



**HAL**  
open science

# Contribution à l'évaluation des incertitudes sur les sections efficaces neutroniques, pour les réacteurs à neutrons rapides

Edwin Privas

► **To cite this version:**

Edwin Privas. Contribution à l'évaluation des incertitudes sur les sections efficaces neutroniques, pour les réacteurs à neutrons rapides. Génie des procédés. Université Grenoble Alpes, 2015. Français. NNT: 2015GREAI109 . tel-01286566

**HAL Id: tel-01286566**

**<https://theses.hal.science/tel-01286566>**

Submitted on 11 Mar 2016

**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.

## THÈSE

Pour obtenir le grade de

**DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ GRENOBLE ALPES**

Spécialité : **Mécanique des fluides, Énergétique, Procédés**

Arrêté ministériel : 7 août 2006

Présentée par

**Edwin Privas**

Thèse dirigée par **Elsa MERLE-LUCOTTE**

préparée au sein du **Laboratoire d'Étude Physique, CEA**  
dans l'**École Doctorale I-MEP2 : Ingénierie – Matériaux,  
Mécanique, Environnement, Énergétique, Procédés, Production**

# Contribution à l'Évaluation des Incertitudes sur les Sections Efficaces Neutroniques, pour les Réacteurs à Neutrons Rapides.

Thèse soutenue publiquement le **28 Septembre 2015**,  
devant le jury composé de :

**Madame Elsa MERLE-LUCOTTE**

Professeur à Grenoble-INP, Directrice de thèse

**Monsieur Éric BAUGE**

Chercheur au CEA – Bruyère-le-Châtel/DAM/DIF, Rapporteur

**Monsieur Luiz LÉAL**

Chercheur à Oak Ridge National Laboratory aux USA, Rapporteur

**Monsieur Cyrille DE SAINT JEAN**

Chercheur au CEA – Cadarache/DEN/DER/SPRC, Encadrant

**Monsieur Philippe DESAGNE**

Chercheur au CNRS – Strasbourg/IPHC/DRS, Président

**Monsieur Adrien BIDAUD**

Chercheur au CNRS – Grenoble/in2p3/LPSC, Membre





---

## Résumé :

La thèse a essentiellement été motivée par la volonté croissante de maîtriser les incertitudes des données nucléaires, pour des raisons de sûreté nucléaire. Elle vise en particulier les sections efficaces indispensables aux calculs neutroniques des réacteurs rapides au sodium de Génération IV (RNR-Na), et les moyens permettant de les évaluer.

Le principal objectif de la thèse est de fournir et montrer l'intérêt de nouveaux outils permettant de réaliser des évaluations cohérentes, avec des incertitudes maîtrisées et fiables. Pour répondre aux attentes, différentes méthodes ont été implémentées dans le cadre du code CONRAD, développé au CEA de Cadarache, au Département d'Étude des Réacteurs.

Après l'état des lieux et la présentation des différents éléments nécessaires pour effectuer une évaluation, il est présenté des résolutions stochastiques de l'inférence Bayésienne. Elles permettent de fournir d'une part, des informations supplémentaires à l'évaluateur par rapport à la résolution analytique et d'autre part, de valider cette dernière. Les algorithmes ont été testés avec succès à travers plusieurs cas, malgré des temps de calcul plus longs faute aux méthodes de type Monte Carlo.

Ensuite, ce travail a rendu possible, dans CONRAD, de prendre en compte des contraintes dites microscopiques. Elles sont définies par l'ajout ou le traitement d'informations additionnelles par rapport à l'évaluation traditionnelle. Il a été développé un algorithme basé sur le formalisme des multiplicateurs de Lagrange pour résoudre les problèmes de continuité entre deux domaines en énergies traitées par deux théories différentes. De plus, d'autres approches sont présentées, avec notamment l'utilisation de la marginalisation, permettant soit de compléter une évaluation existante en ajoutant des matrices de covariance, soit de considérer une incertitude systématique pour une expérience décrite par deux théories. Le bon fonctionnement des différentes méthodes implémentées est illustré par des exemples, dont celui de la section efficace totale de l' $^{238}\text{U}$ .

Enfin, les dernières parties de la thèse se focalisent sur le retour des expériences intégrales, par méthodes d'assimilation de données intégrales. Cela permet de réduire les incertitudes sur les sections efficaces d'intérêt pour les réacteurs rapides. Ce document se clôt par la présentation de quelques résultats clefs sur les sections efficaces de l' $^{238}\text{U}$  et du  $^{239}\text{Pu}$ , avec la considération d'expériences comme PROFIL et PROFIL-2 dans Phénix ou encore Jezebel.

## Mots clés :

Neutronique, Données nucléaires, Sections efficaces, Incertitudes, Évaluation, Inférence Bayésienne

---

---

## Contribution to Uncertainties Evaluation for Fast Reactors Neutronic Cross Sections

### Abstract :

The thesis has been motivated by a wish to increase the uncertainty knowledge on nuclear data, for safety criteria. It aims the cross sections required by core calculation for sodium fast reactors (SFR), and new tools to evaluate its.

The main objective of this work is to provide new tools in order to create coherent evaluated files, with reliable and mastered uncertainties. To answer those problematic, several methods have been implemented within the CONRAD code, which is developed at CEA of Cadarache.

After a summary of all the elements required to understand the evaluation world, stochastic methods are presented in order to solve the Bayesian inference. They give the evaluator more information about probability density and they also can be used as validation tools. The algorithms have been successfully tested, despite long calculation time.

Then, microscopic constraints have been implemented in CONRAD. They are defined as new information that should be taken into account during the evaluation process. An algorithm has been developed in order to solve, for example, continuity issues between two energy domains, with the Lagrange multiplier formalism. Another method is given by using a marginalization procedure, in order to either complete an existing evaluation with new covariance or add systematic uncertainty on an experiment described by two theories. The algorithms are well performed along examples, such the  $^{238}\text{U}$  total cross section.

The last parts focus on the integral data feedback, using methods of integral data assimilation to reduce the uncertainties on cross sections. This work ends with uncertainty reduction on key nuclear reactions, such the capture and fission cross sections of  $^{238}\text{U}$  and  $^{239}\text{Pu}$ , thanks to PROFIL and PROFIL-2 experiments in Phénix and the Jezebel benchmark.

### Keywords :

Neutronic, Nuclear data, Cross sections, Uncertainties, Evaluation, Bayesian Inference

---

---

## Remerciements :

Dans un premier temps, je souhaite remercier M. Frédéric Varaine qui m'a permis de réaliser cette thèse au Service de Physique des Réacteurs et du Cycle dans un environnement propice au travail de thèse. Je souhaite remercier également Cyrille De Saint Jean en tant que chef de laboratoire d'avoir accepté de me prendre au Laboratoire d'Étude de Physique. Merci à toi d'avoir encadré ces travaux de thèse et d'avoir partagé tes connaissances et compétences sur le sujet. Mes sincères remerciements à Elsa qui a suivi ma thèse de loin et de près lors des moments fatidiques. Merci pour ton soutien dans mes différents projets. Merci également au membre du jury et aux rapporteurs pour leurs retours sur ce manuscrit.

Je souhaite remercier les anciens thésards pour les multiples soirées, événements qu'on a pu vivre ensemble. Une pensée donc pour Nicolas pour les randonnées et treks au fin fond des Royaume-Unis (moulgaï!), David R. pour ton engouement pour les sports outdoors (jongle compris), Simon, Florence l'aventurière du rail. Un merci à Li, ma collègue doctorante pendant une année! Merci pour la dégustation de thé.

Je souhaite remercier l'ensemble des stagiaires de passage au laboratoire : Axel C., Charlotte et Simon les québécois; Axel R., Pierre, Paul et Tristan d'avoir voulu partager une ambiance folle au sous-sol; Hugo l'aventurier mauricien. Remerciement particulier à Tic-Tac (oui oui Valentin) d'avoir follement accepté d'être mon stagiaire.

Un merci aux doctorants du même millésime pour les moments que l'on a passé ensemble. Merci aux différents coloc' et pièces rapportées : Aaaaxel, Cyrille, Pierre, Guillaume, Marion et Léonie. Nous n'avons pas tous mené le même combat, mais je n'oublierais pas ces trois années Saint Paulienne. Je souhaite également remercier les personnes avec lesquelles j'ai pu partager de nombreux moments culturelles ou sportifs, notamment Jorge pour les nombreuses parois que l'on a gravi, Julien mon précédent coéquipier qui préfère maintenant danser sur une surface plane plutôt qu'à la verticale :). Un merci à l'équipe de la médiathèque 2, où les relations humaines sont prépondérantes. Un coucou à mes collègues de la ludothèque. Un grand merci à Adrien qui a pour défi de jongler sur une highline en monocycle et avec un parachute de secours sur le dos;). Merci à Romain Le Tellier et Pascal pour les treks et randonnées. Encore un merci à Pascal de m'avoir supporté pendant un an dans son bureau. Un merci pour les sorties en vélo ou sur le terrain de foot version console à Cyrille. Merci à Maxence alias dieu 2 (et oui après mon départ tu pourras passer dieu 1) pour les indénombrables moments passés ensemble. Je me souviendrais toujours de ce trek calamiteux que nous avons fait ensemble. A croire que les hauteurs sont contre nous ... Merci à Shika, pour les voyages dans le grand nord.

Je souhaite remercier les personnes du LEDC avec qui j'ai partagé beaucoup de moment

(dont un stage de 6 mois). Merci à votre bonne humeur ! Un remerciement en particulier à mon ancienne collègue Danièle. Je souhaite également remercier les personnes du LECy pour les différentes parties de tennis. Merci à Vanessa qui a su me donner le goût pour la thèse. Merci également à Julien, Jean-Marc et les Thomas du LPN pour les différents échanges que nous avons pu avoir.

Merci à l'ensemble des « permanents » du LEPH :

- David pour ta bonne humeur et l'attraction la plus palpitante en escalade ;
- Pierre pour les échanges que nous avons pu avoir autour de nos activités communes ;
- Jean pour tes précieux conseils et l'héritage PROFIL que tu m'as laissé ;
- Jean-François notre grand cycliste que je n'ai jamais pu suivre bien longtemps ;
- Gérald pour ta bonne humeur et tes idées ! Et bravo pour la slackline ;
- Frédéric le photographe aguerri ;
- Jean-Marc pour les différentes interactions et ton soutien pour le stage de Valentin ;
- Bénédicte pour les différentes conversations amicales ;
- Alexandra pour ton implication au LEPH. J'espère que tu auras l'occasion de réaliser d'autres treks passionnants !
- les deux fragments de fission Olivier et Olivier. Un grand merci à vous pour le partage de vos connaissances et de l'intérêt que vous m'avez porté sur les problématiques PF ;
- Vincent pour ta bonne humeur et ton aide sur INCA via Valentin. Je n'oublierai pas notre splendide victoire en double ' ;
- Gilles mon encadrant officieux favori. Bon courage en tant que directeur de thèse !
- Yannick pour ta grande sympathie et ton aide. Par contre attention au foot !
- Olivier B. pour rafraichir les couloirs dans ces hivers terribles.

Je souhaite remercier mes amis qui ont su être à l'écoute dans les moments difficiles et avec qui j'ai partagé bien plus qu'un simple lieu de travail :

- David alias Roger mais en moins fort ! N'hésite pas à m'appeler quand il prendra sa retraite, je te soutiendrai moralement :p
- Nans pour être toi tout simplement :) Tu es extraordinaire avec une répartie sans faille ! Je pourrais écrire un roman de remerciement, mais la thèse suffira pour le moment !
- A la plus belle des poires...

Enfin, je souhaite remercier ma famille d'avoir su me laisser partir à l'aventure humaine, sportive et intellectuelle que sont la vie que j'ai choisi durant ces 6 dernières années. Merci à mes deux neveux et ma nièce pour les moments (non-)paisibles passés avec vous (hé hé). On ne peut pas dire que l'on s'ennuie avec vous ! Merci à David pour le temps que l'on a pu passer ensemble, notamment les guerres contre de terribles créatures maléfiques (oui ça remonte un peu). Enfin, je souhaite remercier Claire pour les moments que l'on a pu partager ensemble. Merci d'avoir su me soutenir dans la dernière ligne droite.

---

# Table des matières

<b>Introduction générale</b>	<b>1</b>
<b>1 Évaluation des données nucléaires</b>	<b>5</b>
1.1 Principes de l'évaluation des données nucléaires . . . . .	6
1.1.1 Concept général de l'évaluation . . . . .	6
1.1.2 L'inférence Bayésienne . . . . .	7
1.2 Éléments théoriques de physique nucléaire . . . . .	8
1.2.1 Les interactions neutron-noyau . . . . .	10
1.2.2 Le domaine des résonances résolues (RRR) . . . . .	13
1.2.3 Le domaine des résonances non-résolues (URR) . . . . .	14
1.2.4 Le domaine du continuum . . . . .	15
1.3 Les expériences microscopiques . . . . .	18
1.3.1 Technique du temps de vol . . . . .	18
1.3.2 Mesures des différentes sections . . . . .	19
1.3.3 Gestion des incertitudes . . . . .	20
1.3.4 Exemple : mesure de transmission pour l' $^{238}\text{U}$ . . . . .	21
1.4 Les expériences intégrales . . . . .	23
1.4.1 Benchmark criticité . . . . .	23
1.4.2 Expériences d'irradiation et d'activation . . . . .	25
1.4.3 Indices de spectre et mesure par chambre à fission . . . . .	26
1.4.4 Oscillation d'échantillon . . . . .	27
1.4.5 Gestion des incertitudes . . . . .	27
1.4.6 Exemple : Jezebel ( $^{239}\text{Pu}$ ) . . . . .	29
1.5 Le code d'évaluation CONRAD . . . . .	31
1.6 Les bases de données . . . . .	33
1.6.1 Un format universel : ENDF . . . . .	34
1.6.2 Les bibliothèques de données nucléaires . . . . .	35
1.7 Synthèse . . . . .	37
<b>2 Méthodes de résolution de l'inférence Bayésienne</b>	<b>39</b>
2.1 Principes généraux de l'inférence Bayésienne . . . . .	40
2.2 Résolution analytique . . . . .	41
2.3 Résolution stochastique . . . . .	43
2.3.1 Méthode Classique . . . . .	43
2.3.2 Méthode avec Importance . . . . .	47



2.4	Exemples et cas de validation . . . . .	48
2.4.1	Cas didactique n°1 : URR $^{238}\text{U}$ . . . . .	48
2.4.2	Cas didactique n°2 : RRR $^{155}\text{Gd}$ . . . . .	56
2.5	Traitement des incertitudes systématiques . . . . .	59
2.5.1	Méthode Analytique . . . . .	59
2.5.2	Méthodes stochastiques . . . . .	60
2.5.3	Exemple de l' $^{238}\text{U}$ . . . . .	65
2.6	Synthèse . . . . .	68
<b>3</b>	<b>Méthodes d'ajustement sous contraintes microscopiques</b>	<b>71</b>
3.1	Évaluation traditionnelle : utilisation des expériences microscopiques . . . . .	74
3.1.1	Les données de base . . . . .	74
3.1.2	Utilisation des expériences microscopiques . . . . .	74
3.2	Évaluation des incertitudes en utilisant des fichiers évalués . . . . .	75
3.2.1	Construction rétroactif de l' <i>a priori</i> à partir d'une évaluation . . . . .	75
3.2.2	Application au $^{239}\text{Pu}$ . . . . .	76
3.3	Utilisation de plusieurs théories et des incertitudes systématiques . . . . .	82
3.3.1	Principe . . . . .	82
3.3.2	Exemple sur le $^{23}\text{Na}$ . . . . .	82
3.3.3	Exemple sur l' $^{238}\text{U}$ . . . . .	85
3.4	Formalisme des multiplicateurs de Lagrange . . . . .	89
3.4.1	Formalisme . . . . .	89
3.4.2	Continuité de la section efficace . . . . .	92
3.5	Synthèse . . . . .	97
<b>4</b>	<b>Assimilation de Données Intégrales</b>	<b>101</b>
4.1	Amélioration des évaluations en utilisant les expériences intégrales . . . . .	101
4.1.1	Assimilation de Données Intégrales sur les sections efficaces multigroupes	104
4.1.2	Assimilation de Données Intégrales sur les paramètres de modèles . . . . .	105
4.1.3	Outils de neutronique pour l'assimilation de données intégrales . . . . .	107
4.1.4	Outils de traitement pour l'assimilation de données intégrales . . . . .	110
4.2	Application au $^{239}\text{Pu}$ . . . . .	111
4.2.1	Description du problème et schémas mis en œuvre . . . . .	111
4.2.2	Retours sur les paramètres de modèle en utilisant Jezebel . . . . .	113
4.2.3	Retours multigroupes en utilisant Jezebel . . . . .	114
4.2.4	Résultats et analyses . . . . .	116
4.3	Synthèse . . . . .	120
<b>5</b>	<b>Utilisation des expériences intégrales</b>	<b>123</b>

5.1	Interprétation des expériences PROFIL et PROFIL-2 . . . . .	123
5.1.1	Les programmes PROFIL . . . . .	124
5.1.2	Méthode de propagation des incertitudes . . . . .	130
5.1.3	Les données nucléaires de l' $^{235}\text{U}$ et de l' $^{238}\text{U}$ . . . . .	133
5.1.4	Résultats et discussion pour PROFIL-2A . . . . .	139
5.1.5	Bilan et résultats finaux . . . . .	142
5.2	Utilisation d'expériences intégrales pour l' $^{238}\text{U}$ . . . . .	143
5.2.1	Description de l'expérience réalisée dans MASURCA . . . . .	144
5.2.2	Matrice de covariance <i>a priori</i> . . . . .	145
5.2.3	Résultats <i>a posteriori</i> et discussion . . . . .	145
5.3	Utilisation des résultats PROFIL et Jezebel pour le $^{239}\text{Pu}$ . . . . .	148
5.4	Synthèse . . . . .	154
<b>Conclusions générales &amp; Perspectives</b>		<b>157</b>
<b>A Contexte historique des données nucléaires</b>		<b>161</b>
A.1	D'Henry Becquerel à Ernest Rutherford . . . . .	162
A.2	De la découverte du neutron à la première réaction en chaîne . . . . .	165
<b>B Éléments de neutronique</b>		<b>167</b>
B.1	Le transport spatial . . . . .	168
B.2	Les disparitions (absorptions et diffusions) . . . . .	168
B.3	La source de diffusion . . . . .	168
B.4	La source de fission . . . . .	169
B.5	Les autres sources . . . . .	169
B.6	Formulation de l'équation de transport . . . . .	170
<b>C Résolution de l'inférence Bayésienne - algorithme de Metropolis</b>		<b>171</b>
C.1	Principe . . . . .	171
C.2	Résultats . . . . .	173
<b>D Outils de probabilité</b>		<b>177</b>
D.1	Variable aléatoire unidimensionnelle . . . . .	177
D.2	Variable aléatoire multivariée . . . . .	178
<b>E Propagation des incertitudes</b>		<b>179</b>
E.1	Développement limité d'une fonction $C(\vec{x})$ . . . . .	179
E.2	Calcul de l'espérance de $C(\vec{x})$ . . . . .	180
E.3	Calcul de la covariance entre $C_k(\vec{x})$ et $C_l(\vec{x})$ . . . . .	180
E.4	Calcul de la variance entre de $C(\vec{x})$ . . . . .	181

<b>F Rendements mesurés pour l'<sup>235</sup>U dans PROFIL et PROFIL-2</b>	<b>183</b>
F.1 Importance des rendements de fission . . . . .	184
F.2 Évaluation des rendements des néodymes de fission . . . . .	185
F.3 Résultats de l'interprétation des expériences PROFIL et PROFIL-2 . . . . .	186
<b>Bibliographie</b>	<b>189</b>

# Liste des Tableaux

1.1	Principales réactions neutroniques . . . . .	9
1.2	Description non-exhaustive des sections de la <i>file 3</i> . . . . .	35
2.1	Configuration de spins de l' $^{238}\text{U}$ pour des résonances d'onde <i>s</i> et <i>p</i> . . . . .	49
2.2	Paramètres initiaux de l'URR choisis pour le cas didactique de l' $^{238}\text{U}$ . . . . .	49
2.3	Comparaison entre les différentes méthodes implémentées dans CONRAD pour la section efficace totale de l' $^{238}\text{U}$ . . . . .	51
2.4	Paramètres initiaux choisis (RRR) pour le cas didactique du $^{155}\text{Gd}$ . . . . .	57
2.5	Comparaison entre les différentes méthodes implémentées dans CONRAD pour la section efficace de capture du $^{155}\text{Gd}$ . . . . .	57
2.6	Comparaison entre les différentes méthodes implémentées dans CONRAD, avec une normalisation (incertitude systématique de 1%) sur la section efficace totale de l' $^{238}\text{U}$ . Le sous-cas GLS représente la résolution analytique de l'inférence Bayésienne, sans prise en compte de l'incertitude systématique . . . . .	65
3.1	Paramètres obtenus pour les sections efficaces totales et de fission, après ajustement du $^{239}\text{Pu}$ en utilisant l'évaluation JEFF-3.2 comme expérience microscopique. FissBarr(94,239,2) correspond, par exemple, à la hauteur de la seconde barrière de fission du $^{239}\text{Pu}$ . T(94,240,0) correspond, par exemple, à la CTM ( <b>C</b> onstant <b>T</b> emperature <b>M</b> odel) de l'état fondamental du $^{240}\text{Pu}$ . $a_{S_n}(94,238)$ correspond à l'inverse de l'espacement moyen à l'énergie de séparation $S_n$ . . . . .	78
3.2	Paramètres du sodium utilisés dans l'analyse . . . . .	83
3.3	Corrélation créée entre les différents paramètres lorsqu'une incertitude systématique de 3% est appliquée . . . . .	85
3.4	Paramètres de l'URR (matrice R moyenne) et du modèle optique pour la section efficace totale de l' $^{238}\text{U}$ . . . . .	86
3.5	Corrélation créée entre les différents paramètres lorsqu'une incertitude systématique de 1% est appliquée sur une expérience avec deux théories (URR et modèle optique) . . . . .	86
3.6	Paramètres de l'URR (matrice R moyenne) pour la section efficace totale de l' $^{238}\text{U}$ utilisés dans ce cas didactique . . . . .	93
3.7	Paramètres de l'URR (matrice R moyenne) et du modèle optique pour la section efficace totale de l' $^{238}\text{U}$ utilisés dans ce cas réaliste . . . . .	95

3.8	Corrélation créée entre les différents paramètres lorsque l'on impose la continuité de la section entre deux théories (URR et modèle optique) . . . . .	95
4.1	Contribution du $^{239}\text{Pu}$ à l'incertitude d'un $k_{eff}$ représentatif d'un concept de réacteur à neutrons rapides. Le <i>prior</i> est pris dans la base COMAC-V0.1. La dernière colonne est obtenue suite à l'assimilation de données intégrales de Jezebel sur la section efficace de fission seulement. L'incertitude totale prend en compte l'ensemble des réactions et isotopes présent dans la base COMAC [66]	116
5.1	Tendances intégrales en terme de $\langle C/E \rangle$ pour les sections efficaces de capture du $^{235}\text{U}$ , $^{238}\text{U}$ et $^{239}\text{Pu}$ , obtenues lors de l'interprétation des expériences PROFIL et PROFIL-2 avec la bibliothèque de données nucléaires évaluées JEFF-3.1 . . . . .	124
5.2	Nombre d'échantillons contenant les actinides chargés dans les aiguilles PROFIL et PROFIL-2 . . . . .	128
5.3	Nombre d'échantillons contenant les produits de fission chargés dans les aiguilles PROFIL et PROFIL- . . . . .	128
5.4	Coefficients d'ajustement et leurs incertitudes <i>a priori</i> pour les aiguilles PROFIL et PROFIL-2 ( $p = 1,2,3$ ) . . . . .	132
5.5	Section efficace de fission multigroupe (en barns) de l' $^{235}\text{U}$ des bibliothèques JEFF-3.1.1, JEFF-3.2 et ENDF/B-VII.1. La section efficace de l'AIEA est considérée comme un standard pour les énergies entre 0,15 MeV et 200 MeV .	135
5.6	Sensibilités obtenues à l'aide des outils de perturbation disponibles dans le code ERANOS des variations de ratio $^{235}\text{U}+^{236}\text{U}/^{238}\text{U}$ aux sections efficaces de capture et de fission de l' $^{235}\text{U}$ , l' $^{238}\text{U}$ et l' $^{236}\text{U}$ . . . . .	140
5.7	Valeurs et incertitudes obtenues sur les coefficients de recalage calculés avec JEFF-3.1.1 lorsque les matrices COMAC-V0 et JENDL-7 sont utilisées pour l'analyse de PROFIL-2A. . . . .	140
5.8	Tendances intégrales en terme de $\langle C/E \rangle$ pour les sections efficaces de capture de l' $^{235}\text{U}$ , l' $^{238}\text{U}$ et du $^{239}\text{Pu}$ obtenues suite à l'interprétation de l'expérience PROFIL-2A. La bibliothèque de données évaluées JEFF-3.1.1 en association avec la base de covariance COMAC-V0 sont utilisées. . . . .	142
5.9	C/E obtenus pour les expériences PROFIL, PROFIL-2 et pour les indices de spectre mesurés dans la configuration ZONA2A de MASURCA . . . . .	147
5.10	Sensibilités du $k_{eff}$ (Jezebel) aux principales sections efficaces multigroupes du $^{239}\text{Pu}$ . Ces sensibilités ont été utilisées lors de l'assimilation de l'expérience Jezebel. . . . .	150

---

C.1	Comparaison entre les différentes méthodes implémentées dans CONRAD pour la section efficace totale de l' $^{238}\text{U}$ . . . . .	175
F.1	Différentes évaluations (ENDF/B-VII, JEFF-3.1.1 et JENDL-4.0) pour les rendements des néodymes de l' $^{235}\text{U}$ . . . . .	185
F.2	Mesures disponibles des ratios de concentration des néodymes sur la concentration d' $^{235}\text{U}$ . . . . .	187
F.3	Valeurs expérimentales des rendements cumulés effectifs des néodymes pour la fission de l' $^{235}\text{U}$ . . . . .	187



# Liste des Figures

1.1	Principe général de l'évaluation des données nucléaires . . . . .	7
1.2	Les différentes étapes microscopiques de la fission nucléaire [4]. 90 % de l'énergie produites par la fission se traduit dans l'énergie cinétique des fragments de fission $E_{k,f}$ . . . . .	9
1.3	Schéma décrivant le processus de formation du noyau composé . . . . .	11
1.4	Schéma de niveau d'un noyau excité et voies de désexcitation par diffusion élastique (n,n), diffusion inélastique (n,n') et capture radiative (n, $\gamma$ ), avec $S_n$ l'énergie du seuil de séparation du dernier neutron . . . . .	12
1.5	Schéma décrivant les différents mécanismes de réactions nucléaires à haute énergie . . . . .	16
1.6	Comparaison entre les données expérimentales issues de l'expérience d'Uttley (en bleu) et de la section évaluée de JEFF-3.1.1 (en rouge) pour la section efficace totale de l' $^{238}\text{U}$ entre 6,50 keV et 950 keV . . . . .	22
1.7	Schéma de principe d'une chambre à fission . . . . .	26
1.8	Photo de l'assemblage Jezebel démonté . . . . .	30
1.9	Schéma descriptif de CONRAD . . . . .	32
1.10	Description de la partie analyse de CONRAD . . . . .	33
2.1	Schéma de principe de l'algorithme BMC (Classique) . . . . .	47
2.2	Matrice de corrélation de la section efficace totale de l' $^{238}\text{U}$ <i>a priori</i> . . . . .	52
2.3	Matrice de corrélation de la section efficace totale de l' $^{238}\text{U}$ <i>a posteriori</i> . . . . .	52
2.4	Section efficace totale de l' $^{238}\text{U}$ obtenue avant et après ajustement des paramètres $S_0$ et $S_1$ . . . . .	53
2.5	Distribution de $S_0$ obtenue par la méthode BMC Classique . . . . .	53
2.6	Distribution de $S_1$ obtenue par la méthode BMC Classique . . . . .	54
2.7	Convergences de la valeur des paramètres $S_0$ , $S_1$ et de leur corrélation en fonction du nombre d'histoires simulées . . . . .	55
2.8	Convergences de la valeur du paramètre $\Gamma_\gamma(1^-)$ en fonction du nombre d'histoires simulés . . . . .	57
2.9	Convergences de la valeur du paramètre $\Gamma_\gamma(2^-)$ en fonction du nombre d'histoires simulés . . . . .	58
2.10	Schéma de principe de l'algorithme BMC (Classique) en prenant en considération les paramètres marginalisés . . . . .	64
2.11	Convergences de la valeur du paramètre $S_0$ en fonction du nombre d'histoires simulés . . . . .	66



2.12	Convergences du paramètre $S_1$ en fonction du nombre d'histoires simulés . . .	66
2.13	Matrice de corrélation de la section efficace totale de l' $^{238}\text{U}$ <i>a priori</i> . . . . .	67
2.14	Matrice de corrélation de la section efficace totale de l' $^{238}\text{U}$ <i>a posteriori</i> . . .	67
3.1	Discontinuité de la section efficace totale du $^{239}\text{Pu}$ dans la bibliothèque JEFF-3.1.1 . . . . .	73
3.2	Matrice de variance-covariance de la section efficace totale du $^{238}\text{U}$ en trois blocs diagonaux sans corrélation dans la bibliothèque JENDL-3.3 . . . . .	73
3.3	La figure du dessus montre l'ajustement réalisé avec le code CONRAD, sur la section efficace totale du $^{239}\text{Pu}$ , avec comme expérience l'évaluation JEFF-3.2. La figure de dessous représente les écarts relatifs entre le prior et JEFF-3.2 (en vert) et le posterior et JEFF-3.2 (en rouge) . . . . .	77
3.4	Corrélations des paramètres utilisés comme informations initiales pour l'assimilation de données intégrales. Elles sont le résultat des ajustements sur l'évaluation JEFF-3.2 et de la considération d'incertitudes systématiques. . .	79
3.5	Matrices de corrélations multigroupes (à 33 groupes en énergie), obtenues à partir d'une reproduction de l'évaluation JEFF-3.2 et de l'application d'incertitudes systématiques, pour les principales sections efficaces du $^{239}\text{Pu}$ . . . . .	80
3.6	Matrices de corrélations multigroupes croisées (à 33 groupes en énergie), obtenues à partir d'une reproduction de l'évaluation JEFF-3.2 et de l'application d'incertitudes systématiques, pour les principales sections efficaces du $^{239}\text{Pu}$ .	81
3.7	Section efficace inélastique du sodium, ajusté dans le domaine des résonances résolues et du continuum par CONRAD, sur les expériences de Rouki [70] . .	83
3.8	Conséquence sur la section efficace inélastique du sodium de différentes incertitudes systématiques de la normalisation (de 0,5 à 3%) . . . . .	84
3.9	Résultats obtenus avec/sans prise en compte d'une incertitude systématique expérimentale de 1% (section efficace totale de l' $^{238}\text{U}$ avec un modèle d'URR pour les énergies inférieures à 105 keV et un modèle optique pour les énergies supérieures) . . . . .	87
3.10	Matrices de corrélation obtenues avant (figure de gauche) et après (figure de droite) ajustement lorsque l'on prend en compte ou non une incertitude systématique expérimentale de 1% (section efficace totale de l' $^{238}\text{U}$ avec un modèle d'URR pour les énergies inférieures à 105 keV et un modèle optique pour les énergies supérieures) . . . . .	87
3.11	Incertainces obtenues avec/sans prise en compte d'une incertitude systématique expérimentale de 1% (section efficace totale de l' $^{238}\text{U}$ avec un modèle d'URR pour les énergies inférieures à 105 keV et un modèle optique pour les énergies supérieures) . . . . .	88

3.12	Résultats obtenus avec/sans prise en compte de la contrainte de continuité sur la section efficace totale de l' $^{238}\text{U}$ (URR pour les énergies inférieures à 105 keV et URR pour les énergies supérieures) . . . . .	94
3.13	Matrices de corrélation obtenues avec/sans prise en compte de la contrainte de la continuité contrainte de continuité sur la section efficace totale de l' $^{238}\text{U}$ (URR pour les énergies inférieures à 105 keV et URR pour les énergies supérieures) . . . . .	94
3.14	Résultats obtenus avec/sans prise en compte de la contrainte de continuité sur la section efficace totale de l' $^{238}\text{U}$ (URR pour les énergies inférieures à 105 keV et modèle optique pour les énergies supérieures) . . . . .	96
3.15	Matrices de corrélation obtenues avec/sans prise en compte de la contrainte de la continuité sur la section efficace totale de l' $^{238}\text{U}$ (URR pour les énergies inférieures à 105 keV et modèle optique pour les énergies supérieures) . . . . .	96
3.16	Méthode générale d'une évaluation idéalisée . . . . .	98
4.1	Méthode générale d'assimilation de données intégrales utilisée dans CONRAD. Le critère de convergence $\varepsilon_{user}$ est donné par l'utilisateur. Les paramètres $\vec{x}$ peuvent soit des sections efficaces multigroupes, soit des paramètres de modèles	103
4.2	Méthode d'assimilation de données intégrales utilisée dans CONRAD sur les sections efficaces multigroupes. $\varepsilon_{user}$ est un critère de convergence choisi par l'évaluateur . . . . .	104
4.3	Méthode d'assimilation de données intégrales utilisée dans CONRAD directement sur les paramètres de modèles. Pour n paramètres ajustés, 2n+1 calculs neutroniques doivent être réalisés et donc 2n+1 pré-traitements. . . . .	106
4.4	Propagation des incertitudes des paramètres de modèles sur les sections efficaces multigroupes . . . . .	107
4.5	Schéma de principe des codes stochastiques . . . . .	109
4.6	Profil des sensibilités du $k_{eff}$ aux sections efficaces de fission multigroupes du $^{239}\text{Pu}$ . . . . .	112
4.7	Schémas utilisés pour comparer les deux méthodes d'assimilation de données intégrales (sur les paramètres et sur les sections multigroupes) pour le $^{239}\text{Pu}$ en utilisant Jezebel . . . . .	112
4.8	Méthode d'assimilation de données intégrales sur les paramètres du modèle optique du $^{239}\text{Pu}$ en utilisant Jezebel . . . . .	113
4.9	Méthode d'assimilation de données intégrales sur les sections efficaces du $^{239}\text{Pu}$ en utilisant Jezebel . . . . .	115
4.10	Incertitudes sur la section efficace de fission du $^{239}\text{Pu}$ <i>a priori</i> et <i>a posteriori</i> , obtenues avec les deux schémas de calcul . . . . .	117

4.11	Matrices de corrélation de la section efficace de fission du $^{239}\text{Pu}$ <i>a priori</i> et <i>a posteriori</i> , obtenues avec les deux schémas de calcul . . . . .	118
4.12	Méthode d'assimilation de données intégrales sur les paramètres du modèle optique du $^{239}\text{Pu}$ en utilisant Jezebel . . . . .	119
5.1	Sections efficaces de l' $^{238}\text{U}$ , l' $^{235}\text{U}$ et du $^{239}\text{Pu}$ disponibles dans la bibliothèque JEFF-3.1.1. Elles sont comparés avec le spectre neutronique représentatif des expériences PROFIL. . . . .	125
5.2	Coupe radiale du réacteur Phénix et localisation des assemblages contenant les aiguilles expérimentales PROFIL et PROFIL-2 . . . . .	126
5.3	Position des aiguilles expérimentales PROFIL (figure de gauche) et PROFIL-2 (figure de droite) dans l'assemblage combustible . . . . .	127
5.4	Géométrie simplifiée des échantillons et de leurs conteneurs . . . . .	127
5.5	Schéma de la procédure d'ajustement utilisé pour déterminer les valeurs des coefficients de recalage $\vec{x} = \{z_p, \varphi_p\}$ et leur matrice de covariance $M_x$ . Les dérivées $\Delta c/\Delta x$ sont calculées par perturbation directe. Le nombre d'itérations $n$ dépend du critère de convergence choisi par l'utilisateur $\varepsilon_{\text{user}}$ . . . . .	131
5.6	Section efficace de fission de l' $^{235}\text{U}$ recommandée par l'AIEA, comparée à celle de JEFF-3.1.1. . . . .	134
5.7	Section efficace de fission de l' $^{235}\text{U}$ (à gauche) et de capture (à droite), incertitudes relatives et matrices de corrélation prise dans COMAC-V0 (en haut) et celles reconstruites avec JENDL-4 (en bas) avec la structure 33 groupes d'ECCO. . . . .	137
5.8	Section efficace de fission de l' $^{238}\text{U}$ (à gauche) et de capture (à droite), incertitudes relatives et matrices de corrélation prise dans COMAC-V0 (en haut) et celles reconstruites avec JENDL-4 (en bas) avec la structure 33 groupes d'ECCO. . . . .	138
5.9	La figure du haut compare les incertitudes de la section efficace de capture de l' $^{235}\text{U}$ de COMAC-V0 et de JENDL-4, calculées sur la structure à 33 groupes d'ECCO. La figure de dessous montre le flux PROFIL qui indique les énergies de neutron d'intérêt. . . . .	139
5.10	$\langle C/E \rangle$ représentatifs des sections efficaces de capture obtenus suite à l'interprétation des expériences PROFIL et PROFIL-2 avec JEFF-3.1.1. Les bandeaux représentent les incertitudes dues au recalage de la fluence à $1\sigma$ et $2\sigma$ .	143
5.11	Sections efficaces de capture et de fission de l' $^{238}\text{U}$ et spectre d'un réacteur à neutrons rapides normalisé en léthargie, en fonction de l'énergie . . . . .	144
5.12	Corrélations <i>a priori</i> pour les sections efficaces de fission (à gauche) et de capture à (droite) de l' $^{238}\text{U}$ au-dessus d'1 keV . . . . .	145

5.13	Incertitudes relatives, avant et après ajustement, des sections efficaces de capture (en haut) et de fission (en bas) pour l' $^{238}\text{U}$ . . . . .	146
5.14	Corrélations <i>a posteriori</i> pour les sections efficaces de fission (à gauche) et de capture à (droite) de l' $^{238}\text{U}$ au-dessus d'1 keV . . . . .	147
5.15	Incertitudes multigroupes (à 33 groupes en énergie), obtenues à partir de l'assimilation des expériences PROFIL et Jezebel, pour les principales sections efficaces du $^{239}\text{Pu}$ . Les groupes rapides correspondent aux premiers groupes .	151
5.16	Matrices de corrélations multigroupes (à 33 groupes en énergie), obtenues à partir de l'assimilation des expériences PROFIL et Jezebel, pour les principales sections efficaces du $^{239}\text{Pu}$ . . . . .	152
5.17	Matrices des corrélations croisées multigroupes (à 33 groupes en énergie), obtenues à partir de l'assimilation des expériences PROFIL et Jezebel, entre les principales sections efficaces du $^{239}\text{Pu}$ . . . . .	153
A.1	Les différentes échelles de l'énergie nucléaire . . . . .	162
A.2	Schéma expérimental inspiré des travaux de Rutherford [95]). L'électromètre mesure des variations de charge électrique entre les deux plaques, interprétées comme la radiation naturelle . . . . .	162
A.3	Schéma expérimental simplifié d'Ernest Rutherford afin de mettre en avant l'interaction rayonnement matière entre des particules $\alpha$ et de l'or . . . . .	164
A.4	Représentation microscopique de l'interaction de diffusion entre une particule incidente et un noyau cible . . . . .	164
A.5	Le schéma expérimental, mis en place par James Chadwick, a permis la découverte du neutron . . . . .	166
C.1	Schéma de principe de l'algorithme BMC (Metropolis) avec N le nombre d'histoires simulées . . . . .	172
C.2	Distribution de $S_0$ obtenue par la méthode BMC Metropolis en rouge. En vert est tracée la densité de probabilité non-normalisée, déduite de l'ajustement analytique de type GLS . . . . .	174
C.3	Distribution de $S_1$ obtenue par la méthode BMC Metropolis en rouge. En vert est tracée la densité de probabilité non-normalisée, déduite de l'ajustement analytique de type GLS . . . . .	174
F.1	Organisation des données dans le format ENDF . . . . .	186



# Introduction générale

La consommation mondiale en énergie primaire repose à 80 % sur l'utilisation des combustibles fossiles : le charbon, le pétrole et le gaz. Mais les réserves sont limitées, et la lutte contre le réchauffement climatique passe par des énergies propres à basse émission de carbone. Couplé à ces deux problématiques, on observe une demande d'énergie de plus en plus importante dans le monde, notamment dans les pays émergents ou en pleine croissance économique, comme la Chine ou l'Inde. Le choix du nucléaire a été fait, dans les années 50 en France, pour satisfaire, dans un premier temps, la demande forte en électricité, mais également pour des raisons d'indépendance énergétique. Aujourd'hui, plus de 75 % de son électricité est d'origine nucléaire, produite par 58 Réacteurs à Eau Pressurisée (REP). L'engouement pour l'énergie nucléaire est aujourd'hui l'objet de multiples controverses. En effet, malgré la faible émission de gaz à effet de serre, l'utilisation des combustibles nucléaires induit des déchets nocifs à longue durée de vie, dont la question du devenir n'est pas encore résolue et sujet à polémique. Par ailleurs, les accidents de Three Miles Island en 1979, de Tchernobyl en 1986 et de Fukushima en 2011 ont fait évoluer la perception de l'énergie nucléaire dans les sociétés actuelles. Les trois enjeux majeurs, de nos jours, sont :

- réduire la quantité de déchets produits ;
- accroître la fiabilité et la sûreté ;
- améliorer la compétitivité.

Les pays nucléarisés ont défini des études prospectives de nouveau concept, qui doivent répondre à l'ensemble de ces enjeux, au travers du forum "Génération IV" [1]. Parmi ces concepts, la France a choisi d'étudier, en premier lieu, les Réacteurs à Neutrons Rapides (RNR) à caloporteur sodium. De tels réacteurs ont déjà été construits en France par le passé : Rapsodie en 1957, Phénix en 1974 et Superphénix en 1985. L'intérêt principal de cette filière est l'utilisation des stocks de matière provenant du cycle des REP, permettant alors d'exploiter cette ressource inutilisée pour plusieurs siècles, tout en rendant possible la réduction des déchets radioactifs à vie longue. Les études du prototype Astrid<sup>®</sup> sont principalement pilotées par le CEA, et notamment par les équipes du site de Cadarache. Les études de conceptions menées exigent des résultats de simulation robustes et prédictifs, ainsi qu'une maîtrise des incertitudes associées (compétitivité, fiabilité et sûreté).

Les outils de simulation de physique nucléaire, permettant le dimensionnement et la conception du cœur même d'un réacteur, sont constitués de codes de calcul. Ces derniers utilisent, comme paramètres d'entrée, les données caractéristiques des phénomènes étudiés. Les codes neutroniques résolvant l'équation du transport (*i.e.* équation de Boltzmann) ont besoin principalement des informations relatives aux interactions entre les neutrons et les

noyaux atomiques, présents dans les combustibles et composants des réacteurs. Ces informations, indispensables, sont regroupées sous le nom commun de “données nucléaires” (incluant les réactions induites par photons, neutrons ou particules chargées). L’estimation de ces données nucléaires, et plus particulièrement dans le cadre de cette thèse, les sections efficaces neutroniques, résulte de la synergie entre des modèles théoriques et des expériences. Cette synergie est appelée “évaluation”.

Ce document est dédié à l’évaluation des sections efficaces neutroniques pour les réacteurs à neutrons rapides, ainsi que des matrices de variance-covariance associées. Les objectifs et enjeux sont de quatre types :

- maîtriser les outils d’évaluation et proposer des outils d’analyse, permettant de valider ou compléter ceux traditionnellement utilisés ;
- développer de nouveaux outils d’analyse permettant de rendre plus cohérent le processus d’évaluation ;
- utiliser les expériences intégrales, dans l’objectif de les assimiler pour améliorer les connaissances sur les sections efficaces ;
- obtenir des incertitudes maîtrisées et précises.

Le Chapitre 1 est dédié à la présentation des différents ingrédients intervenant dans l’assimilation de données, nécessaire à l’ensemble de la compréhension du mémoire. L’inférence Bayésienne est présentée et sert de point de départ fondamental aux développements apportés tout au long du manuscrit. Les éléments indispensables permettant de réaliser une évaluation sont d’une part les expériences différentielles et intégrales, et d’autre part les bases de physiques nucléaires et des modèles théoriques associés. Des exemples sont donnés et seront réutilisés pour illustrer les chapitres suivants.

Le Chapitre 2 présente les différentes méthodes utilisées et développées durant la thèse pour la résolution de l’inférence Bayésienne. Notamment, des méthodes dites stochastiques ont été implémentées dans le code CONRAD. Elles permettent soit de compléter l’analyse en donnant des distributions associées à l’ajustement, soit de valider les algorithmes analytiques usuellement utilisés. Des exemples seront présentés afin de démontrer, d’une part la justesse des méthodes Monte-Carlo, et d’autre part leurs limitations.

Le Chapitre 3 montre comment les évaluations sont produites lorsque des expériences dites microscopiques ou différentielles sont utilisées. Une méthode, appelée ajustement sous contrainte, est présentée. Elle a été développée dans ces travaux pour l’évaluation des données nucléaires. Elle permet de pallier des lacunes ou manques de cohérence présentes dans certaines évaluations. Cette approche s’inspire d’une part de l’inférence Bayésienne, et d’autre part du formalisme des multiplicateurs de Lagrange. Elle permet notamment de construire une évaluation complète en prenant en compte la continuité des sections efficaces entre les

différentes théories.

Le Chapitre 4 est dédié à l'assimilation des données intégrales. En effet, longtemps utilisées pour qualifier une évaluation basée sur des expériences microscopiques, les expériences intégrales permettent également de faire un retour sur les données nucléaires, et notamment sur les niveaux des sections efficaces avec une bonne précision. L'utilisation de l'assimilation des données intégrales permet alors de compléter une évaluation et de réduire les incertitudes. Deux méthodes d'assimilation sont présentées et comparées sur un exemple.

Enfin, le Chapitre 5 retranscrit le travail réalisé pendant cette thèse sur les expériences PROFIL et PROFIL-2 sur le réacteur Phénix, ZONA2A sur le réacteur MASURCA et Jezebel. L'exploitation des résultats pour les données nucléaires est décrite. Ces expériences intégrales sont riches en information pour les données nucléaires, car elles sont dédiées à des isotopes et réactions bien précis. Les réductions obtenues permettent d'apporter une confiance plus accrue aux données nucléaires et, *a fortiori*, aux paramètres de sûreté.





# Évaluation des données nucléaires

---

## Sommaire

---

<b>1.1</b>	<b>Principes de l'évaluation des données nucléaires</b>	<b>6</b>
1.1.1	Concept général de l'évaluation	6
1.1.2	L'inférence Bayésienne	7
<b>1.2</b>	<b>Éléments théoriques de physique nucléaire</b>	<b>8</b>
1.2.1	Les interactions neutron-noyau	10
1.2.2	Le domaine des résonances résolues (RRR)	13
1.2.3	Le domaine des résonances non-résolues (URR)	14
1.2.4	Le domaine du continuum	15
<b>1.3</b>	<b>Les expériences microscopiques</b>	<b>18</b>
1.3.1	Technique du temps de vol	18
1.3.2	Mesures des différentes sections	19
1.3.3	Gestion des incertitudes	20
1.3.4	Exemple : mesure de transmission pour l' <sup>238</sup> U	21
<b>1.4</b>	<b>Les expériences intégrales</b>	<b>23</b>
1.4.1	Benchmark criticité	23
1.4.2	Expériences d'irradiation et d'activation	25
1.4.3	Indices de spectre et mesure par chambre à fission	26
1.4.4	Oscillation d'échantillon	27
1.4.5	Gestion des incertitudes	27
1.4.6	Exemple : Jezebel ( <sup>239</sup> Pu)	29
<b>1.5</b>	<b>Le code d'évaluation CONRAD</b>	<b>31</b>
<b>1.6</b>	<b>Les bases de données</b>	<b>33</b>
1.6.1	Un format universel : ENDF	34
1.6.2	Les bibliothèques de données nucléaires	35
<b>1.7</b>	<b>Synthèse</b>	<b>37</b>

---

De nos jours, la “statistique”, en tant que discipline mathématique, est utilisée dans de nombreux domaines (physique, économie, géographie, biologie, psychologie, météorologie...).

