles par rapport à la quantité d'électricité produite. En effet, pour produire l'électricité pour un million de personnes pendant un an, on produit environ 250 kilos de plutonium et quelques dizaines de kilos d'actinides mineurs et de produits de fission à vie longue. La production de la même quantité d'électricité avec un combustible fossile demanderait des masses de combustibles plusieurs dizaines de milliers de fois plus importantes.

La figure 1.5 compare les contributions des différents types de déchets à la radiotoxicité ⁸ en fonction du temps pour un Réacteur à Eau sous Pression. Après quelques centaines d'années, les produits de fission deviennent négligeables devant les actinides lourds.

Enfin la figure 1.6 compare des simulations de radiotoxicité de différentes filières. La filière à cycle fermé U/Pu est près de 2 ordres de grandeurs plus propre que celle des REP. L'avantage du cycle du thorium apparaît clairement puisque ses déchets sont de nouveaux deux ordres de grandeurs moins dangereux que ceux du cycle U/Pu. L'intérêt des réacteurs innovants, utilisant le cycle U/Pu avec des neutrons rapides ou le cycle Th/U, qui recyclent ces noyaux lourds pour en utiliser le potentiel énergétique et les éliminer, est évident en matière de déchets produits.

La quantité et la nocivité des déchets produits dépendent donc de leur mode de production, c'est-à-dire du choix du type de réacteurs et du cycle du combustible utilisés pour produire de l'électricité nucléaire. C'est à partir de cette réflexion que le groupement de recherche français GEDEON (GEstion des DEchets par les Options Nouvelles) est devenu GEDEPEON (GEstion

⁸une mesure de la dangerosité de ces déchets, si ils sont absorbés

des DEchets et PRoduction d'Energie par les Options Nouvelles).

Les réacteurs de génération IV, régénérateurs et incinérateurs de leurs propres noyaux lourds, possèdent le potentiel pour produire massivement de l'électricité, sans production de gaz à effet de serre et en limitant au maximum la dangerosité de leurs déchets.

Dans les réacteurs non surgénérateurs d'aujourd'hui, il y a peu d'actinides mineurs et pas de Thorium, alors que ces noyaux seront présents en grande quantité dans les réacteurs du futur. Ainsi, la simulation des concepts de réacteurs de Génération IV, dont certains répondent aux critères d'un développement massif à long terme, dépend de données nucléaires connues avec une plus grande incertitude que celles nécessaires pour simuler les réacteurs actuels. L'essentiel de ce travail de thèse est d'essayer de quantifier l'impact de ces incertitudes sur les réacteurs du cycle du Thorium.

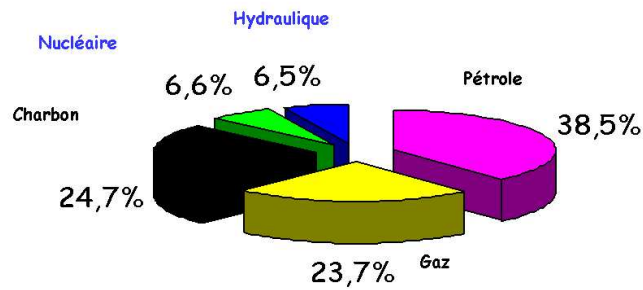


FIG. 1.2 – Répartition de la production d'énergie primaire dans le monde en 2001. Il faudrait ajouter dans cette répartition la contribution de la biomasse "thermique" (bois essentiellement). Cette contribution, de l'ordre de 10% du total, ne fait pas vraiment partie du marché de l'énergie. Elle n'est donc pas quantifiable précisément.

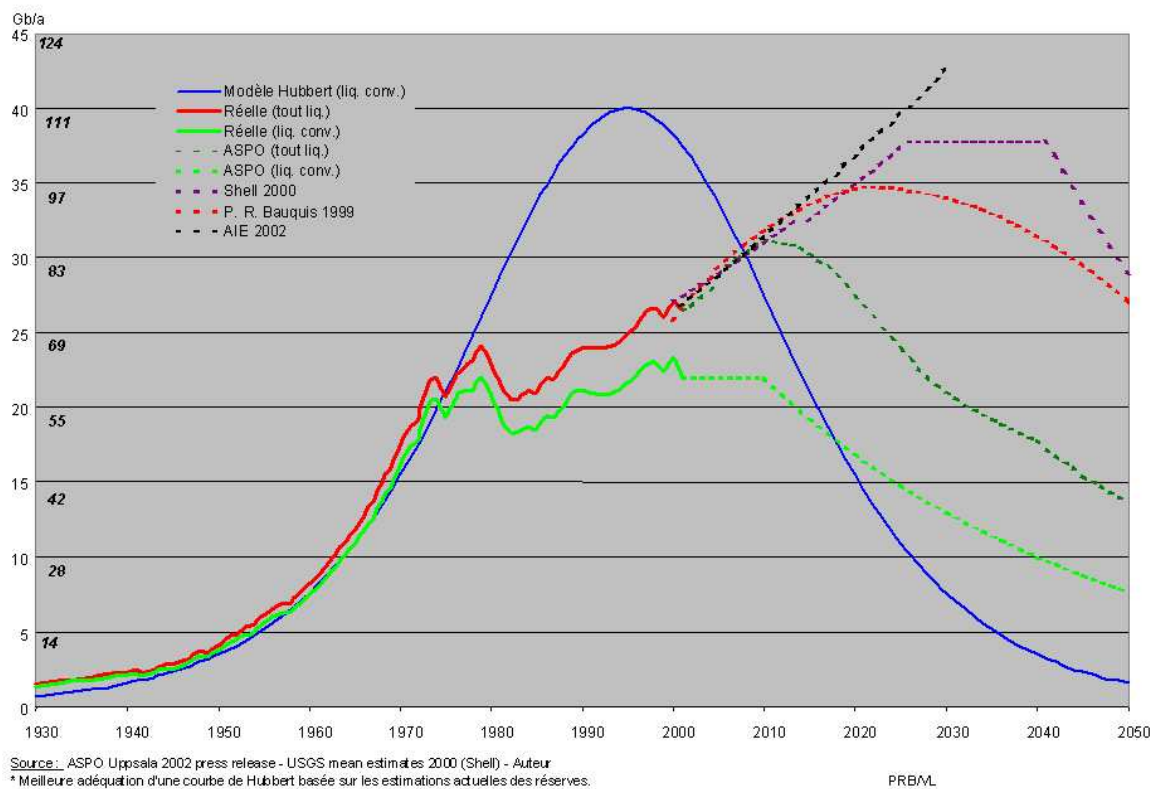


FIG. 1.3 – Estimations des réserves de pétroles suivant plusieurs sources [6]

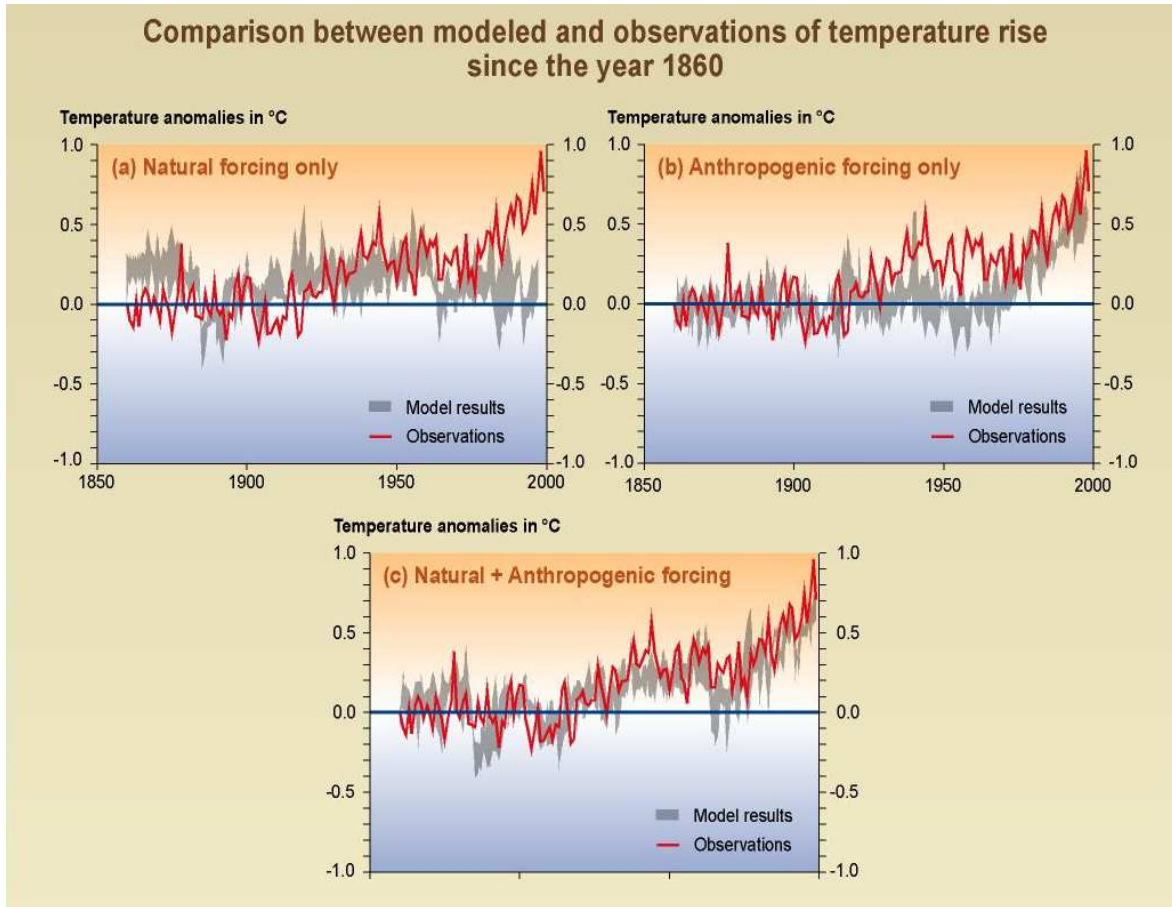


FIG. 1.4 – Comparaison des simulations du climat passé prenant en compte ou non l'impact des émissions de gaz à effet de serre par les activités humaines [7]

Noyau	Inventaire initial	Inventaire final
^{235}U	954	280
^{236}U	0	111
^{238}U	26328	25655
Total Uranium	27282	26047
^{239}Pu	0	156
Total Plutonium	0	266
Actinides Mineurs	0	20
Total Produits de Fission	0	946
PF vie moyenne	0	43
PF vie longue	0	63
Total	27282	27279

TAB. 1.1 – Comparaison des inventaires (en kg) au chargement et au déchargement d'un Réacteur à Eau sous Pression après production d'une énergie d'un GWe pendant un an. Tout l' ^{235}U n'a pas disparu : non seulement l' ^{238}U fissionne parfois directement, mais le ^{239}Pu produit par capture neutronique sur celui-ci fissionne aussi. La perte de masse totale (environ 3 kg) entre le chargement et le déchargement correspond à l'énergie produite suivant la formule bien connue $E = mc^2$ et à la masse des neutrons de fissions absorbés en dehors du combustible.

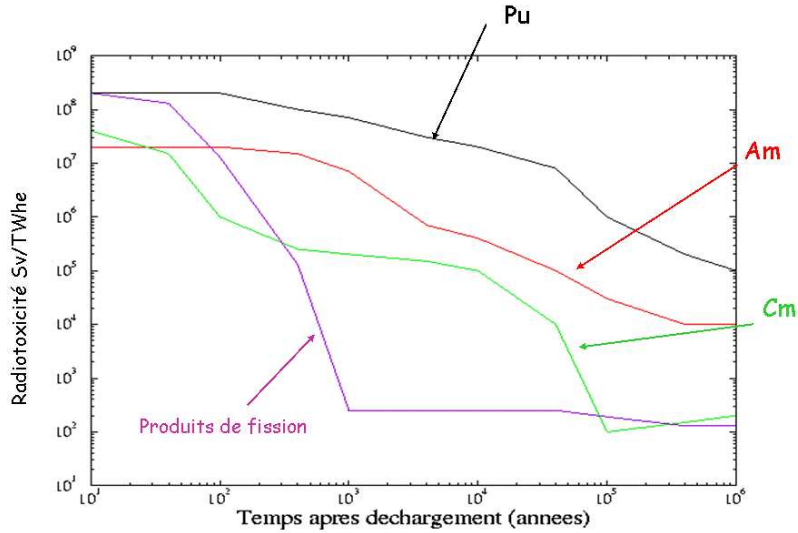


FIG. 1.5 – Comparaison des contributions des différents actinides à la radiotoxicité induite par la production d'un GWth.an d'un Réacteur à Eau sous Pression.

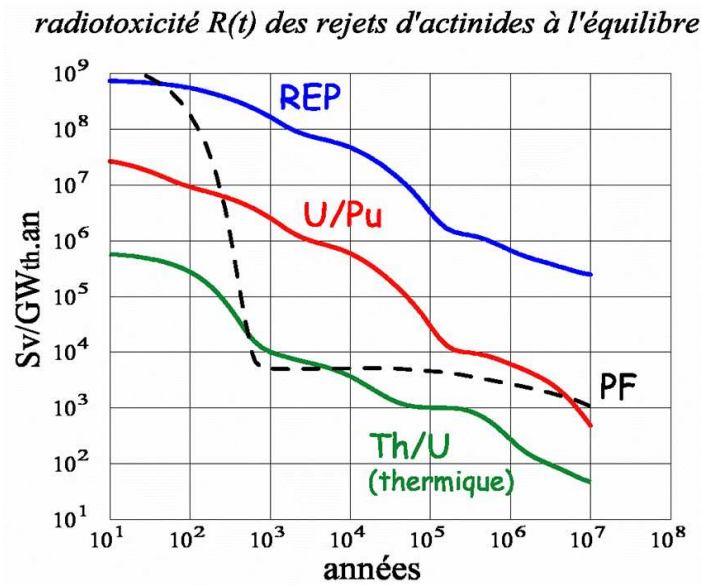


FIG. 1.6 – Comparaison des radiotoxicités induites par la production d'un GWth.an par différentes filières de réacteurs. On étudie les rejets d'actinides seulement lorsque la filière a atteint son équilibre, pas lors des premiers cycles de démarrage. La masse de produits de fission produite, et la radiotoxicité induite dépendent peu de la filière.

Chapitre 2

Données nucléaires

L'équilibre neutronique d'un réacteur nucléaire dépend de la compétition entre la production des neutrons par fissions et la disparition des neutrons par absorption, ou fuites à l'extérieur de la zone active. Les travaux préliminaires de développement de concepts innovants sont basés sur des simulations numériques de ces concepts.

Plusieurs sortes d'informations sont nécessaires à ces calculs :

- les sections efficaces c'est-à-dire les probabilités d'interaction neutron-noyau. La connaissance de la distribution en énergie des neutrons de fission ainsi que le nombre de neutrons produits par la fission de chaque noyau lourd est aussi fondamentale pour estimer le bilan neutronique. Ces données sont cruciales pour pouvoir calculer la probabilité qu'a un neutron issu d'une fission : de ralentir par chocs successifs dans le réacteur, d'être absorbé ou de produire à son tour une fission. L'essentiel de ce travail est de propager l'incertitude de la connaissance de ces données sur des paramètres intégraux clefs du réacteur.
- les données de production et d'interaction des rayonnements gamma mais aussi de dommages aux matériaux par irradiation pour certaines applications comme le calcul des doses reçues à l'extérieur du réacteur ou pour estimer la durée de vie sous irradiation des matériaux de structure.
- les données de décroissance des noyaux radioactifs permettent de simuler l'évolution des matériaux produits par réaction nucléaire dans le réacteur. Ces noyaux participent aussi au bilan neutronique. L'évolution de milliers de noyaux, qui peuvent capturer des neutrons ou disparaître par simple décroissance radioactive, permet de simuler le pilotage du réacteur pour le maintenir critique, et aussi de calculer les inventaires au déchargement du réacteur. La plupart de ces noyaux seront considérés comme des déchets à la sortie du réacteur. Leur quantité ainsi que leur activité (qui dépend de leur demi-vie) dimensionneront le site d'enfouissement, voire dicteront la poursuite de leur incinération dans une autre sorte de

réacteur, dédié par exemple.

Dans les Réacteurs à Eau sous Pression (REP) qui constituent l'essentiel du parc nucléaire actuel, les fissions sont essentiellement produites par des neutrons thermiques. Ces neutrons sont à l'équilibre thermodynamique avec les molécules de l'hydrogène de l'eau du caloporteur : la répartition de leur énergie cinétique correspond à celle de l'agitation thermique des noyaux du modérateur. Ainsi, ces neutrons thermiques ont une énergie de l'ordre de $0,05 \text{ eV}$ ¹ alors qu'ils sont apparus lors d'une fission avec une énergie moyenne de l'ordre du MeV. Sur un tel domaine d'énergie, la physique de l'interaction neutron-noyau est évidemment très complexe et diverse. Les phénomènes mis en jeu sont très nombreux. Connaître l'interaction nucléaire neutron-noyau pour les centaines de matériaux présents dans un réacteur sur au moins 8 ordres de grandeurs d'énergie² avec une précision de l'ordre du pourcent est un exploit en soi. Cet exploit est réalisé grâce à un savant mélange de mesures très précises et de modélisations du noyau qui permet d'extrapoler, et de contraindre les données expérimentales pour donner une image de la physique suffisamment réaliste pour les simulations neutroniques.

La complexité du travail aboutissant à la production de données nucléaires utilisables par les programmes de simulation des réacteurs est présentée dans ce chapitre.

2.1 Différentes zones en énergie

La figure 2.1 représente les sections efficaces de fission et de capture du ^{232}Th . La probabilité d'interaction d'un neutron avec ce noyau varie énormément avec l'énergie de ce neutron. Plusieurs domaines d'énergie distincts apparaissent, chacun régi par une physique bien spécifique demandant un traitement particulier.

2.1.1 Traitement des sections efficaces thermiques

Lorsque les neutrons sont ralentis jusqu'à des énergies correspondant aux énergies typiques des liaisons chimiques entre les noyaux cibles (comme la liaison H-O de l'eau ou la liaison C-C du graphite), celles-ci ne peuvent plus être négligées. Plusieurs phénomènes entrent en jeu et demandent un traitement particulier.

Le neutron peut entrer en résonance avec les atomes liés d'un matériau à structure périodique : c'est la diffusion cohérente élastique. De plus, lors de la diffusion, un mode propre de la liaison (vibration) peut être excité; la réaction n'est alors plus élastique.

¹ $0,05\text{eV}$ correspond à l'énergie thermique $E = 3/2kT$ à la température du modérateur soit environ 600K

²Les données disponibles pour la simulation de réacteur, sous forme de fichiers normalisés donnent ces informations sur plus de 12 ordres de grandeurs.

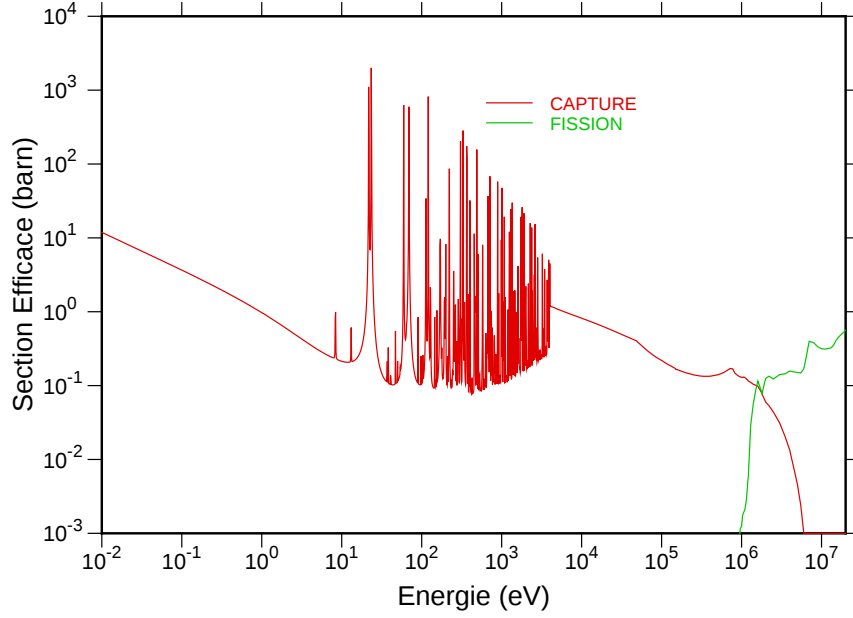


FIG. 2.1 – Sections efficaces évaluées de capture et de fission de l' ^{232}Th en fonction de l'énergie, entre 10^{-2} eV et 20 MeV

La section efficace dépend donc fortement à la fois de la structure cristallographique du matériau, mais aussi des caractéristiques de la liaison chimique données dans une matrice " $S(\alpha, \beta)$ " [9] et de la température du matériau.

La figure 2.2 compare les flux de neutrons thermiques diffusant dans une boule de graphite provenant d'une source de neutrons de haute énergie placée en son centre dans les cas où on prend en compte ou non la liaison chimique C-C dans le graphite lors du calcul des sections efficaces (avec le logiciel NJOY [10]).

Les effets sur le flux sont importants :

- la bosse thermique se déplace nettement vers les plus hautes énergies. Nous verrons que ce décalage est fondamental quant à la stabilité de réacteurs au thorium modérés au graphite.
- cette bosse possède une structure irrégulière due aux augmentations brutales de la section efficace aux énergies caractéristiques du réseau cristallin.

2.1.2 Haute énergie ($E > 1\text{MeV}$)

A haute énergie (au-delà du MeV), les sections efficaces apparaissent relativement lisses. A chaque fois que l'énergie du neutron incident dépasse l'énergie suffisante pour que le noyau composé puisse émettre une particule secondaire plus lourde. La fission du ^{232}Th ne devient

possible que pour des énergies de neutron supérieures à 1 MeV. Au delà de quelques MeV, on voit sur la figure 2.1 le début de la fission de seconde chance c'est-à-dire la réaction correspondant à l'émission d'un neutron avant la fission.

2.1.3 Résonances résolues

Lorsque l'énergie apportée au noyau cible par le neutron incident permet au noyau composé d'atteindre un niveau excité, la probabilité d'interaction augmente fortement. On appelle donc résonances les grandes variations de sections efficaces au voisinage d'énergies correspondant à une excitation particulière du noyau composé. Ces résonances sont très importantes pour la stabilité des réacteurs.

Les neutrons qui, après un choc, arriveraient à une énergie proche de celle de la résonance ont une grande probabilité d'interagir et donc de disparaître par absorption. Le flux $\phi(E)$ des neutrons présente donc des "trous" dans les résonances, et finalement la section efficace moyenne $\bar{\sigma} = \frac{\int \sigma(E)\phi(E)}{\int \phi(E)}$ dans la résonance n'est pas aussi élevée que la section efficace $\sigma(E)$. Ce phénomène appelé "auto-protection" dépend donc finement des caractéristiques du milieu ralentisseur, de la résonance³ et de la température.

En effet, lorsque la température change, la répartition en vitesse des noyaux cibles change. Or, la probabilité d'interaction d'un neutron possédant une énergie donnée -et donc une vitesse $\vec{v}$ - avec un ensemble de noyaux cibles à une température T -et qui ont donc une vitesse $\vec{v}'$ répartie selon une certaine distribution $d(\vec{v}', T)$ - doit être calculée par la convolution (2.1) puisque la vitesse relative du neutron par rapport au noyau lors du choc est $|\vec{v} - \vec{v}'|$.

$$\sigma(\vec{v}, T) = \int \sigma(|\vec{v} - \vec{v}'|) d(\vec{v}', T) d\vec{v}' \quad (2.1)$$

Lorsque la température s'élève, les neutrons "voient" donc les résonances s'élargir puisque la dispersion en vitesse des noyaux cibles augmente : c'est l'effet "Doppler". Et puisque la largeur de la résonance change, l'autoprotection et le taux de réaction effectif changent aussi. Ainsi le bilan neutronique évolue avec la température. Il est important de remarquer qu'il n'existe pas une seule section efficace pour un noyau et une réaction, mais bien un ensemble de paramètres permettant de décrire chaque résonance qu'il faut utiliser pour calculer la section efficace à une température donnée.

³en particulier de la largeur de la résonance relativement à la perte d'énergie moyenne par choc sur le modérateur

2.1.4 Résonances non-résolues

Au-delà de quelques keV, les sections efficaces apparaissent soudain régulières alors que le nombre de résonances par espace d'énergie est plus important lorsque l'énergie augmente dans la zone des résonances résolues. En réalité, il y a aussi des résonances dans cette zone, mais elles sont si nombreuses et leurs largeurs sont si importantes par rapport à leurs distances, que les résonances se recouvrent et qu'il est impossible de les séparer expérimentalement. Les données disponibles sont donc seulement les valeurs moyennes des paramètres de résonance. Elles permettent de reproduire aussi bien que possible les mesures faites à différentes températures. Les effets d'auto-protection existent aussi pour ces résonances; ils dépendent aussi de la température. Ces données sont très importantes pour la physique des réacteurs, en particulier pour les réacteurs à spectre rapide. La section efficace *effective*⁴ dépend là aussi de la température et des caractéristiques du ralentissement autour du noyau résonant. Il faudra utiliser dans cette gamme d'énergie, un traitement approprié lors de l'utilisation des données, pour chaque application, à chaque température.

Il est important de se souvenir que le terme "section efficace", cache des jeux de paramètres physiques et leur traitement associé.

2.2 Mesures des données

Nous avons vu que pour calculer le flux de neutrons dans un réacteur, les données d'interaction neutron-noyau pour plusieurs réactions sur plusieurs ordres de grandeurs en énergie sur plusieurs dizaines de noyaux étaient nécessaires. Pour mesurer ces données, plusieurs techniques sont disponibles. Nous détaillons ici sommairement les deux grandes familles de mesures.

2.2.1 Mesures de sections efficaces différentielles

On peut obtenir auprès d'accélérateurs de particules des sources pulsées de neutrons. En plaçant une cible à une certaine distance d'une telle source, on obtient toute une gamme de neutrons discernables par le temps de vol c'est-à-dire le temps qu'ils ont mis pour atteindre la cible. En détectant les particules émises lors de l'interaction neutron-noyau (produits de fission, gammas de désexcitation...) ou les neutrons ayant traversés la cible ("mesures en transmission") et en connaissant la distribution en énergie des neutrons et leur nombre, on peut remonter à la section efficace différentielle en énergie, c'est-à-dire au $\frac{\partial \sigma}{\partial E}$.

La résolution en énergie des méthodes ponctuelles est limitée par la durée de l'impulsion de la source, par la longueur de la base de temps de vol et par la connaissance des retards du système

⁴ $\bar{\sigma} = \frac{\int \sigma(E)\phi(E)}{\int \phi(E)}$

de détection qui introduit des biais. Plus la durée du vol est importante, plus la séparation de neutrons d'énergie différente est facile. L'installation n-TOF [11] du CERN est remarquable avec une longueur de vol de l'ordre de 200 m. Malheureusement, plus la cible est éloignée de la source, moins de neutrons l'atteignent à chaque impulsion. De plus, des taux de comptage élevés permettent d'obtenir rapidement de bonnes statistiques, il faut donc faire un compromis entre la précision et le temps d'accumulation des données puisque le coût du faisceau en est directement proportionnel.

La précision de la connaissance des sections efficaces est directement liée à la connaissance de l'intensité du flux. Cette intensité dépend du mode de production de neutrons, et doit donc être estimée à partir de comptages de réactions mieux connues. Sur l'installation n-TOF, les neutrons sont produits par spallation sur une cible de plomb avec des protons de haute énergie (20 GeV). La réaction de spallation est très complexe et dépend très fortement de la géométrie de la cible de spallation. Le flux ne peut être déduit précisément des simulations ; il est déduit de taux de fission ou de capture sur des isotopes standards comme les ^{235}U et ^{238}U ou encore ^{197}Au dont on connaît les sections efficaces avec une meilleure précision. Sur l'installation PEREN [12], les neutrons sont produits par fusion $D+T \rightarrow \alpha+n$. La détection des α de recul permet de remonter au flux de neutron. On dit alors que les mesures sont "absolues".

Une autre source d'incertitudes est liée à la connaissance de l'échantillon de la cible. Le taux de comptage dépend du nombre d'atomes, de la pureté chimique et isotopique de l'échantillon, de la répartition de ces atomes par rapport à la forme du faisceau.

Lorsque la cible est très radioactive, les problèmes de radioprotection rendent la manipulation et le transport des cibles difficiles. De plus, la détection des produits de la réaction peut être confondue avec celle des particules émises lors des décroissances des noyaux cibles. L'utilisation d'un flux de neutrons très intense, comme celui disponible sur l'installation n-TOF, est alors nécessaire pour séparer le bruit de fond des données utiles.

Lorsque la durée de vie des noyaux cibles est très courte, comme dans le cas du ^{233}Pa dont la durée de vie est de 27 jours, un problème de disponibilité vient s'ajouter aux problèmes de bruit de fond intense⁵ et de manipulation de sources radioactives. On peut utiliser une réaction "de transfert" [13] à partir d'un noyau voisin stable pour produire le noyau composé de la cible et d'un neutron et déduire de sa décroissance des informations sur la section efficace.

Toutes ces sources d'incertitudes, ainsi que les difficultés techniques liées à la manipulation d'échantillons radioactifs, limitent la précision accessible aux mesures ponctuelles à quelques pourcent.

⁵L'activité, et donc le bruit de fond, est inversement proportionnelle à la durée de vie...

2.2.2 Mesures intégrales

Il est aussi possible d'obtenir des données à partir de mesures faites sur des réacteurs nucléaires. Les neutrons du réacteur servent à irradier la cible. La mesure de la réaction en ligne (dans des chambres à fission [14] par exemple) ou des radioactivités α , β ou γ juste après l'irradiation permet de remonter aux taux de réaction [15]. *Ces taux de réaction correspondent à l'intégrale des sections efficaces* multipliées par le flux sur le spectre de neutrons du réacteur. On peut moduler ce spectre en choisissant le type de réacteur (rapide, thermique), l'épaisseur de modérateur entre le combustible et la cible ou en filtrant une partie du spectre grâce à un blindage bien choisi, au Cadmium, par exemple. La précision de ces données est essentiellement limitée par la connaissance du flux, la mesure des échantillons avant et après irradiation (permettant de déduire le taux de réaction) étant souvent très précise. En répétant ces mesures dans plusieurs configurations, on arrive à obtenir des précisions meilleures que le pourcent sur les sections efficaces moyennes.

Ces mesures sont complémentaires des précédentes pour deux raisons :

- pour remonter aux sections efficaces, il faut connaître le spectre de neutrons et donc utiliser des données ponctuelles pour le simuler.
- bien qu'elles ne permettent pas de mesurer une section efficace à une énergie, elles permettent de la mesurer avec une excellente précision, sur un spectre représentatif de l'application qu'auront les données.

Elles servent pour valider les données en comparant les résultats des simulations à ceux de l'expérience. Les données intégrales sont utilisées pour ajuster les sections efficaces et corriger les biais résiduels des données ponctuelles.

Les deux méthodes sont donc bien plus interdépendantes et complémentaires que concurrentes.

2.3 Evaluation des données

Le travail de l'évaluation est un travail de longue haleine. Les évaluateurs ont accès à des bases de données expérimentales [16] très complètes et à des modèles de noyaux valides dans un certain domaine d'énergie. Regardons comment ces outils sont assemblés pour obtenir, non pas une valeur en quelques points pour quelques réactions, mais un ensemble cohérent de données extrapolables à toute énergie pour quasiment n'importe quelle réaction sur n'importe quel isotope, même lorsque cet isotope ou ce canal de sortie ou cette énergie n'a pas été mesurée explicitement.

2.3.1 Domaine des résonances : le programme SAMMY

Dans la zone des résonances, le formalisme de la matrice R [17] permet de décrire l'évolution des sections efficaces avec l'énergie. Chaque résonance est décrite par un nombre limité de paramètres : énergie de la résonance, largeur totale, largeurs partielles de chaque réaction, spin. Le formalisme de Reich Moore [18] est une approximation de la matrice R qui permet de calculer effectivement les sections efficaces. En donnant un poids à chaque donnée expérimentale en fonction de son incertitude, le logiciel SAMMY[19] calcule la contribution de cette donnée à l'estimation des paramètres de résonances. On obtient alors la meilleure estimation possible au sens du maximum de vraisemblance des paramètres de résonance.

2.3.2 Hautes énergies ($E > 10$ keV)

Au-delà des résonances résolues, des modèles (Hauser-Feshbach [20], modèle optique) de physique du noyau permettent de calculer les sections efficaces. Ces modèles nucléaires ont besoin de quelques paramètres pour décrire la physique intrinsèque du noyau et de la réaction. Ces paramètres sont estimés par comparaison avec des données disponibles pour quelques réactions à quelques énergies. Ils peuvent aussi être estimés à partir d'extrapolation des paramètres de noyaux voisins. L'AIEA rassemble une base complète de référence de paramètres recommandés pour chaque noyau appelée RIPL [21]. A partir de ces paramètres estimés et des modèles (qui sont programmés dans le programme EMPIRE [22] ou dans TALYS [23]) il est possible de calculer toutes les sections efficaces pour un noyau pour toutes les réactions et pour toutes les énergies même celles n'ayant pas été mesurées.

2.3.3 Bibliothèques évaluées

2.3.3.1 Le format ENDF

L'ensemble des données évaluées sont rassemblées dans des bibliothèques et stockées dans des fichiers normalisés [24] pour faciliter leur utilisation et leur sauvegarde. Les informations stockées sont, finalement, rarement des sections efficaces mais plutôt des paramètres permettant leur calcul. Les données sont organisées dans ces fichiers en donnant pour chaque isotope (désigné par un "*MAT*" dans la dénomination ENDF), pour chaque type de donnée (section efficace, mais aussi distribution angulaire des neutrons en sortie de réaction, production de gammas, incertitudes... désignés par leurs "*MF*") les informations sur chaque réaction désignée par un "*MT*".

2.3.3.2 Le programme de traitement des données évaluées : NJOY

Le programme NJOY [10] permet de lire les fichiers évalués et de produire les données au format, à la température, et avec le bon traitement des données thermiques si nécessaire, voulus par l'utilisateur. Ce programme a une structure modulaire.

Les modules s'enchaînent pour faire les traitements nécessaires :

- à la reconstruction de sections efficaces : élargissement des résonances résolues (dans le module BROADR), traitement des résonances non résolues (UNRESR ou PURR), traitement des données thermiques (THERMR précédé de LAPR si nécessaire)...
- à la production de données autres que les données neutrons : production de γ (GAMINR), dépôt de puissance (HEATR), dégâts aux matériaux (calcul des déplacements par atome, production de gaz (GASPR).
- au formatage. Pour les calculs déterministes, le module GROUPE calcule des données moyennées qui peuvent à leur tour être traduites dans d'autres formats (MATXSR, WIMSR). Pour les calculs stochastiques avec le programme MCNP [25] le module ACER est utilisé pour fabriquer les sections efficaces ponctuelles au format attendu.

2.4 Evaluations des incertitudes

Les données expérimentales sont évidemment entachées d'incertitudes (dues à une statistique insuffisante, aux incertitudes sur la cible, ou le flux), et sont corrélées entre elles, à cause du principe même de la mesure pour les mesures intégrales par exemple. La propagation des incertitudes au travers des modèles de noyaux pour obtenir l'incertitude des données évaluées ⁶ peut demander un travail aussi lourd que le travail d'évaluation lui-même.

2.4.1 Format des incertitudes

Dans les fichiers évalués, de l'espace est prévu pour intégrer l'incertitude sur les sections efficaces. Ces incertitudes sont souvent données non pas pour les sections efficaces ponctuelles, mais pour des domaines d'énergies, elles correspondent donc plutôt à l'incertitude sur les sections efficaces moyennées sur une zone d'énergie. On range dans $MF=31$ l'incertitude sur le nombre de neutrons de fission, dans $MF=33$ l'incertitude sur les sections efficaces. Le $MF=32$ accueille l'incertitude sur les paramètres de résonances. Les $MF=34$ et 35 permettent le calcul de l'incertitude sur les répartitions angulaires et énergétiques des neutrons sortant des réactions.

A partir de ces données d'incertitudes évaluées, le module ERRORR de NJOY ou son évolution japonaise ERRORJ [26, 27] calcule l'incertitude sur les sections efficaces avec un découpage

⁶que nous voulons propager aux modèles de réacteur

en énergie demandé par l'utilisateur. Ces informations correspondent donc à l'incertitude sur la section efficace à une énergie donnée, avec toutes les corrélations entre cette donnée et les données à d'autres énergies ou pour d'autres réactions. On représente classiquement ces informations sur des figures comme la figure 2.3 de la page 31, avec l'incertitude représentée par l'écart type à un σ^7 en pourcent, donné en fonction de l'énergie du neutron incident et par la matrice de corrélation énergie-énergie.

Ces corrélations proviennent des méthodes expérimentales mais aussi de la physique des noyaux. Il existe souvent des corrélations entre les réactions voire entre les isotopes puisque dans la plupart des expériences, les résultats sont normalisées par rapport à une autre donnée. Ainsi, si on utilise une certaine réaction de référence "standard" pour connaître le flux disponible sur une installation, toutes les données basées sur des mesures de taux de réaction sur cette installation seront corrélées au standard.

D'autres corrélations proviennent de la méthode de mesure, comme dans le cas des données thermiques. A basse énergie, la variation des sections efficaces avec l'énergie est simple : la section efficace augmente de façon inversement proportionnelle à la racine carrée de l'énergie du neutron incident⁸. Un seul paramètre permet de décrire toute la section efficace sur plusieurs ordres de grandeur. Donc, si on change la section efficace dans une partie de ce spectre, on changera toute la partie thermique. Cette corrélation très forte est visible sur la figure 2.3 sur laquelle on voit la grande zone de corrélation maximum entre 10^{-3} eV et 100 eV. De même, les données obtenues sur une même installation ou avec la même instrumentation seront corrélées puisqu'elles partageront certains biais.

Dans la zone des résonances, on s'attend aussi à observer des corrélations entre les réactions d'un même isotope. En effet, les résonances sont décrites par un jeu de paramètres en grande partie commun à l'ensemble des canaux de sortie⁹. Ceci traduit le fait que toutes les réactions proviennent de l'excitation du noyau composé, du noyau cible+neutron, caractérisé par une certaine énergie, un spin particulier. Les différentes voies de réaction se distinguent par leur probabilité relative d'occurrence. Vraisemblablement, la mesure d'un des canaux de sortie modifiera la largeur relative d'un autre ou la largeur totale selon que l'on connaisse ou non la largeur totale grâce à une mesure de la section efficace totale par transmission par exemple.

⁷sachant que l'on espère que les distributions sont des gaussiennes, 63% des cas tombent dans l'espace autour de la valeur moyenne $\pm 1\sigma$

⁸c'est le fameux "1/v"

⁹L'énergie de la résonance, sa largeur totale, son spin et sa parité sont des données communes, pas les largeurs partielles

2.4.2 Haute énergie

Le programme TALYS [23] permet de propager l'incertitude des paramètres du modèle nucléaire (modèle optique, par exemple) aux sections efficaces construites sur les sorties du modèle. L'utilisateur fournit au programme l'incertitude (l'écart type) sur chaque paramètre du modèle, puis le programme tire au hasard un jeu de paramètres dont la distribution correspond à leur incertitude. On obtient pour chaque paramètre un jeu de sections efficaces dont la dispersion permet de construire les incertitudes et les corrélations. L'évaluateur ne doit donc plus estimer l'incertitude sur la section efficace mais sur les paramètres qui permettent de la décrire. Le choix de l'incertitude sur les paramètres du modèle est alors primordial. L'évaluateur fait ce choix de façon assez arbitraire suivant son expérience et sa compréhension des modèles de noyaux et des méthodes d'obtention des paramètres nucléaires. Il n'est pas encore possible d'introduire de corrélation entre les paramètres du modèle, ce qui implique une légère sous-estimation des erreurs. Cette méthodologie est une vraie avancée dans le domaine des incertitudes puisqu'il permet de construire une matrice de covariance complète pour un noyau (même pour des voies de sorties ou des énergies qui n'auraient pas été mesurées !) à partir d'incertitudes non pas sur ce que l'on observe à la surface de la physique -les sections efficaces- mais sur le cœur de la physique : les paramètres des modèles nucléaires.

2.4.3 Résonances

Historiquement les résonances étaient décrites par le modèle analytique de Breit-Wigner [28]. Il était donc possible de calculer les sensibilités du modèle aux paramètres en décrivant simplement les équations. Lorsque de telles équations n'existent pas, comme dans l'approximation de Reich Moore [18] utilisée systématiquement depuis une dizaine d'années, le travail est beaucoup plus difficile. Ainsi, même si le format a été changé pour permettre le stockage des paramètres de Reich Moore et leurs incertitude et que les évaluateurs auraient fait l'effort de produire les incertitudes, les utilisateurs n'auraient pas eu d'outils permettant de calculer les incertitudes sur les sections efficaces dans leur découpage énergétique parce que le module ERORR de NJOY ne pouvait pas les traiter. Les évaluateurs japonais T. Kawano et K. Shibata [26, 27] proposent de le faire en recalculant la section efficace après perturbation du paramètre de un pourcent. Cette solution relativement satisfaisante théoriquement, bien que lourde en temps de calcul, n'obtient pas encore toujours des résultats très réalistes comme nous le verrons par la suite.

2.4.4 Données disponibles

La disponibilité de données d'incertitude est relativement limitée dans les bibliothèques évaluées distribuées aujourd'hui. La distribution de ENDF-B V représente l'âge d'or des matrices de covariance. La plupart des bibliothèques proposent encore des matrices de covariance provenant de ENDF-B V pour certains isotopes. C'est le cas des bibliothèques JEFF2.2, ENDFB-6 et IRDF90 [29] qui contiennent l'ancienne matrice de covariance du ^{232}Th visible sur la figure 2.4. Dans ce cas particulier la matrice de covariance est particulièrement pauvre, puisque l'incertitude est rassemblée en seulement 4 zones différentes entièrement auto-corrélées.

En plus des données provenant d'anciennes évaluations, des matrices plus récentes provenant des bases IRDF [29] et JENDL [26, 27] viennent donner un ensemble relativement complet [30]. Ces matrices ne sont pas complètes, mais elles ont le mérite d'exister et de donner l'ordre de grandeur des incertitudes.

Devant les limites des matrices d'incertitudes disponibles dans les évaluations, Palmiotti et Salvatores d'Argonne National Laboratory [31], proposent un jeu de données basé sur leur propre expérience de la comparaison de simulations utilisant des bibliothèques différentes et sur les informations fournies par les évaluateurs sur les expériences utilisées lors de l'évaluation. Les auteurs, en donnant une enveloppe des incertitudes, espèrent provoquer une réaction des évaluateurs en les forçant à démontrer, grâce à une vraie évaluation des incertitudes, que leurs données sont dignes de plus de confiance que ce qui est proposé.

Nous disposons donc finalement d'un panorama relativement complet d'incertitudes pour la plupart des noyaux qui nous intéressent. Ce panorama contient cependant souvent des informations obsolètes, voire parfois très sous ou surestimées. Dans les paragraphes suivants, nous décrivons les incertitudes utilisées dans cette thèse ainsi que la confiance que nous leur accordons.

Enfin, il est important de souligner qu'il semble que les évaluateurs soient de nouveau à la fois prêts et motivés pour fournir de nouvelles matrices de covariance. Récemment, des procédures d'ajustement des résonances résolues, compatibles avec le formalisme de Reich-Moore [32], ont été mises au point dans SAMMY. De plus, des méthodologies de propagation des incertitudes des paramètres nucléaires nécessaires au calcul des sections efficaces à haute énergie sur ces sections efficaces [23] sont apparues. Les évaluateurs ont donc les outils pour produire des matrices de covariance réalistes et représentatives des incertitudes sur les dernières évaluations.

2.4.4.1 International Reactor Dosimetry File : IRDF

Le Nuclear Data Service de l'AIEA distribue un jeu de fichiers pour les calculs de dosimétrie dans les réacteurs : IRDF90[29]. Ces données sont utilisées pour pondérer le flux -calculé par un logiciel de transport- avec une section efficace d'une réaction de référence, de manière à reproduire

le taux de réaction mesuré sur les réacteurs. La base contient aussi les données nécessaires pour calculer les *dpa*, c'est-à-dire les déplacements par atome, soit les dégâts aux matériaux, et les données de dépôt de chaleur dans les matériaux par les rayonnements, ce qui est utile pour simuler le couplage neutronique-thermohydraulique. Les données contenues dans cette base sont donc limitées à quelques réactions de référence utilisées classiquement pour monitorer les flux de neutrons. Bien souvent ces réactions sont aussi celles qui nous intéressent pour la physique des réacteurs. C'est le cas pour la fission de l' ^{235}U et la capture de l' ^{238}U par exemple. Ces données sont souvent fournies avec des incertitudes cohérentes et réalistes, ce qui fait de cette base une source particulièrement intéressante pour notre application : le calcul des incertitudes de réacteurs innovants.

2.4.4.2 Données disponibles dans les évaluations japonaises JENDL3.2 et JENDL3.3

Les outils développés autour de la bibliothèque évaluée japonaise JENDL pour la propagation des incertitudes des paramètres de résonances sur les sections efficaces multigroupes sont porteurs d'un potentiel particulièrement intéressant. Le calcul direct de la sensibilité de la section efficace aux données de résonance par la différence entre deux sections efficaces calculées avec deux paramètres différents de 1%, permet de construire systématiquement les matrices de covariance et les corrélations entre réactions, comme on peut le voir sur les figures 2.5 et 2.6, page 32.

Avec les données disponibles, ERRORJ a tendance à surestimer sérieusement les incertitudes dans les groupes présentant de grandes résonances pour les cas du ^{239}Pu et celui de l' ^{238}U . Ceci vient du fait que s'il y a une trop grande incertitude sur les paramètres de résonances, comme les sections efficaces moyennes sont dominées par l'effet des résonances, la surestimation de l'incertitude sur la résonance va augmenter celle sur les sections efficaces moyennes. Ainsi, il est "connu" que JENDL 3.2 comme JENDL3.3 surestiment d'environ un facteur 10 les incertitudes proposées par Mughabghab [33, 34] ou par rapport à IRDF90 [29] pour la section efficace moyenne de capture de l' ^{238}U ¹⁰ et la section efficace moyenne de fission du ^{239}Pu ¹¹.

Dans un réacteur, l'impact des résonances est atténué par leur autoprotection¹². La version 2.2 de ERRORJ permet de prendre en compte cette autoprotection par le biais de l'introduction du σ_0 décrit au paragraphe 3.2.2.1. Comme les sections efficaces, les incertitudes sur les sections efficaces moyennes sont diminuées par l'autoprotection. Le tableau 2.1 montre que les incertitudes sont divisées par plus de 10 dans certains groupes, atteignant à peine 1% dans le groupe où elles devraient être maximales et encore moins ailleurs. De surestimée, l'incertitude devient nettement

¹⁰avec près de 19% au lieu de 1%

¹¹avec environ 8% au lieu de 1,1%

¹²voir le chapitre suivant pour plus de renseignements sur le phénomène de l'autoprotection et le paragraphe 3.2.2.1 pour en savoir plus sur son traitement

sous-estimée, disparaissant quasiment dans la plupart des groupes. Ceci pourrait être le résultat d'une sous estimation de l'incertitude sur la section efficace potentielle. Les dernières versions de JENDL peuvent a priori contenir ce genre d'information. Il est possible que les évaluateurs n'aient pas étudié ce point à l'époque où ERRORJ n'était pas capable de traiter ces informations. Ainsi, dans le calcul de l'incertitude sur la section efficace moyenne dans un groupe, le rôle des incertitudes sur les résonances est peut être surévalué aujourd'hui, par rapport à celui de l'incertitude sur la section efficace entre les résonances.

groupe	Energie Min(eV)	Energie Max (eV)	variance $\sigma_0 = \infty$	écart-type $\sigma_0 = \infty$ (%)	variance $\sigma_0 = 10$	écart-type $\sigma_0 = 10$ (%)
7	3,06E+00	1,07E+01	9,49e-3	9,7	4,17e-5	0,65
8	1,07E+01	2,90E+01	3,6e-2	19	9,0e-5	0,95
9	2,90E+01	1,01E+02	1,26e-3	3,6	3,0e-6	0,18

TAB. 2.1 – Effet de l'autoprotection sur le calcul des incertitudes de la section efficace de capture du ^{238}U dans les groupes correspondant aux plus grandes résonances avec les données de JENDL3.2

De plus, il faudrait ajouter l'incertitude sur le choix du paramètre d'autoprotection σ_0 qui dépend non seulement de la section efficace résonante étudiée mais aussi des noyaux entourant le noyau étudié et participant au ralentissement. On s'attendrait donc à voir encore augmenter les corrélations entre réactions et entre noyaux. Ces termes supplémentaires pourraient être calculés avec un schéma de calcul prenant en compte les termes implicites¹³ comme cela est décrit au paragraphe 5.2 ou dans la référence [35].

Une autre chose "étrange" des données d'incertitude de JENDL vient du fait que, dans le découpage utilisé pour donner les incertitudes, le premier groupe s'arrête à 100 eV comme on peut le voir sur les figures 2.5 et 2.6. Evidemment, pour toutes les sections efficaces contenant des résonances à des énergies inférieures et en particulier des résonances larges comme le ^{239}Pu à 0,3 eV et le ^{238}U à 6,6 eV, il n'est pas étonnant d'obtenir des incertitudes irréalistes. De plus, ce découpage a tendance à minimiser les incertitudes dans la zone thermique. Les incertitudes systématiquement inférieures à 1 % observées sur les figures 2.5 et 2.6 associées aux données de JENDL sont peu vraisemblables. C'est pourquoi, pour le nombre moyen de neutrons par fission (la valeur $\bar{\nu}$) pour les neutrons thermiques de l' ^{233}U , nous recommandons une valeur de 1% plus

¹³c'est-à-dire non seulement les termes de sensibilités liés aux sections efficaces utilisées lors du calcul transport mais aussi les termes provenant de l'autoprotection de ces sections efficaces

proche de celle proposée par Palmiotti [31] de 2% que de celle proposée par JENDL voisine de 0,2%.

Pour la mise en groupe des incertitudes de l' ^{233}U sur le découpage à 172 groupes utilisé au chapitre 5, ERRORJ affichait un message d'erreur lié à une allocation insuffisante de mémoire. La matrice a été redécoupée par Kodeli de l'OCDE/NEA grâce au logiciel ANGELO[36].

En conclusion, il semble que grâce à ERRORJ, les évaluateurs de JENDL possèdent un outil de choix pour produire systématiquement des matrices de covariance basées sur la vraie physique du noyau, c'est-à-dire sur les incertitudes des paramètres de résonances. Malheureusement, aujourd'hui les données évaluées ne sont pas encore au niveau des outils disponibles, ce qui limite la confiance dans ces données. En particulier, nous avons vu que ce programme permettait d'obtenir l'incertitude sur les sections efficaces autoprotégées. Les données actuelles ne permettant pas une prise en compte réaliste de ces résultats, nous préférons utiliser les incertitudes sur les sections efficaces non autoprotégées.