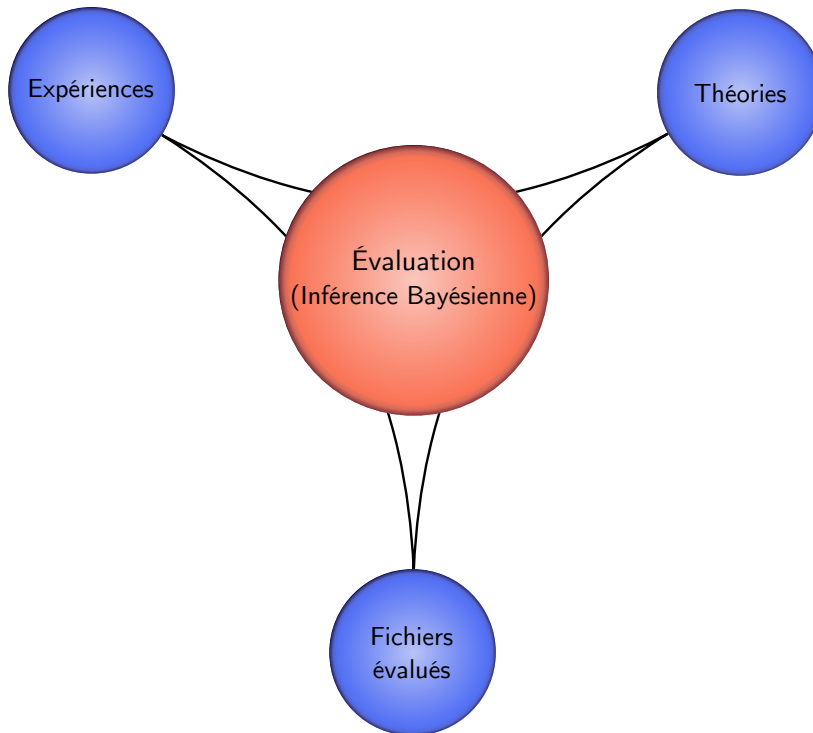
Elle permet à tous les praticiens de bâtir, sur de solides fondations, un pont entre théories et données expérimentales. Les premières méthodes d'ajustement ont vu le jour au début du 19<sup>ème</sup> siècle avec le marquis Pierre-Simon Laplace, Adrien-Marie Legendre et Carl-Friedrich Gauss [2]. Les premiers objectifs en physique étaient de déterminer les valeurs de constantes universelles, comme la vitesse de la lumière, et d'établir leurs incertitudes. Ceci a été rendu possible grâce à un ajustement par les moindres carrés de l'ensemble des données expérimentales disponibles et sensibles à ces constantes fondamentales. Ce premier chapitre décrit les principes généraux de l'évaluation pour les données nucléaires.

## 1.1 Principes de l'évaluation des données nucléaires

Pour réaliser les calculs neutroniques, le neutronicien utilise des données nucléaires regroupées dans des bibliothèques. Elles contiennent, entre autres, les différentes interactions nucléaires qui se produisent au sein du réacteur, comme rappelé en première section de ce chapitre. Notamment, la bonne connaissance des sections efficaces est fondamentale pour calculer des grandeurs physiques (via les codes neutroniques) validées et avec des incertitudes maîtrisées. Une première partie présente le cadre général de l'évaluation des données nucléaires et une deuxième partie présente l'inférence Bayésienne, base des théories d'ajustement.

### 1.1.1 Concept général de l'évaluation

La modélisation des sections efficaces est fondée sur plusieurs modèles théoriques de réactions nucléaires qui dépendent de l'énergie de la particule incidente. Chaque modèle est constitué de paramètres nucléaires (largeur d'une résonance, profondeur du puits de potentiel...). Ces derniers ne sont pas décrits, à ce jour, avec grande précision par des théories de la physique microscopique à cause de la complexité des interactions nucléaires (impossibilité de résoudre avec précision un problème à plus de trois corps). C'est pourquoi ils sont ajustés sur un jeu de mesures, d'observations. Deux types d'observation peuvent être utilisés : les expériences microscopiques et les expériences intégrales. Les premières permettent d'avoir une mesure précise d'une réaction nucléaire en fonction de l'énergie. Les expériences d'intérêt seront décrites dans la Section 1.3. Les expériences intégrales permettent quant à elles d'obtenir des informations précises sur les niveaux des sections efficaces intégrées sous un flux neutronique. La description des expériences intégrales fait l'objet de la Section 1.4. L'évaluation consiste donc à utiliser à la fois les connaissances théoriques, mais aussi les deux types d'expériences microscopiques et intégrales. Elles sont les ingrédients permettant

FIGURE 1.1: *Principe général de l'évaluation des données nucléaires*

d'affiner les connaissances sur les sections efficaces. C'est ce que l'on appelle l'assimilation des données. Celle-ci, dans le cadre de ce document, se base sur un ajustement Bayésien. Elle est implémentée dans le code CONRAD (**CO**de for **N**uclear **R**eaction **A**nalysis and **D**ata Assimilation) développé au sein du LEPH (*Laboratoire d'Études de **P**hysique*) du SPRC (*Service de **P**hysique du **R**éacteur et du **C**ycle*) et est décrite en Section 1.5. La Figure 1.1 montre le principe général de l'évaluation des données nucléaires, associant expériences et théories dont l'objectif est de créer des fichiers évalués présentés dans la Section 1.6.

### 1.1.2 L'inférence Bayésienne

Pour réaliser une assimilation de données, il est nécessaire de regrouper deux types d'information :

- les distributions de probabilité des connaissances *a priori* des paramètres de modèles ;
- les distributions associées aux données expérimentales et aux grandeurs théoriques, représentées par une densité de probabilité multivariée appelée *vraisemblance* (“*likelihood*” en anglais).

L'inférence Bayésienne fait intervenir ces distributions et reste donc une approche probabiliste. L'estimation des paramètres de modèles *a posteriori* s'appuie sur le théorème de Bayes [3] généralisé à des densités de probabilité continues des paramètres de modèles. Elle s'exprime, de façon simplifiée, selon l'expression de l'Équation (1.1). Son expression détaillée et sa résolution font l'objet du Chapitre 2.

$$posterior \propto prior \cdot vraisemblance \quad (1.1)$$

Le concept de l'analyse bayésienne est de partir d'une connaissance *a priori* des paramètres de modèles et de construire la densité *a posteriori* incluant les nouvelles informations apportées par les expériences (représentées par la *vraisemblance*). La mesure favorise et oriente certaines valeurs des paramètres. Une densité de probabilité nouvelle est alors obtenue pour les paramètres de modèles qui donne accès aux moments des distributions (moyennes et covariances).

Au final, l'objectif de l'analyse et des méthodes d'ajustement est de déterminer la distribution *a posteriori* des paramètres.

## 1.2 Éléments théoriques de physique nucléaire

La neutronique est une branche de la physique des réacteurs. Elle a pour objectif de déterminer la densité de population des neutrons. Elle fait intervenir des interactions microscopiques entre des particules incidentes (neutron,  $\gamma$ ...) sur les noyaux atomiques constituant un réacteur. Cette section met en place les éléments théoriques de la physique nucléaire qui vont servir à la compréhension des modèles de sections efficaces. L'aspect théorique est un pilier important de l'évaluation, permettant la prédiction des sections efficaces indispensables aux codes de calcul neutronique.

Différentes réactions impliquant un neutron sont listées, de façon non exhaustive, dans le Tableau 1.1. Elles sont catégorisées en deux familles : les sections efficaces de diffusion ((n,n), (n,n'),(n,2n)...) et les sections efficaces d'absorption ((n, $\gamma$ ),(n,f),(n, $\alpha$ ),(n,p)...). On peut déjà avoir un aperçu rapide de l'effet de chacune d'elles sur la population neutronique dans un réacteur. La fission d'un noyau produit deux fragments de fission qui vont être ralentis dans le combustible et produire l'énergie calorifique. Le processus de fission, décrit sur la Figure 1.2, produit des neutrons prompts et retardés qui vont participer à la réaction en chaîne. Une autre source de neutrons est la réaction (n,2n). En effet, cette réaction à seuil est caractérisée par la capture d'un neutron par le noyau cible, qui va alors émettre deux neutrons pour retrouver un état stable. La réaction (n,n') consiste en la capture d'un

neutron par le noyau puis l'émission d'un autre neutron. Ces apports de neutron est contrasté par les réactions d'absorption, telles que  $(n,\gamma)$ ,  $(n,\alpha)$  et  $(n,p)$ , qui mènent à la capture d'un neutron. Pour avoir une réaction en chaîne auto-entretenu, il est alors nécessaire d'avoir une population de neutrons constante dans le temps. Cela est rendue possible par la balance de toutes ces réactions nucléaires via la composition et l'agencement des combustibles dans un réacteur.

Tableau 1.1: Principales réactions neutroniques

Description de la réaction	Formule	Notation
Diffusion potentielle et résonante élastique	$n + \frac{A}{Z}X \rightarrow n + \frac{A}{Z}X$	$(n,n)$
Diffusion résonante inélastique	$n + \frac{A}{Z}X \rightarrow n' + \frac{A}{Z}X + \gamma$	$(n,n')$
Capture radiative	$n + \frac{A}{Z}X \rightarrow \frac{A+1}{Z}X + \gamma$	$(n,\gamma)$
Capture puis émission d'un proton	$n + \frac{A}{Z}X \rightarrow \frac{A}{Z-1}Y + p$	$(n,p)$
Capture puis émission d'un alpha	$n + \frac{A}{Z}X \rightarrow \frac{A-3}{Z-2}Y + \alpha$	$(n,\alpha)$
Capture puis émission de deux neutrons	$n + \frac{A}{Z}X \rightarrow n_1 + n_2 + \frac{A-1}{Z}X$	$(n,2n)$
Fission	$n + \frac{A}{Z}X \rightarrow PF_1 + PF_2 + \nu n$	$(n,f)$

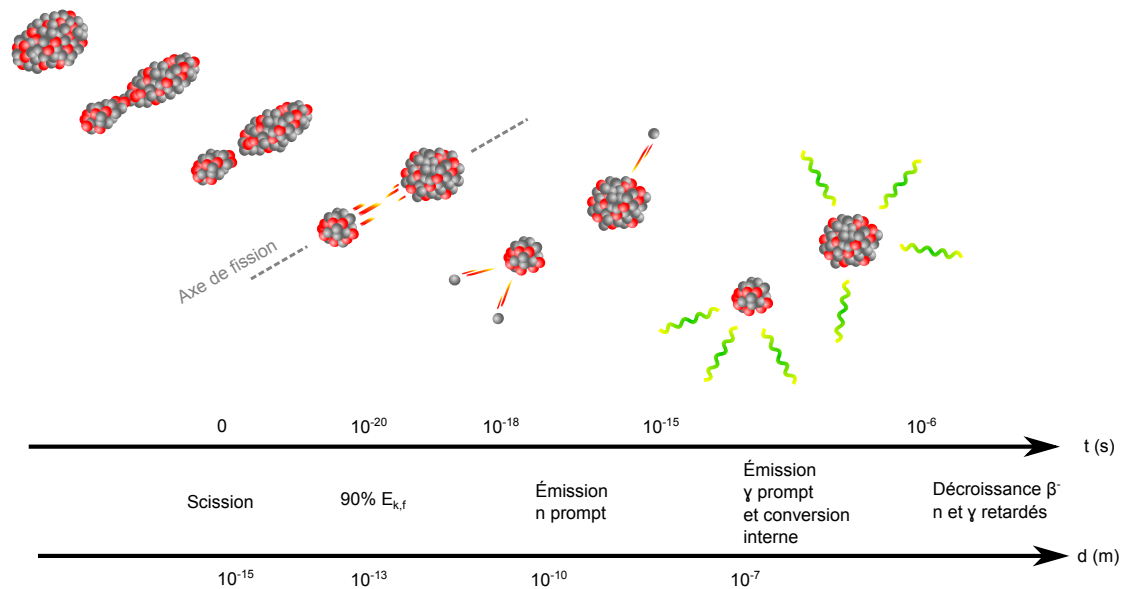


FIGURE 1.2. Les différentes étapes microscopiques de la fission nucléaire [4]. 90 % de l'énergie produites par la fission se traduit dans l'énergie cinétique des fragments de fission  $E_{k,f}$

### 1.2.1 Les interactions neutron-noyau

Les sections efficaces, basées sur des modèles de réactions nucléaires, s'expriment en barn ( $1 \text{ barn} = 10^{-24} \text{ cm}^{-2}$ ) et peuvent être reliées à la probabilité que le processus se déroule. Lorsqu'un neutron d'énergie  $E$  arrive au voisinage d'un noyau  ${}^A_Z X$ , il peut se produire deux types de processus :

- les interactions directes, comme par exemple la diffusion élastique potentielle. Cette réaction est simple et peut être vue comme le choc élastique de deux billes. Le neutron incident va alors diffuser avec un angle  $\theta$  et son énergie cinétique finale sera alors plus faible.
- les interactions qui font intervenir la notion de collision au sein du noyau entre les nucléons et la particule incidente. On distingue deux catégories : la diffusion (élastique résonante et inélastique) et l'absorption (capture radiative, fission, émission de particule).

Pour des domaines concernant des énergies de neutron inférieures à quelques MeV, en particulier ceux qui nous intéressent dans la physique des réacteurs, les réactions par formation d'un noyau composé sont les plus importantes. La théorie associée au noyau composé repose sur un processus en deux étapes. Tout d'abord, le neutron incident se fait absorber par le noyau initial, entraînant ainsi la formation d'un noyau dans un état excité. Puis une réaction nucléaire permet de dissiper l'énergie en surplus. Le noyau produit retourne sur son état fondamental stable. La Figure 1.3 décrit le processus de formation du noyau composé. La notion de voie de réaction se caractérise par :

- $\alpha$  décrivant l'ensemble des deux particules, chacune décrite par sa masse, sa charge, sa parité et son spin ( $i$  et  $I$ ) ;
- $l$  le moment angulaire orbital exprimé en unité d' $\hbar$  ;
- $J^\pi$  le moment angulaire total avec la parité de la voie en unité d' $\hbar$  ;
- $s$  le spin de la voie en unité d' $\hbar$  ( $s = i + I$ ).

On note  $c = (\alpha, l, J^\pi, s)$  et  $c' = (\alpha', l', J^{\pi'}, s')$  respectivement la voie d'entrée et la voie de sortie. A chaque voie est associé un rayon de voie noté  $a_c$ . Il peut être compris intuitivement comme la distance à partir de laquelle les interactions nucléaires sont supposées nulles entre une particule incidente et le noyau. Une formule empirique de  $a_c$  en fermi ( $1 \text{ fm} = 10^{-13} \text{ cm}$ ) est donnée par la relation suivante, avec  $A$  le nombre de masse du noyau cible :

$$a_c = 1,23(A)^{1/3} + 0,8 \quad (1.2)$$

Cette représentation phénoménologique date de plus de 50 ans. L'ordre de grandeur du terme constant (0,8 fm) peut être expliqué en utilisant la distribution de densité du modèle de la goutte liquide proposé par Myers [5]. Il prend en compte la dilatation due à différents

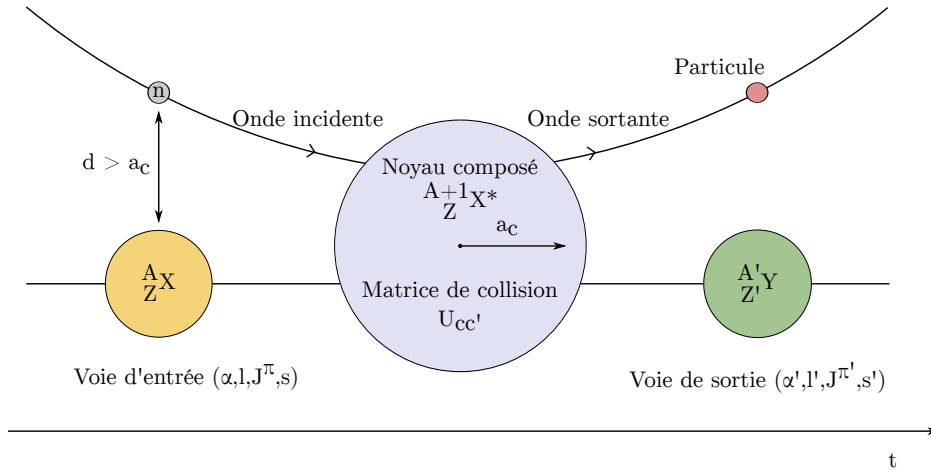


FIGURE 1.3: Schéma décrivant le processus de formation du noyau composé

effets comme la tension de surface, l'excès de neutrons et la répulsion Coulombienne. La forme actuelle est issue de la convention ENDF-6 [6]. Le système interne à  $N$  corps au noyau composé ne permet pas de connaître la fonction d'onde interne. Afin de modéliser les réactions nucléaires à l'intérieur du noyau, la matrice de collision notée  $U$  est introduite [7]. Elle permet de décrire les transitions possibles entre les fonctions d'onde entrantes et sortantes du noyau composé. La section efficace partielle d'une voie d'entrée  $c$  vers une voie de sortie  $c'$  s'exprime en fonction de la matrice de collision :

$$\sigma_{cc'} = \pi \lambda_c^2 g_J |\delta_{cc'} - U_{cc'}| \quad (1.3)$$

Avec  $g_J$  le facteur statistique de spin,  $\lambda_c$  l'inverse du nombre d'onde associé à la voie d'entrée,  $|U_{cc'}|^2$  la probabilité de transition entre la voie  $c$  et  $c'$ , et  $\delta_{cc'}$  le symbole de Kronecker<sup>1</sup>. La section efficace intégrée de type  $(\alpha, \alpha')$ , par exemple celle de la réaction  $(n, \gamma)$ , est obtenue par intégration sur tous les  $J, s$  et  $l$  des sections efficaces partielles :

$$\sigma_{\alpha\alpha'} = \sum_{(J,s,l)} \sigma_{cc'} \quad (1.4)$$

Le noyau composé est aussi caractérisé par la présence de niveaux d'énergie dans le noyau, décrits par le modèle en couches. Ces niveaux d'énergie donnent lieu à des structures résonantes. À partir d'une certaine énergie, ces niveaux ne peuvent plus être discrétisés expérimentalement. La Figure 1.4 illustre le schéma de niveau et les différents domaines en énergie. Afin de pouvoir établir des théories pour calculer des sections efficaces, trois domaines en énergie sont introduits : le domaine des résonances résolues (**Resolved Resonance Range**), le domaine des résonances non-résolues (**Unresolved Resonance Range**), et le continuum.

1. Le symbole Kronecker est égal à l'unité lorsque la voie de sortie est la même que la voie d'entrée



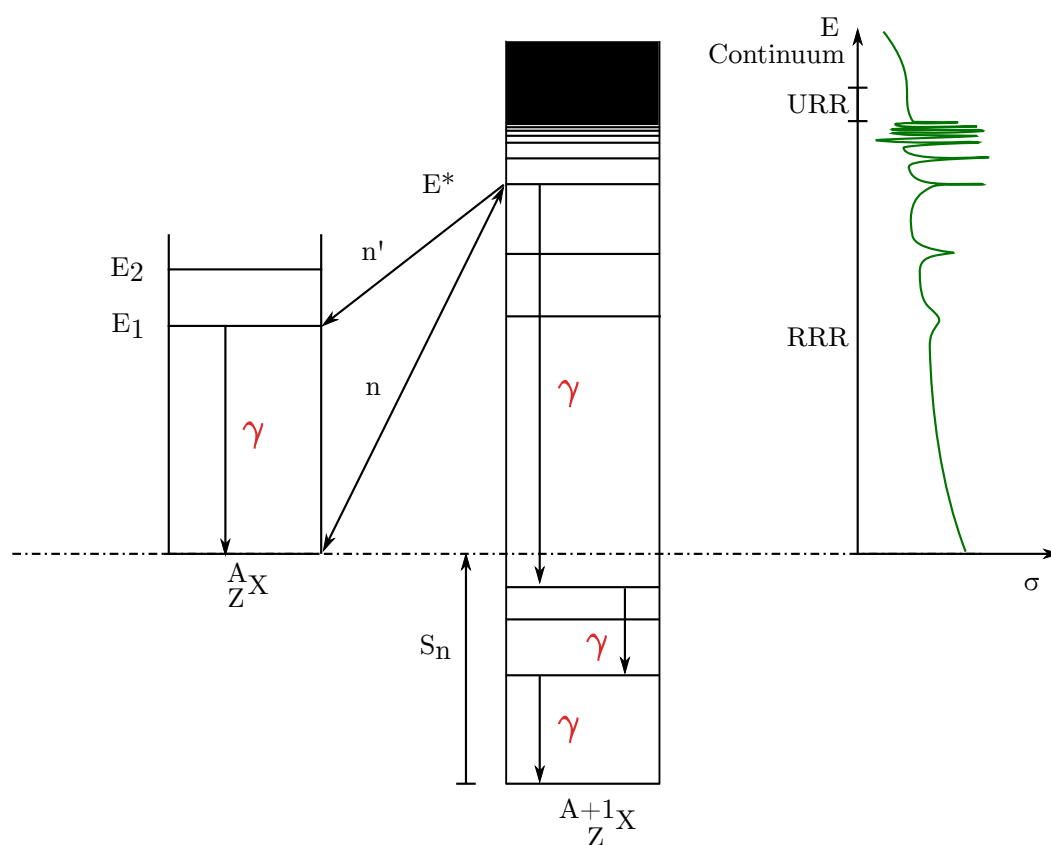


FIGURE 1.4. Schéma de niveau d'un noyau excité et voies de désexcitation par diffusion élastique  $(n,n)$ , diffusion inélastique  $(n,n')$  et capture radiative  $(n,\gamma)$ , avec  $S_n$  l'énergie du seuil de séparation du dernier neutron

### 1.2.2 Le domaine des résonances résolues (RRR)

Le domaine des résonances résolues, dit RRR (*Resolved Resonance Range*) est décrit par le formalisme de la matrice  $\mathbf{R}$  [8]. Ce dernier se base sur des hypothèses additionnelles par rapport au modèle du noyau composé et permet de déterminer les éléments de la matrice de collision. Les hypothèses utilisées dans ce formalisme sont les suivantes :

- les effets relativistes ne sont pas pris en compte car les vitesses des neutrons sont faibles ;
- seuls les processus binaires sont traités, c'est-à-dire une seule particule entrante et un seul noyau ;
- pas de création ou de destruction de particules ;
- pour une distance supérieure à  $a_c$ , les interactions sont décrites par un potentiel dépendant uniquement de la distance.

Ce formalisme permet d'exprimer les interactions qui se produisent dans le noyau composé en fonction des éléments d'une matrice appelée matrice  $\mathbf{R}$ . Chaque élément de cette matrice réfère à une résonance et s'écrit :

$$R_{cc'} = \sum_{\lambda} \frac{\gamma_{\lambda c} \gamma_{\lambda c'}}{E_{\lambda} - E} \quad (1.5)$$

avec :

- $\lambda$  l'état caractérisant une résonance ;
- $\gamma_{\lambda c}$  l'amplitude de probabilité pour la formation des états du noyau composé par la voie d'entrée  $c$  ;
- $\gamma_{\lambda c'}$  l'amplitude de probabilité pour la décroissance des états du noyau composé par la voie de sortie  $c'$  ;
- $E_{\lambda}$  l'énergie du niveau correspondant à la résonance ;
- $E$  l'énergie du neutron incident.

Suite à des opérations mathématiques non détaillées ici, la matrice de collision  $U$  s'écrit [8] :

$$U_{cc'} = \Omega_c P_c^{1/2} \left\{ [\mathbf{1} - \mathbf{R}(\mathbf{L} - \mathbf{B})]^{-1} [\mathbf{1} - \mathbf{R}(\mathbf{L}^* - \mathbf{B})] \right\}_{cc'} P_{c'}^{1/2} \Omega_{c'} \quad (1.6)$$

$$= e^{-i(\varphi_c + \varphi_{c'})} \left\{ \delta_{cc'} + 2iP_c^{1/2} \left[ (\mathbf{1} - \mathbf{R}\mathbf{L}^{\circ})^{-1} \mathbf{R} \right]_{cc'} P_{c'}^{1/2} \right\} \quad (1.7)$$

où :

$$L_{cc'}^{\circ} \equiv L_{cc'} - B_{cc'} = (L_c - B_c) \delta_{cc'} \equiv (S_c + iP_c - B_c) \delta_{cc'} \quad (1.8)$$

On trouve dans les Équations (1.6) et (1.8) :

- $\mathbf{R} = R_{cc'}$  est un des éléments de la matrice- $\mathbf{R}$  décrit dans l'Équation 1.5 ;

- $\Omega_c = \left( \frac{I_c}{O_c} \right)_{r=a_c}$  est la projection du rapport entre l'onde incidente  $I_c$  et l'onde sortante  $O_c$  à la surface ( $r = a_c$ ) de la voie  $c$ . Dans le cas de particules neutres,  $\Omega_c = e^{-i\varphi_c}$  où  $\varphi_c$  représente le décalage de phase de diffusion de la sphère dure ;
- $S_c$  est appelé facteur de décalage de la barrière de potentiel ;
- $P_c$  est le facteur de pénétrabilité de la barrière de potentiel ;
- $B_c$  est une condition aux limites à la surface du noyau composé ( $r = a_c$ ).

Il existe de nombreuses approximations du formalisme de la matrice R qui ne seront pas détaillées ici, dont le Single Level Breit-Wigner [9] et l'approximation de Reich-Moore [10].

### 1.2.3 Le domaine des résonances non-résolues (URR)

Le formalisme associé au domaine des résonances non-résolues, dit URR (*Unresolved Resonance Range*), est basé sur un traitement statistique des paramètres de la matrice R [11]. La description des sections totales et partielles associées au domaine non-résolu, nécessite quatre ingrédients importants :

- la distribution de Porter-Thomas [12], qui permet d'obtenir les largeurs de voie moyennes  $\langle \Gamma_{\lambda_c}^l \rangle$  ;
- la distribution de Wigner [13], qui permet d'obtenir l'espacement moyen des niveaux  $\langle D_{lJ} \rangle$  ;
- la formule semi-empirique de Gilbert et Cameron [14], qui permet de calculer la densité de niveaux  $\rho_J$  comme étant le nombre de résonances par intervalle ;
- les paramètres des niveaux éloignés  $R_{lJ}^\infty$ , parfois appelés paramètres des niveaux distants, issus de la théorie des niveaux externes permettent de reproduire convenablement le niveau des sections efficaces [15].

La section efficace totale peut s'obtenir à l'aide de la matrice de collision moyennée  $\overline{U_{cc'}}$ , issue d'une moyenne sur une plage en énergie :

$$\overline{\sigma}_{tot} = 2\pi\lambda_c^2 \sum_{Jsl} g_J \left( 1 - \text{Re} \left( \overline{U_{cc'}} \right) \right) \quad (1.9)$$

Les éléments de la matrice de collision moyennée sont obtenus en fonction des "pole force"  $s_{lJ}$  et des paramètres des niveaux éloignés  $R_{lJ}^\infty$  :

$$\overline{U}_{lJ}(E) = e^{-2i\varphi_l(E)} \frac{1 + iP_l(E) R_{lJ}^\infty - s_{lJ} P_l(E) \pi}{1 - iP_l(E) R_{lJ}^\infty + s_{lJ} P_l(E) \pi} \quad (1.10)$$

où  $P_l(E)$  et  $\varphi_l(E)$  sont, respectivement, le facteur de pénétration de la barrière centrifuge et le décalage de phase de l'onde incidente diffusée par une sphère. Le paramètre  $s_{lJ}$  est une

fonction de densité de probabilité défini selon les largeurs de voie moyennes et l'espacement moyen des niveaux :

$$s_{lJ} = \frac{1}{P_{lJ}} \frac{\langle \Gamma_{\lambda_c}^l \rangle}{\langle D_{lJ} \rangle} \quad (1.11)$$

Une manière simple de calculer les sections efficaces partielles a été proposée par Moldauer [16, 17] en se basant sur les travaux de Hauser et Feshbach [18] :

$$\sigma_{cc'} = \sigma_p \delta_{cc'} + \pi \lambda_c^2 g_J \frac{T_c T_{c'}}{\sum_c T_c} W_{cc'} \quad (1.12)$$

avec  $\sigma_p$  la section efficace de diffusion potentielle. Le facteur  $\pi \lambda_c^2 g_J \frac{T_c T_{c'}}{\sum_c T_c}$  provient de la composante noyau composé avec  $T_c$  et  $T_{c'}$  les coefficients de transmission neutron des voies  $c$  et  $c'$ .  $W_{cc'}$  est un terme correspondant aux fluctuations et interférences entre les voies. Il existe plusieurs modèles permettant d'obtenir ce dernier terme, dont certains explicités dans la thèse de L. Papineau [19].

#### 1.2.4 Le domaine du continuum

Le domaine du continuum concerne les énergies à partir de quelques keV pour les noyaux lourds et de l'ordre du MeV pour les noyaux légers. Il commence dans la plupart des cas après le domaine non-résolu et parfois à partir de la fin des résonances résolues, introduisant alors des hypothèses fortes vis-à-vis des calculs d'autoprotection en neutronique [20].

Ce domaine en énergie est important pour les réacteurs à neutrons rapides, puisque la plus grande population de neutrons se trouve au-dessus du keV. La complexité des réactions nucléaires dans le domaine du continuum est due à la présence de nombreux mécanismes d'interaction nucléaire, la contribution de chacun pouvant varier suivant l'énergie de la particule incidente. On distingue les mécanismes suivants (*cf.* Figure 1.5) :

- la diffusion potentielle élastique : le neutron est supposé ne pas rentrer pas en contact avec les nucléons ;
- les réactions passant par la formation d'un noyau composé. De façon générale, plus la particule incidente est énergétique, moins la part du noyau composé est importante ;
- les réactions passant par un état de pré-équilibre du noyau : ces réactions interviennent généralement à plus haute énergie ( $> 4$  MeV). Dans une vision semi-classique, la particule incidente va subir plusieurs chocs avec les nucléons du noyau. Le système ainsi formé peut émettre une particule avant d'atteindre un équilibre, comme dans le cas du noyau composé ;

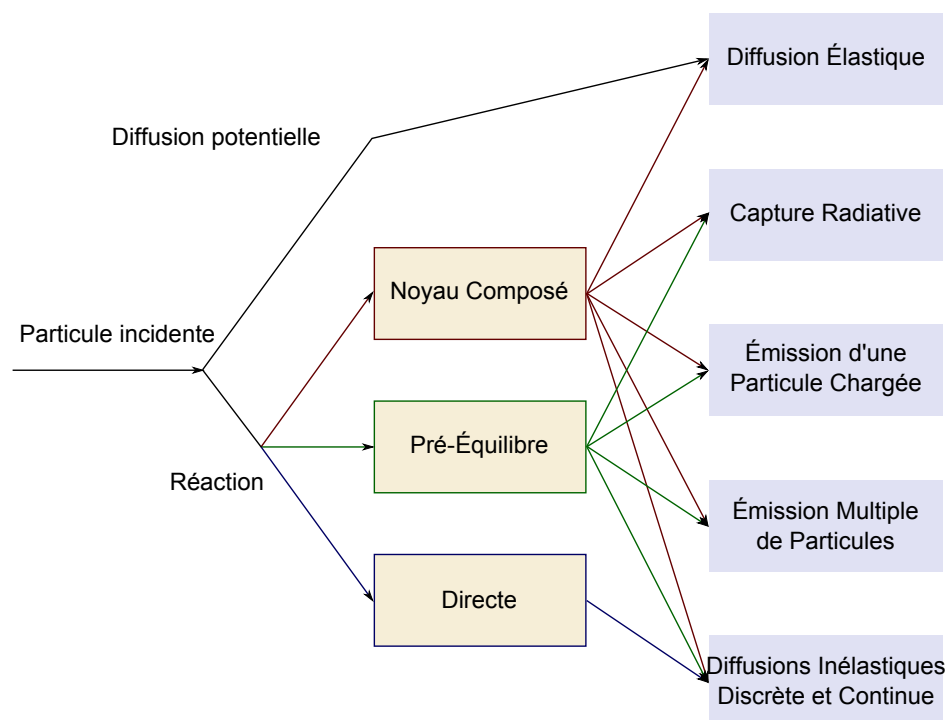


FIGURE 1.5. Schéma décrivant les différents mécanismes de réactions nucléaires à haute énergie

- les réactions directes : on considère qu'il y a peu d'interactions entre la particule incidente et les nucléons du noyau.

#### 1.2.4.1 Le modèle optique

Les différentes réactions à haute énergie peuvent être représentées comme l'interaction entre une particule incidente et un noyau, représentée par un champ de potentiel complexe. Ce potentiel  $V$  intervient dans l'équation de Schrödinger, dans le système de centre de masse des deux particules :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - V(\vec{r}) - E \right] \Psi(\vec{r}) = 0 \quad (1.13)$$

$$\text{où : } \left\{ \begin{array}{l} m, \vec{r}_1 \quad : \text{masse, coordonnées de la particule incidente dans le laboratoire} \\ M, \vec{r}_2 \quad : \text{masse, coordonnées du noyau cible dans le laboratoire} \\ \mu = \frac{m \cdot M}{m + M} \quad : \text{masse réduite du système} \\ \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \quad : \text{coordonnées du système dans le centre de masse} \\ E = \frac{E_{lab} \cdot M}{m + M} \quad : \text{énergie cinétique totale du système} \\ E_{lab} \quad : \text{énergie cinétique totale du système dans le référentiel du laboratoire} \end{array} \right.$$

La résolution numérique de cette équation permet d'obtenir de précieuses informations, comme la diffusion élastique potentielle, les sections efficaces de réaction, les fonctions forces (appelées *strength functions* en anglais) utilisées dans l'URR ou le rayon effectif de diffusion potentiel  $R'$ . Elle permet également de trouver les termes de la matrice de collision [21] et ainsi de calculer les coefficients de transmission qui sont utilisés pour les voies de réaction du noyau composé et les sections partielles (*cf.* Équation (1.12)).

Il existe plusieurs types et formes de potentiel :

- le modèle optique sphérique, où le noyau n'est pas supposé déformé et donc sphérique ;
- le modèle optique, à voies couplées, rotationnel symétrique, où une déformation du noyau est prise en compte (*Coupled Channels Symmetric Rotational Model*) ;
- le modèle optique DWBA (*Distorted Wave Born Approximation*) qui est considéré comme une approximation au premier ordre des modèles vibrationnels ;
- le modèle optique couplé (utilisant des potentiels rotationnel et vibrationnel) est utilisé pour traiter les noyaux lourds tels les actinides. Il permet de calculer la section totale et les processus directs élastiques, mais également les processus directs inélastiques contrairement au modèle optique sphérique.

#### 1.2.4.2 Description du potentiel du modèle optique

Le modèle décrit par Romain-Morillon [22, 23] est repris ici et est utilisé au LEPH. Il permet de réaliser des calculs de sections efficaces pour les actinides ( $^{238}\text{U}$ ,  $^{239}\text{Pu}$ ...). Le potentiel optique phénoménologique est décrit selon l'expression suivante :

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(r, E) = & [\mathcal{V}_v(E) + i\mathcal{W}_v(E)] f(r, R_v, a_v) \\ & + [\mathcal{V}_s(E) + i\mathcal{W}_s(E)] g(r, R_s, a_s) \\ & + [\mathcal{V}_{so}(E) + i\mathcal{W}_{so}(E)] \left( \frac{\hbar}{m_\pi c} \right)^2 \frac{1}{r} g(r, R_{so}, a_{so}) \cdot \vec{\ell} \cdot \vec{\sigma} \end{aligned} \quad (1.14)$$

avec  $\mathcal{V}_{v,s,so}$  et  $\mathcal{W}_{v,s,so}$  les termes réels et imaginaires du potentiel volume-central ( $v$ ), surface-central ( $s$ ) et spin-orbite ( $so$ ). Le facteur de forme  $f$  correspond à une Woods-Saxon<sup>2</sup> et  $g$  est proportionnel à la dérivé première de  $f$  :

$$f(r,R,a) = \frac{1}{1 + \exp[(r - R)/a]}$$

$$g(r,R,a) = -4a \frac{d}{dr} f(r,R,a)$$

Les potentiels volumiques réels  $\mathcal{V}$  et imaginaires  $\mathcal{W}$  sont reliés mathématiquement par une relation de dispersion. Une description plus exhaustive des potentiels et de cette relation peut être trouvée dans les références [22, 23].

### 1.3 Les expériences microscopiques

Les expériences microscopiques, *i.e.* différentielles, permettent d'obtenir des informations sur des données nucléaires en fonction de l'énergie du neutron incident. Les valeurs des sections efficaces partielles peuvent être déterminées de cette manière, pour chaque réaction, à une énergie précise. Pour réaliser de telles mesures, il est nécessaire d'avoir à disposition une source de neutrons bien calibrée avec une gamme en énergie aussi réduite que possible. Le plus souvent, elle est obtenue grâce à un accélérateur linéaire de particules, pouvant fonctionner soit de façon continue, soit en mode pulsé. Dans ce dernier cas, l'énergie des neutrons peut être contrôlée par des mesures de temps de vol. On présente, dans un premier temps, cette technique qui permet d'obtenir une source de neutrons. Une deuxième partie permet d'identifier les différentes grandeurs d'intérêt théoriques permettant de traduire une mesure en une section efficace. Enfin, on décrit les différentes sources d'incertitudes qui interviennent lors de la réduction de données ainsi qu'un formalisme pour pouvoir les traiter du côté évaluateur.

#### 1.3.1 Technique du temps de vol

Les installations basées sur cette méthode utilise une source blanche de neutrons. Par exemple, afin d'obtenir cette source de neutrons, l'installation GELINA à l'IRMM de Geel située en Belgique utilise un accélérateur linéaire permettant de produire des faisceaux d'électrons entre 80 et 140 MeV. Ce faisceau vient percuter une cible d'uranium, qui, par rayon-

---

2. Le potentiel de Woods-Saxon est un potentiel de champ moyen pour les nucléons à l'intérieur du noyau atomique

nement de freinage<sup>3</sup>, va produire des photons avec des énergies importantes. Ces photons vont induire des photo-fissions de l'uranium, qui s'accompagnent d'une émission de neutrons. Le faisceau de neutrons ainsi produit couvre une large gamme énergétique (de quelques eV à plus de 20 MeV). Pour donner un ordre de grandeur, en moyenne 6 neutrons sont créés pour 100 électrons de 100 MeV incidents à la cible d'uranium [24]. L'énergie des neutrons est déterminée comme une fonction de la masse du neutron  $m_n$ , du temps de parcours  $T_n$  et de la longueur effective du parcours  $L_n$  entre la source de neutrons et le système de détection. L'énergie des neutrons est donnée par la relation suivante :

$$E_n = \frac{1}{2}m_n \left( \frac{L_n}{T_n} \right)^2 \quad (1.15)$$

### 1.3.2 Mesures des différentes sections

#### Section efficace totale, mesure de transmission

Une fois le faisceau de neutrons créé avec une énergie  $E_n$ , la mesure la plus simple que l'on puisse faire est celle de la section efficace totale d'un matériau. En effet, elle est donnée directement par le coefficient de transmission au travers d'une cible composée des isotopes à étudier. Cette observable est obtenue en faisant le rapport entre les comptages avec et sans présence de la cible irradiée. Ce dernier s'écrit comme le rapport du flux incident  $\varphi_{in}$  sur le flux sortant  $\varphi_{out}$  après interaction avec la cible. Le coefficient de transmission  $T(E_n)$  s'exprime alors comme une fonction de la densité de noyaux  $n$  de la cible ainsi que la section efficace totale  $\sigma_T$ . Le coefficient de transmission théorique s'écrit donc comme suit :

$$T(E_n) = \frac{\varphi_{in}(E_n)}{\varphi_{out}(E_n)} = e^{-n\sigma_T(E_n)} \quad (1.16)$$

#### Sections efficaces partielles

Les mesures de sections efficaces partielles de réactions ((n, $\gamma$ ), (n,2n), (n,f)...) passent, quant à elles, par la détection des produits de ces réactions. Les mesures de ces sections sont parfois délicates car il est nécessaire d'utiliser beaucoup plus de dispositifs de détection. Par exemple, la section de diffusion peut être obtenue en fonction de l'angle et de l'énergie, en disposant des détecteurs de neutrons aux différents angles solides autour de la cible. La section partielle de capture neutronique  $\sigma_c$  quant à elle peut être mesurée en utilisant une cible d'épaisseur connue. Si un neutron provenant de la source est capturé par les noyaux composant la cible, alors ce noyau sera excité et va relâcher son surplus d'énergie par émission

3. Le rayonnement de freinage, ou *Bremsstrahlung* en allemand, est un rayonnement électromagnétique créé par le ralentissement de charges électriques dans un champ électromagnétique



de raies gamma. Ce rayonnement est mesuré à l'aide de capteurs disposés autour de la cible. Pour un flux de neutrons incidents connus, la mesure des photons  $\gamma$  donne la fraction de neutrons incidents qui ont été absorbés dans l'échantillon. Cette fraction est connue sous le nom de rendement de capture ( $Y(E_n)$ ). Ce rendement, fonction de l'énergie, peut être utilisé en prenant en compte une mesure de la section totale pour déterminer la section de capture en utilisant la formule suivante :

$$Y(E_n) = \left(1 - e^{-N\sigma_T(E_n)}\right) \frac{\sigma_c(E_n)}{\sigma_T(E_n)} \quad (1.17)$$

avec  $N$  l'épaisseur de la cible en atomes/barn. Cette formulation est valide pour des épaisseurs suffisamment faibles.

### 1.3.3 Gestion des incertitudes

Lorsqu'on rend compte du résultat d'une mesure d'une grandeur physique, il faut obligatoirement donner une indication quantitative sur la qualité du résultat. Cela permet à ceux qui l'utiliseront d'en estimer la fiabilité. Les valeurs expérimentales sont souvent issues d'un processus de réduction de données. Les grandeurs mesurées à l'origine, ou données brutes, sont souvent un nombre de coups. De façon générale, ce nombre de coups suit une loi statistique bien précise et souvent une distribution de Poisson (qui tend vers une gaussienne lorsque le nombre de coups devient grand). Cette distribution possède une variance non nulle et fournit ainsi une incertitude statistique. De plus, lorsque la valeur mesurée est transformée en une grandeur ou observable (comme une section efficace), plusieurs opérations entraînant des corrélations sont réalisées. Les incertitudes intervenant dans ces processus sont appelées incertitudes systématiques. Elles peuvent provenir de :

- la normalisation ;
- la correction du temps mort ;
- la soustraction du bruit de fond ;
- la calibration avec une section efficace de référence ;
- la composition de la cible ;
- la fonction de résolution de l'installation ;
- ...

Prenons l'exemple du coefficient de transmission. On souhaite identifier les différentes sources d'incertitudes expérimentales, et la fonctionnelle permettant d'obtenir la grandeur mesurée utilisée pour calculer la section efficace totale (*cf.* Équation (1.16)). D'un point de vue expérimental, cette grandeur peut être calculée selon la relation suivante [25] :

$$T = \frac{C^c - k_c B - B_c}{C^0 - k_0 B - B_0} \quad (1.18)$$

avec :

- $C^c$  et  $C^0$  les taux de comptage corrigés du temps mort respectivement avec et sans la cible  $c$  ;
- $k_c$  et  $k_0$  la normalisation du bruit de fond respectivement avec et sans la cible ;
- $B$  le bruit de fond des taux de comptage généré par le faisceau ;
- $B_c$  et  $B_0$  le bruit de fond sans le faisceau, respectivement avec et sans la cible.

Une fois la réduction de données réalisée, les données expérimentales traduites en sections efficaces sont souvent compilées dans la base EXFOR [26]. Parfois, les incertitudes utilisées ne peuvent pas être retrouvées. Lorsque ces dernières sont identifiées, une décomposition de type AGS peut être utilisée (*Analysis of Geel Spectra* code) [27]. Elle est proposée par C. Bastian selon la formule suivante :

$$M_E = D_{stat} + SS^T, \quad (1.19)$$

où  $M_E$  est la matrice de covariances expérimentale complète de taille égale au nombre de points de mesure  $n_E$ ,  $D_{stat}$  la matrice diagonale de taille  $n_E$  contenant les variances statistiques expérimentales, et  $S$  est une matrice rectangulaire de taille  $(n_E, n_K)$  avec  $n_K$  le nombre de sources d'incertitudes systématiques.

#### 1.3.4 Exemple : mesure de transmission pour l' $^{238}\text{U}$

A titre d'exemple, l'expérience publiée en 1966 par C. A. Uttley [28] est considérée. C'est une mesure de transmission réalisée à l'*Atomic Energy Research Establishment* au Royaume-Uni. Un accélérateur linéaire Van de Graaff a été utilisé avec une distance de vol de 120 m et 300 m. Une des mesures de transmission a été réalisée sur une cible d' $^{238}\text{U}$ , à partir de laquelle la section efficace totale a été déduite. On dispose de 34 points expérimentaux entre 6,50 keV et 950 keV que l'on peut retrouver dans la base EXFOR. Deux domaines théoriques sont concernés : le domaine non-résolu et le continuum. La Figure 1.6 représente la section efficace totale de l' $^{238}\text{U}$  issue de cette expérience. La section efficace totale issue de la bibliothèque JEFF-3.1.1 est également présentée. On peut faire deux remarques :

- la courbe JEFF-3.1.1 est en accord avec les points expérimentaux ;
- les incertitudes expérimentales sur la section sont manquantes. Une incertitude statistique venant des taux de comptage peut être arbitrairement prise de l'ordre de quelques pour-cents, ainsi qu'une incertitude systématique introduite par les biais de méthode et de mesure de la section avec un même appareil, calibré de la même façon pour l'ensemble des mesures.

Cette expérience est reprise tout au long du manuscrit.

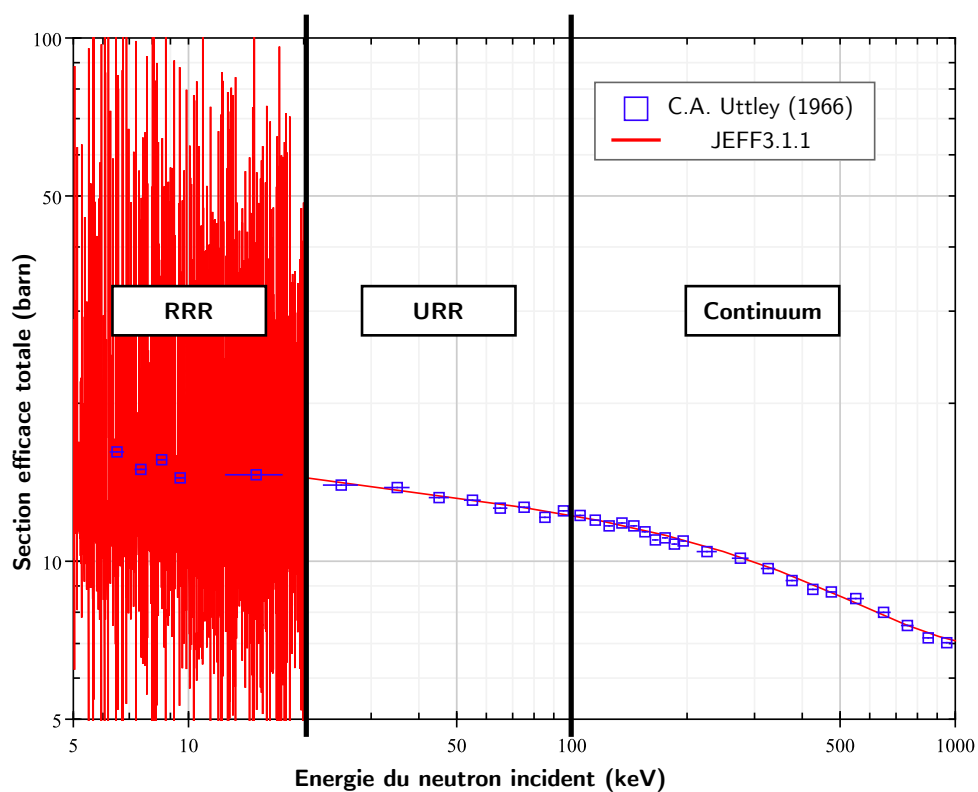


FIGURE 1.6. Comparaison entre les données expérimentales issues de l'expérience d'Uttley (en bleu) et de la section évaluée de JEFF-3.1.1 (en rouge) pour la section efficace totale de  $^{1238}\text{U}$  entre 6,50 keV et 950 keV

## 1.4 Les expériences intégrales

Une expérience intégrale est une expérience réalisée sur un réacteur nucléaire permettant d'obtenir des observables neutroniques sur un domaine en énergie correspondant au spectre du réacteur. La section précédente décrit les expériences dites microscopiques ou différentielles. Comme déjà mentionné, elles permettent d'obtenir des mesures de réaction selon une énergie du neutron incident précise et à des angles donnés. Les cibles sont constituées d'un nombre réduit d'isotopes afin d'étudier les propriétés exclusives de ces derniers. L'inconvénient de ces mesures est qu'elles sont limitées par les incertitudes systématiques, la principale étant la normalisation. Les expériences microscopiques permettent d'obtenir les formes des sections en fonction de l'énergie, mais les incertitudes résultant concernent le niveau de la section. Pour les expériences intégrales, la distribution énergétique des neutrons est plus large, permettant de sonder les propriétés nucléaires sur un domaine de sensibilités plus étendu. C'est une autre source de données qui est complémentaire aux expériences microscopiques. En effet, on ne peut pas en déduire une forme de section efficace, mais seulement un niveau avec parfois des incertitudes plus faibles que les incertitudes systématiques (supposées ou non) des expériences microscopiques. Il existe de nombreuses mesures intégrales disponibles aux évaluateurs. Les paramètres intégraux souvent utilisés sont le coefficient de multiplication, le poids des barres d'absorbant, des distributions de puissance, des bilans de matières... Chacune des grandeurs est sensible à différentes données nucléaires.