2.4.4.3 Autres incertitudes

Pour certains noyaux importants du cycle du thorium, les données d'incertitudes ne sont pas disponibles. C'est le cas pour le ^{233}Pa , l' ^{234}U et pour le ^{237}Np . Pour ces noyaux fertiles, la réaction de capture est largement prépondérante, surtout dans les réacteurs à spectre épithermique étudiés. Pour ces noyaux, nous proposons d'utiliser une valeur "forfaitaire" de 10% pour l'incertitude et de négliger les corrélations. Cette valeur est probablement assez représentative de l'incertitude réelle. Elle correspond à l'ordre de grandeur de ce que Palmiotti et Salvatores [31] proposent pour des noyaux proches comme l' ^{233}U . Elle correspond à la valeur pour le ^{232}Th toujours disponible aujourd'hui dans les bases. L'évaluation de l'incertitude sur ce noyau clef du cycle du thorium est probablement bien plus ancienne que les évaluations les plus récentes. Malgré son caractère très arbitraire, cette valeur nous servira de base pour les calculs d'incertitude.

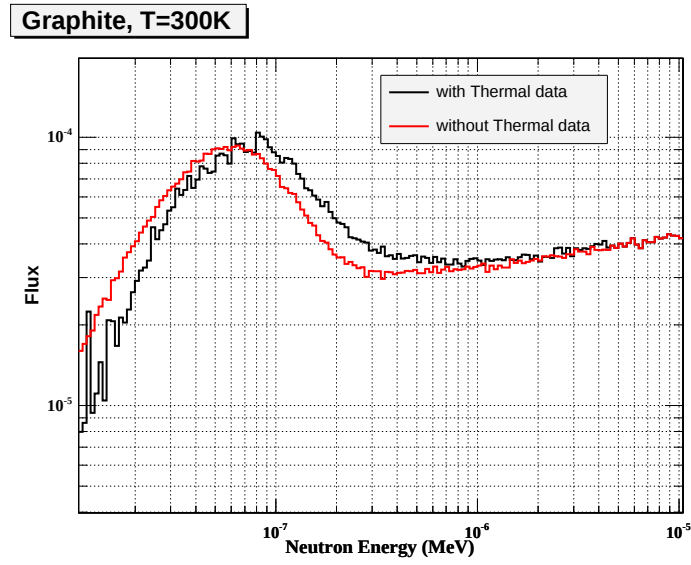


FIG. 2.2 – Comparaison des flux de neutrons dans une sphère de graphite avec et sans traitement des données thermiques

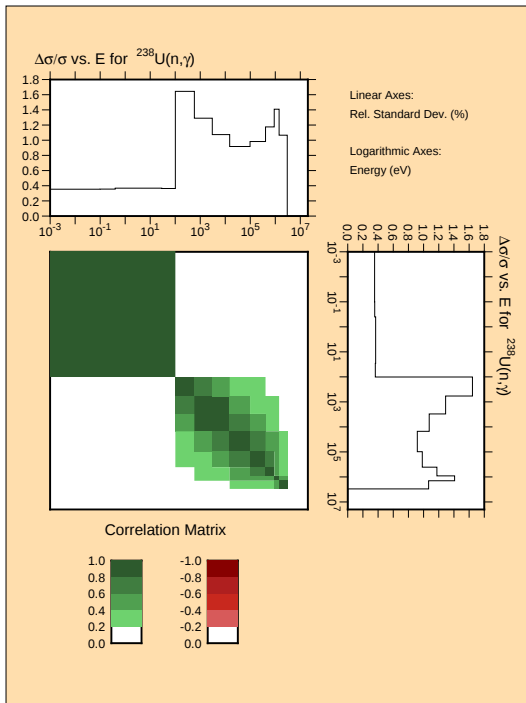


FIG. 2.3 – Incertitudes et matrice de corrélation associée de la section efficace de capture de l' ^{238}U

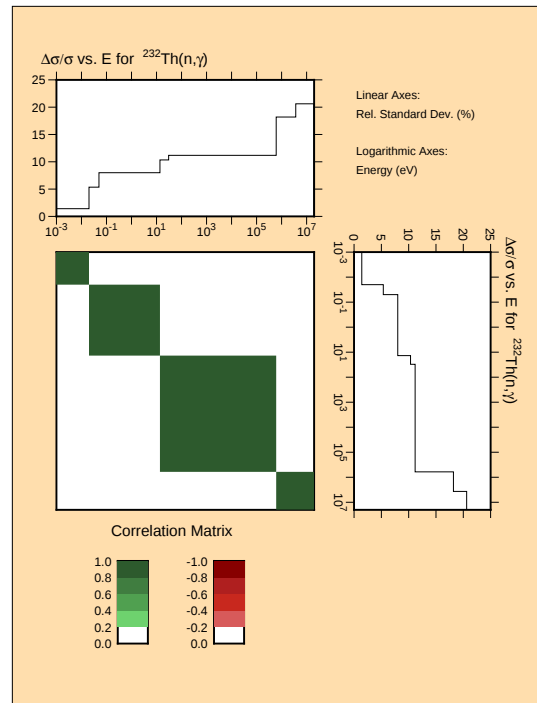


FIG. 2.4 – Incertitudes et matrice de corrélation associée de la section efficace de capture de l' ^{232}Th

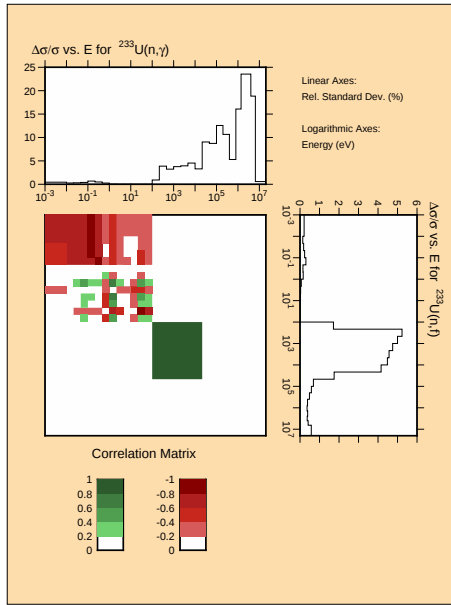


FIG. 2.5 – Incertitude et corrélations des sections efficaces de fission et de capture de l' ^{233}U disponible dans JENDL3.3

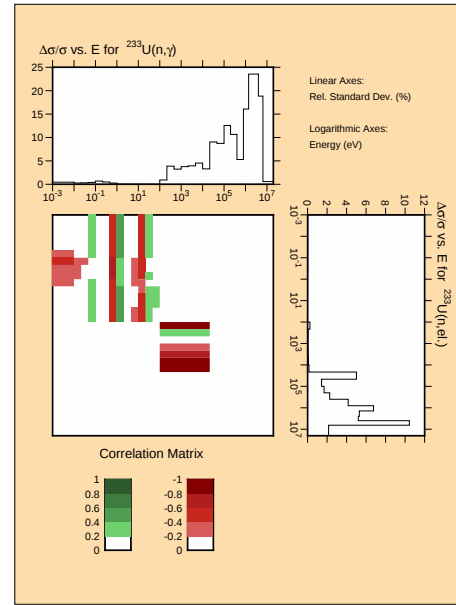


FIG. 2.6 – Incertitude et corrélations des sections efficaces de diffusion élastique et de capture de l' ^{233}U disponible dans JENDL3.3

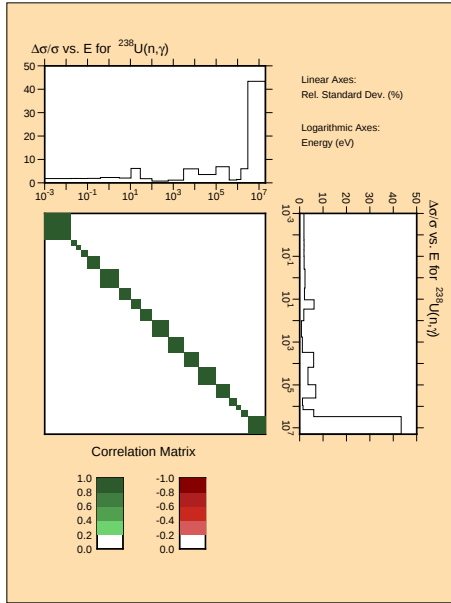


FIG. 2.7 – Matrice de covariance et incertitude sur la section efficace de capture de l' ^{238}U disponibles dans JENDL3.3. On remarque la grande incertitude, autour de 10%, dans le groupe contenant la résonance à 20eV

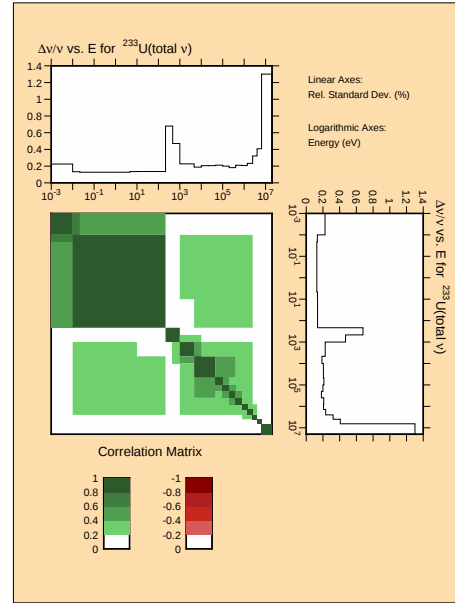


FIG. 2.8 – Matrice de covariance et incertitude sur le nombre de neutrons de fission de l' ^{233}U disponibles dans JENDL3-3

Chapitre 3

Théorie des Perturbations et analyses de sensibilité

La connaissance de la distribution spatiale, énergétique et angulaire des neutrons dans un réacteur nucléaire est à la base de la conception et de l'exploitation du réacteur. De la distribution des neutrons dépend celle des fissions et donc de celle de l'énergie produite. Il faudra bien évacuer cette énergie pour produire de l'électricité et pour éviter tout dégât irréversible du coeur en condition accidentelle. De l'évolution cinétique de cette population dépend donc tout le dimensionnement du réacteur. L'évolution de cette population est régie par l'équation de conservation de Boltzmann [37, 38]. Cette équation fait apparaître directement les caractéristiques de l'interaction neutron-noyau : sections efficaces, nombre de neutrons par fission et spectre des neutrons de fission.

Après un bref aperçu sur la résolution numérique de cette équation, nous montrons comment la Théorie des Perturbations permet d'obtenir de manière élégante les sensibilités de paramètres intégraux (criticité, coefficients de réactivité, taux de réaction) à ces données nucléaires de base.

3.1 Equation du transport

3.1.1 Formulation générale

La conservation, à l'instant t , des neutrons¹ situés dans un élément de volume infinitésimal autour du point $\vec{r}$ évoluant à la vitesse v (et avec une énergie cinétique E) dans la direction $\vec{\Omega}^2$ est décrite par l'équation de conservation du flux suivante :

¹La densité des neutrons $n(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t)$ est simplement liée au flux ϕ par la relation $\frac{1}{v}\phi(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t) = n(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t)$

² $\vec{\Omega}$ est un vecteur unitaire

$$\begin{aligned}
\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \phi(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t) &= - \underbrace{\text{div}(\vec{\Omega} \bullet \phi(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t))}_{\text{Transport}} \\
&\quad - \underbrace{\Sigma_t(\vec{r}, v, \vec{\Omega}) \phi(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t)}_{\text{Disparition}} \\
&\quad + \underbrace{\int_{4\pi} \int_0^\infty \left[\Sigma_s((\vec{r}, v', \vec{\Omega}') \rightarrow (\vec{r}, v, \vec{\Omega})) \phi(\vec{r}, v', \vec{\Omega}, t) \right] dv' d\vec{\Omega}'}_{\text{Source de diffusion}} \\
&\quad + \underbrace{S(\vec{r}, v, \vec{\Omega}), t}_{\text{Autres sources}} \\
&= -B\phi + S
\end{aligned} \tag{3.1}$$

Dans cette équation, la dépendance en temps de toutes les variables (flux, sections efficaces) est implicite puisque les concentrations des différents isotopes -et donc les sections efficaces effectives- vont changer avec lui. Chacun des termes de cette équation est détaillé dans un des paragraphes suivants. Désormais, on notera B l'opérateur contenant les termes de Transports, de Diffusion et de Disparition appelé opérateur de Boltzmann puisqu'il est le terme commun à toutes les formes de l'équation de Boltzmann résolues effectivement. On notera F l'opérateur de fission.

3.1.1.1 Transport

Dans l'équation 3.1, ce terme correspond au bilan des mouvements des neutrons à l'interface de chaque volume élémentaire. Bien sûr, ce terme d'échange dépend des conditions aux limites imposées sur les surfaces frontières de la géométrie considérée.

Ces conditions sont essentiellement de deux types :

- des conditions de vide, c'est-à-dire que l'environnement à l'extérieur de cette zone est vide ou infiniment absorbant et que donc il ne peut pas y avoir de neutrons retournant dans la zone. Soit mathématiquement, pour un point de la surface : $\phi(\vec{r}, v, \vec{\Omega}) = 0$ pour $\vec{\Omega} \bullet d\vec{S} < 0$ où $d\vec{S}$ est le vecteur surface unitaire orienté vers l'extérieur du volume considéré.
- des conditions de réflexion, c'est-à-dire que l'on considère que la surface est parfaitement réfléchissante pour les neutrons. Soit mathématiquement, : $\phi(\vec{r}, v, \vec{\Omega}) = \phi(\vec{r}, v, \vec{\Omega}')$ avec $\vec{\Omega} \bullet d\vec{S} = -\vec{\Omega}' \bullet d\vec{S}$, sachant que $\vec{\Omega}'$ est dans le plan de $\vec{\Omega}$ et $d\vec{S}$. Ce type de frontière est très utile pour simuler une géométrie possédant des symétries ou une structure en réseau infini.

Si on intègre sur tout le volume, après une transformation de Green-Ostrograsky (transformation de l'intégrale sur le volume en intégrale sur la surface) et après application des conditions aux

limites à la partie de réacteur considérée, ce terme correspondra au total des fuites de neutrons vers l'extérieur de cette zone.

3.1.1.2 Disparitions

Ce terme correspond simplement à la somme des disparitions de neutrons dues à des réactions dans cette zone à cette énergie, diffusions comprises même si ces réactions ne sont pas des pertes nettes de neutrons. C'est donc bien la section efficace totale Σ_t qui apparaît.

3.1.1.3 Source de diffusion

Ce terme correspond aux neutrons arrivant à cette vitesse dans cette direction après diffusion. La plupart du temps, ces neutrons avaient précédemment une énergie supérieure, sauf dans le cas où les neutrons se thermalisent avec le modérateur, c'est-à-dire que leur répartition en énergie s'équilibre avec celle du milieu ralentisseur. Il faut alors tenir compte des remontées de neutrons (*up-scattering* en anglais), c'est-à-dire des neutrons qui gagnent de l'énergie suite à un choc sur un noyau du modérateur. On inclut souvent les neutrons produits par réaction (n,xn) dans cette source. Dans ce cas, la section efficace de la réaction (n,xn) apparaît ici simplement multipliée par x.

3.1.1.4 Autres sources

Ce terme contient toutes les autres sources de neutrons produits par fissions (spontanées ou induites), par réactions (α ,n), par sources externes (sources de spallation par exemple) ou par n'importe quel processus générant des neutrons.

Le terme de fission induite par neutrons ajoute un lien entre les différentes énergies puisque les neutrons de fission apparaissent à une énergie différente de celle du neutron provoquant la fission. Une partie des neutrons de fission n'apparaît pas instantanément à l'échelle de temps de la réaction de fission, soit 10^{-14} seconde. Ce sont des neutrons "retardés", puisqu'ils sont produits lors de la désexcitation de produits de fission ; soit, en moyenne, sur des échelles de temps de l'ordre de la seconde, liées aux décroissances des noyaux précurseurs. Leur rôle dans le pilotage d'un réacteur est primordial, puisque la cinétique entre deux générations de neutrons est liée à ces décroissances. Classiquement, les émetteurs de neutrons retardés sont rassemblés plus ou moins arbitrairement dans 6 groupes k auxquels on assigne une proportion des neutrons retardés β_k émis avec un spectre $\chi_{r,k}$, et une constante de désintégration (une demi-vie) λ_k . ν_p neutrons prompts sont produits à chaque fission prompte, avec un spectre χ_p . Le nombre et la distribution des neutrons prompts dépendent de la vitesse du neutron incident. Aujourd'hui, la tendance est de les rassembler en 8 groupes. Idéalement, il devrait y avoir autant de groupes que

de noyaux précurseurs. Il faudrait alors connaître les durées de vie de tous les précurseurs, la probabilité d'apparition suite à une fission, leurs probabilités d'émettre des neutrons ainsi que la répartition spectrale de ces neutrons. L'intérêt de l'apport d'une telle masse d'informations paraît bien petit par rapport à la difficulté des mesures à conduire et du surcoût induit en temps de calcul.

Le terme source de fissions induites par neutron s'écrit donc³ :

$$S_{fission}(\vec{r}, v, \vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} \left[(1 - \sum_k \beta_k) \chi_p \int_0^\infty \nu_p \Sigma_{fiss}(v') \phi(v') dv' + \sum_k \lambda_k C_k \chi_{r,k} \right] \quad (3.2)$$

La concentration C_k des précurseurs du groupe k est régie par l'équation :

$$\frac{\partial C_k}{\partial t} = \beta_k \int_0^\infty \Sigma_{fiss}(v') \phi(v') dv' - \lambda_k C_k \quad (3.3)$$

3.1.2 Problèmes pratiques indépendants du temps

Les équations précédentes montrent une dépendance très forte et très non linéaire en temps⁴, autant l'expérience prouve que les réacteurs nucléaires fonctionnent de manière fiable et très calme. Ceci est dû à un bon dimensionnement permettant à des contre-réactions de maintenir le réacteur dans un domaine de fonctionnement stable et sûr. Nous détaillons ici les équations effectivement résolues par les programmes de transport de neutrons en régime stationnaire, lorsque les non-linéarités peuvent être négligées.

3.1.2.1 Problèmes à source

Un cas simplifié, mais fondamental, des calculs de neutronique est le calcul des problèmes indépendants du temps soumis à une source constante. Tous ces problèmes se réduisent à la résolution de l'équation suivante :

$$div(\vec{\Omega} \bullet \phi(\vec{r}, v, \vec{\Omega})) + \Sigma_t(\vec{r}, v, \vec{\Omega}) \phi(\vec{r}, v, \vec{\Omega}) = T\phi + \Sigma_t\phi = S(\vec{r}, v, \vec{\Omega}) \quad (3.4)$$

où le terme de source contient selon les besoins, la source de diffusion, de fission, les sources intrinsèques ou une source externe.

L'inversion de l'opérateur de transport T , tel que $T = div(\vec{\Omega} \bullet \phi(\vec{r}, v, \vec{\Omega}))$, étant nécessaire à la résolution de n'importe quel problème, il est clair que ce genre de calcul est la base de la partie numérique de la neutronique.

³Désormais, les intégrations évidentes sur les angles et les indices de position, d'angle, de vitesse, de temps ne seront plus marqués par souci de clarté.

⁴L'équation de Boltzmann est linéaire avec le flux. Mais les opérateurs sont des fonctions non linéaires du flux. Les sections efficaces macroscopiques dépendent du nombre de noyaux et de la distribution de température, et d'autres variables dépendantes du temps et du flux

Ces calculs correspondent à une multitude de problèmes :

- le calcul du flux de neutrons à l’extérieur de la zone active du réacteur nucléaire. La durée de vie des réacteurs d’aujourd’hui est limitée par la fluence rapide (l’intégrale sur le temps du flux de neutrons d’énergie $>100\text{keV}$) reçue par la cuve. La cuve contient l’eau sous pression et le cœur. Elle est soumise à des conditions sévères tant en terme de température et de pression que d’irradiation. Les neutrons rapides provoquent des dégâts (mesurés en dpa : déplacements par atome) dans la structure du métal qui finissent par changer ses caractéristiques mécaniques. Les dimensions de la cuve sont telles qu’il est impossible de la changer. Ainsi, lorsque la fluence maximum réglementaire est atteinte, l’installation doit être fermée. L’appréciation du flux sur la cuve est donc fondamentale pour l’exploitant. Une erreur de 2% sur la fluence de la soixantaine de réacteurs français correspond à la durée de vie d’un réacteur soit quelques milliards d’euros. La source est alors celle de fission, donnée par un calcul de criticité (cf. paragraphe 3.1.2.2). Ce problème est difficile puisqu’il faut calculer le flux à un endroit où il est extrêmement faible puisqu’on essaie de le minimiser !
- les calculs de réacteurs hybrides pilotés par accélérateur. La source de neutrons est donnée par des calculs de spallation et de transport à haute énergie. La source de fission dépend du flux, ces calculs sont résolus itérativement. Un calcul de transport de la source de spallation donne un nouveau flux qui donne une nouvelle source de neutrons de spallation et de fission et ainsi de suite. Comme le réacteur est sous-critique par construction, chaque neutron de fission produit à la génération suivante légèrement moins d’un neutron, les itérations convergent.
- les calculs de protections neutroniques et de blindages en général. Il faut résoudre l’équation 3.4 pour calculer le flux de neutrons à l’extérieur d’un château de transport, par exemple. La source à propager est alors la source de fission spontanée du combustible.

3.1.2.2 Calculs de criticité

Supposons que le réacteur fonctionne à une certaine puissance et donc à des températures imposées (que l’on peut simuler par un couplage de la neutronique avec la thermohydraulique) et que l’on connaît donc les sections efficaces que l’on considère constantes. On résout alors l’équation 3.5 aux valeurs propres, indépendante du temps, sans source à part celle de fission.

$$-Transport - Disparition + Diffusion + \lambda * Fission = 0 \quad (3.5)$$

Les valeurs propres λ recherchées pour équilibrer l’équation, qui ne dépend plus du temps, sont placées devant le terme source de fission. En régime stationnaire, peu importe que les neutrons

soient retardés ou non. La source de neutrons se simplifie puisque une fission donne un nombre de neutrons égal à la somme du nombre de neutrons prompts et du nombre de neutrons retardés.

On remarque que si ϕ est solution (*i.e.* vecteur propre en langage mathématique), alors ϕ multipliée par un réel a est encore solution de cette équation. En fait la puissance du réacteur étant prise comme hypothèse, la somme sur tout le réacteur des fissions (qui produisent cette puissance) et donc la normalisation du flux (qui intervient dans le terme de fission) sont imposées

Après intégration de l'équation sur le volume, les vitesses, les angles (soit une intégration sur "l'espace des phases") :

- le terme de Transport se restreint aux fuites.
- si un neutron diffuse, il est décompté dans le terme de disparition pour son énergie et sa direction mais il réapparaît à une autre énergie, dans une autre direction et alors le bilan après intégration avec le terme source de diffusion est neutre. Pour toute autre réaction il disparaît simplement. Ainsi le bilan des Disparitions et des Diffusions correspond aux neutrons disparus par capture dans le domaine.

On arrive alors la signification physique de l'inverse de la valeur propre : le k_{eff} qui n'est que le rapport entre la production de neutrons par fission et l'absorption ou les fuites de ces neutrons à l'extérieur du réacteur :

$$k_{eff} = \frac{1}{\lambda} = \frac{Fissions}{Absorptions + Fuites} \quad (3.6)$$

L'interprétation classique du k_{eff} est que :

- si le k_{eff} est plus grand que un, les fissions sont plus nombreuses que les captures et les fuites : la population neutronique et donc le nombre des fissions et la puissance augmentent.
- si le k_{eff} est égal à un, les fissions et les disparitions s'équilibrent. A chaque fission correspond ν neutrons qui redonnent exactement une fission. Le réacteur est dit "critique".
- si le k_{eff} est inférieur à 1, les disparitions sont prépondérantes par rapport aux fissions : la puissance diminue.

Cette interprétation dynamique d'un calcul indépendant du temps est évidemment limitée, mais elle peut être justifiée lorsque l'on est très proche de la criticité, c'est-à-dire si $k_{eff} = 1$.

Résoudre l'équation 3.5 de la criticité, faire un "calcul critique", permet donc de connaître le facteur de multiplication, mais aussi les taux de réactions en tout point du réacteur en se basant sur l'hypothèse que ce flux critique correspond au flux d'un réacteur. C'est l'équation la plus utilisée de la neutronique en particulier dans l'optique du développement de concepts de réacteurs innovants. C'est une sorte de principe fondamental de la neutronique !

Les données nucléaires (sections efficaces, mais aussi spectre de fission et nombre de neutrons par fission) sont les éléments de base de cette équation. Les solutions, c'est-à-dire la valeur propre (l'inverse du k_{eff}) comme le vecteur propre (le flux) en dépendent donc évidemment.

3.1.3 Problèmes pratiques dépendant du temps

3.1.3.1 Calculs de cinétique

Si on fait l'hypothèse que le réacteur n'est pas critique, mais qu'il n'est pas loin de l'être, il est légitime d'essayer de résoudre l'équation⁵ dépendante du temps sans source par la méthode de la variation de la constante⁶, c'est-à-dire d'écrire le flux comme la factorisation d'une fonction indépendante du temps correspondant au flux "critique" et d'une fonction qui dépend du temps.

On recherche des solutions dépendant du temps sous la forme factorisée :

$$\phi(r, t) = \phi_{critique}(r) * f(t) \quad (3.7)$$

Dès lors, la différence entre 1 et $1/k_{eff}$, multipliée par la source de fission correspond bien à la variation de la population neutronique. On comprend l'interprétation cinétique du k_{eff} : si le k_{eff} est supérieur à 1, la variation est positive : le flux augmente. S'il est inférieur à 1, il diminue.

Dans les réacteurs électrogènes, il existe toujours des sources de neutrons, qui proviennent des fissions spontanées ou des sources externes. Chacun de ces neutrons sources produit des fissions qui à leur tour feront des fissions. L'immense majorité des neutrons présents à un instant t sont bien des neutrons de fission, quand bien même chacun d'entre eux ne produit pas exactement un neutron à la génération suivante. Le fonctionnement stable du réacteur correspond donc plus à un régime à source quasiment critique, qu'à un vrai régime critique. L'hypothèse d'une forme de flux correspondant au flux critique est donc bien justifiée et les transitoires de puissances ressemblent effectivement à ceux d'un réacteur critique.

Dans le cas nettement plus complexe où le réacteur est loin de la criticité, et que la contribution de la source externe au flux de neutrons n'est pas du tout négligeable, cette interprétation n'est plus légitime. Pour pouvoir expliquer la cinétique d'un réacteur fortement sous-critique, d'autres outils sont nécessaires. On trouvera dans la thèse de F. Perdu [39] le développement d'outils permettant d'interpréter les données de l'expérience MUSE [40].

3.1.3.2 Evolution du combustible

Un réacteur n'est jamais vraiment à l'équilibre, puisqu'il produit de l'énergie par fission et que donc à chaque instant des noyaux disparaissent par fission ! En fait, l'évolution du combustible

⁵L'équation de la neutronique dépendante du temps est couplée aux équations d'évolution des précurseurs de neutrons retardés. Il y a donc plusieurs valeurs propres, seule la plus grande correspond à une constante de temps positive, et donc à une puissance qui ne tend pas vers 0, lorsque k_{eff} est plus grand que 1. Tous les autres "modes" décroissent avec le temps.

⁶Cette méthode est appelée "cinétique ponctuelle" dans le jargon de la physique des réacteurs.

(typiquement à l'échelle du jour) est extrêmement lente devant la cinétique des transitoires de réactivité (typiquement à l'échelle de la seconde).

Chaque noyau i peut être produit par un certain nombre de réactions (capture, fission...) sur les noyaux j et réciproquement les noyaux j peuvent provenir de réactions sur le noyau i . De plus, il peut y avoir des décroissances radioactives de l'un vers l'autre. En notant $\sigma_{i,j}$ et $\lambda_{i,j}$ la section efficace et la probabilité de décroissance de production de i à partir du noyau j ⁷, on peut écrire l'équation 3.8, dite de Bateman [41], donnant l'évolution de la matrice N des noyaux i dans le réacteur.

$$\frac{dN}{dt} = M * N + S \quad (3.8)$$

avec M la matrice dont l'élément i, j est :

$$M_{i,j} = \sigma_{i,j}\phi + \lambda_{i,j} \quad (3.9)$$

et S est un vecteur dépendant du temps correspondant aux actions pratiquées sur le combustible : retraitement ou ajout de combustible neuf.

Le flux apparaît dans le calcul des densités et celles-ci apparaissent dans le calcul du flux. Les équations de Bateman et de Boltzmann sont donc résolues alternativement.

La capacité d'un concept à répondre aux critères de gestion durable des ressources et de minimisation est évaluée grâce à de tels outils. Les calculs critiques y ont une place prépondérante. L'impact des données nucléaires sur ces calculs et en particulier sur les taux de réaction est très complexe. En effet, les taux de réaction dépendent des sections efficaces et du flux qui dépend lui-même des sections efficaces qui à leur tour modifieront les concentrations et donc les taux de réaction à l'itération suivante.

3.2 Résolution numérique

Tous les problèmes à résoudre en neutronique peuvent être mis sous la forme d'une équation à source de la forme de l'équation 3.4. Dans le cas d'un calcul de criticité par exemple, on initialise le flux puis on déduit une source de fission. La résolution de l'équation à source donne un nouveau flux et donc une nouvelle source. On itère jusqu'à la convergence fixée par quelques critères bien choisis.

Il existe essentiellement deux familles de programmes, permettant l'inversion de l'opérateur de transport T et donc la résolution des calculs à source, que nous allons décrire succinctement.

⁷on a alors bien sûr $\sigma_{i,j} = -\sigma_{j,i}$ et $\lambda_{i,j} = -\lambda_{j,i}$

3.2.1 Approche stochastique

Dans cette approche, on suit une particule apparaissant à une énergie donnée, dans une certaine direction, dans un point du réacteur, après une réaction quelconque : diffusion, (n,xn), fission ou spontanément. Dans la direction $\vec{\Omega}$ du neutron, l'équation du transport 3.4 se réduit à une simple équation différentielle du premier ordre :

$$\frac{d\phi}{dr} + \Sigma_t \phi = S \quad (3.10)$$

La solution est donc une exponentielle de longueur caractéristique $\lambda = 1/\Sigma_t$. On propage donc une particule sur une longueur, tirée au hasard, dont la distribution doit reproduire la probabilité exponentiellement décroissante du neutron de disparaître⁸. Si cette longueur permet à la particule de rester dans le milieu, on choisit au hasard la réaction (capture, (n,xn), diffusion, fission...) qui a lieu après propagation en fonction des probabilités, c'est-à-dire des sections efficaces. On a alors, une nouvelle génération de particules à transporter. Sinon, cette particule est de nouveau diffusé dans le milieu voisin : l'histoire se répète. A chaque étape on peut garder trace du chemin parcouru et en déduire le flux. De même, on incrémente des compteurs de taux de réaction à chaque interaction. On peut donc reconstruire toutes les observables nécessaires à l'étude du réacteur. Les programmes utilisant cette approche [25, 42] sont souvent utilisés pour faire des calculs de référence car ils ne nécessitent aucune approximation géométrique et utilisent les sections efficaces ponctuelles. Leur principale limitation peut être le temps de calcul nécessaire à la simulation d'un nombre suffisant d'histoires de particules pour obtenir une statistique intéressante.

3.2.2 Approche déterministe

Cette approche nécessite la discrétisation des variables d'énergie, d'espace et d'angle. L'objectif est de réduire l'équation du transport en un système d'équations couplées, soluble numériquement. Nous ne détaillons pas le catalogue des solutions et des hypothèses faites selon les méthodes, mais nous précisons les points-clés des programmes de transport : la constitution de bibliothèques multigroupes et les méthodes à ordonnées discrètes.

3.2.2.1 Discrétisation en énergie

La dimension du système d'équations à résoudre dépend du nombre de points du maillage spatial, du nombre de directions angulaires, et du découpage en énergie. Nous avons vu que l'énergie des neutrons se répartit sur plusieurs ordres de grandeurs. Il est irréaliste d'espérer

⁸Il suffit pour cela de tirer un nombre p avec une distribution uniforme sur $[0,1]$ et alors $\lambda = 1/\Sigma_t \ln(p)$ a la distribution voulue.

placer plusieurs dizaines de points par décade. On résout alors un système d'équations couplées simplifiées correspondant à l'intégration sur un domaine d'énergie $I_i = [E_i, E_{i+1}]$ de l'équation de Boltzmann 3.1 :

$$\begin{aligned} \int_{E_i}^{E_{i+1}} -div(\vec{\Omega} \bullet \phi(E, \vec{\Omega})) dE &= - \int_{E_i}^{E_{i+1}} \Sigma_t(E) \phi(E, \vec{\Omega}) dE \\ &+ \int_{E_i}^{E_{i+1}} \int_{4\pi} \int_0^\infty \left[\Sigma_s((E', \vec{\Omega}') \rightarrow (E, \vec{\Omega})) \phi(E', \vec{\Omega}) \right] dE' d\vec{\Omega}' dE \\ &+ \int_{E_i}^{E_{i+1}} S(E, \vec{\Omega}) dE \end{aligned} \quad (3.11)$$

soit encore :

$$\begin{aligned} -div(\vec{\Omega} \bullet \phi(i, \vec{\Omega})) &= -\Sigma_t(i) \phi(i, \vec{\Omega}) \\ &+ \int_{4\pi} \sum_{i'=1}^{ngroupe} \left[\Sigma_s((i', \vec{\Omega}') \rightarrow (i, \vec{\Omega})) \phi(i, \vec{\Omega}) \right] d\vec{\Omega}' \\ &+ S(i, \vec{\Omega}) \end{aligned} \quad (3.12)$$

où les sections efficaces du groupe i sont définies de manière à conserver les taux de réaction :

$$\Sigma_i \int_{E_i}^{E_{i+1}} \phi(E) dE = \int_{E_i}^{E_{i+1}} \Sigma_t(E) \phi(E) dE \quad (3.13)$$

Les sections efficaces multigroupes sont donc les moyennes des sections efficaces ponctuelles pondérées par le flux. Pour résoudre l'équation multigroupe 3.11 il faudrait donc avoir déjà résolu l'équation générale 3.1 pour connaître le spectre du flux en tout point !

En réalité, il n'y a pas besoin de savoir ce qui se passe en tout point du réacteur pour simuler les effets fins de l'autoprotection. Les effets d'autoprotection (phénomène défini au paragraphe 2.1.3) dépendent de la configuration locale du combustible, de sa gaine et du modérateur, à l'échelle du libre parcours moyen. Ils dépendent de la vitesse de ralentissement sur les noyaux entourant le combustible par rapport à la largeur des résonances. Plus on cherche des effets spectraux fins (nécessitant une description fine de l'énergie), plus la géométrie peut être limitée à de petites échelles. Les programmes déterministes utilisent l'hypothèse que les effets de spectres fins sont calculables en géométrie simplifiée à l'échelle de la structure du combustible pour calculer des sections efficaces moyennes. Elles seront utilisées par la suite pour calculer l'ensemble du cœur.

Une méthode classique de calcul d'autoprotection, très utilisée, est la méthode de Bodarenko [43]. Celle-ci repose sur l'hypothèse fondamentale que la largeur des résonances est très petite devant l'énergie moyenne perdue par choc par le neutron. Ainsi, on peut démontrer que, dans la

mesure où les neutrons possédant l'énergie de la résonance disparaissent à cette énergie, le flux est inversement proportionnel à la section efficace dans la résonance. L'impact sur le flux est d'autant plus important que la section efficace de la résonance est grande par rapport à la section efficace potentielle sans la résonance. On montre que le flux, solution de l'équation du ralentissement, peut s'écrire sous la forme d'un rapport entre une fonction $C(E)$ variant lentement avec l'énergie et une fonction inverse de la section efficace résonante $\sigma_r(E)$:

$$\phi(E) = \frac{C(E)}{\sigma_0 + \sigma_r(E)} \quad \text{où} \quad \sigma_0 = \sum_i \sigma_p^i * N_i \quad (3.14)$$

est le facteur de dilution qui correspond à l'importance du noyau résonant dans le mélange, et i représente les noyaux intervenant dans la diffusion des neutrons par le mélange. Si $\sigma_0 = \infty$ alors le noyau est tellement dilué que le spectre ne dépend pas du noyau résonant, sa section efficace ne sera donc pas autoprotégée. Réciproquement une très forte autoprotection correspond à une petite valeur de σ_0 .

Le programme NJOY permet de produire pour chaque noyau un jeu de données contenant les sections efficaces autoprotégées pour plusieurs valeurs de σ_0 . Ces jeux de données sont ensuite utilisés par un programme de calcul cellule qui résout itérativement l'équation du ralentissement et calcule le facteur de dilution approprié pour chaque groupe. Quelques améliorations supplémentaires sont utilisées pour tenir compte de la géométrie de l'assemblage (sphérique, hexagonal, carré) et donc de l'influence des assemblages voisins au moyen des facteurs de Dancoff [44] et des dimensions de l'assemblage par rapport au libre parcours moyen.

Ce modèle est très utilisé dans notre chaîne de programme de calculs de sensibilité. L'impact des hypothèses faites est étudié en détail dans la partie 4.2.

3.2.2.2 Discrétisation angulaire : les méthodes S_n

Les méthodes numériques déterministes de résolution de l'équation du transport diffèrent souvent essentiellement par leurs méthodes d'approche des variables angulaires. La première idée du physicien est de considérer que tout est isotrope, la variable angulaire disparaît alors tout simplement. On peut simplifier l'équation du transport en une équation classique de diffusion soluble analytiquement⁹, en faisant l'hypothèse que le courant de neutron est proportionnel au gradient du flux de neutrons. Ces hypothèses fournissent des équations nettement plus faciles à résoudre que celle du transport et sont donc la base de programmes particulièrement rapides. Il est possible de raffiner le modèle en décomposant le flux angulaire sur la base des harmoniques sphériques :

⁹dans la mesure où les milieux sont relativement homogènes

$$\phi(\vec{\Omega}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{l=-m}^{l=m} \psi_l^m Y_l^m(\vec{\Omega}) \quad \text{où} \quad \psi_l^m = \int \bar{Y}_l^m(\vec{\Omega}) \phi(\vec{\Omega}) \quad (3.15)$$

avec Y_l^m l'harmonique sphérique d'ordre m , l et $\bar{Y}_l^m$ sa conjuguée.

Après quelques étapes de calculs, on montre que l'on peut réécrire l'équation de la diffusion en prenant en compte partiellement l'harmonique de rang 1. C'est l'équation de la diffusion dite *corrigée transport* qui est à la base des programmes "de premières collisions" et de ceux utilisant la méthode dite des caractéristiques.

Les programmes utilisés dans le cadre de cette thèse n'utilisent pas directement ces hypothèses¹⁰. Dans les méthodes Sn , on choisit judicieusement un jeu de directions particulières couvrant l'espace angulaire. On pondère ensuite chaque direction par une fonction poids bien choisie.

Pour chaque direction discrète et pour chaque axe, l'opérateur du transport s'écrit comme le produit du gradient du flux sur l'axe et du cosinus de l'angle entre cette direction et l'axe. Les fonctions poids apparaissent là où il est nécessaire dans les opérateurs de diffusion, de disparition et dans la source de fission. On a alors, non plus une équation compliquée définie sur un espace angulaire à deux dimensions, mais un jeu de dimension finie d'équations couplées solubles numériquement.

3.2.2.3 Discrétisation spatiale

Les programmes Sn nécessitent le découpage de l'espace en volumes élémentaires de forme simple¹¹ de manière à écrire les opérateurs de dérivation de l'opérateur de transport sous forme de différences finies. Malheureusement, la géométrie des réacteurs nucléaires ne peut que rarement être décrite finement par une géométrie cartésienne. Si les assemblages d'un Réacteur à Eau sous Pression sont effectivement carrés, les crayons de combustibles qu'ils contiennent sont cylindriques. Or, la forme fine du flux, qui détermine les sections efficaces moyennes, dépend de l'interaction entre le combustible et le modérateur. Elle ne peut être calculée précisément par une simulation en géométrie cartésienne. La géométrie utilisée pour le calcul Sn ne reproduit donc pas la géométrie fine exacte mais une géométrie "homogénéisée" dans laquelle la structure fine a disparu. Les sections efficaces utilisées par le calcul coeur Sn sont celles permettant de conserver les taux de réaction, calculées dans un calcul cellule dans lequel la structure fine de

¹⁰L'approximation de la diffusion est utilisée dans DANTSYS pour accélérer la convergence de la source de fission.

¹¹Ce n'est pas le cas d'autres méthodes déterministes comme les méthodes de probabilités de collision ou les méthodes de caractéristiques.

la géométrie a été utilisée. On réalise donc une pondération "flux-volume" de la section efficace pour calculer les sections efficaces moyennes :

$$\Sigma_g^{Sn} = \frac{\int_V \Sigma_{cellule}^g(\vec{r}) \phi_{cellule}^g(\vec{r}) dv}{\int_V \phi_{cellule}^g(\vec{r}) dv} \quad (3.16)$$

3.3 Théorie des Perturbations pour les analyses de sensibilité

L'application de la théorie des perturbations [45] à la physique des réacteurs est apparue très tôt dans l'histoire de l'énergie nucléaire grâce à E. P. Wigner. Un résumé des principales étapes historiques de ce domaine est donné dans [46].

Ce chapitre contient des résultats très classiques de la Théorie des Perturbations développée dans les années 60 en particulier par L.N. Usachev [47] et A. Gandini [48]. Il nous semble nécessaire de revenir sur les points essentiels de la théorie dans l'optique de son application aux analyses de sensibilité aux données.

L'utilisation de quelques fonctions aux propriétés mathématiques bien commodes permet de calculer de façon élégante la sensibilité de résultats intégraux aux données nucléaires, c'est-à-dire de relier la variation relative d'une grandeur calculée à l'échelle du réacteur (k_{eff} , taux de réaction, rapport de taux de réaction), à la variation relative d'une donnée microscopique : section efficace, nombre de neutrons par fission, concentration. Les outils utilisent intensément la fonction importance [49], c'est-à-dire la solution de l'équation de Boltzmann Adjointe.

On utilise les fonctions adjointes parce que les opérateurs adjoints ont des propriétés bien particulières qui permettent des simplifications intéressantes pour les calculs de sensibilité rappelés dans la suite du chapitre.

Soit B l'opérateur de transport défini à l'équation 3.1 page 34 et X^* son opérateur adjoint, X et Y des vecteurs. La propriété essentielle des opérateurs adjoints est de pouvoir commuter dans le produit scalaire¹² :

$$\langle X, BY \rangle = \langle B^* X, Y \rangle \quad (3.17)$$

Pour que cette commutation soit possible, il suffit que l'ordre des énergies et des angles soit inversé :

$$B(g \rightarrow g', \vec{\Omega} \rightarrow \vec{\Omega}')^* = B(g' \rightarrow g, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \quad (3.18)$$

En pratique, l'équation adjointe peut être résolue avec les mêmes programmes que la résolution de l'équation directe, après transposition des matrices de sections efficaces en fonction de

¹²On utilisera la notation du produit scalaire pour signifier la triple intégrale sur le volume, l'énergie, et les directions derrière laquelle se cache une intégrale sextuple...

l'énergie, et en inversant l'ordre de lecture des angles et des énergies.

3.3.1 Analyses de sensibilité

3.3.1.1 Théorie des perturbations pour les fonctionnelles linéaires avec le flux

Supposons que l'on résolve l'équation stationnaire d'un réacteur sous-critique piloté par une source $S(\vec{r}, v)$. On cherche à calculer la sensibilité aux sections efficaces d'un taux de réaction $R = \langle \Sigma \phi \rangle$. Ce taux de réaction peut être le nombre de déplacements par atome dans la cuve (la source est alors la source de neutrons de fission du réacteur en fonctionnement), ou le nombre de neutrons qui arrivent à sortir d'un château de transport de déchets et la source de neutrons est alors la source interne, ou encore n'importe quel taux de réaction dans un ADS, la source étant alors la source de spallation.

On résout donc une équation de la forme :

$$S(\vec{r}, v) = B(\vec{r}, v)\phi(\vec{r}, v) \quad (3.19)$$

où B est l'opérateur de Boltzmann défini par l'équation 3.1.

La source contient éventuellement, la source de fission .

Intéressons-nous à l'équation adjointe suivante :

$$\Sigma = B^* \phi^* \quad (3.20)$$

Après multiplication à droite par ϕ et intégration sur l'espace des phases, on montre aisément en utilisant la propriété fondamentale des opérateurs adjoints 3.17 :

$$\langle \phi, \Sigma \rangle = \langle \phi, B^* \phi^* \rangle = \langle B\phi, \phi^* \rangle = \langle S, \phi^* \rangle = R \quad (3.21)$$

On retrouve ici simplement l'interprétation usuelle de la fonction adjointe : le taux de réaction R peut être vu :

- soit sous la forme $\langle \phi, \Sigma \rangle$ comme l'impact du flux issu de la source fixe S pondéré par la section efficace Σ .
- soit sous la forme $\langle S, \phi^* \rangle$ comme l'impact de cette source pondéré par la fonction adjointe issue de la section efficace Σ .

La fonction poids $\phi^*(\vec{r}, v)$ est appelée *importance* et correspond à la contribution à l'observable d'un neutron se trouvant en un point $\vec{r}$ avec la vitesse $\vec{v}$.

Si l'on imagine une perturbation des sections efficaces apportant une modification ∂B , le flux perturbé $\phi + \partial\phi$ est solution de l'équation :

$$S = (B + \partial B)(\phi + \partial\phi) \quad (3.22)$$

En soustrayant 3.22 et 3.20 et en négligeant le terme d'ordre 2, on trouve que $B\partial\phi = -\partial B\phi$. Après multiplication par ϕ^* , intégration sur l'espace des phases et utilisation de la propriété fondamentale des opérateurs adjoints (rappelée dans l'équation 3.17) on trouve :

$$\langle\phi^*, \partial B\phi\rangle = \langle\phi^*, B\partial\phi\rangle = \langle B^*\phi^*, \partial\phi\rangle = \langle\Sigma, \partial\phi\rangle = \partial R \quad (3.23)$$

On retrouve de nouveau la fonction importance : la variation du taux de réaction R liée à une variation ∂B est tout simplement l'intégrale de cette variation pondérée par la fonction importance associée.

En notant $S_\alpha^B = (\frac{\partial B}{\partial \alpha})/(\frac{1}{\alpha})$, le rapport de la variation de l'opérateur de Boltzmann à la donnée nucléaire α ¹³, on relie aisément la sensibilité du taux de réaction R à la donnée α :

$$S_\alpha^R = (\frac{\partial R}{R})/(\frac{\partial \alpha}{\alpha}) = \langle\phi^*, S_\alpha^B\phi\rangle/R \quad (3.24)$$

Après avoir résolu deux fois seulement l'équation du transport (une fois sous la forme directe, et une fois l'équation adjointe), on peut calculer la sensibilité à n'importe quelle donnée en calculant simplement un produit scalaire! Le lecteur aura remarqué que α pouvait intervenir dans la section efficace Σ de la définition de l'observable R . Dans ce cas, il faut effectivement compléter la sensibilité par un terme "direct", correspondant à la variation du taux de réaction avec sa section efficace : $S_{\alpha,direct}^R = \langle\alpha, \phi\rangle/\langle\Sigma, \phi\rangle$. C'est cette équation qui était programmée à l'origine dans SUS3D[50], le programme de sensibilité disponible à l'OCDE.

3.3.1.2 Théorie simple : sensibilité du k_{eff}

En écrivant l'équation homogène sous sa forme la plus simple 3.25 et en la multipliant par la fonction adjointe homogène, on peut écrire la valeur propre λ sous une forme simple 3.26

$$B\phi = \lambda F\phi \quad (3.25)$$

$$\lambda = \frac{\langle\phi^*, B\phi\rangle}{\langle\phi^*, F\phi\rangle} \quad (3.26)$$

En appliquant une perturbation aux opérateurs de Boltzmann et de source de fission dans l'équation homogène on obtient l'équation perturbée 3.27.

$$(B + \partial B)(\phi + \partial\phi) - (\lambda + \partial\lambda)(F + \partial F)(\phi + \partial\phi) = 0 \quad (3.27)$$

¹³Ce calcul des variations relatives de l'opérateur est assez simple puisque celui-ci est souvent linéaire avec les sections efficaces. Les dérivées partielles de B sont donc parfois simplement les sections efficaces dans le cas de l'opérateur de disparition par exemple. On a alors $S_\alpha^B = (\frac{\partial \Sigma_t}{\partial \alpha})/(\frac{1}{\alpha}) = \alpha$

En réécrivant 3.26 pour le système perturbé puis en soustrayant les termes du système initial on peut écrire 3.28, en négligeant les termes d'ordre deux.

$$\partial\lambda = \frac{\langle\phi^*, (\partial B - \lambda\partial F)\phi\rangle}{\langle\phi^*, F\phi\rangle} - \frac{\langle\phi^*, (B - \lambda F)\partial\phi\rangle}{\langle\phi^*, F\phi\rangle} \quad (3.28)$$

Comme ϕ^* est solution de l'équation adjointe de l'équation 3.25, le numérateur du second terme disparaît :

$$\langle\phi^*, (B - \lambda F)\partial\phi\rangle = \langle(B^* - \lambda F^*)\phi^*, \partial\phi\rangle = \langle 0, \partial\phi\rangle = 0 \quad (3.29)$$

Après calcul de la fonction adjointe et du flux direct, on peut calculer par une intégrale, la variation (et donc la sensibilité) de la valeur propre (et donc du k_{eff}) pour n'importe quelle variation sur n'importe quelle réaction, sur n'importe quel isotope, dans n'importe quelle zone en énergie sans avoir à calculer la variation de flux due à cette variation. On comprend mieux l'intérêt porté à ces méthodes depuis le début du nucléaire.

3.3.1.3 Théorie des Perturbations Généralisées : sensibilités des rapports de taux de réaction

Tous les taux de réaction estimés en utilisant le flux critique sont normalisés à la source de fission. Ainsi, si l'on veut calculer l'impact de la perturbation d'une donnée sur ce taux de réaction, il ne faut pas oublier que la normalisation peut elle aussi être affectée. De même, les mesures expérimentales sont souvent normalisées par rapport à une réaction de référence. Les données sont donc aussi des rapports de taux de réaction plutôt que des taux de réaction.

Les méthodes variationnelles donnent une très jolie démonstration de la sensibilité [51] aux données d'un taux de réaction $R = \frac{\langle\sigma_1, \phi\rangle}{\langle\sigma_2, \phi\rangle}$, où ϕ est solution de l'équation de Boltzmann homogène. L'idée de ces méthodes est d'utiliser une fonctionnelle K qui ressemble au paramètre étudié mais inclut une contrainte supplémentaire, ici le fait que le flux est solution d'une équation qui simplifie le calcul des variations du paramètre. On définit :

$$K = R - \langle\Gamma^*, (B - \lambda F)\phi\rangle \quad (3.30)$$

Γ^* joue ici le rôle d'un multiplicateur de Lagrange. Vu par K , Γ^* et ϕ sont des vecteurs qui ont une valeur en tout point de l'espace des phases. Par définition de ϕ , solution de l'équation homogène¹⁴, on sait que $K = R$ et donc on peut choisir Γ^* arbitrairement. On verra que l'on peut faire ce choix de façon particulièrement judicieuse. On peut écrire la variation au premier

¹⁴ $(B - \lambda F)\phi = 0$ et donc le second terme est nul.

ordre de K , due à une variation de la donnée nucléaire α , et donc de R , comme la somme de plusieurs contributions :

$$dR = dK = \frac{\partial K}{\partial \alpha} \partial \alpha + \frac{\partial K}{\partial \lambda} \partial \lambda + \frac{\partial K}{\partial \Gamma^*} \partial \Gamma^* + \frac{\partial K}{\partial \phi} \partial \phi \quad (3.31)$$

Si l'on arrive à faire disparaître les trois derniers termes, la variation relative (*i.e.* la sensibilité) de R due à une variation relative de α s'écrit "simplement" :

$$S_\alpha^R = \frac{\partial R}{R} / \frac{\partial \alpha}{\alpha} = \frac{\alpha}{R} \frac{\partial R}{\partial \alpha} = \alpha \left(\left(\frac{\langle \frac{\partial \sigma_1}{\partial \alpha}, \phi \rangle}{\langle \sigma_1, \phi \rangle} - \frac{\langle \frac{\partial \sigma_2}{\partial \alpha}, \phi \rangle}{\langle \sigma_2, \phi \rangle} \right) - \frac{1}{R} \langle \Gamma^*, (\frac{\partial B}{\partial \alpha} - \lambda \frac{\partial F}{\partial \alpha} \phi) \rangle \right) \quad (3.32)$$

On retrouve la forme générale d'une sensibilité obtenue par la théorie des perturbations. Le terme direct provient de l'impact direct de la donnée si elle contribue à la fonctionnelle étudiée. Le terme indirect correspond à la modification du flux liée à cette donnée. Ce dernier terme a de nouveau la forme d'un produit scalaire du taux de réaction pondéré par une fonction importance bien choisie. Il reste à choisir la bonne fonction importance pour que les derniers termes de l'équation 3.31 disparaissent.

Revenons en détail sur l'annulation de chacun de ces termes.

Le premier terme correspond à la variation de K résultant d'une variation de la valeur propre. Comme λ est un scalaire :

$$0 = \frac{\partial K}{\partial \lambda} \partial \lambda = \langle \Gamma^*, \partial \lambda F \phi \rangle = \partial \lambda \langle \Gamma^*, F \phi \rangle = 0 \quad (3.33)$$

En choisissant un vecteur Γ^* orthogonale à la source directe, cette condition sera vérifiée pour tout λ .

L'annulation du second terme s'écrit :

$$\frac{\partial K}{\partial \Gamma^*} = \langle \mathbf{1}, (B - \lambda F) \phi \rangle = 0 \quad (3.34)$$

où $\mathbf{1}$ est le vecteur unité qui vaut 1 pour toutes les directions, tous les groupes d'énergie, en tout point du réacteur. Cette condition est, bien sûr, toujours vérifiée car ϕ est solution de l'équation de la criticité 3.25.

Enfin il faut que :

$$0 = \frac{\partial K}{\partial \phi} = \frac{\partial R}{\partial \phi} - \langle \Gamma^*, (B - \lambda F) \frac{\partial \phi}{\partial \phi} \rangle = \frac{\partial R}{\partial \phi} - \langle \Gamma^*, (B - \lambda F) \mathbf{1} \rangle \quad (3.35)$$

Après utilisation de la propriété fondamentale des adjoints et la définition de la fonction unité, il suffit que l'équation suivante soit vérifiée :

$$\frac{\partial R}{\partial \phi} = \Gamma^* (B^* - \lambda F^*) \quad (3.36)$$

L'adjoint permettant de calculer toutes les sensibilités d'un rapport de taux de réaction n'est autre que la solution de l'équation adjointe dont la source est la dérivée du taux de réaction par rapport au flux. Il faut de plus que cette solution soit orthogonale au flux. En effet, n'importe quelle fonction Γ_b^* telle que $\Gamma_b^* = \Gamma_a^* + a * \phi^*$ c'est-à-dire égale à une solution Γ_a^* de 3.36 plus une contamination de l'adjointe habituel (solution de l'équation adjointe homogène) est aussi solution de l'équation 3.36. Seule la solution orthogonale à la source directe et donc solution de 3.33 permet un calcul aisé des sensibilités.

3.4 Analyses d'incertitude

Une fois que les sensibilités $S_{i,x,g}$ de l'observable R à la donnée x sur l'isotope i dans le groupe d'énergie g sont calculées, si l'on dispose des incertitudes sur les données de base sous forme de matrices de covariance, on peut propager cette incertitude à l'observable R qui nous intéresse en utilisant la formule classique :

$$\begin{aligned} \frac{\Delta R}{R} &= \sqrt{S^t Cov S} \\ &= \sum_{x,y} \sum_{i,j} \sum_{g,h} S_{i,x,g} Cov(\sigma_{i,g}^x, \sigma_{j,h}^y) S_{j,y,g'} \end{aligned} \tag{3.37}$$

Chapitre 4

Validation sur la maquette critique VENUS

4.1 Présentation du réacteur VENUS

Le réacteur VENUS (Vulcain Experimental for NUClear Study) est un réacteur expérimental de puissance nulle situé à Mol en Belgique. C'est une maquette critique représentant un Réacteur à Eau sous Pression (REP) classique. Il a été utilisé dans diverses configurations de manière à tester les modèles de simulation numérique. Dans la configuration "VENUS 2", le réacteur était partiellement chargé en MOX. Les répartitions de puissance axiale et radiale ont été mesurées ainsi que des taux de réaction en plusieurs points. Ces données sont donc particulièrement intéressantes pour la validation des données et des études de cœur. La géométrie est présentée sur la figure 4.1.

Cette configuration a fait l'objet d'un exercice de calcul international sous l'égide de l'Agence de l'Energie Nucléaire de l'OCDE [52]. Dans le cadre des études de recyclage de Plutonium et en particulier du Plutonium militaire, les données mises à disposition par SCK•CEN ont été utilisées pour décrire les spécifications de l'exercice, puis pour comparer les résultats. Les spécifications [52] ont alors été distribuées aux participants du Working Party on the Physics of Plutonium Fuels and Innovative Fuel Cycles (WPPR) et de la Task Force on Reactor-based Plutonium Disposition (TFRPD).

Les résultats demandés étaient :

- le facteur de multiplication des calculs d'assemblages pour les trois zones d'enrichissement : deux zones UO₂ enrichies à 3.3% et à 4% et une zone mixte MOX enrichie à 2% en U²³⁵ et à 2.7% en Plutonium ;
- le facteur de multiplication d'un modèle 2 D représentant un quart du réacteur ;

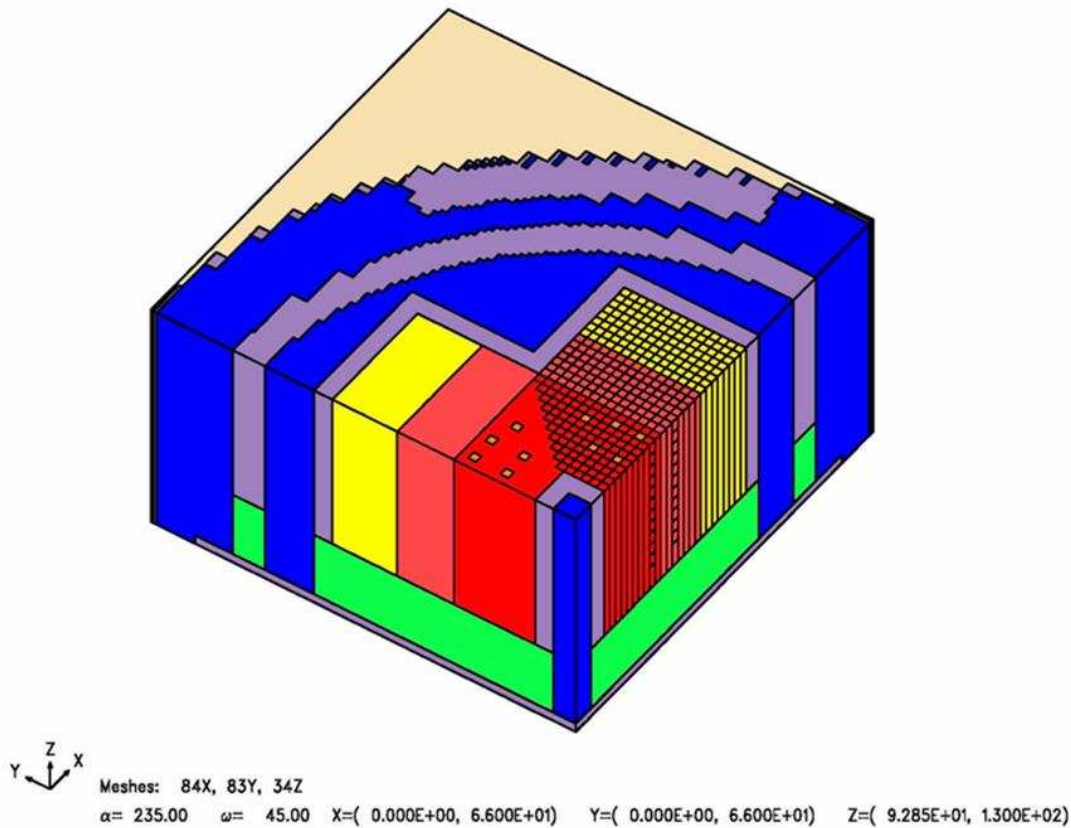


FIG. 4.1 – Coupe à mi-hauteur d'un quart de la géométrie de VENUS2. Les différentes zones d'enrichissement UOX 3,3% et 4% puis MOX sont en rouge puis jaune. Les barres de contrôle sont placées dans la zone enrichie à 3,3%. Les zones d'eau sont en bleu ou en vert pour le réflecteur inférieur. La cuve et les blindages sont en acier et en gris. La zone beige à l'extérieur est de l'air.

– la répartition du taux de fission dans environ la moitié des aiguilles de ce quart de cœur.

Ce benchmark, réalisé en aveugle (c'est-à-dire que les participants ne connaissaient pas les résultats expérimentaux), a eu beaucoup de succès puisque 14 solutions ont été proposées, utilisant à la fois des programmes déterministes et des programmes stochastiques et les données les plus récentes : ENDF/B-5, ENDF/B-6, JEF-1, JEFF-2.2 et JENDL-3.2. Etant donné le succès de ce premier exercice, d'autres spécifications ont été distribuées [53]. L'objectif est alors de simuler le réacteur en 3D et de reproduire, en plus des résultats de criticité, la répartition axiale du taux de fission dans six aiguilles.

Cet exercice est très intéressant pour la validation de nos outils et méthodes, puisque nous

disposons à la fois de repères expérimentaux et de résultats numériques pour critiquer nos propres résultats.

4.2 Présentation des outils

4.2.1 Chaîne disponible à l'OCDE/AEN

L'Agence de l'Energie Nucléaire de l'OCDE distribue des programmes et des données aux organismes de recherche des pays membres, en particulier toute une chaîne de programmes [54] nécessaire aux calculs des sensibilités et à la propagation des incertitudes sur les données nucléaires disponibles sous la forme de matrices de covariance. Cette chaîne, détaillée sur la figure 4.2, a été utilisée sur une très grande variété d'applications : fusion [55], problèmes de protection [56], ajustement de données nucléaires [57]. Le début de son utilisation pour les calculs de criticité [58] est contemporain de ce travail de thèse.

Les calculs de sensibilité aux données nucléaires utilisant la théorie des perturbations nécessitent le calcul du flux direct et celui de la fonction-importance liée au paramètre d'intérêt. La plupart des implémentations de cette théorie utilisent des programmes déterministes pour résoudre les équations directes et adjointes [59]. Même des solutions innovantes basées sur des calculs stochastiques utilisent un découpage énergétique multigroupe [60, 61]. Le programme SUS3D [62] de sensibilités, disponible à la banque de données, accepte en entrée les solutions des systèmes DOORS (ANISN, DORT, TORT) [63] et DANTSYS (ONE-TWO-THREE DANT) [64]. Ces programmes ont besoin de données nucléaires multigroupes. Celles-ci doivent être fournies dans certains formats bien précis : FIDO, après traitement pour mise au format binaire avec le programme GIP pour DOORS ou dans une multitude de formats pour les programmes de DANTSYS. Les données multigroupes viennent des fichiers évalués après traitement approprié des résonances dans un programme adapté. L'OCDE distribue un certain nombre de programmes réalisant ce traitement (TRANSX [65], SCALE [66], WIMS [67]).

C'est la partie la plus technique et la plus productrice d'erreurs des programmes déterministes. Nous reviendrons plus en détail sur l'impact de la mise en groupes sur les calculs déterministes au paragraphe 4.3.1.2 et sur les calculs de sensibilités au paragraphe 4.4.1.1. Lorsque la géométrie se complique, l'écriture des fichiers d'entrée devient particulièrement pénible. Le changement du maillage des 14 zones (avec 10 barres de contrôle réparties dans la zone enrichie à 3.3%...) nécessaires à la description de VENUS2 est inenvisageable sans l'aide d'un programme adapté. De même l'exploitation des résultats a posteriori est difficile puisque les programmes produisent des fichiers binaires de flux. La banque de données de l'OCDE/AEN distribue le programme BOT3P [68] pour faciliter les étapes fastidieuses de description de la géométrie et de traitement

a posteriori des résultats. Ce programme a démontré son utilité [69]. Nous avons participé à son développement en programmant la lecture des fichiers de DANTSYS pour permettre la représentation graphique des flux. De plus nous avons demandé à R. Orsi, de l'ENEA Bologne, d'améliorer la description des sources pour permettre la préparation des fichiers nécessaires aux sources complexes de la théorie des perturbations généralisées. Toutes ces améliorations sont disponibles dans la version 5 [68].

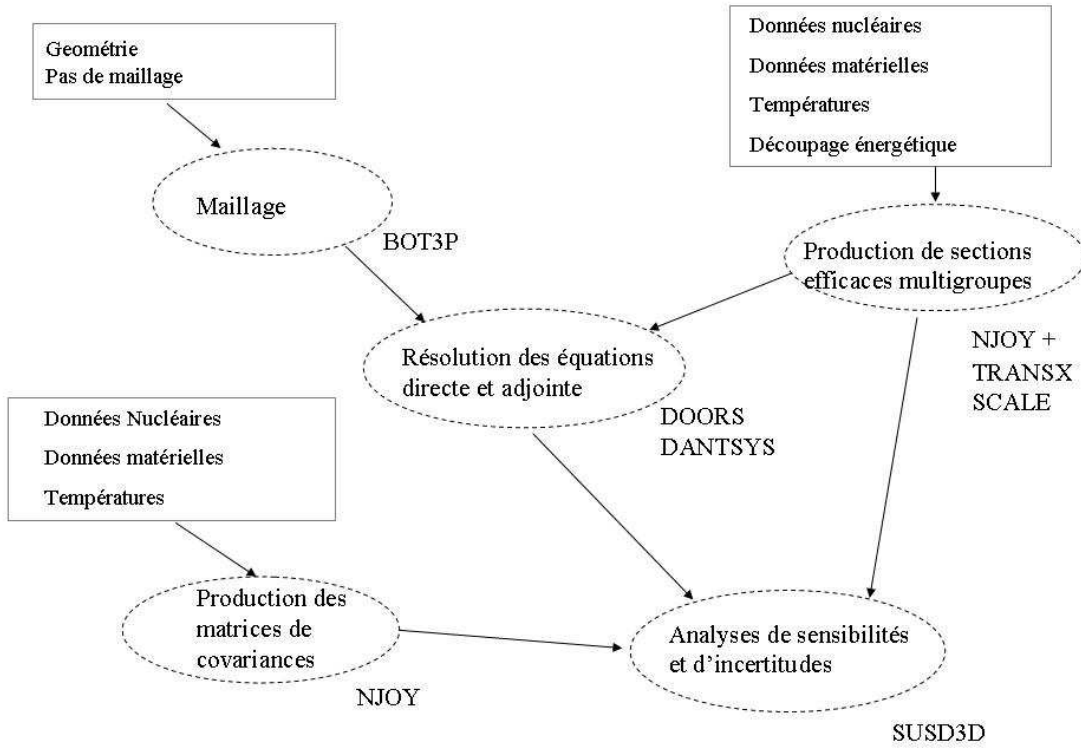


FIG. 4.2 – Organigramme des programmes utilisés pour les analyses de sensibilité et d'incertitude

4.2.2 Description de SUS3D

Historiquement, le programme SUS3D permettait de calculer les sensibilités d'un taux de réaction $R = \langle \sigma_r, \phi \rangle$ à une section efficace de réaction x sur l'isotope i dans le groupe g , c'est-à-dire qu'il permettait l'application numérique de l'équation 3.24 :

$$S_{\sigma_x^i(g)}^R = \underbrace{\frac{\langle \frac{d\sigma_r}{d\sigma_x^i(g)} \sigma_x^i(g), \phi \rangle}{R}}_{\text{terme direct}} + \underbrace{\frac{\langle \phi^*, \frac{dB}{d\sigma_x^i(g)} \sigma_x^i(g) \phi \rangle}{R}}_{\text{terme indirect}} = S_{\sigma_x^i(g) \text{ direct}}^R + S_{\sigma_x^i(g) \text{ indirect}}^R \quad (4.1)$$

où B est l'opérateur de Boltzmann. B étant proportionnel aux sections efficaces (cf. l'équation 3.1), sa dérivée par rapport à une section efficace sur le noyau i est simplement la concentration du noyau i .

Le terme indirect $S_{\sigma_x^i(g) \text{ indirect}}^R$ peut être décomposé en deux parties, une partie dite de perte correspondant au terme de disparition de l'équation de Boltzmann et une partie dite de gain correspondant aux sources de neutrons de diffusion ou de fission. Les sections efficaces apparaissent sous forme de vecteurs pour la première, alors qu'il faut des matrices pour exprimer la seconde. En effet, elle traduit le fait que les neutrons d'une énergie et d'un secteur angulaire participent au flux d'un autre secteur angulaire à une autre énergie.

En notant ΔV_k et N_k respectivement le volume de l'élément de maillage k et la concentration du noyau étudié dans cet élément, $\phi_{g,k,m}$ et $\phi_{g,k,m}^*$ le flux direct et la fonction adjointe, $\Delta \Omega_m$ le poids de la direction Ω_m , $M_{g,k}^{l,n}$, et $M_{g,k}^{*,l,n}$ leurs moments, la formule implémentée dans SUS3D permettant le calcul des sensibilités s'écrit :

$$S_{\sigma_x^i(g) \text{ indirect}}^R = \frac{1}{R} \sum_k \Delta V_k \left(N_k \left(\underbrace{-\sigma_{k,g}^x \sum_m \phi_{g,k,m} \phi_{g,k,m}^* \Delta \Omega_m}_{\text{perte}} \right) \right. \quad (4.2)$$

$$\left. + \underbrace{\sum_{g'} \sum_{l=0}^L \sigma_{k,g \rightarrow g',l}^x \sum_{n=-l}^{n=l} M_{g,k}^{l,n} M_{g',k}^{*,l,n}}_{\text{gain}} \right) \quad (4.3)$$

Les intégrales du terme de gain de l'équation 4.2 peuvent être calculées soit à partir des flux angulaires, soit à partir des moments du flux. Dans les méthodes Sn , les flux sont angulaires. Cependant les sections efficaces doublement différentielles sont décomposées sur les polynômes de Legendre jusqu'à l'ordre L . L'utilisation des moments du flux direct et de la fonction adjointe reconstruits à partir des flux angulaires n'est donc pas une grosse approximation et permet des gains importants en temps de calcul et en espace mémoire [54] .

Pour que SUS3D calcule rigoureusement la sensibilité de l'observable aux données nucléaires du programme de transport, il faudrait qu'il utilise ces données. Pour pouvoir calculer les sensibilités aux sections efficaces partielles (*i.e.* pas seulement aux données apparaissant dans l'équation du transport : section efficace d'absorption, de diffusion et produit $\chi \nu \sigma_{\text{fission}}$ de la source de fission) quel que soit le programme de transport utilisé, SUS3D lit les fichiers de sections efficaces multigroupes dans le format des fichiers produits par GROUPE (le module de NJOY calculant

les sections efficaces multigroupes) plutôt que les fichiers de sections efficaces des programmes de transport. Cela revient à faire l'hypothèse que ces données sont suffisamment proches bien qu'elles soient préparées différemment. Les résonances des sections efficaces sont autoprotégées par la méthode de Bondarenko [43]. L'impact de cette hypothèse est étudié en détail dans ce chapitre. L'intérêt d'utiliser les fichiers de sections efficaces partielles est que l'on peut obtenir les incertitudes pour ces sections efficaces.

Dans le cas des calculs critiques, l'opérateur de fission est multiplié par l'inverse du k_{eff} . Le terme de gain doit donc aussi être divisé par k_{eff} . SUSD3D a été modifié par Ivo Kodeli récemment pour prendre en compte ce facteur. Cette correction est peu importante dans le cas d'un réacteur critique. Mais elle peut devenir importante si on étudie un ADS, ou dans le cas d'un exercice purement numérique comme dans le cas du benchmark de l'OCDE sur les HTR [70, 71].

4.3 Présentation de nos résultats

4.3.1 Effet de la mise en groupe

4.3.1.1 Utilisation de BUGLE

La banque de données de l'OCDE distribue des bibliothèques multigroupes VITAMIN-BVI [72] et VITAMINBOLIB [73] multi-applications. Ces bibliothèques à 199 groupes sont basées sur les bibliothèques évaluées américaine ENDFb-6, et européenne JEFF2.2. Elles sont distribuées dans le format AMPX, utilisé par le système SCALE4.4 [66]. Ce programme enchaîne les modules nécessaires à la production d'une bibliothèque multigroupe autoprotégée et homogénéisée :

- NITAWL autoprotège les sections efficaces dans la zone des résonances résolues. Le formalisme de Nordheim est utilisé. Il permet d'autoprotéger un isotope résonnant dans une géométrie à deux zones dans l'hypothèse des résonances étroites.
- BONAMI autoprotège les sections efficaces dans la zone des résonances non résolues en utilisant le formalisme de Bondarenko.
- XSDRNPM est un programme de transport S_n en une dimension. Il permet de faire des calculs cellules, c'est-à-dire de calculer le flux à l'échelle du pavage régulier de la géométrie et de "fabriquer" les sections efficaces homogénéisées pour que ce pavage disparaisse dans le calcul cœur.
- ALPO est un module changeant le format vers celui utilisable par les logiciels de transport.

La bibliothèque BUGLE est une bibliothèque à 47 groupes, préparée pour les calculs de blindages à partir de la bibliothèque VITAMIN-B6. Son utilisation nous a permis de prendre en main l'ensemble des outils de la chaîne de calcul de sensibilité et d'incertitude. En particulier, nous

avons pu utiliser le logiciel BOT3P pour préparer la description de la géométrie des programmes 2D DORT et TWODANT et pour les programmes 3D TORT et THREEDANT. Le benchmark 2D, définit la géométrie dans le plan XY. Pour prendre en compte la forme du flux selon la troisième dimension, les programmes de transport utilisent des approximations basées sur le modèle de diffusion qui prévoit une forme sinusoïdale. Ainsi, TWODANT attend un *buckling height*¹ et DORT un *DB2*² lui correspondant. Ces données *buckling height* et *DB2* sont utilisées respectivement, dans TWODANT pour augmenter artificiellement les sections efficaces d'absorption, et dans DORT pour modifier le bilan neutronique dans le calcul du k_{eff} . *In fine*, l'idée est la même : ces paramètres permettent de simuler un réacteur fini suivant l'axe Z en prenant en compte les fuites correspondantes. Le tableau 4.1 résume les résultats obtenus pour plusieurs géométries. Pour les calculs 2D, les valeurs des paramètres ne sont pas prises au hasard : la forme du flux axial ayant été mesurée sur l'expérience, le laplacien et donc la longueur de diffusion sont donnés dans la description du benchmark. On remarque que les résultats 2D sont très différents entre eux alors que l'on utilise les mêmes données, les mêmes modèles numériques P3S8³ et le même maillage. Par contre les résultats 3D sont très cohérents entre eux. La quasi-criticité du calcul TWODANT ne doit pas être considérée comme une réussite de ce programme puisqu'il est en désaccord avec le calcul 3D équivalent de près de 3000 pcm⁴ ! De même, on peut s'interroger sur le résultat relativement encourageant de DORT à se rapprocher des calculs 3D.

Geometrie	programme	k_{eff}
2D XY	DORT	0,96465
2D YX	TWODANT	1,00369
3D XYZ	TORT	0,96900
3D XYZ	TREEDANT	0,970529

TAB. 4.1 – Comparaison des calculs en fonction de la géométrie et du programme

A l'occasion de la prise en main des outils, nous avons pu apprécier la nécessité de posséder des outils de visualisation pour confirmer l'allure générale des résultats [69]. Avec plus d'une centaine de points de maillage dans chaque direction, quelques dizaines de groupes en énergie et quelques dizaines de directions, le problème est donc de résoudre une équation à quelques millions

¹équivalente à la hauteur extrapolée en français, correspondant à la longueur caractéristique de l'atténuation selon la troisième dimension

²souvent appelé le laplacien axial, c'est l'inverse au carré de la hauteur extrapolée à π^2 près

³c'est-à-dire utilisant un développement à l'ordre 3 des polynômes de Legendre et un ordre 8 de développement de la discrétisation angulaire. Ceci permet de prendre en compte raisonnablement l'anisotropie des diffusions.

⁴pcm=pour cent mille, c'est souvent la bonne échelle pour parler des écarts en neutronique.

d'inconnues. Ces outils de visualisation sont particulièrement utiles pour détecter des erreurs dans les fichiers d'entrées, qui apparaissent une fois le flux représenté, mais difficilement détectables en fouillant les tableaux de chiffres des fichiers de sortie. Nous avons d'ailleurs participé au développement de BOT3P [68] en implémentant la relecture des fichiers de flux de DANTSYS et en proposant un module supplémentaire, permettant de comparer deux flux calculés sur le même maillage avec des programmes différents ou des options différentes. La figure 4.3 présente par exemple la comparaison des flux de DORT et de DANTSYS. On voit que les deux flux sont extrêmement comparables au niveau du cœur où le flux est maximum et assez différents à la périphérie extérieure de la cuve où le flux est de plusieurs ordres de grandeur inférieur, alors que le bilan neutronique (*i.e.* le k_{eff}) fait apparaître un écart de 3% d'après le tableau 4.1. Il faut noter que la norme ⁵ est la même dans les deux cas, il n'est donc pas étonnant que, en moyenne, les résultats soient cohérents.

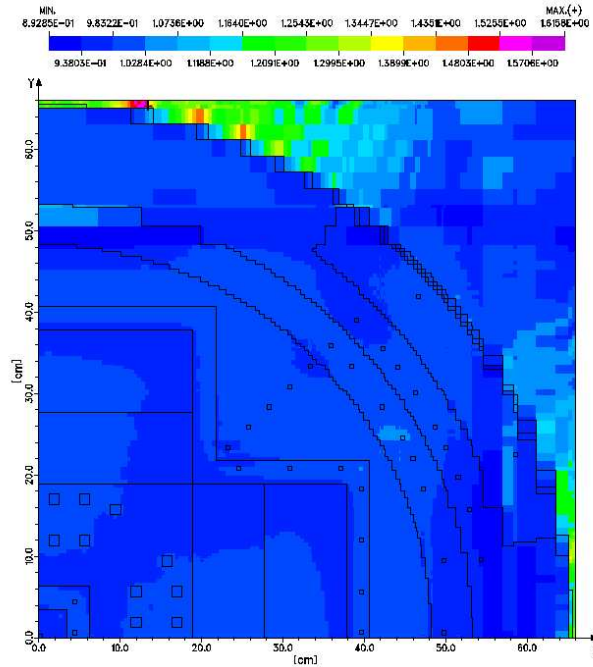


FIG. 4.3 – Comparaison du flux DORT par rapport à celui de TWODANT : $\frac{\phi_{DORT}}{\phi_{TWODANT}}$

La géométrie 2D, XY, est donc peu recommandée pour le calcul du facteur de multiplication d'un réacteur, quand on ne connaît pas la correction à apporter sous la forme de fuites axiales pour obtenir le facteur de multiplication. Cette géométrie ne sera donc plus utilisée dans la suite puisque l'objectif de ce travail est d'estimer les incertitudes sur des réacteurs innovants dont il

⁵l'intégrale triple du flux angulaire sur tout le réacteur

n'existe pas d'expérience permettant les recadrages. L'utilisation de la bibliothèque BUGLE a montré ses limites dès les calculs de criticité; il a donc fallu se concentrer sur l'obtention et la production d'autres bibliothèques adaptées.

4.3.1.2 Utilisation de bibliothèques spécifiques

A partir des bibliothèques générales citées précédemment, nous avons produit des sections efficaces autoprotégées spécifiquement pour VENUS. Pour cela, nous avons fait trois calculs cellules pour chaque combustible du réacteur. Les résultats obtenus, pour les calculs cellules ainsi que pour les calculs cœurs, sont comparés aux moyennes des participants dans le tableau 4.2. La dispersion des résultats des participants étant d'environ 500 *pcm*, nos calculs cellules sont très satisfaisants, puisque nous approchons de la moyenne des participants à quelques dizaines de *pcm* pour les calculs des zones UOX! La figure 4.4 montre la répartition du flux 3D dans le réacteur sur une coupe à mi-hauteur du combustible. La cohérence de ces résultats nous encourage à poursuivre l'exercice.

Un participant au benchmark, W. Zwermann du laboratoire allemand GRS, nous a fourni une bibliothèque à 18 groupes autoprotégée par le système RESMOD [74]. Cette chaîne de programme est une évolution de SCALE utilisant une discrétisation fine (plus de dix-mille groupes) pour le calcul de l'autoprotection dans la zone des résonances résolues.

Calcul	keff ou kinf	moyenne participants
Cellule UO2 3,3%	1,40642	1,40646
Cellule UO2 4,0%	1,33735	1,33769
Cellule MOX	1,25469	1,25737
3D SCALE	0,99466	1,00122
3D RESMOD	1,0052	1,00122

TAB. 4.2 – Comparaison des calculs de criticité

4.3.1.3 Taux de réaction

L'intérêt principal de ce benchmark est d'être basé sur des mesures expérimentales, en particulier des mesures de distribution de taux de fission. La figure 4.5 page 80 montre les comparaisons calcul/expérience de la distribution du taux de fission, par aiguille de combustible, obtenues en 3D avec nos deux bibliothèques de référence. Les premières aiguilles sont celles placées près du réflecteur central dans la zone enrichie à 3%. Puis on suit les colonnes le long de l'axe x. Viennent donc ensuite les aiguilles de la zone enrichie à 4% puis la zone MOX. Les résultats obtenus avec

la bibliothèque préparée avec le logiciel RESMOD à 18 groupes sont très représentatifs des résultats des autres participants du benchmark. W. Zwermann obtient des écarts d'environ 1% avec MCNP avec des temps de calcul bien plus faibles⁶, la tendance générale étant de sous estimer les fissions dans les zones UOX et de les surestimer entre 5% et 10% dans la zone MOX. Ces écarts dépassent légèrement en dehors des erreurs expérimentales, estimées à 1σ à environ 1% dans les zones UOX et 1,5% dans la zone MOX.

Les résultats obtenus avec les bibliothèques constituées avec SCALE4.4 diffèrent de quelques pourcent, à la fois des résultats expérimentaux et des tendances des autres participants, dans certaines zones en particulier :

- dans la zone MOX : l'autoprotection des résonances larges à basses énergie, et en particulier celles du ^{239}Pu et du ^{240}Pu , avec le formalisme de Nordheim [66] utilisé par NITAWL, n'est pas vraiment recommandée. Au contraire la procédure utilisée par W. Zwermann, basée sur une description fine en énergie [74] permet d'obtenir d'excellents résultats même si la bibliothèque finale contient moins de groupe.
- pour les aiguilles proches de la cuve.
- pour les aiguilles entourant les barres de contrôle. La très forte hétérogénéité apportée par les absorbants en bore, en particulier dans la partie thermique du spectre, modifie les sections efficaces effectives pour les barres de combustible entourant les barres de contrôle. Cette hétérogénéité est prise en compte dans la bibliothèque préparée avec RESMOD.

4.4 Calcul des sensibilités du k_{eff}

Le tableau 4.3 présente les sensibilités intégrées⁷ de l'expérience VENUS à quelques sections efficaces particulièrement importantes.

Les valeurs de sensibilités intégrées sur le volume, les directions et l'énergie sont données en pourcent par pourcent. Par exemple, si l'on augmente le nombre de neutrons de fission (le $\bar{\nu}$) de ^{235}U de 1%, le k_{eff} devrait augmenter de 0,811%. Les réactions tendant à consommer des neutrons ont donc une sensibilité négative, alors que les réactions de fission ont une sensibilité positive.

Comme on peut s'y attendre, on voit que les données avec une sensibilité importante sont :

- les $\bar{\nu}$. La somme des sensibilités du k_{eff} à ces données est 1 puisque le k_{eff} est proportionnel au nombre de neutrons par fission. Ici la somme est légèrement différente, parce que d'autres

⁶Il faut à peine quelques minutes pour un calcul TWODANT (2D), alors qu'il faut quelques heures avec MCNP, suivant la précision statistique demandée.

⁷Ces calculs correspondent à ce qui sera montré dans la suite comme les résultats obtenus à partir des calculs 2D utilisant la bibliothèque de section efficace à 18 groupes fournie par W. Zwermann de GRS.

noyau	réaction	sensibilité (%/%)
H	(n,elas)	0,304
H	(n, γ)	-3,92e-2
O	(n,elas)	3,58e-2
	(n, γ)	-2,10e-5
	(n,p)	-8,45e-04
²³⁵ U	$\bar{\nu}$	0,811
	(n,fission)	0,321
	(n, γ)	-0,105
²³⁸ U	$\bar{\nu}$	8,12e-2
	(n,fission)	5,84e-2
	(n, γ)	-0,212
²³⁹ Pu	$\bar{\nu}$	0,102
	(n,fission)	4,78e-2
	(n, γ)	-2,77e-2

TAB. 4.3 – Sensibilités intégrées (%/%) du k_{eff} de VENUS aux réactions les plus importantes

noyaux interviennent minoritairement (²⁴⁰Pu, ²⁴¹Pu...) et ne sont donc pas présentés ;

- les sections efficaces de fission et de capture des noyaux fissiles ; bien sûr, ces noyaux fissionnent mieux qu'ils ne capturent. Une augmentation de 1% de la section efficace de capture radiative de l'²³⁵U diminuera le k_{eff} de 0,1% alors qu'un changement de la section efficace de fission de 1% l'augmentera de 0,3% ;
- la section efficace de capture de l'²³⁸U présent en très grande quantité dans un tel réacteur ;
- la section efficace de diffusion de l'hydrogène ; cette sensibilité tient compte de la variation de la section efficace de diffusion de l'hydrogène sa liaison à l'oxygène dans l'eau ;
- marginalement, d'autres réactions comme la diffusion de l'oxygène ou la capture radiative de l'hydrogène ; on retrouve dans les sensibilités le fait que l'oxygène consomme plus de neutrons par réaction (n,p) à haute énergie que par capture sur tout le spectre.

L'intérêt d'utiliser la théorie des perturbations est de pouvoir chiffrer systématiquement toutes les sensibilités pour chaque isotope, pour chaque réaction, pour chaque groupe d'énergie en réalisant seulement deux calculs-transports. Il est, par exemple, très facile d'obtenir les profils de la figure 4.6 page 80. De plus, il est possible de calculer la sensibilité à des sections efficaces dont la sensibilité est petite. Si l'on voulait obtenir cette sensibilité en faisant la diffé-

rence de deux calculs proches ; le résultat serait masqué, soit par les problèmes de convergence si on utilise un programme déterministe, soit par les problèmes de statistique si on utilise un programme stochastique. Il faudrait attendre longtemps un résultat finalement médiocre alors qu'avec la théorie des perturbations ce résultat est quasiment immédiat et précis. Il est obtenu sans calcul supplémentaire puisque seules les résolutions des équations du transport directe et adjointe sont nécessaires pour le calcul d'un nombre quelconque de sensibilités.

Si l'on ne possède pas de logiciel pour calculer les profils de sensibilités, une première approche est de tracer le taux de réaction en fonction de l'énergie. On obtient alors une idée de l'importance de chaque énergie puisque l'on connaît la contribution de la section efficace au bilan neutronique. Ceci revient à prendre une importance constante, égale à 1.

La figure 4.7 compare les profils de sensibilité du k_{eff} à la section efficace de capture sur l' ^{238}U , obtenus par deux méthodes : celle des perturbations et celle où l'on renormalise le taux de réaction pour que les sensibilités intégrées⁸ soient égales. Les différences sont relativement limitées, le taux de réaction étant légèrement trop petit (en valeur absolue) à basse énergie, et trop grand à haute énergie. Ceci est dû au fait qu'une capture à haute énergie est moins "importante" qu'une capture à basse énergie. Dans un réacteur à spectre thermique comme VENUS, l'impact d'une capture à basse énergie est plus pénalisante qu'une capture à haute énergie. Les neutrons lents ont un poids plus important que les neutrons rapides puisqu'ils ont survécu aux captures lors du ralentissement et sont donc d'une meilleure efficacité pour entretenir la réaction en chaîne. C'est cette notion d'importance que rajoute la théorie des perturbations. Cette fonction poids est égale à la fonction solution de l'équation adjointe.

La figure 4.8 81 représente le spectre neutronique et la fonction-importance en fonction de l'énergie.

4.4.1 Autoprotection des sections efficaces partielles

Le phénomène de l'autoprotection, décrit au paragraphe 3.2.2.1, demande un traitement particulier des sections efficaces dans la zone des résonances. SUS3D utilise les sections efficaces partielles multigroupes provenant du module GROUPE de NJOY [10] pour les calculs de sensibilité. Ces sections efficaces ne sont donc pas nécessairement celles utilisées par le programme de transport. GROUPE permet de produire des jeux de sections autoprotégées en utilisant le formalisme de Bodarenko. SUS3D ne peut utiliser pour un isotope donné, qu'une seule valeur de σ_0 , identique pour tous les groupes.

Les programmes d'autoprotection SCALE4.4[66] et TRANSX [65], mais aussi ceux utilisés à l'IPPE/Obninsk [60] servent essentiellement à choisir, pour chaque isotope et pour chaque

⁸Cette renormalisation pourrait être obtenue par un calcul de sensibilité direct par exemple.

groupe, la valeur de σ_0 ⁹. L'utilisation d'une unique valeur de σ_0 pour tout le spectre revient à faire l'hypothèse que l'autoprotection est relativement constante pour tous les groupes. En fait, il suffit que l'autoprotection soit constante pour les groupes avec une forte sensibilité pour que les résultats soient satisfaisants. Parmi toutes les valeurs de σ_0 , la valeur recommandée pour le calcul des sensibilités est donc celle correspondant à la zone en énergie la plus importante pour la section efficace considérée. Le profil de sensibilité permet de définir cette zone. Il est donc souvent utile de faire plusieurs itérations avec SUS3D pour trouver dans quelle partie du spectre l'observable est sensible à la section efficace et donc pour laquelle il est important de calculer l'autoprotection qui servira de nouveau à évaluer les sensibilités. Il n'est pas prévu, aujourd'hui, de développement de SUS3D pour lui permettre de lire et/ou d'extrapoler la section efficace effective à partir de sections efficaces calculées pour plusieurs valeurs de σ_0 par NJOY en fonction des résultats des calculs cellules. L'impact de cette hypothèse est relativement faible. Dans les cas particuliers où ce n'est pas le cas, il est encore possible d'introduire la section efficace transport directement dans SUS3D.

L'autoprotection des résonances n'est pas la seule étape permettant d'obtenir les sections efficaces nécessaires aux programmes de transport Sn . Il faut encore homogénéiser les sections efficaces pour obtenir les sections efficaces qui conservent les taux de réactions en géométrie homogène. SUS3D a été modifié récemment pour utiliser directement les sections efficaces données sous forme de vecteur par l'utilisateur. Il est donc possible d'entrer les sections efficaces du programme de transport préparée avec un spectre de pondération particulier calculée à plus de 10000 groupes avec RESMOD dans notre cas. Ce qui permet de s'affranchir, non seulement du choix du σ_0 , mais aussi des problèmes liés à l'utilisation de sections efficaces non homogénéisées.

Le tableau 4.4 présente, la sensibilité du k_{eff} à la section efficace de capture de l'²³⁸U obtenue en utilisant la meilleure valeur estimée du σ_0 et une spectre de pondération générique, et les rapports entre cette sensibilité et celles obtenues en utilisant les sections efficaces d'absorption avant ou après homogénéisation (cf. le chapitre 3.2.2.3) par W. Zwermann.

A haute énergie, les sensibilités sont très différentes parce qu'elles ne recoupent pas la même définition. Dans le cas de l'utilisation des sections efficaces NJOY, il s'agit de la section efficace de capture radiative¹⁰ alors que dans les autres cas, il s'agit de la section efficace d'absorption. Comme à hautes énergies, des réactions à seuil peuvent avoir lieu comme par exemple la réaction (n,p), la section efficace d'absorption est nettement plus importante que celle de capture. Il faut remarquer que cette zone en énergie n'est pas cruciale pour les réacteurs critiques (peu de neutrons de fissions apparaissent au-delà de 3MeV), ce qui se traduit d'ailleurs par une sensibilité

⁹Si cette valeur n'a pas été calculée par NJOY, ils interpolent la section efficace à partir des valeurs existantes déjà calculées.

¹⁰correspondant à la dénomination MT102 du format ENDF

Energie Min(eV)	Energie Max (eV)	sensibilité S_{σ_0} données NJOY (%/%)	$\frac{S_{\sigma_0}}{S_{\sigma_{sanshom}}}$	$\frac{S_{\sigma_0}}{S_{\sigma_{avechom}}}$
1,00e-5	1,75e-2	-9,672e-4	0,962	0,746
1,75e-2	3,00e-2	-1,334e-2	0,997	0,855
3,00e-2	5,00e-2	-1,954e-2	0,996	0,890
5,00e-2	1,00e-1	-1,936e-2	0,986	0,913
1,00e-1	4,00e-1	-8,205e-3	1,029	0,981
4,00e-1	3,059	-3,598e-3	1,004	0,991
3,059	1,068e+1	-3,265e-2	0,932	0,893
1,068e+1	2,902e+1	-2,204e-2	1,128	1,091
2,902e+1	1,013e+2	-2,123e-2	1,268	1,239
1,013e+2	5,830e+2	-1,230e-2	1,112	1,094
5,830e+2	3,035e+3	-8,156e-3	1,010	1,002
3,035e+3	1,503e+4	-5,430e-3	1,001	0,997
1,503e+4	9,804e+4	-3,449e-3	0,964	0,968
9,804e+4	4,076e+5	-2,214e-3	0,982	1,010
4,076e+5	9,072e+5	-3,208e-3	1,028	1,070
9,072e+5	1,423e+6	-2,710e-3	1,528	1,596
1,423e+6	3,012e+6	-1,123e-3	13,37	13,93
3,012e+6	1,964e+7	-1,664e-5	217,6	226,5
sensibilité intégrée		-0.207	-0.204	-0.204

TAB. 4.4 – Comparaison des sensibilités du k_{eff} à la section efficace de capture de l' ^{238}U en fonction des sections efficaces utilisées

très faible du k_{eff} . Ces problèmes de définition illustrent la difficulté de l'utilisation des sections efficaces du programme de transport pour les calculs de sensibilités. Ceux-ci étant à l'interface entre le monde des physiciens nucléaires et celui des physiciens des réacteurs, il a fallu choisir un vocabulaire. Le choix de SUS3D est d'utiliser les sections efficaces partielles de base.

Comme attendu, le profil des sensibilités utilisant les sections efficaces NJOY est très proche de celui utilisant les sections efficaces autoprotégées avant homogénéisation à quelques pourcent près dans la plupart des groupes. Ces résultats pourraient éventuellement être légèrement améliorés en utilisant plusieurs valeurs de σ_0 , de manière à prendre plus finement en compte l'effet de l'autoprotection, en particulier dans les groupes incluant des très grandes résonances, au prix d'un effort de programmation relativement important.

L'effet de l'homogénéisation se fait surtout sentir à basse énergie, lorsque les sections efficaces deviennent très grandes¹¹. Alors le libre parcours moyen diminue nettement et les effets d'espace de l'autoprotection ne sont plus négligeables. Ainsi dans le bas de la bosse thermique, l'écart entre les sections efficaces homogénéisées ou non, et donc entre les sensibilités utilisant ces sections efficaces, peut atteindre quelques dizaines de pourcent. Ceci est relativement gênant puisque la sensibilité à la section efficace de capture est grande dans cette zone.

En résumé, les hypothèses faites lors de l'utilisation de SUS3D sont les suivantes : utilisation d'une seule valeur de σ_0 et de sections efficaces non homogénéisées. Elles conduisent, dans le pire des cas¹², à des biais de l'ordre de quelques pourcent dans la plupart des groupes et de quelques dizaines pour les groupes contenant de grandes résonances et à basse énergie. Pour les quelques cas les plus importants¹³, il est recommandé d'utiliser la nouvelle capacité de SUS3D permettant de lire les sections efficaces disponibles sous forme de vecteurs dans le programme de transport. Il revient alors à l'utilisateur de prêter attention aux définitions des sections efficaces.

Reste un problème pour les cas de sections efficaces apparaissant dans le terme de gain sous forme de matrices (fission, diffusion) des noyaux résonants. Ces noyaux ont souvent des sections efficaces de diffusion relativement faibles et NJOY peut fournir plusieurs matrices avec des σ_0 différents. La diffusion n'est donc pas un vrai problème. Par contre, NJOY ne sait fournir la matrice de fission que pour un seul σ_0 correspondant à une dilution infinie. Or, toutes les sensibilités sont normalisées à la somme des sensibilités aux $\bar{\nu}$ par définition du k_{eff} comme le rapport entre les neutrons produits par fission et leur disparition. Ce terme est aussi le terme de gain de la sensibilité du k_{eff} aux sections efficaces de fission. Cette limitation de NJOY modifie

¹¹On dit qu'elles évoluent en " $1/v$ " où v est la vitesse du neutron, d'autant plus petite que son énergie cinétique est petite.

¹²celui d'un noyau possédant de très grandes résonances à très basse énergie, présent en très grande quantité, dont les résonances sont donc très autoprotégées.

¹³ceux pour lesquels l'autoprotection est très importante et très dépendante de l'énergie

toutes les sensibilités.

Nous pouvons toutefois corriger partiellement les résultats pour prendre en compte l'autoprotection des sections efficaces de fission et estimer l'impact de cette correction sur le résultat. En effet, jusqu'à des énergies de neutrons incidents relativement importantes, la matrice de fission, c'est-à-dire la matrice donnant le nombre de neutrons de fission arrivant dans le groupe g' à partir d'une fission dans le groupe g , peut se simplifier, puisque le spectre des neutrons de fission est peu dépendant de l'énergie du neutron incident :

$$\chi \nu \sigma_f(g \rightarrow g') \approx \chi_{g'} \nu \sigma_f^g \quad (4.4)$$

Ainsi, on peut corriger les sensibilités du $\bar{\nu}$ à la section efficace de fission, en divisant la sensibilité du groupe g par la section efficace non protégée du groupe g et en multipliant par la section efficace autoprotégée :

$$S_{\bar{\nu}_g}^{corr} \approx \frac{\sigma_{f,\sigma_0}^g}{\sigma_{f,\sigma_0=\infty}^g} * S_{\bar{\nu}_g} \quad (4.5)$$

Les tableaux 4.5 et 4.6 présentent les valeurs corrigées des sensibilités du k_{eff} au $\bar{\nu}$ des principaux noyaux fissiles de VENUS : l' ^{235}U et le ^{239}Pu . Dans les groupes correspondant aux grandes résonances, l'autoprotection a un effet important, qui atteint quelques dizaines de pourcent. L'autoprotection ayant tendance à diminuer les sections efficaces, la sensibilité corrigée est plus petite. La normalisation à 1 de la somme des sensibilités au $\bar{\nu}$ impose, dans la plupart des groupes, une correction égale au changement de normalisation de 2,74%.

4.4.1.1 Effets de la mise en groupe

Nous avons comparé les résultats du benchmark basé sur des bibliothèques préparées différemment. Le tableau 4.7 présente les sensibilités intégrées obtenues à partir des calculs directs et adjoints utilisant ces deux bibliothèques. Pour que la comparaison soit intéressante, nous avons utilisé dans les deux cas la procédure classique pour la préparation des données utilisées dans SUS3D. Cette procédure n'est pas optimisée, mais elle donne rapidement des résultats très vraisemblables contenant l'essentiel de la physique que l'on cherche.

Le tableau 4.7 montre que les écarts sont relativement importants pour les réactions sur l' ^{238}U et surtout sur le ^{239}Pu . Nous avons montré que nous avons du mal à prévoir les taux de fission puisque nous sous-estimons ce taux dans la zone MOX par rapport aux autres participants avec la bibliothèque préparée avec SCALE. Cette sous-estimation d'un peu plus de 5% des taux de fission se traduit par une sous-estimation de la sensibilité d'environ 10%. Il est important de souligner que la sensibilité est le produit du flux et de la fonction-importance, ainsi il n'est pas

Energie Min(eV)	Energie Max (eV)	$S_{k_{eff}}^{\bar{\nu}}$ ^{235}U corrigée	Correction ^{235}U $\frac{\sigma_{f,\sigma_0}^g}{\sigma_{f,\sigma_0=\infty}^g}$	$S_{k_{eff}}^{\bar{\nu}}$ ^{239}Pu corrigée	Correction ^{239}Pu $\frac{\sigma_{f,\sigma_0}^g}{\sigma_{f,\sigma_0=\infty}^g}$
1,00e-5	1,75e-2	1,233e-1	0,983	8,309e-3	0,980
1,75e-2	3,00e-2	1,077e-1	1,025	7,734e-3	1,025
3,00e-2	5,00e-2	1,395e-1	1,026	1,092e-2	1,026
5,00e-2	1,00e-1	1,719e-1	1,025	1,645e-2	1,027
1,00e-1	4,00e-1	1,308e-1	1,025	4,100e-2	0,796
4,00e-1	3,06	4,068e-2	1,014	6,178e-3	0,902
3,06	1,07e+1	1,612e-2	0,922	1,116e-3	0,799
1,07e+1	2,90e+1	1,844e-2	0,936	3,425e-3	0,776
2,90e+1	1,01e+2	2,168e-2	0,975	2,370e-3	0,880
1,01e+2	5,83e+2	1,620e-2	1,014	1,621e-3	0,971
5,83e+2	3,04e+3	7,155e-3	1,024	5,275e-4	1,019
3,04e+3	1,50e+4	3,531e-3	1,028	2,658e-4	1,026
1,50e+4	9,80e+4	2,781e-3	1,028	2,729e-4	1,027
9,80e+4	4,08e+5	2,630e-3	1,027	3,595e-4	1,027
4,08e+5	9,07e+5	2,098e-3	1,027	3,649e-4	1,027
9,07e+5	1,42e+6	1,324e-3	1,027	2,429e-4	1,027
1,42e+6	3,01e+6	2,687e-3	1,027	5,074e-4	1,027
3,01e+6	1,96e+7	3,017e-3	1,028	4,484e-4	1,027

TAB. 4.5 – Sensibilités au $\bar{\nu}$ de l' ^{235}U et du ^{239}Pu corrigées et impact de la correction du k_{eff}

	^{235}U corrigée	^{235}U non corrigée	^{239}Pu corrigée	^{239}Pu non corrigée
sensibilité intégrée	0,812	0,802	0,102	0,114

TAB. 4.6 – Impact de la correction sur les sensibilités intégrées au $\bar{\nu}$ de l' ^{235}U et du ^{239}Pu du k_{eff}

noyau	réaction	sensibilité 18g(%/%)	sensibilité 199g(%/%)
H	(n,elas)	0,304	0,304
	(n, γ)	-3,92e-2	-4,05e-2
O	(n,elas)	3,58e-2	3,47e-2
	(n, γ)	-2,10e-5	-2,13e-5
²³⁵ U	$\bar{\nu}$	0,811	0,852
	(n,fission)	0,321	0,349
	(n, γ)	-0,105	-0,110
²³⁸ U	$\bar{\nu}$	8,12e-2	6,22e-2
	(n,fission)	5,84e-2	4,06e-2
	(n, γ)	-0,212	-0,200
²³⁹ Pu	$\bar{\nu}$	0,102	8,92e-2
	(n,fission)	4,78e-2	4,32e-2
	(n, γ)	-2,77e-2	-2,37e-2

TAB. 4.7 – Comparaison des sensibilités intégrées (%/%) du k_{eff} de VENUS aux réactions les plus importantes calculées à partir des données à 199 groupes préparées avec SCALE4.4 ou de la bibliothèque à 18 groupes préparée par W.Zwermann avec RESMOD

étonnant d'avoir des écarts plus importants sur la sensibilité que sur le taux de réaction. Les écarts entre nos calculs et ceux des autres participants viennent de la difficulté d'autoprotéger les résonances larges avec nos outils et de l'absence de calculs d'homogénéisation aux interfaces. Ces problèmes de préparation des données sont vraisemblablement à l'origine des écarts sur les sensibilités.