Les expériences intégrales ont souvent été utilisées comme indicateur du bon comportement d'une évaluation. Un des objectifs de cette thèse est de pouvoir les assimiler lors du processus d'évaluation, notamment à l'aide d'outils d'assimilation présentés dans la Chapitre 4 appelés ADI (*Assimilation de Données Intégrales*). On décrit par la suite les principales expériences intégrales qui peuvent être utilisées dans le cadre d'une assimilation de données.

### 1.4.1 Benchmark criticité

L'une des grandeurs intégrales la plus souvent utilisée est le coefficient de multiplication effectif dans les expériences de criticité. La technique de mesure de ce paramètre est fondée sur la connaissance de l'ensemble des variables rendant une configuration critique comme le nombre de crayons combustibles et leurs compositions, la géométrie du cœur... De façon générale, on est capable de mesurer l'évolution temporelle de la population neutronique. En la notant  $N(t)$ , elle suit une loi exponentielle :

$$N(t) = N(0) \cdot e^{\frac{k-1}{l}t}, \quad (1.20)$$

avec  $k$  le facteur de multiplication et  $l$  la durée moyenne de la vie des neutrons. De cette mesure, il est déduit le temps de doublement noté  $t_d$  qui permet de remonter à la réactivité du cœur à l'aide des courbes de Nordheim fondées sur l'inversion des équations de la cinétique [29].

Les expériences proches de la criticité sont regroupées dans ce que l'on appelle des benchmarks criticité. L'une des principales sources de données est celle compilée par l'OCDE : International Criticality Safety Benchmark Evaluation Project (ICSBEP) [30] créée en Octobre 1992. Le projet a été pris en main par l'Idaho National Laboratory (INL) et implique des experts en criticité des différents grands centres de recherche nucléaire aux Etats-Unis, comme le Los Alamos National Laboratory (LANL). L'aspect international du benchmark apparut avec l'entrée de plusieurs pays européens dans le projet en 1994. Les objectifs de ce benchmark sont les suivants :

- identifier et rendre exploitables les différentes expériences de criticité ;
- évaluer les données trouvées et quantifier l'ensemble des incertitudes à l'aide d'analyses de sensibilité ;
- compiler les données sous un format standard ;
- faire des calculs pour chaque expérience avec des codes de calcul de référence ;
- documenter les travaux précédents dans une unique base de données.

L'ICSBEP recense plus de 550 expériences représentant plus de 4700 mesures critiques, sous critiques et proches de la criticité. Chacune d'elles est décrite de façon détaillée permettant à quiconque de pouvoir modéliser les expériences avec leurs propres codes et données nucléaires. Les différentes expériences sont répertoriées dans le Handbook [30]. Une interface graphique a été développée, nommée DICE [31] (*Database for the International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments*). Elle permet de prendre en considération toutes les données du benchmark. Ce logiciel permet d'avoir une description complète de chaque configuration expérimentale et une base de recherche simple répondant aux demandes des utilisateurs. Par exemple, il est possible d'obtenir toutes les expériences faisant intervenir le  $^{239}\text{Pu}$ . Chaque expérience suit une nomenclature donnée sous la forme XXX-YYY-ZZZ-### avec :

- XXX le type de combustible. Par exemple, HEU (*High Enriched Uranium*), IEU (*Intermediate Enriched Uranium*), LEU (*Low Enriched Uranium*)...
- YYY la forme chimique du combustible. Par exemple, MET (métal), COMP (composé), SOL (solution)...
- ZZZ le spectre en énergie. On retrouve les spectres rapide (FAST), intermédiaire (INTER) et thermique (THEM) ;
- ### le numéro associé à l'expérience de la catégorie XXX-YYY-ZZZ.

Par exemple, HEU-MET-FAST-001 est l'expérience GODIVA (boule critique) composée à

plus de 90% de masse d' $^{235}\text{U}$  (HEU), sous la forme métallique (MET) et dont le spectre est rapide (FAST). Elle est numérotée 001 dans sa catégorie. Il est possible d'utiliser une nomenclature simplifiée de la forme XYZ#. Dans l'exemple précédent, on aurait HMF1. Certaines expériences de ce benchmark ont été utilisées pendant la thèse, car ce sont des ingrédients nécessaires pour réaliser des Assimilations de Données Intégrales (*cf.* Chapitre 4).

### 1.4.2 Expériences d'irradiation et d'activation

Il existe de nombreuses mesures de composition isotopique après irradiation en réacteur, donnant des informations sur les données nucléaires de base. Cela peut être des mesures de pastilles irradiées comme les expériences TRAPU [32] dans PHENIX ou encore des analyses de combustibles usés en sortie d'un réacteur de production. Les expériences PROFIL, PROFIL-2, PROFIL-R et PROFIL-M dans le réacteur PHENIX sont une source d'informations précises pour les sections efficaces d'absorption. Ce sont des irradiations d'échantillons d'isotope aussi pur que possible, pendant plusieurs cycles d'exploitation du réacteur. Des analyses isotopiques avant et après irradiation donnent des mesures très sensibles à un type de réaction précis. Ces expériences seront décrites dans le Chapitre 5, avec notamment un travail d'évaluation des incertitudes pour l'interprétation. Souvent, les mesures sont réalisées par méthode destructive. Il est courant d'avoir recours à une analyse isotopique par ICPMS (*Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry*) qui permet d'atteindre des incertitudes de mesure de l'ordre du pour mille. Cette méthode permet de détecter des isotopes avec des concentrations très faibles de l'ordre de 1 pour  $10^9$ . Cela est possible en ionisant l'échantillon à analyser, grâce à un plasma obtenu par chauffage inductif [33]. Un spectromètre de masse est ensuite utilisé pour séparer et quantifier les ions créés dans plasma.

Les expériences d'activation sont similaires aux expériences d'irradiation. La différence réside dans le niveau de flux qui est bien plus faible dans une expérience d'activation. La consommation de l'isotope analysée est alors négligeable au cours de l'irradiation. Les échantillons activés sont ensuite analysés à l'aide de techniques non destructives. Un autre type d'expérience est l'activation de dosimètres dans un réacteur. La dosimétrie permet d'obtenir des informations sur la forme du flux neutronique dans une configuration donnée. On peut également citer l'exemple de l'expérience PERLE (*Programme d'Étude de Réflecteur Lourd dans ÉOLE*) dans le réacteur de recherche Eole à Cadarache, qui utilise en partie des dosimètres pour valider/qualifier une évaluation du fer 56 [34].

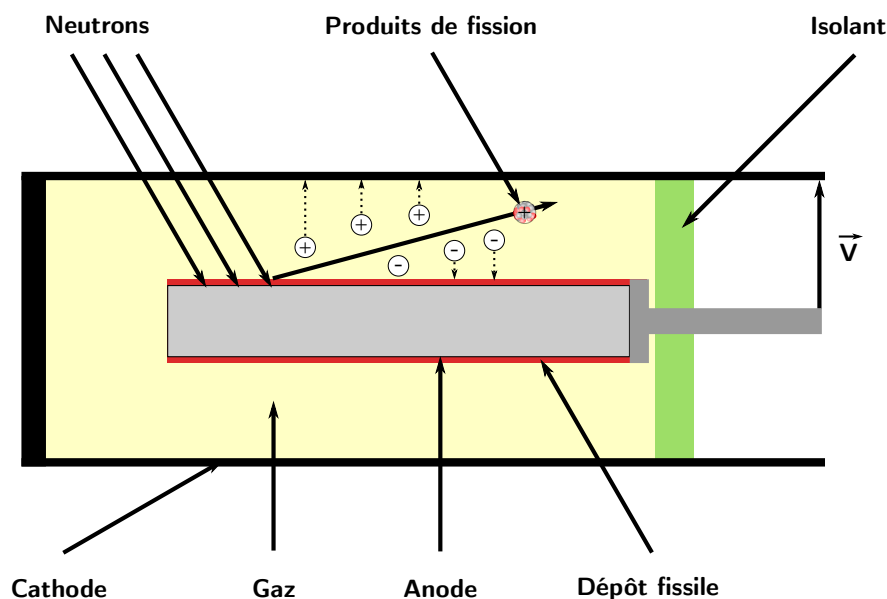


FIGURE 1.7: Schéma de principe d'une chambre à fission

### 1.4.3 Indices de spectre et mesure par chambre à fission

Pour réaliser des mesures de flux en relatif ou en absolu, il est possible d'utiliser des chambres à fission. Ce sont des détecteurs constitués d'une enceinte remplie d'un gaz neutre et isolant et de deux électrodes métalliques entre lesquelles est appliquée une différence de potentiel. Un exemple est donnée sur la Figure 1.7. Quelques microgrammes d'un isotope fissile sont déposés en couche mince sur l'anode. Lorsqu'un neutron arrive sur l'anode, il peut induire une fission. Cette réaction crée deux fragments de fission avec des angles d'émission de  $180^\circ$ . Ainsi, un fragment va s'arrêter dans l'anode tandis que le second va ioniser la chambre. Les charges alors produites sont captées par les électrodes grâce à la tension qui règne entre ces deux dernières. À l'aide d'un calibrage, un flux peut être déterminé. Il existe plusieurs types de chambres à fission avec des dépôts d'isotopes différents comme l'  $^{233}\text{U}$ ,  $^{235}\text{U}$ ,  $^{238}\text{U}$  ou encore la famille des plutonium. On ne mesure pas les mêmes domaines en énergie du flux selon l'isotope choisi. Par exemple, en choisissant l'  $^{238}\text{U}$ , on aura une image du flux dans la partie rapide d'un réacteur, car la fission est négligeable en-dessous de 800 keV. Les chambres à fission sont habituellement utilisées pour deux types d'application :

- les mesures statiques : elles sont dédiées aux mesures de paramètres d'intérêt pour la physique des réacteurs, notamment les distributions axiales et radiales de taux de fission dans le cœur, ou les indices de spectre qui permettent de qualifier les calculs de spectre neutronique en un point précis du cœur. Les indices de spectre sont des informations combinées de plusieurs mesures avec des chambres à fission différentes.

Par exemple, les rapports des chambres à fission  $^{235}\text{U}/^{238}\text{U}$  donnent une indication sur la dureté du spectre. Plus ce ratio est faible, plus le spectre est rapide.

- les mesures dynamiques : elles ont pour but de fournir des éléments de qualification pour les études de sûreté. Il s'agit par exemple des mesures de temps de doublement et des mesures de chute de barres permettant d'estimer leur poids en réactivité.

Certaines mesures sont accessibles dans le benchmark ICSBEP. D'autres données, davantage dédiées aux réacteurs à neutrons rapides, sont disponibles au sein du CEA, notamment les mesures d'indices de spectre dans MASURCA [35] ou les récentes expériences sur le réacteur critique CALIBAN [36].

#### 1.4.4 Oscillation d'échantillon

Les expériences d'oscillations d'échantillons sont basées sur une mesure de perturbation provoquée par l'insertion d'un échantillon dans un système critique. La perturbation est caractérisée par la mesure du niveau global de la variation du flux dans le réacteur, ou par la mesure d'une variation locale grâce à des détecteurs placés à proximité du canal d'oscillation. Dans le premier cas, la variation de la réactivité induite par l'insertion puis l'extraction de l'échantillon est compensée par une barre de contrôle, ce qui permet de conserver une réactivité nulle dans le réacteur. Connaissant les caractéristiques de la barre de contrôle, la différence de réactivité peut être déterminée. De telles mesures sont réalisées dans le réacteur Minerve [37] ou encore les expériences STEK au RCN (*Reactor Centrum Nederland*) [38].

#### 1.4.5 Gestion des incertitudes

Toutes les expériences intégrales possèdent de nombreuses sources d'incertitudes. Pour une expérience de criticité par exemple, elles reposent sur la composition exacte des assemblages (masse et isotopie des éléments le constituant) mais également sa géométrie comme les dimensions du dispositif expérimental (rayon d'une boule critique, pas du réseau...). De façon plus générale, les sources d'incertitudes possibles que l'on peut trouver dans les expériences intégrales peuvent être de type :

- géométrique : dimension, sphéricité, planéité, courbure, déformation, distance, hauteur, espacement, positionnement, pas de cellule, excentricité...
- physique et chimique : constitution, humidité, densité, isotopie, concentration, homogénéité, échantillonnage, radiolyse, hydrolyse, acidité, impureté, température...
- temporelle : temps d'acquisition, date de l'expérience, date de la mesure...
- calculatoire : constantes universelles, sections efficaces, masse atomique, temps de



demi-vie, isotopie naturelle, troncature, approximation, simplification, comptage statistique, ajustement, extrapolation, calibration...

- condition expérimentale : durée de l'expérience, puissance du réacteur, niveau du flux neutronique...

Parfois, les valeurs moyennes des paramètres permettant de décrire l'expérience, ne sont pas disponibles. Il est alors nécessaire de pouvoir estimer ces incertitudes afin de rendre les expériences intégrales exploitables. Dans la préparation des expériences, ce sont les expérimentateurs qui identifient les sources et les quantifier. Dans le cas où cela n'est pas possible, c'est à l'évaluateur de donner une estimation des incertitudes de manière rigoureuse. Cette rigueur est nécessaire car ces estimations permettent *a posteriori* de quantifier des biais sur des schémas de calcul et sur les sections efficaces. Les incertitudes sur les sections efficaces sont par la suite propagées sur les grandeurs d'intérêt, comme par exemple le coefficient multiplicateur ou les coefficients de contre-réactions neutroniques.

L'évaluateur doit réaliser une analyse d'incertitude pour les expériences qui va au-delà de celle effectuée par les expérimentateurs. Souvent, les expérimentateurs ne réalisent pas d'analyses suffisantes pour permettre de rendre les résultats directement exploitables dans une logique d'évaluation. Ceci peut être expliqué par des moyens de calcul limités pour les premières expériences (début de la deuxième moitié du 20<sup>ème</sup> siècle) contrairement à aujourd'hui où les expérimentateurs disposent d'outils de calcul performants. De fait, l'effet des faibles incertitudes jugées négligeables à cette époque peuvent impliquer des méconnaissances sur les grandeurs mesurées plus importantes que prévues initialement. De plus, l'exigence requise aujourd'hui des codes de calcul et des sections efficaces est beaucoup plus grande qu'avant, impliquant une demande d'évaluation des incertitudes plus précise. Dans le cas où l'on ne dispose pas d'information reportée par l'expérimentateur ou alors que cette dernière n'est pas donnée avec un niveau de confiance suffisant (à  $1\sigma$  par exemple), il est nécessaire de demander l'avis d'experts pouvant renseigner ces incertitudes au mieux. Ces derniers se basent sur une compréhension des phénomènes physiques intervenant dans l'estimation d'une grandeur et de comment elle peut varier autour de sa valeur moyenne.

Enfin, un aspect important, parfois oublié de nos jours, est l'estimation de la corrélation entre plusieurs expériences. Par exemple, on peut imaginer deux expériences sensiblement identiques (avec les mêmes matériaux), mais faisant intervenir deux appareils de mesure différents. La question qui se pose, de considérer ou non une corrélation entre les deux mesures, est une problématique à laquelle l'évaluateur se voit confronter [39]. Si l'on souhaite être conservatif, et dans le cas où il n'est pas possible de réaliser une telle évaluation des corrélations, il peut être judicieux d'imposer une corrélation de 1.

### 1.4.6 Exemple : Jezebel ( $^{239}\text{Pu}$ )

Jezebel est un assemblage critique fabriqué par le Los Alamos Scientific Laboratory en 1951. Un total de trois assemblages a été construit : l'un constitué de 95,5 %at. de  $^{239}\text{Pu}$  (PU-MET-FAST-001 selon la nomenclature du benchmark ICSBEP), l'un constitué de 20,1 %at.  $^{240}\text{Pu}$  (PU-MET-FAST-002) et le dernier constitué de 98,0 %at. d' $^{233}\text{U}$  (U233-MET-FAST-001). Dans le cadre de la thèse, seul l'assemblage composé principalement de  $^{239}\text{Pu}$  est étudié. On utilisera la nomenclature réduite PMF1. Cet assemblage critique a quasiment une forme sphérique et est composé de quatre pièces majeures, de masse similaire, pour des raisons de sûreté. La Figure 1.8 montre l'assemblage expérimental dans sa configuration non critique. On remarque la présence de peu de matériaux environnant, afin d'éviter tout effet réflecteur.

Il n'y a pas eu de modélisation exacte de l'assemblage PMF1. A la place, des analyses précises et des mesures expérimentales ont été réalisées par le Los Alamos, permettant de définir une modélisation simplifiée et réaliste (boule parfaite de plutonium avec une densité homogène). Il en a été déduit une sphère d'alliage de plutonium de  $17,020 \pm 0,1$  kg avec une densité de  $15,61 \text{ g.cm}^{-3}$  et un rayon de 6,3849 cm. Plusieurs expériences se sont déroulées sur cet assemblage, notamment une mesure de réactivité. L'incertitude issue de la modélisation réalisée, et évaluée par le Los Alamos sur le coefficient de multiplication  $k_{\text{eff}}$ , est de 200 pcm. Ainsi, la valeur expérimentale retenue par la suite est  $k_{\text{eff}} = 1,00000 \pm 0,00200$ .

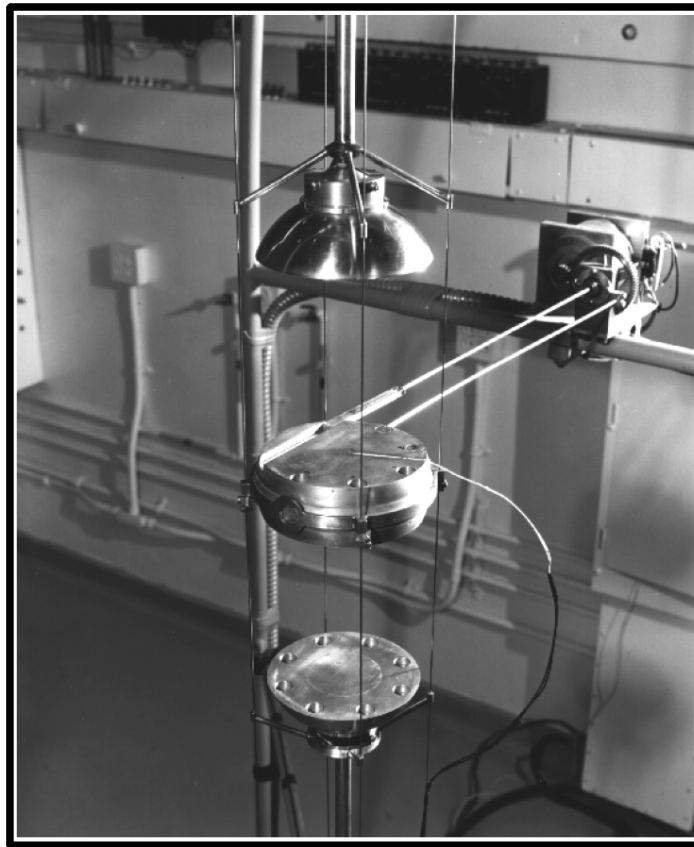


FIGURE 1.8: *Photo de l'assemblage Jezebel démonté*

## 1.5 Le code d'évaluation CONRAD

Cette partie présente de manière non-exhaustive le code d'évaluation CONRAD (*COde for Nuclear Reaction Analysis and Data Assimilation*) pour les données nucléaires. L'assimilation de données est l'ensemble des techniques qui permettent de combiner un modèle théorique et des observations (ou mesures). D'un côté, le modèle consiste à représenter un phénomène physique comme une section efficace. Et de l'autre, les données représentent une source d'information expérimentale. Comme déjà mentionné, le but de l'assimilation de données est de combiner modèles et données dans l'objectif de reproduire convenablement les expériences par la théorie. Un cas d'école d'ajustement est, par exemple, de faire passer une droite par des points expérimentaux (régression linéaire).

Les premiers développements du code ont vu le jour en 2005 au SPRC/LEPh du CEA de Cadarache. Ils avaient pour objectif l'évaluation des réactions nucléaires et la propagation des incertitudes pour des énergies allant de l'eV au MeV [40, 41]. CONRAD permet donc de traiter le domaine des résonances résolues (approximation du formalisme de la matrice  $R$  : Reich-Moore et Multi-Level Breit-Wigner), le domaine des résonances non-résolues (*average R-Matrix* et théorie d'Hauser-Feshbach), et le domaine du continuum (interfaces avec ECIS [42] et TALYS [43]). Aujourd'hui, le code est généralisé à d'autres modèles autres que des sections efficaces, comme par exemple les spectres de fission de neutrons prompts [44] ou des modèles de fission [45]. CONRAD est développé en C++ et peut faire intervenir d'autres programmes écrits dans des langages différents. Le code est constitué d'une bibliothèque dynamique *conradlib* et d'un exécutable *conradtui* permettant d'exploiter les fonctionnalités de la bibliothèque. La bibliothèque *conradlib* se décompose en plusieurs parties :

- un ensemble de classes d'analyses : ajustement déterministe, marginalisation déterministe et stochastique...
- un ensemble de classes théoriques : modèle de la matrice  $R$ -moyenne, formalisme de Reich-Moore (RRR)...
- un ensemble de classes expérimentales : traitement des expériences microscopiques (observables), expériences intégrales...
- un ensemble de classes d'interfaces, gérant les différentes interactions entre les ensembles décrits précédemment, et permettant le dialogue avec l'utilisateur.

La Figure 1.9 synthétise l'architecture de CONRAD. Les développements réalisés pendant cette thèse, présentés dans le Chapitre 2, se placent dans le cadre de l'analyse. Ce dernier est décrit de façon non exhaustive sur la Figure 1.10. On trouve notamment une méthode qui permet d'utiliser les moteurs d'ajustement de CONRAD en fournissant, en données d'entrée, les éléments nécessaires pour réaliser un ajustement (*Miscellaneous*). Ce développement a été utilisé lors de l'interprétation des expériences intégrales PROFIL (*cf.* Chapitre 5). Des

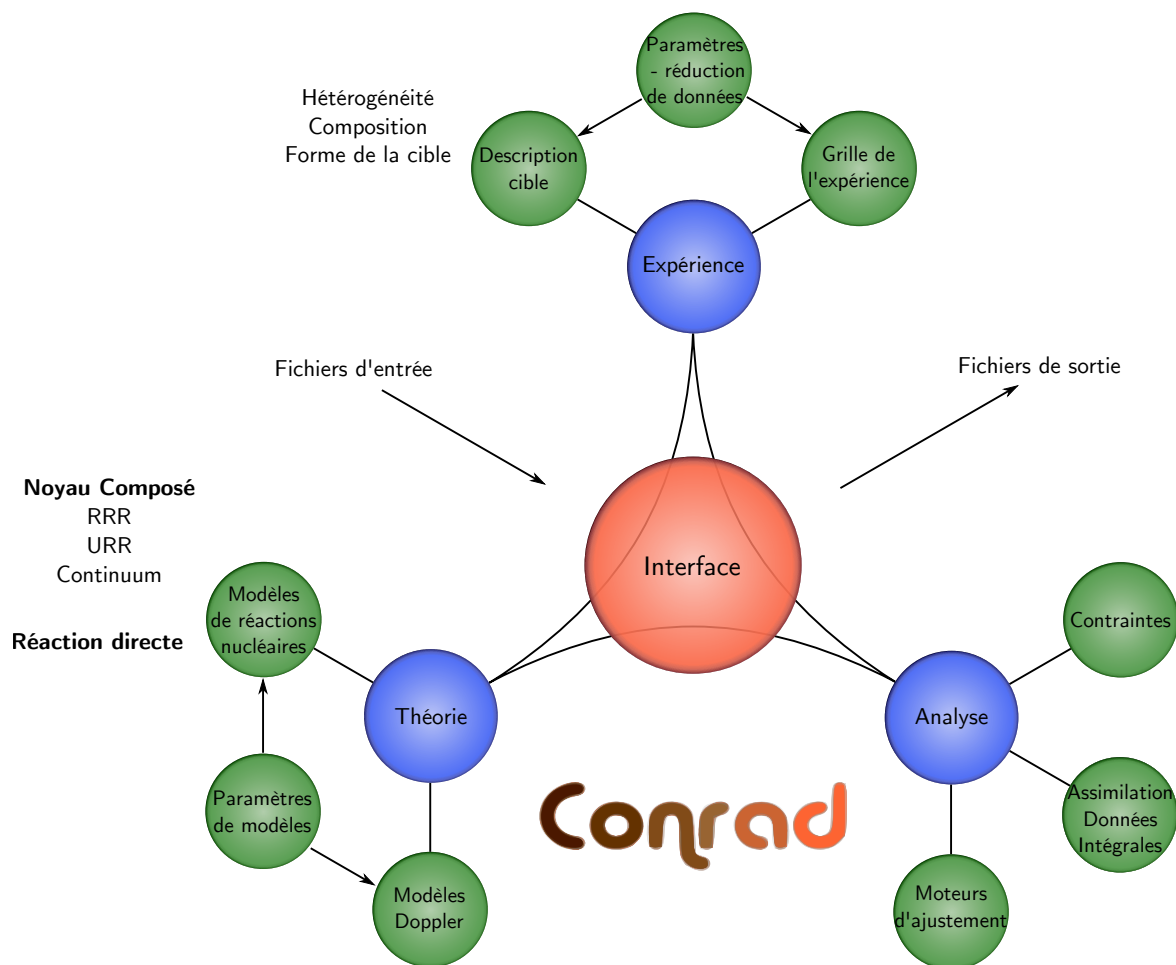


FIGURE 1.9: Schéma descriptif de CONRAD

méthodes d'ajustement stochastiques de type BMC (*Bayesian Monte Carlo*) et des méthodes d'ajustement avec contraintes développé dans ces travaux font l'objet des Chapitres 2 et 3.

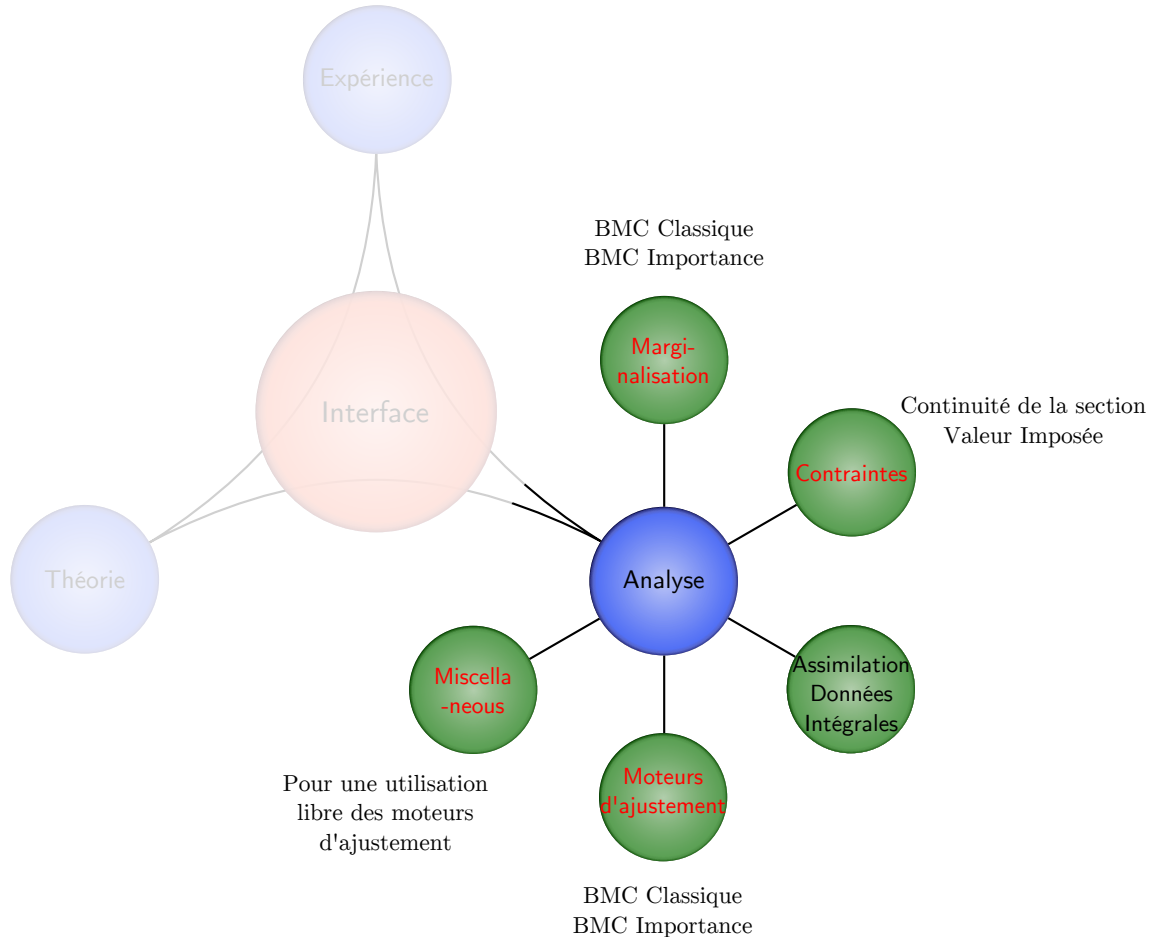


FIGURE 1.10: Description de la partie analyse de CONRAD

## 1.6 Les bases de données

La Section 1.2 fait l'état des lieux des différents formalismes des sections efficaces. Les informations liées à l'évaluation doivent être retranscrites dans des fichiers universels, afin de permettre à n'importe quel utilisateur de les utiliser. Ce format contient, entre autres, les informations relatives aux sections efficaces. Il est appelé ENDF (*Evaluated Nuclear Data Formats*). Il existe un fichier par isotope. Une première partie décrit ce format pour les fichiers évalués. Une deuxième partie est consacrée aux différentes bibliothèques de données nucléaires disponibles, regroupant ces fichiers ENDF selon les pays et les évaluateurs.

### 1.6.1 Un format universel : ENDF

Le système de fichier ENDF a été développé pour conserver et mettre à disposition les données nucléaires évaluées, pour les applications nucléaires comme la neutronique. Il permet de conserver de nombreuses informations selon le domaine d'application. L'évaluateur utilise ce format pour diffuser son évaluation. Le format ENDF [46] a été mis en place par le CSEWG (*Cross Section Evaluation Working Group*) et maintenu par la NNDC (*National Nuclear Data Center*) aux États-Unis. Le format ENDF fournit, entre autres, les représentations des sections efficaces, les distributions angulaires et énergétiques, la production des photons due aux interactions neutrons-matière, quelques données sur l'émission des particules chargées due aux interactions neutroniques, les données de diffusion du neutron à l'énergie thermique, les constantes de désintégration et les rendements de fission.

Les fichiers ENDF sont au format ASCII. Chaque fichier décrit un isotope et se décompose en parties appelées MF (ou *Files*). Chaque MF se subdivise en sections, appelées MT, correspondant à une réaction donnée. Seules les *files* utiles pour les calculs neutroniques sont décrites ici.

- La MF1 donne les informations générales sur l'évaluation où l'on peut trouver un historique des modifications effectuées sur l'évaluation en question. Les spectres de fission  $\gamma$  sont décrits également.
- La MF2 ne contient que la section MT151. Elle décrit la liste des paramètres de résonances pour le domaine des résonances résolues (RRR) et le domaine des résonances non-résolues (URR), ainsi que la représentation des résonances employée (Single Level Breit-Wigner, Reich-Moore...).
- La MF3 décrit les sections efficaces ponctuelles en fonction de l'énergie du neutron incident pour toutes les réactions. Chaque réaction à un numéro MT associé. Par exemple, les données sur les sections de capture radiative sont fournies dans la section MT102. Le Tableau 1.2 montre les principales réactions décrites dans cette *file*.
- La MF4 (décomposée en plusieurs MT) fournit les distributions angulaires pour les réactions nucléaires aboutissant à l'émission d'un neutron, sous forme de polynômes de Legendre. La section élastique (MT2) et les sections inélastiques discrètes (MT51 à MT90) sont décrits dans cette *file* par exemple.
- La MF5 regroupe les distributions énergétiques pour les réactions nucléaires aboutissant à l'émission d'un neutron. Par exemple, on y trouve la distribution en énergie des neutrons émis lors de la réaction  $(n,2n)$  selon l'énergie incidente du neutron.
- La MF6 décrit les distributions angulo-énergétiques des particules émises après une réaction neutronique. Par exemple, on trouve la distribution angulaire des particules  $\alpha$  émises après une réaction de type  $(n,\alpha)$ .

Tableau 1.2: *Description non-exhaustive des sections de la file 3*

MF3	Nom de la section efficace	Symbole
MT1	Totale	(n,tot)
MT2	Élastique	(n,n)
MT4	Inélastique totale	(n,n')
MT16	Capture puis émission de deux neutrons	(n,2n)
MT18	Fission	(n,f)
MT(50 à 90)	Inélastiques discrètes	(n,n' <sub>k</sub> )
MT91	Inélastique continuum	(n,nc)
MT102	Capture radiative	(n, $\gamma$ )
MT103	Capture puis émission d'un proton	(n,p)
MT107	Capture puis émission d'un $\alpha$	(n, $\alpha$ )

- La MF32 fournit les covariances associées aux paramètres de résonances (MT151).
- La MF33 fournit les covariances associées aux sections ponctuelles des différentes MT présentes dans la MF3. Les données fournies dans cette *file* sont destinées à un post-traitement afin d'obtenir des matrices de variance-covariance multigroupes.

La MF33 est finalement la *file* indispensable pour la propagation d'incertitudes pour les réacteurs à neutrons rapides. Effectivement, cette *file* regroupe les matrices de variance-covariance associées aux énergies supérieures au keV, énergies typiques de ces réacteurs.

### 1.6.2 Les bibliothèques de données nucléaires

Il existe de nombreux fichiers d'évaluation pour les différents isotopes. Ces fichiers sont généralement regroupés dans des bibliothèques de données nucléaires. Elles peuvent être lues et utilisées par un certain nombre de codes. Il existe plusieurs bibliothèques de données évaluées, les principales utilisées aujourd'hui par les physiciens des réacteurs sont les suivantes :

- **JEFF** (*Joint Evaluated Fission and Fusion File*) est une bibliothèque internationale de données nucléaires gérée par la NEA. Les objectifs de cette bibliothèque sont de fournir des données pour la fission et la fusion. La dernière bibliothèque regroupe 472 noyaux. La dernière version en date est JEFF-3.2 [47] (2014). La version JEFF-3.1.1 est principalement utilisée dans le présent document.
- **ENDF** (*Evaluated Nuclear Data File*) est la bibliothèque nord américaine contenant 14 sous-bibliothèques de données nucléaires (réaction protonique, neutronique, photo-nucléaire...). 400 matériaux sont décrits dans ces bibliothèques. La dernière version en



date est ENDF/B-VII.1 [48] (2011).

- **JENDL** (*Japanese Evaluated Nuclear Data Library*) contient 406 matériaux et regroupe l'ensemble des données nucléaires neutroniques. La dernière version en date est JENDL-4.0 [49] (2010).
- **RUSFOND** (*RUSsian File Of evaluated Neutron Data*) est la bibliothèque russe de données évaluées pour la neutronique, contenant 686 matériaux. La dernière version en date est RUSFOND-2010 [50] (2010).
- **CENDL** (*Chinese Evaluated Nuclear Data Library*) est la bibliothèque chinoise contenant les fichiers évalués pour les réactions neutroniques. Elle contient 240 matériaux. La dernière version en date est CENDL-3.1 [51] (2009).

L'ensemble de ces bibliothèques contient des fichiers évalués, structurés au format ENDF-6 [46]. Ces bibliothèques ne regroupent pas toujours les paramètres qui permettent de traiter les sections efficaces et de générer des données qui pourront ensuite être utilisées par les codes résolvant l'équation du transport neutronique (*cf.* Chapitre 4 pour la description des outils de pré-traitement des fichiers évalués). D'ailleurs, une des principales difficultés que l'on rencontre lorsque l'on souhaite travailler dans le continuum, est l'absence de ces paramètres. En effet, les évaluations à haute énergie sont réalisées historiquement pour des applications militaires et versées pour le civil sous le format de sections efficaces ponctuelles. On ne dispose donc que rarement des paramètres de modèles dans le continuum.

Parfois, les informations des matrices de variance-covariance dans les différentes bibliothèques ne sont pas indiquées. Ainsi, il est possible de trouver d'autres bases de données contenant des informations sur les variances et les covariances. Voici les trois principales bases que l'on trouve :

- **COMAC** (*COvariance MATrices of Cadarache*) est une base de données de covariance gérée par le CEA de Cadarache et qui est associée à la bibliothèque de données évaluées JEFF [52].
- **COMMARA** (*COvariance Multigroup Matrix for Advanced Reactor Applications*) est la base de variance covariance intégrée à la sous bibliothèque américaine des réactions neutroniques de ENDF [53].
- **BOLNA** (*BNL, ORNL, LANL, NRG, AN*) est une bibliothèque issue d'une collaboration entre laboratoires américains et hollandais. Les données fournies sont une compilation d'un ensemble de matrices de variance-covariance issues de ces différents laboratoires [54].

## 1.7 Synthèse

Dans ce chapitre, nous avons pu décrire les différents éléments intervenant dans le monde de l'évaluation.

L'amélioration des données nucléaires évaluées pour la physique des réacteurs nucléaires permet de déterminer avec une meilleure précision les paramètres neutroniques. On a vu que la bonne connaissance traduite dans une base de données, comme JEFF, repose sur quatre grands piliers :

- la présence de nombreuses expériences microscopiques permettant de décrire la forme des sections efficaces ;
- la présence des expériences intégrales permettant de compléter les expériences microscopiques en donnant une idée du niveau de la section avec une gestion rigoureuse des incertitudes ;
- des modèles théoriques qui permettent de produire un ensemble de sections efficaces cohérent pour les différentes énergies des particules incidentes qui intéressent la physique des réacteurs (de  $10^{-5}$  eV à 20 MeV) ;
- un moteur d'ajustement efficace et complet permettant l'évaluation des données nucléaires alliant les expériences microscopiques ou intégrales aux modèles théoriques.

Ainsi, pour répondre aux exigences de sûreté notamment, il est nécessaire de mener une bataille sur quatre fronts :

- réaliser de nouvelles expériences afin de pouvoir cibler des réactions nucléaires clés pour la réduction d'incertitude sur les paramètres de sûreté ;
- développer de nouveaux outils et modèles théoriques pour une maîtrise croissante en terme de modélisation physique ;
- développer des codes d'évaluation et des outils d'ajustement pour produire des évaluations plus pertinentes avec les incertitudes associées.

Le prochain chapitre traite des travaux apportés au code CONRAD d'évaluation dans le cadre de l'analyse, sur les méthodes associées à l'inférence Bayésienne.



# Méthodes de résolution de l'inférence Bayésienne

---

## Sommaire

<b>2.1</b>	<b>Principes généraux de l'inférence Bayésienne . . . . .</b>	<b>40</b>
<b>2.2</b>	<b>Résolution analytique . . . . .</b>	<b>41</b>
<b>2.3</b>	<b>Résolution stochastique . . . . .</b>	<b>43</b>
2.3.1	Méthode Classique . . . . .	43
2.3.2	Méthode avec Importance . . . . .	47
<b>2.4</b>	<b>Exemples et cas de validation . . . . .</b>	<b>48</b>
2.4.1	Cas didactique n°1 : URR $^{238}\text{U}$ . . . . .	48
2.4.2	Cas didactique n°2 : RRR $^{155}\text{Gd}$ . . . . .	56
<b>2.5</b>	<b>Traitement des incertitudes systématiques . . . . .</b>	<b>59</b>
2.5.1	Méthode Analytique . . . . .	59
2.5.2	Méthodes stochastiques . . . . .	60
2.5.3	Exemple de l' $^{238}\text{U}$ . . . . .	65
<b>2.6</b>	<b>Synthèse . . . . .</b>	<b>68</b>

---

Le cœur même de l'évaluation, où expériences et théories se rencontrent, repose sur l'inférence Bayésienne, comme nous avons pu le voir dans le Chapitre 1. Cette partie fait intervenir des notions de mathématiques et de statistiques, permettant de trouver le meilleur compromis entre la connaissance *a priori* et les nouvelles données expérimentales. L'inférence Bayésienne, souvent utilisée par les évaluateurs, est une méthode qui a fait ses preuves par le passé. En théorie, l'inférence Bayésienne permet d'obtenir les distributions *a posteriori*, dont découlent les moments de la distribution. Ce sont les deux premiers moments, c'est-à-dire les valeurs des paramètres et leurs incertitudes, qui sont intéressants en pratique, d'une part pour les calculs de sections efficaces et de leurs incertitudes, et d'autre part pour la propagation d'incertitudes sur les grandeurs neutroniques. Une première partie décrit les principes généraux de l'inférence Bayésienne. Cette dernière méthode était déjà implémenté

dans le code CONRAD avant ces travaux. Puis une méthode analytique traditionnellement utilisée est détaillée. Les développements réalisés, dans le cadre de cette thèse, concernent de nouvelles méthodes de type Monte Carlo. Elles permettent de résoudre l'inférence Bayésienne à l'aide d'une simulation stochastique. Des exemples viendront illustrer les différents algorithmes, en reprenant notamment l'expérience d'Uttley vue au Chapitre 1 sur la section efficace totale de  $^{238}\text{U}$ . Un cas utilisant le formalisme de la matrice R sur le  $^{155}\text{Gd}$  sera également présenté, afin de mettre en avant certaines limitations des méthodes stochastiques. Enfin, les traitements des incertitudes systématiques sont présentés dans une dernière partie, avec différentes résolutions : analytique, semi-stochastique et stochastique. Ces travaux sur les différentes méthodes stochastiques présentées dans ce Chapitre ont été implémentées dans le code CONRAD.

## 2.1 Principes généraux de l'inférence Bayésienne

L'inférence Bayésienne fait intervenir des distributions de probabilité. L'estimation des paramètres de modèles [55] s'appuie sur le théorème de Bayes [3], généralisé à des densités de probabilité continues des paramètres de modèles :

$$p(\vec{x}|\vec{y},U) = \frac{p(\vec{x},U) \cdot p(\vec{y}|\vec{x},U)}{\int p(\vec{x},U) \cdot p(\vec{y}|\vec{x},U) d\vec{x}} \quad (2.1)$$

avec  $\vec{x}$  les paramètres de modèles,  $\vec{y}$  les valeurs expérimentales et  $U$  représentant la connaissance *a priori* des paramètres de modèles.

Trois termes apparaissent :

- $p(\vec{x}|U)$  est la densité de probabilité rendant compte de la connaissance préalable des paramètres  $\vec{x}$ . Elle est appelée densité *a priori*.
- $p(\vec{y}|\vec{x},U)$  est la probabilité des mesures pour une valeur donnée des paramètres. C'est la fonction de *vraisemblance*, également appelée *likelihood* en anglais. Elle rend compte de la cohérence entre les modèles théoriques et les valeurs expérimentales  $\vec{y}$ .
- $p(\vec{x}|\vec{y},U)$  est la densité de probabilité conditionnelle, appelée densité *a posteriori*. Elle représente la connaissance que l'on peut avoir des paramètres, en prenant compte de l'information *a priori* combinée à celle contenue dans les données expérimentales via la fonction de vraisemblance.

Le dénominateur de l'expression de l'Équation (2.1) est une simple normalisation. Il assure que l'intégrale de la densité de probabilité soit égale à 1. Cette relation peut être simplifiée comme suit :

$$\text{posterior } [p(\vec{x}|\vec{y},U)] \propto \text{prior } [p(\vec{x},U)] \cdot \text{vraisemblance } [p(\vec{y}|\vec{x},U)] \quad (2.2)$$

Plusieurs méthodes sont disponibles pour estimer les paramètres *a posteriori*. La première étape est de déterminer les densités de probabilité choisies pour l'*a priori* et la fonction de *vraisemblance*. Pour ce faire, on utilise le principe de maximum d'entropie au sens de Shannon [56] : la distribution gaussienne est la plus probable lorsque les deux premiers moments sont connus. Ainsi, on obtient les deux expressions suivantes :

- la distribution *a priori* des paramètres de modèles suit une loi gaussienne multivariée centrée en  $\vec{x}_{prior}$  et de covariance  $M_x^{prior}$  :

$$prior \propto \exp \left[ -\frac{1}{2} (\vec{x} - \vec{x}_{prior})^T M_x^{prior^{-1}} (\vec{x} - \vec{x}_{prior}) \right] \quad (2.3)$$

- la fonction de vraisemblance suit une loi gaussienne centrée sur la mesure  $\vec{y}$  et de covariance  $M_E$ . On note  $t(\vec{x})$  les valeurs données par les modèles théoriques, fonctions des paramètres. La fonction de vraisemblance s'écrit alors comme suit :

$$vraisemblance \propto \exp \left[ -\frac{1}{2} (\vec{t}(\vec{x}) - \vec{y})^T M_E^{-1} (\vec{t}(\vec{x}) - \vec{y}) \right] \quad (2.4)$$

L'objectif de l'ajustement est de trouver les deux premiers moments de la variable aléatoire multivariée  $\vec{x}_{post}$  et, si possible, la distribution associée.