La figure 4.9 page 82 montre les profils des sensibilités à la capture du ²³⁹Pu et de l'²³⁸U. L'utilisation d'un découpage en énergie fin permet de discerner la structure fine de la sensibilité. Ainsi, on voit bien l'importance des premières résonances de capture de l'²³⁸U. Toutefois, l'utilisation d'un découpage fin est insuffisante pour obtenir de bons résultats, comparables à ceux obtenus avec 18 groupes mais avec des techniques de traitement des résonances plus évoluées.

Enfin, on voit que la sous-estimation de la sensibilité par les calculs utilisant la bibliothèque à 199 groupes à la section efficace de fission du ²³⁹Pu est essentiellement limitée aux basses énergies et à la première grande résonance à 0,3 eV. Cela vient renforcer notre interprétation des écarts avec l'autre bibliothèque, à la fois pour les taux de réaction et pour les sensibilités intégrées, par l'inadaptation de nos outils à l'autoprotection des résonances larges et à l'absence

d'homogénéisation pour traiter les effets d'interfaces. Mais ceux-ci sont importants pour la zone MOX, puisqu'elle est située à proximité de la cuve et des réflecteurs radiaux.

Nos investigations donnent une bonne idée de l'impact des hypothèses faites lors de l'autoprotection des sections efficaces, non seulement sur les calculs transports, mais aussi sur les sensibilités de ces calculs aux sections efficaces. Notre expérience montre qu'il est probablement plus important d'utiliser une bibliothèque très bien préparée qu'une bibliothèque avec beaucoup de groupes, mais moins élaborée. Non seulement le gain en temps de calcul est appréciable mais en plus les informations supplémentaires obtenues avec un découpage plus fin ne sont pas utiles pour notre application (les calculs d'incertitudes de réacteurs innovants) puisque les données d'incertitudes sont elles-mêmes rarement distribuées sur un découpage fin.

4.4.1.2 Effets géométriques

La modélisation 3D est nettement supérieure à la 2D, XY, pour estimer le k_{eff} de systèmes innovants, puisque nous avons vu au chapitre 4.3.1.1 qu'il n'est pas nécessaire de recalculer le programme en utilisant un paramètre bien choisi permettant la prise en compte des fuites axiales.

Cette amélioration de l'estimation du coefficient de multiplication a un impact important sur les temps de calcul qui augmentent d'environ un ordre de grandeur. Nous avons étudié la possibilité d'utiliser des machines parallèles, de manière à surmonter cette difficulté [75]. Nous avons pris contact avec le groupe d'Ali Haghghat de l'université de Floride qui développe le programme *Sn* PENTRAN [76], et nous pensions utiliser PARTISN [77] la nouvelle version parallélisée de DANTSYS. Malheureusement, le non-renouvellement de l'accord d'échange de programmes entre la banque de données de l'AEN/OCDE et son homologue nord américaine RSICC, nous a empêché d'utiliser ces programmes. Nous avons voulu savoir dans quelle mesure la géométrie 2D peut suffire à estimer les sensibilités du k_{eff} sachant que k_{eff} est lui même relativement mal connu dans ce cas. Le tableau 4.1 du paragraphe 4.3.1.1 montre qu'il est facile de faire une erreur de quelques pourcent en utilisant une valeur mal adaptée de paramètre d'ajustement des fuites .

Le tableau 4.8 rappelle les sensibilités calculées à 2D et montre les écarts entre les sensibilités intégrées calculées avec une modélisation du cœur à 3D, et celles calculées avec une modélisation à 2D. Excepté pour les réactions sur les noyaux hydrogène et oxygène, l'effet de la troisième dimension (3D) est transparent. La prise en compte effective des réflecteurs axiaux et des fuites n'a quasiment pas d'effet. Dans la zone combustible, on peut dire que le spectre (dont dépendent directement les sensibilités) est suffisamment bien calculé en 2D pour rendre compte très précisément de la physique des sensibilités. En fait, la prise en compte du changement de spectre à l'interface avec le réflecteur n'est pas nécessaire *pour le calcul des sensibilités*.

On voit que dans le calcul 3D, les sensibilités aux sections efficaces des noyaux présents dans l'eau sont systématiquement surestimés. L'apport décisif du calcul 3D est la prise en compte des réflecteurs axiaux, de l'eau dans le cas de ce réacteur. Cet effort supplémentaire de modélisation est nécessaire pour calculer le k_{eff} sans recalage du modèle. Le modèle 3D contient donc plus d'eau que le modèle 2D. La dernière colonne du tableau montre le calcul des sensibilités pour les mêmes sections efficaces lorsque l'on ne prend pas en compte les zones du réacteur qui sont absentes dans la modélisation 2D pour le calcul des sensibilités 3D. Les sensibilités 3D corrigées de l'effet de volume "ressemblent" beaucoup plus aux sensibilités 2D sauf, la sensibilité à la section efficace de diffusion de l'oxygène.

noyau	réaction	2D	$\frac{3D}{2D}$	$\frac{3D_{corrigé}}{2D}$
H	(n, γ)	-3,92e-2	1,20	1,00
	(n,elas)	0,304	1,15	1,06
O	(n,elas)	3,58e-2	1,42	1,30
	(n, γ)	-2.10e-5	1,08	1,00
	(n,p)	-8,45e-4	0,99	0,98
^{10}B	(n, γ)	-3,18e-2	0,98	sans objet
^{235}U	$\bar{\nu}$	0,811	1,00	
	(n,fission)	0,321	1,01	
	(n, γ)	-0,105	0,99	
^{238}U	$\bar{\nu}$	8,12e-2	0,99	
	(n,fission)	5,84e-2	1,00	
	(n, γ)	-0,212	0,97	
^{239}Pu	$\bar{\nu}$	0,102	1,00	
	(n,fission)	4,78e-2	1,00	
	(n, γ)	-2,77e-2	1,00	

TAB. 4.8 – Comparaison des sensibilités intégrées (%/%) du k_{eff} de VENUS aux réactions les plus importantes calculées à partir de résultats 2D, 3D et incluant la correction du volume en 3D

Ainsi, l'impact d'une géométrie 2D n'est pas trop important pour le calcul des sensibilités, en particulier pour la contribution des noyaux lourds du combustible. Pour continuer à valider les calculs 2D pour les calculs de sensibilités, il est important de connaître l'impact du choix du paramètre des fuites pour affiner la compréhension de l'importance de l'hypothèse faite.

Les données de la bibliothèque de Zwermann contiennent déjà la correction nécessaire pour

que le facteur de multiplication soit égal à 1. Observer l'impact de la correction faite par les programmes de transport n'a donc pas de sens avec cette bibliothèque. Le tableau 4.9 présente la comparaison des sensibilités obtenues avec deux calculs faits avec des *hauteurs extrapolées* différentes. Le calcul 2D de référence est fait avec la hauteur extrapolée (64 cm) proposée dans le benchmark, donnant un k_{eff} de 1,02536. Le second calcul est fait avec une hauteur extrapolée ajustée pour que le réacteur soit critique ($BGHT=52cm$), ce qui donne un $keff=1,00304$. Le code TWODANT prend en compte le laplacien axial en augmentant légèrement les sections efficaces de disparitions¹⁴, pour rendre compte de la fuite des neutrons dans un réacteur de hauteur finie. De même que cette modification a un faible impact sur le k_{eff} , elle a un impact très faible sur le spectre et donc sur les sensibilités, sauf pour quelques réactions très absorbantes dont l'impact sur le spectre est très important comme le (n, α) du bore et la capture du ²³⁹Pu.

noyau	réaction	sensibilité intégrée BGHT=64cm	$\frac{S_{BGHT=52cm}}{S_{BGHT=64cm}}$
H	(n, γ)	-4,05e-2	0,99
¹⁰ B	(n, γ)	-3,18e-2	1,13
O	(n, γ)	-2,13e-5	0,99
²³⁵ U	$\bar{\nu}$	0,852	1,00
	(n,fission)	3,49	1,01
	(n, γ)	-0,110	1,00
²³⁸ U	$\bar{\nu}$	6,22e-2	1,02
	(n,fission)	4,06e-2	1,02
	(n, γ)	-0,200	1,01
²³⁹ Pu	$\bar{\nu}$	8,92e-2	0,98
	(n,fission)	4,32e-2	0,98
	(n, γ)	-2,37e-2	0,96

TAB. 4.9 – Comparaison des sensibilités intégrées (%/%) du k_{eff} de VENUS aux réactions les plus importantes calculées à partir de deux calculs 2D utilisant des valeurs de hauteurs extrapolées différentes

¹⁴c'est-à-dire les sommes des sections efficaces des réactions consommatrices de neutrons

4.4.2 Analyse d'incertitude

Les résultats du benchmark obtenus avec la bibliothèque à 18 groupes de W. Zwermann (GRS) sont excellents. La concordance avec des résultats expérimentaux prouve que la physique est bien maîtrisée, au pourcent près. Nous avons donc une bonne confiance dans les calculs de sensibilité basés sur l'utilisation de cette bibliothèque. L'utilisation d'une bibliothèque avec un découpage en énergie plus fin n'apporte pas beaucoup plus d'informations. On préfère donc utiliser la bibliothèque la plus élaborée, même si elle décrit moins finement les profils de sensibilités. De plus, nous avons démontré que les hypothèses sur la géométrie de la modélisation avaient un impact faible sur ces sensibilités. L'utilisation des sections efficaces partielles sortant directement du module GROUPR de NJOY, change de quelques dizaines de pourcent les sensibilités dans quelques groupes, à cause du manque d'homogénéisation et de l'utilisation d'un unique paramètre d'autoprotection pour tout le spectre. L'impact de cette dernière limitation de la méthode peut être contourné, grâce à l'ajout récent de la possibilité d'entrer dans SUS3D les sections efficaces effectives utilisées pour le calcul de transport.

Nous disposons donc d'une base solide de sensibilités sur laquelle il est possible de construire une analyse d'incertitude. Le tableau 4.10 présente les principales contributions des données nucléaires à l'incertitude du k_{eff} de l'expérience VENUS2. Quand une alternative aux données de JENDL existe, elle est donnée pour comparaison. Si la bibliothèque JENDL est appréciée pour la disponibilité de ces incertitudes, on lui préfère d'autres sources qui semblent plus vraisemblables en particulier pour les incertitudes sur la capture du ^{238}U et la fission du ^{239}Pu et la fission du ^{235}U pour laquelle nos versions de ERRORJ et des données ne nous permettent pas de calculer de matrice de covariance au-delà des résonances résolues. Ainsi, le total de la colonne des incertitudes IRDF correspond à la somme des contributions de JENDL sauf pour les réactions dont les incertitudes sont disponibles dans IRDF.

A partir de différentes sources d'incertitudes, nous obtenons des résultats sensiblement différents. La comparaison des totaux indique que **l'incertitude totale apportée par les données nucléaires sur le calcul du k_{eff} est de l'ordre de 500 pcm.**

Les principales contributions à cette incertitude sont¹⁵ :

- la section efficace de capture de l' ^{238}U . Le résultat de JENDL est nettement surestimé à cause de la procédure de propagation de l'incertitude des paramètres de résonance sur la section efficace comme nous l'avons vu au chapitre 2.4.4. Cette procédure a tendance à surestimer l'incertitude dans les groupes où justement la sensibilité est maximale. La prépondérance de cette réaction dans l'incertitude du calcul des Réacteurs à Eau sous Pression (REP) est connue de la communauté. Une partie de l'incertitude sur les résonances

¹⁵L'ordre est légèrement différent selon la source des incertitudes utilisée.

isotope	donnée	sensibilité (%/%)	incertitude JENDL3.2 (pcm)	incertitude IRDF90 (pcm)
H	(n, γ)	-3,92e-2	20	
	(n,elas)	0,304	76	
B	$\sigma_{(n,\alpha)}$	-3,18e-2	21	
^{238}U	ν	8,12e-2	49	31
	σ_{fiss}	5,84e-2	19	
	σ_{capt}	-0,212	691	
^{235}U	ν	0,811	237	62
	σ_{fiss}	0,321	2,2	
	σ_{capt}	-0,105	3,2	
^{239}Pu	ν	0,102	9,4	16
	σ_{fiss}	4,78e-2	167	
	σ_{capt}	-2,77e-2	64	
Total			774	333

TAB. 4.10 – Contribution des données nucléaires importantes à l'incertitudes du k_{eff} de VENUS calculées à partir de différentes bases de données. Lorsqu'une alternative aux incertitudes de JENDL est disponible, elle est utilisée. Alors, les corrélations entre réactions ne peuvent pas être prises en compte

s'explique par le fait que les données de la référence [78] ont été perdues. Récemment, un gros travail d'évaluation de cette réaction a été mené conjointement par le CEA (à Cadarache pour la partie des résonances résolues, à Bruyères-le-Chatel pour la partie à plus haute énergie) et par l'Oak Ridge National Laboratory [79, 80]. En particulier, les paramètres des résonances résolues sont désormais les mêmes dans les bases américaine (dans ENDFB-VII) et européenne (dans JEFF3.1). Il n'est donc plus possible d'estimer l'incertitude sur les données en comparant les résultats de ces deux bases de référence. Bien que ces données soient aujourd'hui disponibles, elles ne sont pas fournies avec de nouvelles matrices de covariance. Il n'est donc pas possible de quantifier l'apport du travail accompli sur la réduction des incertitudes sur les applications.

- le $\bar{\nu}$ et la section efficace de fission de ^{235}U . ^{235}U est d'ailleurs la nouvelle cible des évaluateurs des deux côtés de l'Atlantique.
- les données sur le ^{239}Pu .

- la section efficace de diffusion élastique sur l’hydrogène. L’incertitude sur la section efficace de diffusion de l’atome seul est relativement bien connue comme le démontre le faible impact de cette donnée malgré la forte sensibilité. La simplicité (relative) du noyau cible et donc de l’interaction avec les neutrons explique cette bonne connaissance. La section efficace de diffusion élastique de l’hydrogène lié à l’oxygène de l’eau est par contre nettement plus difficilement modélisable (cf. chapitre 2.1.1). Récemment, de gros efforts ont été faits [81] pour améliorer les modèles et les données permettant de mieux simuler la partie thermique du spectre, vitale pour de nombreux concepts comme les High Temperature Reactors (HTR) modérés par du carbone sous forme de graphite.

4.5 Calculs des sensibilités des taux de réaction

L’objectif était de pouvoir calculer la sensibilité d’un rapport de taux de réaction à n’importe quelle réaction, l’exemple typique qui nous intéresse pour les réacteurs innovants étant la régénération. Dans un réacteur critique, tous les taux de réaction sont normalisés¹⁶ et correspondent donc à ce genre d’observable. La théorie exposée dans la partie 3.3.1.3 montre qu’il est possible de calculer cette sensibilité à partir du flux direct et d’une fonction-importance bien particulière. Cette solution doit être solution de l’équation adjointe à source 3.36, avec la dérivée du rapport de taux de réaction comme source. Une condition additionnelle est que cette fonction soit orthogonale à la source de fission directe. En théorie, il faut aussi vérifier que la source adjointe soit orthogonale au flux direct. Notre problème est particulièrement difficile ; il nécessite le calcul, à l’échelle du réacteur, de cette fonction-importance puisque la régénération est souvent obtenue grâce à des couvertures, ce qui suppose une forte dépendance géométrique de la fonction-importance. Il n’est donc pas possible d’utiliser ce qui existe à l’échelle du calcul cellule dans DRAGON [82] ou APOLLO2 [83] par exemple. De même, le réacteur qui nous intéresse est un réacteur au thorium de spectre épithermique. L’utilisation des outils disponibles dans le programme ERANOS [84] pour les réacteurs à neutrons rapides est donc discutée. Il n’existe pas à notre connaissance de programme disponible aujourd’hui pour trouver une solution à ce problème.

Malheureusement, le travail entrepris ici n’a pas abouti à ce jour. Nous décrivons ici les problèmes techniques rencontrés ainsi que les pistes utilisées pour tenter de les surmonter. Nous disposons d’un problème de test physiquement intéressant. Nous avons vu qu’une tendance nette des participants aux benchmarks VENUS était de surestimer les taux de fission dans la zone MOX. Nous voudrions donc calculer les sensibilités et les incertitudes du taux de fission aux

¹⁶le niveau du flux étant imposé par la puissance, on peut considérer que tous les taux de réaction sont normalisés au taux de fission

sections efficaces pour essayer de comprendre ces écarts. Les exercices imaginés sont donc basés sur le calcul de la fonction-importance liée au taux de fission dans une aiguille de combustible. L'exercice est intéressant, parce que VENUS est un réacteur thermique représentatif des difficultés numériques de ces réacteurs, liées aux remontées de neutrons dans la bosse thermique. De plus, sa petite taille fait que la résolution numérique n'est pas très longue. Enfin, nous le connaissons bien et le problème posé contient suffisamment de physique pour pouvoir apprécier grossièrement la vraisemblance des solutions numériques.

4.5.1 Impossibilité de résoudre une équation à source négative

Nous cherchons à calculer la sensibilité du rapport entre le taux de fission dans une aiguille positionnée dans le centre de la zone UO2 enrichie à 3% et le taux de fission dans tout le réacteur :

$$R = \frac{\langle \sigma_{aiguille}^{fission}, \phi \rangle}{\langle \sigma_{reacteur}^{fission}, \phi \rangle} \quad (4.6)$$

Nous avons vu au chapitre 3.3.1.3 que pour calculer les sensibilités à une telle observable, il fallait résoudre l'équation à source adjointe 3.36, la source étant :

$$\frac{\partial R}{\partial \phi} = R \left(\frac{\sigma_{aiguille}^{fission}}{\langle \sigma_{aiguille}^{fission}, \phi \rangle} - \frac{\sigma_{reacteur}^{fission}}{\langle \sigma_{reacteur}^{fission}, \phi \rangle} \right) \quad (4.7)$$

Cette source est bien orthogonale au flux direct, il existe donc bien des solutions à l'équation adjointe.

Il ne "reste" plus qu'à rechercher, parmi les solutions de l'équation adjointe à source, celle qui est orthogonale à la source de fission directe et qui vérifie donc l'équation 3.33.

Nous avons calculé la source à partir d'un calcul direct très bien convergé, en utilisant des critères de convergence¹⁷ de 10^{-7} . La source trouvée est bien orthogonale au flux : grâce à un programme que nous avons écrit, on peut vérifier que le produit scalaire du flux par la source est bien nul à 10^{-6} près, ce qui est en accord avec les critères de convergence sur le flux.

La source de l'équation 4.7 est "à moitié" négative¹⁸. De même la solution cherchée est à moitié négative de manière à être orthogonale à la source de fission directe, elle aussi définie positive. Or les programmes *Sn* ne sont pas prévus pour calculer des flux négatifs. En particulier, une solution négative est une aberration numérique que les programmes de transport s'empressent de corriger. De même, les programmes de BOT3P destinés au tracé des fonctions émettent un

¹⁷c'est-à-dire que le calcul s'arrête lorsque l'écart entre les valeurs propres calculées par deux itérations successives est inférieur à 10^{-7}

¹⁸Elle est orthogonale au flux direct, c'est-à-dire que l'intégrale de son produit par une observable définie positive est nulle.

message d'erreur lorsqu'ils lisent des valeurs négatives. Nous avons donc programmé des fonctions *signe* et *valeur absolue* pour pouvoir observer les solutions numériques.

Les figures 4.10 et 4.11 donnent le signe et la valeur absolue de la solution au problème trouvé par DORT. Le code DORT possède une option pour désactiver la correction des flux négatifs qui a été utilisée ici. Cependant, la source est positive d'après la définition de l'équation 4.7 et l'on s'attend donc à la voir entourée de valeurs d'importance positives¹⁹. Le graphe du signe montre que le crayon est entouré de valeurs négatives. L'option de DORT semble donc inopérante, voire dangereuse, puisque le programme converge vers une solution aberrante. Il faut donc trouver une autre méthode de résolution numérique.

L'utilisation de TWODANT pour le même problème est encore plus décevante. Le code TWODANT est un excellent programme de calcul de criticité : il est sûr, rapide grâce à l'accélération par des méthodes de diffusion, et très pratique pour l'utilisateur. Il a aussi les défauts de ses qualités puisque dans un cas difficile comme le nôtre, où l'on utilise les programmes en dehors des modèles pour lesquels ils sont prévus, nous ne pouvons aider le programme puisque nous n'avons pas accès aux différentes options de convergence.

4.5.2 Schéma numérique proposé

L'équation 3.36 est résolue de manière itérative grâce à la convergence de la suite $\Gamma^*_{(n)}$, définie par la récurrence 4.8, vers la fonction Γ^* .

$$\Gamma^*_{(0)} = 0 \quad (4.8)$$

$$\frac{\partial R}{\partial \phi} + \lambda F^* \Gamma^*_{(n)} = B^* \Gamma^*_{(n+1)} \quad (4.9)$$

En utilisant un programme de transport pour inverser l'opérateur B^* , on calcule cette suite jusqu'à un ordre suffisant pour satisfaire un critère de convergence. Par exemple, on peut stopper la convergence lorsque, pour tous les points du réacteur, $\epsilon_n(x, y, z)$ est inférieur à une valeur petite arbitraire et où $\epsilon_n(x, y, z)$ est tel que :

$$\epsilon_n(x, y, z) = \frac{|\Gamma^*_{(n)} - \Gamma^*_{(n-1)}|}{|\Gamma^*_{(n)}|} \quad (4.10)$$

Comme les programmes de transport n'admettent pas de flux négatif, il existe un problème, dès la première itération, pour calculer $\Gamma^*_{(1)}$ par la résolution de l'équation suivante :

¹⁹Ce qui traduirait que les neutrons qui apparaîtraient près du crayon étudié aurait une grande probabilité de produire une fission dans ce crayon et donc de contribuer positivement au taux de réaction. Réciproquement, les neutrons apparaissant plus loin, provoqueraient plus souvent des fissions en dehors de ce crayon, diminuant d'autant le taux de fission relatif dans l'aiguille.

$$\frac{\partial R}{\partial \phi} + \lambda F^* \Gamma^*_{(0)} = B^* \Gamma^*_{(1)} \quad (4.11)$$

$$\frac{\partial R}{\partial \phi} + 0 = B^* \Gamma^*_{(1)} \quad (4.12)$$

En effet, la source est partiellement négative, comme l'opérateur de transport est défini positif, une partie de $\Gamma^*_{(1)}$ est négative.

La solution proposée par Childs [85] est de "découper" la source²⁰ en deux parties : la partie positive et la partie négative dont on inverse le signe. En procédant ainsi à chaque itération, le programme de transport ne "voit" jamais de source négative. Il n'a à résoudre qu'un exercice classique de propagation de source, sans fission, en mode adjoint. Pour préparer l'itération suivante, on reconstitue la fonction $\Gamma^*_{(n)}$ à partir des deux solutions et on redécoupe la source pour l'itération et ainsi de suite.

Cette solution élégante, permet d'éliminer les effets de corrections de zéro. Bien sûr, elle demande deux fois plus de temps de calcul, puisque à chaque itération, il faut résoudre deux équations du transport. Les deux calculs adjoints à source sont complètement indépendants à l'intérieur de chaque itération. Dans une application systématique de ces outils, ils pourraient être facilement parallélisés.

Pour s'assurer que l'on converge bien vers la solution qui ne contient pas l'adjoint classique et vérifie bien l'équation 3.33, il est possible de décontaminer la source à chaque itération, c'est-à-dire de rendre la solution adjointe orthogonale à la source directe.

On définit α_n à chaque itération par :

$$\alpha_n = \frac{\langle \Gamma^*_{(n)}, F\phi \rangle}{\langle \phi^*_{(n)}, F\phi \rangle} \quad (4.13)$$

Ne serait-ce qu'à cause des arrondis, α_n est différent de zéro, c'est-à-dire que la fonction adjointe n'est pas orthogonale à la source directe. On construit alors, la fonction adjointe $\tilde{\Gamma}^*_{(n)}$, elle aussi solution de 3.36, telle que :

$$\tilde{\Gamma}^*_{(n)} = \Gamma^*_{(n)} - \alpha_n \phi^* \quad (4.14)$$

Par définition, cette fonction est orthogonale à la source directe. C'est elle qui sera utilisée pour calculer la source de l'itération $(n+1)$.

Sans décontamination systématique, les effets d'accumulation d'erreurs d'arrondi et les autres problèmes de convergence risqueraient de faire diverger le problème. En effet, il existe une infinité

²⁰C'est-à-dire la somme de la source adjointe généralisée et la source de fission calculée grâce à la solution de l'itération précédente.

de solutions de l'équation 3.36. Si rien n'empêche le programme d'être contaminé par l'adjoint classique à chaque itération, il n'y a pas de raison pour qu'il converge vers une solution finie.

4.6 Conclusion

Nous avons écrit un programme et les scripts permettant de :

- lire et écrire tous les fichiers de flux directs et adjoints, les sources, les sections efficaces, la description du maillage dont on a besoin pour faire les calculs ;
- calculer les deux parties de la source à chaque itération ;
- décontaminer le flux reconstitué à chaque itération ;
- tracer les graphes du signe et de la valeur absolue de la solution reconstituée grâce à BOT3P [68] ;
- lancer toutes les fonctions, gérer ces fichiers et exécuter deux runs de DORT à chaque itération.

Tous ces efforts n'ont pas été récompensés. Nous parvenons bien à calculer des suites de fonctions ressemblant à de bonnes solutions puisque le signe est bien positif autour de l'aiguille dont le taux de fission est étudié et que la décontamination est efficace. Mais la suite ne converge pas vers une solution raisonnable.

Plusieurs difficultés ont ralenti notre progression dans cette voie :

- la documentation sur les formats des fichiers de flux et de source de DORT est limitée ;
- la complexité théorique du problème et du schéma numérique proposé ;
- la complexité technique de son application. En effet, il faut gérer une bonne dizaine de fichiers de sources et de flux directs et adjoints de manière à lancer les itérations, mais aussi à tester la convergence ;
- la complexité du cas test. Nous avons choisi le calcul des sensibilités de la distribution de puissance dans un réacteur existant comme cas-test, car le contenu physique des solutions numériques permet de contrôler l'évolution des calculs. Même si VENUS est un petit réacteur, et même si nous possédons une très bonne bibliothèque à 18 groupes, le temps de calcul n'est pas négligeable. De plus, VENUS est un réacteur thermique, ce qui implique le calcul des remontées de neutrons dans les groupes de basse énergie. Numériquement ce traitement se traduit par un certain nombre d'itérations externes supplémentaires.

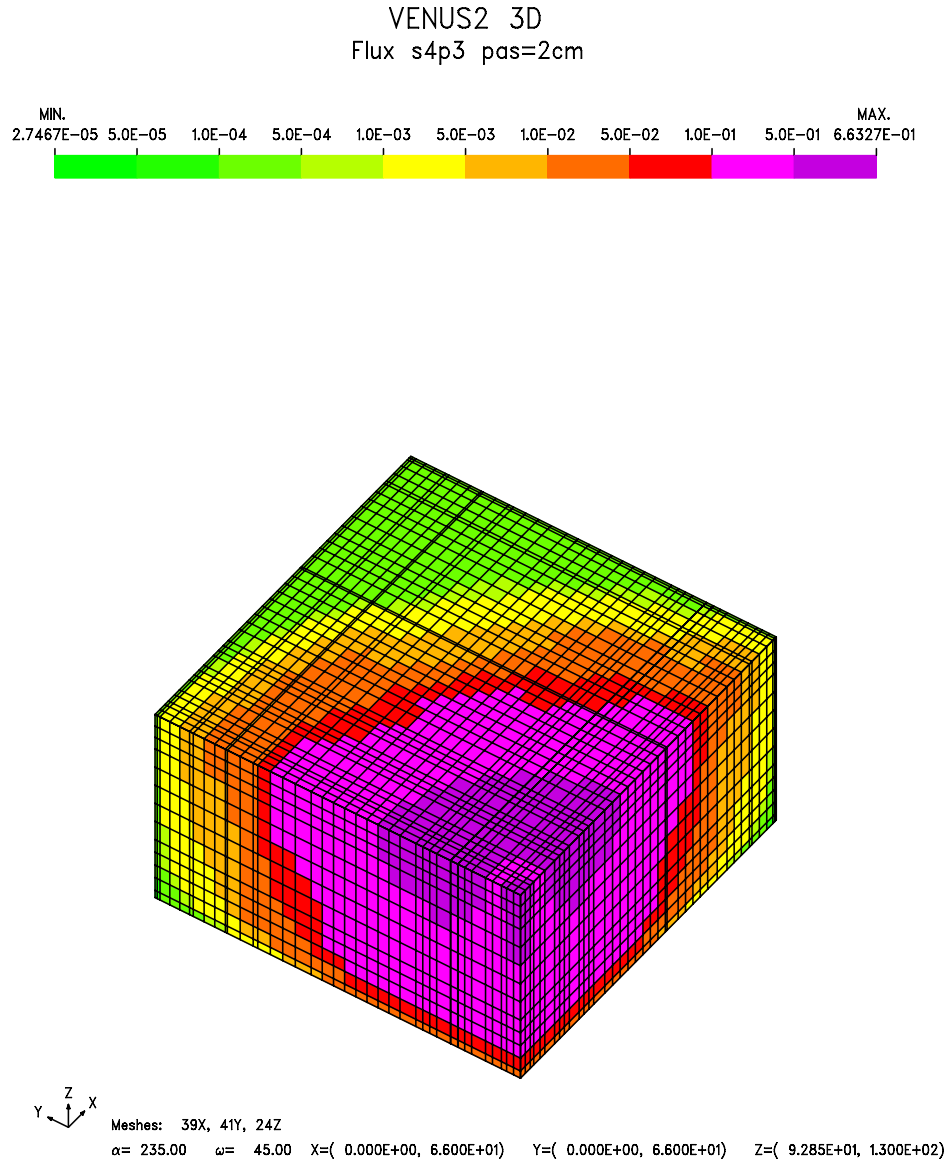


FIG. 4.4 – Distribution du flux de neutrons vu sur une coupe à mi-hauteur d'un quart de la géométrie de VENUS. L'amortissement du flux vers les bords est net. La remontée du flux de neutrons thermiques dans le trou d'eau central aussi. La norme du flux est celle donnée par la définition du benchmark : le flux est tel qu'il y ait 640 fissions par secondes dans un quart de réacteur

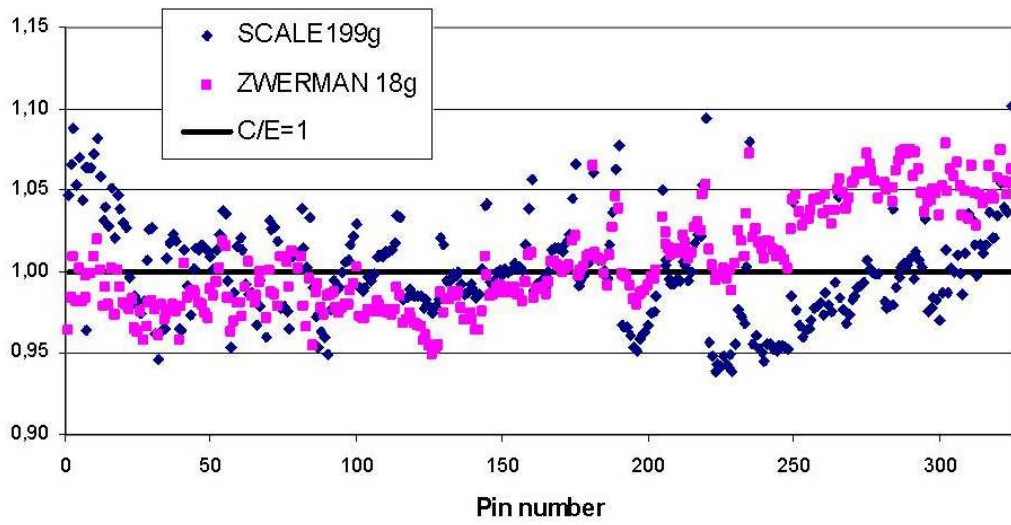


FIG. 4.5 – Comparaison Calcul/Expérience de la distribution du taux de fission dans VENUS2

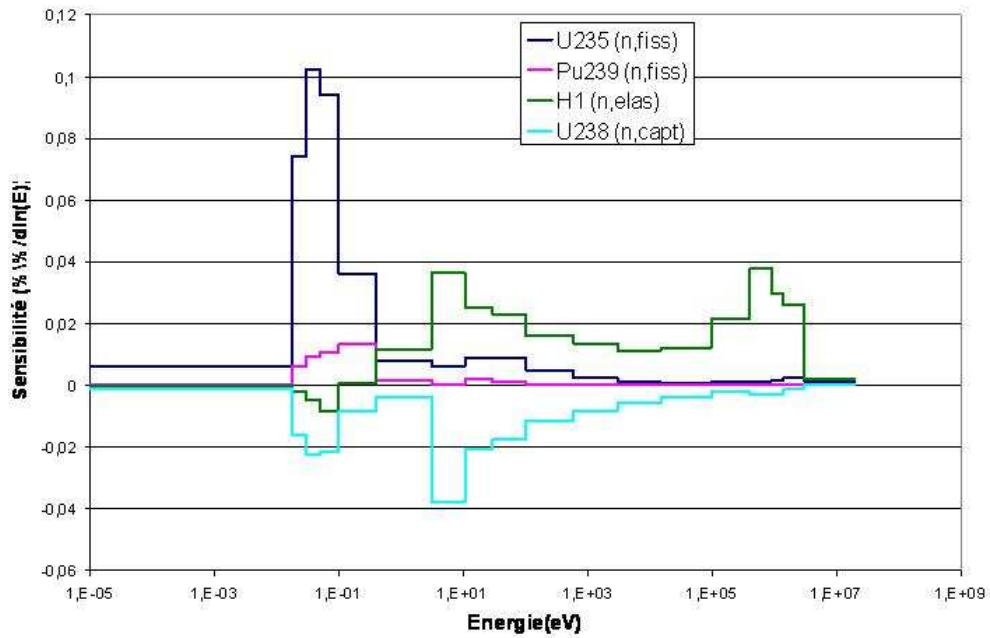


FIG. 4.6 – Profils des sensibilités du k_{eff} de VENUS2 suivant quelques sections efficaces

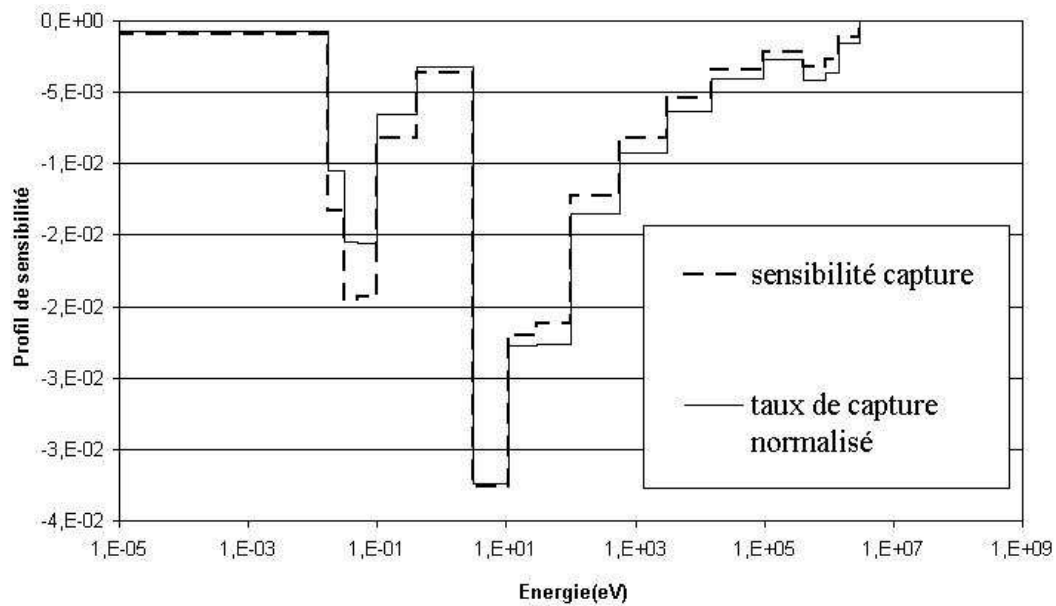


FIG. 4.7 – Comparaison des sensibilités à la section efficace de capture de l' ^{238}U , calculées par la théorie des perturbations et par le profil du taux de réaction

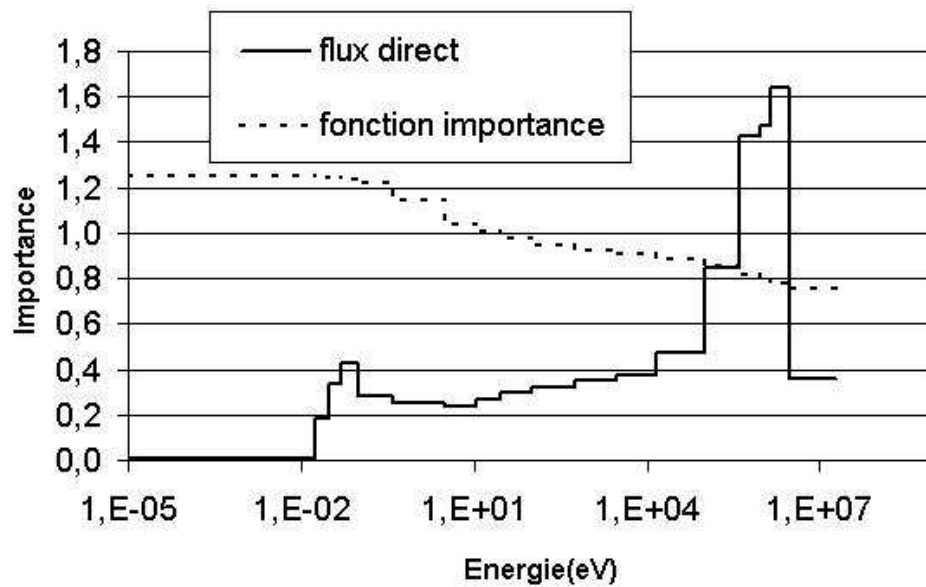


FIG. 4.8 – Spectre du flux direct et fonction-importance de VENUS2 des zones combustibles. Le flux n'est pas représenté, comme habituellement, pour prendre en compte l'échelle logarithmique en énergie. L'unité de l'axe des ordonnées est donc arbitraire pour le flux alors qu'elle est adaptée pour la fonction-importance.

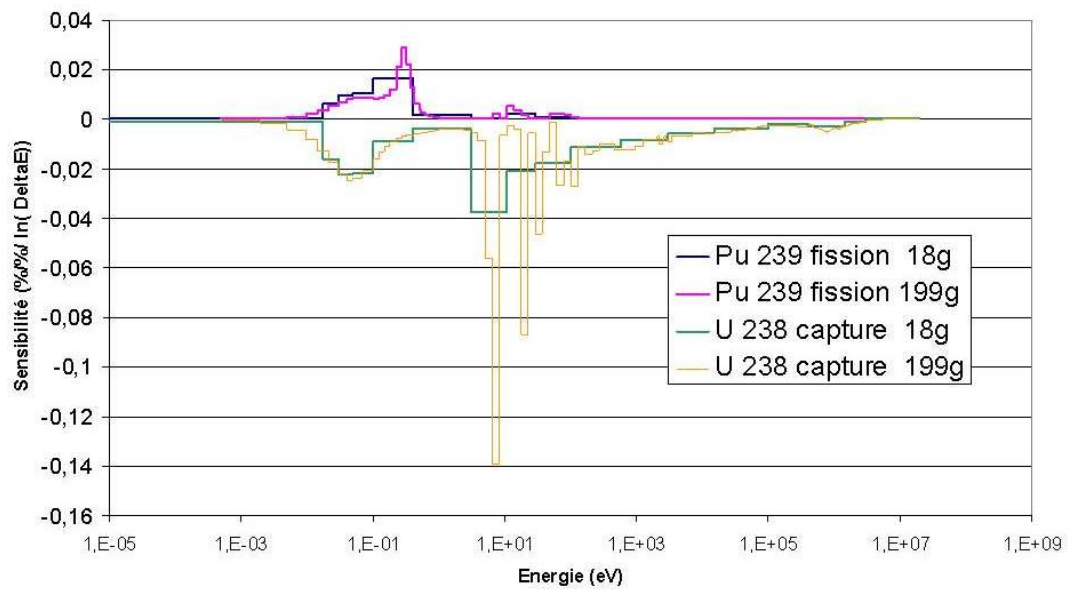


FIG. 4.9 – Comparaison des profils de sensibilité du k_{eff} , basés sur les calculs transports faits à 18 groupes et à 199 groupes.

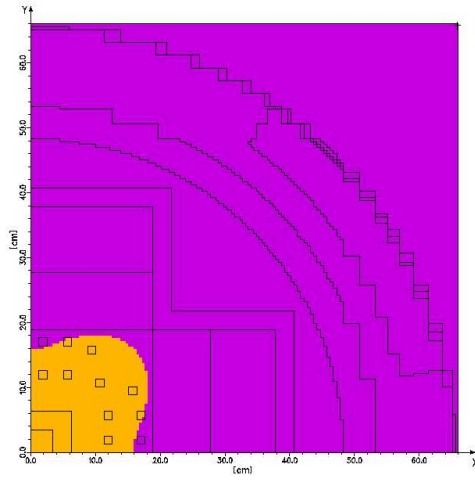


FIG. 4.10 – Signe de la fonction adjointe généralisée calculée par DORT. En orange la partie négative, en violet la partie positive.

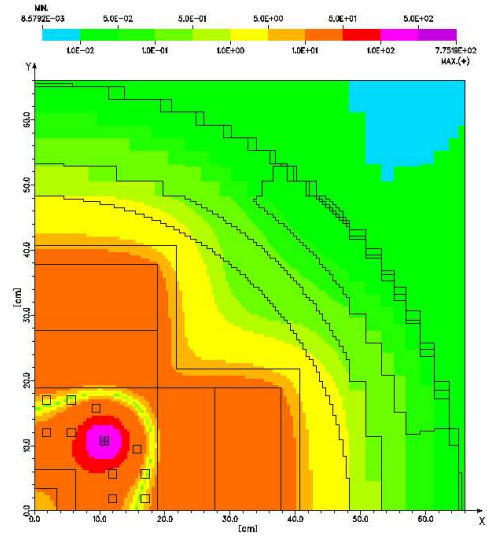


FIG. 4.11 – Valeur absolue de la fonction adjointe généralisée calculée par DORT. On s'attend bien à avoir une valeur absolue maximum autour du crayon étudié puisque les neutrons l'entourant ont une forte probabilité d'augmenter le taux de fission à l'intérieur du crayon.

Chapitre 5

Application à un réacteur innovant : le Thermal Molten Salt Reactor

Les Réacteurs à Sels Fondus sont des réacteurs uniques dans le paysage des concepts de réacteurs de génération IV. Le sel, sous forme liquide, y joue à la fois le rôle de combustible et de caloporteur.

Les sels sont caractérisés par d'assez bonnes qualités thermo-hydrauliques, physiques et chimiques :

- des capacités calorifiques élevées et d'assez bonnes conductivités thermiques (comparables à celles des métaux liquides) permettent une bonne extraction de la puissance et des densités de puissances très élevées. Certains concepts (en particulier pour des réacteurs spatiaux) envisagent d'ailleurs de ne pas utiliser les sels fondus comme combustibles mais seulement comme caloporteurs ;
- avec un point de fusion proche de 500°C [86] et un point d'ébullition proches de 1400°C (ces valeurs dépendent de la composition du sel choisi), leur stabilité physique est assurée dans une large plage de fonctionnement. De plus, l'utilisation de réacteurs à haute température ($>800^{\circ}\text{C}$), nécessaire pour améliorer le rendement thermodynamique ou pour produire de l'hydrogène est possible avec certains sels. Comme avec les métaux liquides, la pression de vapeur saturante est faible, il n'y a donc pas de surpressions dans les circuits de refroidissement ;
- contrairement aux métaux liquides, ils sont transparents. Il est donc possible d'imaginer des systèmes d'inspection en fonctionnement comme dans les réacteurs à gaz, sauf qu'ici il n'existe pas de risque de rupture de gaine ou de fusion du combustible, puisque celui-ci est déjà fondu.

De plus, il est possible d'effectuer directement des traitements chimiques sur le combustible. C'est

ce qui rend ce concept très attrayant pour les réacteurs de quatrième génération : le combustible est traité sur place (sans transport), la composition du combustible est ajustée, les produits de fission extraits et la quantité de noyaux lourds contrôlée selon la stratégie choisie. Ainsi, le réacteur reste juste critique. La marge de réactivité présente dans le cœur est donc très faible, ce qui limite beaucoup les scénarios accidentels.

Un certain nombre de difficultés ont limité le développement de ces concepts :

- des matériaux résistants à la corrosion à haute température sont nécessaires. Le retour des expériences menées à Oak Ridge dans les années 60 [87, 88] est relativement encourageant puisqu'un bon candidat avait été développé.
- un des composants principaux de la plupart des sels est le lithium. Le lithium naturel est constitué à 7,5% de ${}^6\text{Li}$. Or ce noyau capture beaucoup de neutrons par la réaction $n + {}^6\text{Li} \rightarrow \alpha + {}^3\text{H}$. Il est donc nécessaire d'enrichir le lithium en ${}^7\text{Li}$ à plus de 99.99%. Cet enrichissement, nettement plus facile que celui de l'uranium¹, implique cependant un surcoût.

Ce concept est particulièrement adapté à l'utilisation du cycle thorium. La régénération du fissile ${}^{233}\text{U}$ est possible à partir du ${}^{232}\text{Th}$, même dans un spectre de neutrons thermiques. L'utilisation d'un tel spectre limite les dégâts aux matériaux, qui augmentent avec le flux de neutrons de haute énergie, et a des avantages pour la sûreté. En effet, en dehors du réacteur, les neutrons ne sont plus modérés et le combustible qui viendrait à fuir du cœur ne peut pas provoquer d'accident de réactivité. Malheureusement, les sections efficaces de captures des produits de fission augmentent en spectre thermique et ces captures deviennent vite gênantes avec l'accumulation de ceux-ci. Le retraitement chimique permet de contrôler leur densité dans le combustible et de maintenir le réacteur critique. Le retraitement permet aussi de gérer la concentration des noyaux lourds suivant les caractéristiques du réacteur et de la stratégie voulue pour incinérer les transuraniens ou optimiser la régénération, par exemple.

Dans ce chapitre, les sensibilités aux données du k_{eff} et des coefficients de température sont calculées. Les incertitudes sur les données nucléaires sont propagées au k_{eff} et à l'incertitude sur l'enrichissement en ${}^{233}\text{U}$ et à la régénération.

5.0.1 Historique des réacteurs à sels fondus

Deux réacteurs expérimentaux ont fonctionné aux Etats-Unis dans les années 1950 et 1960. Le premier est l'Aircraft Reactor Experiment (ARE) [88], concept de réacteur pour l'aviation, qui a fonctionné quelques centaines d'heures. Le second, le Molten Salt Reactor Experiment (MSRE) a fonctionné entre les années 1965 et 1969. Les démonstrations expérimentales enregistrées sur

¹La différence relative des masses est beaucoup plus importante.

ce réacteur de 8 *MWth* sont très encourageantes pour le concept de Réacteur à Sels Fondus :

- la stabilité des sels fluorures sous irradiation est validée.
- la souplesse du concept de Réacteur à Sels Fondus a été établie par le fonctionnement du réacteur avec plusieurs combustibles. Le réacteur était initialement chargé en uranium enrichi à 30% en ^{235}U . Puis, le sel a été retraité pour remplacer l'uranium enrichi par de l' ^{233}U pur, faisant de ce réacteur le premier réacteur à fonctionner avec ce noyau fissile. Finalement, l' ^{233}U a été remplacé par du ^{239}Pu .
- les problèmes de corrosion de la cuve et des tuyauteries ont été résolus [89, 90] par la mise au point d'un alliage spécial à base d'Hastelloy-N.

Le potentiel du cycle thorium et le succès de ces expériences ont abouti au développement, dans les années 1970 à Oak Ridge National Laboratory (ORNL), d'un concept de RSF au thorium surgénérateur : le Molten Salt Breeder Reactor (MSBR). Ce concept était très ambitieux du point de vue de la régénération, ce qui imposait un retraitement extrêmement rapide du combustible de 10 jours. Les difficultés techniques que représentent un tel retraitement, la concurrence des réacteurs à neutrons rapides U/Pu et l'isolement de ORNL aux Etats-Unis sur ce thème expliquent l'abandon du concept en 1976. Les études ont été poursuivies quelques années à EdF et au CEA [91] avant d'être aussi abandonnées. La problématique des déchets nucléaires fait renaître un certain nombre de concepts dans les années 1990 dont les ADS (Accelerator Driven System) [92]. Pour les besoins de la transmutation, la souplesse des RSF, apportée par le retraitement en ligne, est alors très appréciée. EdF a proposé par exemple le concept Actinide Molten Salt Transmuter (AMSTER) [86]. Aujourd'hui l'optimisation de ce concept de réacteur est faite dans le cadre de GEDEPEON au LPSC Grenoble en coopération avec EdF [93, 94]. L'objectif de ces études est de revisiter le concept MSBR en essayant de confirmer ses caractéristiques de sûreté, et d'optimiser la régénération avec un retraitement simplifié par rapport à celui du MSBR.

5.0.2 Détails de neutronique

Les degrés de liberté d'un tel concept (température, niveaux de flux, spectre, retraitement, puissance,...) ainsi que ses contraintes (sûreté, solubilité des noyaux lourds dans le sel, régénération, difficulté du retraitement, durée de vie du graphite, inventaire de matière fissile) sont assez nombreux pour qu'il soit difficile d'étudier systématiquement l'espace des possibilités. Les recherches en cours au LPSC à Grenoble [95] visent donc à étudier les variations autour d'une configuration de référence qui n'est donc qu'un optimum relatif d'un certain nombre de contraintes liées aux objectifs de développement durable.

La géométrie proposée (cf. figure 5.1) vise à optimiser la régénération, la sûreté et la simplicité

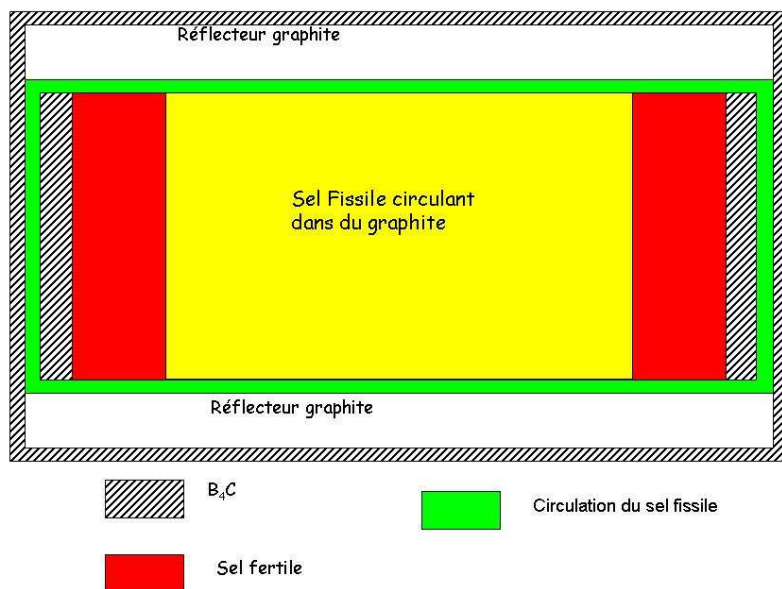


FIG. 5.1 – Géométrie du Réacteur à Sels Fondus vu en coupe médiane

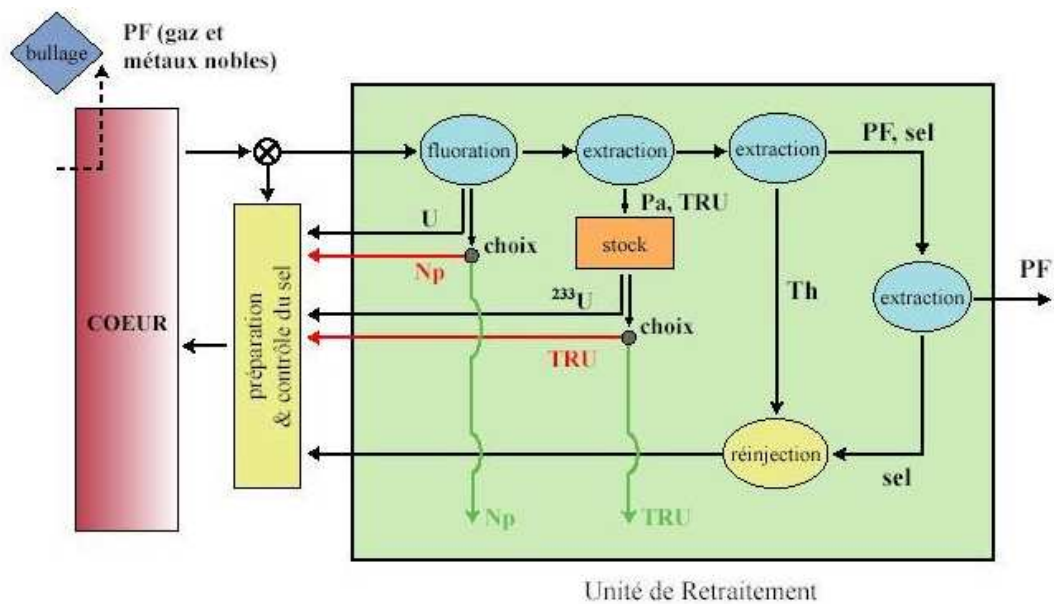


FIG. 5.2 – Schéma de retraitement du sel fissile du RSF de référence

du retraitement chimique. Elle a servi d'exercice de comparaison entre les outils de neutronique, du LPSC basés sur le logiciel stochastique MCNP [25] et d'EdF qui utilise le programme déterministe du CEA/Saclay : APOLLO2 [83]. La configuration étudiée ici a deux sels : un sel principal où a lieu l'essentiel des fissions et un sel secondaire en couverture, qui permet d'obtenir à la fois un coefficient de température négatif et une régénération très proche de l'unité.

Le retraitement en ligne du combustible est une caractéristique unique des RSF, autorisant des marges de manœuvre inaccessibles aux autres concepts de réacteurs². Suivant la vitesse du retraitement et les options choisies, le fonctionnement du réacteur peut être sensiblement modifié en ligne. L'impact des différentes stratégies de retraitement a été étudié en détail à ORNL pour le MSBR. Ces résultats ont été réévalués en détail récemment [93].

Le LPSC propose que le retraitement de référence (cf. le schéma 5.2) soit ralenti à 6 mois³, ce qui limite beaucoup les inventaires hors cœur mais aussi la taille de l'usine de retraitement puisque les débits de sels à retraiter sont alors très faibles. De plus, un retraitement lent permet d'optimiser la chimie. En limitant au maximum les pertes de noyaux lourds au retraitement, on diminue la radiotoxicité des déchets du cycle. En effet, au-delà de quelques centaines d'années après le retraitement, la radiotoxicité est dominée par ces noyaux. Avec un retraitement aussi lent par rapport à la demi-vie du ^{233}Pa (27 jours), son extraction sélective et son stockage hors flux afin de lui permettre de décroître en ^{233}U , ne sont plus vraiment efficaces. Cependant, ils fournissent une petite marge de manœuvre pour optimiser la régénération. Dans le scénario de référence, le neptunium est extrait. Le ^{237}Np est le passage "obligé" vers les actinides lourds. L'incinération de ces noyaux dans le spectre envisagé consomme des neutrons (cf. partie 6.4.3.2) et limite la régénération. Le désavantage en terme de radiotoxicité induite par la non-incinération d'une partie des noyaux lourds, n'est pas évident. En effet, non seulement on produit moins de noyaux de forte radioactivité (en particulier le ^{238}Pu), et donc on limite la radiotoxicité à court terme, mais en plus, l'inventaire total en noyaux très radiotoxiques est bien plus faible. Ainsi, en cas d'arrêt de la filière, l'inventaire final à gérer sera nettement moindre.

La figure 5.3 permet d'imaginer toute la difficulté de la recherche d'un concept ayant des bonnes caractéristiques. Cette figure compare l'évolution d'un certain nombre de grandeurs caractéristiques (régénération, durée de vie du graphite, coefficient de température, inventaire d' ^{233}U) avec le rayon des canaux de sel. Comme le pas de la structure hexagonale des canaux est fixe (15cm), ce rayon est une mesure du ralentissement moyen des neutrons et donc de la dureté du spectre. Pour des rayons faibles, le graphite est prédominant dans le cœur et donc le ralentis-

²Seuls les réacteurs à eau lourde, type CANDU, permettent une certaine souplesse grâce à la possibilité de les recharger en ligne, continuellement

³Le bullage, c'est-à-dire l'extraction des produits de fission gazeux comme le Xénon, est quasiment instantané dans tous les cas.

sement est maximum : le flux est très thermalisé. Réciproquement, pour de grands rayons, il y a moins de graphite dans le cœur, le ralentissement se fait alors essentiellement sur les noyaux du sel : le spectre est rapide. Il est difficilement imaginable de construire des réacteurs dont le coefficient de température serait positif. Toutes les configurations avec des rayons de sel inférieurs 7 cm semblent donc éliminées⁴.

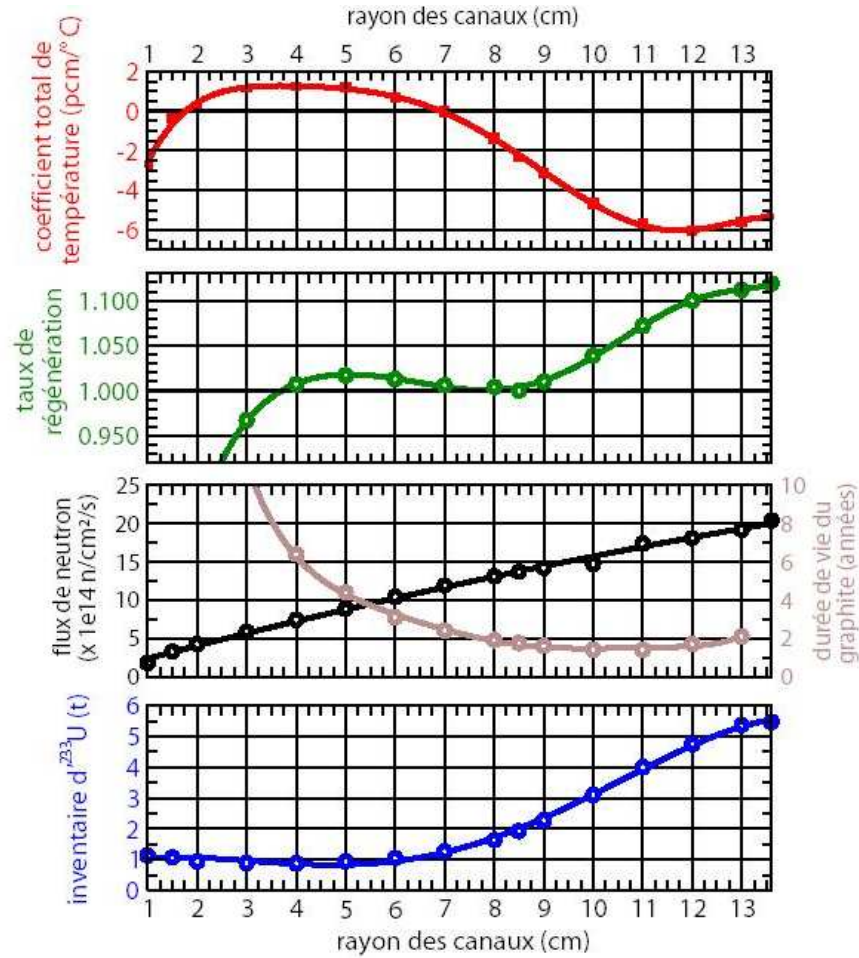


FIG. 5.3 – Evolution de paramètres de neutronique avec le rayon des canaux du sel [95]

Le coefficient de température interdit donc le fonctionnement dans des configurations qui par ailleurs semblent particulièrement favorables. En effet, pour les rayons inférieurs à 7 cm et supérieurs à 4 cm , la régénération est légèrement positive, la durée de vie du graphite relativement grande, et l'inventaire d' ^{233}U minimum, ce qui, couplé à la régénération minimise le temps de

⁴Le MSBR, avec son rayon de 4 cm et un sel relativement proche de celui de référence aurait d'ailleurs un coefficient légèrement positif, d'après les calculs de la référence [96].

doublement. Toutes les incertitudes sur le k_{eff} , et surtout sur le coefficient de température obligeront donc à augmenter les marges de sécurité et à s'écarter de cet intervalle de rayon. Un autre point de fonctionnement semble particulièrement favorable : la configuration sans graphite, dans laquelle les neutrons ne sont presque plus modérés, ce qui correspond à un spectre de neutrons rapides. Les coefficients de température sont alors nettement négatifs et la durée de vie du graphite ne serait plus un problème. Toutefois, ce concept est très différent du concept étudié et mériterait une étude détaillée. En effet, pour favoriser la dureté du spectre, un sel basé sur des matériaux plus lourds serait avantageux, avec du sodium à la place du lithium par exemple. Mais alors, les températures de fonctionnement et les caractéristiques de dilution de noyaux lourds s'en trouveraient sensiblement modifiées.

L'étude menée ici s'intéresse à une configuration "de référence" pour laquelle le rayon des canaux de sel est de 8,5 cm (cf. figure 5.3). Cette configuration constitue un compromis entre plusieurs contraintes. Et si elle est isogénératrice avec un inventaire d' ^{233}U raisonnable, et surtout un coefficient de température négatif, la durée de vie du graphite réduite à 2 ans, représente un désavantage opérationnel important.

5.1 Présentation du schéma de calcul

Notre expérience avec VENUS2 a montré les limites de l'utilisation des programmes de préparation des données multigroupes disponibles à l'OCDE pour l'étude des réacteurs innovants. Nos collègues d'EdF utilisent le solveur à ordonnées discrètes Sn d'APOLLO2 [83] pour les calculs de cœur. Ils possèdent donc des données tout à fait adaptées à ces programmes, jumeaux des logiciels de transport de notre chaîne de programmes.

Nous avons à notre disposition des données multigroupes autoprotégées pour chaque zone de combustible développées à l'ordre de Legendre P1. La traduction de ces données APOLLO en un format utilisable par les programmes Sn est réalisée par notre programme *ad-hoc* écrit dans le langage objet C++ (cf. annexe B).

Nos résultats ont été comparés systématiquement à ceux obtenus par Tatiana Ivanova à partir des outils disponibles à IPPE/Obninsk pendant son séjour scientifique à l'IPN d'Orsay et au CNAM/Paris. Pour cet exercice, elle a utilisé la chaîne de programmes CONSYST [60], basée sur le logiciel de transport multigroupe stochastique MMK-KENO [97]. Ces outils utilisent la théorie des perturbations pour calculer les sensibilités. Cependant, la fonction-importance n'est pas obtenue par un calcul adjoint, mais par l'utilisation du poids d'un neutron, connu par la participation au bilan de sa descendance sur quelques générations. Cette utilisation astucieuse des programmes stochastiques permet d'obtenir un code très rapide, sans hypothèse nécessaire

sur la géométrie.

Le tableau 5.1 compare les résultats de k_{eff} obtenus par différents outils pour la configuration de référence. Seuls les calculs déterministes APOLLO2 et DORT partagent la même description de la géométrie (en particulier les canaux de sels sont "homogénéisés") et les mêmes données. Les autres résultats utilisent une approche stochastique, et donc une description exacte de la géométrie. Quelles que soient les hypothèses choisies, toutes les simulations sont très proches de la criticité.

programme	laboratoire	k_{eff}
MCNP	LPSC Grenoble	1,00180
APOLLO2	EdF R&D Clamart	0,99667
DORT	IPN Orsay	0,998184
MMK KENO	IPN Orsay	0,9995

TAB. 5.1 – Comparaison des k_{eff} obtenus par différents outils

5.2 Calcul de sensibilité du k_{eff}

5.2.1 Sensibilités

Le tableau 5.2 compare les sensibilités intégrées (données en pourcent par pourcent) obtenues par les méthodes déterministes et stochastiques. Les deux méthodes donnent globalement des résultats assez semblables. Les données les plus importantes pour le calcul du k_{eff} sont :

- les nombres de neutrons par fission. En particulier celui de l' ^{233}U ,
- la section efficace de fission du noyau fissile principal,
- la section efficace de capture du noyau fertile,
- la section efficace de diffusion du modérateur,

Une fois de plus, ces résultats ne sont guère surprenants, étant donné la constitution du réacteur. L'intérêt d'utiliser les méthodes des perturbations est de quantifier de façon extrêmement économique ces sensibilités et d'en donner leurs profils comme sur la figure 5.4, même lorsque la sensibilité est petite.

Les calculs directs de sensibilité sont intéressants pour confirmer les résultats. Nos collègues L. Mathieu du LPSC Grenoble et D. Lecarpentier de EdF R&D Clamart ont accepté de faire quelques calculs en modifiant les concentrations de quelques pourcents. La différence de k_{eff} divisée par la variation de concentration peut alors être comparée à la somme des contributions de chaque réaction. Les résultats obtenus sont repris dans le tableau 5.3.

Noyau	réaction	Sensibilité méthode Sn (%/%)	Sensibilité stochastique (%/%)
C	(n,elas)	0,340	0,311±0,045
²³⁵ U	(n,γ)	-0,019	-0,019±0,000
	(n,fission)	0,038	0,043±0,000
	$\bar{\nu}$	0,094	0,099±0,000
²³³ U	(n,γ)	-0,075	-0,068±0,000
	(n,fission)	0,370	0,385±0,000
	$\bar{\nu}$	0,895	0,883±0,000
²³² Th	(n,γ)	-0,379	-0,379±0,000
	(n,fission)	0,003	0,006±0,000
	$\bar{\nu}$	0,006	0,010±0,000
²³⁴ U	(n,γ)	-0,060	-0,058±0,000
²³⁴ Pa	(n,γ)	-0,014	-0,014±0,000

TAB. 5.2 – Sensibilités intégrées (en %/%) du TMSR aux réactions les plus importantes
Sensibilités intégrées (en %/%) du TMSR aux réactions les plus importantes. Les incertitudes
données pour la solution stochastique ne correspondent qu'à la statistique. Cette incertitude est
négligeable sauf pour la diffusion qui correspond à la différence de deux termes proches.

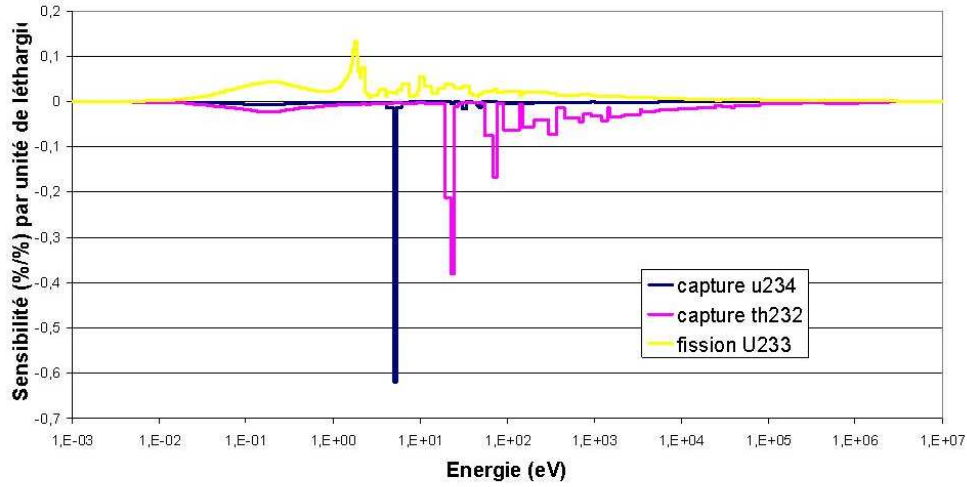


FIG. 5.4 – Profils de sensibilité du k_{eff} aux sections efficaces de captures de l' ^{234}U et du ^{232}Th et à la section efficace de fission de l' ^{233}U

Les résultats sont très cohérents sauf pour le ^{232}Th . Dans ce cas, les calculs de sensibilité utilisant la Théorie des Perturbations, surestiment la sensibilité d'environ un tiers. Pour voir si cet effet ne remettait pas en cause l'hypothèse du premier ordre nécessaire aux calculs de perturbations, D. Lecarpentier a fait plusieurs calculs correspondant à des concentrations différentes. Ses calculs montrent que la sensibilité est bien linéaire pour les perturbations apportées. La différence de sensibilité pour le calcul avec une variation de concentration de ^{232}Th de 0,3% correspond à une différence de k_{eff} de moins de 10 pcm. Elle n'est donc pas vraiment représentative étant donné le critère de convergence de 10^{-6} qui n'implique pas que l'on soit à 10^{-6} de la bonne réponse, mais que l'écart de k_{eff} entre deux itérations soit de 10^{-6} . Pour une perturbation plus petite, on s'attend à une convergence vers le calcul de perturbation utilisant l'hypothèse du premier ordre, alors que l'écart est indépendant de l'amplitude de la variation. L'hypothèse du premier ordre n'est donc pas remise en cause.

Nous pensons qu'une partie de l'écart pourrait être due à l'absence du terme implicite lié à l'effet d'autoprotection des sections efficaces dans nos calculs. Nous calculons la sensibilité du facteur de multiplication aux sections efficaces autoprotégées alors que les calculs directs calculent la sensibilité aux sections efficaces microscopiques. Ainsi, l'effet d'une perturbation sur l'autoprotection n'est pas pris en compte dans nos calculs. Cette explication de l'écart reste à faire :

Noyau	variation concentration calcul direct	Calcul direct APOLLO2(MCNP) (%/%)	Sensibilité méthode Sn (%/%)	Sensibilité stochastique (%/%)
²³³ U	1%	0,317(0,287)	0,295	0,317
²³⁴ U	1%	-0,06	-0,060	-0,058
²³³ Pa	1%	(-0,013)	-0,014	-0,014
²³³ Th	0,3%	-0,26	-0,370	-0,385
	1%	-0,292(-0,227)		
	3%	-0,29		

TAB. 5.3 – Sensibilités intégrées (en %/%) du TMSR aux réactions les plus importantes

- soit par un calcul de sensibilité incluant le terme implicite. La théorie permettant de calculer ce terme est décrite dans l'article [35]. Cette méthode est implémentée dans TSUNAMI (le logiciel de sensibilité de SCALE 5 [98] malheureusement indisponible aujourd'hui en Europe) et dans MMK-KENO[97].
- soit par un calcul direct en modifiant non pas les concentrations lors du calcul cellule, mais lors du calcul cœur. Malheureusement nous n'avons accès qu'aux sections efficaces homogénéisées par zone, il ne nous est donc pas possible de faire ce calcul simplement.

Les figures 5.5 page 95 et 5.6 comparent les profils de sensibilité aux réactions de capture sur le ²³²Th et de fission du ²³³U obtenus par différentes méthodes de calculs. Les résultats *Sn* ont une tendance nette à sous-estimer les sensibilités dans la partie "rapide" du spectre. Cette tendance est visible sur les sensibilités intégrées dans le cas de réaction à seuil (qui ont donc lieu à haute énergie) comme la fission du ²³²Th qui est assez nettement sous-estimée. Comme les sensibilités intégrées sont comparables entre les deux méthodes, la tendance à basse énergie compense celle à haute énergie : les sensibilités dans les premières résonances sont surestimées par nos méthodes.

5.2.2 Effet des facteurs d'autoprotection

Nous avons déjà vu au chapitre 4.4.1 l'importance de l'autoprotection des résonances pour les sections efficaces utilisées par les codes de transport et donc aussi par SUSD3D. Pour les sections efficaces apparaissant dans l'opérateur de disparition, il est possible d'introduire dans SUSD3D, non pas les sections efficaces provenant de NJOY, mais celles de l'utilisateur. Dans le calcul de l'autoprotection, APOLLO2 affiche le rapport entre les sections efficaces autoprotégées et les sections efficaces non autoprotégées pour les isotopes résonnants. Les résultats du tableau

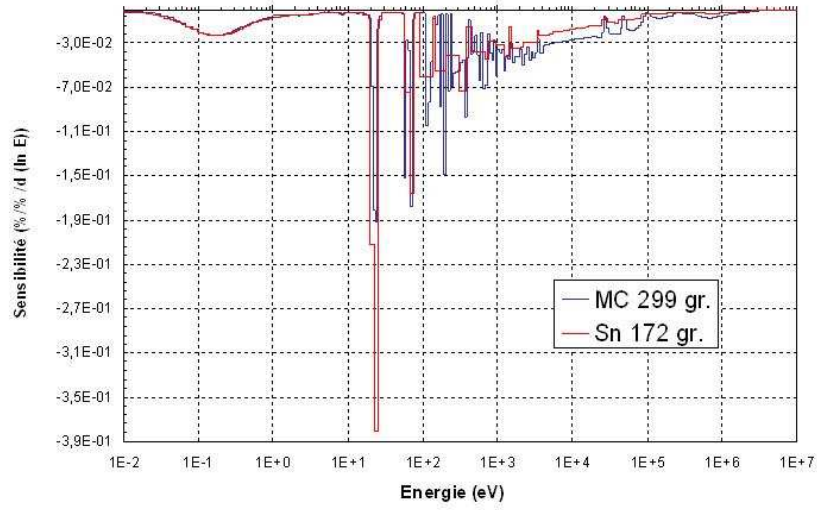


FIG. 5.5 – Comparaison des profils de sensibilité du k_{eff} à la section efficace de capture du ^{232}Th obtenus par les différentes méthodes

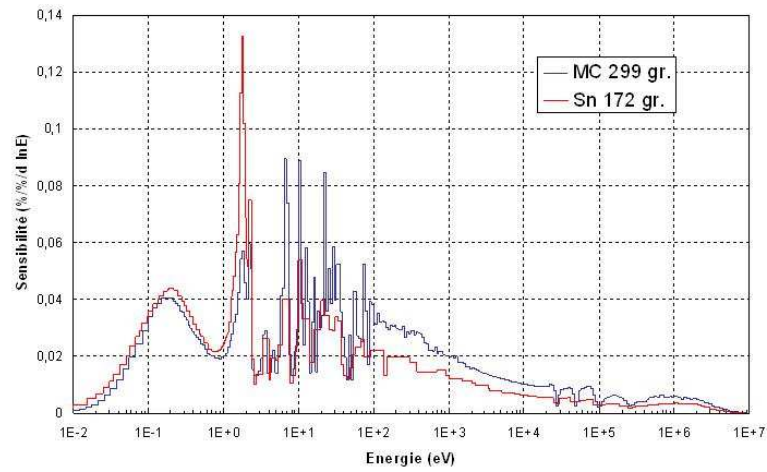


FIG. 5.6 – Comparaison des profils de sensibilité du k_{eff} à la section efficace de fission de l' ^{233}U obtenus par les différentes méthodes

5.3 ainsi que les profils présentés précédemment intègrent ces coefficients pour la section efficace de capture du ^{232}Th .

L'autoprotection des résonances n'est pas appliquée dans APOLLO2 à l' ^{234}U . Pour cet isotope, nous utilisons donc la stratégie de référence de SUS3D, c'est-à-dire les sections efficaces sortant de NJOY avec le σ_0 approprié. Le tableau 5.4 présente la sensibilité intégrée du k_{eff} à la section efficace de capture de l' ^{234}U en fonction du σ_0 choisi. Il est clair, après quelques itérations, en voyant le profil de la sensibilité présenté sur la figure 5.4, que l'essentiel de la sensibilité à cette section efficace provient de la résonance à 5,16 eV. Si l'on prend le σ_0 correspondant, il n'est pas étonnant alors de retrouver les résultats obtenus avec les autres méthodes.

Energie représentative (eV)	σ_0	sensibilité (%/%)
aucune	∞	-0,138
50	200	-0,069
5	20	-0,060

TAB. 5.4 – Comparaison de la sensibilité intégrée à la section efficace de capture de l' ^{234}U en fonction de la valeur du σ_0 choisi dans NJOY

isotope	terme direct non corrigé	terme direct corrigé	sensibilité non corrigée	sensibilité corrigée
^{233}U	0,8948	0,8924	0,370	0,3407
^{235}U	9,378e-2	9,566e-2	3,77e-2	3,675e-2

TAB. 5.5 – Effet de la correction du terme de gain sur les sensibilités du k_{eff} au nombre de neutrons par fission et à la section efficace de fission

NJOY ne fournit pas de matrices de distribution des neutrons de fission autoprotégées. Nous avons appliqué ici la même stratégie que dans la partie 4.4.1 pour corriger ces termes. La correction des sections efficaces de fission de l' ^{233}U et de l' ^{235}U modifie la normalisation de 6%. Le tableau 5.5 présente l'impact de cette correction sur le terme de gain et sur la sensibilité aux sections efficaces de fission de ces isotopes. L'autoprotection plus importante de l' ^{233}U a tendance à équilibrer légèrement la répartition des contributions à la sensibilité totale du terme de gain au profit de l' ^{235}U .

5.2.3 Analyses d'incertitude

On peut propager les incertitudes disponibles sous forme de matrices de covariance en utilisant les sensibilités calculées précédemment. Les matrices disponibles ont été produites avec les découpages en énergie des deux méthodes de calcul des sensibilités. Ainsi, il est possible de comparer les analyses d'incertitude utilisant des sources d'incertitudes cohérentes dans le tableau 5.6. Malgré les différences notables sur les profils, les sensibilités intégrées sont très comparables. Finalement les incertitudes sont aussi très proches, en tout cas, les différences sont nettement plus faibles que l'incertitude sur les incertitudes. Nous avons montré que nous avons une confiance limitée dans les incertitudes disponibles aujourd'hui sous forme de matrices de covariance dans les bases évaluées présentées au paragraphe 2.4.4. Or l'incertitude sur un paramètre intégral est le produit de la sensibilité et de l'incertitude. L'écart maximum, de quelques dizaines de pourcent pour la sensibilité, est bien négligeable devant l'écart entre les incertitudes disponibles et celles, probablement sur-estimées, dans la référence [31] qui peut atteindre 1000% sur le nombre de neutrons de fission pour l' ^{233}U par exemple⁵.

noyau	réaction	sensibilité (%/%)	incertitude(pcm) Méthode déterministe	incertitude Méthode stochastique	bibliothèque source incertitudes
C	(n,elas)	0,340	80	62	JEFF2.2
^{235}U	(n, γ)	0,038	9	7(*)	JENDL3.3
^{233}U	(n, γ)	-0,075	22	19	JENDL3.3
	(n,fission)	0,370	275	299	
	$\bar{\nu}$	0,895	231	253	
^{232}Th	(n, γ)	-0,379	3620	3360	JEFF2.2
Total			3638	3383	

TAB. 5.6 – Contributions à l'incertitude (pcm) du k_{eff} sur TMSR des réactions les plus importantes

Contributions à l'incertitude (pcm) du k_{eff} sur TMSR des réactions les plus importantes. La matrice de covariance ABBN93[99] a été utilisée pour l'uranium 235 pour le calcul d'incertitude avec la méthodologie stochastique.

On ne dispose pas de matrices de covariance pour tous les isotopes, en particulier pour des isotopes dont les sensibilités sont relativement importantes comme l' ^{234}U et le ^{233}Pa . Si on

⁵alors que JENDL3.3 propose 200 pcm, Palmiotti *et al.* [31] proposent 2% !

multiplie la sensibilité par une incertitude de l'ordre de grandeur de celle proposée par Palmiotti *et al.*, soit 10%, on obtient une contribution de 600 *pcm* pour ^{1234}U et de 140 *pcm* pour le ^{233}Pa . Ainsi, ^{1234}U deviendrait la seconde source d'incertitude pour le calcul du k_{eff} .

On voit que l'incertitude sur la section efficace de capture du ^{232}Th domine de loin toutes les autres contributions⁶. Les comparaisons avec les calculs directs ont montré que nos calculs de sensibilité avaient tendance à surestimer d'environ 30% la sensibilité du ^{232}Th . Toutefois, si ^{1234}U est la seconde contribution de l'ordre de 600 *pcm*, même les nouvelles données pour le thorium utilisant les dernières mesures effectuées à GEEL et à n-TOF ne changeront pas la répartition des rôles. De plus, la contribution du nombre moyen de neutrons par fission $\bar{\nu}$ et celle de la fission de ^{1233}U sont vraisemblablement sous-estimées dans la base JENDL3.3 par rapport aux propositions de la référence [31] et apporteraient plutôt environ 600 *pcm* chacune.

L'incertitude totale sur le k_{eff} étant donné les incertitudes disponibles et en utilisant nos sensibilité serait donc de l'ordre de 3500 *pcm*. Ce résultat est à comparer à l'ordre de grandeur des incertitudes sur les réacteurs à spectre rapide de GEN IV des références [100, 101]. En utilisant les sections efficaces non ajustées, il y a environ 1500 *pcm* a priori. Avec les nouvelles données, on commencera à s'approcher de cet ordre de grandeur. En effet, en comptant toutes les contributions, en considérant une incertitude de 5% pour la capture du thorium et en utilisant la sensibilité intégrée trouvée par les calculs directs, **on obtiendrait une incertitude totale d'environ 1800 *pcm*.** Même si la connaissance des données du cycle du thorium était moins bonne que celle du cycle de l'uranium⁷, les simulations seraient dignes d'une confiance similaire à celle que l'utilisateur peut avoir de ses simulations du cycle uranium.

5.3 Analyses de sensibilité des coefficients de température

5.3.1 Présentation des effets de température

Les coefficients de température étudiés ici sont simplement les différences entre des k_{eff} calculés sur des réacteurs supposés à deux températures homogènes différentes, divisées par les différences de température. Ces coefficients sont de bons indicateurs du potentiel de stabilité d'un réacteur. Une analyse de sûreté complète ne se limite évidemment pas à leurs calculs. Cependant, il est clair que si les coefficients de température sont bons, la démonstration de la sûreté en sera bien facilitée. Nous avons vu sur la figure 5.3, qu'autour du point de référence⁸, le coefficient de tem-

⁶L'incertitude totale augmente en fonction de la somme des carrés de chaque contribution. Ainsi, si une contribution est plus grande d'un facteur 5, l'impact relatif sur le total est plutôt de l'ordre de 25.

⁷En particulier, par manque de validation par comparaison avec des données intégrales, il semble difficile d'améliorer les données telles que le $\bar{\nu}$ en faisant des mesures ponctuelles.

⁸lorsque le rayon des canaux de sel est de 8,5cm

pérature tendrait à être d'autant meilleur que le spectre se durcit, alors que d'autres paramètres (durée de vie du graphite, inventaire d' ^{233}U) deviennent moins bons, sachant que la régénération passe par un minimum. La précision des calculs de coefficients de sûreté est cruciale pour ces concepts, puisque toute incertitude entraînera l'autorité de sûreté à réclamer des marges, qui tendent à pousser les choix de dimensionnement vers des points de fonctionnement globalement moins favorables.

Le coefficient de température global [95] peut être décomposé en plusieurs effets comme on le voit sur la figure 5.7. Autour du point de fonctionnement, ces différents effets peuvent assez bien s'expliquer :

- le coefficient de densité correspond à l'effet de la dilatation du sel avec la température. Plus le sel se dilate, moins les neutrons rencontrent de sel par rapport au graphite. Ils ont donc tendance à mieux se thermaliser et à échapper aux captures dans les résonances. Ainsi avec l'élévation de température, la réactivité augmente.
- le coefficient Doppler est lié à l'élargissement des résonances avec la température du sel. Cet élargissement favorise les captures sur le ^{232}Th . Le bilan de neutrons que représente le k_{eff} penche donc plus du côté des absorptions : le coefficient Doppler est négatif. Il a tendance à être d'autant plus négatif que le spectre se durcit.
- le coefficient graphite lié à l'augmentation de température du graphite. Les neutrons de basses énergies ont une énergie moyenne qui tend vers celle du graphite. Donc, lorsque la température du graphite augmente, l'énergie moyenne des neutrons augmente comme on le voit sur la figure 5.8. Hors, entre 0,1 eV et 1 eV, la section efficace de fission de ^{233}U diminue moins vite que la section efficace de capture du ^{232}Th déséquilibrant le bilan neutronique vers les fissions. Cet effet est donc positif, il est d'autant plus marqué que la quantité de graphite dans le cœur est importante.

5.3.2 Sensibilités du coefficient de température

Les sensibilités des coefficients de température peuvent être calculés de deux manières différentes en utilisant la Théorie des Perturbations.

La première est d'écrire la réactivité sous forme d'un rapport de produit bilinéaire du flux et du flux adjoint [48]. Il est alors possible, en utilisant la théorie des perturbations généralisée, de calculer la sensibilité des coefficients de température sans avoir à faire de différence entre le calcul de référence et le calcul à une autre température. Cette méthode, très satisfaisante théoriquement, est néanmoins lourde à mettre en œuvre puisqu'elle suppose le calcul de fonctions-importances ne correspondant pas à la fonction adjointe classique.

L'autre solution est de se souvenir que la théorie classique des perturbations donne facilement

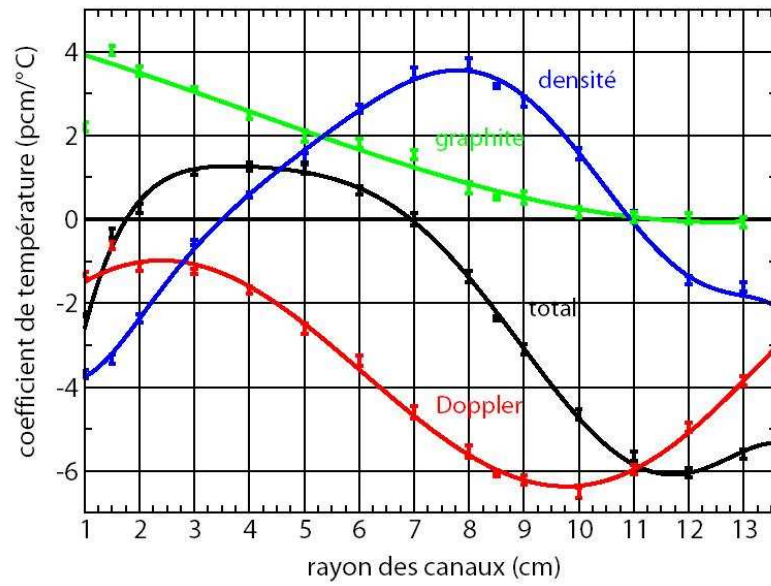


FIG. 5.7 – Evolution des coefficients de température avec le rayon des canaux [95]

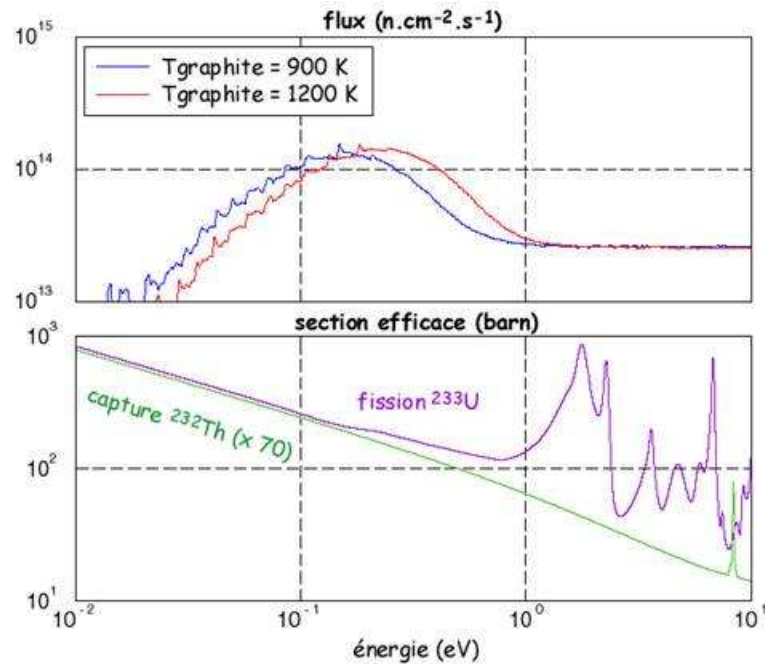


FIG. 5.8 – Sections efficaces de capture du ^{232}Th et de fission du ^{233}U comparées aux flux thermiques à deux températures différentes

les sensibilités des calculs de k_{eff} à toutes les sections efficaces et que le coefficient de réactivité correspond à peu près à une différence de k_{eff} ⁹. Les coefficients de sensibilité peuvent donc s'écrire :

$$S_{CT\sigma_x^i(g)} = \frac{k_p k_r}{k_p - k_r} (k_p S_{k_p\sigma_x^i(g)} - k_r S_{k_r\sigma_x^i(g)}) \quad (5.1)$$

où k_r et k_p sont respectivement les k_{eff} du calcul de référence et du calcul perturbé par une variation de température.

Cela permet de réutiliser les coefficients de sensibilité $S_{k_p\sigma_x^i(g)}$ et $S_{k_r\sigma_x^i(g)}$ calculés dans la partie précédente. La différence des k_{eff} apparaît au dénominateur, rendant le calcul des sensibilités très sensible aux méthodes et aux incertitudes. L'écart de 20% entre les coefficients de température calculés par les deux méthodes correspond à une incertitude incompressible sur les sensibilités. Néanmoins, cette méthode est relativement simple à mettre en œuvre à partir du moment où l'on est capable de calculer les sensibilités du k_{eff} aux données.

Cette méthode peut être utilisée pour calculer les sensibilités de variation de réactivité liée à n'importe quelle variation de configuration, que ce soit une variation liée à des variations de température, ou pour calculer les sensibilités de l'efficacité d'une barre de contrôle par exemple.

Nous avons vu quelles étaient les sections efficaces les plus importantes pour le calcul du k_{eff} . Les sections efficaces de fission de l'²³³U et de capture du ²³²Th sont les réactions dont les sensibilités sont les plus importantes pour le k_{eff} . Nous pouvons limiter l'étude des sensibilités des coefficients de température à ces sections efficaces puisque les coefficients de température découlent des calculs de k_{eff} . De plus, ce sont des réactions sur des isotopes résonnants pour lesquels les sections efficaces changent rapidement avec la température et qui ont donc une importance évidente pour le calcul des coefficients de température, en particulier le coefficient Doppler.

Les profils de sensibilité présentés sur les figures 5.9 et 5.10 viennent renforcer notre compréhension de la physique des coefficients de température :

- le thorium et l'²³³U ont des rôles symétriques dans la zone thermique. Ces rôles correspondent bien à notre compréhension de l'effet de température du graphite. Si la section efficace de capture du ²³²Th était légèrement plus grande (si elle diminuait un peu moins vite, comme la fission de l'²³³U), le coefficient de température (négatif) serait plus grand en valeur absolue¹⁰ ; c'est-à-dire encore plus négatif, puisque l'effet graphite serait moins

⁹Pour être plus précis, le coefficient de température est défini comme la différence de réactivité -i.e. l'inverse du k_{eff} - divisée par la différence de température soit $CT = \frac{\Delta\rho}{\Delta T}$ où $\rho = 1 - 1/k_{eff}$ soit encore $CT = \frac{1/k_r - 1/k_p}{\Delta T}$. Donc le coefficient de température est bien le rapport de la différence des k_{eff} et de la différence des températures, au produit des k_{eff} près. Comme on travaille sur des réacteurs critiques, on s'attend à ce que ces k_{eff} soient très proches de 1...

¹⁰les sensibilités comparent des variations relatives

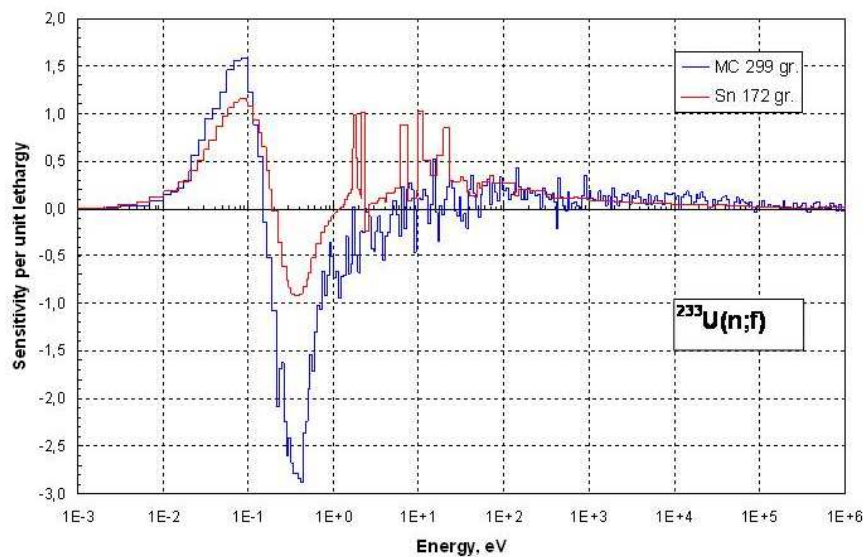


FIG. 5.9 – Comparaison du profil de sensibilités du coefficient de température à la section efficace de fission de l' ^{233}U obtenu par les différentes méthodes

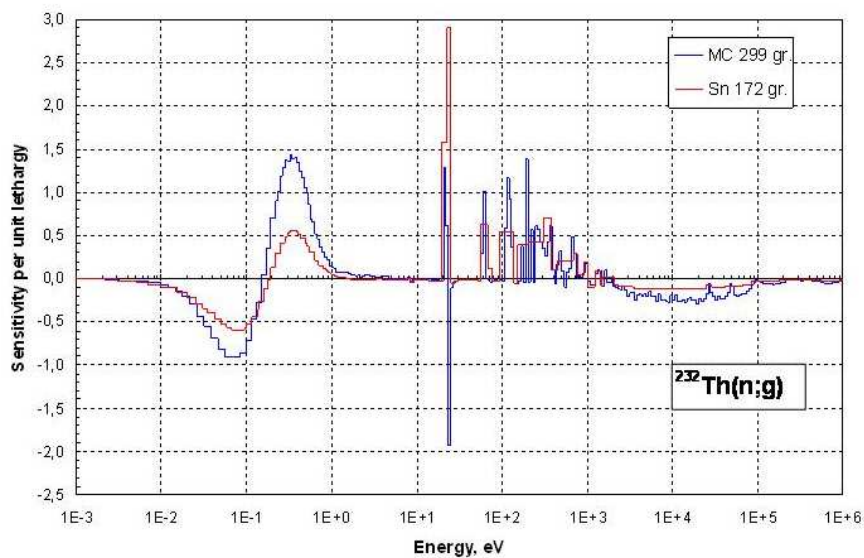


FIG. 5.10 – Comparaison du profil de sensibilité du coefficient de température à la section efficace de capture du ^{232}Th obtenu par les différentes méthodes

important.

- le thorium est le principal contributeur à l’effet Doppler comme le montre la sensibilité positive (si les résonances étaient plus grandes, le coefficient Doppler serait encore plus important) très importante du coefficient de température aux résonances résolues de la section efficace de capture du ^{232}Th . Nous ne comprenons pas bien la sensibilité négative du coefficient de température à la section efficace de capture du ^{232}Th dans la zone des résonances non-résolues. Une explication pourrait être que si l’on augmente les captures dans cette zone, on diminue l’effet Doppler puisque moins de neutrons ralentissent jusqu’aux grandes résonances, ce qui diminuerait le coefficient de température.

Ces analyses permettent une meilleure compréhension de la physique des coefficients de température et des sections efficaces mises en jeu. En particulier, elles mettent bien en évidence le rôle des absorptions par le thorium au niveau du léger renforcement de la section efficace de fission de l’ ^{233}U par rapport à la section efficace de capture du ^{232}Th . Les auteurs de la référence [96] ont d’ailleurs proposé une possibilité d’amélioration du coefficient de température du graphite en mélangeant au graphite un absorbant avec une résonance de capture bien placée de manière à compenser l’excès de fission lorsque la température du graphite s’élève. Ainsi, la pénalité sur la régénération, liée à l’ajout d’un absorbant, est limitée puisqu’en condition normale le flux dans cette zone est relativement faible. L’erbium 167, avec ses résonances à 0,46 eV et 0,58 eV conviendrait parfaitement.

5.3.3 Propagation des incertitudes de la section efficace de capture du ^{232}Th

Nous savons que la capture du ^{232}Th est la principale source d’incertitude du calcul du k_{eff} . Nous avons vu que les sensibilités du coefficient de température étaient très importantes pour cette réaction. Il est donc vraisemblable que la section efficace de cette réaction soit aussi la principale source d’incertitude du calcul du coefficient de température. Les informations sur l’incertitude sur la section efficace de capture du thorium sont très pauvres comme nous l’avons vu au chapitre 2.4.4. Or, l’incertitude dépend beaucoup des différences de sections efficaces avec la température (en particulier dans la zone des résonances). Toutefois, c’est bien la valeur de la section efficace par rapport à celle des autres réactions qui fait l’importance de la section efficace de capture du thorium. Les calculs des sensibilités sont très difficiles et relativement peu fiables. Les écarts entre les sensibilités calculées par les deux méthodes, Monte-Carlo et Sn , sont importants. Ils sont ici exacerbés par la nature même de l’observable étudiée : le coefficient de température est la différence entre deux valeurs très proches. L’étude de ces variations relatives est très difficile car les données de bases, les modélisations, les méthodes numériques sont différentes. Nous utilisons donc les résultats de la méthodologie russe parce qu’elle possède une modélisation

plus fine du réacteur et que ses analyses de sensibilité sont plus éprouvées [102, 103]. Les résultats de l'analyse d'incertitude faite ici sont à utiliser avec précaution. Au mieux, ils donnent un ordre de grandeur de l'incertitude sur le coefficient de température.

La figure 5.11 donne les profils de la variance¹¹ et de l'intégrale de la variance¹² du coefficient de température. Le profil de la variance donne une idée de la contribution à l'incertitude de chaque groupe d'énergie. Comme la sensibilité est négative dans certains groupes et que les corrélations entre les énergies sont égales à 1 pour des grands groupes en énergie, il arrive que les incertitudes se compensent au sein de ces groupes. On voit bien sur l'intégrale de la variance, les compensations entre les deux côtés de la bosse thermique. De même, l'incertitude sur les résonances non-résolues compense celle sur les résonances résolues. On calcule aisément la contribution à l'erreur à un sigma, de la section efficace de capture du ^{232}U ¹³ en prenant la racine de la valeur de l'intégrale de la variance contenant tout le spectre en énergie. **L'incertitude totale apportée par la section efficace de capture du thorium sur le coefficient de température est d'environ 2,5%.** Ce résultat est très important puisque l'on voit que l'incertitude est relativement faible¹⁴. Pourtant le coefficient de température est petit et l'on pouvait s'attendre à des grandes incertitudes relatives. Les données du thorium, malgré de fortes incertitudes seraient donc relativement bonnes pour l'estimation des calculs de coefficients de température. Toutefois, étant données les hypothèses faites pour le calcul, en particulier la qualité de l'évaluation des incertitudes, sa portée doit être relativisée. En effet, les sensibilités sont très importantes, et l'on doit à la pauvreté de la matrice de corrélation les effets de compensation d'erreurs entre les différentes énergies. De plus, il faudrait ajouter la contribution des autres réactions à l'incertitude totale. Une autre source d'incertitude pour le coefficient de température est le traitement de la liaison chimique du carbone dans le graphite qui n'est pas étudié ici.

5.4 Analyse de sensibilité du taux de régénération

Nous avons vu que les incertitudes sur les données se traduisent par une incertitude sur le facteur de multiplication, que nous avons calculée en utilisant la théorie des perturbations. Un réacteur de puissance fonctionne en régime critique stable, c'est-à-dire à $k_{eff} = 1$. Sa configuration est donc prévue pour compenser non seulement les excursions de réactivité dans tous les cas (arrêt, fonctionnement nominal, accident...), mais aussi les écarts de réactivité (entre la réacti-

¹¹ $V_{\frac{\partial \rho}{\partial T}}(g) = S_{\frac{\partial \rho}{\partial T}}(g) \sum_k S_{\frac{\partial \rho}{\partial T}}(k) Cov(g, k)$

¹² $I(g) = \sum_{k=1}^{k=g} V_{\frac{\partial \rho}{\partial T}}(k)$

¹³Qui est vraisemblablement la plus grande contribution de loin, et donc celle qui impose l'ordre de grandeur que nous recherchons.

¹⁴elle est plus petite que l'incertitude sur le k_{eff} !