## 2.2 Résolution analytique

L'hypothèse de prendre une distribution gaussienne pour l'*a priori* est ici indispensable à la résolution analytique. Les algorithmes présentés ici sont développés sur cette base. En utilisant l'approximation de Laplace [57], on suppose que la densité de probabilité *a posteriori* suit également une gaussienne, centrée en  $\vec{x}_{post}$ , de covariance  $M_{\vec{x}_{post}}$  :

$$posterior \propto prior \cdot vraisemblance \propto \exp \left[ -\frac{1}{2} (\vec{x} - \vec{x}_{post})^T M_x^{post^{-1}} (\vec{x} - \vec{x}_{post}) \right] \quad (2.5)$$

Selon cette approximation, les valeurs des paramètres *a posteriori* les plus probables sont données par le maximum de la distribution  $prior \cdot vraisemblance$ . On souhaite donc maximiser le terme exponentiel de l'Équation (2.5). Cela revient à minimiser une fonction coût, appelée également fonction des moindres-carrés généralisée, définie par :

$$\chi_{GLS}^2 = (\vec{x} - \vec{x}_{prior})^T \cdot M_x^{prior^{-1}} \cdot (\vec{x} - \vec{x}_{prior}) + (\vec{t}(\vec{x}) - \vec{y})^T \cdot M_E^{-1} \cdot (\vec{t}(\vec{x}) - \vec{y}), \quad (2.6)$$

où GLS est l'abréviation de **G**eneralized **L**east **S**quare (méthode généralisée des moindres carrés). La résolution de ce problème de minimisation passe par l'utilisation d'une méthode de Gauss-Newton [58]. Dans la plupart des cas, et surtout si les modèles sont linéaires, le résultat obtenu correspond à l'optimum de la fonction coût. La méthode de Newton utilise

le gradient et la matrice Hessienne de la fonction coût. Le gradient  $\gamma$  est défini selon la formulation suivante :

$$\gamma(\vec{x}) = \frac{\partial \chi}{\partial \vec{x}} = 2 \left[ G^T M_y^{-1} (t(\vec{x}) - \vec{y}) + M_x^{prior^{-1}} (\vec{x} - \vec{x}_{prior}) \right] \quad (2.7)$$

avec  $G_{ij} = \frac{\partial t_i}{\partial \vec{x}_j}(\vec{x})$ . La matrice Hessienne, quant à elle, est définie selon l'expression suivante :

$$H_{ij}(\vec{x}) = \frac{\partial^2 \chi}{\partial \vec{x}_i \partial \vec{x}_j}(\vec{x}) = \frac{\partial \gamma_i}{\partial \vec{x}_j}(\vec{x}) \quad (2.8)$$

D'où :

$$H(\vec{x}) = 2 \cdot \left[ M_x^{prior^{-1}} + G^T M_y^{-1} G + \frac{\partial G}{\partial \vec{x}}(\vec{x}) M_y^{-1} (t(\vec{x}) - \vec{y}) \right] \quad (2.9)$$

Le dernier terme de la matrice Hessienne  $\frac{\partial G}{\partial \vec{x}}(\vec{x}) M_y^{-1} (t(\vec{x}) - \vec{y})$  est souvent considéré négligeable, car il contient des valeurs faibles et de signes aléatoires [59]. Ainsi, par simplification, on obtient la relation suivante :

$$H(\vec{x}) = 2 \cdot \left[ M_x^{prior^{-1}} + G^T M_y^{-1} G \right] \quad (2.10)$$

La méthode de Gauss-Newton consiste à linéariser autour de  $\vec{x}_{prior}$  et à faire des itérations sur les paramètres  $\vec{x}$ . C'est-à-dire qu'à la n-ième itération, on a :

$$\vec{x}^{(n)} = \vec{x}^{(n-1)} - H^{(n-1)^{-1}} \cdot \gamma(\vec{x}^{(n-1)}) \quad (2.11)$$

avec  $\vec{x}^{(0)} = \vec{x}_{prior}$ . La matrice de covariance *a posteriori* est alors donnée par la formule ci-dessous :

$$M_x^{post} = M_x^{(n)} = \left[ M_x^{prior^{-1}} + G_{(n-1)}^T \cdot M_E^{-1} \cdot G_{(n-1)} \right]^{-1} \quad (2.12)$$

Les paramètres *a posteriori*, quant-à-eux, sont obtenus selon la relation suivante :

$$\vec{x}^{(n)} = \vec{x}_{prior} + M_x^{(n)} \cdot G_{(n-1)}^T \cdot M_E^{-1} \cdot \left[ \vec{y} - \vec{t}_{(n-1)} - G_{(n-1)} \cdot (\vec{x}_{prior} - \vec{x}^{(n-1)}) \right] \quad (2.13)$$

Le critère d'arrêt des itérations est choisi afin d'obtenir une variation de la fonction coût entre deux itérations suffisamment faible.

## 2.3 Résolution stochastique

CONRAD disposait des outils de résolution analytique décrits dans la section précédente. Cependant, certaines hypothèses ont été réalisées. Notamment, pour le cas de l'ajustement de paramètres à l'aide d'une méthode des moindres carrés, les hypothèses suivantes sont considérées :

- utilisation de distribution gaussiennes pour l'*a priori* et la *vraisemblance* ;
- l'approximation de Laplace sur la distribution *a posteriori* ;
- la linéarisation du gradient autour du *prior* ;
- le terme d'ordre 2 négligé lors du développement des équations de la méthode Gauss-Newton.

Afin de pouvoir, d'une part valider les méthodes d'ajustement, et d'autre part déterminer les distributions *a posteriori*, on introduit une méthode appelée BMC (*Bayesian Monte Carlo*). Cette technique, répandue dans le domaine de l'inférence Bayésienne, a été appliquée récemment dans le domaine de l'évaluation des données nucléaires, notamment par Donald L. Smith [60]. La méthode BMC dite Classique pour l'ajustement des paramètres, est décrite dans une première partie. Elle correspond à une traduction mathématique simple, dont la solution repose, au final, sur une intégration par la méthode Monte Carlo. Une seconde partie présente la méthode dite Importance. Cette dernière permet de pallier certains problèmes usuels d'un point de vue numérique. Elle permet également une convergence plus rapide des algorithmes. Une troisième méthode, de type Metropolis est mentionnée en Annexe C. Dans la suite du manuscrit, les échantillonnages sont réalisés selon la méthode LHS (*Latin Hypercube Sampling*) [61].

### 2.3.1 Méthode Classique

Il a été présenté, dans la Section 2.2 de ce chapitre, le formalisme de l'ajustement des paramètres de modèles avec l'introduction d'une fonction coût. Il est possible de se placer dans un cadre entièrement stochastique via des outils Monte Carlo. On utilise comme point de départ l'inférence Bayésienne décrite dans l'Équation (2.1). On suppose également, afin de pouvoir comparer les différentes méthodes, que les distributions *a priori* suivent une loi gaussienne. Nous verrons, par la suite, que rien ne nous empêche d'utiliser d'autres lois.

Pour retrouver les résultats des méthodes analytiques, il est nécessaire de déterminer les deux premiers moments de la densité de probabilité *a posteriori*. Par définition, la valeur



moyenne  $\langle \vec{x} \rangle$  de la densité de probabilité *a posteriori* s'écrit :

$$\langle \vec{x} \rangle = \int \vec{x} \cdot p(\vec{x}|\vec{y}, U) d\vec{x} = \int \vec{x} \cdot \frac{p(\vec{x}|U) \cdot (\vec{y}|\vec{x}, U)}{\int p(\vec{x}|U) \cdot (\vec{y}|\vec{x}, U) d\vec{x}} d\vec{x} \quad (2.14)$$

Par ailleurs, la covariance  $\text{cov}(x_i, x_j)$  de la densité de probabilité *a posteriori* s'écrit :

$$\text{cov}(x_i, x_j) = \int x_i \cdot x_j \cdot p(\vec{x}|\vec{y}, U) d\vec{x} - \langle x_i \rangle \langle x_j \rangle \quad (2.15)$$

Or, de façon plus générale, on sait que si  $p(\vec{x})$  est une densité de probabilité continue sur  $\mathbb{R}$ , et  $f(\vec{x})$  une fonction continue sur  $\mathbb{R}$ , alors :

$$\int p(\vec{x}) \cdot f(\vec{x}) d\vec{x} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left( \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n f(\vec{x}_k) \right) \quad (2.16)$$

avec les  $\vec{x}_k$  distribués selon la densité de probabilité  $p(\vec{x})$ . Cette expression est souvent utilisée, notamment pour calculer des intégrales via la méthode Monte Carlo [57]. D'après l'Équation (2.14) et l'Équation (2.15), la moyenne  $\langle \vec{x} \rangle$  est obtenue selon l'expression suivante :

$$\langle \vec{x} \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \left( \frac{\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \vec{x}_k \cdot p(\vec{y}_k|\vec{x}_k, U)}{\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n p(\vec{y}_k|\vec{x}_k, U)} \right) \quad (2.17)$$

Et la covariance, entre les  $i^{\text{ème}}$  et  $j^{\text{ème}}$  paramètres de  $\vec{x}$ , est donnée par :

$$\text{cov}(x_i, x_j) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left( \frac{\sum_{k=1}^n x_{i,k} \cdot x_{j,k} \cdot p(\vec{y}_k|\vec{x}_k, U)}{\sum_{k=1}^n p(\vec{y}_k|\vec{x}_k, U)} \right) - \langle x_i \rangle \langle x_j \rangle \quad (2.18)$$

Ces sommes sont calculées en prenant un échantillonnage des  $\vec{x}$  selon la densité de probabilité de l'*a priori*. Les équations précédentes permettent d'obtenir les valeurs moyennes et les covariances associées à la distribution *a posteriori* à l'aide d'une simulation de type Monte Carlo. Pour cela, la procédure consiste à réaliser  $N_x$  tirages aléatoires des paramètres. Afin de s'approcher au mieux de la solution, il est nécessaire de prendre  $N_x$  suffisamment grand. On rappelle, une fois encore, que ces tirages aléatoires sont réalisés de telle manière que les densités de probabilité des paramètres respectent la connaissance *a priori*. C'est-à-dire que les paramètres seront échantillonnés selon la densité de probabilité de chaque paramètre *a priori*. Soit  $k \in \llbracket 1; N_x \rrbracket$  un tirage aléatoire tel que :

$$\vec{x}_k = \vec{x}_{\text{prior}} + C\vec{r} \quad (2.19)$$

avec  $C$  la matrice de Cholesky définie telle que  $M_x^{prior} = CC^T$  et  $\vec{r}$  un vecteur aléatoire généré selon une loi gaussienne multivariée centrées réduites  $\mathcal{N}(0,1)$ , si l'on se place dans l'hypothèse d'un *a priori* de type gaussien.

À la suite des tirages stochastiques, il est possible de reconstruire la matrice de variance-covariance et la valeur moyenne des paramètres échantillonnés. L'estimation passe par une statistique et un comptage des événements. Elles sont données par les relations suivantes :

$$\langle x_i \rangle_{N_x} = \frac{1}{N_x} \sum_{k=1}^{N_x} x_{i,k} \quad (2.20)$$

$$\left( M_x^{prior} \right)_{ij}^{N_x} = \frac{1}{N_x} \sum_{k=1}^{N_x} x_{i,k} x_{j,k} - \langle x_i \rangle_{N_x} \langle x_j \rangle_{N_x} \quad (2.21)$$

avec  $x_i$  et  $x_j$  les  $i^{\text{ème}}$  et  $j^{\text{ème}}$  paramètres ajustés du vecteur  $\vec{x}$ . On vérifie alors que l'*a priori* est bien échantillonné. La convergence de la valeur moyenne évolue comme l'inverse de la racine carrée du nombre d'échantillons. Le problème sera donc de bien gérer l'*a posteriori* et sa convergence.

D'après l'Équation (2.17) et pour  $N_x$  suffisamment grand, les valeurs moyennes des paramètres *a posteriori* sont données par :

$$\langle x_i \rangle_{N_x} = \frac{\sum_{k=1}^{N_x} x_{i,k} p(\vec{y}_k | \vec{x}_k, U)}{\sum_{k=1}^{N_x} p(\vec{y}_k | \vec{x}_k, U)} \quad (2.22)$$

La covariance entre le  $i^{\text{ème}}$  et le  $j^{\text{ème}}$  paramètre est obtenue selon la définition de la covariance donnée par :

$$Cov(x_i, x_j)_{N_x} = \left( M_x^{post} \right)_{ij}^{N_x} = \frac{\sum_{k=1}^{N_x} x_{i,k} \cdot x_{j,k} \cdot p(\vec{y}_k | \vec{x}_k, U)}{\sum_{k=1}^{N_x} p(\vec{y}_k | \vec{x}_k, U)} - \langle x_i \rangle_{N_x} \langle x_j \rangle_{N_x} \quad (2.23)$$

L'estimation des valeurs moyennes et des covariances *a posteriori* peut se comprendre comme une pondération des  $\vec{x}$  suivant la distribution *a priori*, par la *vraisemblance*. Ainsi, on peut résumer le principe selon les quatre points suivants :

1. On échantillonne aléatoirement les paramètres selon la densité de probabilité de l'*a priori*;

2. Si on obtient des valeurs calculées théoriques proche de l'expérience, alors la *vraisemblance* sera proche de sa valeur maximale, donnant ainsi un poids important à ce jeu de paramètres ;
3. Si les valeurs calculées sont éloignées des valeurs expérimentales, alors la *vraisemblance* prendra une valeur faible ;
4. Finalement, le grand nombre d'échantillonnage autour du *prior* donne un poids important aux valeurs de ce dernier dans l'estimation des paramètres *a posteriori* en augmentant la statistique. Les échantillonnages correspondant au maximum de la *vraisemblance* donneront de l'importance aux paramètres dont les valeurs calculées sont proches des valeurs expérimentales.

La méthode satisfait ainsi un équilibre entre la connaissance *a priori* et les nouvelles données représentées par une *vraisemblance*. Le schéma de principe de l'algorithme est décrit sur la Figure 2.1.

Enfin, l'évaluateur pourra utiliser cette méthode pour deux types d'activité :

- soit pour une première estimation des paramètres, le *prior* est choisi non-informatif, c'est-à-dire avec des incertitudes importantes et/ou une distribution uniforme ;
- soit pour mettre à jour des paramètres, en se basant sur une évaluation antérieure et en utilisant une nouvelle expérience pour améliorer les connaissances sur ces paramètres *a priori*.

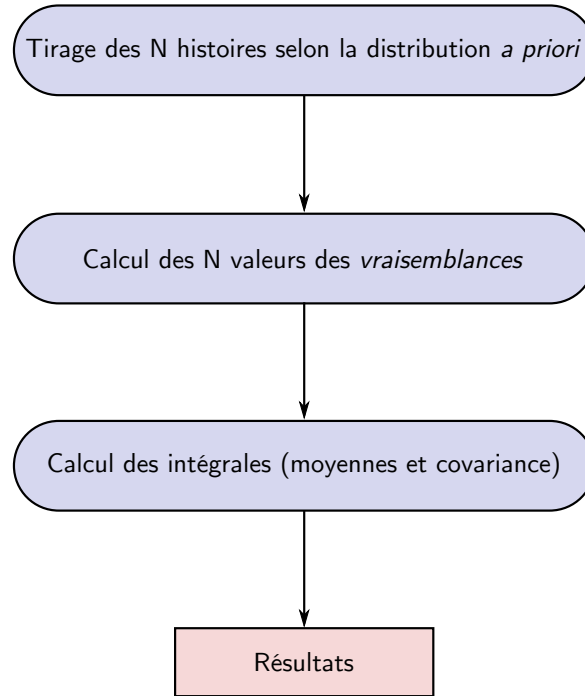


FIGURE 2.1: Schéma de principe de l'algorithme BMC (Classique)

### 2.3.2 Méthode avec Importance

L'intégrale d'une fonction  $f(\vec{x})$  par une densité de probabilité  $p(\vec{x})$  n'est pas toujours facile à obtenir. La première idée était de calculer cette intégrale en distribuant selon la densité de probabilité du *prior*  $p(\vec{x}|U)$ . Or, dans les cas où le *prior* est loin de la solution, l'algorithme décrit précédemment demandera beaucoup plus d'histoires pour converger, puisque l'on va se retrouver avec un échantillonnage au mauvais endroit donnant de faibles valeurs de la *vraisemblance*. C'est pourquoi il est intéressant d'introduire une fonction importance  $p_{bias}(\vec{x})$  pour accélérer la convergence :

$$p(\vec{x}) = \frac{p(\vec{x})}{p_{bias}(\vec{x})} \cdot p_{bias}(\vec{x}) \quad (2.24)$$

Ainsi, en reprenant l'Équation (2.16) où intervient la définition de l'intégration par méthode stochastique, on obtient :

$$\int \frac{p(\vec{x}) \cdot f(\vec{x})}{p_{bias}(\vec{x})} \cdot p_{bias}(\vec{x}) d\vec{x} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left( \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \frac{p(\vec{x}_k)}{p_{bias}(\vec{x})} \cdot f(\vec{x}_k) \right) \quad (2.25)$$

La différence avec la méthode Classique réside, d'une part dans le calcul du terme supplémentaire  $\frac{p(\vec{x})}{p_{bias}(\vec{x})}$ , et d'autre part dans la distribution utilisée pour l'échantillonnage. Dans le

cas présenté ici,  $N_x$  histoires sont échantillonnées selon la loi de distribution de la fonction d'importance. Le choix de cette fonction importance est déterminant. Plus elle est représentative de la solution, plus elle convergera. Dans ce manuscrit, la fonction importance utilisées à partir d'un ajustement analytique préalable :

- les valeurs moyennes de l'importance sont prises égales à celles de la distribution *a posteriori* du GLS ;
- les corrélations entre les paramètres sont prises égales à celles de l'*a priori* ;
- les incertitudes de l'importance sont prises égales au double de celles de la distribution *a posteriori* du GLS afin de rester conservatif.

L'Équation (2.22) permettant de calculer la valeur moyenne de  $\vec{x}$  devient :

$$\langle x_i \rangle_{N_x} = \frac{\sum_{k=1}^{N_x} x_{i,k} \cdot h(\vec{x}_k) \cdot p(\vec{y}_k | \vec{x}_k, U)}{\sum_{k=1}^{N_x} h(\vec{x}_k) \cdot p(\vec{y}_k | \vec{x}_k, U)} \quad (2.26)$$

avec  $h(\vec{x}_k) = \frac{p(\vec{x}_k | U)}{p_{bias}(\vec{x}_k)}$ . Cette fonction permet de prendre en compte le fait que l'échantillonnage ne suit pas la distribution *a priori*. Plus les tirages aléatoires, selon la fonction importance, sont proche de la distribution *a priori*, plus la fonction  $h$  sera grande. Ainsi, tout comme le cas Classique, la densité de probabilité de l'*a priori* est belle et bien prise en compte dans cette méthode.

L'Équation (2.26) est correcte pour un échantillonnage des  $\vec{x}_k$  selon la distribution de l'importance. Les covariances sont obtenues de manière similaire :

$$\left( M_x^{post} \right)_{ij}^{N_x} = \frac{\sum_{k=1}^{N_x} x_{i,k} \cdot x_{j,k} \cdot h(\vec{x}_k) \cdot p(\vec{y}_k | \vec{x}_k, U)}{\sum_{k=1}^{N_x} h(\vec{x}_k) \cdot p(\vec{y}_k | \vec{x}_k, U)} - \langle x_i \rangle_{N_x} \langle x_j \rangle_{N_x} \quad (2.27)$$

## 2.4 Exemples et cas de validation

### 2.4.1 Cas didactique n°1 : URR <sup>238</sup>U

Pour cette étude de cas simplifiée, l'expérience de transmission, décrite dans la Section 1.3.4 du Chapitre 1, est reprise. 16 des 34 points expérimentaux sont choisis, entre 20 keV et 175 keV. La borne inférieure correspond approximativement au domaine du non-résolu de

l'évaluation de l' $^{238}\text{U}$  de JEFF-3.1.1. Un unique modèle (URR) est utilisé pour modéliser l'ensemble de l'expérience (section totale de l' $^{238}\text{U}$ ). Pour simplifier les calculs et le modèle, seuls les 2 premiers moments angulaires sont pris en compte. Les valeurs  $J^\pi$  permises pour l' $^{238}\text{U}$  sont résumées dans le Tableau 2.1. Le rayon de voie et les deux fonctions forces sont récupérés dans les données de Mughabghab [62] et sont décrits dans le Tableau 2.2. Enfin, aucune corrélations est prise en compte, initialement, entre les paramètres *a priori*.

	$\ell$	$s$	$J^\pi$	$g_J$	onde
$^{238}\text{U} (0^+)$	0	1/2	1/2 <sup>+</sup>	1	$s$
	1	1/2	1/2 <sup>-</sup> 3/2 <sup>-</sup>	1 2	$p$

Tableau 2.1: Configuration de spins de l' $^{238}\text{U}$  pour des résonances d'onde  $s$  et  $p$

Paramètres	Valeurs
$a_c$	$9,6 \pm 0,1 \text{ fm}$
$S_0$	$1,290 \times 10^{-4} \pm 1,3 \times 10^{-5}$
$S_1$	$2,170 \times 10^{-4} \pm 1,9 \times 10^{-5}$

Tableau 2.2: Paramètres initiaux de l'URR choisis pour le cas didactique de l' $^{238}\text{U}$

Seulement deux paramètres sont ajustés, ce qui permet de faciliter la compréhension des résultats. Les paramètres  $S_0$  et  $S_1$  correspondent respectivement à la fonction force de moment angulaire  $\ell = 0$  et  $\ell = 1$  (cf. Section 1.2.3 du Chapitre 1). Ces deux paramètres permettent de piloter les deux principales sections efficaces pour les deux premiers moments angulaires prépondérant sur ce domaine en énergie. Afin de prendre en compte l'incertitude donnée sur le rayon de voie  $a_c$ , les incertitudes initiales des deux paramètres ajustés sont arbitrairement augmentées (à 15 %, ce qui constitue une connaissance non-informative). Ainsi,  $S_0 = 1,290 \times 10^{-4} \pm 1,935 \times 10^{-5}$  et  $S_1 = 2,170 \times 10^{-4} \pm 3,255 \times 10^{-5}$ . L'étude est simplifiée et utilise une incertitude statistique de 2 % sur chaque point expérimental. Ce cas permet de vérifier que les différents algorithmes convergent bien vers la même solution, dans un cas général où un des paramètres *a priori* se situe à environ  $3\sigma$  de la solution. Avec 16 points expérimentaux non-corrélés et une incertitude statistique de 2 % sur chacun des points, l'incertitude relative cible sur la section totale doit alors être réduite d'un facteur  $\sqrt{16} = 4$ .

Les différents algorithmes, présentés au début de ce Chapitre, sont comparés (GLS pour la méthode analytique, Classique pour la méthode BMC dite Classique, Importance pour la méthode dite Importance). Les cas stochastiques sont réalisés avec 1 million d'histoires. Le Tableau 2.3 témoigne de la cohérence entre les différentes méthodes :

- l'incertitude moyenne finale sur la section efficace totale  $\langle \delta_y \rangle$ , est réduite d'un facteur 4,3 dans les différentes études.
- la valeur moyenne des paramètres sont identiques. En conséquence, les sections efficaces le sont également. Une représentation de la section efficace totale de l'  $^{238}\text{U}$  avant et après ajustement est donnée en Figure 2.4.
- l'incertitude obtenue pour les paramètres  $S_0$  et  $S_1$  sont similaires à 1 % prêt. Ce léger écart est dû à un nombre d'histoires pas assez suffisant dans le cas de la méthode dite Classique. Cependant, cette faible différence ne se répercute pas au niveau des incertitude des sections efficaces.
- la corrélation entre les paramètres  $S_0$  et  $S_1$  est différente de 5 % pour la méthode Classique. Cet écart se justifie par un manque de convergence de la méthode, convergence plus longue lorsque l'on souhaite calculer une corrélation faisant intervenir deux grandeurs par rapport à la convergence de la valeur moyenne.

Les matrices de corrélations, représentatives de tous les sous cas, sur la section *a priori* et *a posteriori*, sont respectivement représentées sur les Figures 2.2 et 2.3. Elles sont obtenues en propageant les incertitudes des paramètres de modèles sur les sections efficaces. Une description de cette méthodologie est présentée en Annexe E. La présence d'une anti-corrélation de -0,446 au niveau des paramètres se répercute sur la matrice *a posteriori*, avec la création d'anti-corrélation au niveau de la section efficace. Cette dernière se comprend bien, puisque la section est sensible, au paramètre  $S_0$  pour les faibles énergies, et au paramètre  $S_1$  pour les hautes énergies. De plus, les effets respectivement à basse et à haute énergie de ces deux paramètres sont opposés.

Enfin, les algorithmes BMC permettent de visualiser les distributions des paramètres *a posteriori*. C'est un des avantages indéniables du Monte Carlo. Les distributions obtenues, dans le cas de la méthode BMC Classique, sont présentées sur les Figures 2.5 et 2.6. Leur forme est bien gaussienne. Les distributions *a posteriori* possèdent une largeur à mi-hauteur bien plus faible que les distributions *a priori*, montrant graphiquement la réduction d'incertitude obtenue.

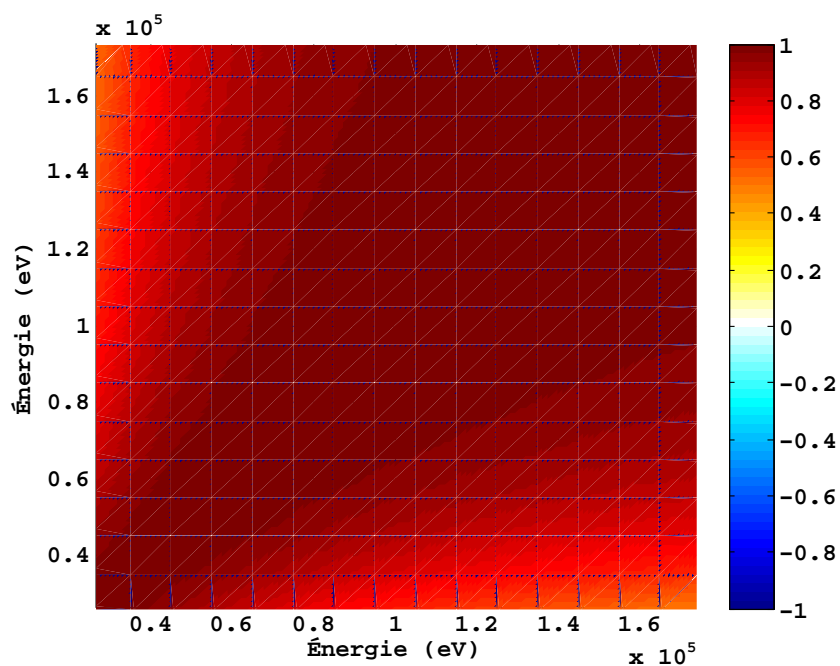
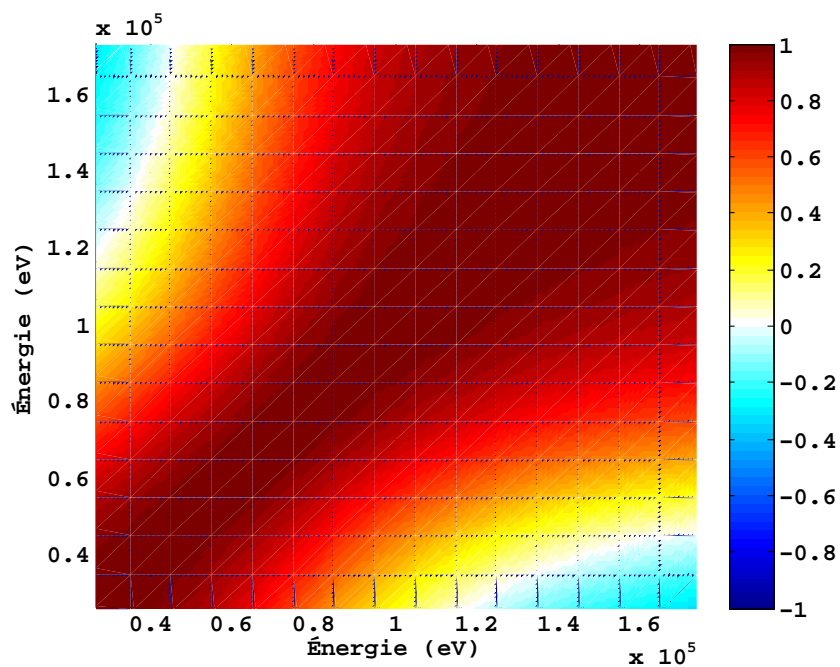
Les temps de calculs sont beaucoup plus long dans le cadre stochastique, multipliés par le nombre d'histoires simulées (ordre de grandeur). Cependant, les différents algorithmes convergent bien vers la même solution. Elle est plus rapide avec la méthode Importance que la Classique (*cf.* Figure 2.7). En effet, l'échantillonnage est réalisée selon la distribution de l'Importance, qui est proche de la solution. Cependant, la convergence est plus lente pour la corrélation entre les paramètres  $S_0$  et  $S_1$ . Elle se caractérise sur la Figure 2.7 par une fluctuation importante dans le cas Classique après plus de 1 000 histoires. Cela s'explique car le calcul d'une corrélation est réalisé sur un ensemble de points aléatoires de deux variables, contrairement à la moyenne. Enfin, la convergence de la méthode Classique fait apparaître des

TABLEAU 2.3. Comparaison entre les différentes méthodes implémentées dans CONRAD pour la section efficace totale de  $l^{238}U$ 

Grandeurs	<i>Prior</i>	GLS	Classique	Importance
$S_0$ ( $\times 10^{-4}$ )	1,290	1,073	1,072	1,073
$\delta S_0$ ( $\times 10^{-6}$ )	19,35	9,013	<b>9,122</b>	9,020
$S_1$ ( $\times 10^{-4}$ )	2,170	1,192	1,193	1,192
$\delta S_1$ ( $\times 10^{-6}$ )	32,55	6,089	<b>6,135</b>	6,095
Corrélation	0,000	-0,446	<b>-0,425</b>	-0,447
$\chi^2$	381,6	8,78	8,79	8,78
$\langle \delta y \rangle$ (%)	2,78	0,64	0,65	0,64

paliers (courbe bleue sur la Figure 2.7), qui s'explique par le fait que lorsque la distribution a priori est loin de la solution recherchée, on va obtenir de nombreux points avec de faibles valeurs de la *vraisemblance*, ne participant alors pas à la statistique.



FIGURE 2.2: Matrice de corrélation de la section efficace totale de  $l'^{238}\text{U}$  a prioriFIGURE 2.3: Matrice de corrélation de la section efficace totale de  $l'^{238}\text{U}$  a posteriori

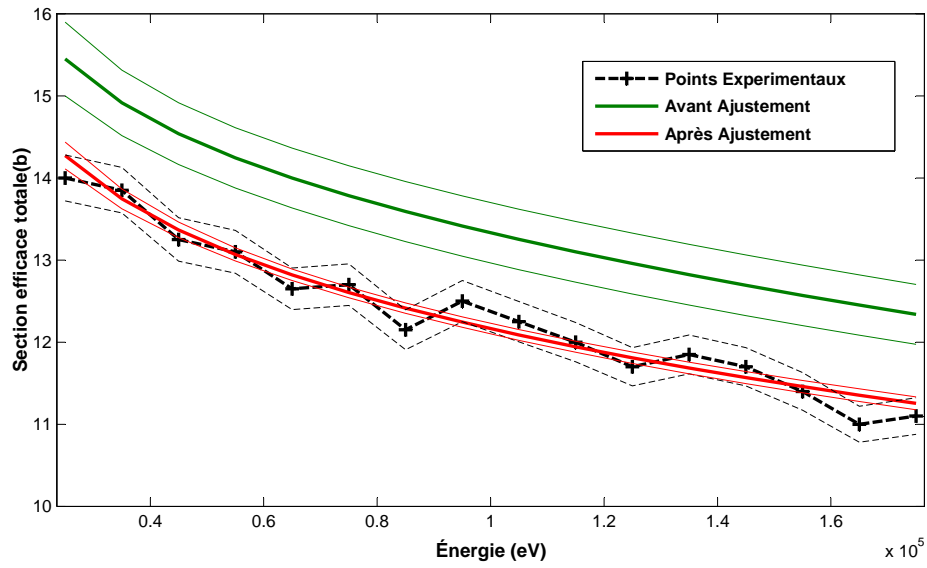


FIGURE 2.4. Section efficace totale de  $^{238}\text{U}$  obtenue avant et après ajustement des paramètres  $S_0$  et  $S_1$

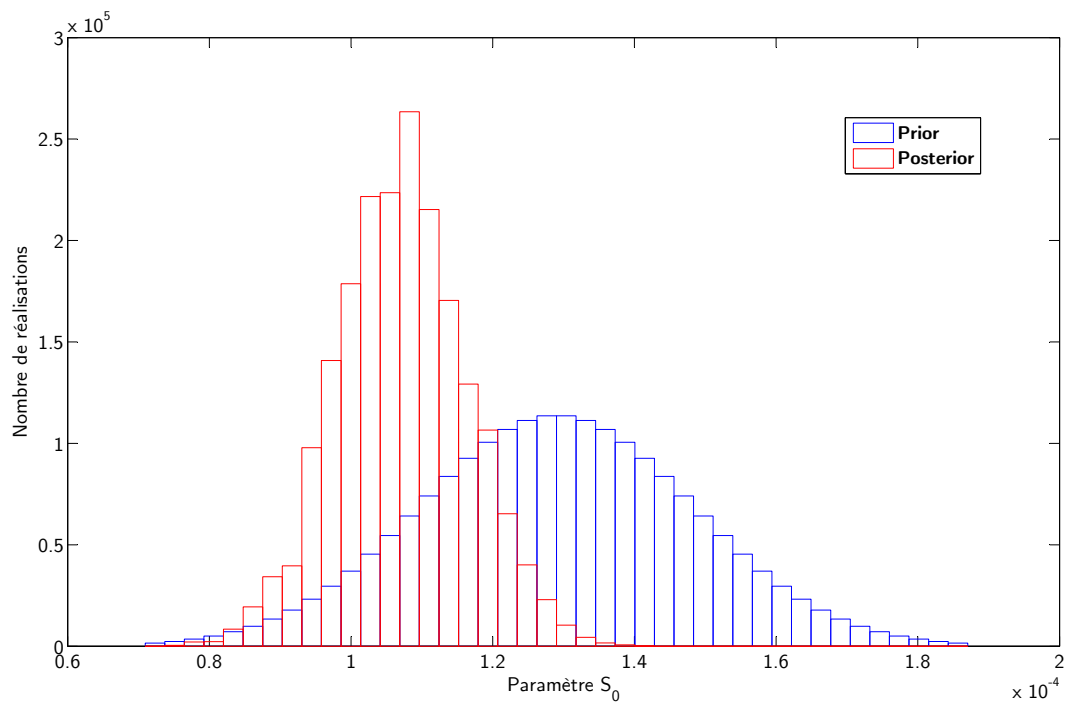


FIGURE 2.5: Distribution de  $S_0$  obtenue par la méthode BMC Classique

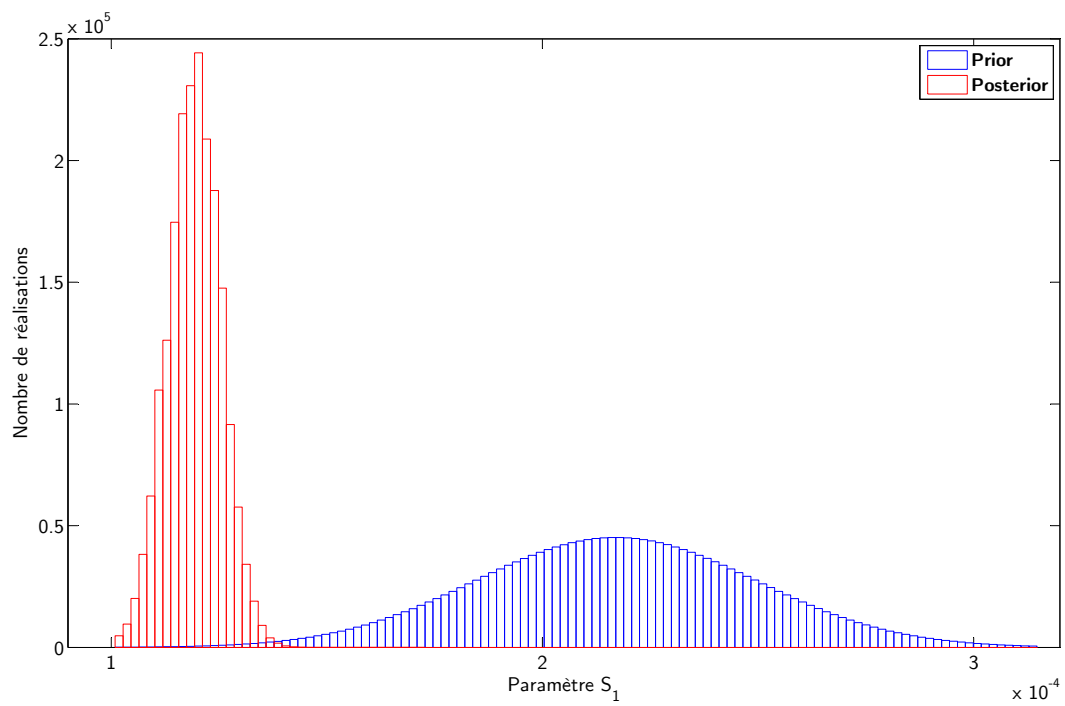


FIGURE 2.6: *Distribution de  $S_1$  obtenue par la méthode BMC Classique*

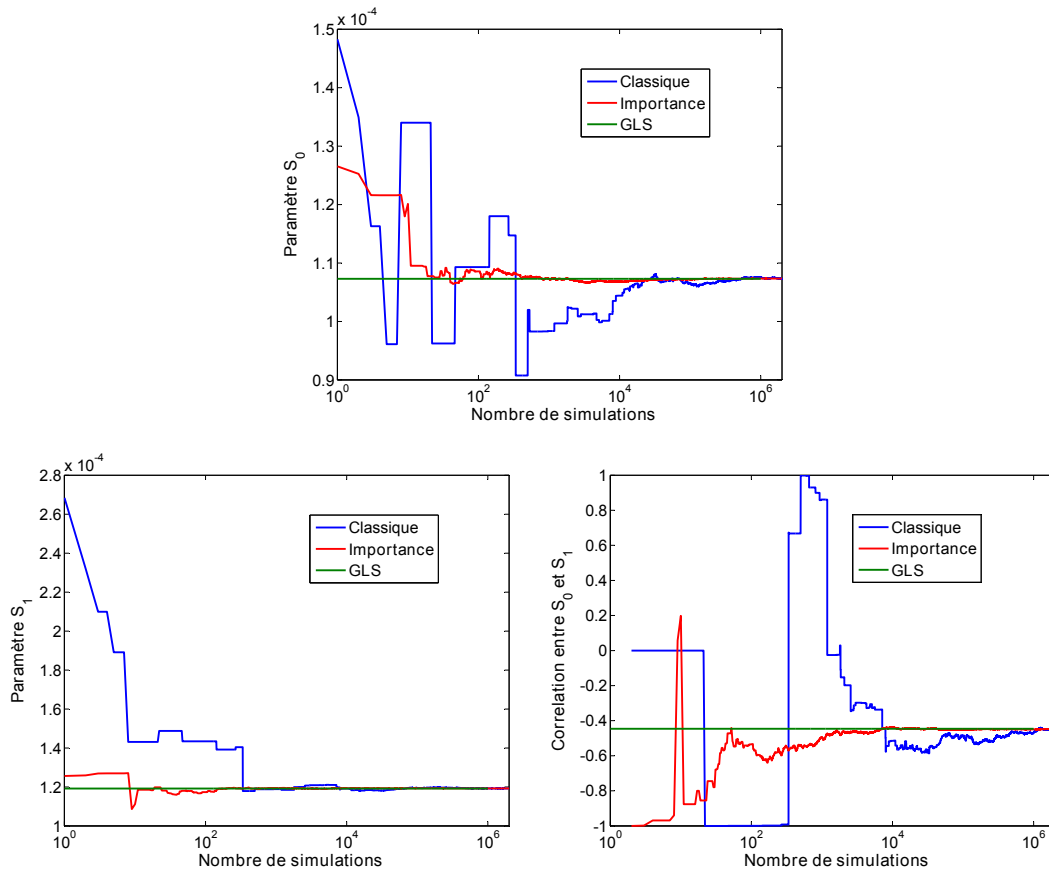


FIGURE 2.7. Convergences de la valeur des paramètres  $S_0$ ,  $S_1$  et de leur corrélation en fonction du nombre d'histoires simulées

### 2.4.2 Cas didactique n°2 : RRR $^{155}\text{Gd}$

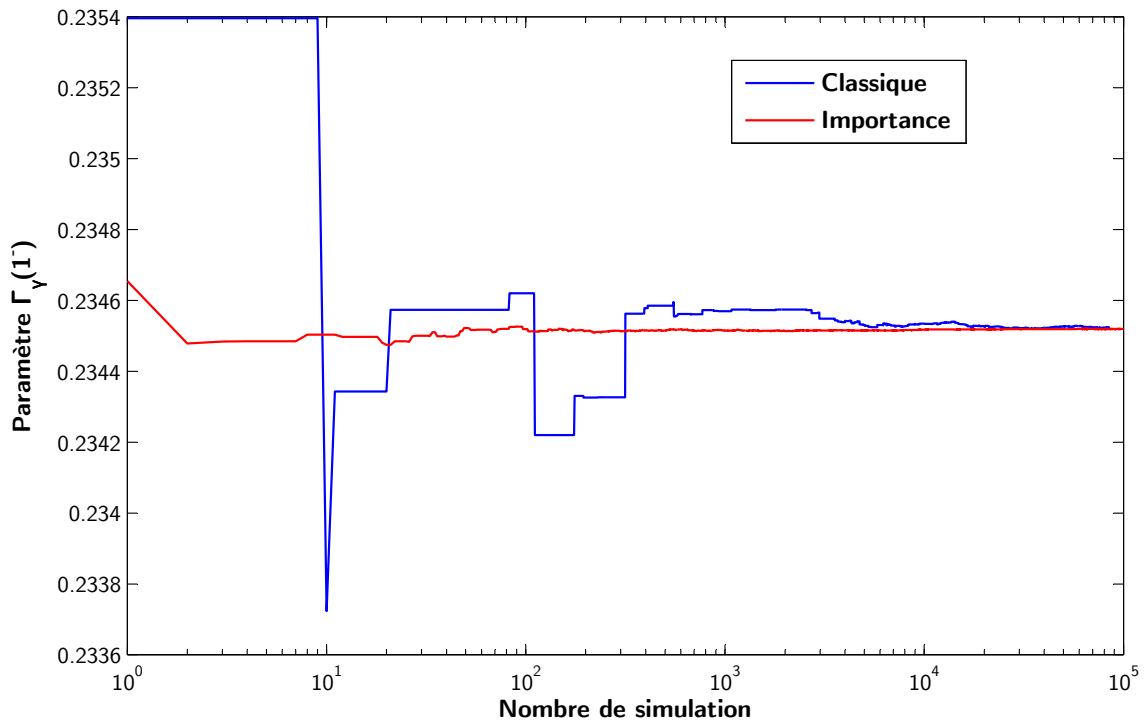
Pour cette étude, nous prenons une expérience virtuelle correspondant à deux résonances du  $^{155}\text{Gd}$ . On étudie la section efficace de capture sur le domaine énergétique [14,0 eV ; 34,0 eV]. L'expérience (que l'on rappelle virtuelle) se compose de 2138 points expérimentaux avec une incertitude statistique de 1 %. Ce cas permet de regarder ce qu'il se passe lorsque de nombreux points sont à disposition, avec des incertitudes statistiques relativement faibles. Un modèle unique, celui de la matrice R (*cf.* Section 1.2.2 du Chapitre 1), est utilisé pour modéliser l'ensemble de l'expérience avec la description des deux résonances (avec un  $J_\pi$  de -1 et -2). Les paramètres *a priori* sont donnés dans le Tableau 2.4 avec une incertitude relative de 5 %. Seuls les largeurs radiatives moyennes  $\Gamma_\gamma(1^-)$  et  $\Gamma_\gamma(2^-)$  sont ajustées pour cette étude avec des corrélations nulles *a priori*. Ce choix des paramètres, peu sensibles, permet d'une part de tester l'algorithme dans ces conditions, et d'autre part de pouvoir affiner légèrement un *a priori* proche de la solution. L'information véhiculée par ces nombreux points expérimentaux non-corrélés doit se traduire par une réduction forte des incertitudes. Pour preuve, l'ajustement avec la méthode analytique (GLS) donne des incertitudes finales de l'ordre de 0,03 % sur les paramètres ajustés.

L'utilisation de la méthode Classique se voit confronter à un problème de type numérique : en effet, la distribution multivariée normale représentant les données expérimentales, possède une matrice de covariance diagonale dont les éléments sont très faibles. Ceci a pour conséquence de calculer des exponentielles de très grands nombres (*cf.* Équation (2.4)). L'échantillonnage selon l'*a priori* est alors inefficace, puisque les valeurs de la *vraisemblance* seront numériquement nulles. Cependant, et dans ce cas, la distribution *a priori* couvre la distribution de la *vraisemblance* : l'algorithme converge vers la solution, mais de façon beaucoup plus lente, comme le montre les Figures 2.8 et 2.9. La simulation montre que seulement 8,5 % des tirages aléatoires sont utilisés, puisqu'environ 91,5 % des poids calculés sont nuls à cause du problème numérique. La méthode dite Importance permet de pallier ce problème numérique, puisque l'intégration Monte Carlo est effectuée en échantillonnant autour de la solution donnée par l'ajustement de type GLS, en gardant les corrélations de l'*a priori* et en augmentant d'un facteur 4 les variances de la matrice obtenue par la méthode GLS, comme définie dans la Section 2.3 précédente. La convergence est atteinte, dans les deux cas vers les mêmes valeurs, confirmant ainsi que les différentes méthodes donnent des résultats similaires, malgré des temps de convergence beaucoup plus long pour la méthode Classique (d'un facteur 10). L'inefficacité de l'algorithme Classique se traduit donc par un besoin d'une plus grande histoire : 100 000 histoires sont simulées dans le cas de la méthode avec Importance et 1 000 000 pour la méthode Classique. Puisque le rendement numérique est de 8,5 %, le nombre d'histoires effectif, dans le cas Classique, n'est que de 85 114.

Paramètres	Valeurs
$\Gamma_\gamma(1^-)$	$110,00 \pm 5,50 \text{ meV}$
$\Gamma_\gamma(2^-)$	$111,00 \pm 5,55 \text{ meV}$

Tableau 2.4: Paramètres initiaux choisis (RRR) pour le cas didactique du  $^{155}\text{Gd}$ TABLEAU 2.5. Comparaison entre les différentes méthodes implémentées dans CONRAD pour la section efficace de capture du  $^{155}\text{Gd}$ 

Grandeurs	Prior	GLS	Classique	Importance
$\Gamma_\gamma(1^-)$	0,2345	0,2345	0,2345	0,2345
$\delta\Gamma_\gamma(1^-)$	$5,86 \times 10^{-3}$	$9,44 \times 10^{-5}$	$9,44 \times 10^{-5}$	$9,51 \times 10^{-5}$
$\Gamma_\gamma(2^-)$	0,2356	0,2356	0,2356	0,2356
$\delta\Gamma_\gamma(2^-)$	$5,89 \times 10^{-3}$	$5,04 \times 10^{-5}$	$5,09 \times 10^{-5}$	$5,07 \times 10^{-5}$
Corrélation	0,000	-0,469	-0,495	-0,445
$\langle \delta_y \rangle$	3,095	0,029	0,028	0,029

FIGURE 2.8. Convergences de la valeur du paramètre  $\Gamma_\gamma(1^-)$  en fonction du nombre d'histoires simulés

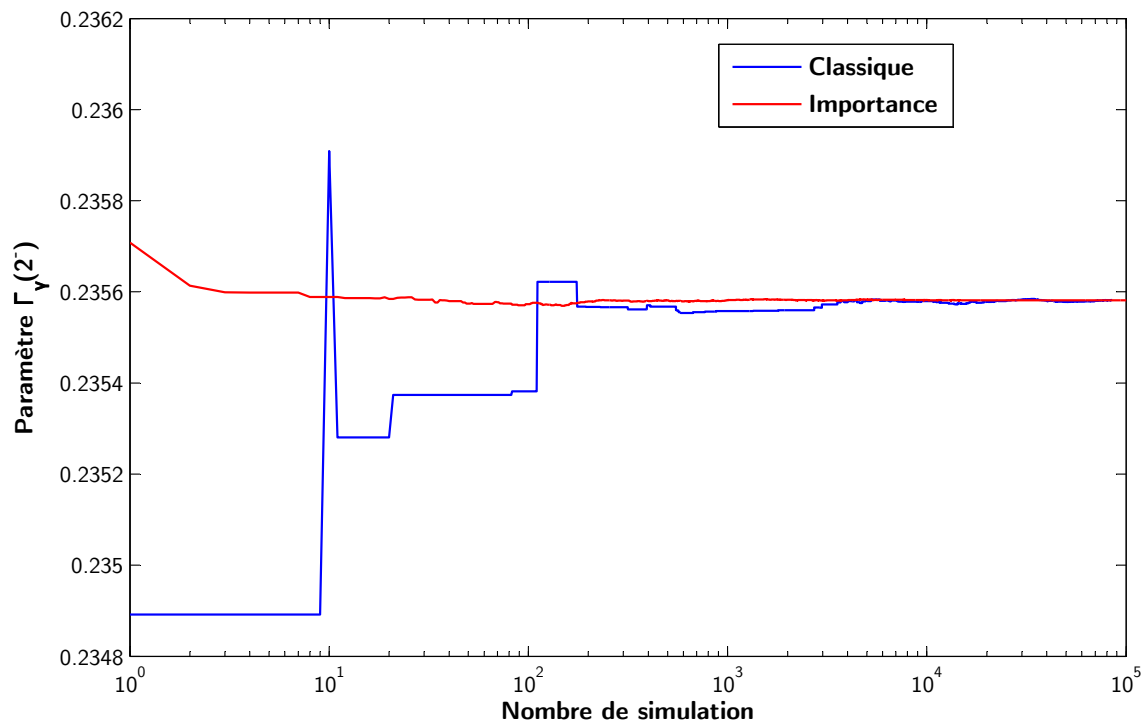


FIGURE 2.9. Convergences de la valeur du paramètre  $\Gamma_\gamma(2^-)$  en fonction du nombre d'histoires simulés

## 2.5 Traitement des incertitudes systématiques

L'ajustement Bayésien permet d'estimer des paramètres de modèles à l'aide de l'assimilation de données. Cependant, les mesures peuvent être associées à des paramètres expérimentaux, comme la normalisation, qui ne sont pas en soit des paramètres de modèles. Ils sont appelés paramètres de nuisance ou marginaux (notés  $\vec{\theta}$  par la suite) et interviennent lors du processus de réduction de données (*cf.* Section 1.3 du Chapitre 1). La mauvaise prise en compte des incertitudes systématiques, lors du processus d'ajustement, donne des incertitudes très faibles. De plus, il est possible de se voir confronter à un problème numérique appelé Peelle's Pertinent Puzzle [55]. L'idée de la marginalisation est de répercuter les incertitudes des paramètres de nuisance sur les paramètres intrinsèques des modèles nucléaires. Si les incertitudes de ces paramètres n'étaient pas prises en compte, les incertitudes sur les données nucléaires seraient diminuées. Malheureusement, ces incertitudes systématiques sont rarement considérées, ou assimilées comme des erreurs statistiques. La thèse de B. Habert [55] a permis d'implémenter deux techniques de marginalisation des paramètres de nuisance : une analytique [63] et une par Monte-Carlo partiel [64]. Dans le cadre de la thèse, deux méthodes stochastiques ont été développées en reprenant les méthodes BMC décrites précédemment.

### 2.5.1 Méthode Analytique

La marginalisation analytique est décrite de façon exhaustive dans la thèse de B. Habert [55]. Les équations ne sont pas détaillées ici. La marginalisation analytique est effectuée après un ajustement classique des paramètres. Soit  $M_x^{stat}$  la matrice de covariance sur les paramètres obtenue après ajustement, et  $M_x^{marg}$  la matrice *a posteriori* après marginalisation donnée par :

$$M_x^{marg} = M_x^{stat} + \left(G_x^T G_x\right)^{-1} \cdot G_x^T \cdot G_\theta M_\theta G_\theta^T \cdot G_x \cdot \left(G_x^T G_x\right)^{-1} \quad (2.28)$$

avec  $G_x$  contenant les dérivées de la grandeur calculée aux paramètres ajustés et  $G_\theta$  contenant les dérivées de la grandeur calculée aux paramètres de nuisance. Le terme  $\left(G_x^T G_x\right)$ , matrice carrée dont la taille est égale au nombre de paramètres ajustés, est supposé inversible. C'est généralement le cas lorsqu'il y a plus de points expérimentaux que de paramètres ajustés. Dans le cas où cette dernière n'est pas inversible, il est nécessaire de vérifier le choix des paramètres  $\vec{x}$  sur lesquelles l'incertitude systématique sera portée [65].



### 2.5.2 Méthodes stochastiques

Afin de comprendre la marginalisation stochastique déjà existante avant ce travail, il est nécessaire de rappeler quelques définitions et principes. Tout d'abord, on rappelle que la distribution de l'ensemble des paramètres de modèle  $\vec{x}$  et de nuisance  $\vec{\theta}$  s'exprime en termes de probabilités conditionnelles :

$$p(\vec{x}, \vec{\theta} | \vec{y}, U) = p(\vec{x} | \vec{\theta}, \vec{y}, U) \cdot p(\vec{\theta} | \vec{y}, U) \quad (2.29)$$

avec  $U$  l'information *a priori* sur les paramètres de modèles et de nuisance. Les paramètres de nuisance sont supposés indépendants de la mesure (au sens des taux de comptages). Autrement dit, on considère que ces paramètres interviennent au niveau des modèles expérimentaux, c'est-à-dire de la simulation de l'expérience. Ainsi  $p(\vec{\theta} | \vec{y}, U) = p(\vec{\theta} | U)$ . D'où :

$$p(\vec{x}, \vec{\theta} | \vec{y}, U) = p(\vec{x} | \vec{\theta}, \vec{y}, U) \cdot p(\vec{\theta} | U) \quad (2.30)$$

La densité de probabilité marginale de  $p(\vec{x}, \vec{\theta} | \vec{y}, U)$ , notée  $p_{\theta}(\vec{x} | \vec{y}, U)$ , est recherchée. Elle correspond à une intégration des densités de probabilité selon les variables marginales. Elle s'exprime comme suit :

$$p_{\theta}(\vec{x} | \vec{y}, U) = \int p(\vec{x}, \vec{\theta} | \vec{y}, U) d\vec{\theta} \quad (2.31)$$

D'après l'Équation (2.30), on obtient la relation suivante :

$$p_{\theta}(\vec{x} | \vec{y}, U) = \int p(\vec{x} | \vec{\theta}, \vec{y}, U) \cdot p(\vec{\theta} | U) d\vec{\theta} \quad (2.32)$$

Pour calculer le premier terme de l'intégrale de l'Équation (2.32), on utilise le théorème de Bayes :

$$p(\vec{x} | \vec{\theta}, \vec{y}, U) = \frac{p(\vec{x} | U) \cdot p(\vec{y} | \vec{\theta}, \vec{x}, U)}{\int p(\vec{x} | U) \cdot p(\vec{y} | \vec{\theta}, \vec{x}, U) dx} \quad (2.33)$$

Cette expression est valable en considérant les paramètres de modèles indépendants des paramètres de nuisance. D'après l'Équation (2.32) et l'Équation (2.33), on peut déterminer la densité de probabilité marginale *a posteriori* des paramètres ajustés. Elle est donnée par la relation suivante :

$$p_{\theta}(\vec{x} | \vec{y}, U) = \int p(\vec{\theta} | U) d\vec{\theta} \frac{p(\vec{x} | U) \cdot p(\vec{y} | \vec{\theta}, \vec{x}, U)}{\int p(\vec{x} | U) \cdot p(\vec{y} | \vec{\theta}, \vec{x}, U) dx} \quad (2.34)$$

### 2.5.2.1 Résolution semi-stochastique

Cette technique (notée MC\_Margi par la suite) est simple à mettre en œuvre en partant de l'Équation (2.34) : les paramètres de nuisance sont échantillonnés selon une distribution gaussienne autour de leur valeur moyenne, et à chaque itération, un ajustement à l'aide de la méthode déterministe de type GLS est effectué (décrite dans la Section 2.1). À la fin de chaque ajustement, on enregistre le vecteur de paramètres ajustés et la matrice de covariance associée. Lorsque les itérations du calcul sont terminées, on utilise le théorème de la covariance totale qui nous donne la covariance finale sur les paramètres de modèles. Ces développements ont été implémentés dans CONRAD et ont été présentés de façon plus exhaustive par le passé [55, 66].

### 2.5.2.2 Résolution par la méthode BMC Classique

La méthode BMC dite Classique permet également de prendre en compte la marginalisation de façon plus directe et complètement stochastique. Ce travail a été réalisé dans la thèse dans l'objectif d'une implémentation dans le code CONRAD. On souhaite trouver la densité de probabilité marginale des paramètres  $\vec{x}$  en absorbant les paramètres de nuisance, définis selon l'Équation (2.34) que l'on rappelle :

$$p_{\theta}(\vec{x}|\vec{y},U) = p(\vec{x}|U) \int \frac{p(\vec{\theta}|U) \cdot p(\vec{y}|\vec{\theta},\vec{x},U)}{\int p(\vec{x}|U) \cdot p(\vec{y}|\vec{\theta},\vec{x},U) d\vec{x}} d\vec{\theta}$$

Cette forme ressemble au cas sans paramètre de nuisance (*cf.* Équation (2.1)). On peut appliquer le même principe de pondération, sauf qu'au lieu de pondérer par la *vraisemblance*, on utilise le poids  $w_{\theta}(\vec{x}|\vec{y})$  défini par :

$$w_{\theta}(\vec{x}|\vec{y}) = \int \frac{p(\vec{\theta}|U) \cdot p(\vec{y}|\vec{\theta},\vec{x},U)}{\int p(\vec{x}|U) \cdot p(\vec{y}|\vec{\theta},\vec{x},U) d\vec{x}} d\vec{\theta} \quad (2.35)$$

La similarité avec le cas sans paramètre de marginalisation, permet une implémentation plus facile dans le code CONRAD. Au final :

$$p_{\theta}(\vec{x}|\vec{y},U) = p(\vec{x}|U) \cdot w_{\theta}(\vec{x}|\vec{y}) \quad (2.36)$$

Les intégrales peuvent se résoudre une fois encore par une méthode Monte Carlo. Le

calcul de l'intégrale de l'Équation (2.35) s'effectue selon la formulation suivante :

$$w_\theta(\vec{x}|\vec{y}) = \lim_{n_\theta \rightarrow \infty} \left( \frac{1}{n_\theta} \sum_{l=0}^{n_\theta} \frac{p(\vec{y}|\vec{\theta}_l, \vec{x}, U)}{\int p(\vec{x}|U) \cdot p(\vec{y}|\vec{\theta}_l, \vec{x}, U) d\vec{x}} \right) \quad (2.37)$$

Les  $n_\theta$  calculs se font selon la distribution de  $p(\vec{\theta}|U)$ . Le calcul de l'intégrale du dénominateur de l'Équation (2.37) s'effectue de la façon suivante :

$$\forall l \in \llbracket 1, n_\theta \rrbracket, \int p(\vec{x}|U) \cdot p(\vec{y}|\vec{\theta}_l, \vec{x}, U) d\vec{x} = \lim_{n_x \rightarrow \infty} \left( \frac{1}{n_x} \sum_{m=0}^{n_x} p(\vec{y}|\vec{\theta}_l, \vec{x}_m, U) \right) \quad (2.38)$$

Les  $n_x$  calculs se font selon la distribution de  $p(\vec{x}|U)$ . Ainsi, d'après l'Équation (2.37) et l'Équation (2.38), on obtient l'expression du poids comme suit :

$$w_\theta(\vec{x}|\vec{y}) = \lim_{n_\theta \rightarrow \infty} \left( \frac{1}{n_\theta} \sum_{l=0}^{n_\theta} \frac{p(\vec{y}|\vec{\theta}_l, \vec{x}, U)}{\lim_{n_x \rightarrow \infty} \left( \frac{1}{n_x} \sum_{m=0}^{n_x} p(\vec{y}|\vec{\theta}_l, \vec{x}_m, U) \right)} \right) \quad (2.39)$$

Soit  $N_x$  le nombre d'histoires sur les paramètres ajustés et  $N_\theta$  le nombre d'histoires sur les paramètres marginalisés. Plus ces nombres sont grands, plus le résultat sera convergé. La relation suivante est obtenue :

$$w_\theta(\vec{x}|\vec{y}) = \frac{N_x}{N_\theta} \sum_{l=0}^{N_\theta} \frac{p(\vec{y}|\vec{\theta}_l, \vec{x}, U)}{\sum_{m=0}^{N_x} p(\vec{y}|\vec{\theta}_l, \vec{x}_m, U)} \quad (2.40)$$

Afin de simplifier les algorithmes, et après en avoir vérifié la bonne cohérence, la valeur  $N_\theta$  est prise égale à  $N_x$ . Soit  $N = N_\theta = N_x$ . Dans un premier temps,  $N$  tirages aléatoires selon les lois respectives des  $\vec{\theta}_k$  et  $\vec{x}_k$  sont réalisés. Ainsi, l'Équation (2.39) s'écrit comme suit :

$$w_\theta(\vec{x}|\vec{y}) = \sum_{l=0}^N \frac{p(\vec{y}|\vec{\theta}_l, \vec{x}, U)}{\sum_{m=0}^N p(\vec{y}|\vec{\theta}_l, \vec{x}_m, U)} \quad (2.41)$$

Finalement, le problème à résoudre est d'établir une statistique à partir du calcul de la *vraisemblance*. Dans CONRAD, les  $N*N$  valeurs de la *vraisemblance* sont conservées. C'est-à-dire que l'on calcule  $\forall (i, j) \in \llbracket 1, N \rrbracket^2, p(\vec{y}|\vec{\theta}_j, \vec{x}_i, U)$

Les poids pour chaque histoire sont au final calculés selon la formulation suivante :

$$w_\theta(\vec{x}_k|\vec{y}_k) = \frac{\sum_{l=0}^N p(\vec{y}_k|\vec{\theta}_l, \vec{x}_k, U)}{\sum_{m=0}^N p(\vec{y}_k|\vec{\theta}_l, \vec{x}_m, U)} \quad (2.42)$$

On sait que  $w_\theta(\vec{x})$  est une densité de probabilité. Ainsi, la valeur moyenne des paramètres ajustés est calculée par une intégrale (cf. Équation (2.16)). La formule suivante est utilisée :

$$\langle \vec{x} \rangle_N = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^N \vec{x}_k \cdot \frac{\sum_{l=0}^N p(\vec{y}_l|\vec{\theta}_l, \vec{x}_k, U)}{\sum_{m=0}^N p(\vec{y}_l|\vec{\theta}_l, \vec{x}_m, U)} \quad (2.43)$$

Cette formule est une pondération des  $\vec{x}_k$  par les poids  $w_\theta(\vec{x}_k|\vec{y}_k)$ . En effet, on peut montrer que  $\sum_{k=0}^N w_\theta(\vec{x}_k) = N$  et retrouver la formule de l'Équation (2.43). La covariance entre le  $i^{\text{ème}}$  et le  $j^{\text{ème}}$  paramètre est obtenue de la même façon que dans l'Équation (2.23) :

$$Cov(x_i, x_j)_N = \left( M_{\vec{x}_{post}} \right)_{ij}^{N_x} = \langle x_i x_j \rangle_N - \langle x_i \rangle_N \langle x_j \rangle_N \quad (2.44)$$

avec  $\langle x_i x_j \rangle_N$  défini comme la moyenne pondérée du produit des deux paramètres par :

$$\langle x_i x_j \rangle_N = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N x_{i,k} \cdot x_{j,k} \cdot w_\theta(\vec{x}_k|\vec{y}_k) \quad (2.45)$$

Le schéma de principe de l'algorithme est décrit sur la Figure 2.10.

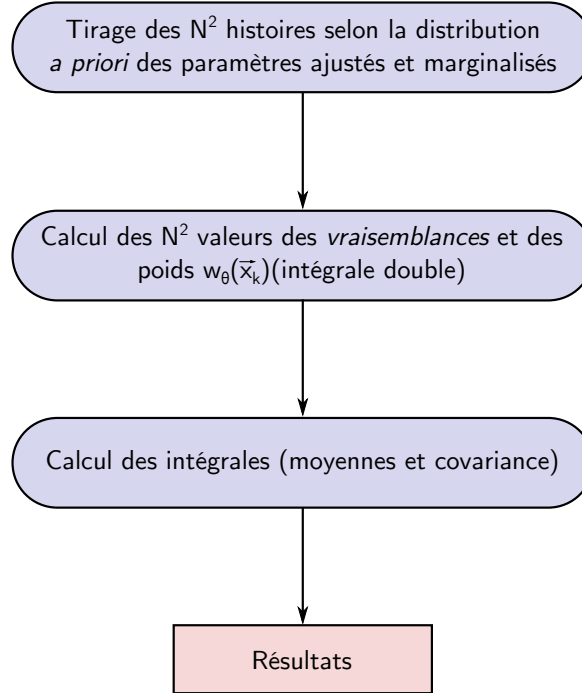


FIGURE 2.10. Schéma de principe de l'algorithme BMC (Classique) en prenant en considération les paramètres marginalisés

### 2.5.2.3 Résolution par la méthode BMC Importance

Cette méthode est introduite et développée pour les mêmes raisons que dans le cas de l'ajustement (*cf.* Section 2.3.2). De plus, la méthode est, en quelque sorte, une combinaison de celles décrites précédemment. En effet, le poids  $w_{\theta}(\vec{x}_k)$  introduit dans la Section 2.3.2 se voit modifié de la façon suivante :

$$w_{\theta}(\vec{x}_k|\vec{y}_k) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{p(\vec{y}|\vec{\theta}_j, \vec{x}_k, U)}{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N h(\vec{x}_i) \cdot p(\vec{y}|\vec{\theta}_j, \vec{x}_i, U)} \quad (2.46)$$

avec  $h(\vec{x}_i) = \frac{p_{prior}(\vec{x}_i)}{p_{bias}(\vec{x}_i)}$ . Finalement, on obtient la valeur moyenne sur les paramètres grâce à l'expression suivante :

$$\langle \vec{x} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^N \vec{x}_k \cdot h(\vec{x}_k) \cdot w_{\theta}(\vec{x}_k|\vec{y}_k) \quad (2.47)$$

TABLEAU 2.6. Comparaison entre les différentes méthodes implémentées dans CONRAD, avec une normalisation (incertitude systématique de 1 %) sur la section efficace totale de  $l^{238}\text{U}$ . Le sous-cas GLS représente la résolution analytique de l'inférence Bayésienne, sans prise en compte de l'incertitude systématique

Grandeurs	Prior	GLS	AN_Margi	MC_Margi	Classique	Importance
$S_0$ ( $\times 10^{-4}$ )	1,290	1,073	1,073	1,073	1,063	1,074
$\delta S_0$ ( $\times 10^{-6}$ )	19,35	9,013	9,634	9,469	<b>8,939</b>	9,490
$S_1$ ( $\times 10^{-4}$ )	2,170	1,192	1,192	1,194	1,215	1,193
$\delta S_1$ ( $\times 10^{-6}$ )	32,55	6,089	11,60	11,52	<b>8,945</b>	11,54
Corrélation	0,000	-0,446	0,081	0,035	<b>-0,061</b>	0,044
$\langle \delta_y \rangle$ (%)	3,78	0,64	1,19	1,17	<b>0,93</b>	1,18

### 2.5.3 Exemple de $l^{238}\text{U}$

Ce cas est similaire au premier cas de la Section 2.4 sauf qu'une normalisation est appliquée, avec une incertitude systématique de **1 %**. 10 000 histoires sont échantillonnées dans le cas MC\_Margi et 10 000x10 000 pour les méthodes BMC. On rappelle que l'on prend, comme distribution pour l'importance, les corrélations de l'*a priori*, les valeurs moyennes des paramètres issues d'un ajustement de type analytique (GLS) et le double des incertitudes des paramètres issues du GLS. Les paramètres *a posteriori*, obtenus par les algorithmes analytiques, semi-stochastique et la méthode Importance, donnent des résultats sensiblement similaires (*cf.* Tableau 2.6). Le cas Classique n'est pas être convergé, comme il en était le cas dans la Section 2.4, car des résultats sensiblement différents sont trouvés pour les valeurs moyennes, les incertitudes et les corrélations. Les Figures 2.11 et 2.12 montre la convergence sur les valeurs moyennes des paramètres. Il y apparaît graphiquement que la méthode Classique n'est pas convergée.

Les temps de calculs sont extrêmement longs (65 heures pour les méthodes BMC au lieu de quelques secondes pour la méthode analytique), puisque deux intégrales sont évaluées au lieu d'une, induisant une double boucle dans l'algorithme.

Les résultats obtenus se traduisent par des matrices de corrélation sur la section efficace similaire. Les Figures 2.13 et 2.14 montrent les matrices obtenues *a priori* et *a posteriori*, quelque soit la méthode utilisée. Les matrices *a posteriori* sont semblables, puisque au final la corrélation obtenue *a posteriori* sur les paramètres est proche de celle *a priori* (*i.e.* nulle).

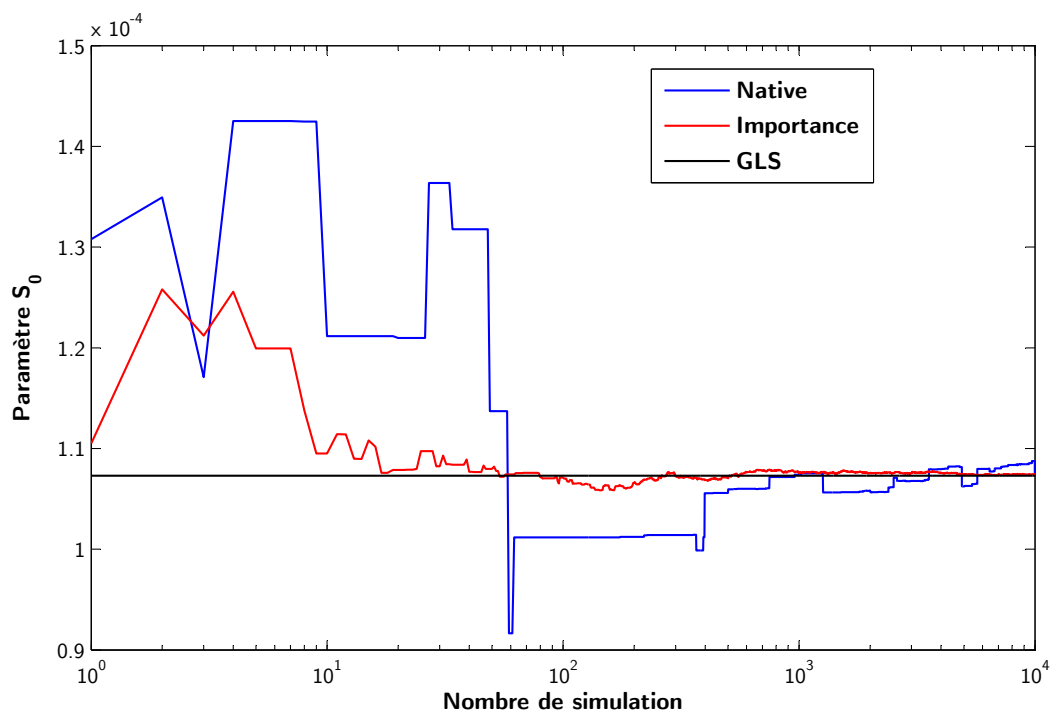


FIGURE 2.11. Convergences de la valeur du paramètre  $S_0$  en fonction du nombre d'histoires simulés

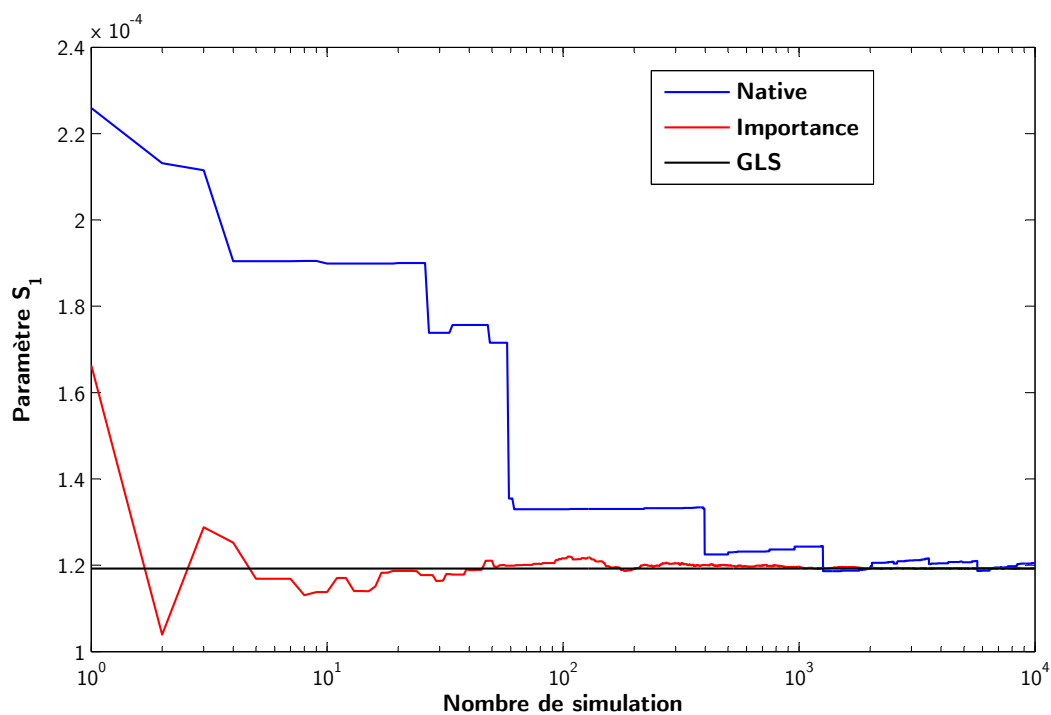
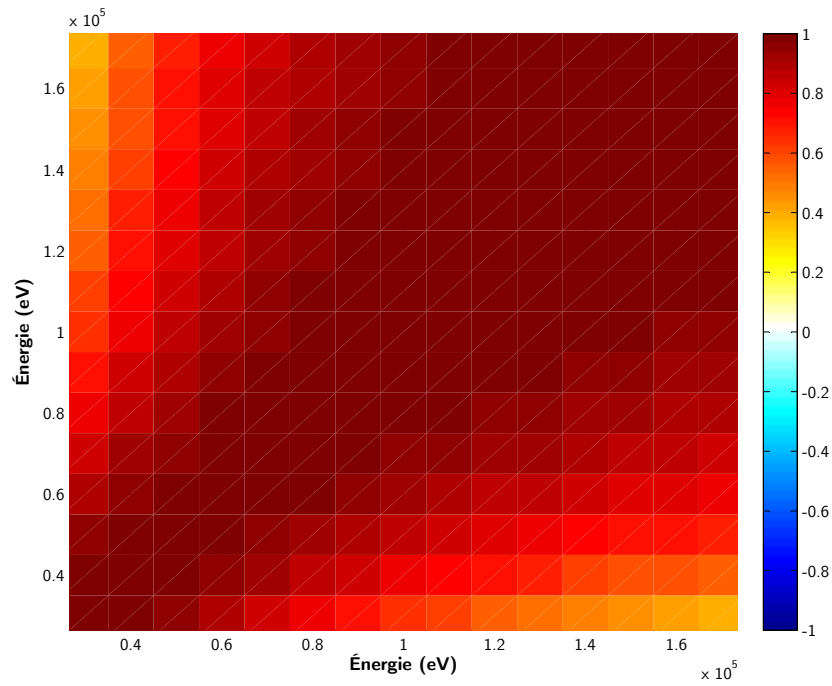
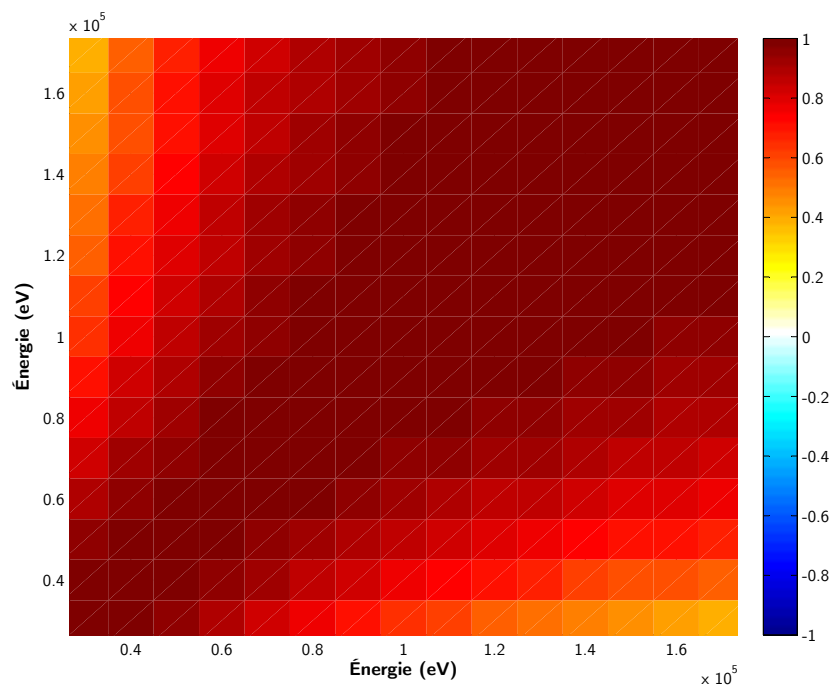


FIGURE 2.12: Convergences du paramètre  $S_1$  en fonction du nombre d'histoires simulés

FIGURE 2.13: *Matrice de corrélation de la section efficace totale de  $^{238}\text{U}$  a priori*FIGURE 2.14: *Matrice de corrélation de la section efficace totale de  $^{238}\text{U}$  a posteriori*



## 2.6 Synthèse

De nouvelles méthodes ont été développées tout au long de la thèse, afin de proposer des améliorations au niveau de l'inférence Bayésienne dans le cadre de l'évaluation. Pour pallier aux hypothèses réalisées lors d'un ajustement déterministe, c'est-à-dire l'approximation de Laplace, la linéarisation du  $\chi^2$  et un terme de fluctuation du deuxième ordre négligé, une méthode stochastique a été proposée. Cette dernière repose, mathématiquement, sur des intégrations par Monte-Carlo en respectant les connaissances *a priori* dont on dispose (valeurs moyennes, variances, loi gaussienne...). Les incertitudes systématiques sont également traitées dans le formalisme utilisé, permettant ainsi la comparaison avec les méthodes existantes. De plus, pour chaque possibilité offerte par le code CONRAD, en terme d'analyse, il est possible de remplacer le moteur d'ajustement Bayésien déterministe par les méthodes BMC implémentées. Cependant quelques inconvénients de la méthode BMC peuvent être cités :

- les temps de calculs sont plus importants, d'autant plus lorsque des modèles chronophages sont utilisés (comme par exemple, dans le continuum où TALYS et ECIS sont utilisés) ;
- une convergence statistique non maîtrisée, voire impossible, lorsque les distributions *a priori* ne permettent pas d'atteindre la distribution de la fonction de vraisemblance ;
- des problèmes de calcul numérique à cause des grands nombres que peuvent générer des expériences avec une multitude de points, lors du calcul de la vraisemblance.

Une méthode de type Metropolis a également été abordée durant la thèse. Cette dernière est décrite en Annexe C. Elle permet de dresser, après chaque tirage, la distribution *a posteriori*. Cependant, la méthode ne semble actuellement pas converger exactement vers les bonnes solutions, et nécessite quelques améliorations.

D'autres méthodes ont vu le jour dans les dernières années, notamment la méthode dite BFMC (**B**ackward **F**orward **M**onte **C**arlo), développé au Département des Applications Militaires du CEA [67]. Cette dernière est semblable à la méthode dite Classique. Cependant, au lieu de prendre la *vraisemblance* comme poids, la fonction suivante est utilisée :

$$BF(\vec{x}) = \exp\left(-\left(\frac{\chi^2}{\chi_{min}^2}\right)^2\right)$$

avec  $\chi^2$  représentant la composante de l'exponentielle de la *vraisemblance* et  $\chi_{min}^2$  la valeur minimal du  $\chi^2$  parmi les tirages aléatoires. Cette méthode permet d'augmenter l'efficacité de l'algorithme Classique puisque le terme de l'exponentielle se voit réduit pour chaque tirage. Cependant, cette méthode n'a pas été implémentée, car bien que l'algorithme converge vers les bons paramètres moyens *a posteriori*, il n'est pas garanti que les covariances convergent

vers la bonne solution. Cela vient du fait que cette astuce suppose une forme de la *vraisemblance* non-gaussienne, mais avec une valeur moyenne identique à la *vraisemblance* définie dans les algorithmes BMC.

Au final, ces travaux sur les méthodes BMC permettent de donner des informations complémentaires à l'évaluateur : la forme des distributions *a posteriori*. Elles peuvent être également utilisées dans le cadre d'une validation des méthodes analytiques. De plus, il est également possible d'utiliser une loi de distribution uniforme pour les paramètres *a priori*, permettant de traiter les cas où l'on a peu de connaissance. Ainsi, on ne présuppose par de probabilité maximale. Une des autres possibilités offertes par les méthodes Monte Carlo est l'identification de *minima* locaux de la fonction  $\chi^2$ . En effet, la méthode analytique présentée et utilisée dans le cadre de la thèse, ne certifie pas que le minimum atteint soit global. La méthode stochastique peut ainsi montrer des distributions non-Gaussiennes avec plusieurs *maxima* locaux. Enfin, l'optimisation de l'algorithme, basée sur une parallélisation des histoires, n'a pas été réalisé dans le code CONRAD, mais offrirait des gains de temps très important.



# Méthodes d'ajustement sous contraintes microscopiques

---

## Sommaire

<b>3.1</b>	<b>Évaluation traditionnelle : utilisation des expériences microscopiques</b>	<b>74</b>
3.1.1	Les données de base . . . . .	74
3.1.2	Utilisation des expériences microscopiques . . . . .	74
<b>3.2</b>	<b>Évaluation des incertitudes en utilisant des fichiers évalués</b>	<b>75</b>
3.2.1	Construction rétroactif de l' <i>a priori</i> à partir d'une évaluation . . . . .	75
3.2.2	Application au $^{239}\text{Pu}$ . . . . .	76
<b>3.3</b>	<b>Utilisation de plusieurs théories et des incertitudes systématiques</b>	<b>82</b>
3.3.1	Principe . . . . .	82
3.3.2	Exemple sur le $^{23}\text{Na}$ . . . . .	82
3.3.3	Exemple sur l' $^{238}\text{U}$ . . . . .	85
<b>3.4</b>	<b>Formalisme des multiplicateurs de Lagrange</b>	<b>89</b>
3.4.1	Formalisme . . . . .	89
3.4.2	Continuité de la section efficace . . . . .	92
<b>3.5</b>	<b>Synthèse</b>	<b>97</b>

---

L'ajustement Bayésien permet d'obtenir des paramètres de modèles nucléaires ou des sections efficaces pour reproduire au mieux les données expérimentales. Cependant, les évaluations sont souvent réalisées de manière indépendante entre les trois grands domaines en énergie. En conséquence, la continuité sur la section efficace n'est pas toujours respectée. La section totale du  $^{239}\text{Pu}$  dans la bibliothèque JEFF-3.1.1 (*cf.* Figure 3.1) possède par exemple une discontinuité entre le domaine des résonances non-résolues et le domaine statistique. Ce saut n'est pas physique et résulte d'une évaluation séparée de ces deux domaines. Une autre conséquence de ce mode d'évaluation est l'absence de covariance entre les domaines en énergie. Pourtant, les paramètres du modèle du domaine des résonances non-résolues peuvent être investigués à partir du domaine des résonances résolues ou du continuum, impliquant

logiquement une corrélation entre les domaines. La non prise en compte de cette information entraîne des matrices de variance-covariance en trois blocs diagonaux, comme on peut le voir pour la section totale de  $^{238}\text{U}$  dans JENDL-3.3 (*cf.* Figure 3.2). Enfin, un autre constat que l'on peut faire est une mauvaise considération de la normalisation lors d'évaluations indépendantes. Certaines données expérimentales couvrent plusieurs domaines en énergie, avec des incertitudes systématiques due, par exemple, à une normalisation. Lorsque l'on réalise une évaluation de façon indépendante, le caractère systématique qui lie explicitement les points expérimentaux est perdu. Or, on comprend bien que ces incertitudes impliquent des corrélations entre les domaines en énergie, et que finalement, elles doivent être retranscrites au niveau des covariances.

Une solution possible est d'introduire des contraintes dites microscopiques lors de l'ajustement Bayésien. Dans un premier temps, on rappelle succinctement comment les évaluations sont réalisées, lorsque l'on dispose de l'ensemble des ingrédients (expériences microscopiques, incertitudes et théories). Une seconde partie est dédiée à la présentation de l'évaluation réalisée au CEA de Cadarache, lorsque l'on ne dispose pas des modèles et de leurs paramètres (notamment dans le domaine du continuum). Ensuite, il est présenté l'évaluation réalisée sur une plage en énergie correspondant à plusieurs théories, avec une incertitude systématiques communes. Enfin, un des travaux de la thèse a été de pouvoir réaliser des évaluations avec des contraintes microscopiques en utilisant le formalisme des multiplicateurs de Lagrange. De telles développements permettent par exemple d'obtenir la continuité entre deux domaines en énergie.

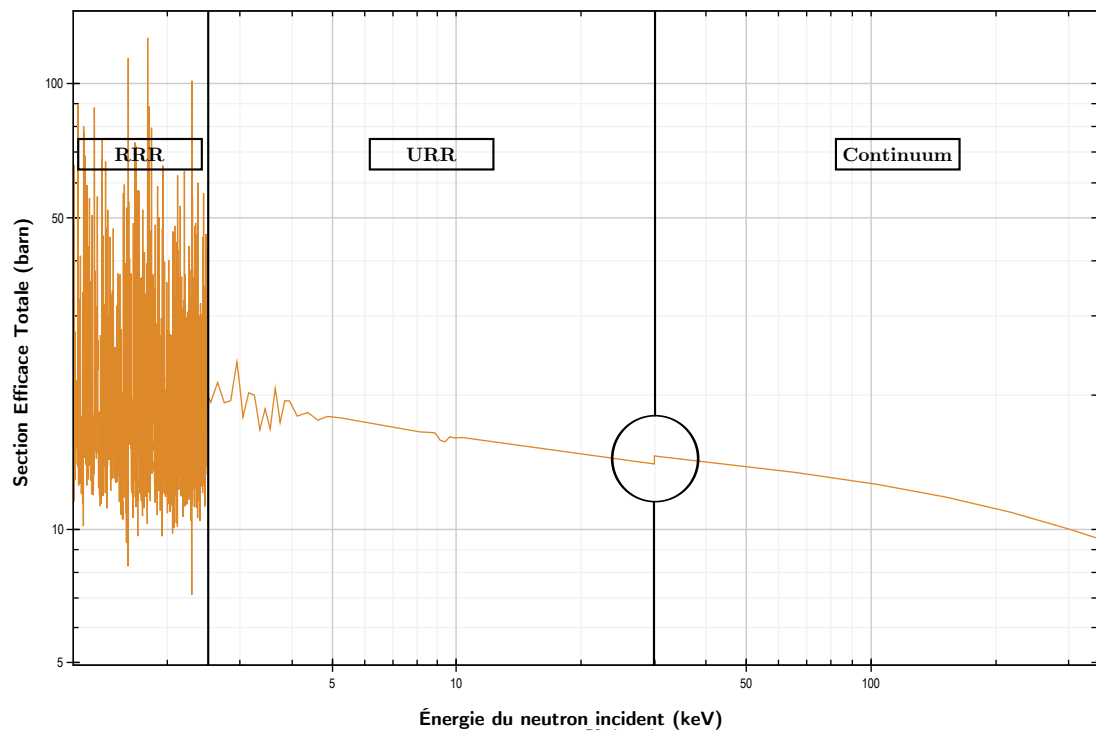


FIGURE 3.1. *Discontinuité de la section efficace totale du  $^{239}\text{Pu}$  dans la bibliothèque JEFF-3.1.1*

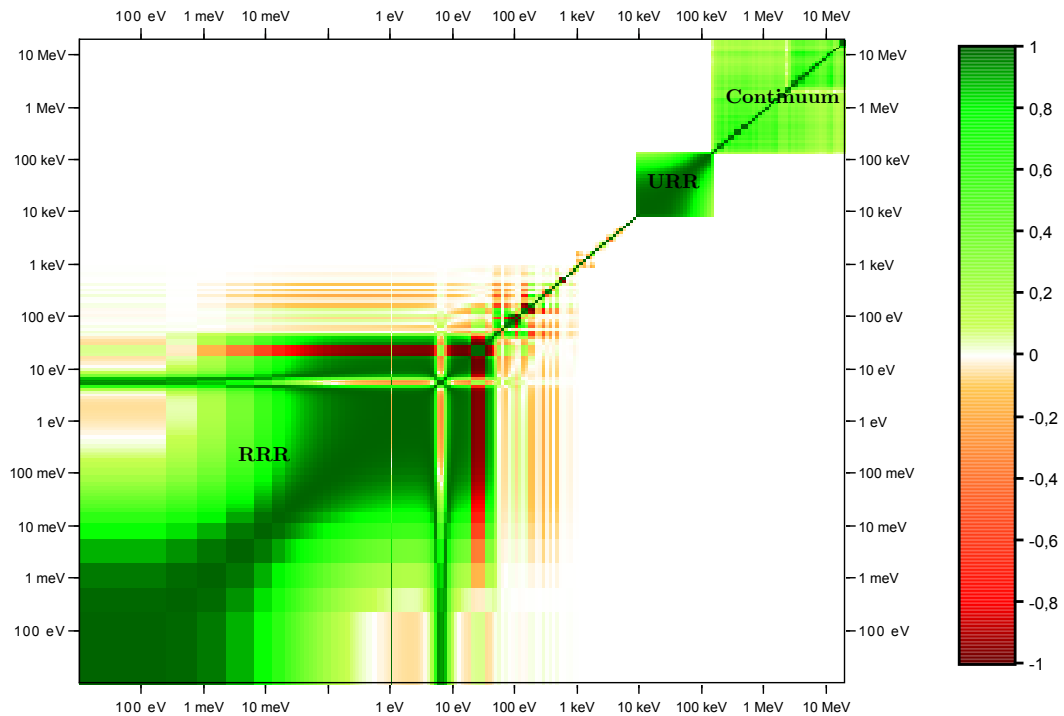


FIGURE 3.2. *Matrice de variance-covariance de la section efficace totale du  $^{238}\text{U}$  en trois blocs diagonaux sans corrélation dans la bibliothèque JENDL-3.3*

### 3.1 Évaluation traditionnelle : utilisation des expériences microscopiques

Usuellement, les évaluateurs réalisent de façon indépendante les évaluations selon les trois grands domaines énergétiques : celui des résonances résolues, des résonances non-résolues et du continuum. À partir d'une information *a priori*, exposée dans une première partie, les évaluateurs vont associer des expériences, choisir les paramètres sensibles à ajuster, et utiliser une méthode d'ajustement pour déterminer les deux premiers moments de la distribution *a posteriori*.

#### 3.1.1 Les données de base

Dans la plupart des cas, il existe peu d'expériences en physique nucléaire fondamentale permettant de mesurer des paramètres de modèles, car ce ne sont pas toujours des observables mesurables. Des indications sur les valeurs et les incertitudes de ces paramètres peuvent être trouvées dans la littérature, tout comme des modèles théoriques permettant de les estimer [62, 68]. RIPL (*R*eference *I*ntput *P*arameter *L*ibrary), par exemple, peut être utilisé pour déterminer les informations *a priori* sur les paramètres du noyau (densité de niveau, résonances...). Il est également possible de prendre des valeurs d'expert, dans l'optique de réaliser par la suite des ajustements. Dans ce dernier cas, il est préférable de ne pas mettre d'incertitudes "trop faibles" pour ne pas influencer l'ajustement. On parle alors d'un *a priori* non informatif. Lorsque les méthodes d'ajustement l'autorisent, comme les algorithmes BMC décrits dans le Chapitre 2, une densité de probabilité *a priori* non informative peut être représentée par une distribution uniforme, ne présupposant pas de maximum de probabilité.

#### 3.1.2 Utilisation des expériences microscopiques

De façon pratique, les évaluations antérieures sont utilisées comme informations *a priori* (*cf.* Section 3.1.1). Dans le cas où les sections efficaces déjà évaluées sont à disposition, avec les paramètres de modèles correspondants, on peut directement les utiliser comme *a priori* et réaliser un nouvel ajustement avec de nouvelles mesures. Il est alors important de ne pas refaire une assimilation de données à partir des mêmes expériences utilisées pour obtenir l'*a priori*, afin d'éviter une réduction des incertitudes non justifiée. Enfin, les incertitudes systématiques, lorsqu'elles sont présentes dans les données expérimentales, sont traitées de façon différente, selon le laboratoire qui réalise les mesures ou selon les évaluateurs. Dans ces travaux, les outils pour traiter les incertitudes systématiques, c'est-à-dire la marginalisation

(présentés dans le Chapitre 2) sont utilisés. Le traitement par la méthode analytique est régulièrement employé, favorisant la simplicité et la rapidité.

## 3.2 Évaluation des incertitudes en utilisant des fichiers évalués

L'ajustement Bayésien, tel que défini dans le Chapitre 2, fait intervenir la distribution *a priori* des paramètres ajustés. Cette information reflète la connaissance des données, notamment les valeurs moyennes et les incertitudes. Dans le continuum, domaine d'intérêt pour les réacteurs à neutrons rapides, les modèles et leurs paramètres ne sont pas rendus accessibles à l'utilisateur, car souvent les évaluations proviennent des laboratoires militaires (LANL aux États-Unis, CEA/DAM en France). Seules les sections efficaces ponctuelles sont données, sans précision sur leurs incertitudes ou leurs évaluations. L'objectif de cette partie est de montrer les moyens utilisés au CEA de Cadarache pour reproduire une évaluation et introduire des incertitudes pour compléter l'évaluation. Les méthodes d'assimilation de données intégrales, présentées dans le Chapitre 4, permettront l'obtention de matrices de variance-covariance représentatives des connaissances actuelles en complétant l'évaluation microscopique.

### 3.2.1 Construction rétroactif de l'*a priori* à partir d'une évaluation

Dans le cas où les paramètres et les modèles ne sont pas donnés, ce qui est le cas de ENDF et JEFF au contraire de JENDL, il est possible d'utiliser de façon simple ses propres modèles et paramètres pour reproduire une évaluation donnée. Il n'y a donc pas besoin de refaire le travail d'évaluation depuis le début, en utilisant les expériences différentielles. Cette méthode est simple, mais ne permet pas de traduire les incertitudes du travail sur lequel on s'appuie car inexistantes. L'objectif ici est de venir compléter une évaluation existante en ajoutant les incertitudes. Pour ce faire, le ré-évaluateur peut ajouter une incertitude systématique qui lui semble raisonnable vis-à-vis des incertitudes expérimentales que l'on peut trouver dans la littérature. La section efficace ainsi reconstruite reproduit des sections déjà évaluées et permet de construire une matrice de covariance cohérente avec l'évaluation *a priori*. Cette dernière n'étant pas forcément très représentative du travail de l'évaluateur (par manque de traçabilité et conservatisme), il est nécessaire d'ajouter de nouvelles informations, comme les expériences intégrales (*cf.* Chapitre 4).



### 3.2.2 Application au $^{239}\text{Pu}$

Cette partie montre comment est réalisée une évaluation se rapprochant au mieux de JEFF-3.2, dont l'objectif est d'obtenir des paramètres du modèle optique (pour le continuum) du  $^{239}\text{Pu}$ , afin de pouvoir y associer des incertitudes non présente dans l'évaluation actuelle. La construction du *prior* se base sur les trois étapes suivantes :

- les paramètres du modèle optique (potentiel rotationnel de type Morillon-Romain) sont ajustés, afin de reproduire la section efficace totale de JEFF-3.2. La Figure 3.3 illustre l'ajustement réalisé au niveau de la section totale. La section efficace issue de CONRAD, reproduit bien la forme de celle de JEFF-3.2.
- les paramètres nécessaires à la description des sections efficaces partielles (capture, fission...), sont ensuite ajustés sur JEFF-3.2, en gardant fixes les paramètres du modèle optique.
- la marginalisation de normalisations est ensuite utilisée, avec des incertitudes systématiques correspondant à celles recommandées par l'AIEA [69]. La méthode analytique est utilisée ici, à cause de la complexité de l'évaluation. De plus, on s'attache à réduire le nombre de paramètres qui vont porter l'ensemble de l'incertitude. Les paramètres alors obtenus, pour le modèle optique et le calcul de la section efficace de fission, sont donnés dans le Tableau 3.1. De fortes corrélations, dues aux incertitudes systématiques imposées, sont créées, comme on peut le voir sur la Figure 3.4. Elles se retrouvent également au niveau de la section efficace de fission, comme le montre la première matrice de corrélation très corrélée de la Figure 3.5. Ce jeu de covariance sera utilisé, par la suite, comme information *a priori* pour réaliser une assimilation de données intégrales.

Les différentes matrices de covariance créées par ces différents processus sont présentées sur la Figure 3.5. Les corrélations croisées entre réaction sont quant à eux présentées sur la Figure 3.6.