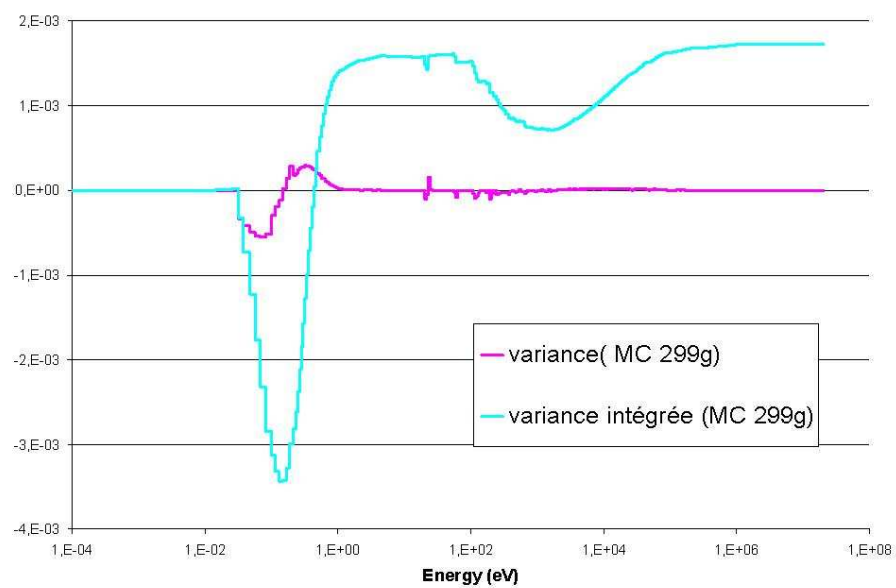


FIG. 5.11 – Variance et intégrale de la variance de la contribution de la section efficace de capture du ^{232}Th à l'incertitude sur le calcul du coefficient de température

tivité calculée et celle mesurée lors du démarrage) dus aux incertitudes sur les calculs utilisés pour le dimensionnement. Il faut donc prévoir des marges d'autant plus grandes que les incertitudes sont plus importantes. Pour compenser un écart éventuel entre le k_{eff} obtenu et celui estimé, le retraitement en ligne sera utilisé pour changer la concentration de ^{233}U . L'objectif est de favoriser les réactions sur ^{233}U (donc essentiellement des fissions) par rapport aux autres réactions ayant lieu dans le réacteur. Une incertitude sur le k_{eff} se traduit par une incertitude sur la concentration d'uranium. L'incertitude sur le k_{eff} provient majoritairement de l'incertitude sur la section efficace de capture du thorium, elle est de l'ordre de 3% (cf. tableau 5.6). L'ajustement du facteur de multiplication au démarrage s'obtient par une modification de la concentration d' ^{233}U .

La sensibilité du k_{eff} à la concentration de l'uranium peut être approximée par la somme des sensibilités des différentes réactions sur ^{233}U , soit environ 0,3% par pourcent quelle que soit la méthode de calcul utilisée (cf. annexe A pour plus de détails). La correction à apporter est de l'ordre de 10%. On atteint ici les limites de l'hypothèse du premier ordre qui a servi au calcul des sensibilités. Seul un réacteur à combustible liquide peut accepter une telle incertitude sur son enrichissement. Il semble difficile d'imaginer une filière de fabrication et d'utilisation de combustible classique dont l'enrichissement n'est connu qu'à 10% près en ne comptant que l'incertitude due aux données nucléaires. Cette très grande incertitude va, à son tour, changer les caractéristiques du réacteur :

- Avec quelques pourcent d'uranium en plus ou en moins, le niveau de flux changera. La puissance P étant proportionnelle à la somme des fissions (cf. l'équation 5.2) et ^{233}U fournissant 80% des fissions, le flux doit être modifié pour retrouver la puissance nominale pour laquelle le circuit de refroidissement a été dimensionné. La variation du flux a un effet sur l'équilibre des noyaux dont la disparition est une compétition entre les réactions nucléaires et les décroissances radioactives. En particulier, le cas du ^{233}Pa , qui tient un rôle prépondérant dans la marge de régénération du cycle du thorium est étudié dans le paragraphe suivant.

$$P = \sum_{i=\text{noyaux lourds}} N_i * \sigma_f^i * E_{fission}(i) * \phi \quad (5.2)$$

où $E_{fission}(i)$ est l'énergie produite par fission du noyau i .

- Le spectre pourrait être aussi sensiblement différent du spectre attendu, ce qui aurait un effet sur la répartition des taux de réaction sur les autres noyaux, et donc sur toutes les concentrations à l'équilibre.
- La concentration de noyaux lourds étant partiellement imposée par des considérations de stabilité chimique du sel, la concentration de thorium est ajustée pour conserver la propor-

tion de noyaux lourds constante. Comme le thorium représente 95% de ces noyaux lourds, un changement de quelques pourcent de concentration pour les autres noyaux changera peu celle du thorium. L'impact neutronique de cette contrainte est donc limité.

- La régénération correspond au rapport production sur consommation d' ^{233}U . La consommation étant proportionnelle à la concentration d' ^{233}U , et la production proportionnelle à celle du ^{232}Th , un changement de concentration de l' ^{233}U risque d'avoir un impact important.

5.4.1 Impact de l'ajustement de la concentration d'uranium sur celle du proactinium

La concentration du ^{233}Pa dépend d'un équilibre entre la production par capture sur le thorium, les disparitions par décroissance naturelle, la capture et la chimie.

La conservation du ^{233}Pa s'écrit¹⁵ :

$$\frac{\partial N_{Pa}}{\partial t} = 0 = N_{Th}\sigma_c^{Th}\phi - N_{Pa}\sigma_c^{Pa}\phi - \lambda_{Pa}N_{Pa} \quad (5.3)$$

La concentration de ^{233}Pa à l'équilibre est donc :

$$\frac{N_{Th}\sigma_c^{Th}\phi}{\lambda_{Pa} + \sigma_c^{Pa}\phi} = N_{Pa} \quad (5.4)$$

Les captures sur le ^{233}Pa sont nettement minoritaires¹⁶ par rapport aux décroissances, sinon le cycle thorium ne pourrait évidemment pas fonctionner. La concentration du ^{233}Pa dépend du flux. Comme on travaille à puissance constante, si la concentration d' ^{233}U varie, le flux varie en sens inverse. Regardons l'effet de cette variation du flux sur la régénération. En utilisant l'expression de la régénération définie comme le rapport de production d' ^{233}U sur sa consommation et l'équation précédente 5.4, on trouve :

$$BR = \frac{N_{Th}\sigma_c^{Th} - N_{Pa}\sigma_c^{Pa}}{N_U\sigma_f^U(1 + \alpha)} = \frac{N_{Th}\sigma_c^{Th}(1 - \frac{\sigma_c^{Pa}\phi}{\lambda_{Pa} + \sigma_c^{Pa}\phi})}{N_U\sigma_f^U(1 + \alpha)} = \frac{N_{Th}\sigma_c^{Th}}{N_U\sigma_f^U(1 + \alpha)} \left(\frac{\lambda_{Pa}}{\lambda_{Pa} + \sigma_c^{Pa}\phi} \right) \quad (5.5)$$

où α est le rapport capture sur fission de l' ^{233}U . Cette équation permet de montrer simplement que la régénération est sensible au premier ordre aux sections efficaces et aux concentrations du ^{232}Th et de l' ^{233}U . Par conservation de la puissance, la variation de la concentration de l'uranium a un effet du premier ordre sur le flux. Le flux apparaît ici dans le terme $\sigma_c^{Pa}\phi$ et ce terme est très minoritaire par rapport à λ_{Pa} . L'impact sur la régénération, de la variation du flux liée

¹⁵On peut considérer que λ_{Pa} correspond à la durée de vie effective et contient la durée de vie "chimique" : $\lambda_{Pa} = \ln(2)/\tau_{Pa} + 1/T_{chimie}$.

¹⁶dans le rapport de 2,5%, voir chapitre 6

à la conservation du k_{eff} et de la puissance est donc seulement un effet du second ordre. Cet exemple montre bien l'importance de prendre en compte, non seulement les effets directs des variations des taux de réaction¹⁷, mais aussi l'impact de contraintes extérieures liées aux lois de conservation, de la criticité en particulier.

5.4.2 Conservation du k_{eff} et de la régénération : impact sur le besoin en retraitement

On cherche à obtenir la sensibilité de la régénération aux données nucléaires, dans un RSF dont la criticité est contrôlée par l'apport d'²³³U, à puissance et à contenu en noyaux lourds constants. Nous avons vu précédemment que les deux dernières contraintes apportaient des corrections mineures par rapport à la contrainte de criticité.

Si on regarde les équations définissant la régénération (équation A.6 de l'annexe A.1) et le k_{eff} (équation A.1 redétailée dans l'équation 5.6), on voit que la section efficace de capture du ²³²Th et la concentration de l'²³³U jouent des rôles symétriques. Ainsi, si la section efficace de capture du ²³²Th se révèle être plus petite que celle évaluée aujourd'hui, on diminuera la concentration d'²³³U pour conserver un réacteur critique.

$$k_{eff} = \frac{N_U \nu \sigma_f^U + R_{fiss}}{N_U \sigma_f^U (1 + \alpha) + N_{Th} \sigma_c^{Th} + R_{disp}} \quad (5.6)$$

Quantitativement, si on écrit la conservation du k_{eff} et que l'on cherche la variation relative de la régénération, en ne regardant au premier ordre que les variations de ces grandeurs avec la concentration d'²³³U et l'incertitude due à la section efficace du ²³²Th, on obtient le système :

$$\begin{cases} \frac{\Delta k_{eff}}{k_{eff}} = S_{k_{eff}}^{N_U} \frac{\Delta N_U}{N_U} + I_{k_{eff}}^{Th} = 0 \\ \frac{\Delta BR}{BR} = S_{BR}^{N_U} \frac{\Delta N_U}{N_U} + I_{BR}^{Th} \end{cases}$$

où $I_{k_{eff}}^{Th}$ et I_{BR}^{Th} correspondent aux incertitudes relatives sur le k_{eff} et le BR apportées par l'incertitude sur la capture du ²³²Th. On les obtient à partir de la formule 3.37 de propagation des incertitudes, c'est-à-dire en prenant la racine du produit des covariances par les sensibilités.

On obtient finalement l'incertitude sur la régénération :

$$\frac{\Delta BR}{BR} = I_{BR}^{Th} - \frac{S_{BR}^{N_U}}{S_{k_{eff}}^{N_U}} I_{k_{eff}}^{Th} \quad (5.7)$$

Il ne nous est pas possible de calculer cette incertitude exactement. Malgré nos efforts (cf. chapitre 4.5), nous ne possédons pas d'outil permettant de calculer dans l'immédiat, la fonction-

¹⁷Qui pourraient correspondre à des variations de sections efficaces.

importance nécessaire à la formule 3.32, donnant les sensibilités des taux de réaction aux données nucléaires. Toutefois l'annexe A montre que l'on peut obtenir les ordres de grandeurs et les tendances des sensibilités intégrées en étudiant les taux de réaction ¹⁸. Nous avons vu avec la figure 4.7 du paragraphe 4.4 que les taux de réaction donnent une bonne idée du profil de sensibilité même s'il manque l'importance spécifique à chacun de ces taux de réaction pour avoir une bonne sensibilité. La seule matrice de covariance disponible pour la section efficace de capture du ²³²Th étant pratiquement diagonale et l'incertitude étant quasiment constante, en tout cas dans le domaine des résonances important pour ce réacteur, la matrice de covariance de la capture du ²³²Th peut être réduite à une seule valeur correspondant à l'incertitude moyenne sur tout le spectre soit environ $\frac{\Delta\sigma_{capt}^{Th}}{\sigma_{capt}^{Th}} = 12\%$. Les équations du type 3.37 pour les incertitudes sur le k_{eff} et sur la régénération peuvent donc se simplifier¹⁹ :

$$\begin{cases} I_{k_{eff}}^{Th} = S_{k_{eff}}^{\sigma_{capt}^{Th}} * \frac{\Delta\sigma_{capt}^{Th}}{\sigma_{capt}^{Th}} \\ I_{BR}^{Th} = S_{BR}^{\sigma_{capt}^{Th}} * \frac{\Delta\sigma_{capt}^{Th}}{\sigma_{capt}^{Th}} \end{cases}$$

Les sensibilités présentes dans ces équations étant simplement les sensibilités intégrées calculables, soit par la théorie des perturbations, soit par calcul direct, soit par calcul "manuel" en utilisant les taux de réaction. L'équation 5.7 peut alors être réécrite :

$$\frac{\Delta BR}{BR} = (S_{BR}^{\sigma_{capt}^{Th}} - \frac{S_{BR}^{N_U}}{S_{k_{eff}}^{N_U}} S_{k_{eff}}^{\sigma_{capt}^{Th}}) \frac{\Delta\sigma_{capt}^{Th}}{\sigma_{capt}^{Th}} \quad (5.8)$$

Ce qui nous permet de définir la sensibilité de la régénération à k_{eff} constant

$$\frac{\Delta BR}{BR} = S_{BR}^{\sigma_{capt}^{Th}} \Bigg|_{k_{eff}=cst} \frac{\Delta\sigma_{capt}^{Th}}{\sigma_{capt}^{Th}} \quad (5.9)$$

avec

$$S_{BR}^{\sigma_{capt}^{Th}} \Bigg|_{k=cst} = S_{BR}^{\sigma_{capt}^{Th}} - \frac{S_{BR}^{N_U}}{S_{k_{eff}}^{N_U}} S_{k_{eff}}^{\sigma_{capt}^{Th}} \quad (5.10)$$

Le tableau 5.7 donne les applications numériques des sensibilités de la régénération, à k_{eff} constant, à la section efficace de capture du ²³²Th et l'incertitude. Elles ont été obtenues soit par des calculs directs, MCNP au LPSC Grenoble ou APOLLO2 à EdF Clamart, soit par des calculs "manuels".

Il est important de remarquer que la sensibilité prenant en compte la contrainte de criticité est environ 4 à 5 fois plus faible que la sensibilité intégrée simple. La symétrie des rôles du ²³²Th

¹⁸Nous avons vu que pour la sensibilité au k_{eff} , cela revenait à faire l'hypothèse $\phi^* = 1$. Dans le cas de la régénération, cela revient à faire l'hypothèse que $\Gamma^* = 0$

¹⁹Ces simplifications reviennent à remplacer l'intégrale de produits par le produit des intégrales, d'après l'inégalité de Cauchy-Schwarz, cette simplification surestime l'incertitude réelle.

méthodes	Sensibilité brute	Sensibilité k_{eff} constant	incertitude(%)
MCNP	0,576	0,125	1,5
Manuelle	1,02	0,215	2,58

TAB. 5.7 – Comparaison des sensibilités de la régénération à la section efficace de capture avec ou sans prise en compte de la conservation de la criticité. Incertitude de la régénération induite par la section efficace de capture du ^{232}Th à k_{eff} constant

et de l' ^{233}U dans les définitions du k_{eff} et de la régénération est à l'origine de cette compensation comme pressentie en introduction de ce paragraphe. L'incertitude obtenue (1,5%) est une surestimation assez grossière puisque seules les sensibilités intégrées ont été prises en compte. De plus l'incertitude sur la donnée de base (la section efficace de capture du ^{232}Th) n'est vraisemblablement plus représentative des incertitudes sur les évaluations récentes, et encore moins sur celles en construction utilisant les données mesurées sur les expérimentations de n-TOF et de GEEL.

Le raisonnement mené ici ne prend en compte que l'incertitude sur la section efficace de capture du ^{232}Th . Celle-ci est la contribution principale à l'incertitude sur le k_{eff} . On obtient une incertitude de 1,5%²⁰, ce qui est loin d'être négligeable puisque la régénération est de 1,002 dans le concept de référence²¹. Cette incertitude est de l'ordre de grandeur du changement de régénération correspondant à une variation de la vitesse de retraitement du sel de 50% (*i.e.* 3 mois au lieu de 6 par exemple) [104]. Les incertitudes sur les sections efficaces ont un impact majeur sur le dimensionnement du réacteur et de l'usine de retraitement associée.

D'autres données nucléaires participent au bilan neutronique et donc à la régénération. Nous avons vu que la sensibilité de la régénération aux sections efficaces de l' ^{233}U est très importante. Le chapitre suivant montre comment on obtient une estimation des contributions d'autres réactions nucléaires aux incertitudes en prenant en compte non seulement la contrainte de criticité du RSF, mais aussi la particularité des cycles des réacteurs de Génération IV : l'équilibre des concentrations de noyaux dans le combustible.

²⁰alors que l'on avait plus de 3% sur le k_{eff}

²¹Sachant que le gain de régénération est de 0,002, une incertitude de 1,5 % sur la régénération correspond à incertitude de 1000% !

Chapitre 6

Conservation des neutrons à l'équilibre des cycles fermés

La plupart des réacteurs de Génération IV sont régénérateurs et incinérateurs (au moins de leurs propres déchets) pour respecter la contrainte de durabilité [1]. L'idée est de minimiser le stockage en profondeur en n'y mettant que les produits de fission et la fraction résiduelle de noyaux lourds perdue au retraitement. Dans ces réacteurs, les noyaux lourds sont recyclés à l'infini dans les réacteurs producteurs d'énergie. On s'intéresse ici au bilan neutronique des réacteurs à cycle fermé à l'équilibre. En cycle fermé, l'utilisation du minerai de combustible est maximum, puisque aucun noyau lourd n'est écarté : chaque noyau fertile disparaît par fission après un nombre plus ou moins grand de captures neutroniques. Si le nombre de neutrons capturés avant cette fission est supérieur au nombre de neutrons produits par fission¹, le réacteur ne sera pas critique. Il faut donc améliorer l'économie des neutrons, en ouvrant le cycle, par exemple, c'est-à-dire en sortant des réacteurs la partie des noyaux lourds la plus pénalisante, en terme de consommation de neutrons. On sait que dans les réacteurs au thorium, le bilan est très tendu et que la séparation du ^{237}Np au retraitement permet de "couper" la chaîne de production de noyaux lourds et ainsi d'améliorer la régénération. Lorsqu'il y a une marge de neutrons disponibles², on cherche à savoir dans quelle mesure cette marge est connue, de quelles réactions elle dépend. Dans le cas du cycle thorium, on aimerait savoir quelle est la sensibilité de la marge de neutrons disponibles pour la régénération relativement à la vitesse du retraitement, c'est-à-dire à la vitesse d'extraction du ^{237}Np , du ^{233}Pa et des produits de fission. Nous recherchons non pas des formules exactes, mais plutôt les simplifications et les hypothèses à faire, permettant d'apprécier l'incertitude sur les

¹aux fuites et aux captures sur les produits de fission et sur les matériaux près

²Ce qui peut être utile pour augmenter les fuites, de manière à améliorer les coefficients de température, ou pour incinérer certains produits de fission à vie longue, ou des noyaux lourds provenant d'autres réacteurs

phénomènes principaux. De plus, il faudrait savoir quelles sont les données les plus importantes pour la mise à l'équilibre d'un réacteur dont le cycle est en partie fermé.

6.1 Fermeture des cycles

Il existe parmi les noyaux lourds, une séparation évidente entre les noyaux fissiles et fertiles. Les noyaux fertiles peuvent être caractérisés par une fission à seuil et donc par une probabilité de capture très nettement supérieure³ à la probabilité de fission. Les noyaux fissiles sont caractérisés par une fission sans seuil dont la probabilité est souvent nettement plus grande que celle de la capture à toutes les énergies. Dans les deux cycles fermés possibles, deux noyaux sont particulièrement importants : l' ^{1238}U et le ^{232}Th . Ce sont les noyaux fertiles qui produiront *in fine* l'énergie par fission d'un noyau produit par un certain nombre de captures et de décroissances⁴.

Ainsi le cycle atteint un équilibre, c'est-à-dire que les concentrations de noyaux et les taux de réaction n'évoluent quasiment plus. A quelle échelle de temps, et à quelle précision cette non-évolution est-elle vraisemblable ?

Cette notion existe réellement dans un concept de Réacteur à Sels Fondus puisque le retraitement en ligne permet de maintenir une concentration de produits de fission constante et que la circulation continue du sel force l'homogénéisation. Si le réacteur est sur-générateur ou sous-générateur, l'alimentation ou le retrait du fissile principal (l' ^{233}U pour le cycle Th/U et le ^{239}Pu pour le cycle U/Pu) en continu permet d'assurer l'équilibre.

Dans un concept à combustible solide, l'accumulation des produits de fission modifie légèrement le bilan neutronique au cours du cycle d'irradiation. Toutefois la notion d'équilibre reste pertinente pour des réacteurs à spectre rapide dans lequel l'empoisonnement par les produits de fission est limité. Quant aux noyaux lourds, si le temps de refroidissement est court et le retraitement rapide, ils sont effectivement très proches de l'équilibre. Excepté le noyau fertile qui est consommé⁵ et le noyau fissile principal qui est lentement⁶ consommé ou accumulé selon le taux de régénération du concept, les concentrations avant et après rechargement sont identiques par définition du cycle partiellement fermé. Si le retraitement est lent, de l'ordre de grandeur des décroissances du ^{241}Pu (14,35 ans), du ^{243}Cm (29,1 ans) et du ^{244}Cm (18,1 ans), on atteindra un équilibre très différent. Toutefois, le déploiement de la filière U/Pu à neutrons rapides étant dicté par le coût de la matière fissile, il est difficilement imaginable d'augmenter les inventaires

³ Au moins jusqu'au seuil, c'est-à-dire aux énergies d'intérêt pour les réacteurs critiques.

⁴ Ce nombre est parfois 0 dans le cas où le fertile lui-même fissionne

⁵ et qui remplace les noyaux lourds fissionnés pour produire de l'énergie !

⁶ Aujourd'hui, la tendance est de travailler autour de l'isogénération donc le bilan du fissile principal est neutre. De plus, quand bien même les concepts sont sur-générateurs, les temps de doublement les plus courts possibles sont de l'ordre de 20 ans : la concentration de fissile est environ 5% plus forte après un an d'irradiation.

pour laisser de grandes quantités de matière, en particulier fissile, refroidir à l'extérieur des réacteurs, en attente de recyclage. Les stratégies envisagées aujourd'hui sont plutôt, de raccourcir au maximum le cycle du combustible et d'utiliser des retraitements pyrochimiques ⁷ pour limiter les besoins en matière fissile. Ainsi, l'hypothèse, de concentrations de noyaux et de taux de réaction constants, est considérée comme valide à l'échelle de la précision que nous recherchons.

Nous appliquons notre discussion aux cycles de trois RSF. Les deux premiers sont des réacteurs au thorium fonctionnant en spectre épithermique. Le premier (RSF 1) est le réacteur de référence développé dans les travaux de thèse [93], dont le sel à base de Li-F-Be est retraité en dix jours seulement, ce qui permet une régénération relativement forte pour un réacteur au thorium ($BR = 1,038$ environ). Le second (RSF2) est le réacteur de référence des études EdF/CNRS [95] à cycle thorium et à retraitement simplifié présenté au chapitre 5. Dans ce dernier, le cycle thorium envisagé est relativement court, car le ^{237}Np est extrait en continu et donc les noyaux lourds supérieurs sont produits en très petite quantité. Le troisième (RSF 3) est un réacteur à neutrons rapides en cycle U/Pu quasi-régénérateur décrit dans la thèse [93].

Les taux de réaction à l'équilibre sont présentés sur les figures 6.1 et 6.2. On y distingue les noyaux en fonction de leur mode de disparition majoritaire. A priori, on ne considère pas les chaînes complètes et on peut négliger les décroissances α minoritaires. Cette hypothèse n'est pas gênante dans le cas du cycle Th/U. Dans le cycle U/Pu, le ^{238}Pu est produit par décroissance α du ^{242}Cm . Sachant que ce noyau produit environ 1% des fissions et 1% du ^{239}Pu par capture, il n'est pas tout à fait négligeable. De même, 1% du ^{240}Pu est produit par décroissance du ^{244}Cm . L'impact est donc faible pour le ^{240}Pu , mais très important pour le ^{244}Cm . Les réactions minoritaires, comme les réactions (n, xn) , peuvent souvent être négligées. Dans les cas où elles contribuent beaucoup au bilan de neutrons, comme les réactions $(n, 2n)$ sur le béryllium ou sur le ^{232}Th , on peut les compter comme une sorte de décroissance. On prendra garde, dans le bilan neutronique, à compter positivement la production de neutrons liée à ces réactions.

6.2 Equilibre des noyaux lourds

Pour chaque noyau, on va estimer sa probabilité d'apparition ainsi que les neutrons produits et consommés nécessaires à sa disparition.

Certains noyaux peuvent être produits de plusieurs manières différentes : par captures et décroissances β ou α successives. C'est le cas de ^{234}U du cycle thorium qui est produit, soit par capture sur ^{233}U qui provient lui-même de la décroissance du ^{233}Pa , soit par décroissance du ^{234}Pa provenant de la capture sur le ^{233}Pa . Chaque voie est à l'équilibre, on peut donc séparer

⁷qui pourraient être faits même sur des combustibles très radioactifs

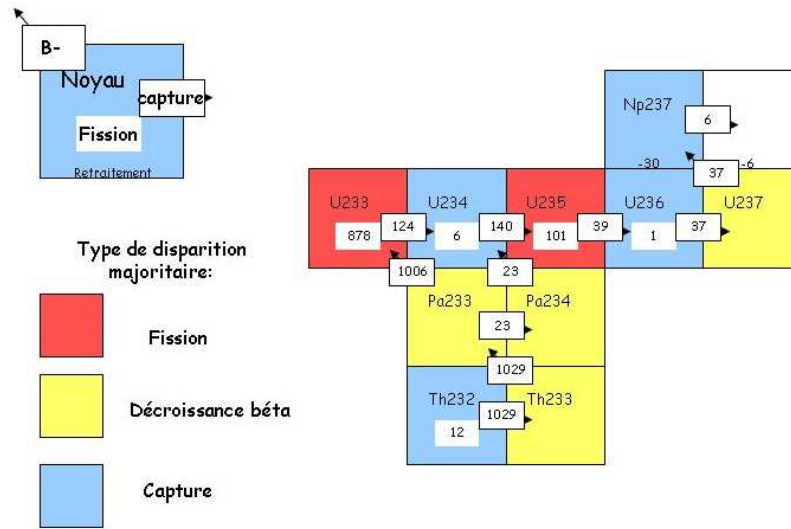


FIG. 6.1 – Représentation dans le plan (N,Z) des chaînes de réaction des noyaux lourds du cycle Th/U dans le RSF 2. Les taux de réaction sont normalisés à 1000 fissions.

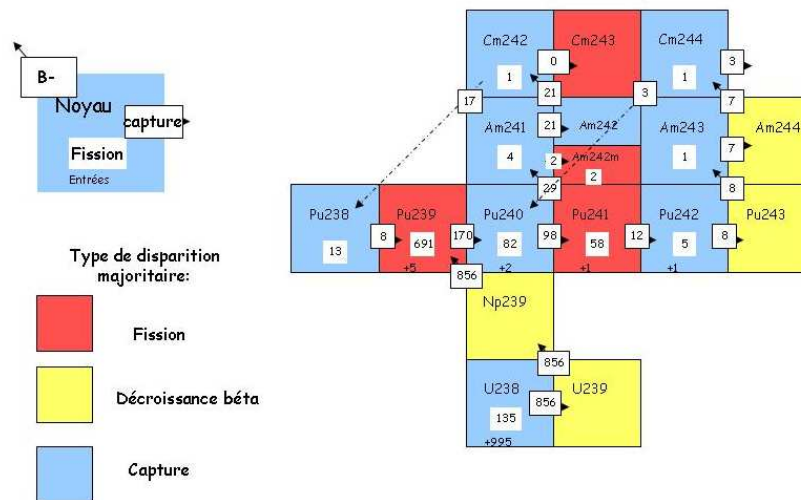


FIG. 6.2 – Représentation dans le plan (N,Z) des chaînes de réaction des noyaux lourds du cycle U/Pu dans le RSF 3. Les taux de réaction sont normalisés à 1000 fissions

les contributions de chacune des voies de production du nucléide qui nous intéresse.

On note i l'indice d'un noyau dans une chaîne j . i est le nombre de captures neutroniques et de décroissances nécessaires pour obtenir le noyau i à partir du noyau de départ. Le ^{240}Pu a l'indice 1 dans le cas où l'on regarde la chaîne basée sur les noyaux de ^{239}Pu . Ceux-ci viendraient d'un ajout de Plutonium dans le cycle de U/Pu par exemple. Dans ce modèle, le chargement apparaît comme un terme source dans l'équation d'équilibre. Chaque noyau apporté de l'extérieur est donc le père d'un certain nombre de chaînes où seul le noyau d'indice 0 possède une source notée S_j . Les principales chaînes du cycle du thorium sont détaillées dans le tableau 6.1. En réalité, la plupart des noyaux de ^{233}Pa décroissent en cœur. Il faudrait donc distinguer une chaîne correspondant aux noyaux qui décroissent en cœur⁸ et une autre qui correspond aux noyaux sortis par la chimie. Les deux peuvent être considérés comme une seule chaîne, à condition de considérer une sortie plus importante de ^{233}Pa et une entrée plus importante d' ^{233}U permettant de prendre en compte le fonctionnement effectif du réacteur et de son retraitement.

Chaîne j Indice i	1	2	3	4	5
0	^{232}Th	^{232}Th	^{232}Th	^{233}U	^{233}U
1	^{233}Th	^{233}Th	^{233}Th	^{234}U	^{234}U
2	^{233}Pa	^{233}Pa	^{233}Pa	^{235}U	^{235}U
3	retrait ou décroissance	^{234}U	^{234}U	^{236}U	^{236}U
4		^{235}U	^{235}U	^{237}U	^{237}U
5		^{236}U	^{236}U	^{237}Np	^{237}Np
6		^{237}U	^{237}U	retrait	^{238}Np
7		^{237}Np	^{237}Np		^{238}Pu
8		retrait	^{238}Np		^{239}Pu
9			^{238}Pu		^{240}Pu

TAB. 6.1 – Chaînes des noyaux du cycle T/U

Soit un nucléide d'indice $i > 0$ à l'équilibre. Avec nos hypothèses, s'il est produit par capture neutronique sur le noyau précédent d'indice $i - 1$, l'équation de conservation de sa concentration $N_{i,j}$ à l'équilibre s'écrit :

$$\frac{dN_{i,j}}{dt} = N_{i-1,j}\sigma_{capt}^{i-1,j}\phi - N_{i,j}\sigma_{capt}^{i,j}\phi - N_{i,j}\sigma_{fiss}^{i,j}\phi - \lambda_{i,j}N_{i,j} = 0 \quad (6.1)$$

⁸et qui ne s'arrête donc pas au ^{233}Pa

où $\lambda_{i,j}$ est une constante de décroissance⁹.

Si en revanche, il est produit par décroissance, l'équation de sa conservation est :

$$\frac{dN_{i,j}}{dt} = N_{i-1}^j \lambda_{i-1,j} - N_{i,j} j \sigma_{capt}^{i,j} \phi - N_{i,j} \sigma_{fiss}^{i,j} \phi - \lambda_{i,j} N_{i,j} = 0 \quad (6.2)$$

où $\sigma_x^{i,j}$ est la section efficace moyenne de la réaction x sur le nucléide i , c'est-à-dire l'intégrale triple sur les angles, le volume et l'énergie du produit du flux et de la section efficace divisée par l'intégrale triple de ϕ .

$$\sigma_x^{i,j} = \frac{\int_V \int_\Omega \int_E \sigma_x^{i,j}(V, \Omega, E) \phi(V, \Omega, E)}{\int_V \int_\Omega \int_E \phi(V, \Omega, E)} \quad (6.3)$$

On peut écrire sous une forme plus générale la concentration de ce noyau en fonction du noyau précédent :

$$N_{i,j} = N_{i-1,j} \frac{\gamma_{i-1,j}}{\sigma_{capt}^{i,j} \phi + \sigma_{fiss}^{i,j} \phi + \lambda_{i,j}} \quad (6.4)$$

où $\gamma_{i-1,j} = \sigma_{capt}^{i-1,j} \phi$ ou bien $\gamma_{i-1,j} = \lambda_{i-1,j}$ selon le mode de production du noyau i à partir du noyau d'indice¹⁰ $(i-1)$. Cette relation peut être généralisée simplement pour le noyau père d'indice 0. Puisque le numérateur correspond au taux de production du noyau i , ce numérateur est simplement égal à la source S_j dans le cas du noyau d'indice 0.

Soit encore, en divisant les numérateurs et dénominateurs par les sections efficaces de fission :

$$N_{i,j} = N_{i-1,j} \frac{\sigma_{fiss}^{i-1,j} \phi \Gamma_{i-1,j}}{\sigma_{fiss}^{i,j} \phi (1 + \alpha_{i,j} + \Lambda_{i,j})} \quad (6.5)$$

$$\text{où } \alpha_{i,j} = \frac{\sigma_{capt}^{i,j} \phi}{\sigma_{fiss}^{i,j} \phi}, \Gamma_{i-1,j} = \frac{\gamma_{i-1,j}}{\sigma_{fiss}^{i-1,j} \phi} \text{ et } \Lambda_{i,j} = \frac{\lambda_{i,j}}{\sigma_{fiss}^{i,j} \phi}.$$

Cette relation de récurrence à l'ordre i , permet d'écrire simplement la contribution de la chaîne j à la concentration du noyau i :

$$N_{i,j} = N_{0,j} \frac{\sigma_{fiss}^{0,j} \phi (1 + \alpha_{0,j} + \Gamma_{0,j})}{\sigma_{fiss}^{i,j} \phi (1 + \alpha_{i,j} + \Lambda_{i,j})} P_i^j \quad (6.6)$$

où P_i^j est la probabilité de produire le noyau i à partir du noyau père de la chaîne j :

$$P_i^j = \prod_{k=0}^{i-1} \frac{\Gamma_{k,j}}{1 + \alpha_{k,j} + \Lambda_{k,j}} \quad (6.7)$$

⁹ $\lambda_{i,j} = \ln(2)/T_{1/2}^{i,j} + 1/T_c^{i,j}$ ou $T_{1/2}^{i,j}$ est la demi-vie du nucléide et $T_c^{i,j}$ la demi-vie "chimique" correspondant à l'extraction de ce noyau par le retraitement en ligne.

¹⁰ Il est tout à fait possible d'élargir encore cette définition pour le cas de rapport de branchement, comme dans le cas de la décroissance du noyau produit par capture de l'²⁴¹Am, par exemple.

Le numérateur du terme précédent est simplement le taux de disparition du noyau père lié à la chaîne j . A l'équilibre, les disparitions sont égales aux créations et par suite, ce numérateur est simplement égal à S_j .

Cette formule s'interprète aisément. Le premier terme est le rapport des taux de réaction du noyau père 0 et du noyau i . Le terme produit est la probabilité d'obtenir le noyau i par la chaîne j . Le produit des deux traduit l'équilibre de la chaîne, car pour chaque élément de la chaîne, les disparitions doivent être égales aux apparitions. Cette formule est intéressante puisqu'elle permet, en additionnant toutes les chaînes, de retrouver les concentrations de chaque noyau en fonction des différentes voies de formation. Mais surtout, elle permet de comprendre l'importance relative de chaque taux de réaction.

Les caractéristiques du noyau i (décroissance, taux de réaction), n'interviennent en tant que telles, que dans le calcul de la concentration du noyau i . Pour les noyaux descendants du noyau i , seuls des rapports de taux de réaction et de constantes de décroissance apparaissent. Un taux de capture seul, ou une section efficace de fission seule, ne sont pas vraiment utiles, sauf pour calculer la concentration de ce noyau et donc pour les observables qui dépendent de cette concentration. Le calcul d'inventaire est important, en particulier pour calculer les flux de matière dans les usines de retraitement. Dans les cycles fermés, la radiotoxicité au bout de quelques centaines d'années est dominée par les pertes au retraitement, qui sont proportionnelles à l'inventaire. Cette démarche supposant l'équilibre, a d'ailleurs déjà été utilisée pour les calculs d'inventaire et de radiotoxicité [105]. Dans le cas nettement plus complexe, où le taux de réaction est en compétition avec une décroissance, il est important de remarquer que l'équilibre dépend aussi du niveau de flux et que la mesure absolue est alors nécessaire. Ce cas est finalement assez rare (^{233}Pa dans le cycle Th/U ou ^{241}Pu dans le cycle U/PU). Le flux est donc un paramètre supplémentaire, qui peut permettre une certaine marge de manœuvre sur le bilan neutronique. Les données relatives apparaissent en facteur de tous les noyaux fils. La sensibilité d'un paramètre intégral à une réaction qui changerait l'équilibre, est donc nettement plus importante que la sensibilité brute, calculée au moyen de la théorie des perturbations pour cette réaction. En effet, la sensibilité devrait tenir compte la modification de l'équilibre et donc de la modification des contributions des noyaux fils. C'est un point important, parce qu'expérimentalement, on mesure essentiellement des données relatives. Cette remarque est une réponse partielle aux questions posées lors du meeting JEFF du 4 Mai 2005 [106].

Les données relatives sont primordiales, sauf si un mode de décroissance est majoritaire ($\alpha \gg 1$ ou $\Lambda \gg 1$). Alors, les rapports de taux de réaction ne nous intéressent plus, puisqu'ils se simplifient entre le numérateur et le dénominateur du second terme de l'équation 6.6. Le fait qu'un α ou qu'un Λ soit majoritaire se traduit par un facteur égal P_i^j à 1 !

6.3 Bilan de neutrons

Chaque seconde, un noyau i consomme $\sigma_{fiss}^{i,j} \phi (1 + \alpha_{i,j})$ neutrons et en produit $\nu_{i,j} \sigma_{fiss}^{i,j} \phi$. Le noyau père de la chaîne est consommé au rythme de $S_j = N_{0,j} \sigma_{fiss}^{0,j} \phi (1 + \alpha_{0,j} + \Lambda_{0,j})$. La contribution au bilan de neutrons du noyau i de la chaîne j produit donc, pour chaque noyau père consommé :

$$Bilan_i^j = \frac{\nu_{i,j} - (1 + \alpha_{i,j})}{(1 + \alpha_{i,j} + \Lambda_{i,j})} P_i^j \quad (6.8)$$

En additionnant les contributions de tous les noyaux fils issus d'un noyau, on peut estimer le bilan neutronique de la chaîne j , ce qui permet de retrouver les coefficients D_j [107] :

$$D_j = \sum_{i=1}^{\infty} Bilan_i^j \quad (6.9)$$

Pour calculer le bilan d'un noyau père, il suffit d'additionner les contributions de toutes les chaînes à sa propre contribution $BP = \frac{\bar{\nu}_0 - (1 + \alpha_0)}{(1 + \alpha_0 + \Lambda_0)}$ et de soustraire les contributions des noyaux communs à plusieurs chaînes dont le comptage est redondant ¹¹ :

$$\frac{\bar{\nu}_0 - (1 + \alpha_0)}{(1 + \alpha_0 + \Lambda_0)} + D_{AX} = \frac{\bar{\nu}_0 - (1 + \alpha_0)}{(1 + \alpha_0 + \Lambda_0)} + \sum_j (D_j + Bilan_{i,j} \xi_{i,j}) \quad (6.10)$$

où $\xi_{i,j}$ est la fonction caractéristique qui vaut 1 si le noyau i est rencontré pour la première fois et 0 s'il a déjà été rencontré dans une chaîne d'indice j inférieur. D_{AX} correspond au bilan des descendants du noyau AX . Ce formalisme est relativement lourd pour retrouver finalement que la contribution d'un noyau quelconque est la somme des bilans de neutrons de fission et des neutrons d'absorptions pour tous ces descendants. Le principal intérêt pratique de cet outil est de mettre en évidence les données pour le calcul de l'équilibre.

6.3.1 Exemple sur le calcul du bilan de l' ^{234}U

Le cas de l' ^{234}U peut paraître compliqué si l'on utilise les chaînes proposées précédemment. Dans le cycle thorium (cf. figure 6.1), pour cet isotope, il suffit de suivre la consommation des chaînes 2 ou 4. En effet, comme les chaînes 3 et 5 sont plus courtes, on ne les compte pas pour ne pas comptabiliser 2 fois leurs contributions. Ainsi, sur cet isotope, une seule chaîne nous intéresse : celle qui correspond à des captures systématiques ou aux décroissances en cœur pour le ^{238}Np et pour le ^{237}U .

¹¹ comme le ^{233}Pa qui appartient à plusieurs chaînes basées sur le thorium dont la contribution ne doit être comptée qu'une fois

Une fois les α et les Λ calculés¹², les P_i^j se déduisent facilement avec la formule 6.7. Le calcul du D_{234U} est alors très simple puisqu’une seule chaîne doit être prise en compte.

6.3.2 Application numérique

Les tableaux 6.2, 6.3 et 6.4 présentent ces résultats, ainsi que les données qui ont permis de les obtenir¹³. Les données d’inventaires et de sections efficaces proviennent de la thèse d’A. Nuttin [93] pour le RSF à spectre rapide et pour le RSF F-Li-Be. Pour l’autre réacteur RSF au thorium, nous ne connaissons pas toutes les données de la simulation MCNP pour tous les isotopes. Sauf pour les données de l’²³³U, les données viennent du calcul APOLLO2 fait à EdF Clamart par D. Lecarpentier. Nous verrons que les données de l’²³³U sont cruciales pour le calcul de l’évolution. La comparaison est donc meilleure, en retenant les données utilisées à Grenoble pour le calcul d’évolution. Pour les réacteurs au thorium, les noyaux de Z supérieurs à 94 sont négligés¹⁴. Leurs contributions sont extrêmement faibles dans le bilan des réacteurs au thorium. Leurs inventaires sont d’autant plus faibles que dans le retraitement pris comme référence, celui du RSF 2, le ²³⁷Np est extrait. Les valeurs de contribution au bilan pour les plutoniums sont donc d’autant moins représentatives que l’on s’intéresse aux isotopes plus lourds. Les données de $\bar{\nu}$ proviennent de la thèse de A. Tchistiakov [108] pour le réacteur à spectre rapide¹⁵. Une contribution positive d’un noyau indique que, si on ajoute un tel noyau dans le cœur, sa disparition serait productrice nette de neutrons. On retrouve sans surprise les résultats de Salvatores *et al.* dans la référence [105]. Il est clair que dans le cycle U/Pu avec un spectre rapide, tous les noyaux sont contributeurs nets. Comme leur disparition ne consomme pas de neutrons, ils sont aisément incinérés. De plus, un grand nombre de neutrons est disponible.

Inversement, en cycle thorium épithermique, la disparition des noyaux fertiles est strictement consommatrice de neutrons, sauf pour le ²³⁸Pu assez fissile, qui produit beaucoup de neutrons par fission et dont le descendant par capture (le ²³⁹Pu) est un bon fissile. Il est intéressant de remarquer quelles chaînes basées sur les captures des noyaux fissiles (les D_X) changent sensiblement les contributions des noyaux fissiles. En effet, après une capture sur un noyau fissile, on arrive sur un noyau fertile et il faut donc encore perdre au moins un neutron pour retomber sur un nouveau noyau fissile producteur de neutrons.

¹²Pratiquement, il n’y a qu’un Λ non nul, celui correspondant à l’extraction chimique du ²³⁷Np.

¹³Pour les calculs du ²³²Th, du ²³³Pa et du ²³⁸U, on considère que les noyaux extraits sont réinjectés directement de façon à estimer non pas ce qui se passe dans le réacteur mais plutôt le bilan potentiel lié à l’introduction de ces noyaux dans ce type de réacteur.

¹⁴Placés au delà du Plutonium dont $Z = 94$

¹⁵Dans ce travail, l’étude portait sur les données du réacteur Superphénix. On fait donc l’hypothèse que ce réacteur avait un spectre suffisamment proche de celui du RSF à neutrons rapides pour avoir des nombres de neutrons par fission comparables.

noyau	α	$\bar{\nu}$	Bilan Propre	D_{AX}	bilan total
^{232}Th	157,9	2,38	-0,985	1,158	0,173
^{233}Pa	431,2	2,66	-5,672e-3	-0,005	1,166
^{233}U	1,242e-1	2,50	1,224	-0,044	1,180
^{234}U	75,93	2,62	-0,966	0,572	-0,394
^{235}U	2,329e-1	2,42	0,963	-0,384	0,579
^{236}U	44,76	2,57	-0,944	-1,087	-2,031
^{237}Np	189,2	2,80	-0,985	-0,127	-1,112
^{238}Pu	16,34	2,96	-0,829	0,702	-0,127
^{239}Pu	0,6087	2,87	0,783	-0,038	0,745
^{240}Pu	752,9	2,97	-0,996	0,896	-0,100
^{241}Pu	0,3602	2,94	1,158	-0,261	0,897

TAB. 6.2 – Contribution au bilan de neutron de la disparition d’une partie des actinides à l’équilibre du RSF 1, au thorium à retraitement rapide.

noyau	α	Λ	$\bar{\nu}$	Bilan Propre	D_{AX}	bilan total
^{232}Th	83,4	2e-7	2,38	-0,969	-0,03086	0,0750
^{233}Pa	225	8343,2	2,66	-0,0219	-9,267e-3	1,089
^{233}U	0,143	1e-6	2,48	1,1670	-0,0527	1,114
^{234}U	24,0	4e-4	2,62	-0,895	0,478	-0,418
^{235}U	0,360	3e-9	2,42	0,775	-0,278	0,498
^{236}U	34,6	7e-6	2,57	-0,927	-0,116	-1,04
^{237}Np	60,3	334	2,80	-0,146	0,0261	-0,120
^{238}Pu	3,91	0,221	2,96	-0,368	0,541	0,173
^{239}Pu	0,641	4e-5	2,87	0,746	-0,0318	0,714
^{240}Pu	207	0,01	2,97	-0,986	0,904	-0,0815
^{241}Pu	0,330	0,08	2,94	1,1424	-0,233	0,908

TAB. 6.3 – Contribution au bilan de neutron de la disparition d’une partie des actinides à l’équilibre du RSF 2, au thorium à retraitement simplifié.

noyau	α	Λ	$\bar{\nu}$	Bilan Propre	D_{AX}	bilan total
^{238}U	6,50	0,0	2,77	-0,631	1,35	0,716
^{239}Np	3,65	5456	2,91	-3,18e-4	1,55	0,55
^{238}Pu	0,598	0,0	3	0,877	0,83	1,46
^{239}Pu	0,246	0,0	2,94	1,36	0,196	1,56
^{240}Pu	1,21	0,0	3,03	0,374	0,617	0,991
^{241}Pu	0,213	0,498	2,97	1,03	0,507	1,13
^{242}Pu	1,48	0,0	3,04	0,225	0,0	0,829
^{241}Am	5,50	0,140	3,64	0,125	1,26	1,39
^{242}Am	0,143	1,54e+5	3,32	1,41e-5	1,47	1,47
^{242m}Am	9,26-2	3,17e-2	3,24	1,91	8,33e-2	1,99
^{243}Am	6,14	1,04e-2	3,43	-0,519	1,31	1,01
^{242}Cm	1,81	237	3,35	2,24e-03	1,47	1,47
^{243}Cm	8,70e-2	3,20	3,44	0,549	1,05	1,60
^{244}Cm	1,84	2,17	3,51	0,134	1,340	1,53
^{245}Cm	0,127	8,68e-4	3,88	2,44	0,239	2,68
^{246}Cm	0,750	1,27e-2	3,86	1,20	0,605	2,13
^{247}Cm	0,150	0,0	3,67	2,19	0,238	1,42
^{248}Cm	0,774	0,0	3,85	1,17	0,663	1,83
^{249}Bk	7,12	0,311	3,75	-0,518	2,04	1,52
^{249}Cf	0,242	1,91e-2	4,45	2,54	0,482	3,03
^{250}Cf	0,348	1,15	4	1,06	1,45	2,51
^{251}Cf	0,132	3,99e-3	4,5	2,97	0,205	3,17
^{252}Cf	0,397	9,39	4,33	2,63e-2	1,74	1,77

TAB. 6.4 – contribution au bilan de neutron de la disparition d’une partie des actinides à l’équilibre du RSF 3, à spectre rapide à combustible (U/Pu)Cl₃.

Pour le cycle Th/U, le nombre de neutrons produits lors de la disparition de chaque noyau de ^{232}Th est positif, de l'ordre de 0,17 neutron pour le RSF1 et 0,075 neutron pour le RSF2. C'est le nombre de neutrons disponibles pour faire autre chose que de l'énergie. Ce nombre est positif dans les deux concepts RSF 1 et RSF 2. On retrouve ainsi que les Réacteurs à Sels Fondus, peuvent être critiques et régénérateurs. Cependant, le nombre de neutrons disponibles est très faible. Les bilans détaillés calculés au LPSC/Grenoble[93], donnent 0,14 neutron par fission perdu par capture sur les structures et les produits de fission et une régénération de 0,038 pour le premier concept. Dans le second concept[95], il y a 0,072 neutron perdu par fission et une régénération de 0,002. Il est encourageant pour notre étude de retrouver le bon ordre de grandeur en utilisant uniquement les rapports de sections efficaces et les données de décroissance, mais en prenant en compte tous les descendants de chaque noyau. Ceci n'est pas vraiment étonnant puisque nous utilisons et nous réécrivons simplement les données et les équations utilisées pour calculer l'évolution du combustible¹⁶.

Au-delà des chiffres, la formule utilisée pour compléter les tableaux nous permet surtout de mieux comprendre quelles sont les données importantes pour les cycles à l'équilibre. Lorsqu'un noyau dont $\alpha \gg 1$ (ce qui n'est vrai que pour les fertiles en spectre thermique et pour ^{1241}Am en spectre rapide) disparaît, sa contribution est indépendante de sa section efficace de capture puisque de nouveau, le α va se simplifier entre le numérateur et le dénominateur des termes de l'équation 6.10. Peu importe sa section efficace de capture, son taux de capture sera constant et égal à son taux de production par capture sur le noyau père. **On retrouve ainsi le premier point soulevé : en spectre thermique, les sections efficaces de capture sont d'autant plus importantes que les noyaux ne sont pas fertiles !** Ce résultat est relativement étonnant. Il l'est d'autant plus que l'on a rarement l'habitude de travailler sur des cycles à l'équilibre. Ainsi, les données nucléaires importantes pour la mise à l'équilibre d'un cycle partiellement fermé, peuvent être différentes de celles importantes pour le calcul du k_{eff} comme les sections efficaces de capture sur les fertiles.

6.4 Gain de régénération

La régénération a déjà été décrite dans l'équation A.6 (annexe A.1) comme la probabilité de produire un noyau d' ^{233}U par noyau disparu par fission ou capture de ce noyau¹⁷.