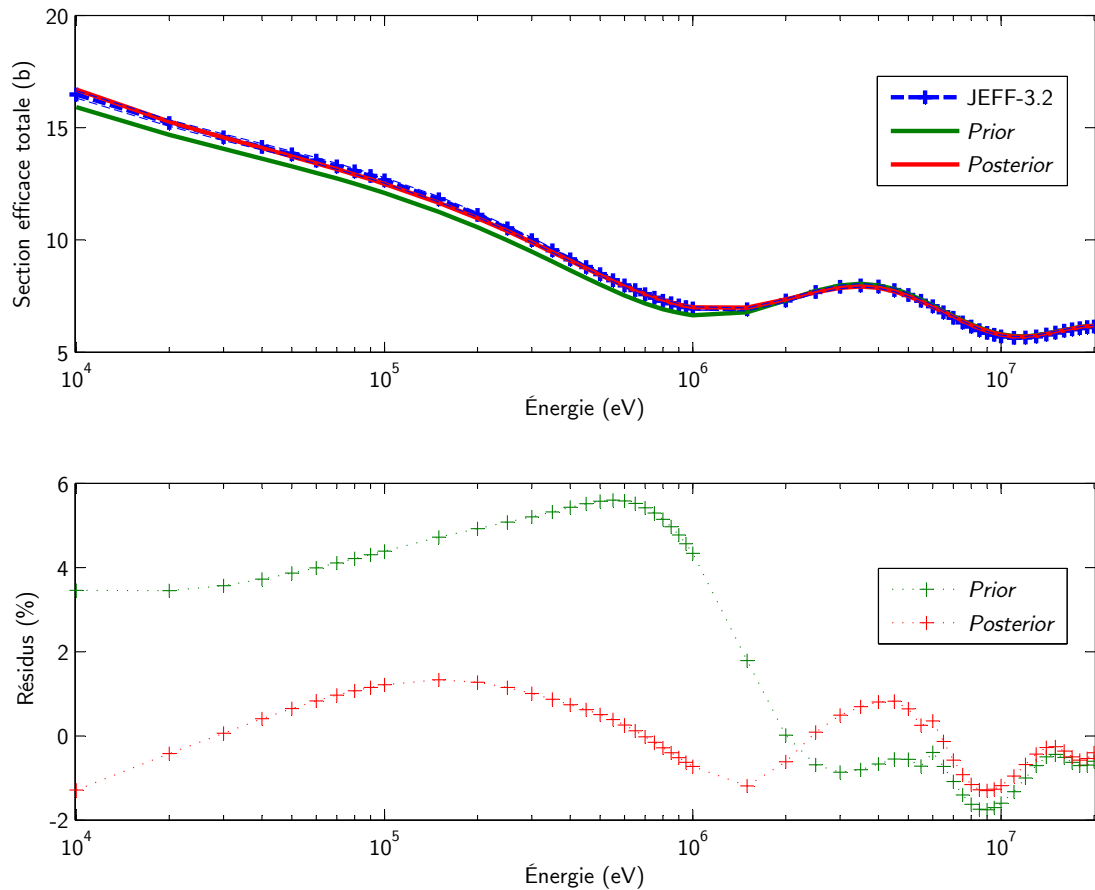


FIGURE 3.3. La figure du dessus montre l'ajustement réalisé avec le code CONRAD, sur la section efficace totale du  $^{239}\text{Pu}$ , avec comme expérience l'évaluation JEFF-3.2. La figure de dessous représente les écarts relatifs entre le prior et JEFF-3.2 (en vert) et le posterior et JEFF-3.2 (en rouge)

	Paramètres ajustés	Valeurs	
Potentiel Optique Rotationnel	$r0\_VolumeR\acute{e}el$	$1,287 \pm 9 \times 10^{-3}$	(0,7 %)
	$a0\_VolumeR\acute{e}el$	$0,5783 \pm 7,5 \times 10^{-3}$	(1,3 %)
	$p0\_VolumeR\acute{e}el$	$-86,26 \pm 5,95 \times 10^0$	(6,9 %)
	$p2\_VolumeR\acute{e}el$	$1,128 \pm 4,3 \times 10^{-2}$	(3,8 %)
	$p0\_SurfaceImaginaire$	$15,06 \pm 2,1 \times 10^{-1}$	(1,4 %)
Densité de Niveau	$T(94,237,0)$	$0,4650 \pm 7,9 \times 10^{-3}$	(1,7 %)
	$T(94,238,0)$	$0,3838 \pm 9,2 \times 10^{-3}$	(2,4 %)
	$T(94,239,0)$	$0,3867 \pm 5,0 \times 10^{-3}$	(1,3 %)
	$T(94,239,1)$	$0,3877 \pm 7,4 \times 10^{-3}$	(1,9 %)
	$T(94,239,2)$	$0,5116 \pm 9,7 \times 10^{-3}$	(3,3 %)
	$T(94,240,0)$	$0,334 \pm 1,7 \times 10^{-4}$	(5,0 %)
	$T(94,240,1)$	$0,2597 \pm 3,4 \times 10^{-3}$	(1,3 %)
	$T(94,240,2)$	$0,4444 \pm 4,9 \times 10^{-3}$	(1,1 %)
Barrières de Fission	$a_{S_n}(94,238)$	$15,69 \pm 1,3 \times 10^{-1}$	(0,8 %)
	$FissBarr(94,238,1)$	$5,791 \pm 9,3 \times 10^{-2}$	(1,6 %)
	$FissBarr(94,239,1)$	$5,919 \pm 1,8 \times 10^{-2}$	(0,3 %)
	$FissBarr(94,239,2)$	$5,054 \pm 7,6 \times 10^{-2}$	(1,5 %)
	$FissBarr(94,240,1)$	$6,220 \pm 1,2 \times 10^{-2}$	(0,2 %)
	$FissBarr(94,240,2)$	$5,394 \pm 2,7 \times 10^{-2}$	(0,5 %)

TABLEAU 3.1. Paramètres obtenus pour les sections efficaces totales et de fission, après ajustement du  $^{239}\text{Pu}$  en utilisant l'évaluation JEFF-3.2 comme expérience microscopique.  $FissBarr(94,239,2)$  correspond, par exemple, à la hauteur de la seconde barrière de fission du  $^{239}\text{Pu}$ .  $T(94,240,0)$  correspond, par exemple, à la CTM (Constant Temperature Model) de l'état fondamental du  $^{240}\text{Pu}$ .  $a_{S_n}(94,238)$  correspond à l'inverse de l'espacement moyen à l'énergie de séparation  $S_n$

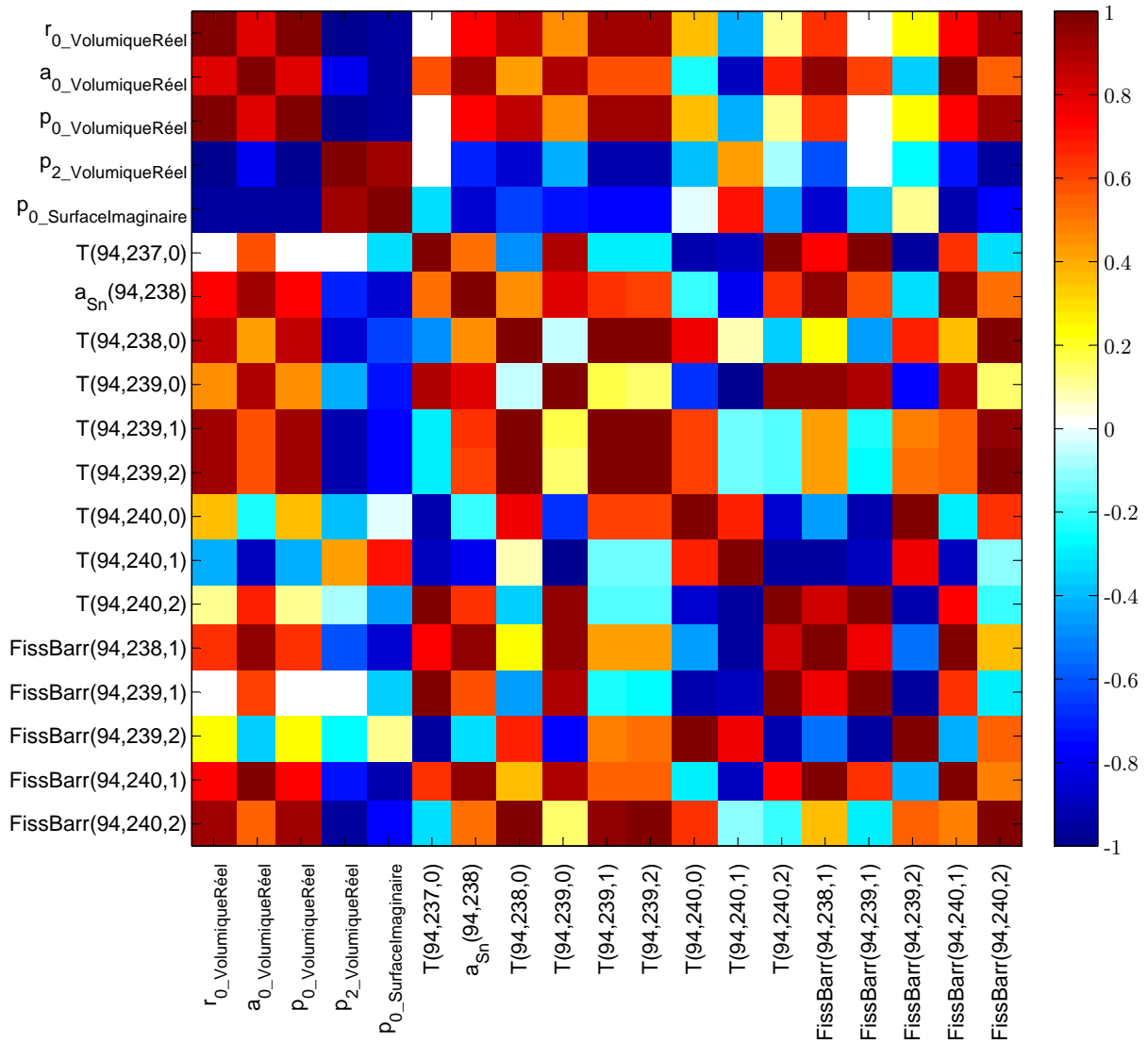


FIGURE 3.4. Corrélations des paramètres utilisés comme informations initiales pour l'assimilation de données intégrales. Elles sont le résultat des ajustements sur l'évaluation JEFF-3.2 et de la considération d'incertitudes systématiques.

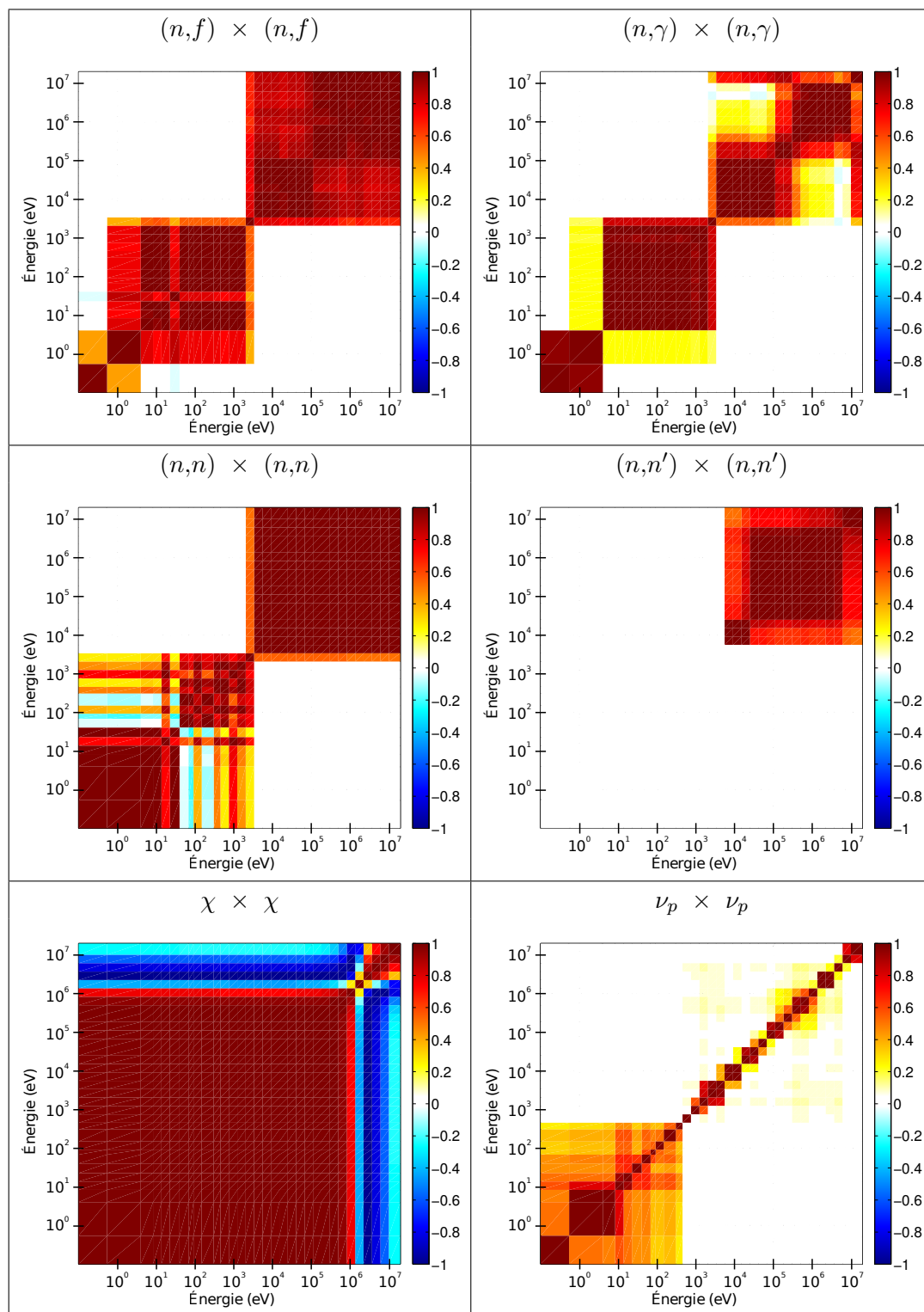


FIGURE 3.5. Matrices de corrélations multigroupes (à 33 groupes en énergie), obtenues à partir d'une reproduction de l'évaluation JEFF-3.2 et de l'application d'incertitudes systématiques, pour les principales sections efficaces du  $^{239}\text{Pu}$

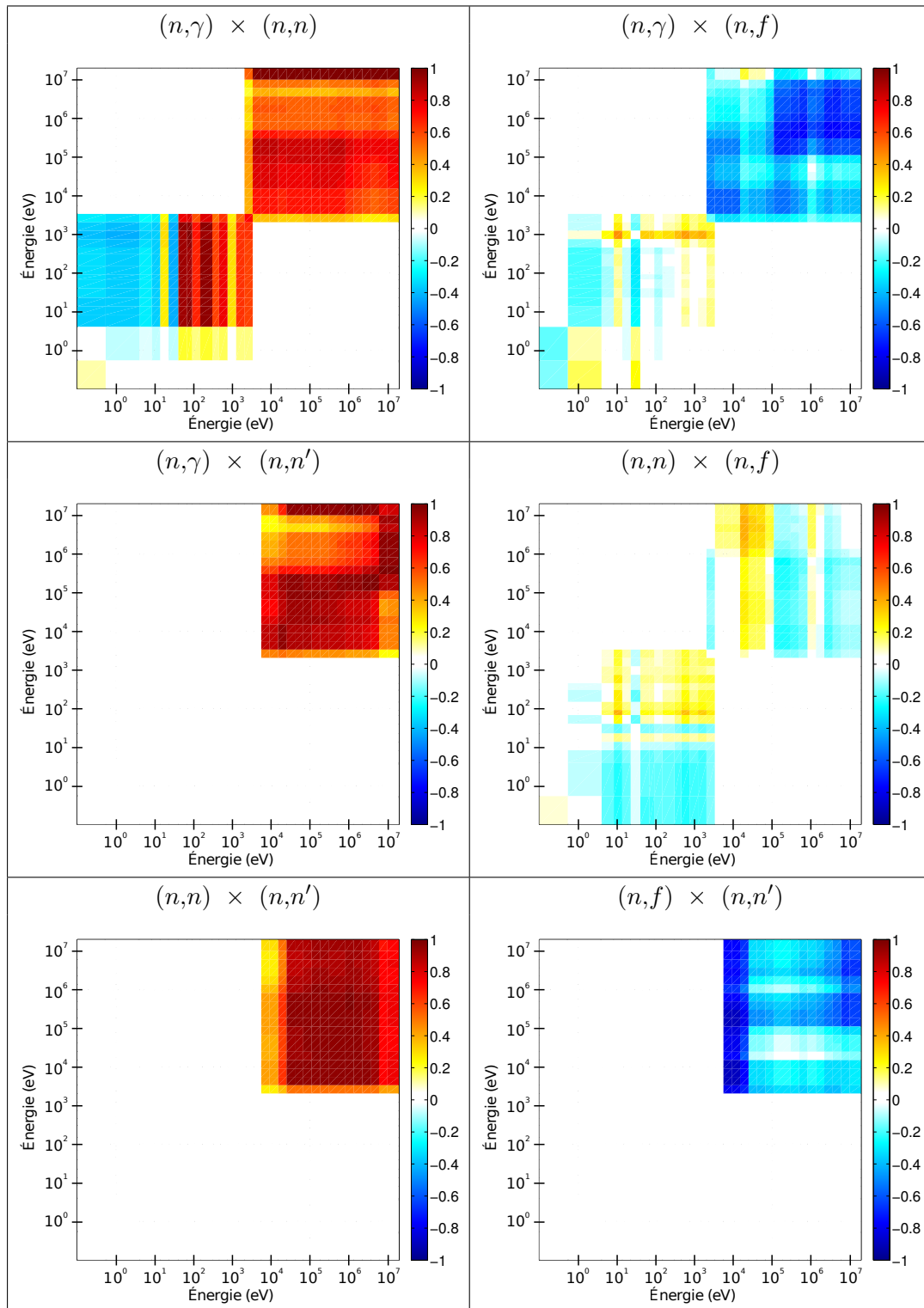


FIGURE 3.6. Matrices de corrélations multigroupes croisées (à 33 groupes en énergie), obtenues à partir d'une reproduction de l'évaluation JEFF-3.2 et de l'application d'incertitudes systématiques, pour les principales sections efficaces du  $^{239}\text{Pu}$

### 3.3 Utilisation de plusieurs théories et des incertitudes systématiques

#### 3.3.1 Principe

Un des problèmes de l'évaluation est le travail indépendant réalisé pour chaque domaine en énergie. Or, de nombreuses expériences couvrent plusieurs domaines en énergie. De plus, elles sont souvent munies ou se voient munir d'incertitudes systématiques communes à tous les points expérimentaux. C'est pourquoi il a été rendu possible, dans le cadre de ces travaux dans CONRAD, de réaliser une évaluation à partir de plusieurs théories sur un ensemble complet de points expérimentaux. Un traitement des incertitudes systématiques est fait, une fois encore, avec la méthode analytique. Elle est simple et rapide à mettre en œuvre. Si une normalisation est considérée, sur des points expérimentaux avec de part et d'autre une théorie différente, la considération de l'incertitude systématique va corrélérer les paramètres des différents modèles. Ce qui se traduira par des corrélations entre les domaines en énergie au niveau des sections efficaces. Deux exemples sont présentés ensuite :

- le cas du sodium, dans lesquels une évaluation réalisée par P. Archier [21], à l'aide d'une expérience microscopique, est reprise. On s'attache dans cette exemple à quantifier l'impact du niveau de l'incertitude systématique.
- le cas de l' $^{238}\text{U}$ , avec un modèle dans le domaine des résonances non-résolues et un autre pour le modèle de continuum. L'expérience d'Uttley [28], présentée dans la Section 1.3 (Chapitre 1), est reprise, avec la prise en compte d'une incertitude systématique commune aux points expérimentaux de 1 %.

#### 3.3.2 Exemple sur le $^{23}\text{Na}$

Afin d'éviter des incertitudes non réalistes sur les paramètres de modèles et les sections efficaces, plusieurs méthodes ont été vues dans le Chapitre 2 précédent pour traiter les incertitudes systématiques. Avec les développements dans le code CONRAD pendant ces travaux, il est dorénavant possible d'ajuster plusieurs modèles théoriques (sur des domaines en énergie différents) sur une expérience couvrant les deux domaines. Dans cette partie, un exemple sur la section efficace inélastique du sodium (*cf.* Figure 3.7) est utilisé. Deux théories sont prises en compte : un modèle de la matrice-R pour les résonances et un modèle optique pour le domaine du continuum.

Le domaine en énergie considéré est [1,9 MeV; 2,1 MeV] avec une limite à 2 MeV. La partie correspondant aux faibles énergies est modélisée avec la théorie de la matrice-R, en utilisant

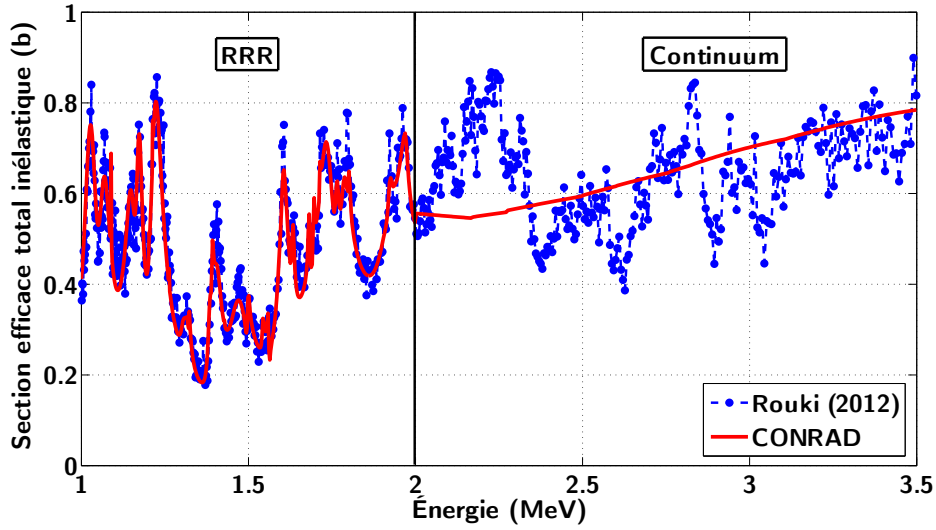


FIGURE 3.7. Section efficace inélastique du sodium, ajusté dans le domaine des résonances résolues et du continuum par CONRAD, sur les expériences de Rouki [70]

Tableau 3.2: Paramètres du sodium utilisés dans l'analyse

E (MeV)	$J^\Pi$	Paramètres des résonances (keV)		
1,9215	$3^-$	$\Gamma_n = 2,13 \pm 0,69$	$\Gamma_{n'1} = 11,18 \pm 0,82$	$\Gamma_{n'2} = 3,27 \pm 0,15$
1,9625	$2^+$	$\Gamma_n = 26,46 \pm 2,50$	$\Gamma_{n'1} = 8,81 \pm 1,30$	$\Gamma_{n'2} = 2,91 \pm 0,16$
1,9723	$1^+$	$\Gamma_n = 27,58 \pm 5,10$	$\Gamma_{n'1} = 27,96 \pm 5,50$	-
Paramètres du potentiel optique				
Volume-Réel	$R_0 = 1,290 \pm 0,008$		$a_0 = 0,558 \pm 0,059$	

les paramètres de résonance de JEFF-3.2. Pour les hautes énergies, un modèle optique et les paramètres statistiques sont utilisés (dont la section efficace est également donnée dans JEFF-3.2) [66]. Par souci de simplicité et de démonstration, l'expérience modifiée de la façon suivante est utilisée : une courbe théorique est simulée, donnée par les deux modèles de part et d'autre de la limite ; puis une incertitude statistique de 3% est imposée ainsi qu'une incertitude systématique liée à un facteur de normalisation de 0,5, 1 et 3%. Cet exemple se veut illustratif et n'a pas pour objectif de réaliser une nouvelle évaluation. Le Tableau 3.2 donne les paramètres utilisés, ainsi que leurs incertitudes *a priori*. Seule la partie volumique réelle du potentiel optique est utilisée (rayon réduit et diffusivité).

La Figure 3.8 montre les conséquences de la prise en compte des incertitudes systématiques au niveau des mesures expérimentales. Les effets de la normalisation créent des corrélations entre les deux modèles théoriques, lorsque ces derniers sont utilisés en même temps



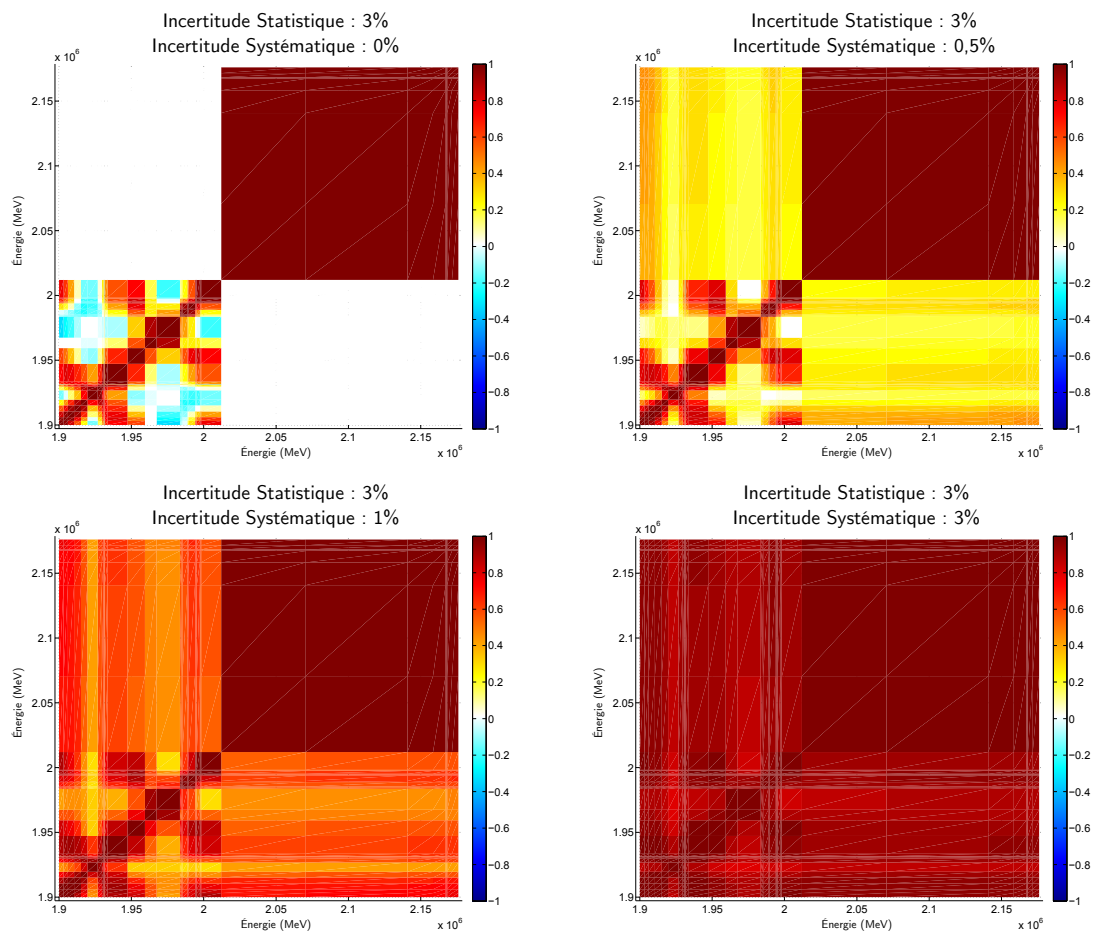


FIGURE 3.8. Conséquence sur la section efficace inélastique du sodium de différentes incertitudes systématiques de la normalisation (de 0,5 à 3%)

TABLEAU 3.3. Corrélation créée entre les différents paramètres lorsqu'une incertitude systématique de 3 % est appliquée

	$\Gamma_n^{3-}$	$\Gamma_{n'1}^{3-}$	$\Gamma_n^{2+}$	$\Gamma_{n'1}^{2+}$	$\Gamma_n^{1+}$	$\Gamma_{n'1}^{1+}$	$R_0$
$\Gamma_n^{3-}$	1	0,83	-0,39	0,74	-0,11	0,41	0,83
$\Gamma_{n'1}^{3-}$		1	-0,37	0,89	0,03	0,56	0,98
$\Gamma_n^{2+}$			1	-0,36	-0,05	-0,32	-0,38
$\Gamma_{n'1}^{2+}$				1	-0,09	0,42	0,90
$\Gamma_n^{1+}$					1	-0,37	0,03
$\Gamma_{n'1}^{1+}$						1	0,58
$R_0$							1

dans le processus d'ajustement, avec marginalisation. Il est simple de voir qu'il n'y aurait pas de corrélations entre les domaines en énergie si seules les incertitudes statistiques étaient considérées (cf. la figure située en haut à gauche de la Figure 3.8). Par contre, lorsqu'on considère une incertitude systématique, des corrélations entre les domaines sont créées. Ces corrélations sont d'autant plus forte que l'incertitude systématique est élevée. Le Tableau 3.2 décrit les paramètres des modèles qui gouvernent le niveau de la section efficace inélastique, comme le rayon réduit du potentiel optique ou encore les largeurs inélastiques. Les corrélations créées lors du processus de marginalisation de l'incertitude systématique de 3 % sont indiquées dans le Tableau 3.3.

### 3.3.3 Exemple sur $1^{238}\text{U}$

Le cas de l'expérience d'Uttley [28], présentée dans la Section 1.3 (Chapitre 1), est reprise. Un modèle de la matrice R moyenne à gauche et un modèle optique à droite sont utilisés. Une limite à l'énergie 105 keV est considérée entre les deux modèles (de façon arbitraire). Les paramètres utilisés pour l'ajustement sont transcrits dans le Tableau 3.4. Deux paramètres sont choisis pour le domaine des résonances non-résolues (fonctions forces  $S_0$  et  $S_1$ ) et un pour le modèle optique, correspondant à la hauteur du puits de potentiel  $p_0$ . Dans ce cas, une normalisation de 1 est imposée comme paramètre de nuisance, avec un écart type de 1 %. La Figure 3.9 montre l'ajustement réalisé lorsque cette incertitude est prise en compte avec un traitement analytique. La courbe théorique passe très bien par les points expérimentaux, que ce soit pour le modèle utilisé dans le domaine des résonances non-résolues ou celui utilisé dans le continuum. Le fait de mettre une incertitude systématique commune sur l'ensemble des points expérimentaux entraîne, comme pour le cas du sodium, une corrélation *a posteriori* sur les paramètres des modèles, comme l'indique le Tableau 3.5. En effet, les paramètres de modèle doivent piloter l'ensemble de la section efficace de la même manière pour reproduire

TABLEAU 3.4. Paramètres de l'URR (matrice R moyenne) et du modèle optique pour la section efficace totale de  $l^{238}\text{U}$ 

Paramètres de la matrice R moyenne	
$S_0 = 1,290 \times 10^{-04} \pm 15\%$	$S_1 = 2,170 \times 10^{-04} \pm 15\%$
Paramètre du modèle optique	
$p_0 = -82.40 \pm 5\%$	

TABLEAU 3.5. Corrélacion créée entre les différents paramètres lorsqu'une incertitude systématique de 1 % est appliquée sur une expérience avec deux théories (URR et modèle optique)

	$S_0$	$S_1$	$p_0$
$S_0$	1	-0,288	-0,0862
$S_1$		1	-0,204
$p_0$			1

le paramètre de normalisation. Ces covariances vont créer de fortes corrélations au niveau de la section efficace, entre les domaines en énergie. Elles sont représentées sur la Figure 3.10. Il n'est pas illustré l'impact du niveau de l'incertitude systématique, mais comme pour le sodium, plus l'erreur systématique est importante, plus les corrélations seront fortes. Enfin, la Figure 3.11 présente la réduction des incertitudes obtenue avec un simple ajustement, et lorsque l'incertitude systématique est appliquée. Cette dernière se répercute au niveau des incertitudes sur la section efficace totale de  $l^{238}\text{U}$ . Le niveau moyen des incertitudes, avec la marginalisation, est d'environ 0,7 % plus élevé que dans le cas où un simple ajustement est réalisé.

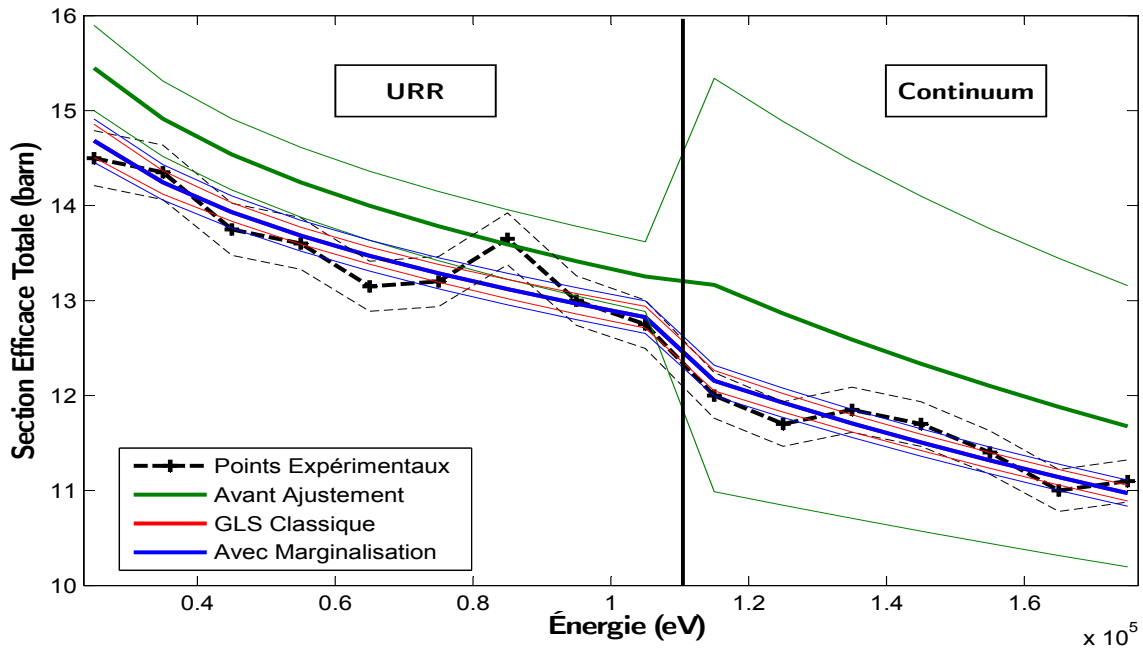


FIGURE 3.9. Résultats obtenus avec/sans prise en compte d'une incertitude systématique expérimentale de 1% (section efficace totale de  $l^{238}\text{U}$  avec un modèle d'URR pour les énergies inférieures à 105 keV et un modèle optique pour les énergies supérieures)

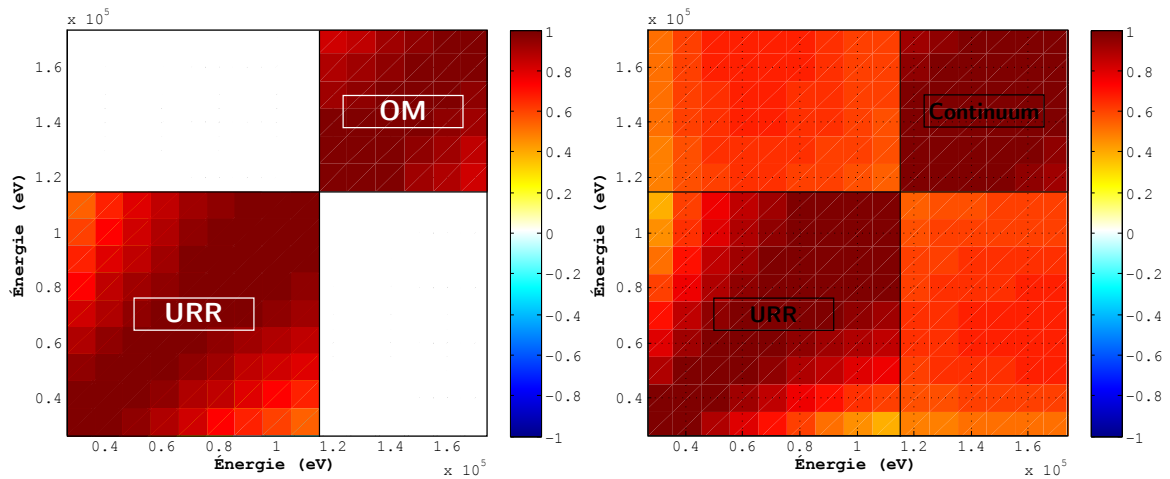


FIGURE 3.10. Matrices de corrélation obtenues avant (figure de gauche) et après (figure de droite) ajustement lorsque l'on prend en compte ou non une incertitude systématique expérimentale de 1% (section efficace totale de  $l^{238}\text{U}$  avec un modèle d'URR pour les énergies inférieures à 105 keV et un modèle optique pour les énergies supérieures)

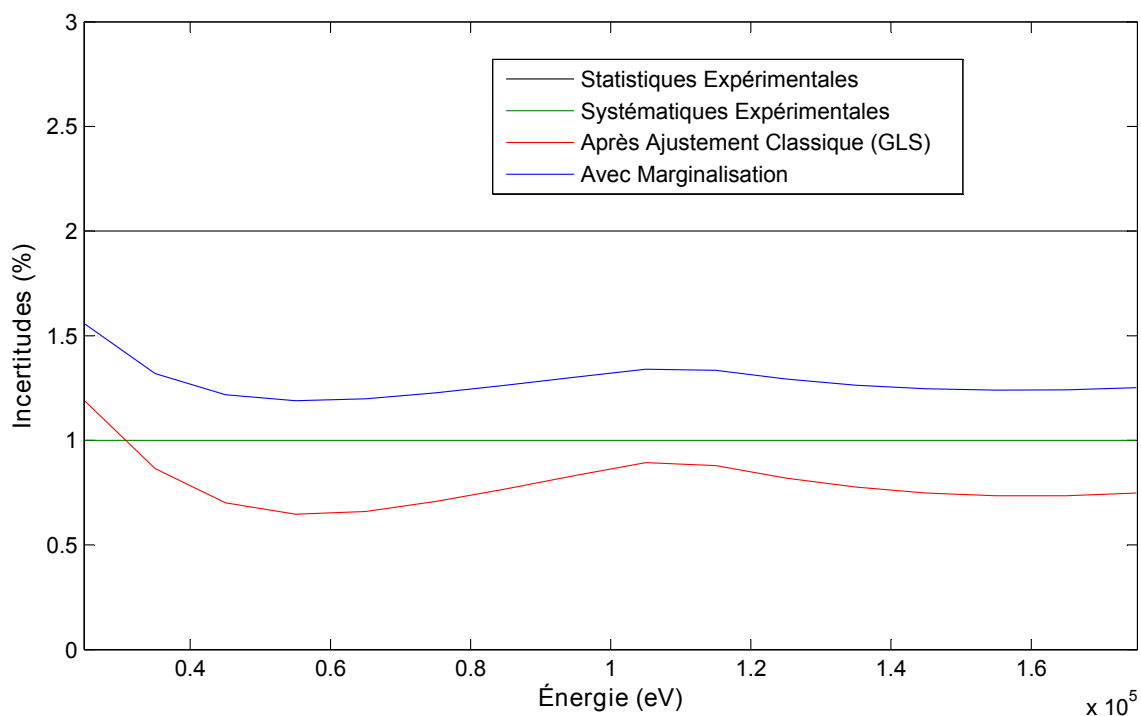


FIGURE 3.11. Incertitudes obtenues avec/sans prise en compte d'une incertitude systématique expérimentale de 1% (section efficace totale de l' $^{238}\text{U}$  avec un modèle d'URR pour les énergies inférieures à 105 keV et un modèle optique pour les énergies supérieures)

## 3.4 Formalisme des multiplicateurs de Lagrange

### 3.4.1 Formalisme

Lors d'un ajustement classique, des données expérimentales sont choisies et une théorie leur est associée. Les informations d'entrées, c'est-à-dire les points expérimentaux et leurs incertitudes, ainsi que les paramètres ajustés, vont permettre l'obtention des paramètres *a posteriori* comme décrit dans la Section 2.1. Dans ces travaux, on souhaite introduire des contraintes pendant cet ajustement. Ces contraintes peuvent être diverses et variées (l'intégrale de la section égale à une valeur donnée, la continuité de la section, le passage de la courbe par un point fixe...). Le principe de l'utilisation des multiplicateurs de Lagrange consiste à rajouter un terme à la fonction coût définie par l'Équation (2.6). Les variables suivantes sont définies pour la suite :

- $n_X$  le nombre de paramètres ajustés ;
- $n_E$  le nombre de points expérimentaux ;
- $n_C$  le nombre de contraintes ;
- $\vec{C}$  le vecteur contenant les  $n_C$  contraintes ;
- $\vec{\lambda}$  le vecteur contenant les  $n_C$  multiplicateurs de Lagrange.

La nouvelle fonction coût s'écrit de la façon suivante :

$$\chi_{GLS}^2 = (\vec{x} - \vec{x}_{prior})^T M_x^{prior^{-1}} (\vec{x} - \vec{x}_{prior}) + (t(\vec{x}) - \vec{y})^T M_E^{-1} (t(\vec{x}) - \vec{y}) + 2 \cdot \vec{C}(\vec{x}) \vec{\lambda} \quad (3.1)$$

Elle se compose de trois termes principaux : un terme lié à la connaissance *a priori* des paramètres en entrée, un autre sur la nouvelle information expérimentale, et le dernier qui traduit la contrainte. Si cette dernière est réalisée, le terme deviendra négligeable par rapport aux autres. La contrainte peut être définie, par exemple, de la façon suivante :

$$\vec{C}(\vec{x}) = \left( 1 - \frac{\vec{L}(\vec{x})}{\vec{R}(\vec{x})} \right)^2 \quad (3.2)$$

avec  $\vec{L}(\vec{x})$  et  $\vec{R}(\vec{x})$  définissant la contrainte imposée (continuité entre deux modèles par exemple). Cette forme a été choisie pour des raisons pratiques : la contrainte est toujours positive, sans dimension, de dérivées positives ou nulles et devient nulle lorsque la contrainte est respectée. Le vecteur  $\vec{C}(\vec{x})$  est de taille  $n_C$ . Nous souhaitons minimiser l'Équation (3.1) dans l'objectif de trouver les deux premiers moments de la distribution *a posteriori*. En dérivant l'expression du  $\chi_{GLS}^2$  par rapport à  $\vec{x}$  et  $\vec{\lambda}$ , on trouve les relations suivantes :

$$\begin{cases} d\chi_{GLS}^2/d\vec{x} = M_x^{prior^{-1}} (\vec{x} - \vec{x}_{prior}) + S_t^T(\vec{x}) M_E^{-1} \cdot (\vec{y} - \vec{t}(\vec{x})) + S_c^T(\vec{x}) \cdot \vec{\lambda} = 0 \\ d\chi_{GLS}^2/d\vec{\lambda} = \vec{C}(\vec{x}) = 0 \end{cases} \quad (3.3)$$

avec :

$$S_t(\vec{x}) = \frac{d\vec{t}(\vec{x})}{d\vec{x}} = \begin{pmatrix} \left. \frac{d\vec{t}(\vec{x})}{dx_1} \right|_{E1} & \cdots & \left. \frac{d\vec{t}(\vec{x})}{dx_{n_x}} \right|_{E1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \left. \frac{d\vec{t}(\vec{x})}{dx_1} \right|_{En_E} & \cdots & \left. \frac{d\vec{t}(\vec{x})}{dx_{n_x}} \right|_{En_E} \end{pmatrix}$$

et

$$S_c(\vec{x}) = \frac{d\vec{C}(\vec{x})}{d\vec{x}} = \begin{pmatrix} \frac{d\vec{C}_1(\vec{x})}{dx_1} & \cdots & \frac{d\vec{C}_1(\vec{x})}{dx_{n_x}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{d\vec{C}_{n_C}(\vec{x})}{dx_1} & \cdots & \frac{d\vec{C}_{n_C}(\vec{x})}{dx_{n_x}} \end{pmatrix}$$

La résolution de ce problème peut être réalisée en passant par une étape de linéarisation autour de  $\vec{x}_{prior}$ . On obtient alors les expressions suivantes :

$$\begin{cases} \vec{t}(\vec{x}) = \vec{t}(\vec{x}_{prior}) + S_t(\vec{x}_{prior}) \cdot \vec{x} \\ S_t(\vec{x}) = S_t(\vec{x}_{prior}) = S_t \\ S_c(\vec{x}) = S_c(\vec{x}_{prior}) = S_c \\ \vec{C}(\vec{x}) = \vec{C}(\vec{x}_{prior}) + S_c(\vec{x}_{prior}) \cdot \vec{x} \end{cases}$$

En posant  $\vec{t} = \vec{t}(\vec{x}_{prior})$  on obtient :

$$M_x^{prior^{-1}} \cdot (\vec{x} - \vec{x}_{prior}) + S_t^T M_E^{-1} \cdot \vec{y} - S_t^T M_E^{-1} \cdot [\vec{t} + S_t \cdot \vec{x}] + S_c^T \cdot \vec{\lambda} = 0 \quad (3.4)$$

Ce qui donne des expressions similaires au développement des méthodes analytiques de minimisation d'une fonction coût, avec un terme en plus correspondant aux contraintes. Les équations suivantes sont alors obtenues :

$$\begin{cases} (M_x^{prior^{-1}} - S_t^T M_E^{-1} S_t) \cdot \vec{x} + S_c^T \cdot \vec{\lambda} = M_x^{prior^{-1}} \cdot \vec{x}_{prior} + S_t^T M_E^{-1} \cdot (\vec{y} - \vec{t}) \\ S_c(\vec{x}_{prior}) \cdot \vec{x} = -\vec{C}(\vec{x}_{prior}) \end{cases} \quad (3.5)$$

Pour faciliter la lecture et simplifier les expressions, on pose :

$$\begin{cases} A = M_x^{prior^{-1}} - S_t^T(\vec{x}_{prior}) \cdot M_E^{-1} \cdot S_t^T(\vec{x}_{prior}) \\ B = S_c^T(\vec{x}_{prior}) \\ X = \vec{x} \\ \Lambda = \vec{\lambda} \\ F = M_x^{prior^{-1}} \cdot \vec{x}_{prior} + S_t^T(\vec{x}_{prior}) \cdot M_E^{-1} (\vec{t}(\vec{x}_{prior}) - \vec{y}) \\ G = -\vec{C}(\vec{x}_{prior}) \end{cases}$$

Finalement, on obtient le système matriciel suivant :

$$\begin{pmatrix} A & B^T \\ B & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ \Lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

La solution de ce système correspond à la détermination d'un point-selle de la fonction  $\chi_{GLS}^2$ . Ce système peut être résolu avec une méthode itérative d'Uzawa [71], définie par l'algorithme ci-dessous :

$$\begin{cases} X_{i+1} = X_i + A^{-1} (F - (AX_i + B^T \Lambda_i)) \\ \Lambda_{i+1} = \Lambda_i + \tau (BX_{i+1} - G) \end{cases}$$

avec  $\tau$  un réel.