Si on écrit le bilan du facteur de multiplication comme le fait que les productions par fission doivent être égales aux disparitions de neutrons (par fuites vers l'extérieur du réacteur, par

¹⁶la seule différence est que nous avons supposé l'équilibre

¹⁷Pour alléger les notations, sauf mention contraire, on utilisera dans les équations Th pour ^{232}Th , Pa pour ^{233}Pa et U pour ^{233}U .

capture ou réaction (n,p) sur les produits de fission ou sur les matériaux de structure comme le graphite, le lithium et le fluor), on obtient¹⁸ :

$$\begin{aligned} & \Sigma_f^{Th}(1 + \alpha_{Th})\left(\frac{\bar{\nu}_{Th} - (1 + \alpha_{Th})}{1 + \alpha_{Th}} + D_{Th}\right) \\ & + \Sigma_f^U(1 + \alpha_U)\left(\frac{\bar{\nu}_U - (1 + \alpha_U)}{1 + \alpha_U} + D_U\right) \\ & = \Sigma_c^{PF} + Fuites + \Sigma_c^{Reste} \end{aligned} \quad (6.11)$$

En utilisant la définition du rapport α et celle du coefficient D_{Th} rappelé dans les équations 6.12 et 6.13, on peut simplifier le premier terme¹⁹ pour obtenir l'équation 6.14.

$$\alpha_X = \frac{\Sigma_c^X}{\Sigma_f^X} \quad (6.12)$$

$$D_{Th} = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\bar{\nu}_{i,j} - (1 + \alpha_{i,j})}{(1 + \alpha_{i,j} + \Lambda_{i,j})} P_i^{Th} = \frac{\alpha_{Th}}{1 + \alpha_{Th}} \left(\frac{-\sigma_c^{Pa}\phi}{\sigma_c^{Pa}\phi + \lambda_{Pa}} + D_{Pa} \right) \quad (6.13)$$

$$\begin{aligned} & \Sigma_c^{Th} \left(\frac{\bar{\nu}_{Th} - 1}{\alpha_{Th}} - 1 + \frac{-\sigma_c^{Pa}\phi}{\sigma_c^{Pa}\phi + \lambda_{Pa}} + D_{Pa} \right) \\ & + \Sigma_f^U(1 + \alpha_U)\left(\frac{\bar{\nu}_U - (1 + \alpha_U)}{1 + \alpha_U} + D_U\right) \\ & = \Sigma_c^{PF} + Fuites + \Sigma_c^{Reste} \end{aligned} \quad (6.14)$$

On rappelle l'équation 5.5 de définition de la régénération et du gain de régénération GR :

$$BR = 1 + GR = \frac{\Sigma_c^{Th}}{\Sigma_f^U(1 + \alpha_U)} \left(\frac{\lambda_{Pa}}{\lambda_{Pa} + \sigma_c^{Pa}\phi} \right) \quad (6.15)$$

Ce qui nous permet de réécrire la section efficace de capture du thorium en fonction du gain de régénération :

$$\Sigma_c^{Th} = \Sigma_f^U(1 + GR)(1 + \alpha_U) \frac{\lambda_{Pa} + \sigma_c^{Pa}\phi}{\lambda_{Pa}} \quad (6.16)$$

En remplaçant le taux de capture du thorium dans 6.11, et en renormalisant, on obtient :

$$\begin{aligned} & (1 + GR) \frac{\lambda_{Pa} + \sigma_c^{Pa}\phi}{\lambda_{Pa}} \left(\frac{\bar{\nu}_{Th} - 1}{\alpha_{Th}} - 1 - \frac{\sigma_c^{Pa}\phi}{\sigma_c^{Pa}\phi + \lambda_{Pa}} + D_{Pa} \right) \\ & + \left(\frac{\bar{\nu}_U - (1 + \alpha_U)}{1 + \alpha_U} + D_U \right) \\ & = \frac{\Sigma_c^{PF} + Fuites + \Sigma_c^{Reste}}{\Sigma_f^U(1 + \alpha_U)} \end{aligned} \quad (6.17)$$

¹⁸après simplification par le flux qui est facteur de tous les termes

¹⁹dont on néglige la fission

Ce qui permet, après quelques calculs, de détailler le gain de régénération :

$$GR = \frac{1}{1 + 2\frac{\sigma_c^{Pa}\phi}{\lambda_{Pa}} - \frac{\lambda_{Pa} + \sigma_c^{Pa}\phi}{\lambda_{Pa}}\left(\frac{\bar{\nu}_{Th}-1}{\alpha_{Th}} + D_{Pa}\right)} \quad (6.18)$$

$$\times \left[\frac{\bar{\nu}_U - 2(1 + \alpha_U)}{1 + \alpha_U} + D_U - 2\frac{\sigma_c^{Pa}\phi}{\lambda_{Pa}} + \frac{\lambda_{Pa} + \sigma_c^{Pa}\phi}{\lambda_{Pa}}\left(\frac{\bar{\nu}_{Th}-1}{\alpha_{Th}} + D_{Pa}\right) \right.$$

$$\left. - \frac{\Sigma_{capt}^{PF} + F_{uites} + \Sigma_{capt}^{Reste}}{\Sigma_f^U(1 + \alpha_U)} \right]$$

6.4.1 Lien avec le $\bar{\nu} - 2(1 + \alpha)$

On peut rapprocher cette équation de celle du nombre de neutrons disponibles par fission²⁰, le $N_d = \bar{\nu} - 2(1 + \alpha)$ [109]. Ce nombre N_d n'est, ni plus ni moins, que le gain de régénération présenté ici avec une normalisation légèrement différente puisque il est ramené non pas à un noyau d'²³³U disparu mais à une fission. Pour retrouver N_d , il suffit donc de :

- considérer qu'il n'y a pas de fission sur le thorium. Cette hypothèse invalide alors le raisonnement d'à peine quelques pourcent.
- considérer seulement 2 isotopes : le ²³²Th et l'²³³U. La formule se simplifie puisque l'on ne prend pas en compte le bilan des descendants de l'²³³U et du ²³³Pa . C'est l'hypothèse la plus importante nécessaire. Mais c'est celle qui permet d'obtenir une formule très simple pour comparer les cycles U/Pu et Th/U par exemple.
- renormaliser, c'est-à-dire de multiplier GR par $\Sigma_f^{233U}(1 + \alpha_{233U})$ et de diviser par toutes les fissions dans le réacteur Σ_f .

La formule se réduit au premier terme, qui lui-même se simplifie en $\bar{\nu} - 2(1 + \alpha)$. Avec l'hypothèse que toutes les fissions ont lieu sur l'²³³U, multiplier par $\frac{\Sigma_f^{233U}(1 + \alpha_{233U})}{\Sigma_f}$ revient à multiplier simplement par $1 + \alpha_{233U}$.

La formule 6.18 n'est donc qu'une généralisation du $\bar{\nu} - 2(1 + \alpha)$. Les quelques termes supplémentaires nous permettent de mieux comprendre les réactions intervenant dans le calcul de la régénération d'un réacteur critique, dont le combustible est à l'équilibre.

6.4.2 Détails sur les termes supplémentaires

Le tableau 6.5 présente les détails de l'application numérique des contributions à la régénération dans la formule 6.18. Pour le RSF 2, on utilise les données MCNP pour le $\bar{\nu}$ et le α de l'²³³U de manière à être consistant avec les résultats de l'évolution.

Nos outils nous permettent de recalculer la régénération à 5‰ près à partir des contributions des taux de réaction des noyaux principaux et des contributions de leurs chaînes de descendants.

²⁰sous-entendu, pour faire autre chose que de la régénération

terme	RSF 1	RSF 2
$2 \frac{\sigma_c^{Pa} \phi}{\lambda_{Pa}}$	1,15	4,54
$\frac{\lambda_{Pa} + \sigma_c^{Pa} \phi (\bar{\nu}_{Th} - 1)}{\lambda_{Pa} \alpha_{Th}}$	0,879	1,83
$\frac{\lambda_{Pa} + \sigma_c^{Pa} \phi}{\lambda_{Pa}} D_{Pa}$	-0,237	-0,906
Total dénominateur	100,82	103,16
$\frac{\bar{\nu}_U - 2(1 + \alpha_U)}{(1 + \alpha_U)}$	22,4	16,70
D_U	-4,35	-5,27
$\frac{-\Sigma_{capt}^{Pf}}{\Sigma_f^U (1 + \alpha_U)}$	-1,52	-3,0
$\frac{-F_{uites} - \Sigma_{capt}^{Reste} + \Sigma_{(n,2n)}}{\Sigma_f^U (1 + \alpha_U)}$	-11,8	-4,12
Total numérateur	4,22	0,692
GR estimé	4,18	0,670
GR calculé(MCNP)	3,8	0,2

TAB. 6.5 – Contributions des différentes réactions à la régénération dans les cas des deux Réacteurs à Sels Fondus au thorium, RSF 1 et RSF 2, exprimée en %

La régénération s'exprime comme le rapport de deux termes. Le dénominateur est un nombre proche de 1, puisque les corrections apportées sont petites devant 1. La probabilité de capture du ^{233}Pa par rapport à sa décroissance est faible ²¹. Puisque le ^{232}Th est fertile et que l'on étudie des réacteurs à spectre épithermique, la probabilité de fission du ^{232}Th est aussi très faible. La probabilité de capture du ^{233}Pa est petite, la contribution de la chaîne est bien sûr aussi très petite, comme nous l'avons vu dans les tableaux 6.3 et 6.2.

Les différentes manipulations ont quasiment fait disparaître la section efficace de capture du ^{232}Th . Ceci vient du rôle symétrique de cette capture dans le facteur de multiplication et dans la régénération, comme il a été expliqué au chapitre 5.4.2. Les effets indirects de cette section efficace sur la régénération ont déjà été traités. Dans le chapitre précédent, on a calculé grâce à l'utilisation des sensibilités "directes", l'impact du changement de spectre, induit par une perturbation de la section efficace du thorium, sur la régénération, sachant que le k_{eff} était maintenu constant par le contrôle de l'enrichissement en ^{233}U .

La présence quasiment systématique du rapport α de l' ^{233}U , vient renforcer son importance a priori par rapport au $\bar{\nu} - 2(1 + \alpha)$. De plus, il ne faut pas oublier que le terme D_{233U} est aussi proportionnel à ce rapport α , puisque la probabilité d'apparaître et donc la contribution au bilan de chacun des descendants de l' ^{233}U sont proportionnelles à la probabilité de capture

²¹de l'ordre de 2%

sur l' ^{233}U . Les termes contenant le $\bar{\nu} - 2(1 + \alpha)$ et le $D_{233\text{U}}$ sont légèrement plus avantageux pour la régénération dans le RSF 1. Le spectre plus thermique du RSF 1 améliore le rapport α et donc la régénération.

De même, la section efficace de capture du ^{233}Pa apparaît aussi particulièrement importante, puisqu'elle est multipliée par un facteur 2 dans la formule 6.18. Chaque neutron perdu par capture sur un noyau de ^{233}Pa empêche, non seulement la criticité, mais aussi une décroissance sur un noyau d' ^{233}U , diminuant d'autant la régénération. La section efficace de capture du ^{233}Pa est aussi en facteur du terme contenant le $D_{233\text{Pa}}$. Il est important de remarquer que, contrairement à la section efficace de capture de l' ^{233}U , il est nécessaire de connaître précisément, non pas le facteur α , mais la section efficace *absolue*, puisque cette capture est en compétition avec la décroissance. Et donc l'importance de cette réaction dépend aussi du niveau de flux de neutrons dans le réacteur et du choix de la stratégie de retraitement, puisque celui-ci peut être considéré comme une décroissance. Dans le RSF 1, le retraitement est rapide devant la demi-vie. Les captures sur le ^{233}Pa sont donc très limitées puisqu'il est extrait et stocké hors cœur. C'est ce qui explique le facteur 3 entre les RSF 1 et 2 pour les contributions de la section efficace de capture du ^{233}Pa et du terme contenant $D_{233\text{Pa}}$.

La section efficace de fission du ^{232}Th est présente dans l'équation 6.18 sous la forme du rapport α . Ce terme a un impact mineur dans le cycle du thorium, puisque le ^{232}Th contribue à hauteur de à peine 1% des fissions. Si on écrivait l'équivalent de cette équation pour le cycle U/Pu ce terme serait déjà nettement moins négligeable, puisque plus de 10% des fissions ont lieu sur l' ^{238}U , diminuant d'autant les besoins en matières fissiles. La différence entre les contributions de ce terme pour le RSF 1 et le RSF 2, provient du fait que le RSF 2 a un spectre légèrement plus rapide, ce qui favorise les réactions à seuil comme la fission du ^{232}Th .

Le spectre plus rapide du RSF 2 limite aussi les captures sur les produits de fission, alors que ceux-ci sont présents en plus grande quantité, puisque le retraitement et donc leur extraction est beaucoup plus lente.

Le terme des pertes sur les structures et autres fuites est limité dans le RSF 2, grâce à l'utilisation de la couverture en sel fertile sous modérée.

6.4.3 Application au calcul de la régénération en fonction de la stratégie du retraitement chimique

6.4.3.1 Extraction du ^{233}Pa

La capture sur le ^{233}Pa correspond à un court circuit de la production d' ^{233}U (cf figure 6.1). Les neutrons perdus sur le ^{233}Pa comptent double pour la régénération puisque, non seulement la capture a consommé un neutron, mais en plus, elle a empêché d'obtenir un noyau d' ^{233}U .

De plus, comme le montre le terme contenant le D_{Pa} du tableau 6.5, la chaîne de neutrons basée sur cette capture apporte une contribution négative au bilan neutronique. Ceci traduit le fait qu'une fois un premier neutron capturé sur le ^{233}Pa , on produit un noyau d' ^{234}U , qui est aussi fertile, dont le bilan neutronique est négatif comme le montrent les tableaux 6.2 et 6.3. L'élimination de la descendance du ^{233}Pa par capture va aussi consommer des neutrons. Il est donc avantageux d'extraire le ^{233}Pa pour qu'il décroisse hors flux de manière à limiter sa capture très consommatrice de neutrons. Cette extraction est d'autant plus efficace pour le bilan de neutrons que le recyclage est rapide par rapport aux décroissances.

6.4.3.2 Extraction du ^{237}Np

Nous avons vu que, dans le cas de référence, le ^{237}Np et ses descendants sont extraits, ce qui limite leur consommation de neutrons, permet d'obtenir davantage de captures sur le thorium et donc favorise la régénération. En appliquant les outils développés ci-dessus, nous estimons leur potentiel de production de neutrons et leur impact sur la marge de neutrons disponibles. Nous utilisons des données calculées (les sections efficaces et les flux) lorsque ces noyaux sont extraits pour estimer ce qui se passe s'ils ne le sont plus.

6.4.3.3 Calcul des marges apportées par les choix de stratégie

L'extraction chimique d'un noyau équivaut, dans l'évolution, à une décroissance de ce noyau. Si la contribution de ce noyau au bilan neutronique est faible, un changement de sa concentration devrait peu changer le spectre du réacteur et donc les sections efficaces moyennes. Changer le retraitement revient donc à changer les rapports Λ . On peut donc refaire les calculs des coefficients D_j , ainsi que les calculs de régénération qui en découlent, *sans refaire tout le calcul d'évolution jusqu'à l'équilibre*.

Nous possédons trois méthodes pour estimer la variation de régénération liée à un changement de stratégie de retraitement.

La première est d'utiliser la méthode classique²², c'est-à-dire de calculer la régénération après évolution jusqu'à l'équilibre.

La seconde²³ est de comparer les coefficients D_j du thorium c'est à dire la contribution au bilan neutronique de la disparition d'un noyau de ^{232}Th . Toutes choses égales par ailleurs, la différence de ces coefficients correspond bien au nombre de neutrons disponibles pour faire de la régénération.

²²Cette méthode sera notée 1 dans le tableau 6.6.

²³notée 2

La troisième²⁴ est de calculer les gains de régénération avec la formule 6.18 tout simplement.

Le tableau 6.6 donne, pour les RSF 1 et 2, les effets attendus selon le choix de retraitement sur la régénération, des concepts à l'équilibre, calculés par les différentes méthodes.

Les stratégies de référence étant différentes entre le RSF 1 et le RSF 2, nous n'indiquons que la variation entre le cas avec retraitement ou sans retraitement. Les options de retraitement dans le cas de référence diffèrent dans ces deux réacteurs : dans le RSF 1, a priori le ^{237}Np n'est pas extrait. Il a été démontré dans la thèse [93] que les différentes options étaient bien additives. Ce qui sous-entendait déjà que l'impact sur le spectre, d'une modification de concentration des isotopes dont la contribution est faible, était petit.

Réacteur	Méthode	1	2	3
	Stratégie			
RSF1	Extraction ^{237}Np	0,020	0,023	0,025
	Extraction ^{233}Pa	0,050	0,055	0,052
RSF2	Extraction ^{237}Np	non calculé	0,025	0,025
	Extraction ^{233}Pa	0,01	0,012	0,012

TAB. 6.6 – Comparaison de la variation de régénération avec la stratégie de retraitement

La concordance de nos résultats avec les calculs de régénération à l'aide d'un calcul d'évolution complet est bonne à 10% près pour le RSF 1. Pour le RSF 2 nous ne possédons pas les sections efficaces et les flux MCNP avec la même précision. Nous préférons utiliser les données du modèle APOLLO. Ces données sont différentes pour plusieurs raisons : non seulement les données de bases ne sont pas les mêmes, mais en plus les programmes et donc les traitements des données sont différents. En particulier, nous utilisons une géométrie 2D, RZ, avec les programmes Sn , alors que le modèle MCNP est un modèle 3D. Les comparaisons entre les résultats MCNP et APOLLO n'étant pas terminées, il semble qu'il reste quelques différences notables entre les modélisations, sur les bilans matière, par exemple.

On remarque que l'extraction du ^{233}Pa est beaucoup plus efficace dans le RSF 1. Cette extraction est faite en 10 jours. Elle permet à la majorité des décroissances d'avoir lieu à l'extérieur du réacteur. Dans le cas du RSF 2, cette extraction est faite en 6 mois, ce qui est long devant la

²⁴notée 3

demi-vie de 27 jours du ^{233}Pa .

L'efficacité de l'extraction du ^{237}Np est la même dans les deux cas. La vitesse d'extraction est toujours grande devant le taux de capture. Même en recyclant le volume du cœur en 6 mois, l'extraction de ce noyau reste très efficace.

6.4.3.4 Conclusions

Les outils redétaillés ici ont de nouveau montré qu'ils permettaient d'estimer le potentiel de régénération d'un concept. Pour calculer les marges sur la régénération avec ces outils, que la chimie peut améliorer, il faut faire l'hypothèse que le flux et donc les sections efficaces intégrées changent peu avec une perturbation des concentrations. On peut ainsi utiliser les sections efficaces d'un point de fonctionnement pour calculer d'autres points de fonctionnement. Cette hypothèse est valide, puisque nous savons calculer l'ordre de grandeur de l'impact d'un changement de stratégie de retraitement sur la régénération *sans recalculer toute la mise à l'équilibre*. En fait, aucun calcul de cœur n'est nécessaire, après le premier qui permet de calculer les sections efficaces intégrées.

6.4.4 Calcul des sensibilités

La formule 6.18, proposée pour le calcul de la marge de régénération, indique les contributions explicites de chaque donnée, sachant que le combustible est supposé à l'équilibre et que le réacteur est critique. Il est alors possible de dériver chaque terme par rapport à une donnée et de calculer la sensibilité de la régénération à cette donnée.

Nous calculons ainsi la sensibilité de la régénération à la section efficace à un groupe. Cette section efficace est en fait la section efficace moyenne. Elle cache l'intégrale du produit du flux et de la section efficace. Nous avons montré dans ce chapitre qu'une perturbation des concentrations n'avait qu'un effet du second ordre sur les sections efficaces. Le calcul des sensibilités à partir des dérivées de la formule 6.18 doit donc nous donner l'effet au premier ordre qui domine la sensibilité.

L'équation 6.19 rappelle la définition de la sensibilité.

$$S_{GR}^X = \frac{\partial GR}{\partial X} \frac{X}{GR} \quad (6.19)$$

Pour les données x apparaissant au dénominateur et au numérateur l'équation 6.18 peut être mise sous la forme :

$$GR = \frac{a + bx}{c + dx} \quad (6.20)$$

où a,b,c et d sont des constantes. La sensibilité se calcule alors simplement :

$$S_{GR}^x = \frac{bx}{a+bx} - \frac{dx}{c+dx} \quad (6.21)$$

Le dénominateur $(c+dx)$ du second membre est proche de c^{25} alors que le numérateur est petit devant 1. La sensibilité de la régénération aux termes du dénominateur ne sera donc qu'une correction d'ordre supérieur, puisque le second terme $(\frac{dx}{c+dx})$ sera petit devant le premier.

Le tableau 6.7 donne les détails de l'application numérique et les contributions de chaque terme du numérateur à la sensibilité à chaque donnée. Le tableau 6.8 donne les totaux pour chaque donnée, ainsi que la comparaison des sensibilités relatives. Une fois multipliées par le gain de régénération, les sensibilités ne sont plus exprimées en pourcent par pourcent (%/%) mais la comparaison des deux différents concepts devient possible alors que leurs régénérations sont très différentes.

Donnée	terme	RSF 1	RSF 2
$\bar{\nu}_{233U}$	$\frac{\bar{\nu}_{233U}-2(1+\alpha_{233U})}{(1+\alpha_{233U})}$	58,5	1084
α_{233U}	$\frac{\bar{\nu}_{233U}-2(1+\alpha_{233U})}{(1+\alpha_{233U})}$	-6,46	-137
α_{233U}	D_{233U}	-1,	-23,0
α_{233U}	$\frac{-\Sigma_{capt}^{PF}-Fuites-\Sigma_{capt}^{Reste}+\Sigma(n,2n)}{\Sigma_f^{233U}(1+\alpha_{233U})}$	0,305	3,92
$\sigma_c^{233Pa}\phi$	$2\frac{\sigma_c^{233Pa}\phi}{\lambda_{233Pa}}$	0,302	-21,8
$\sigma_c^{233Pa}\phi$	$\frac{\lambda_{233Pa}+\sigma_c^{233Pa}\phi}{\lambda_{233Pa}}\frac{(\bar{\nu}_{232Th}-1)}{\alpha_{232Th}}$	1,32e-3	0,194
$\sigma_c^{233Pa}\phi$	$\frac{\lambda_{233Pa}+\sigma_c^{233Pa}\phi}{\lambda_{233Pa}}D_{233Pa}$	-0,145	-4,73
$\bar{\nu}_{232Th}$	$\frac{\lambda_{233Pa}+\sigma_c^{233Pa}\phi}{\lambda_{233Pa}}\frac{(\bar{\nu}_{232Th}-1)}{\alpha_{32Th}}$	0,397	15,8
α_{232Th}	$\frac{\lambda_{233Pa}+\sigma_c^{233Pa}\phi}{\lambda_{233Pa}}\frac{(\bar{\nu}_{232Th}-1)}{\alpha_{232Th}}$	-0,231	-9,14
$\bar{\nu}_{235U}$	D_{233U}	5,63	107,6
$\bar{\nu}_{235U}$	$\frac{\lambda_{233Pa}+\sigma_c^{233Pa}\phi}{\lambda_{233Pa}}D_{233Pa}$	0,29	18,9
α_{235U}	D_{233U}	-2,20	-41,0
α_{235U}	$\frac{\lambda_{233Pa}+\sigma_c^{233Pa}\phi}{\lambda_{233Pa}}D_{233Pa}$	-0,101	-7,37
$\sigma_c^{233Np}\phi$	D_{233U}	-3,12e-3	-1,94
$\sigma_c^{233Np}\phi$	$\frac{\lambda_{233Pa}+\sigma_c^{233Pa}\phi}{\lambda_{233Pa}}D_{233Pa}$	-1,61e-4	-0,355

TAB. 6.7 – Sensibilité aux données des RSF thorium

²⁵_c = 1 ici

Donnée	RSF 1	RSF 2	$\frac{S_{RSF2*GR2}}{S_{RSF1*GR1}}$
$\bar{\nu}_{233U}$	58,5	1084	0,974
α_{233U}	-7,832	-163,7	1,100
σ_c^{233Pa}	-0,445	-26,6	3,39
$\bar{\nu}_{232Th}$	0,397	15,8	2,076
α_{232Th}	-0,231	-9,14	2,076
$\bar{\nu}_{235U}$	5,92	127	1,12
α_{235U}	-2,31	-48,4	1,104
σ_c^{237Np}	-0,00329	-1,59	25,4

TAB. 6.8 – Comparaison des sensibilité aux données du RSF thorium

Les sensibilités du gain de régénération du RSF 2 à retraitement simplifié sont, en valeurs relatives, systématiquement plus grandes que celles du RSF 1. Ceci est dû à la petite valeur absolue du gain. Comme la sensibilité correspond à la variation relative du gain par rapport à une variation relative de la donnée, le gain de régénération apparaît au dénominateur de la sensibilité. Si les sensibilités sont grandes c'est parce qu'une petite variation de la donnée peut beaucoup changer la petite valeur de la régénération.

On voit dans le tableau 6.7, qu'une petite partie de la sensibilité de la régénération au α_{233U} vient du terme D_{233U} , c'est-à-dire de la consommation de neutrons de la descendance par capture de l' ^{233}U . Ce terme n'apparaissait pas dans le $\bar{\nu} - 2(1 + \alpha)$.

Les sensibilités aux données contenues dans le D_{233Pa} sont, en valeurs relatives, beaucoup plus faibles dans le RSF 1. Ceci est dû à la différence de vitesse de retraitement. Dans le RSF 1, le sel est retraité en 10 jours. Ainsi, la majorité du ^{233}Pa décroît hors flux, ce qui limite les captures et donc la sensibilité de la régénération à sa section efficace de capture.

Les sensibilités dépendant de la chaîne basée sur la capture sur l' ^{233}U , sont, en valeurs relatives, légèrement plus grandes dans le RSF 2 car dans un spectre plus rapide, le rapport α est légèrement plus grand.

Le cas du ^{237}Np est très intéressant. Ce noyau est fertile; nous avons déjà expliqué que nous nous attendions à de petites sensibilités aux sections efficaces de capture sur ce noyau, sauf dans les cas où ces réactions étaient en concurrence avec une décroissance qui peut être "fictive" dans le cas d'une extraction chimique. Dans le RSF 1, le ^{237}Np n'est pas extrait, alors qu'il est extrait du RSF 2. La sensibilité est plus petite d'un facteur 25 dans le premier cas que dans le second. Ce résultat est d'autant plus étonnant que le taux de capture sur ce noyau est 4 fois plus important dans le RSF 1. Le ^{237}Np est un noyau fertile. En spectre épithermique, s'il n'est pas

extrait chimiquement il disparaît à 98% par capture. Son taux de production est fixé par le taux de capture du ^{236}U , pas par sa section efficace de capture propre. Même si sa section efficace est différente de la valeur évaluée, son taux de capture dans un réacteur sera toujours égal à celui du ^{236}U . Seule sa densité changera par rapport à la simulation. Ainsi, malgré un taux de réaction plus important, la sensibilité de la régénération à cette section efficace est petite. On voit bien ici, l'importance d'observer, non pas les taux de réaction seuls, mais bien de prendre en compte toute la mise à l'équilibre des noyaux lourds du combustible.

6.4.5 Incertitudes

Les tableaux 6.9 et 6.10, récapitulent les contributions de chaque donnée à la régénération. La colonne "type" indique si la donnée intervient de façon relative ou absolue. On a vu que la donnée de la section efficace de capture l' ^{233}U n'intervient pas de façon explicite mais seulement sous la forme du rapport α . Il n'y a donc pas besoin de connaître la section efficace absolue. A contrario, les sections efficaces de capture, en compétition avec des décroissances²⁶, doivent être mesurées sans référence.

Les données d'incertitudes sur les données sont celles proposées au chapitre 2.4.4.

L'incertitude totale sur la régénération du RSF 1 est de l'ordre de 3800 *pcm*. Elle est de 4200 *pcm* sur le RSF 2. Ces valeurs sont à comparer à celles de la régénération, de l'ordre de 3800 *pcm* pour le premier et de 200 *pcm* pour le second, d'après les calculs du LPSC/Grenoble. Il faut ajouter à cette incertitude, celle provenant de la section efficace de capture du thorium qui n'apparaît plus dans ces calculs mais que nous avons évaluée avec des calculs directs dans la partie 5.4.2 à environ 1500 *pcm*, **soit une incertitude totale de 4500 pcm environ**. Cette incertitude est très importante, de l'ordre de grandeur des marges que l'on peut obtenir en changeant la stratégie de retraitement ou en doublant sa vitesse [93].

Les principales contributions à cette incertitude sont :

- le rapport α de l' ^{233}U ;
- la section efficace de capture du ^{232}Th ;
- le $\bar{\nu}$ de l' ^{233}U ;
- la section efficace de capture du ^{233}Pa ;
- le rapport α de l' ^{235}U .

La section efficace de capture (qui apparaissaient sous forme du rapport α) de l' ^{233}U domine de loin cette incertitude.

Comme l'incertitude est dominée par celle sur le rapport α de l' ^{233}U , le RSF 2 a une incertitude légèrement supérieure puisque, avec son spectre légèrement plus dur, son rapport α et la

²⁶qui peuvent correspondre à l'extraction chimique

Donnée	Incertitude sur la donnée (%)	Sensibilité	Incertitude relative ($\Delta GR/GR$)	Incertitude absolue $\Delta GR(\text{pcm})$	type
$\bar{\nu}_{233U}$	1	58,5	0,6	2280	absolue
σ_{capt}^{233U}	10	-7,83	0,78	2960	relative
$\bar{\nu}_{232Th}$	2	0,4	8e-3	30	absolue
$\sigma_{capture}^{232Th}$	10	0,23	2,3e-2	87	relative
$\bar{\nu}_{235U}$	0,5	5,92	2,96e-2	112	absolue
σ_{capt}^{235U}	5	-2,31	0,115	440	relative
σ_{capt}^{233Pa}	10	-0,45	4,5e-2	167	absolue
σ_{capt}^{237Np}	10	-3,2e-3	3,3e-4	1,25	absolue
Total			1	3770	

TAB. 6.9 – Incertitudes sur la régénération du RSF 1. La régénération est $GR=0,038$ pour ce concept. Nous obtenons une incertitude sur cette valeur de 100%.

Donnée	Incertitude sur la donnée (%)	Sensibilité	Incertitude relative ($\Delta GR/GR$)	Incertitude absolue $\Delta GR(\text{pcm})$	type
$\bar{\nu}_{233U}$	1	1083	11	2200	absolue
σ_{capt}^{233U}	10	-163,7	16,3	3260	relative
$\bar{\nu}_{232Th}$	2	15,76	0,3	60	absolue
$\sigma_{capture}^{232Th}$	10	9,14	0,94	180	relative
$\bar{\nu}_{235U}$	0,5	126,5	0,63	126	absolue
σ_{capt}^{235U}	5	-48,37	2,419	480	relative
σ_{capt}^{233Pa}	10	-26,64	2,6	520	absolue
σ_{capt}^{237Np}	10	-1,586	0,159	32	absolue
Total			21	4190	

TAB. 6.10 – Incertitudes sur la régénération du RSF 2. Pour ce concept, on obtient une incertitude ΔGR 21 fois plus grande que la valeur de la régénération de $GR=0,002$.

sensibilité au rapport α sont un peu plus grands. Cette grande incertitude cache les différences liées aux choix de la stratégie de retraitement.

La différence de vitesse de retraitement fait que l'incertitude apportée par la capture du ^{233}Pa est plus petite dans le RSF 1 que dans le RSF 2. Il y a beaucoup moins de capture sur le ^{233}Pa dans le RSF 1, car son extraction est beaucoup plus rapide. La sensibilité de la régénération à la section efficace de capture du ^{233}Pa est donc nettement plus petite.

La contribution à l'incertitude de la capture du ^{237}Np est très différente selon qu'il est extrait ou pas. Sa contribution est toujours faible, mais plus importante lorsqu'il est sorti du cœur. Le ^{237}Np est un cas typique de noyau fertile en spectre épithermique : sa section efficace de capture à l'équilibre n'intervient pas dans le bilan neutronique, sauf si on l'extrait. Car alors la section efficace est déterminante pour connaître l'équilibre entre les vitesses de disparition, par extraction et par capture. La connaissance de la section efficace de capture du ^{237}Np en spectre épithermique est donc importante, non pas pour simuler correctement son incinération mais plutôt pour simuler sa "non-incinération", et en particulier la quantité envoyée au stockage.

Finalement, peu importe le choix du retraitement chimique : dans tous les concepts de RSF au thorium, l' ^{233}U sera présent en grande quantité et son rapport α apportera la principale source d'incertitude sur la régénération à l'équilibre.

6.4.6 Conclusions sur l'utilisation des outils développés

Les particularités des cycles à l'équilibre ont été détaillées ici. Nous avons développé des outils pour évaluer la contribution, non pas d'une réaction seule sur un isotope, mais l'impact de cette réaction sur toute la chaîne de noyau qui dépend de cet isotope. Ces outils ont permis de mieux appréhender le rôle des réactions dans l'accumulation des noyaux lourds et dans leur contribution effective au bilan neutronique, dans le cas de cycles fermés à l'équilibre. En particulier, le rôle des réactions de capture sur les noyaux *fissiles* ressort de manière prépondérante, pour les réacteurs à spectre épithermique étudiés. La relation trouvée, pour le calcul du gain de régénération d'un réacteur critique, dont le combustible est à l'équilibre, est une généralisation de celle donnant le nombre de neutrons disponibles[109] $Nd = \bar{\nu} - 2(1 + \alpha)$. Elle permet de calculer l'effet direct d'une modification de donnée sur l'économie de neutron. C'est-à-dire l'effet d'une variation des sections efficaces sur les taux de réaction dont dépendent ces sections efficaces. On s'attend à ce que les effets indirects, liés à des variations de spectre induits par des variations de sections efficaces, soient du second ordre. Ces relations sont très efficaces puisque les hypothèses nécessaires - criticité, équilibre, réactions et décroissances secondaires négligées - sont souvent vérifiées. Nous pouvons par exemple recalculer l'impact d'un choix de stratégie de retraitement avec une bonne précision (de l'ordre de 10%) sans recalculer toute la mise à l'équilibre. Toutefois, ces résultats

sont basés sur des taux de réaction calculés sur un cœur dans une géométrie vraisemblable. Il faut donc avoir déjà fait le calcul pour pouvoir discuter des applications avec notre approche. Il s'agit surtout de comprendre la physique à grande échelle a posteriori pour estimer le potentiel et les marges de manœuvres éventuelles d'un concept.

6.4.7 Conclusions sur les calculs d'incertitude de la régénération à l'équilibre

L'incertitude sur la régénération est de l'ordre de grandeur, à la fois des gains de régénération accessibles en cycle thorium et des marges de manœuvre que peut apporter le retraitement en ligne du combustible.

Ce résultat montre bien l'importance de conserver des marges prenant en compte les incertitudes. Il est déconseillé de construire des scénarios à base de réacteurs isogénérateurs tel que le RSF 2, malgré les avantages de ce type de réacteur en terme d'indépendance énergétique -leur besoin est seulement d'une Tonne par GWe par an de matériau fertile- et de lutte contre la prolifération -il n'y a pas de matière fissile non utilisée-. Etant donné les incertitudes, si on a une chance sur deux qu'ils soient sur-générateurs²⁷, il y a aussi une chance sur deux pour qu'ils soient sous-générateurs. Ces scénarios ne sont pas très crédibles, car on ne peut pas dire si un autre type de réacteur sera nécessaire, non seulement au démarrage de la filière isogénératrice mais surtout aussi longtemps que celle-ci existe. Heureusement, les concepts à Sels Fondus profitent de la souplesse exceptionnelle qu'apporte le retraitement chimique en continu. Toutefois, l'incertitude (environ 4%) est de l'ordre du potentiel théorique²⁸ (environ 8%), il existe une probabilité pour qu'aucun réacteur au thorium ne soit régénérateur quel que soit le retraitement chimique.

Compte tenu des marges prises sur l'évaluation de l'incertitude du rapport α du ^{233}U , notre analyse d'incertitude est sûrement assez conservatrice. Elle donne vraisemblablement une bonne idée de l'ordre de grandeur de l'incertitude, quoique peut-être trop pessimiste. L'utilisation de nouvelles bases de données évaluées, à partir des dernières expériences, est donc cruciale pour confirmer les caractéristiques espérées. Des réacteurs au thorium ont déjà fonctionné par le passé, il est souhaitable que ces résultats expérimentaux soient utilisés pour valider les bases de données. Si ces nouvelles données contiennent des incertitudes évaluées plus réalistes que celles disponibles aujourd'hui, on pourra alors refaire cette analyse. En espérant qu'alors, les incertitudes permettront de simuler rigoureusement des scénarios détaillés de déploiement de réacteurs au thorium.

²⁷et donc autosuffisants en matière fissile

²⁸Cette valeur est celle de la contribution au bilan neutronique de la disparition d'un noyau de thorium du tableau 6.2 à laquelle on soustrait les pertes par captures sur les structures

Conclusions et Perspectives

La simulation de réacteurs innovants repose sur des données nucléaires ne bénéficiant pas du retour d'expérience des 50 années d'exploitation des REP. L'objectif de ce travail était de quantifier les incertitudes apportées par les données nucléaires sur les études de réacteurs innovants, en particulier les Réacteurs à Sels Fondus au Thorium en spectre neutronique épithermique. Nous avons pour cela, contribué à valider des outils classiques de calcul des incertitudes sur les données disponibles auprès de l'Agence de l'Energie Nucléaire de l'OCDE, qui rassemble et distribue ces données.

Analyses de sensibilités et d'incertitudes

Les calculs d'incertitude ne sont pas une nouveauté pour la communauté des physiciens des réacteurs nucléaires. Toute une panoplie d'outils théoriques a été développée dès le début du développement du nucléaire. Ces outils, basés sur la Théorie des Perturbations, utilisent les solutions directe et adjointe de l'équation du transport de neutrons pour calculer élégamment la sensibilité d'une observable à une donnée nucléaire. Avant d'utiliser ces outils sur un réacteur innovant, nous avons voulu les valider par l'étude des sensibilités et des incertitudes du k_{eff} d'un réacteur classique, pour lequel il existe des valeurs expérimentales auxquelles comparer les calculs.

Validation sur le réacteur expérimental VENUS-2

La banque de données de l'Agence de l'Energie Nucléaire de l'OCDE, distribue un ensemble de programmes permettant la propagation des incertitudes des données nucléaires à travers les programmes de simulation du transport des neutrons. Un important travail d'apprentissage et de validation a été effectué sur l'exercice de calcul international basé sur la simulation du réacteur VENUS2, partiellement chargé en MOX. L'objectif de ce travail était de quantifier l'effet des hypothèses faites lors des calculs de réacteurs, non sur les résultats de ces calculs, mais sur les sensibilités de ces calculs aux données nucléaires.

En particulier nous nous sommes intéressés à l'impact sur les sensibilités du k_{eff} aux données, de :

- la préparation des bibliothèques de sections efficaces utilisées pour les calculs transport. Les données de physique nucléaire fondamentale ne sont pas utilisables directement par les programmes simulant le transport des neutrons. Le traitement de ces données est particulièrement complexe pour les programmes déterministes utilisés pour les analyses de sensibilité.
- la finesse de la description géométrique. Une modélisation du réacteur en 3D permet de s'affranchir de la modélisation des fuites neutroniques suivant la troisième dimension. Il était important de connaître l'impact de cette modélisation sur les calculs de sensibilité, car elle demande un effort important en temps de calcul.
- la préparation des données nucléaires utilisées lors des calculs de sensibilité. Les données utilisées pour le calcul de sensibilité SUS3D distribué par l'AEN/OCDE ne sont pas celles utilisées par le calcul de transport.

Les deux premiers points ont des effets extrêmement limités. Le dernier point repose sur des hypothèses qui ont un impact relativement important sur le profil des sensibilités. Il est possible, ponctuellement, pour les cas les plus importants, de ne pas faire ces hypothèses. Les données d'incertitude ne sont pas systématiquement mises à jour et paraissent parfois assez peu réalistes. Or, l'incertitude sur un paramètre intégral est liée au produit des sensibilités par les incertitudes. Nos biais sur les sensibilités auront donc un impact limité sur l'estimation des incertitudes d'un réacteur innovant.

Analyses du k_{eff} d'un RSF Thorium

Le travail de validation, lié au travail de comparaison avec les analyses de sensibilités et d'incertitudes faites avec des méthodes stochastiques par T. Ivanova lors de son séjour scientifique à l'IPN d'Orsay et au CNAM-Paris, appuie nos conclusions sur les analyses d'incertitude du k_{eff} du RSF Thorium. **L'incertitude sur le k_{eff} d'un tel réacteur, étant donné les incertitudes partielles disponibles aujourd'hui est d'environ 3500 pcm.** La section efficace de capture du Thorium est la principale responsable de cette importante incertitude. Les nouvelles évaluations à venir, basées sur de nouvelles mesures, devraient ramener cette incertitude à une valeur plus proche de celle sur les concepts équivalents du cycle uranium.

Analyses du coefficient de température

A partir des analyses des sensibilités du k_{eff} , nous avons calculé les sensibilités du coefficient de température. L'étude des profils de sensibilité confirme notre compréhension des phénomènes

mis en jeu lors des changements de température. La section efficace de capture du ^{232}Th étant de loin la principale source d'incertitude pour le calcul du k_{eff} , nous avons propagé les incertitudes disponibles sur le coefficient de température. Alors que les sensibilités sont encore plus importantes en valeur absolue que pour le k_{eff} et que l'on s'attendait à une incertitude encore plus importante, **l'incertitude sur le coefficient de température est relativement faible, de l'ordre de quelques pourcent**. Des corrélations entre les sections efficaces à différentes énergies limitent l'impact de l'incertitude. La matrice de corrélation utilisée est très ancienne et très pauvre. De plus, seule la contribution de la section efficace de capture a été étudiée. La portée de ce résultat est donc relativement limitée. Toutefois, il semble que les données nucléaires disponibles permettent de calculer plutôt sereinement les coefficients de température. Nul besoin de prendre d'importantes marges sur le dimensionnement pour assurer la sûreté, ce qui permet de ne pas s'écarter des points de fonctionnement optimaux pour d'autres caractéristiques comme la durée de vie du graphite, la régénération ou l'inventaire de matière fissile.

Analyse de l'incertitude sur la régénération à l'équilibre

Dans un Réacteur à Sels Fondus, le combustible peut atteindre un équilibre grâce au retraitement chimique quasi-continu. En effet, au fur et à mesure de sa consommation, on ajoute du ^{232}Th et on retire les produits de fission²⁹. En fonction de la stratégie choisie, d'autres noyaux lourds sont extraits et parfois réinjectés. La concentration de tous les noyaux est donc maintenue constante : les apparitions sont maintenues égales aux disparitions. Ces concentrations dépendent bien sûr des sections efficaces. Mais certains taux de réaction n'en dépendent presque pas. C'est le cas pour les réactions de capture sur les noyaux fertiles en spectre épithermique : leur taux de disparition est égal à leur taux de production. Comme leur concentration est inversement proportionnelle à leur section efficace de capture³⁰, le produit de leur section efficace par leur concentration est simplement égal à leur taux de production, quasiment indépendamment de leur section efficace de capture. Pourtant cette réaction de capture a bien lieu, elle pénalise d'ailleurs la criticité et la régénération, puisqu'elle consomme un neutron. Comment faire apparaître l'incertitude de cette consommation de neutrons sur la régénération ? Quelles sont les réactions qui pilotent vraiment l'incertitude sur la régénération des réacteurs à l'équilibre ?

C'est en cherchant à répondre à ces questions, que nous nous sommes tournés vers les outils développés au CEA/Cadarache, pour estimer les potentiels d'incinération et de régénération des concepts innovants. L'étude du potentiel des Réacteurs à Sels Fondus au Thorium étant faite en détail au LPSC/Grenoble, nous nous sommes concentrés *sur l'estimation des sensibilités et des*

²⁹Et beaucoup d'énergie !

³⁰Celle-ci domine largement toutes les autres voies de réaction dans les spectres étudiés

incertitudes sur la régénération des RSF Thorium à l'équilibre.

Nous avons pu calculer l'incertitude sur la régénération de deux concepts de RSF Thorium. Ces deux réacteurs ont des spectres neutroniques et des géométries légèrement différents. Ils diffèrent surtout par leur stratégie de retraitement du sel : dans le premier le sel est retraité en 10 jours contre 6 mois pour le second. De plus, dans le second, le ^{237}Np est extrait pour optimiser la régénération. Dans les deux cas, **l'incertitude est dominée par le rapport capture sur fission de l' ^{233}U , et est de l'ordre de 4%**. Cette incertitude est donc peu dépendante du choix de retraitement ou des petites modifications du spectre. Elle sera proche pour tous les concepts de réacteurs régénérateurs au Thorium.

Cette incertitude est plutôt surestimée mais son ordre de grandeur est bon et il est proche de celui des gains de régénération estimés pour ces concepts, ce qui limite la confiance accordée aux scénarios contenant des réacteurs au Thorium. L'utilisation de données basées sur de nouvelles expériences, bien validées sur toutes les expériences critiques contenant des combustibles semblables, permettra de conforter les études de réacteurs. Ces données seraient d'autant plus intéressantes si elles contenaient des incertitudes sous forme de matrices de covariance.

Bilan des incertitudes et des besoins en nouvelles données évaluées

Toutes les analyses de sensibilité et d'incertitude permettent de faire un bilan des données contribuant à l'incertitude sur les paramètres clefs d'un réacteur innovant : son k_{eff} bien sûr, mais aussi le coefficient de température et surtout la régénération.

Nous pouvons donc faire une liste des besoins en données nucléaires, c'est-à-dire celles à améliorer en priorité, en fonction de leur importance pour des calculs particuliers :

- le rapport α de l' ^{233}U , donnée cruciale pour le calcul de la régénération ;
- la section efficace de capture du ^{232}Th , surtout à cause de sa participation majoritaire dans l'incertitude du k_{eff} , mais aussi à cause de sa contribution non négligeable pour le calcul de la régénération ;
- le $\bar{\nu}$ de l' ^{233}U , pour ses importantes contributions aux incertitudes du k_{eff} et de la régénération ;
- la section efficace de fission de l' ^{233}U , en particulier dans la zone thermique pour confirmer les calculs de coefficients de température ;
- la section efficace de capture du ^{234}U , qui est probablement la seconde source d'incertitude du k_{eff} ;
- la section efficace de capture du ^{233}Pa , dans le cas où il est extrait lentement du RSF, il contribue à l'incertitude sur la régénération ;
- la section efficace de capture du ^{237}Np , dans le cas de son extraction.

Il est intéressant de noter que, souvent, les données qui imposent leurs incertitudes dans le calcul de l'évolution, ne sont pas celles qui imposent le dimensionnement et la sûreté du réacteur. Le ^{232}Th ou le ^{234}U sont les principaux contributeurs à l'incertitude sur le k_{eff} , mais interviennent peu dans la régénération. Réciproquement, la capture de l' ^{233}U est le paramètre dominant la régénération, mais n'a qu'une contribution mineure à l'incertitude sur le facteur de multiplication.

Enfin, nous tenons à insister sur la principale limite de ces analyses d'incertitude : le manque de données d'incertitudes évaluées. Nous avons vu que les outils disponibles donnent systématiquement les sensibilités des paramètres intégraux aux données nucléaires avec une bonne précision. Sans incertitudes sur les données de base, ces outils sont peu utilisés, et donc peu développés. Malheureusement, cette problématique des calculs d'incertitude peut vite entrer dans un cercle vicieux : sans application des analyses d'incertitudes, les évaluateurs ne font pas l'effort de renouveler leurs incertitudes, interdisant de fait les applications potentielles.

Perspectives

Validation sur un exercice international de calculs de sensibilité

Nous avons montré que les outils disponibles permettent de réaliser des analyses d'incertitude. Toutefois, des différences notables existent avec les profils de sensibilités des programmes de l'IPPE/Obninsk, alors que les sensibilités intégrées sont très cohérentes. Il serait intéressant de comparer les résultats d'un maximum de programmes de sensibilités et d'incertitudes dans le cadre d'un benchmark organisé sous l'égide de OCDE/AEN par exemple. En comparant les résultats sur plusieurs exercices de difficulté croissante, les effets des différentes approximations pourraient être séparés et mieux compris. Ce qui pourrait permettre d'améliorer les méthodes, mais surtout, donnerait plus d'éclairage sur ces programmes, leurs performances et leurs disponibilités.

Evolution du programme de sensibilité SUS3D

Le programme SUS3D, calculant les sensibilités et les incertitudes des taux de réaction dans les problèmes de blindage et du k_{eff} dans les problèmes critiques, ne permet pas aujourd'hui de calculer systématiquement les sensibilités des coefficients de température. Sans outils adaptés, la propagation des incertitudes est très fastidieuse. Le développement d'outils permettant de faire des opérations simples (multiplication par un scalaire, addition, soustraction) est envisagé. Il suffirait pour cela de calculer les sensibilités des coefficients de température à partir des sensibilités du k_{eff} .

Calcul des fonctions adjointes nécessaires pour la Théorie des Perturbations Généralisées

La Théorie des Perturbations donne une méthode permettant de calculer les sensibilités des rapports de taux de réaction aux données. Ces calculs auraient de très nombreuses applications, en particulier pour le calcul systématique des profils de sensibilités de la régénération des réacteurs innovants. Ceux-ci nécessitent une fonction-importance particulière, fastidieuse à calculer par les programmes de transport a priori. Un gros effort de développement a été entrepris pour résoudre ce difficile problème. Il n'a pas encore permis d'obtenir une solution réaliste. Une fois cette fonction-importance obtenue, le programme SUS3D pourrait être utilisé pour calculer les sensibilités de rapports de taux de réaction, à condition que le développement proposé dans le paragraphe précédent soit disponible.

Validation des sensibilités par des calculs directs de sensibilités en évolution

Nous avons calculé à partir des taux de réaction les sensibilités de la régénération à l'équilibre d'un réacteur critique. Il serait intéressant de valider ces résultats par des calculs d'évolution perturbés. Le programme MURE permet de calculer efficacement des évolutions. Il serait très utile de pouvoir estimer les sensibilités directes. Les méthodes directes et de perturbations trouveraient ici une nouvelle complémentarité : les analyses de sensibilité permettent de sélectionner les réactions vraiment importantes pour lesquelles les calculs directs peuvent confirmer les sensibilités et même les propager lors de l'évolution.

Annexe A

Calculs de coin de table, de dos d'enveloppe, de fin de thèse

Un certain nombre de calculs d'ordres de grandeur, contenant souvent beaucoup de physique sont accessibles à partir d'une modélisation très simple du réacteur en calculant les bilans (k_{eff} et régénération) sous forme de sections efficaces à 1 groupe. Ces sections efficaces correspondent en fait à l'intégrale sur les angles, le volume et l'énergie des taux de réactions. On n'oublie pas que ces sections efficaces cachent en fait l'intégrale du produit de la section efficace par le flux, et que la rétroaction sur le flux d'une perturbation d'une section efficace n'est donc pas prise en compte. Nous comparons donc dans la mesure du possible ces résultats avec des résultats "exacts" provenant de calculs directs ou avec des résultats provenant de l'utilisation de la théorie des perturbations. On s'intéresse en particulier à la sensibilité aux réactions de fission et de capture sur l' ^{233}U , et des captures sur le ^{232}Th et le ^{233}Pa et les produits de fission qui apparaissent dans la définition du taux de régénération de l'uranium.

A.1 Sensibilité du k_{eff}

Nous avons vu dans le paragraphe 3.1.2.2 l'interprétation du k_{eff} dans l'équation 3.6. Redé-
taillons cette équation avec nos hypothèses :

$$k_{eff} = \frac{N_U \nu \sigma_f^U + R_{fiss}}{N_U \sigma_f^U (1 + \alpha) + R_{disp}} = \frac{\text{fission}}{\text{absorptions} + \text{fuites}} \quad (\text{A.1})$$

où α est le rapport "capture sur fission" de l' ^{233}U , R_{fiss} correspond aux neutrons produits par fission d'autres matériaux que l' ^{233}U (l' ^{235}U par exemple produit environ 10 pourcent des fissions) et R_{disp} correspond aux termes de disparitions additionnels du bilan neutronique : captures sur

les matériaux autres que l'uranium et fuites.