La matrice de covariance est donnée par la relation suivante (cf. Paul Avery [72]) :

$$M_x^{post} = M_x^{prior^{-1}} - M_x^{prior^{-1}} B (B^t M_x^{prior^{-1}} B)^{-1} B^t M_x^{prior^{-1}} \quad (3.7)$$

Afin d'étudier la convergence de l'algorithme, on définit  $X$  et  $\Lambda$  solutions exactes du problème. Soit  $e_i$  le vecteur erreur à l'itération  $i$  et  $M$  une matrice, respectivement définis par :

$$e_i = \begin{pmatrix} X - X_i \\ \Lambda - \Lambda_i \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad M = \begin{pmatrix} 0 & -A^{-1}B^T \\ 0 & I - \frac{1}{\tau}BA^{-1}B^T \end{pmatrix}$$

Montrons que le vecteur  $e_{i+1}$  satisfait la relation  $e_{i+1} = M \cdot e_i$ .

$$M \cdot e_i = \begin{pmatrix} -A^{-1}B^T \Lambda + A^{-1}B^T \Lambda_i \\ \Lambda - \Lambda_i - \frac{1}{\tau}BA^{-1}B^T \Lambda + \frac{1}{\tau}BA^{-1}B^T \Lambda_i \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

D'après l'Équation (3.6) et l'Équation (3.8), on a :

$$\begin{cases} B^T \Lambda = F - AX \\ X_{i+1} = A^{-1}F - A^{-1}B^T \Lambda_i \\ \Lambda_{i+1} = \Lambda_i + \tau (BX_{i+1} - G) \end{cases}$$

D'où

$$M \cdot e_i = \begin{pmatrix} -A^{-1}(F - AX) - X_{i+1} + -A^{-1}F \\ \Lambda - \Lambda_{i+1} + \frac{1}{\tau}(BX_{i+1} - G) - \frac{1}{\tau}BA^{-1}B^T \Lambda + \frac{1}{\tau}BA^{-1}B^T \Lambda_i \end{pmatrix} \quad (3.9)$$



Après simplification, la relation devient :

$$M \cdot e_i = \begin{pmatrix} X - X_{i+1} \\ \Lambda - \Lambda_{i+1} \end{pmatrix} = e_{i+1} \quad (3.10)$$

Cette relation est typique en mathématique et physique appliquée. Le vecteur erreur de cette méthode itérative tend vers le vecteur nul, pour n'importe quelle  $e_0$ , si le module de la plus grande valeur propre  $\rho_{max}$  de  $M$  est inférieur à l'unité [73]. Soit  $\rho$  la fonction qui donne la plus grande valeur propre d'une matrice (par méthode de la puissance itérée). On a donc :

$$|\rho_{max}| = \left| \rho \left( I - \frac{1}{\tau} BA^{-1}B^T \right) \right| < 1 \quad (3.11)$$

En posant  $\tau = 2 * \rho(BA^{-1}B^T)$ , on va pouvoir forcer la convergence de l'algorithme. On obtient, par vérification, la relation suivante :

$$\rho_{max} = \rho \left( I - \frac{1}{\tau} BA^{-1}B^T \right) = 1 - \rho \left( \frac{1}{\tau} BA^{-1}B^T \right) = \frac{1}{2} \quad (3.12)$$

Ainsi  $|\rho_{max}| < 1$ , ce qui permet à l'algorithme d'Uzawa de converger.

### 3.4.2 Continuité de la section efficace

De façon usuelle, la continuité de la section efficace est parfois réalisée à la main. C'est-à-dire que l'on réalise une évaluation en choisissant les paramètres des modèles tel que l'on observe la continuité entre deux domaines théoriques. Or, ce n'est pas forcément le même laboratoire ou le même évaluateur qui réalise le travail d'évaluation pour un isotope donné, ce qui peut mener parfois à des discontinuités. Le formalisme Lagrangien des contraintes nous permet de rendre automatique la continuité de la section efficace lors de l'ajustement, et permet d'obtenir une matrice de variance-covariance cohérente avec le choix de la continuité. On se place dans le cas où nous étudions la continuité entre deux modèles  $M_1$  et  $M_2$  respectivement définis sur les domaines en énergie  $[E_{min}, E_{lim}]$  et  $[E_{lim}, E_{max}]$ . En reprenant l'Équation (3.2), on définit  $\vec{L}(\vec{x})$  et  $\vec{R}(\vec{x})$  les valeurs respectives du modèle  $M_1$  et  $M_2$  sur ces deux domaines.

Afin de vérifier la convergence et le bon fonctionnement de l'algorithme, dans le cadre de la continuité, deux exemples seront étudiés :

1. un cas didactique avec l'expérience d'Uttley décrite dans la Section 1.3 (Chapitre 1) avec un modèle URR de part et d'autre de la limite ;
2. un cas plus réaliste, toujours sur la même expérience, avec cette fois un modèle URR pour les basses énergies et un modèle optique sinon.

TABLEAU 3.6. Paramètres de l'URR (matrice R moyenne) pour la section efficace totale de l' $^{238}\text{U}$  utilisés dans ce cas didactique

Paramètres de la matrice R moyenne pour le modèle de gauche	
$S_0 = 2,290 \times 10^{-04} \pm 15\%$	$S_1 = 2,170 \times 10^{-04} \pm 15\%$
Paramètres de la matrice R moyenne pour le modèle de droite	
$S_0 = 1,290 \times 10^{-04} \pm 20\%$	$S_1 = 3,170 \times 10^{-04} \pm 30\%$

### Cas 1 : URR / URR

L'expérience d'Uttley présentée dans la Section 1.3 du Chapitre 1 est une fois de plus utilisée. Deux modèles de la matrice R moyenne sont choisis et une contrainte de continuité entre les deux théories à l'énergie  $E_{lim} = 105$  keV est imposée. Les paramètres ajustés ne sont pas les mêmes et sont indépendants entre modèles (*cf.* Tableau 3.6).

La Figure 3.12 montre la continuité de la section efficace totale, tout en conservant un bon compromis avec les points expérimentaux. Une discontinuité est obtenue lors d'un ajustement classique sans contrainte. La Figure 3.13 montre qu'avec une contrainte de continuité sur la section efficace totale de l' $^{238}\text{U}$ , des corrélations sont créées entre les deux modèles. Dans ce cas didactique, la continuité sur la section est bien obtenue d'une part, et une forme de continuité au niveau des covariances entre les deux blocs apparaît d'autre part.

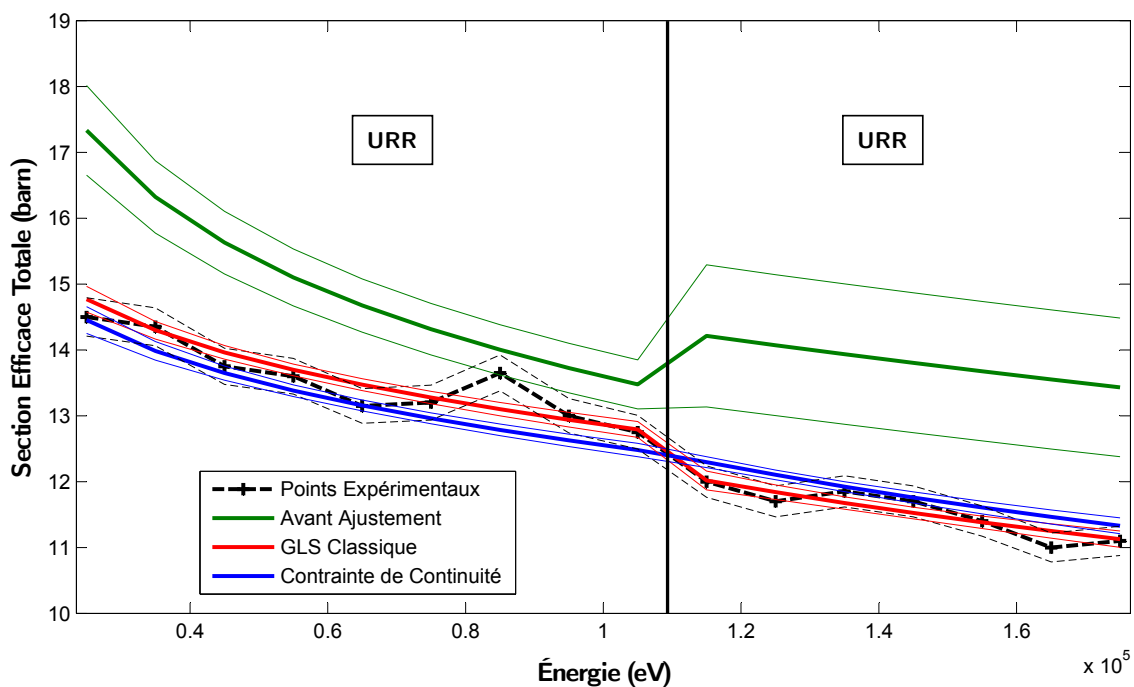


FIGURE 3.12. Résultats obtenus avec/sans prise en compte de la contrainte de continuité sur la section efficace totale de  $l'^{238}U$  (URR pour les énergies inférieures à 105 keV et URR pour les énergies supérieures)

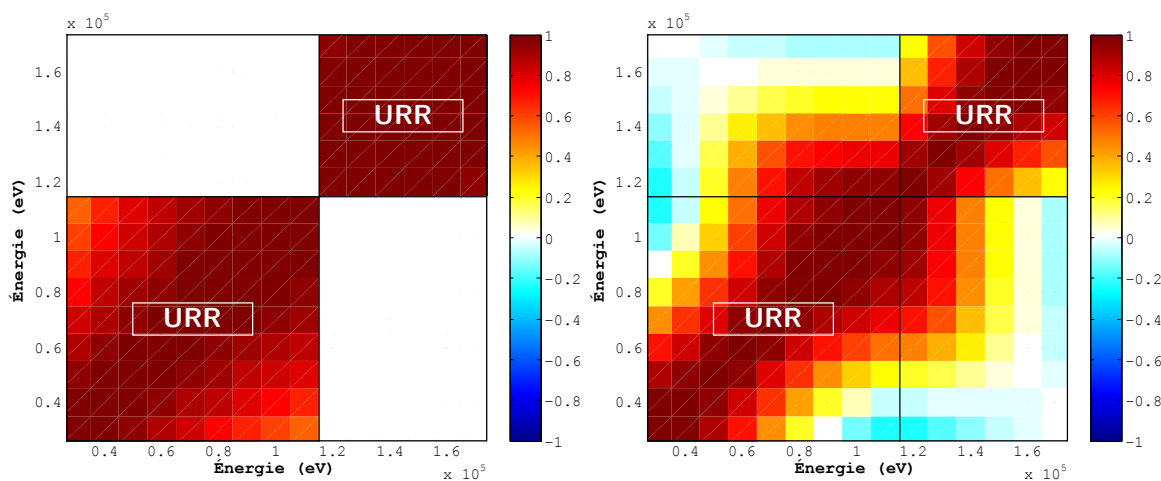


FIGURE 3.13. Matrices de corrélation obtenues avec/sans prise en compte de la contrainte de la continuité contrainte de continuité sur la section efficace totale de  $l'^{238}U$  (URR pour les énergies inférieures à 105 keV et URR pour les énergies supérieures)

## Cas 2 : URR / OM

La même expérience d'Uttley est reprise. Cette fois, un modèle de la matrice R moyenne à gauche et un modèle optique à droite sont utilisés. Une contrainte de continuité entre les deux modèles à l'énergie  $E_{lim} = 105 \text{ keV}$  est toujours imposée. Les paramètres utilisés pour l'ajustement sont transcrits dans le Tableau 3.7. Deux paramètres pour le modèle des résonances non-résolues et un seul pour le modèle optique est utilisé, correspondant à la hauteur du puits de potentiel  $p_0$ . L'ensemble des paramètres permettent de gérer le niveau de la section efficace sur l'ensemble des domaines en énergie.

L'algorithme permet d'avoir une continuité de la section entre les deux domaines en énergie (cf. Figure 3.14). Cette continuité est aussi atteinte au niveau des matrices de corrélation de la section efficace, comme en témoigne la Figure 3.15. Ces corrélations découlent de celles obtenues entre les paramètres de modèles (cf. Tableau 3.8). On constate une corrélation de 0,996 entre les paramètres  $S_1$  et  $p_0$ , justifié par le fait que ce sont deux paramètres qui influencent le niveau de la section dans ce domaine en énergie. La corrélation d'environ -0,5 entre  $S_0$  et  $S_1$  correspond au fait que ces paramètres influencent le niveau de la section, mais pas exactement pour les mêmes énergies.

TABLEAU 3.7. Paramètres de l'URR (matrice R moyenne) et du modèle optique pour la section efficace totale de  $l^{238}\text{U}$  utilisés dans ce cas réaliste

Paramètres de la matrice R moyenne	
$S_0 = 1,290 \times 10^{-04} \pm 15\%$	$S_1 = 2,170 \times 10^{-04} \pm 15\%$
Paramètre du modèle optique	
$p_0 = -82,40 \pm 5\%$	

TABLEAU 3.8. Corrélation créée entre les différents paramètres lorsque l'on impose la continuité de la section entre deux théories (URR et modèle optique)

	$S_0$	$S_1$	$p_0$
$S_0$	1	-0,595	-0,517
$S_1$		1	0,996
$p_0$			1

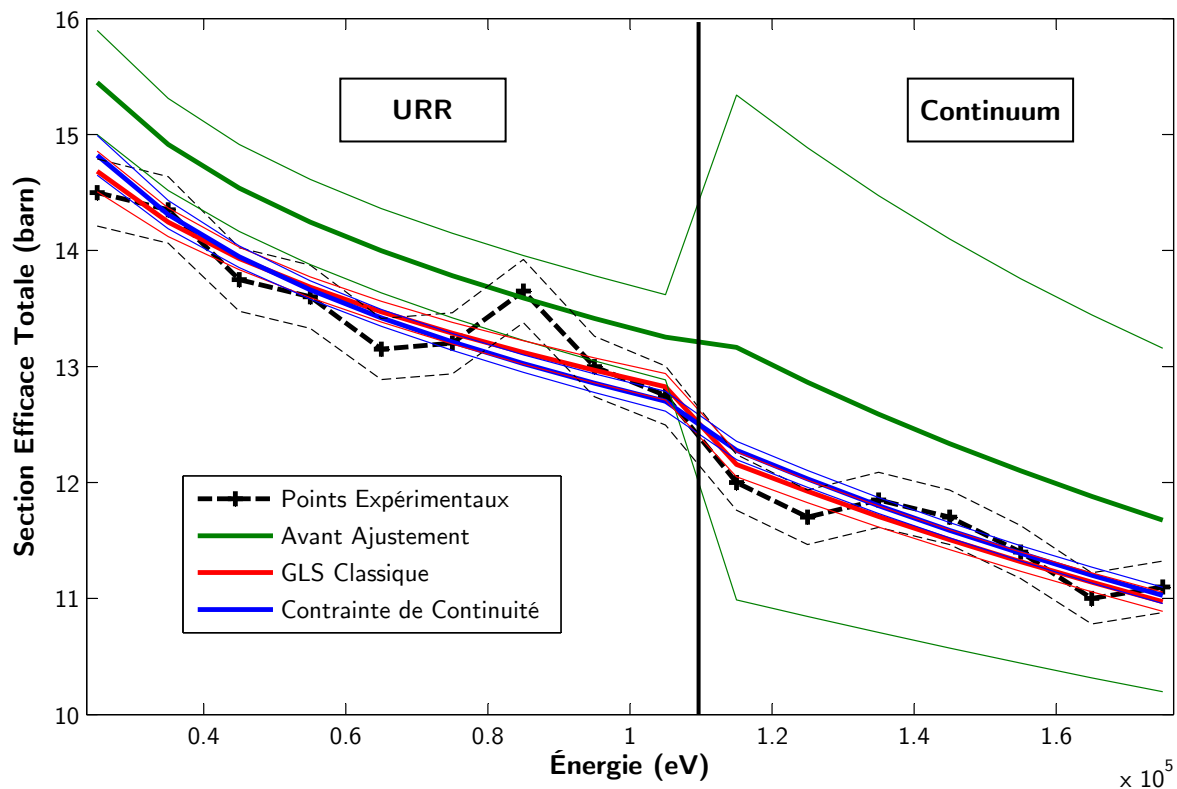


FIGURE 3.14. Résultats obtenus avec/sans prise en compte de la contrainte de continuité sur la section efficace totale de  $l'^{238}\text{U}$  (URR pour les énergies inférieures à 105 keV et modèle optique pour les énergies supérieures)

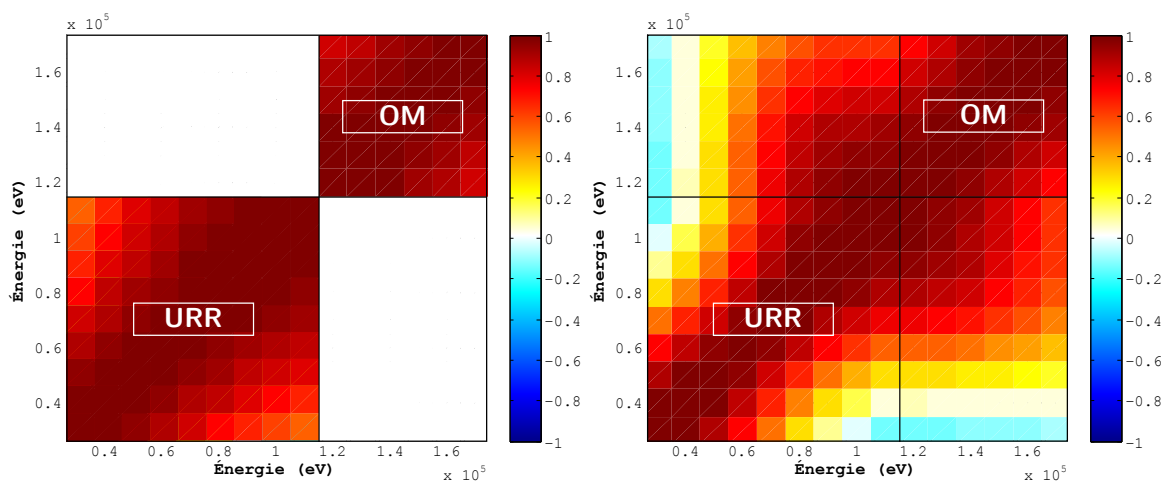


FIGURE 3.15. Matrices de corrélation obtenues avec/sans prise en compte de la contrainte de la continuité sur la section efficace totale de  $l'^{238}\text{U}$  (URR pour les énergies inférieures à 105 keV et modèle optique pour les énergies supérieures)

## 3.5 Synthèse

De façon générale, une évaluation peut être décomposée idéalement en trois temps :

1. Les connaissances sur les données nucléaires fondamentales sont utilisées pour déterminer les valeurs moyennes des paramètres de modèles et leurs covariances. Dans le cas où ces informations ne sont pas disponibles, des valeurs d'experts peuvent être utilisées. Il est nécessaire de prendre en compte les différentes théories qui vont être impliquées lors d'un ajustement à l'aide d'expériences. En effet, les expériences microscopiques ou intégrales peuvent faire intervenir plusieurs isotopes et/ou plusieurs domaines en énergie. Il a été rendu possible dans CONRAD d'utiliser ces différentes informations en même temps.
2. Ensuite, des expériences microscopiques sont utilisées afin d'améliorer les connaissances sur les données nucléaires (variances et valeurs moyennes) et de pouvoir représenter la forme des sections efficaces selon leur dépendance en énergie. Dans la mesure du possible, et afin d'assurer une bonne cohérence dans l'évaluation, il est recommandé d'utiliser les différentes méthodes décrites dans le Chapitre 2 précédent. De plus, il est important de réaliser une évaluation complète (avec plusieurs isotopes si les expériences en impliquent plusieurs) avec l'ensemble des expériences disponibles, en prenant en compte les éventuelles incertitudes et corrélations entre les points de mesure et entre les expériences. Dans le cas où l'évaluateur décide de reproduire une section efficace évaluée, il est intéressant d'imposer des incertitudes systématiques correspondant aux incertitudes que l'on peut trouver dans les bases de données expérimentales comme EXFOR.
3. Enfin, des expériences intégrales peuvent être utilisées pour réduire les incertitudes. Ce point est abordé dans les Chapitre 4 et 5.

La Figure 3.16 synthétise le schéma de principe de l'évaluation en présentant les différents ingrédients que l'on peut retrouver. Deux ajustements apparaissent : un permettant de faire un retour sur les modèles théoriques et leurs paramètres grâce aux expériences microscopiques et/ou contraintes ; le deuxième permettant d'utiliser l'information issue du précédent ajustement comme information *a priori*, et de réaliser une ADI (*Assimilation de Données Intégrales*) grâce aux expériences intégrales, ce qui fait l'objet du Chapitre 4 suivant.

Ce chapitre fournit également une solution aux difficultés que l'on rencontre lorsque l'on souhaite faire ou compléter une évaluation dont les paramètres et les modèles ne sont pas connus (seulement les sections efficaces ponctuelles). Il est possible de construire ses propres modèles pour représenter, au mieux, une évaluation à laquelle on souhaite intégrer des matrices de covariance. Dans un premier temps, l'évaluateur doit utiliser des modèles

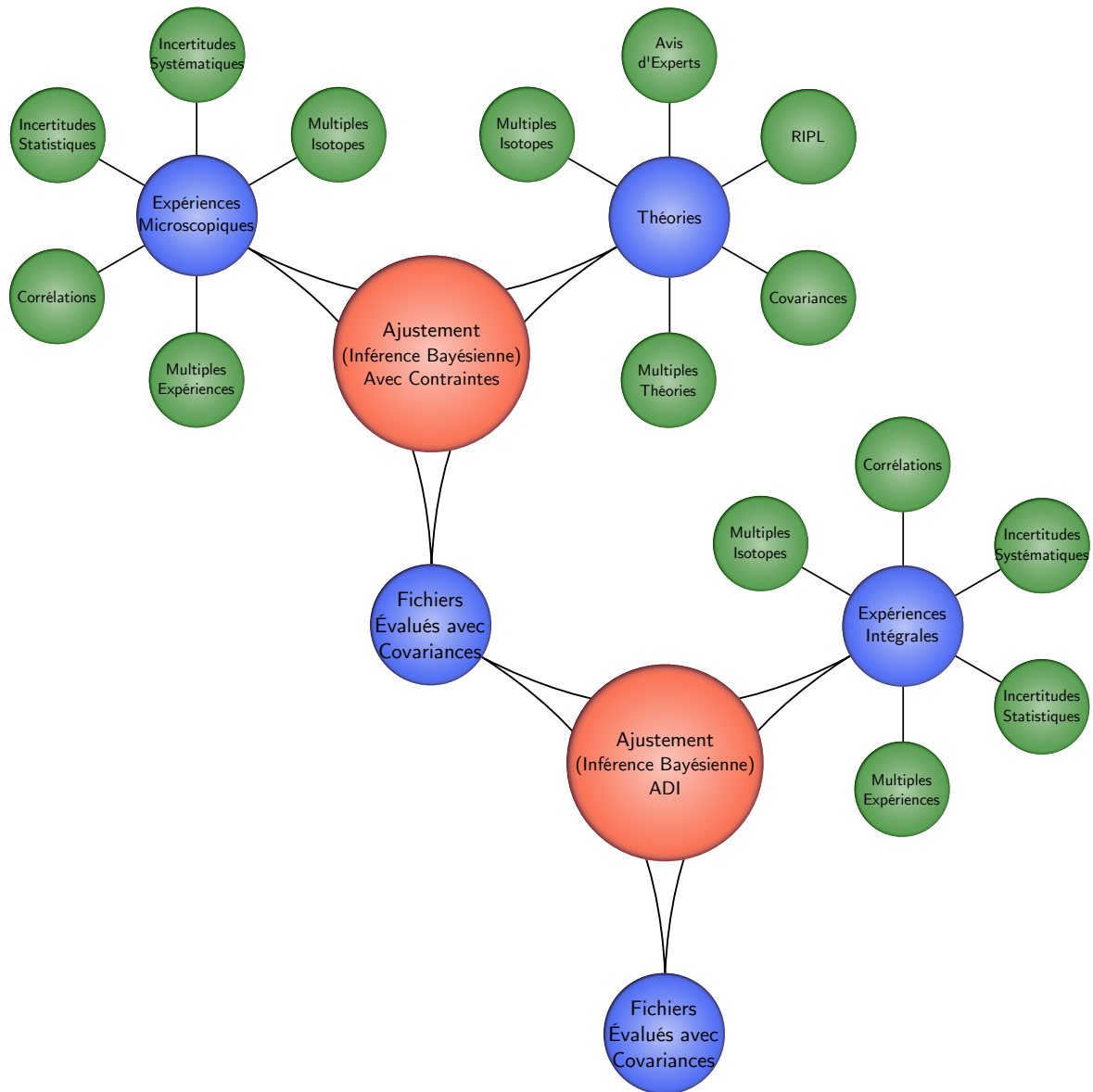


FIGURE 3.16: Méthode générale d'une évaluation idéalisée

disponibles et des paramètres permettant de reproduire une évaluation donnée. A ces paramètres il est important d'ajouter, dans un deuxième temps, des incertitudes statistiques, puis des incertitudes systématiques, souvent portées par un paramètre de normalisation (estimées par l'évaluateur, afin de refléter au mieux les incertitudes expérimentales disponibles dans la littérature ou recommandées). Le résultat de ces considérations est la production de matrices de covariance très corrélées. Ces corrélations vont contribuer aux incertitudes de grandeurs intégrales, comme le coefficient de multiplication par exemple.

Dans une dernière partie, on a pu voir qu'historiquement, les évaluateurs séparaient les différents domaines en énergie, provoquant alors des discontinuités entre le domaine des résonances résolues, non-résolues et le continuum, au niveau des sections efficaces, mais également au niveau des matrices de variance-covariance. Il a été choisi, pour pallier ce défaut, d'implémenter une méthode basée sur les multiplicateurs de Lagrange, dans l'optique de réaliser une unique analyse cohérente quand on traite une observable. Les performances de l'algorithme ont été améliorées durant la thèse et permettent ainsi d'obtenir des résultats convaincants, notamment sur une contrainte dite de continuité entre modèles. Ce formalisme laisse la place pour de futures implémentations :

- une contrainte où l'on impose une valeur de passage de l'observable (ceci peut être utilisé lorsqu'une courbe est renormalisé par rapport à un point) ;
- une contrainte de continuité de la dérivée ;
- une contrainte permettant de relier certains paramètres des différents modèles entre eux.

Enfin, il est dorénavant possible, dans CONRAD, d'utiliser ces différentes méthodes tout au long du processus d'évaluation. Par exemple, on pourrait en une seule fois, pour  $^{238}\text{U}$  :

- réaliser une évaluation dans le domaine résolu en se basant sur des expériences microscopiques existantes ;
- réaliser une évaluation dans le domaine du continuum à partir de l'évaluation JEFF-3.2 ;
- réaliser une évaluation dans le domaine non-résolu en se basant sur l'évaluation JEFF-3.2, avec des contraintes sur les paramètres de modèles et des contraintes de continuité avec les domaines voisins ;
- compléter les évaluations basées sur JEFF-3.2 précédente, en prenant en compte des incertitudes systématiques.

Ce travail n'a été fait que partiellement durant la thèse, car certaines étapes sont chronophages.





# Assimilation de Données Intégrales

---

## Sommaire

---

<b>4.1</b>	<b>Amélioration des évaluations en utilisant les expériences intégrales</b>	<b>101</b>
4.1.1	Assimilation de Données Intégrales sur les sections efficaces multigroupes	104
4.1.2	Assimilation de Données Intégrales sur les paramètres de modèles . . . . .	105
4.1.3	Outils de neutronique pour l'assimilation de données intégrales . . . . .	107
4.1.4	Outils de traitement pour l'assimilation de données intégrales . . . . .	110
<b>4.2</b>	<b>Application au <math>^{239}\text{Pu}</math></b>	<b>111</b>
4.2.1	Description du problème et schémas mis en œuvre . . . . .	111
4.2.2	Retours sur les paramètres de modèle en utilisant Jezebel . . . . .	113
4.2.3	Retours multigroupes en utilisant Jezebel . . . . .	114
4.2.4	Résultats et analyses . . . . .	116
<b>4.3</b>	<b>Synthèse</b>	<b>120</b>

---

Historiquement, les expériences intégrales ont toujours eu une importance et influencé l'évaluateur. Cependant, il n'était pas coutume de prendre directement en compte les expériences de type intégrale, lors du processus d'évaluation. En effet, ce dernier devait se reposer uniquement sur les expériences microscopiques. Les expériences intégrales étaient alors utilisées pour faire des retours multigroupes ("*feedbacks*" en anglais) par les physiciens des réacteurs. Ces mesures ( $k_{\text{eff}}$ , taux de réaction, coefficients de vidange...) permettaient aux évaluateurs de réaliser une qualification des données nucléaires et parfois de modifier de façon *ad-hoc* les sections efficaces multigroupes, dans l'optique de trouver un compromis entre expériences microscopiques et intégrales.

## 4.1 Amélioration des évaluations en utilisant les expériences intégrales

Dans les Chapitres 2 et 3 précédents, il a été introduit le principe de l'évaluation et de nouvelles méthodes pour fournir, d'une part, des capacités de validation de type stochastique,

et d'autre part, de pallier les manques de cohérence qui peuvent exister entre les différents domaines en énergie. Ce chapitre a pour objectif de mettre en avant les actions menées afin de réaliser des ADI (*Assimilation de Données Intégrales*) (ou IDA en anglais pour “*Integral Data Assimilation*”). Le principe général est donné sur le schéma de la Figure 4.1. On rappelle les notations suivantes :

- $\vec{x}$  représente les paramètres sur lesquels on souhaite faire des retours. Cela peut être soit des sections efficaces multigroupes, soit des paramètres de modèles dans ce travail ;
- $M_x^{prior}$  représente la matrice de covariance *a priori*, soit sur les paramètres de modèle, soit sur les sections efficaces multigroupes ;
- $\vec{t}(\vec{x}) = \vec{C}$  représente les valeurs calculées par les codes neutroniques. C'est le pendant de la théorie lors des ajustements de type microscopiques.
- $\vec{y} = \vec{E}$  représente les valeurs expérimentales intégrales ;
- $M_E$  correspond à la matrice de covariance expérimentale.

Un sous-groupe de l'AIEA (WPEC-SG33) travaille en particulier sur les sections efficaces multigroupes, mais également sur l'assimilation de données intégrales. Le sous-groupe a remis en question les retours multigroupes réalisés dans les dernières décennies, utilisant de multiples expériences intégrales et ajustant directement à l'aide de code déterministe les sections efficaces multigroupes. Ces retours figuraient alors dans des bibliothèques applicatives, utilisées pour des concepts de réacteurs précis. Trois principales critiques ressortent de leurs réflexions [74] :

- l'assimilation de données utilisant des codes déterministes impliquent des corrections de biais de calcul, différent pour chaque concept de réacteur, sur les sections efficaces multigroupes ajustées. Ainsi, il est important d'utiliser de telles bibliothèques seulement pour un concept bien précis de réacteur, en signalant à l'utilisateur que les sections utilisées corrigent également certains biais de calcul ;
- les différentes expériences considérées ne disposaient pas de corrélation entre elles. Or, l'impact sur les données nucléaires est importante, pouvant faire l'objet de réduction d'incertitude beaucoup trop grande et non-justifiée ;
- les expériences utilisées étaient sensibles à de nombreux isotopes et de nombreuses réactions. Or, plus on augmente le nombre de paramètres, plus la résolution de l'inférence Bayésienne est complexe, et plus les résultats sont difficilement interprétables.

Par exemple des retours multigroupes ont déjà été réalisés au CEA avec la bibliothèque de données ERALIB1 [75]. Cette dernière repose sur des assimilations de données intégrales à l'aide du code de calcul ERANOS (“*European Reactor ANalysis Optimized calculation System*”) [76, 77] présenté dans la Section 4.1.3 de ce chapitre.

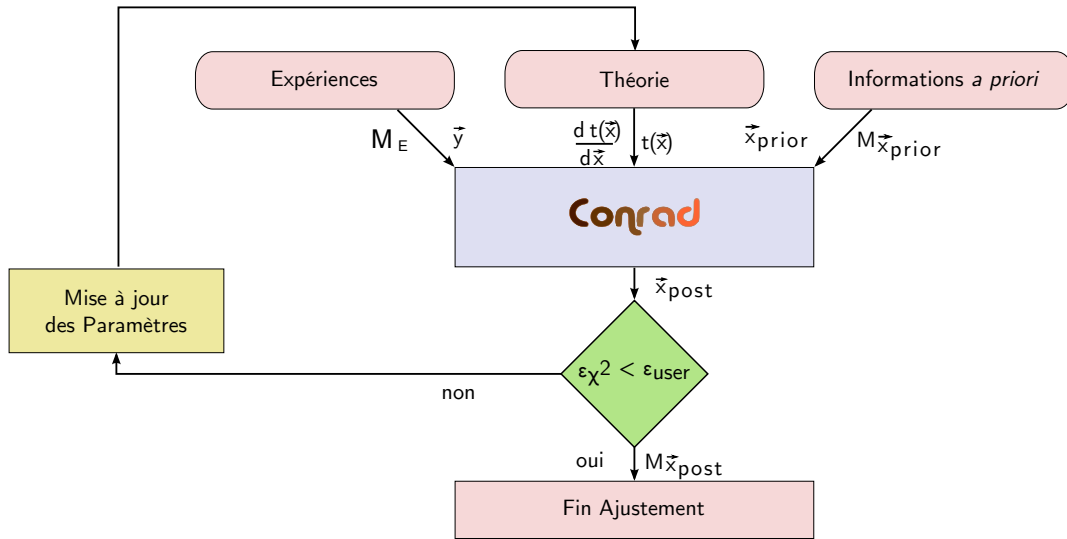


FIGURE 4.1. Méthode générale d’assimilation de données intégrales utilisée dans CONRAD. Le critère de convergence  $\epsilon_{user}$  est donné par l’utilisateur. Les paramètres  $\vec{x}$  peuvent soit des sections efficaces multigroupes, soit des paramètres de modèles

Dans le cadre de la thèse, les assimilations de données intégrales sont réalisées en s’affranchissant des biais de calculs, grâce à la simulation Monte Carlo, afin de rendre générique les évaluations (pouvant être utilisée pour d’autres applications). De plus, on cible des expériences sensibles uniquement à certaines réactions de certains isotopes. Ensuite, quelques expériences indépendantes sont prises en compte.

Plusieurs méthodes ont été implémentées par le passé dans le code CONRAD, permettant de réaliser l’assimilation de données intégrales :

- “low fidelity”, développée par B. Habert [55], permet de réaliser une assimilation rapide se basant sur les équations déclinées dans le Chapitre 2 de l’inférence Bayésienne, mais qui fait appel à de nombreuses approximations et considérations. Un seul calcul neutronique est nécessaire pour cette méthode ;
- “brute force”, développée par P. Archier [21], qui sera utilisée et décrite par la suite ;
- “coupled”, développée par P. Archier également dans le cadre de sa thèse, qui est un compromis entre les deux méthodes précédentes.

Deux méthodes développées dans ces travaux sont détaillées par la suite, inspirée de la “brute force”. La première fait appel à l’assimilation de données intégrales sur les sections efficaces, et la deuxième celle directement sur les paramètres de modèles. Enfin, les outils nécessaires, comme les codes de calculs neutroniques et les outils de pré-traitements, sont présentés par la suite.

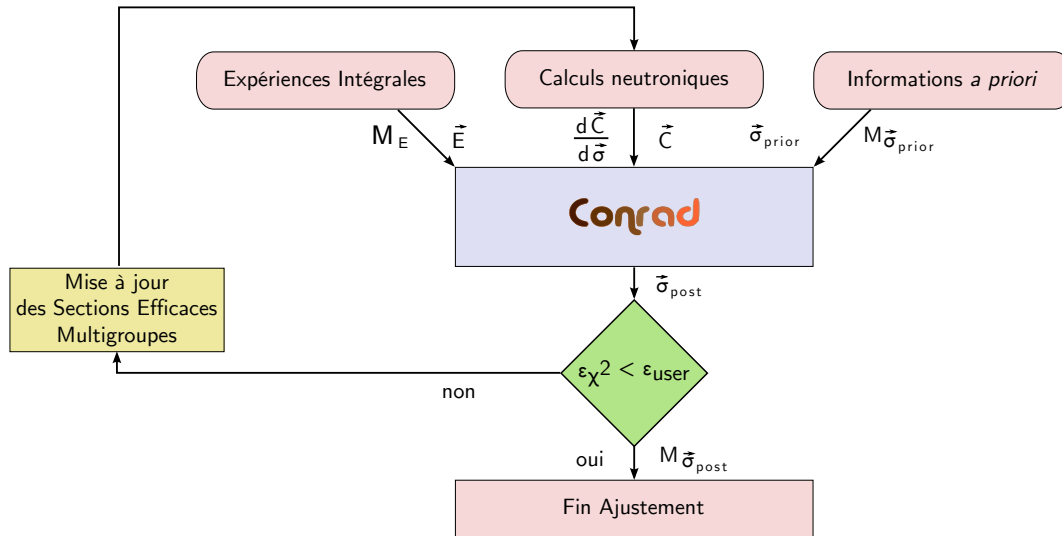


FIGURE 4.2. Méthode d'assimilation de données intégrales utilisée dans CONRAD sur les sections efficaces multigroupes.  $\epsilon_{user}$  est un critère de convergence choisi par l'évaluateur

#### 4.1.1 Assimilation de Données Intégrales sur les sections efficaces multigroupes

Ce choix est souvent motivé pour voir rapidement l'apport que pourrait avoir une expérience intégrale sur les sections efficaces. La méthode est relativement simple à appliquer, surtout quand on dispose d'outils de sensibilité associés aux codes de calcul neutroniques. En effet, l'assimilation est possible avec seulement trois informations :

- les sections efficaces multigroupes et les matrices de variance-covariance associées *a priori*, disponibles dans des bibliothèques d'application (*i.e.* en ECCOLIB pour le code ERANOS [78], en APOLIB pour le code APOLLO [79], au format PENDF pour TRIPOLI [80]...);
- les valeurs expérimentales intégrales, avec si possible, les matrices de covariance expérimentales;
- les grandeurs intégrales calculées et leurs sensibilités aux sections efficaces multigroupes. Ces dernières peuvent être obtenues soit par perturbation directe des sections efficaces (long en temps de calcul), soit par des moteurs de sensibilités disponibles dans les codes déterministes (APOLLO, ERANOS) ou récemment implémentés dans les codes Monte Carlo (MCNP, TRIPOLI) [81, 82]

La Figure 4.2 illustre cette méthode. La présence d'itérations apparaît et est nécessaire lorsque les grandeurs intégrales peuvent être modélisées par une fonction non-linéaire. Les matrices de covariance obtenues par cette méthode peuvent directement être exploitées pour

réaliser des propagations d'incertitudes, dans le cadre d'autres calculs neutroniques. Ce sont bien ces données qui sont actuellement utilisées par le modélisateur de réacteur et non celles sur les paramètres de modèles.

#### 4.1.2 Assimilation de Données Intégrales sur les paramètres de modèles

Soit  $N_x$  le nombre de paramètres de modèles contenu dans le vecteur  $\vec{x}$  et  $N_E$  le nombre d'expériences intégrales à calculer (taille du vecteur  $\vec{C}$ ). Dans cette méthode (cf. Figure 4.3),  $(2N_x + 1)$  évaluations différentes sont créées par itération et par isotope.  $(2N_x)$  pour les paramètres perturbés et une pour obtenir les valeurs moyennes (sans perturbation).

La première étape de la méthode consiste à réaliser une première itération avec le jeu de paramètres *a priori*  $\vec{x}$ . Le code CONRAD permet de créer des fichiers évalués nécessaires, c'est-à-dire les files 1, 2 et 3 indispensables pour l'assimilation de données intégrales. Ces fichiers, au format ENDF, sont ensuite traités pour être transformés en bibliothèques d'application. Ce traitement utilise principalement NJOY (cf. la Section 4.1.4). Cette étape permet ensuite d'évaluer les grandeurs neutroniques d'intérêt  $\vec{C}$ . Ensuite, pour chaque paramètre  $x_j$  de  $\vec{x}$ , deux évaluations sont créées, basées respectivement sur les jeux de paramètres  $\vec{x}_{+\delta x_j} = \{x_0, \dots, x_j + \delta x_j, \dots, x_{N_x}\}$  et  $\vec{x}_{-\delta x_j} = \{x_0, \dots, x_j - \delta x_j, \dots, x_{N_x}\}$ . À partir des vecteurs de paramètres  $\vec{x}_{+\delta x_j}$  et  $\vec{x}_{-\delta x_j}$ , on calcule  $\vec{C}^{+\delta x_j}$  et  $\vec{C}^{-\delta x_j}$ . De cette manière, les termes de la matrice de dérivées  $G$  peuvent s'écrire comme :

$$G_{(n)}(i,j) = \left( \frac{\partial C_i}{\partial x_j} \right)_{(n)} \simeq \left( \frac{C_i^{+\delta x_j} - C_i^{-\delta x_j}}{2\delta x_j} \right)_{(n)} \quad (4.1)$$

Autant d'itérations que nécessaire sont réalisées pour atteindre le critère de convergence imposé  $\varepsilon_{user}$  de l'assimilation de données. Une fois la solution trouvée, c'est-à-dire  $\vec{x}_{post}$  et  $M_{\vec{x}_{post}}$ , il est possible de calculer les sections efficaces et de propager les incertitudes des paramètres. À partir de ces sections efficaces, il est possible de réaliser, une fois encore, un traitement afin de mettre à jour une bibliothèque de données nucléaires pour de futurs calculs neutroniques.

Cette méthode est coûteuse en temps, mais reste abordable lorsque l'on réalise une assimilation de données intégrales sur de petits cœurs ou réacteurs. En effet, le temps nécessaire ne dépend quasiment que des calculs de la grandeur intégrale et des dérivées (soit  $(2N_x + 1) \cdot N_E$  simulations par itération). Il sera d'autant plus important si un code stochastique est utilisé. (présenté dans la section suivante). La dérivée calculée serait alors sans approximation déterministe. Dans le cas où un code de type Monte Carlo est utilisé, il faut bien évidemment faire attention à la convergence des résultats, et vérifier que l'incertitude statistique soit faible.

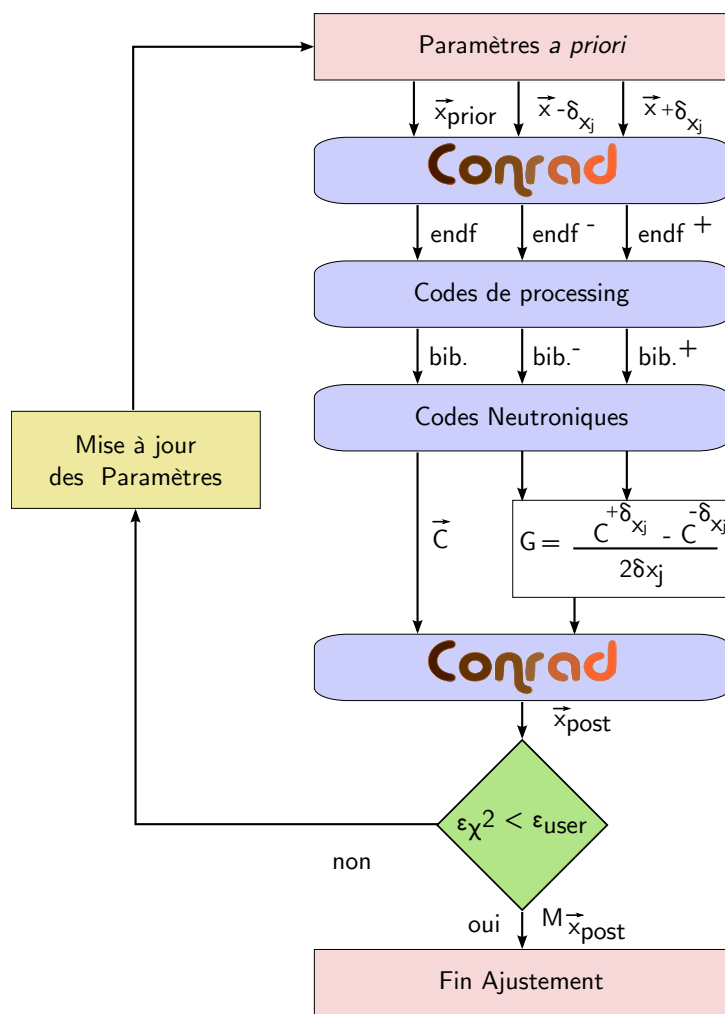


FIGURE 4.3. Méthode d'assimilation de données intégrales utilisée dans CONRAD directement sur les paramètres de modèles. Pour  $n$  paramètres ajustés,  $2n+1$  calculs neutroniques doivent être réalisés et donc  $2n+1$  pré-traitements.

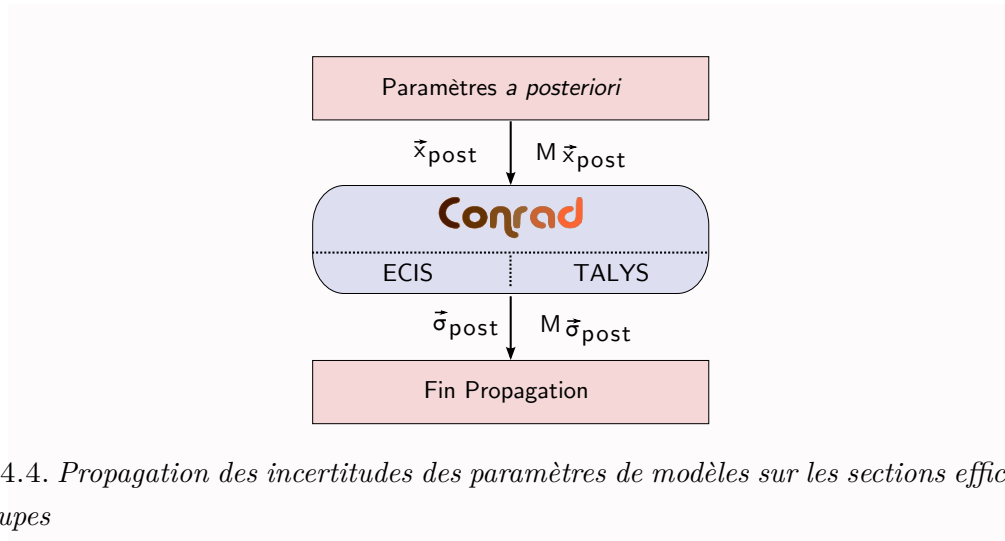


FIGURE 4.4. Propagation des incertitudes des paramètres de modèles sur les sections efficaces multigroupes

Cette méthode a été retenue pour s’affranchir des biais de calcul et rendre les évaluations aussi génériques que possible, les rendant valides pour tous les types de calculs neutroniques, quel que soit le code utilisé et le type de réacteur modélisé.

### 4.1.3 Outils de neutronique pour l’assimilation de données intégrales

La physique du réacteur, et plus particulièrement la neutronique, est décrite par les équations de Boltzmann. La résolution de cette dernière permet de connaître la distribution spatiale, énergétique et angulaire de la population neutronique au sein d’un réacteur. Les différents termes de cette équation font intervenir des caractéristiques de l’interaction neutron-noyau et donc des données nucléaires. L’équation du transport s’obtient en faisant un bilan de la variation du nombre de neutrons  $n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$  sur un intervalle de temps  $dt$ , dans un élément de volume  $d\vec{r}$ , pour un intervalle d’énergie  $dE$  et un angle solide  $d\vec{\Omega}$ . Cette variation est la somme de plusieurs contributions qui sont détaillées dans l’Annexe B. Le bilan neutronique, dépendant du temps, de l’espace, de l’angle et de l’énergie peut être condensé sous le format suivant :

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \Phi}{\partial t} = F_p \Phi + S_d + S - L \Phi \tag{4.2}$$

avec :

- $v$  la vitesse d’un neutron d’énergie  $E$  ;
- $\Phi$  le flux neutronique ;
- $F_p \Phi$  un terme de source de neutrons prompts issus de la fission ;
- $S_d$  un terme de source de neutrons retardés issus de la désintégration de certains produits de fission ;



- $S$  un terme de source de neutrons autres que les deux précédentes ( $(n,2n)$  par exemple) ;
- $L\Phi$  un terme de disparition de neutrons ( $(n,\gamma)$  et  $(n,n')$  par exemple).

On trouve deux catégories de codes de simulation pour résoudre l'équation de Boltzmann : certains procèdent à une résolution déterministe, d'autres à une résolution stochastique (simulation Monte Carlo). Le code TRIPOLI, ERANOS et PARIS sont décrits succinctement par la suite.

### Le code stochastique TRIPOLI

TRIPOLI [80] est un code Monte Carlo développé au CEA-Saclay. Il permet de résoudre les problèmes de transport des particules neutres et chargées (neutrons, photons, électrons, positrons). Il offre la possibilité de traiter la variable énergétique et angulaire de manière ponctuelle, à partir des bibliothèques de données issues des fichiers évalués au format ENDF-6. Il est également possible d'effectuer des calculs multigroupes, à partir de données issues d'un code déterministe, d'un calcul stochastique ou à partir de NJOY. TRIPOLI est principalement utilisé au sein du SPRC pour résoudre des problèmes à source ou de criticité en physique des réacteurs. Il a été utilisé dans le cadre de la thèse, pour simuler des expériences intégrales. Il est à noter que les temps de calculs sont importants pour des réacteurs de production avec les codes stochastiques, mais largement abordables pour des expériences intégrales dans des cœurs simples (boule enrichie...). La version TRIPOLI-4.8, datant de 2011, a été utilisée lors de ce travail. Un schéma de principe Monte Carlo est présenté sur la Figure 4.5.