On calcule aisément alors la sensibilité du k_{eff} à la concentration en ^{233}U :

$$\begin{aligned} S_{N_U}^{k_{eff}} &= \frac{\partial k_{eff}}{\partial N_U} / \frac{\partial N_U}{N_U} = \frac{N_U}{k_{eff}} \\ &= \frac{N_U}{k_{eff}} \left(\frac{\nu \sigma_f^U}{N_U \sigma_f^U (1 + \alpha) + R_{disp}} - \frac{\sigma_f^U (1 + \alpha) (N_U \nu \sigma_f^U + R_{fiss})}{(N_U \sigma_f^U (1 + \alpha) + R_{disp})^2} \right) \\ &= \frac{N_U \sigma_f^U}{k_{eff} (N_U \nu \sigma_f^U + R_{fiss})} (\nu - (1 + \alpha) \frac{N_U \nu \sigma_f^U + R_{fiss}}{N_U \sigma_f^U (1 + \alpha) + R_{disp}}) \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

En simplifiant en utilisant la définition de k_{eff} dans l'équation A.1 on trouve :

$$S_{N_U}^{k_{eff}} = \frac{\nu - (1 + \alpha) k_{eff}}{\nu} \frac{N_U \nu \sigma_f^U}{N_U \nu \sigma_f^U + R_{fiss}} \quad (\text{A.3})$$

Soit une formule qui nous indique que k_{eff} a une sensibilité à la concentration du noyau fissile principal inférieure à 1 puisque chaque fission produit ν neutrons mais en consomme aussi $(1 + \alpha)^1$, et que de plus ce noyau n'est pas responsable du total des fissions.

La capture du thorium n'apparaissant que dans le terme de disparition au dénominateur de l'équation A.1, on peut aussi calculer la sensibilité du k_{eff} à la section efficace de capture du ^{232}Th :

$$S_{\sigma_c^{Th}}^{k_{eff}} = \frac{\partial k}{\partial \sigma_c^{Th}} / \frac{\partial \sigma_c^{Th}}{\sigma_c^{Th}} = \left(\frac{-N_{Th} \sigma_c^{Th}}{N_U \sigma_f^U + R_{fiss}} \right) \quad (\text{A.4})$$

La position de la capture du ^{233}Pa étant équivalente à celle de la capture du ^{232}Th dans le k_{eff} , on trouve un résultat équivalent pour la sensibilité :

$$S_{\sigma_c^{Pa}}^{k_{eff}} = \frac{\partial k}{\partial \sigma_c^{Pa}} / \frac{\partial \sigma_c^{Pa}}{\sigma_c^{Pa}} = \left(\frac{-N_{Pa} \sigma_c^{Pa}}{N_U \nu \sigma_f^U + R_{fiss}} \right) \quad (\text{A.5})$$

A.2 Sensibilité de la régénération

Le réacteur est régénérateur si le nombre de noyaux de ^{233}U consommés (par absorption de neutron) est compensé par le nombre de noyaux produits par décroissance du ^{233}Pa . Le nombre de noyaux de ^{233}Pa qui décroissent est égal au nombre produit par capture sur le ^{232}Th moins les captures sur le ^{233}Pa , relativement importantes à cause de la durée de vie de 27,3 jours.

On écrit donc la régénération (Breeding Ratio en Anglais) :

$$BR = \frac{N_{Th} \sigma_c^{Th} - N_{Pa} \sigma_c^{Pa}}{N_U \sigma_f^U (1 + \alpha)} \quad (\text{A.6})$$

¹ à k_{eff} près, qui est égal à 1 dans les cas qui nous intéressent

Le calcul de la sensibilité de la régénération à la concentration d' ^{233}U est immédiate :

$$S_{N_U}^{BR} = -1 \quad (\text{A.7})$$

De même les sensibilités aux réactions de capture du ^{232}Th et ^{233}Pa sont très simples :

$$S_{\sigma_c^{Th}}^{BR} = \frac{N_{Th}\sigma_c^{Th}}{N_{Th}\sigma_c^{Th} - N_{Pa}\sigma_c^{Pa}} \quad (\text{A.8})$$

et

$$S_{\sigma_c^{Pa}}^{BR} = \frac{-N_{Th}\sigma_c^{Pa}}{N_{Th}\sigma_c^{Th} - N_{Pa}\sigma_c^{Pa}} \quad (\text{A.9})$$

A.3 Applications numériques

Nous connaissons par les outils de théorie des perturbations mais aussi par calculs directs la sensibilité du k_{eff} aux données. Le tableau A.1 compare ces résultats² avec nos calculs de coin de table. Par calcul direct, nous connaissons la sensibilité de la régénération aux concentrations. Nous comparons dans le tableau A.2 ces résultats avec nos calculs manuels.

méthode(%/%)	déterministe	directe APOLLO2	directe MCNP	manuelle
^{233}U	0,295	0,317	0,287	0,514
^{232}Th	-0,37	-0,292	-0,227	-0,414
^{233}Pa	-0,014	-0,013		-0,009

TAB. A.1 – Comparaison des sensibilités du k_{eff} calculées par diverses méthodes

méthode(%/%)	directe	manuelle
^{233}U	-0,570	-1
^{232}Th	0,576	1,02
^{233}Pa	-0,007	-0,023

TAB. A.2 – Comparaison des sensibilités de la régénération calculées par diverses méthodes

On constate que les calculs "manuels" donnent le bon ordre de grandeur et les bonnes tendances mais sont surestimés d'environ un tiers, sauf dans le cas de la sensibilité du k_{eff} à la

²le terme de perturbation implicite manque pour le calcul de la sensibilité du k_{eff} à la section efficace de capture du ^{232}Th , voir la partie 5.2

section efficace du ^{233}Pa qui est sous-estimée d'un tiers. Ceci est dû au fait que le changement de section efficace change aussi le spectre et donc les sensibilités et que ces effets ne sont pas pris en compte dans le calcul de la dérivée. Seuls des calculs perturbatifs permettraient d'obtenir cette composante. L'autoprotection a tendance à limiter l'impact des perturbations des sections efficaces. En effet, si une section efficace est augmentée (respectivement diminuée), le taux de réaction lié devrait être augmenté (respectivement diminué)³. Le flux devrait alors diminuer (respectivement augmenter) puisque un nombre différent de neutrons disparaît par réaction et donc le produit $\sigma\phi$ diminue(augmente) à nouveau, limitant l'impact de la perturbation.

³Puisqu'il est le produit de la section efficace et du flux.

Annexe B

Programme apollo2fido

Notre programme APOLLO2FIDO permet de récupérer les sections homogénéisées autoprotégées par APOLLO2[83] pour chaque cellule et de les mettre au format FIDO des programmes de transport DOORS ou DANTSYS.

Ce programme est écrit en C++. Les classes d'objets sont inspirées de celles du module ENDF2ACE du package MURE [110]. Ce module sert à fabriquer automatiquement les fichiers de sections efficaces au format ACE (lisible par MCNP) sans que l'utilisateur n'ait besoin de connaître l'utilisation du programme NJOY [10]. Sa structure est très simple : un programme sert d'interface avec l'utilisateur, construit un objet de la classe APOLLO2FIDO. Il appelle les méthodes liées à cette classe pour lire le fichier de sortie d'APOLLO2 puis écrit le fichier au format FIDO. Ainsi, le changement de format d'un fichier de sections efficaces qui peut faire des centaines de lignes, est réalisé quasiment instantanément après l'écriture d'une unique ligne de commande. De plus l'utilisation de la programmation objet permet d'adapter aisément toute nouvelle option. La connaissance par l'utilisateur des formats du fichier de sortie APOLLO2 et FIDO, du nombre de groupes avec remontée de neutrons (*up-scattering* en anglais) et donc de la dimension des matrices en sortie, n'est pas nécessaire.

Cette annexe est un petit manuel d'utilisation, décrivant les différentes options du programme qui permettent de s'affranchir des petites variations de format des fichiers APOLLO.

Les sorties du programme APOLLO2 contiennent les données nécessaires aux programmes de transport. Ces données, homogénéisées sur la cellule, sont :

- la section efficace totale : $\sigma_{totale}(g)$;
- le produit du nombre de neutron de fission par la section efficace de fission : $\nu * \sigma_{fission}(g)$;
- le spectre des neutrons de fissions : $\chi(g)$;
- les matrices des sections efficaces de diffusion du groupe g' dans le groupe g aux ordres P_0 et P_1 : $\sigma_{diffusion}^l(g' \rightarrow g)$

- quelques autres données non nécessaires pour le calcul transport telles que des coefficients de diffusion ou des laplaciens géométriques DB^2 (utiles pour la prise en compte des fuites en géométrie 2D (cf. chapitre 4.3.1.1), ou des sections efficaces de réactions qui peuvent servir pour calculer des taux de fissions par exemple.

Voici quelques détails sur les options disponibles :

- "-h" permet d'avoir l'aide!
- "-a" et "-f" permettent de nommer les fichiers d'entrées-sorties. Le fichier d'entrée APOLLO doit être coupé pour commencer directement (sans la ligne de "—") par la matrice contenant le numéro de groupe, le flux intégré, les sections TOTALE, SELF, ABSORB., FISSION, SNNN, etc. Nul besoin de connaître toutes ces appellations : APPOLO2FIDO s'occupe de tout...
- "-i" pour donner le nombre de groupes, appelé *igm* par le programme de transport.
- "-t" pour donner la place de la section efficace totale dans le fichier de sortie (appelée *iht* dans le formalisme des programmes de transport). Dans les formats ANISN ou FIDO, on donne dans l'ordre : les sections efficaces nécessaires pour éditer des taux de réactions s'il y en a, la section efficace de capture, le produit $\nu * \sigma_{fission}(g)$ et enfin la section efficace totale. Dans le cas où l'on veut calculer des taux de fission mettre 4, sinon 3 ce qui est équivalent à ne pas utiliser cette option.
- "-s" pour donner la place de la section efficace d'autodiffusion dans le fichier de sortie (donnée *ih*s dans le formalisme des programmes de transport). Cette position dépend du nombre de groupes d'énergie inférieure qui peuvent diffuser dans le groupe en question. APOLLO2FIDO se débrouille seul a priori pour trouver cette place. Dans le cas où les calculs de chaque cellule donneraient des nombres de groupes concernés par le *up scattering* différents, le programme de transport ne pourra pas lire les données puisque la taille des matrices dépendra des résultats des calculs cellules. La solution est de forcer cette valeur au maximum des valeurs utilisées. Ainsi, toutes les matrices ont la même taille et aucune information n'est perdue. Les données *igm*, *ih*s et *ih*t (ainsi que *ih*m, la longueur totale de la table) sont fournies dans l'en-tête de chaque moment de chaque mélange en sortie.
- "-l" pour donner l'ordre maximum du développement des sections efficaces sur les polynômes de Legendre.
- "-n" pour donner le nom du mélange, qui sera écrit dans l'en-tête des sections efficaces en sortie.
- "-d" et "-g" sont des panneaux à utiliser dans les cas où il le faut ! En fonction de la présence ou de l'absence dans les matrices d'une colonne contenant le coefficient de pertes (le DB^2) ou le coefficient de diffusion, la taille des matrices en entrée change, ce qui risque

d'occasionner des erreurs lors de la lecture.

- "-e" doit être utilisé si les sections P_0 ne sont pas conservatives ; car alors le format du fichier APOLLO change légèrement et ne peut plus être lu. Il suffit de comparer dans les sorties du programme appolo2fido et le message lu dans le fichier et de les faire concorder par une utilisation judicieuse de cette option.
- "-c" pour appliquer ou compenser la correction transport utilisée. Les sections efficaces fournies, même si elles contiennent l'ordre P_1 sont en fait corrigées à l'ordre P_1 . Cela peut se vérifier par le fait que la section efficace totale n'est "que" la somme des sections des réactions de capture, de fission, (n,xn), et diffusion à l'ordre P_0 . Il faut donc inverser la correction tranport c'est à dire faire les opérations :

$$\sigma_t(g) = \sigma_{tcorr}(g) + TRACorr(g) \quad (B.1)$$

$$\sigma_s^0(g) = \sigma_{s^0corr}^0(g) + TRACorr(g) \quad (B.2)$$

avec

$$TRACorr(g) = \frac{\sum_{g'=1}^{igm} \sigma_s^1(g \rightarrow g')}{3} \quad (B.3)$$

Ces opérations sont nécessaires si on veut utiliser les données à l'ordre 1. Il faut alors utiliser l'option 2. Si on veut faire des calculs à l'ordre 0 il suffit de ne rien faire !

- "-p" permet de demander la présence d'un "t" à la fin de chaque moment. Ainsi le fichier est bien un fichier xslib presque prêt pour DANTSYS. Pour DOORS, il ne faut pas utiliser cette option. Il ne faut pas oublier non plus d'ajouter un "t" terminal à la fin du fichier d'entrée du logiciel GIP.
- "-b" permet de mettre à 0 la production de neutrons de fissions. Il arrive que la variation relative de la source de fission soit un critère de convergence. Dans une zone de très faible flux qui contiendrait du fissile, cette source risque de beaucoup changer alors que l'impact de ce changement sur les données intégrales importantes soit minimal. Utiliser cette option pour interdire la fission dans cette zone permet alors une utilisation optimale des critères de convergence.

Annexe C

Programme Endf2cov

L'utilisation de SUS3D nécessite des fichiers multigroupes et des matrices de covariances mises en forme par NJOY ou par les modules ERRORJ [111] (versions japonaises de ERRORR) en cas d'utilisation des données d'incertitudes JENDL. La préparation pour chaque isotope, à plusieurs températures avec parfois des traitements particuliers ¹ de ces fichiers est vite fastidieuse car source de nombreuses erreurs. L'automatisation de cette tâche était nécessaire. Le programme ENDF2ACE du package MURE sert lui aussi à automatiser la production de fichiers de sections efficaces avec NJOY pour MCNP. Il a été profondément modifié pour devenir ENDF2COV. ENDF2COV a donc exactement la même structure, basée sur la programmation objet en C++, que ENDF2ACE ou APPOLO2FIDO. Une seule ligne d'appel de ce programme suffit pour préparer le fichier input pour NJOY et de l'exécuter, ce qui permet :

- la production (ou le rajout à un fichier existant) de sections efficaces pour un isotope à une température donnée avec le traitement thermique nécessaire ;
- la production (ou le rajout à un fichier existant) de covariances pour un isotope à une température si la source d'information pour les incertitudes n'est pas JENDL ;
- la production d'un canevas de fichier input pour ERRORJ dans le cas où la source d'information sur les incertitudes est JENDL ;
- le tracé de la matrice de covariance dans le cas où la source d'information sur les incertitudes n'est pas JENDL ;

Ce programme nécessite un seul fichier d'entrée nommé "groupstructure" contenant les coupures énergétiques ! Ce fichier ASCII sera recopié dans le fichier input NJOY, il doit contenir les entrées 6A (ngn = nombre de groupe) et 6B (egn = $ngn+1$ coupures en énergie) du module GROUPE.

Voici quelques détails sur les différentes options disponibles :

¹pour le traitement thermique des liaisons de l'hydrogène dans l'eau et du carbone dans le graphite, par exemple

- "-h" pour avoir de l'aide, c'est à dire un résumé de cette annexe!
- "-p" pour donner le chemin et le nom du fichier de section efficace au format ENDF à utiliser pour les sections efficaces.
- "-c" pour donner le chemin et le nom du fichier au format ENDF contenant les informations d'incertitudes à utiliser pour produire les matrices de covariances.
- "-d" nom de la base de donnée utilisée. Cette option ne sert à rien dans la plupart des cas *sauf* lors de l'utilisation de JENDL pour la partie incertitudes. Dans ce cas-là, un fichier séparé pour ERRORJ est produit et ERRORJ est exécuté. Il est probable que ERRORJ ne soit pas capable de traiter ce fichier. En effet, les évaluations dans JENDL se font souvent par l'évaluation conjointe de plusieurs isotopes. Ainsi des corrélations existent et doivent être reprise en compte lors de la préparation des covariances [26, 27]. L'utilisateur doit donc modifier à la main en conséquence le fichier ERRORJ pour faire apparaître ces corrélations : l'entrée *iread* doit être égale à deux et les réactions corrélées entrées dans l'entrée de carte 10 (entrées *mat1* et *mt1*). De plus l'utilisateur doit fournir un fichier² de section efficace (fichier *ngout*) comprenant des sections efficaces multigroupes de toutes les sections de références. Il ne reste plus alors à l'utilisateur qu'à utiliser la version appropriée de ERRORJ avec ce fichier d'entrée.
- "-v" version de la base utilisée. Tout aussi inutile que l'option précédente mais sans restriction et donc sans intérêt!
- "-z" numéro atomique de l'atome à processor.
- "-a" nombre de nucléons de l'atome.
- "-i" utile pour processor un isomère, et donc 0 par défaut, pour l'état fondamental.
- "-m" numéro du noyau (MAT) dans la nomenclature ENDF, ou au moins dans le fichier de ENDF utilisé. Cette option est très utile lorsque le fichier contient un noyau virtuel dont les sections efficaces correspondent à celle du composant avec sa distribution isotopique naturelle.
- "-l" ordre de Legendre maximum à considérer. SUS3D calcule les sensibilités à partir des moments du flux. Il peut donc utiliser des sections efficaces tronquées à un ordre supérieur à 0.
- "-t" température. NJOY peut produire plusieurs températures pour un seul isotope en un seul passage mais cette possibilité n'est pas utilisée ici. En effet, même si SUS3D peut calculer plusieurs sensibilités à plusieurs températures pour un seul isotope dans sa deuxième couche, la troisième couche elle ne fait pas la différence entre les températures pour un noyau donné. La production en un seul passage de sections efficaces et de covariances à

²Ce fichier peut astucieusement être produit par ce même programme lors d'une exécution précédente.

- plusieurs températures n'est donc pas nécessaire. Puisqu'il faudra toujours faire plusieurs exécutions de SUS3D, autant les faire avec plusieurs fichiers différents.
- "-b" pour ajouter un second sigma zéro : paramètre d'autoprotection du formalisme de bodarenko. NJOY par défaut calcule une section efficace moyenne à dilution infinie. Si l'utilisateur veut utiliser un second facteur, il faut le demander avec cette option. Fonctionnement similaire à la température : NJOY et la seconde couche de SUS3D peuvent en gérer plusieurs à la fois, mais pas la troisième couche de SUS3D... Dans le cas où cette option est utilisée, il faut bien sûr demander à SUS3D d'utiliser la seconde valeur.
 - "-g" pour utiliser le découpage énergétique du fichier ENDF pour la partie covariance. Les incertitudes sont données dans un certain découpage énergétique, et SUS3D attend des covariances avec le découpage utilisé dans le code de transport. NJOY traite donc les incertitudes pour les regrouper et les redécouper sur la grille de l'utilisateur. L'utilisation de cette option permet de vérifier la cohérence des données et de l'impact du redécoupage en demandant un graphe des covariances.
 - "-f" drapeau indiquant que cet isotope doit être écrit dans un nouveau fichier. Cette option est nécessaire aussi pour tracer les covariances puisque le fichier postscript des covariances n'est produit que pour le premier isotope.
 - "-n" présence de données de covariances et demande de traitement associé. La valeur par défaut 0, indique de ne rien faire. "-n 1" indique que les incertitudes sur les sections efficaces sont présentes, c'est à dire qu'il faut traiter les MF=33 du fichier ENDF. "-n 2" indique que les incertitudes sur les nombres de neutrons par fission doivent aussi être traitées, c'est à dire que les MF=33 et les MF=31 sont présents.

Bibliographie

- [1] Forum Generation IV. *A Technology Roadmap for the Generation IV Nuclear Energy Systems*, december 2003. <http://gif.inel.gov/roadmap>.
- [2] C. Bataille. *Loi n° 91-1381 du 30/12/1991 relative aux recherches sur la gestion des déchets radioactifs*. Journal Officiel, 1991.
- [3] J.M. Jancovici. *L'avenir Climatique, Quel temps ferons-nous ?* Seuil, 2002.
- [4] C. Ngô. Le contexte énergétique mondial actuel et à venir. In *Journées de la division de physique nucléaire de la SFP, IPN Orsay*, Mai 2004.
- [5] P.R. Bauquis. Quelles énergie pour le transport au XXIème siècle. *La revue de l'Energie*, 55, 2004.
- [6] P.R. Bauquis. Un point de vue sur les besoins et les approvisionnements en énergie à l'horizon 2050. *La revue de l'Energie*, 50, 1999.
- [7] Groupe d'experts intergouvernemental sur l'évolution du climat (GIEC). *Bilan 2001 des changements climatiques : Les éléments scientifiques*, 2001. <http://ipcc.ch>.
- [8] ANDRA. *Inventaire national des déchets radioactifs et des matières valorisables*. ANDRA, 2004.
- [9] R. E. Mac Farlane. *New Thermal Neutron Scattering Files for ENDF-BIV Release 2*, Août 1994.
- [10] B. Mac Farlane et al. *NJOY 97.0, Code System for Producing Pointwise and Multigroup Neutron and Photon Cross Sections from ENDF/B-VI Data*, 1998. RSICC CODE PACKAGE PSR-368.
- [11] n_TOF Collaboration. *European Collaboration for High-Resolution Measurements of Neutron Cross Sections between 1 eV and 250 MeV*, 1999. CERN-SPSC-99-8 SPSC/P310.
- [12] L. Perrot. *Validation des bases de données de sections efficaces par l'utilisatin d'un spectromètre à temps de ralentissement au plomb entre 0.1 eV et 30 keV, méthodologie - résultats*. PhD thesis, Université Joseph Fourier, Grenoble, 2001.

- [13] S. Boyer. *Dans le cadre du nouveau cycle de combustible $^{232}\text{Th}/^{233}\text{U}$, détermination de la section efficace de capture radiative $^{233}\text{Pa}(n,\gamma)$ pour des énergies de neutrons comprises entre 0 et 1 MeV.* PhD thesis, Université Bordeaux I, 2004.
- [14] O. Deruelle et al. The Mini-Inca Project : Experimental Study of the Transmutation of actinides in High Intensity Neutron Flux. In *Int. Conf. Nucl. Data for Science and Technology*, Tsukuba, Japan, Octobre 2001.
- [15] O. Deruelle. *Mise au point d'un système de spectroscopie pour mesurer des sections efficaces neutroniques applicables à un possible développement du nucléaire comme source d'énergie.* PhD thesis, Université Paris XI-Orsay, 2002.
- [16] V. McLane. *EXFOR Exchange Formats Manual*, Août 2004. IAEA-NDS-207 Rev. 2004/08.
- [17] A. M. Lane, R. G. Thomas. R-Matrix Theory for Nuclear Reactions. *Rev. Mod. Phys.*, 17 :563, 1960.
- [18] C.W. Reich, M.S. Moore. Multilevel Formula for the Fission Process. *Phys. Rev.*, 111 :929–933, 1958.
- [19] N.M.Larson. *Updated User's guide for SAMMY : Multilevel R-Matrix Fits to Neutron Data Using Bayes'Equation*, 2003. ORNL/TM-9179/R6.
- [20] F. H. Fröhner. *Nuc. Sci. Eng.*, 103 :119, 1989.
- [21] T. Belgia et al. *Handbook for Calculations of Nuclear Reaction Data, RIPL-2*, 2005. IAEA-NDS.
- [22] M. Hertman et al. Recent Developments of the Nuclear Reaction Model Code Empire. In *Int. Conf. Nuc. Data for Science and Technology*, Santa Fe, USA, September 2004.
- [23] A. Koning et al. TALYS Comprehensive Nuclear Reaction Modeling. In *Int. Conf. Nucl. Data for Science and Technology*, Santa Fe, USA, September 2004.
- [24] Cross Section Evaluation Working Group. *ENDF-102 Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data File ENDF-6*, Août 1990. BNL-NCS-44945-01/04-Rev.
- [25] J.F. Briesmeister. *MCNP - A General Monte Carlo N Particle Transport Code*, 1997. LANL, report 12625-M .
- [26] K. Shibata et al. JENDL 3.2 Covariance files. In *Nuclear Data Covariance Workshop*, Brookhaven National Laboratory, Avril 1999. ORNL/TM-2000/19.
- [27] T. Kawano, K. Shibata. *Evaluation of Covariance for Resolved Resonance Parameters of ^{235}U , ^{238}U , ^{239}Pu* , Février 2003. JAERI-Research 2003-001.
- [28] G. Breit, E. Wigner. Capture of Slow Neutrons. *Phys. Rev.*, 49 :519–531, 1936.

- [29] N.P Kocherov, P. K. McLaughlin. *International Reactor Dosimetry Files,IRDF90v2*, 1990. IAEA-DS-141.
- [30] I. Kodeli. *Cross Section Covariance Data Available in Evaluated Nuclear Data Libraries*, 2003. JEF/DOC-940.
- [31] G. Palmiotti, M. Salvatores. *Proposal for Nuclear Data Covariance Matrix*, janvier 2005. JEF/DOC-1063rev1.
- [32] G. Noguere et al. Nuclear Data Evaluation for GEN IV and Other Nuclear Energy Systems. In *Workshop on Nuclear Data Needs for GEN IV Reactors, Antwerpen, Belgium*, April 2005.
- [33] S. Mughabghab et al. *Neutron Cross Section, Vol.1. Neutron Resonance Parameters and Thermal Cross Section, Part A*. Academic Press, New York, 1981.
- [34] S. Mughabghab et al. *Neutron Cross Section, Vol.1. Neutron Resonance Parameters and Thermal Cross Section, Part B*. Academic Press, Orlando FA, 1984.
- [35] M.L. Williams, B.L Broadhead, C.V. Parks. Eigenvalue sensitivity Theory for Resonance-Shielded Cross Sections. *Nuc. Sci. Eng.*, 138 :177–191, 2001.
- [36] I. Kodeli et E. Sartori. *ZZ-VITAMIN/COVA, Covariance Data Library*, 1990. NEA1264/03.
- [37] B. Davidson. *Neutron Transport Theory*. Oxford University Press, 1957.
- [38] A. M Weinberg, E.P. Wigner. *The Physical Theory of Neutron Chain Reactors*. Chicago University Press, 1958.
- [39] F. Perdu. *Contribution aux études de sûreté pour les filières innovantes de réacteurs nucléaires*. PhD thesis, Université Joseph Fourier, Grenoble, 2003.
- [40] J. Vollaie. *L'expérience MUSE-4 : mesure des paramètres cinétiques d'un système sous-critique*. PhD thesis, Université Joseph Fourier, Grenoble, 2004.
- [41] P. Reuss. *La Neutronique*, volume 3307. Presses Universitaires de France, 1998. Collection Que-sais-je ?
- [42] J. P. Both et al. *User Manual for version 4.3 of the TRIPOLI-4 Monte Carlo method particle Transport computer code*, 2003. CEA-Report : CEA-R-6044, DTI, NEA-1716/02.
- [43] I. I. Bondarenko. *Group Constants for Nuclear Reactor Calculations*, 1964. Consultants Bureau, New York.
- [44] S.M. Dancoff, M. Ginsburg. *Surface Resonance Absorption in Close Packed Lattices*, 1944. Manhattan Project Report CP-2157.
- [45] E. P. Wigner. *Effect of Small Perturbations on Pile Period*, 1945. CP 3048.

- [46] A. Bidaud, T. Ivanova, V. Mastrangelo. Analyse des incertitudes et des facteurs de sensibilités de données nucléaires sur des concepts de réacteurs à sels fondus. In *Bilan des action soutenues, GDR GEDEPEON, Grenoble*, décembre 2004.
- [47] L.N. Usachev. Perturbations theory for the breeding ratio and for other number ratios pertaining to various reactor processes. *J. Nuc. Ener.*, 18 :571, 1964.
- [48] A. Gandini. A generalized perturbation method for bilinear functionals of the real and adjoint fluxes. *J. Nuc. Ene.*, 21 :735–745, 1967.
- [49] J. Lewins. *Importance. The adjoint function*. Pergamon Press, 1964.
- [50] I. Kodeli. *SUSD3D, 1-, 2-, 3- Dimensional Cross Section Sensitivity and Uncertainty Code*, 2000. NEA-1608/01.
- [51] M. L. Williams. *Perturbation Theory for Nuclear Reactor Analysis*. Y. RONEN. Ed., CRC Press, Boca Raton, Florida , 1985.
- [52] B-C. Na, E Sartori. *Benchmark on the VENUS-2 MOX Core Measurements*. OECD/NEA report, 2000. NEA/NSC/DOC(2000), ISBN 92-64-18276-4.
- [53] B-C. Na, E Sartori. *Benchmark on the Three-dimensional VENUS-2 MOX Core Measurements*. OECD/NEA report, 2004. NEA/NSC/DOC(2003)5, ISBN 92-64-02160-4.
- [54] I. Kodeli. Multidimensional Deterministic Nuclear Data Sensitivity and Uncertainty Code System, Method and Application. *Nuc. Sci. Eng.*, 138 :45–66, 2001.
- [55] I. Kodeli. Cross-Section Data Uncertainty and how such Information is Used in Fusion Analysis. In *PHYSOR-2000, Pittsburg, PA*, Mai 2000.
- [56] I. Kodeli. Analysis of Venus-3 Benchmark Experiment. In *Nuc. Ener. in Central Europe, Terme Čatež, Slovenia* , Septembre 1998.
- [57] I. Kodeli. *Etudes des Incertitudes sur la Fluence dans les Cuves des REP, Ajustement des Données de Base*. PhD thesis, Université Paris XI-Orsay, 1991.
- [58] S. J. Kim, I. Kodeli, E. Sartori. Analysis of SNEAK-7A & 7B Critical Benchmark using 3-D Deterministic Transport and Sensivity Analysis Methods . In *PHYSOR-2004, Chicago, Illinois*, Avril 2004.
- [59] M. Ionescu-Bujor, D. G. Cacuci. A Comparative Review of Sensitivity and Uncertainty Analysis of Large-Scale Systems. *Nuc. Sci. Eng.*, 147 :189, 2004.
- [60] A. Bliskava et al. *CONSYST/MMKKENO Codes for Nuclear Reactor Calculation Using Monte Carlo Method in Multigroups with P_5* , 2001. Pre-print IPPE-2887, Obninsk, (in Russian).

- [61] B.T. Rearden. Perturbation Theory Eigenvalue Sensitivity Analysis with Monte Carlo Techniques. *Nuc. Sci. Eng.*, 146 :367–382, 2004.
- [62] K. Furuta, Y. Oka, S. Kondo. *SUSD : A Computer Code for Cross-section, Sensitivity and Uncertainty Analysis Including Secondary Neutron Energy and Angular Distributions*, Août 1986. Draft of UTNL-R0185, English Translation.
- [63] W.A. Rhoades et al. *DOORS3.2, One-, Two-, Three-Dimensional Discrete Ordinates Neutron/Photon Transport Code System*, 1998. CCC-650, RSICC, Oak Ridge National Laboratory.
- [64] R.E. Alcouffe et al. *DANTSYS3.0 - A Diffusion Accelerated, Neutron-Particle Transport System*, 1995. LA-12969-M, Los Alamos National Laboratory.
- [65] R.E. Macfarlane. *TRANSX 2 : A code for Interfacing MATXS Cross-Section Libraries to Nuclear Transport Codes*, 1995. LA-12969-M, Los Alamos National Laboratory.
- [66] *SCALE-4.4 : A Modular Code System for Performing Standardized Computer Analyses for Licensing Evaluation*, 1998. RSICC code package CCC-545.
- [67] T. D. Newton et J. L. Hutton. The Next Generation WIMS Lattice Code : WIMS9. In *PHYSOR-2002, Seoul, Korea*, Octobre 2002.
- [68] R. Orsi. *BOT3P Version 5.0 : A Pre/Post-Processor System for Transport Analysis*, 2005. FIS-P9H6-008, ENEA-Bologna, Italy, NEA-1678.
- [69] A. Bidaud, V. Mastrangelo. Results of Benchmarks carried out with DANTSYS, DOORS, BOT3P. In *3D-Trans, Workshop on Common Tools and Interfaces for Deterministic Radiation Transport, for Monte Carlo and Hybrid Codes, Paris*, Septembre 2003.
- [70] A. Bidaud et al. Sensitivity and Uncertainty Study for Thorium Molten Salt Reactors. In *Advanced Reactors With Innovative Fuel, Oak Ridge, TN, USA*, février 2005.
- [71] G. Hosking and T. D. Newton. *Proposed Benchmark Specification for an HTR fuelled with Reactor Grade Plutonium (or Reactor Grade Pu/Th and U/Th)*, 2003. NEA/NSC/DOC(2003)22.
- [72] J.E. White et al. VITAMIN-B6, A Fine-group Cross Section Library Based on ENDF/B-VI for Radiation Transport Applications. In *Proc. Int. Conf. Nucl. Data for Science and Technology, Gatlingburg, TN, USA*, pages 733–736, Mai 1994.
- [73] M. Pescarini et al. *VITJEF22.BOLIB, A JEF-2.2 Multigroup coupled (199 n+ γ) Cross Section Library in AMPX Format for Nuclear Fission Applications*, 2003. FIS-P815-001.
- [74] W. Bernnat et al. Validation of Nuclear Data Libraries for Reactor Safety and Design Calculations, Octobre 2001.

- [75] A. Bidaud, I. Kodeli, V. Mastrangelo, E. Sartori. Validation of a Multidimensional Deterministic Nuclear Data Sensitivity and Uncertainty Code System : an Application Needing Supercomputing. In *Proc. of Supercomputing and Nuclear Applications, Paris(, France, Septembre 2003.*
- [76] G. E. Sjoden and A. Haguighat. PENTRAN -A 3-D Cartesian Parallel Sn Code with Angular, Energy and Spatial Decomposition. In *Supercomputing and Nuclear Applications, Saratoga Springs, NY, USA*, volume 2, pages 1267–1276, 1997.
- [77] R. E. Alcouffe et al. *PARTISN User's Guide*, Novembre 2002. Transport Methods Groups, CCS-4, Los Alamos National Laboratory.
- [78] C.A. Uttley et al. In *Proc. Int. Conf. Nucl. Data for Reactors, Paris, 1966.* VOL. I, P. 165, IAEA .
- [79] A. Courcelle et al. *ORNL-CEA Evaluation of ^{238}U Resonance Parameters up to 20 keV*, 2004. JEF/DOC-1075.
- [80] A. Courcelle et al. *New Evaluation of the ^{238}U Cross Sections in the Unresolved Resonance Range (20keV-150keV*, 2004. JEF/DOC-1074.
- [81] M. Mattes et J. Keivert. *Thermal Scattering Law for the Moderator Materials H₂O, D₂O and ZrHx in ENDF-6 Format and as ACE Library for MCNP(X) Codes*, Avril 2005. IAEA-INDC(NDS)-0470.
- [82] T. Courau. *Theorie des perturbations*. PhD thesis, Université , Montréal, 2002.
- [83] S. Louvière, R. Sanchez, M. Coste, A. Herbert, Z. Stankovski. APOLLO2 Twelve Years Later. In *Int. Conf. on Mathematics and Computation, Madrid , Spain, 1999.*
- [84] D. Honde, P. Palmiotti, J.M. Rieunier, G. Rimpault. *ERANOS : Manuel des Méthodes. Les calculs de perturbations et les analyses de sensibilités.* note technique DER/SPRC/LEPh/96.275.
- [85] R. L. Childs. *Generalized Perturbation Theory Using Two-Dimensional, Discrete Ordinates Transport Theory*, June 1980. ORNL/CSD/TM-127.
- [86] D. Lecarpentier. *Le concept AMSTER, Aspects Physiques et Sécurité*. PhD thesis, Conservatoire National des Arts et Métiers, Paris, 2001.
- [87] P.N. Haubenreich, J.R. Engel. Experience with the Molten Salt Reactor Experiment. *Nuclear Applications and Technology*, 8 :118–136 , 1970.
- [88] R.C. Briant, A.M. Weinberg. Aircraft Nuclear Propulsion Reactor. *Nuc. Sci. Eng.*, 2 :795–853, 1957.

- [89] R.T. Coyle, T.M. Thomas, G.Y. Lai. Exploratory corrosion tests on alloys in molten salts at 900°C. *High Temperature Corrosion in Energy Systems, Detroit, USA*, pages 627–641, 1984.
- [90] Groupe de travail CEA-EDF "Matériaux métalliques RSF". *Synthèse des études réalisées entre 1773 et 1983, dossier matériaux métalliques*", 1983. Rapport interne EDF HT/12/77/83.
- [91] Groupe de travail CEA-EDF "cœur". *Synthèse des études réalisées entre 1973 et 1983, dossier "cœur"*, 1983. rapport interne EDF HT/12/75/83.
- [92] C.D. Bowman et al. Nuclear energy generation and waste transmutation using an accelerator-driven intense thermal neutron source. *Nuc. Instr. Meth. in Physics Research*, A320 :336–367, 1992.
- [93] A. Nuttin. *Potentialité du concept de réacteurs à sel fondus pour une production durable d'énergie nucléaire basée sur le cycle Thorium en spectre épithermique*. PhD thesis, Université Joseph Fourier, Grenoble, 2002.
- [94] A. Nuttin et al. Potential of Thorium Molten Salt Reactors Detailed Calculations and Concept Evolution with a view to Large Scale Energy Production. *Prog. In Nuc. Ener*, 46(1) :77–99, 2005.
- [95] L. Mathieu. *Cycle Thorium et Réacteurs à Sel Fondu. Exploration du champ des Paramètres et des contraintes définissant le "Thorium Molten Salt Reactor"*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Grenoble, Septembre 2005.
- [96] D. Lecarpentier, C. Garzenne, D.Heuer, A.Nuttin. Temperature Feedbacks of a Thermal Molten Salt Reactor : Compromise between Stability and breeding Performances. In *Int. Cong. on Advances in Nuclear Power Plants*, 4-7 Mai 2003.
- [97] A.A. Bliskavka et al. Algorithm of Calculation of k_{eff} Sensitivities to Group Cross Sections Using Monte Carlo Method and Features of Its Implementation in the MMK-KENO Code. In *Mathematics and Computation, Supercomputing, Reactor Physics and Nuclear and Biological Applications, Avignon, France*, Septembre 2005.
- [98] S. M. Bowman et al. *SCALE 5 : Powerful New Criticality Safety Analysis Tools*. In *Int. Conf. on Nuclear Criticality Safety*, 2003.
- [99] G. Manturov, M. Nikolaev, A. Tsiboulia. *ABBN-93 Group Data Library. Part 1 : Nuclear Data for the Calculations of Neutron and Photon Radiation Fields*, 1997. IAEA, INDC (CCP)-409, Vienna.

- [100] M. Salvatores et al. Sensitivity of Advanced Reactor and Fuel Cycle Performance Parameters to Nuclear Data Uncertainties. In *Workshop on Nuclear Data Needs for GEN IV Reactors, Antwerpen, Belgium*, April 2005.
- [101] G. Rimpault et al. Nuclear Data Needs for the Assessments of GEN IV Nuclear Energy Systems. In *Workshop on Nuclear Data Needs for GEN IV Reactors, Antwerpen, Belgium*, April 2005.
- [102] A. Bidaud, T. Ivanova, V. Mastrangelo, I. Kodeli. Sensitivity of Advanced Reactor and Fuel Cycle Performance Parameters to Nuclear Data Uncertainties. In *Workshop on Nuclear Data Needs for GEN IV Reactors, Antwerpen, Belgium*, Avril 2005.
- [103] T. Ivanova, A. Bidaud, I. Kodeli, V. Mastrangelo. Comparison of M/C Methods and S_n Eigenvalue Sensitivity Methods by the Analysis of a Thorium Molten Salt Reactor. In *Proc. of Mathematics and Computation, Supercomputing, Reactor Physics and Nuclear and Biological Applications, Avignon, France*, Septembre 2005.
- [104] L. Mathieu et al. *The Thorium Molten Salt Reactor : Moving on from the Molten Salt Breeder Reactor*, 2005. Soumis pour publication dans Phys. Nuc. Ene.
- [105] M. Salvatores, I. Slessarev, A. Tchistiakov. Analysis of Nuclear Power Transmutation Potential at Equilibrium. *Nuc. Sci. Eng.*, 124(2) :280–290, 1996.
- [106] H. Weigmann. *Some questions related to data accuracies and covariances*, Mai 2005. JEF/DOC-1092.
- [107] M. M. Uematsu. *Etude Physique du Couplage d'un Accélérateur et d'un Réacteur Sous-critique pour la Transmutation des Déchets Nucléaires*. PhD thesis, Université de Provence, Aix-Marseille I, 1994.
- [108] A. Tchistiakov. *Etude du potentiel de transmutation et des caractéristiques de sûreté d'un système hybride : Accélérateur -réacteur sous critique*. PhD thesis, Université de Provence, 1998.
- [109] S. David. Future Scenarios for Fission Based Reactors. *Nucl. Phys. A*, 751 :429–441, 2005.
- [110] O. Méplan et al. MURE : MCNP Utility for Reactor Evolution. <http://lpsc.in2p3.fr/gpr/MURE/html/UserGuide/UserGuide.html>.
- [111] G. Chiba. *ERRORJ Manual*, Septembre 2003. JNC TN9520 2003-008.

Table des figures

1.1	Répartition de la consommation d'énergie en France en 2000	6
1.2	Répartition de la production d'énergie primaire dans le monde en 2001.	12
1.3	Estimations des réserves de pétroles suivant plusieurs sources	12
1.4	Comparaison des simulations du climat passé prenant en compte ou non l'impact des émissions de gaz à effet de serre par les activités humaines	13
1.5	Comparaison des contributions des différents actinides à la radiotoxicité induite par la production d'un GWth.an dans un REP.	15
1.6	Comparaison des radiotoxicités induites par la production d'un GWth.an par dif- férentes filières de réacteurs.	15
2.1	Sections efficaces évaluées de capture et de fission de l' ^{233}Th en fonction de l'éner- gie, entre 10^{-2} eV et 20 MeV	18
2.2	Comparaison des flux de neutrons dans une sphère de graphite avec et sans trai- tement des données thermiques	31
2.3	Incertitudes et matrice de corrélation associée de la section efficace de capture . .	31
2.4	Incertitudes et matrice de corrélation associée de la section efficace de capture de l' ^{232}Th	31
2.5	Matrice de covariance et incertitude sur la section efficace de fission de l' ^{233}U disponibles dans JENDL3-3	32
2.6	Matrice de covariance et incertitude sur le nombre de neutron par fission de l' ^{233}U disponibles dans JENDL3-3	32
2.7	Matrice de covariance et incertitude sur la section efficace de capture de l' ^{238}U disponibles dans JENDL3-3	32
2.8	Matrice de covariance et incertitude sur le nombre de neutrons par fission de l' ^{233}U disponibles dans JENDL3-3	32
4.1	Coupe à mi-hauteur d'un quart de la géométrie de VENUS2	52

4.2	Organigramme des programmes utilisés pour les analyses de sensibilité et d'incertitude	54
4.3	Comparaison du flux DORT par rapport à celui de TWODANT	58
4.4	Distribution du flux de neutrons vu sur une coupe à mi-hauteur d'un quart de la géométrie de VENUS	79
4.5	Comparaison Calcul/Expérience de la distribution du taux de fission dans VENUS2	80
4.6	Profils des sensibilités du k_{eff} de VENUS2 suivant quelques sections efficaces . .	80
4.7	Comparaison des sensibilités à la section efficace de capture de ^{1238}U , calculée par la théorie des perturbations et par le profil du taux de réaction	81
4.8	Spectre du flux direct et fonction-importance de VENUS2 des zones combustibles.	81
4.9	Comparaison des profils de sensibilité du k_{eff} , basés sur les calculs transports faits à 18 groupes et à 199 groupes.	82
4.10	Signe de la fonction adjointe généralisée calculée par DORT.	83
4.11	Valeur absolue de la fonction adjointe généralisée calculée par DORT.	83
5.1	Géométrie du Réacteurs à Sels Fondus vu en coupe médiane	87
5.2	Schéma de retraitement du sel fissile du RSF de référence	87
5.3	Evolution de paramètres de neutronique avec le rayon des canaux	89
5.4	Profils de sensibilité du k_{eff} aux sections efficaces de captures de ^{1234}U et ^{232}Th et à la section efficace de fission de ^{1233}U	93
5.5	Comparaison des profils de sensibilité du k_{eff} à la section efficace de capture du ^{232}Th obtenus par les différentes méthodes	95
5.6	Comparaison des profils de sensibilité du k_{eff} à la section efficace de fission de ^{1233}U obtenus par les différentes méthodes	95
5.7	Evolution des coefficients de température avec le rayon des canaux	100
5.8	Evolution des coefficients de température avec le rayon des canaux	100
5.9	Comparaison du profil de sensibilités du coefficient de température à la section efficace de fission de ^{1233}U obtenu par les différentes méthodes	102
5.10	Comparaison du profil de sensibilité du coefficient de température à la section efficace de capture du ^{232}Th obtenu par les différentes méthodes	102
5.11	Variance et intégrale de la variance de la contribution de la section efficace de capture du ^{232}Th à l'incertitude sur le calcul du coefficient de température	105
6.1	Représentation dans le plan (N,Z) des chaînes de réaction des noyaux lourds . . .	114
6.2	Représentation dans le plan (N,Z) des chaînes de réaction des noyaux lourds . . .	114

Liste des tableaux

1.1	Comparaison des inventaires (en kg) au chargement et au déchargement d'un Réacteur à Eau sous Pression après production d'une énergie d'un GWe pendant un an.	14
2.1	Effet de l'autoprotection sur le calcul des incertitudes de la section efficace de capture du ^{238}U dans les groupes correspondant aux plus grandes résonances avec les données de JENDL3.2	29
4.1	Comparaison des calculs en fonction de la géométrie et du programme	57
4.2	Comparaison des calculs de criticité	59
4.3	Sensibilités intégrées (%/%) du k_{eff} de VENUS aux réactions les plus importantes	61
4.4	Comparaison des sensibilités du k_{eff} à la section efficace de capture de l' ^{238}U en fonction des sections efficaces utilisées	64
4.5	Sensibilités au $\bar{\nu}$ de l' ^{235}U et du ^{239}Pu corrigées et impact de la correction du k_{eff}	67
4.6	Impact de la correction sur les sensibilités intégrées au $\bar{\nu}$ de l' ^{235}U et du ^{239}Pu du k_{eff}	67
4.7	Comparaison des sensibilités intégrées (%/%) du k_{eff} de VENUS aux réactions les plus importantes calculées à partir des données à 199 groupes préparées avec SCALE4.4 ou de la bibliothèque à 18 groupes préparée par W.Zwermann avec RESMOD	68
4.8	Comparaison des sensibilités intégrées (%/%) du k_{eff} de VENUS aux réactions les plus importantes calculées à partir de résultats 2D, 3D et incluant la correction du volume en 3D	70
4.9	Comparaison des sensibilités intégrées (%/%) du k_{eff} de VENUS aux réactions les plus importantes calculées à partir de deux calculs 2D utilisant des valeurs de hauteurs extrapolées différentes	71
4.10	Contribution des données nucléaires importantes à l'incertitudes du k_{eff} de VENUS	73

5.1	Comparaison des k_{eff} obtenus par différents outils	91
5.2	Sensibilités intégrées (en %/%) du TMSR aux réactions les plus importantes . . .	92
5.3	Sensibilités intégrées (en %/%) du TMSR aux réactions les plus importantes . . .	94
5.4	Comparaison de la sensibilité intégrée à la section efficace de capture de l' ^{234}U en fonction de la valeur du σ_0 choisi dans NJOY	96
5.5	Effet de la correction du terme de gain sur les sensibilités du k_{eff} au nombre de neutrons par fission et à la section efficace de fission	96
5.6	Contributions à l'incertitude (pcm) du k_{eff} sur TMSR des réactions les plus importantes	97
5.7	Comparaison des sensibilités de la régénération à la section efficace de capture avec ou sans prise en compte de la conservation de la criticité. Incertitude de la régénération induite par la section efficace de capture du ^{232}Th à k_{eff} constant . .	110
6.1	Chaînes des noyaux du cycle T/U	115
6.2	Contribution au bilan de neutron de la disparition d'une partie des actinides à l'équilibre du RSF 1, au thorium à retraitement rapide.	120
6.3	Contribution au bilan de neutron de la disparition d'une partie des actinides à l'équilibre du RSF 2, au thorium à retraitement simplifié.	120
6.4	contribution au bilan de neutron de la disparition d'une partie des actinides à l'équilibre du RSF 3, à spectre rapide à combustible (U/Pu)Cl ₃	121
6.5	Contributions des différentes réactions à la régénération dans les cas des deux Réacteurs à Sels Fondus au thorium, RSF 1 et RSF 2, exprimée en %	125
6.6	Comparaison de la variation de régénération avec la stratégie de retraitement . .	128
6.7	Sensibilité aux données des RSF thorium	130
6.8	Comparaison des sensibilité aux données du RSF thorium	131
6.9	Incertitudes sur la régénération du RSF 1. La régénération est GR=0,038 pour ce concept. Nous obtenons une incertitude sur cette valeur de 100%.	133
6.10	Incertitudes sur la régénération du RSF 2. Pour ce concept, on obtient une incertitude ΔGR 21 fois plus grande que la valeur de la régénération de GR=0,002. .	133
A.1	Comparaison des sensibilités du k_{eff} calculées par diverses méthodes	145
A.2	Comparaison des sensibilités de la régénération calculées par diverses méthodes .	145

Résumé

La simulation neutronique des réacteurs nucléaires suppose la connaissance de l'interaction neutron noyau (sections efficaces, nombres et spectres des neutrons de fission...) pour les quelques dizaines de noyaux présents dans le réacteur sur une douzaine d'ordres de grandeur d'énergie des neutrons. Le développement d'un nucléaire durable impose de nouvelles contraintes aux réacteurs du futur : l'optimisation de l'utilisation de la matière première nécessite la régénération des noyaux fissiles et la gestion des déchets suppose leur transmutation. Les réacteurs proposés permettant d'atteindre ces objectifs (génération IV et ADS) sont chargés de combustibles nouveaux (thorium, actinides lourds...) et fonctionnent avec des spectres neutroniques pour lesquels les données nucléaires ne bénéficient pas des 50 années de l'expérience industrielle. Après leur validation sur un réacteur expérimental dans le cadre d'un exercice international, nous appliquons des outils classiques de physique de réacteurs en combinaison avec les incertitudes sur les données de bases disponibles pour calculer l'incertitude sur la criticité et le coefficient de température d'un réacteur à sel fondu au thorium. De plus, une réflexion sur les taux de réactions importants pour le cycle à l'équilibre donne une estimation de l'efficacité des différentes stratégies de retraitement en ligne du combustible et les contributions de ces taux de réactions à l'incertitude sur la régénération et donc l'impact de ces incertitudes sur le dimensionnement de l'usine de retraitement. Nous pouvons alors lister les données à améliorer prioritairement pour améliorer la précision des calculs.

Abstract

Neutronic simulation of nuclear reactors is based on knowledge of the neutron-nucleus interaction (cross-sections, fission neutron yields and spectra...) for the dozens of nuclei present in the core over a very large energy range (fractions of eV to several MeV). To obtain the goal of the sustainable development of nuclear power, future reactors must have new and more strict constraints to their design : Optimization of ore materials will necessitate breeding (generation of fissile material from fertile), and waste management will require transmutation. Innovative reactors that could achieve such objectives (Generation IV or ADS) are loaded with new fuels (thorium, heavy actinides...) and function with neutron spectra for which nuclear data do not benefit from 50 years of industrial experience, and thus present particular challenges. After validation on an experimental reactor using an international benchmark, we take classical reactor physics tools along with available nuclear data uncertainties to calculate the sensitivities and uncertainties of the criticality and temperature coefficient of a Thorium Molten Salt Reactor. In addition, a study based on the important reaction rates for the calculation of cycle's equilibrium allows us to estimate the efficiency of different reprocessing strategies and the contribution of these reaction rates on the uncertainty on the breeding and then on the uncertainty of the size of the reprocessing plant. Finally, we use this work to propose an improvement of the high priority experimental request list.

Mots clefs

Données nucléaires, analyses de sensibilité, analyses d'incertitude, réacteurs à sels fondus, cycle Thorium, théorie des perturbations.