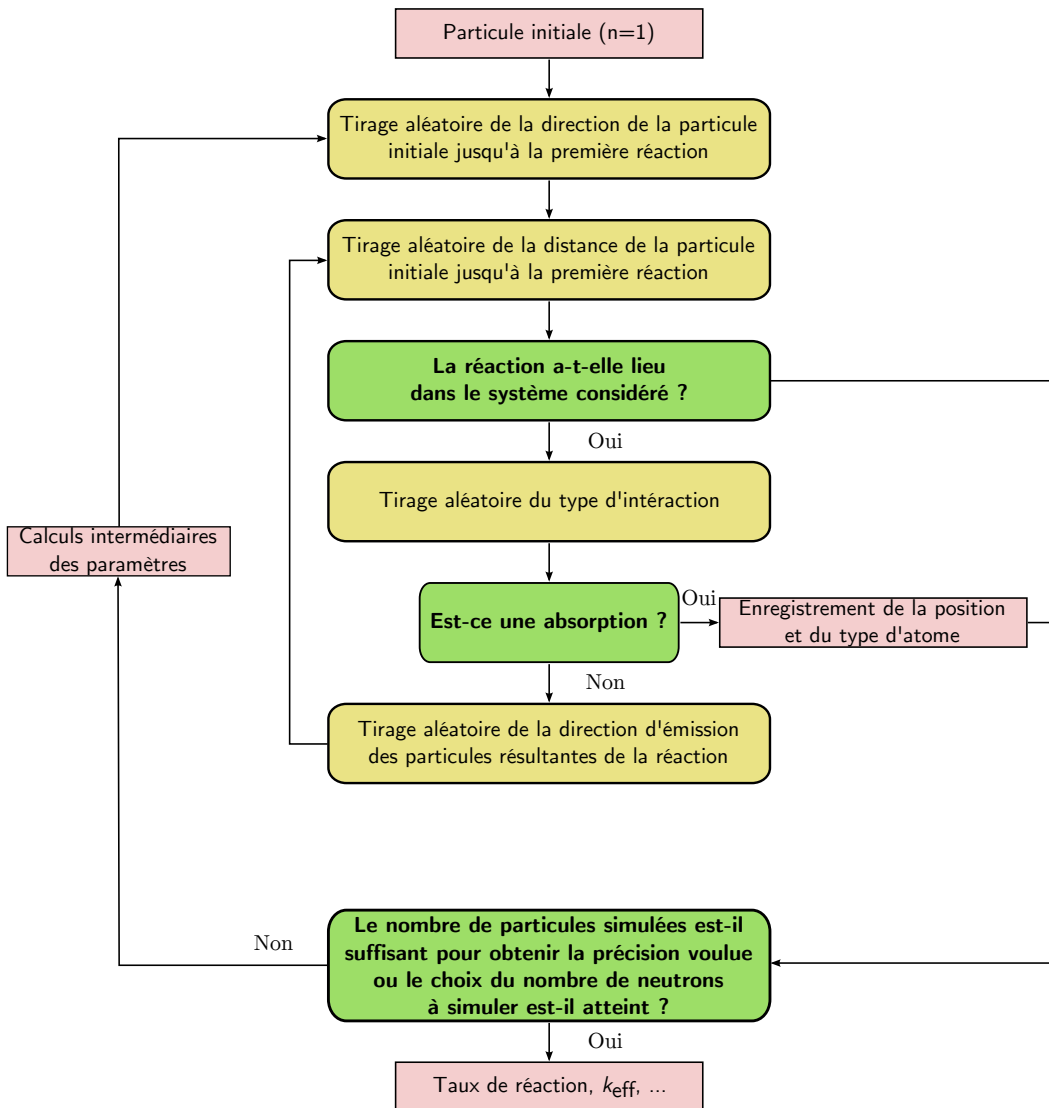


FIGURE 4.5: Schéma de principe des codes stochastiques

## Les codes déterministes ERANOS et PARIS

ERANOS [77, 76] a été développé et validé dans l’objectif de fournir des calculs neutroniques pour les réacteurs à neutrons rapides. Cette plateforme comprend une bibliothèque de données nucléaires applicatives (appelée ECCOLIB), des codes déterministes permettant de résoudre les équations de Boltzman et de Bateman et des procédures. Ce code permet de répondre au besoin des organisations de recherche et des exploitants, comme dernièrement les centrales Phénix et SuperPhénix en France. ERANOS regroupe :

- ECCO (*E*uropean *C*ell *C*ode), code de calcul cellule ;
- des solveurs flux (diffusion, transport...), permettant de réaliser des calculs au niveau du cœur ;
- des modules d’évolution cellule et cœur ;
- des outils de perturbation et d’analyse de sensibilités ;
- des modules permettant de faire du suivi de cœur.

PARIS, quant à lui, est une plateforme permettant de réaliser des calculs cœur de type Sn à trois dimensions. La méthode Sn traite les variables angulaires selon un nombre de directions données : elle est appelée méthode des “ordonnées discrètes”. Les calculs cellules sont réalisés au préalable par le module ECCO d’ERANOS, ainsi que l’homogénéisation et la condensation des sections efficaces à 33 groupes. PARIS permet également de calculer les sensibilités des grandeurs d’intérêt rapidement par la méthode des perturbations, via le calcul du flux adjoint [83].

### 4.1.4 Outils de traitement pour l’assimilation de données intégrales

Pour réaliser les assimilations intégrales, il est nécessaire de créer les fichiers évalués au format ENDF-6. Ces derniers doivent être transformés à l’aide de codes de traitement, dans l’objectif de créer une bibliothèque d’application pour les codes de neutronique.

En pratique, chaque code de neutronique nécessite un enchaînement de codes de traitement décrit comme suit :

- TRIPOLI (Monte-Carlo) :
  - NJOY [84] : pour transformer l’évaluation en PENDF (*P*ointwise *E*valuated *N*uclear *D*ata *F*ile) à la température souhaitée ;
  - CALENDF [20] : pour générer les tables de probabilités dans le domaine non-résolu de l’évaluation.
- ERANOS (Déterministe) :

- NJOY : pour transformer l'évaluation en GENDF (*Groupwise Evaluated Nuclear Data File*) à la température souhaitée ;
- CALENDF : pour générer les tables de probabilités (TP) dans le domaine résolu et non-résolu de l'évaluation, essentielles pour les calculs d'autoprotection dans ERANOS pour la phase cellule avec ECCO ;
- MERGE [85] : pour fusionner le GENDF produit par NJOY et les TP de CALENDF dans un même fichier ;
- GECCO [86] : pour mettre le fichier produit par MERGE dans un format accepté par ERANOS (les sections partielles sont mises dans des "macro"-sections dans un format de type binaire).

## 4.2 Application au $^{239}\text{Pu}$

### 4.2.1 Description du problème et schémas mis en œuvre

Deux méthodes possibles ont été vues pour réaliser une assimilation de données intégrales :

- une approche multigroupes sans passer par les paramètres de modèles ;
- une approche paramètres permettant de faire un retour, dans un premier lieu, sur les modèles puis sur les sections multigroupes.

Pour rappel, ce sont des matrices de covariance multigroupes qui sont utilisées pour réaliser une propagation d'incertitude. On reprend ici le schéma général défini en début de chapitre (*cf.* Section 4.1). L'objectif de cette partie est de comparer les deux méthodes d'assimilation de données intégrales, en réalisant un retour sur la section efficace de fission multigroupe et sur les paramètres du modèle optique du  $^{239}\text{Pu}$ . Le profil des sensibilités du  $k_{eff}$  aux sections efficaces de fission multigroupes justifie le choix de regarder seulement cette réaction et seulement le domaine du continuum (*cf.* Figure 4.6). L'expérience Jezebel décrite dans la Section 1.4 du Chapitre 1 est utilisée. Pour ce cas, seuls les résultats sur la section efficace de fission est présenté, à titre d'illustration des méthodes. La présentation de l'ensemble des résultats, en considérant les autres sections efficaces pour cette expérience, est présentée dans la Section 5.3 du Chapitre 5.

Le schéma de la Figure 4.7 synthétise les deux méthodes appliquées à ce cas et décrites dans les deux prochaines sections. *L'a priori*, utilisé comme point de départ pour les deux méthodes, correspond à celle construit dans la Section 3.2.2 du Chapitre 3.

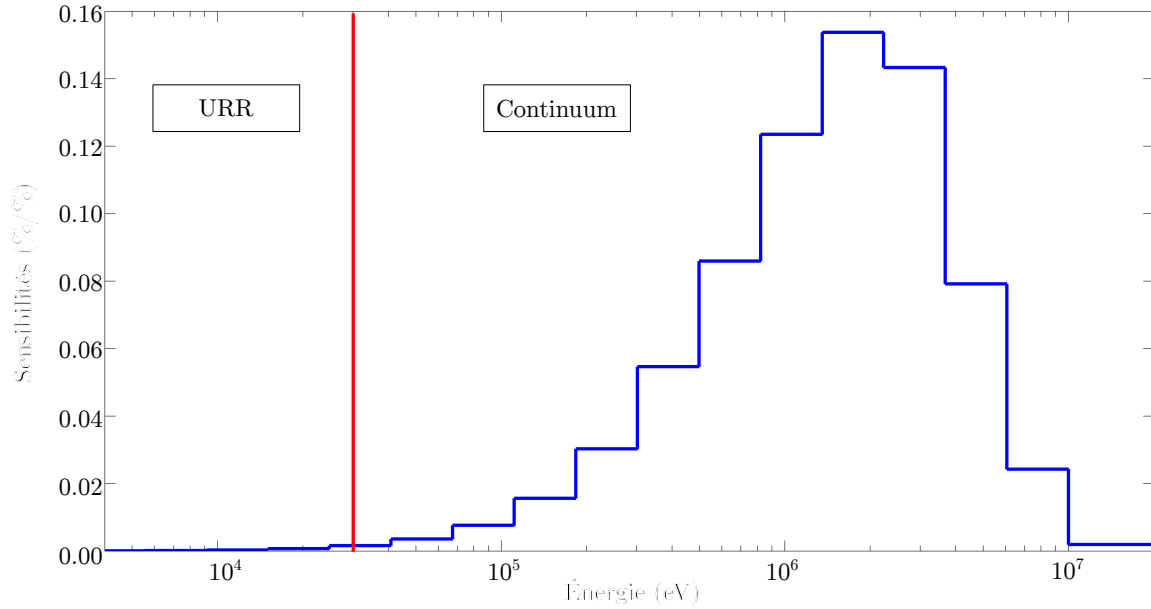


FIGURE 4.6. Profil des sensibilités du  $k_{eff}$  aux sections efficaces de fission multigroupes du  $^{239}\text{Pu}$

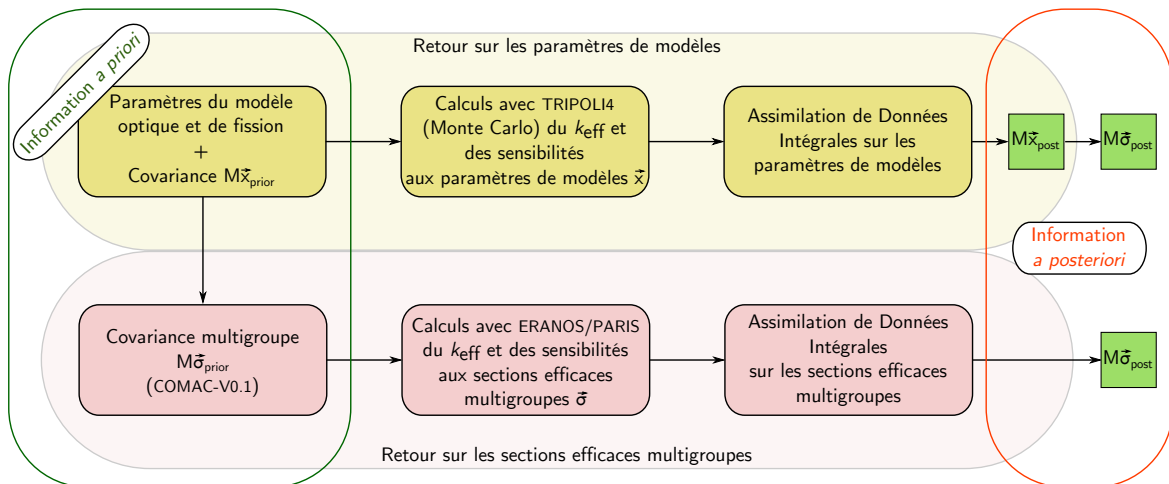


FIGURE 4.7. Schémas utilisés pour comparer les deux méthodes d'assimilation de données intégrales (sur les paramètres et sur les sections multigroupes) pour le  $^{239}\text{Pu}$  en utilisant Jezebel

### 4.2.2 Retours sur les paramètres de modèle en utilisant Jezebel

L'utilisation de cette méthode fait intervenir les paramètres de modèle du  $^{239}\text{Pu}$ . Les éléments nécessaires pour l'ajustement sont les sensibilités du coefficient multiplicateur à ces paramètres. L'obtention de ces dernières est réalisée à l'aide du code de calcul stochastique TRIPOLI par une approche directe. Chacun des paramètres se voit perturbé de +1 %, puis de -1 %. Ensuite, la bibliothèque applicative pour TRIPOLI est créée. Enfin, le double du nombre de paramètres de calculs sont simulés pour pouvoir évaluer la dérivée. Cette méthode est généralement coûteuse en temps de calcul, mais l'expérience est simple et la convergence statistique obtenue est suffisante après seulement quelques heures de calcul. La Figure 4.8 montre les étapes nécessaires pour une seule simulation complète (c'est-à-dire un seul paramètre perturbé). Ce processus est répété autant de fois que besoin pour obtenir toutes les sensibilités du coefficient multiplicateur aux paramètres. Un ajustement est ensuite réalisé à l'aide du code CONRAD (assimilation de données intégrales). Les paramètres *a posteriori* ainsi que leurs covariances sont alors obtenus. Une simple propagation de ces incertitudes permet d'obtenir les matrices de variance covariance sur la section efficace de fission, puis sur les sections multigroupes.

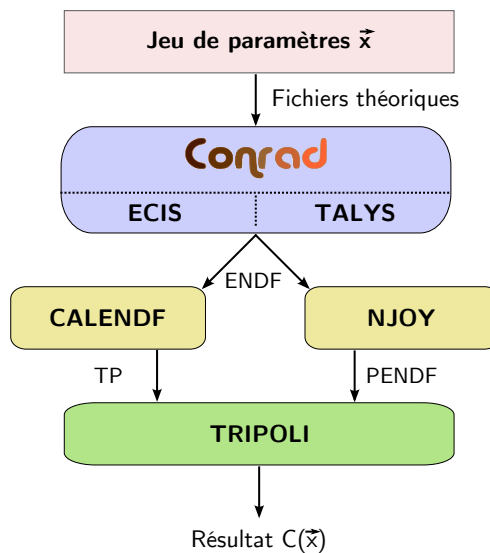


FIGURE 4.8. Méthode d'assimilation de données intégrales sur les paramètres du modèle optique du  $^{239}\text{Pu}$  en utilisant Jezebel

### 4.2.3 Retours multigroupes en utilisant Jezebel

L'utilisation de cette méthode fait directement intervenir les sections efficaces multigroupes du  $^{239}\text{Pu}$ . L'expérience Jezebel est utilisée pour obtenir un retour sur la section de fission à laquelle l'expérience est principalement sensible. Dans le cas choisi, les valeurs moyennes des sections efficaces sont considérées comme justes et permettent l'obtention du  $C/E=1$ . Ainsi l'utilisation de l'assimilation de données intégrales pour réduire les incertitudes est cohérente. Les éléments nécessaires pour l'ajustement sont les sensibilités du coefficient multiplicateur aux sections efficaces multigroupes. L'obtention de ces dernières est réalisée à l'aide des codes de calculs ECCO (du code ERANOS) et PARIS. ERANOS est utilisé pour générer les sections efficaces multigroupes à 33 groupes à partir des sections à 1968 groupes et du spectre de Jezebel (calculé par ERANOS également). PARIS permet de faire un calcul cœur précis et d'obtenir par une méthode perturbation, les sensibilités utilisées pour réaliser l'assimilation de données intégrales. Les sections efficaces à 1968 groupes sont issues des codes de traitement, utilisant les données d'entrée *a priori* déterminées dans la Section 3.2.2 du Chapitre 3, pour produire la bibliothèque applicative. La Figure 4.9 montre les différentes étapes nécessaires pour réaliser un retour multigroupe, des étapes de pré-traitement à l'ajustement permettant l'obtention des matrices de variance-covariance *a posteriori*.

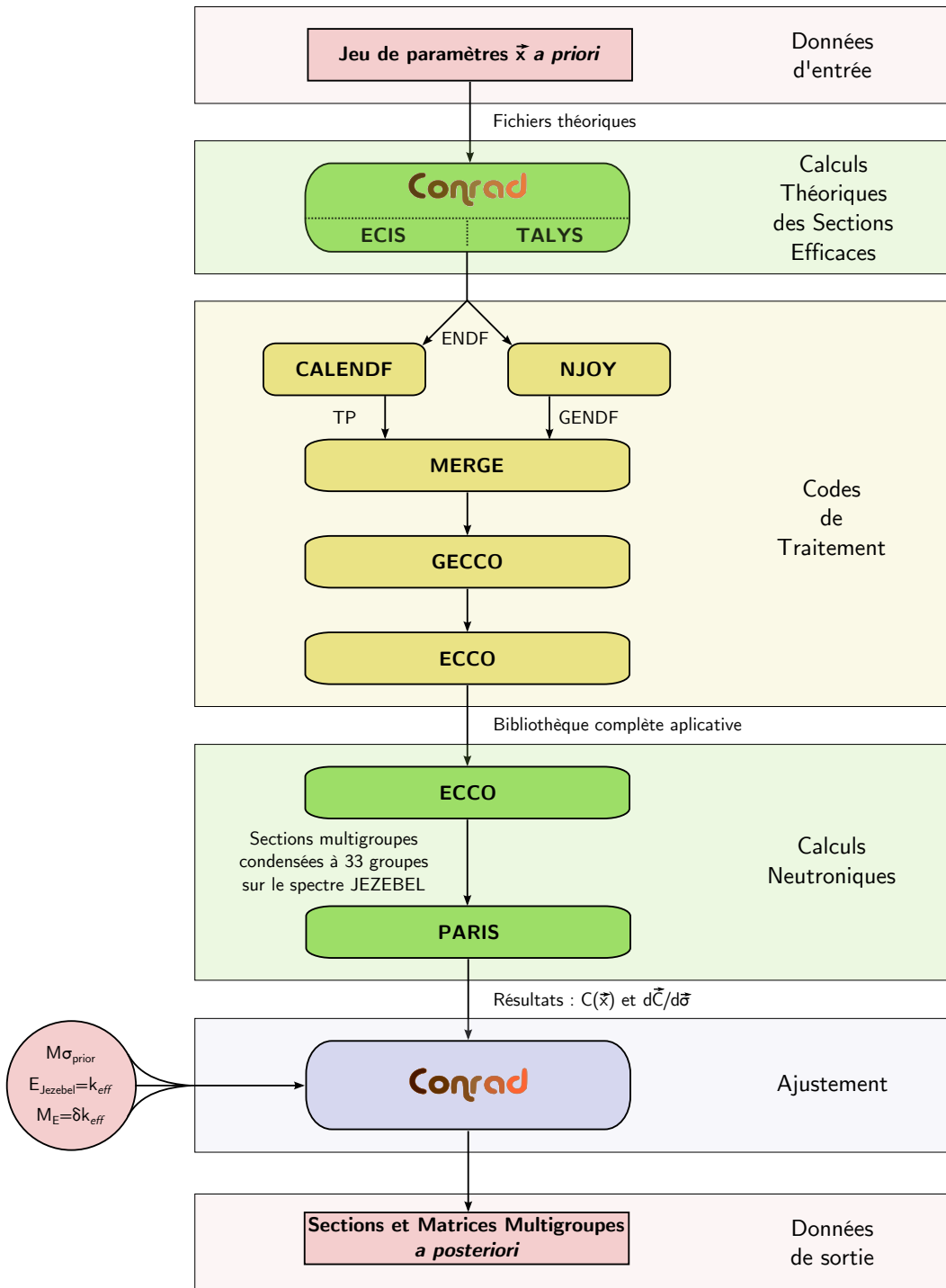


FIGURE 4.9. Méthode d'assimilation de données intégrales sur les sections efficaces du  $^{239}\text{Pu}$  en utilisant Jezebel



#### 4.2.4 Résultats et analyses

La Figure 4.10 montre la réduction d'incertitude obtenue avec les deux assimilations de données intégrales sur la section efficace finale de fission. Une réduction similaire des incertitudes est observée lorsqu'un retour sur les paramètres de modèle nucléaires ou sur les sections efficaces multigroupes est utilisé. Les assimilations de données intégrales jouent bien un rôle similaire, traduit par le fait que les paramètres de modèle sont directement liés aux sections efficaces. De plus, il y a une certaine linéarité entre les paramètres de modèle et la section efficace de fission du  $^{239}\text{Pu}$ , ce qui favorise ces résultats. Pour ces analyses, il n'y a pas de tendance sur le niveau de la section *a posteriori*, car on a un C/E proche de l'unité.

La Figure 4.11 montre les résultats obtenus sur la matrice de corrélation de la section efficace multigroupe de fission du  $^{239}\text{Pu}$ . Elle illustre également bien l'adéquation entre les deux assimilations de données intégrales. Cette exemple montre que, pour cet isotope et avec ces matrices *a priori*, les deux méthodes donnent des résultats identiques, que l'on utilise une assimilation de données intégrales "fine" sur les paramètres de modèle ou une assimilation sur les sections efficaces multigroupes. De plus, la réduction des incertitudes s'accompagne également de la réduction des corrélations (*cf.* Figure 4.11). Les conséquences de telles réductions est une diminution supplémentaire de la contribution des incertitudes de la fission du  $^{239}\text{Pu}$  sur les grandeurs d'intérêt des réacteurs à neutrons rapides. D'ailleurs, le Tableau 4.1 montre les incertitudes obtenues du  $k_{eff}$  d'un réacteur rapide de nouvelle génération, avec la contribution de la section efficace de fission du  $^{239}\text{Pu}$  [66].

Pour ces analyses, les paramètres de modèle les plus sensibles sont ceux des barrières de fission (de première et de seconde chance), des densités de niveaux et du potentiel optique, notamment le rayon et la diffusivité. Leurs incertitudes ont été réduites en utilisant Jezebel lors de l'assimilation de données intégrales et leurs corrélations ont changé.

TABLEAU 4.1. Contribution du  $^{239}\text{Pu}$  à l'incertitude d'un  $k_{eff}$  représentatif d'un concept de réacteur à neutrons rapides. Le prior est pris dans la base COMAC-V0.1. La dernière colonne est obtenue suite à l'assimilation de données intégrales de Jezebel sur la section efficace de fission seulement. L'incertitude totale prend en compte l'ensemble des réactions et isotopes présent dans la base COMAC [66]

Covariances	COMAC-V0.1	COMAC-V0.1+Jezebel
Fission	782	304
TOTAL (réactions+isotopes)	1249	994

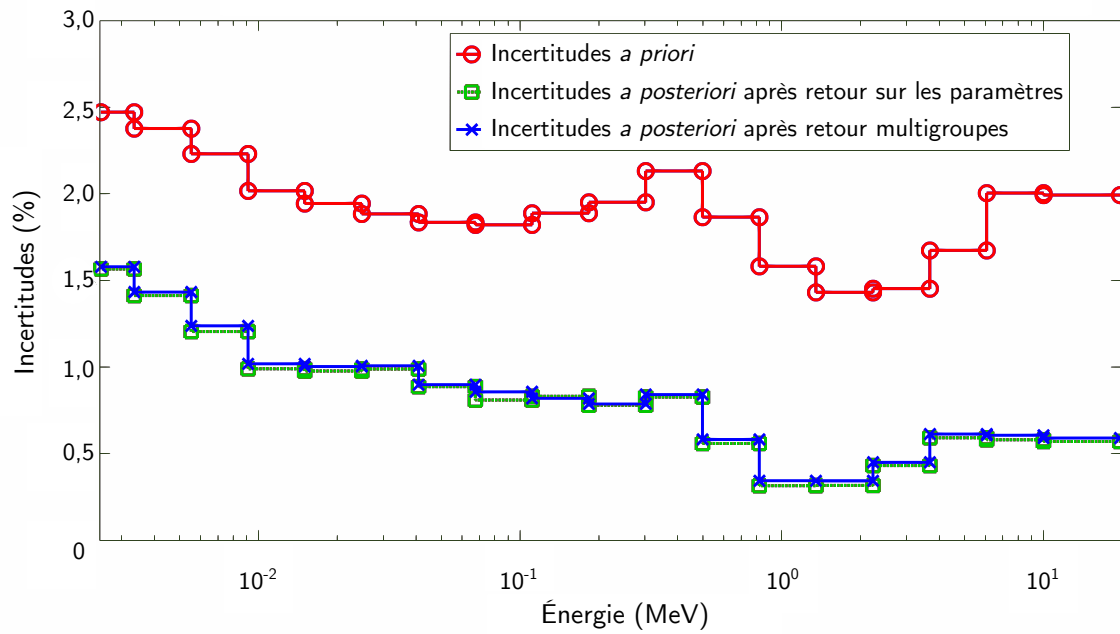


FIGURE 4.10. Incertitudes sur la section efficace de fission du  $^{239}\text{Pu}$  a priori et a posteriori, obtenues avec les deux schémas de calcul

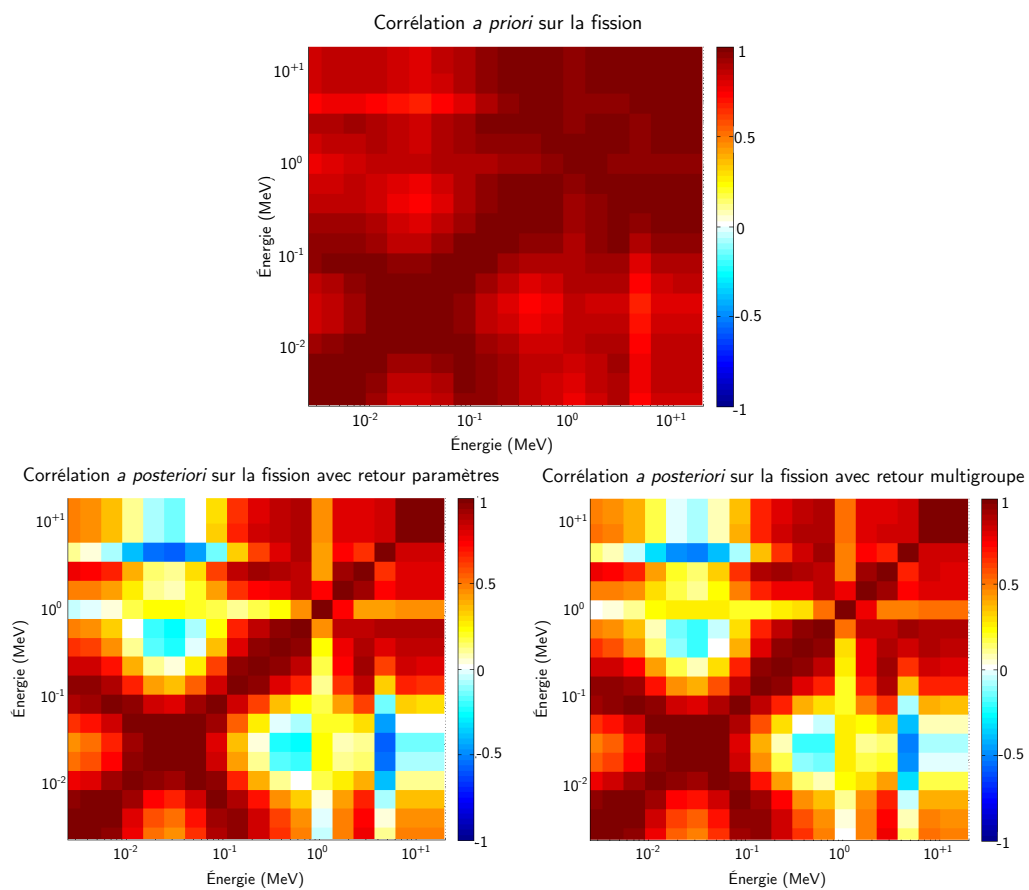


FIGURE 4.11. Matrices de corrélation de la section efficace de fission du  $^{239}\text{Pu}$  *a priori* et *a posteriori*, obtenues avec les deux schémas de calcul

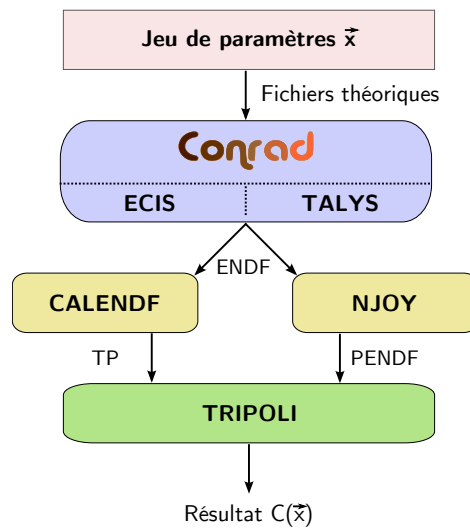


FIGURE 4.12. Méthode d'assimilation de données intégrales sur les paramètres du modèle optique du  $^{239}\text{Pu}$  en utilisant Jezebel

### 4.3 Synthèse

Une fois qu'une évaluation est construite d'un point de vue microscopique, il est important d'utiliser des expériences intégrales pour produire une nouvelle matrice de covariance grâce à une assimilation de données intégrales. Deux méthodes peuvent être choisies :

- ADI sur les paramètres de modèle, puis propagation des incertitudes des paramètres sur les sections efficaces multigroupes utilisées par les codes de neutronique (pour estimer les incertitudes sur des grandeurs intégrales) ;
- ADI sur les sections efficaces multigroupes.

Avec l'exemple de l'assimilation de données intégrales sur la section de fission du  $^{239}\text{Pu}$  en utilisant Jezebel, on constate que les deux méthodes fournissent des résultats identiques. Ces résultats donnent crédit à l'assimilation de données intégrales réalisée directement sur les sections efficaces multigroupes (beaucoup plus rapide et facile à mettre en place), dans les cas où l'expérience est principalement sensible à un isotope et une réaction. Ce critère peut être évalué facilement en réalisant un calcul déterministe avec des codes utilisant des perturbations généralisées, fournissant les sensibilités des observables neutroniques aux sections efficaces multigroupes.

A noter que l'assimilation de données intégrales peut être utilisée pour toutes les données nucléaires évaluées, que ce soit les différentes sections efficaces, comme présentés ici, mais également pour le spectre de fission ou encore la multiplicité des neutrons. L'assimilation complète de Jezebel en considérant les principales réactions a été menée et les résultats sont présentés dans la Section 5.3 du Chapitre 5.

Durant la thèse, il n'a pas été vu d'exemple montrant la nécessité de réaliser l'assimilation sur les paramètres de modèles. Il serait intéressant de trouver des cas où l'ajustement multigroupe présente des failles. Cela peut être le cas pour des grandeurs neutroniques en réacteur de production ou de recherche, sensibles à plusieurs réactions de différents isotopes, car des liens seront plus forts entre les paramètres de modèles. Pour un isotope de même numéro atomique, les paramètres de densité de niveau, par exemple, des différents isotopes considérés, sont nécessaires. Une fois la propagation des incertitudes des paramètres de modèles aux sections efficaces, on s'attend alors à voir apparaître des corrélations entre réactions pour un même isotope, mais également entre isotope. Pour réaliser de tels ajustements de façon plus automatique, des développements supplémentaires seraient nécessaires dans le code CONRAD.

Les travaux d'assimilation présentés dans ce chapitre s'appuient sur la résolution analytique de l'inférence Bayésienne. Cependant, les méthodes stochastiques BMC présentées dans le Chapitre 2 peuvent très bien être utilisées également. D'ailleurs, les résultats obtenus pour le

cas du  $^{239}\text{Pu}$  sont exactement similaires, bien que non transcrit ici. Deux méthodes peuvent être approchées dans le cas d'utilisation de la méthode BMC :

- une utilisant les sensibilités de la grandeur expérimentale aux données nucléaires ou multigroupes pour calculer la fonction de vraisemblance (les poids). Cette méthode est intrinsèquement utilisable dans CONRAD ;
- une re-calculant la *vraisemblance* pour chaque tirage aléatoire des paramètres ou sections selon la distribution *a priori*. Cette méthode nécessite quelques implémentations dans CONRAD pour la rendre utilisable. A noter que les temps de calculs seraient beaucoup plus longs, et d'autant plus si on fait un retour sur les paramètres de modèles à cause des chaînes de pré-traitement.

Enfin, les expériences intégrales issues des benchmarks ou des structures de recherche (données restreintes) viennent apporter de nouvelles données, bien qu'elles ne soient pas toujours publiques. Elles permettent d'obtenir des informations plus précises en terme d'incertitudes sur les niveaux des sections efficaces. Une fois de plus, il est nécessaire d'avoir une description fine des incertitudes de l'expérience, afin de les maîtriser et de les assimiler correctement.



# Utilisation des expériences intégrales

## Sommaire

<b>5.1</b>	<b>Interprétation des expériences PROFIL et PROFIL-2</b>	<b>123</b>
5.1.1	Les programmes PROFIL	124
5.1.2	Méthode de propagation des incertitudes	130
5.1.3	Les données nucléaires de $^{235}\text{U}$ et de $^{238}\text{U}$	133
5.1.4	Résultats et discussion pour PROFIL-2A	139
5.1.5	Bilan et résultats finaux	142
<b>5.2</b>	<b>Utilisation d'expériences intégrales pour <math>^{238}\text{U}</math></b>	<b>143</b>
5.2.1	Description de l'expérience réalisée dans MASURCA	144
5.2.2	Matrice de covariance <i>a priori</i>	145
5.2.3	Résultats <i>a posteriori</i> et discussion	145
<b>5.3</b>	<b>Utilisation des résultats PROFIL et Jezebel pour le <math>^{239}\text{Pu}</math></b>	<b>148</b>
<b>5.4</b>	<b>Synthèse</b>	<b>154</b>

## 5.1 Interprétation des expériences PROFIL et PROFIL-2

Les expériences PROFIL et PROFIL-2 ont été réalisées dans le réacteur à neutrons rapides Phénix (CEA Marcoule, France). Elles fournissent des informations intégrales sur les sections efficaces de capture neutronique, de fission et (n,2n) pour des neutrons rapides ( $E > 1 \text{ keV}$ ), pour de nombreux produits de fission et actinides. Les dernières interprétations avec les bibliothèques JEFF-3.0 et JEFF-3.1 ont été réalisées en 2006 et 2008 [87, 88]. Les résultats sont donnés en terme de ratios de valeurs calculées sur les valeurs mesurées, notés  $\langle C/E \rangle$ . Les incertitudes expérimentales sont très faibles. Par exemple, les résultats pour  $^{235}\text{U}(n,\gamma)$ ,  $^{238}\text{U}(n,\gamma)$  et le  $^{239}\text{Pu}(n,\gamma)$  sont de l'ordre de 0,2 % [88] (*cf.* Tableau 5.1).



TABLEAU 5.1. *Tendances intégrales en terme de  $\langle C/E \rangle$  pour les sections efficaces de capture du  $^{235}\text{U}$ ,  $^{238}\text{U}$  et  $^{239}\text{Pu}$ , obtenues lors de l'interprétation des expériences PROFIL et PROFIL-2 avec la bibliothèque de données nucléaires évaluées JEFF-3.1*

Isotopes	Réaction	JEFF-3.1
$^{235}\text{U}$	(n, $\gamma$ )	$1.000 \pm 0.001$ (0.1%)
$^{238}\text{U}$	(n, $\gamma$ )	$1.018 \pm 0.002$ (0.2%)
$^{239}\text{Pu}$	(n, $\gamma$ )	$0.981 \pm 0.001$ (0.1%)

Ces faibles incertitudes ne représentent pas les incertitudes systématiques typiques d'une expérience d'irradiation, dépendant de nombreux facteurs de normalisation (comme le temps d'irradiation, le niveau de flux...).

Les principales sources d'incertitudes pour de telles expériences dépendent, de façon simplifiée, de trois paramètres :

- la mesure de densité des échantillons avant et après irradiation ;
- la mesure de l'isotopie avant et après irradiation ;
- la mesure de la fluence.

Ce travail propose une solution analytique pour estimer des incertitudes réalistes sur les  $\langle C/E \rangle$  due à la dernière source d'incertitude.

### 5.1.1 Les programmes PROFIL

Les expériences intégrales réalisées dans les réacteurs de puissance, comme Phénix, sont importantes pour la validation et l'évaluation des fichiers ENDF. Les programmes PROFIL sont utilisés pour fournir des retours sur les données nucléaires de la bibliothèque JEFF, avec des réductions d'incertitudes possibles lors de l'assimilation de données intégrales. Une description plus exhaustive est donnée dans les articles [87, 88] et une publication à paraître de ces travaux [89].

#### 5.1.1.1 Description des expériences

PROFIL et PROFIL-2 font parties des expériences intégrales d'irradiation. Le principe consiste à irradier des échantillons contenant de faibles quantités d'isotope, aussi purs que possible, sous un spectre neutronique bien caractérisé. Ces programmes ont été conçus pour étudier les sections efficaces dans le domaine des résonances non-résolues et le continuum. La

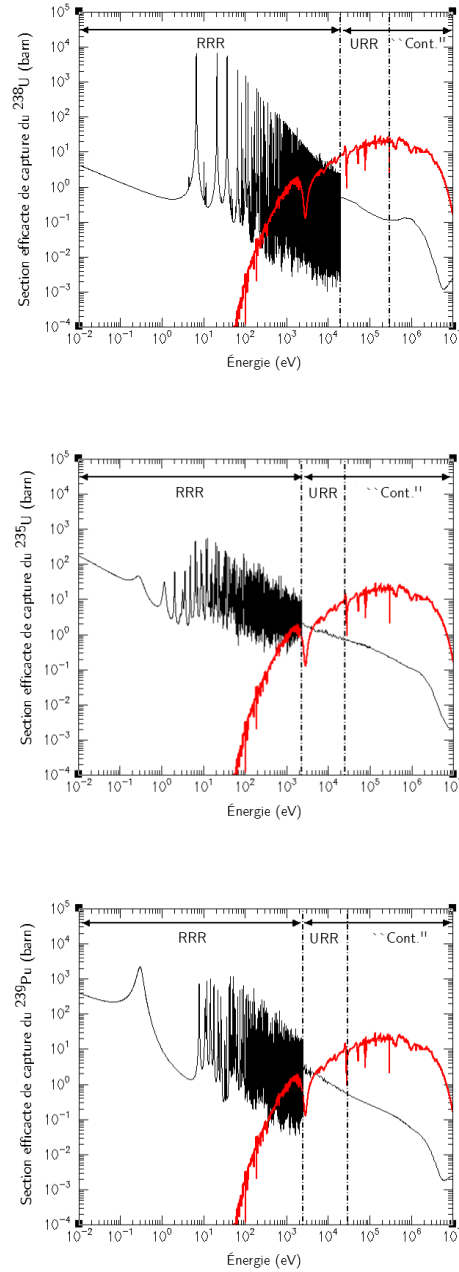


FIGURE 5.1. Sections efficaces de l' $^{238}\text{U}$ , l' $^{235}\text{U}$  et du  $^{239}\text{Pu}$  disponibles dans la bibliothèque JEFF-3.1.1. Elles sont comparées avec le spectre neutronique représentatif des expériences PROFIL.

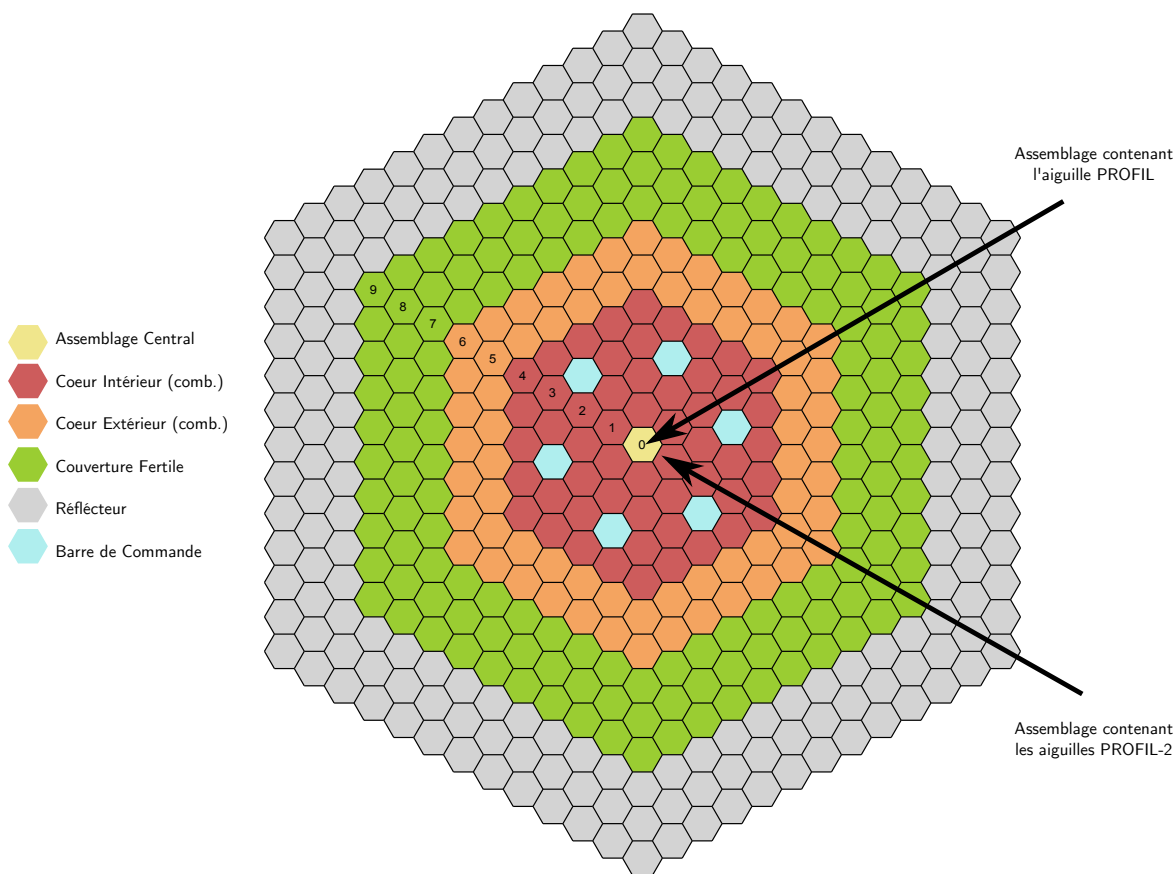


FIGURE 5.2. Coupe radiale du réacteur Phénix et localisation des assemblages contenant les aiguilles expérimentales PROFIL et PROFIL-2

Figure 5.1 montre la limite du domaine non-résolu pour les sections efficaces de l' $^{238}\text{U}$ , l' $^{235}\text{U}$  et du  $^{239}\text{Pu}$ . Les sections efficaces sont comparées avec le spectre neutronique calculé pour les expériences PROFIL en utilisant le code cellule ECCO d'ERANOS [76, 77], avec une structure de 1968 groupes d'énergie. Deux expériences ont été réalisées dans les années 1970, pendant les premiers cycles du réacteur de 250 MWe Phénix (CEA Marcoule). Une coupe radiale du cœur simplifiée est présentée sur la Figure 5.2. Le premier programme PROFIL est composé d'une seule aiguille expérimentale, mise en place dans un assemblage combustible situé au centre du réacteur. L'aiguille comporte 46 échantillons séparés. La seconde phase (PROFIL-2) a été plus ambitieuse avec deux aiguilles expérimentales, notées A et B, comportant chacune 42 échantillons séparés. La Figure 5.3 montre la position des aiguilles dans l'assemblage combustible. Finalement, c'est un total de 130 échantillons qui ont été irradiés pendant 4 cycles ( $> 10$  mois). Les échantillons des expériences PROFIL sont disposés dans des conteneurs cylindriques avec un diamètre extérieur de 5,5 mm et une hauteur de 1 cm.

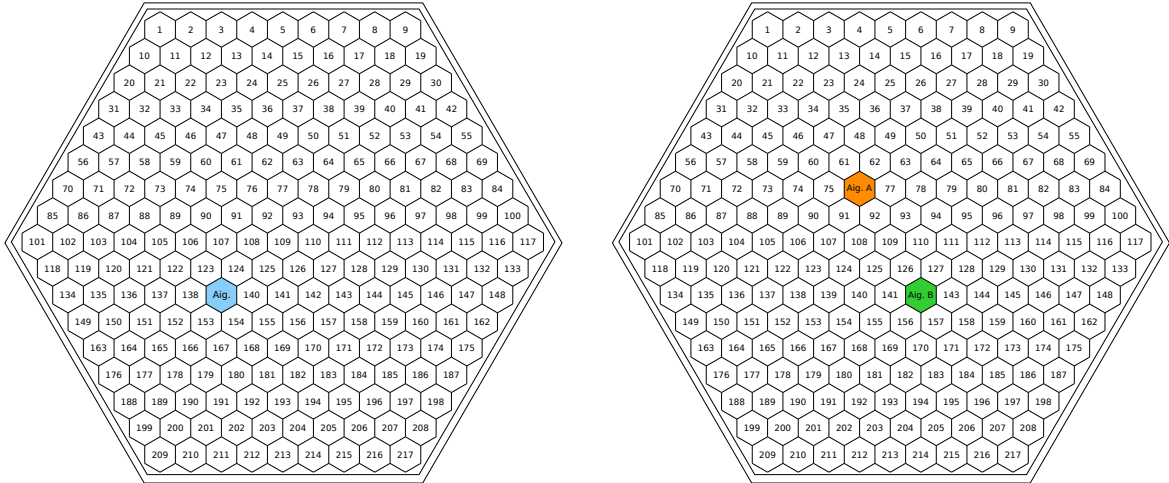


FIGURE 5.3. Position des aiguilles expérimentales PROFIL (figure de gauche) et PROFIL-2 (figure de droite) dans l'assemblage combustible

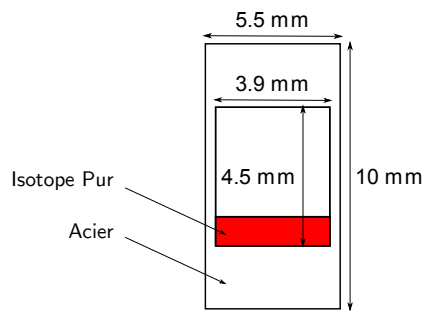


FIGURE 5.4. Géométrie simplifiée des échantillons et de leurs conteneurs

TABLEAU 5.2. Nombre d'échantillons contenant les actinides chargés dans les aiguilles PROFIL et PROFIL-2

Isotopes	PROFIL	PROFIL-2 (A+B)
<sup>232</sup> Th	-	1 + 2
<sup>233</sup> U	-	1 + 2
<sup>234</sup> U	-	2 + 1
<sup>235</sup> U	6	7 + 7
<sup>238</sup> U	3	3 + 3
<sup>237</sup> Np	-	2 + 1
<sup>238</sup> Pu	2	2 + 1
<sup>239</sup> Pu	3	2 + 2
<sup>240</sup> Pu	3	2 + 2
<sup>241</sup> Pu	3	-
<sup>242</sup> Pu	3	2 + 2
<sup>241</sup> Am	2	2 + 2
<sup>243</sup> Am	-	2 + 2
<sup>244</sup> Cm	-	2 + 2
Total	25	30 + 28

TABLEAU 5.3. Nombre d'échantillons contenant les produits de fission chargés dans les aiguilles PROFIL et PROFIL-

Isotopes	PROFIL	PROFIL-2 (A+B)
<sup>92</sup> Zr	-	2 + 1
<sup>95</sup> Mo	2	-
<sup>97</sup> Mo	2	-
<sup>101</sup> Ru	3	-
<sup>105</sup> Pd	2	-
<sup>106</sup> Pd	-	2 + 2
<sup>133</sup> Cs	2	-
<sup>143</sup> Nd	-	1 + 2
<sup>144</sup> Nd	-	1 + 2
<sup>145</sup> Nd	2	-
<sup>147</sup> Sm	-	1 + 2
<sup>149</sup> Sm	2	-
<sup>151</sup> Sm	-	1 + 2
<sup>153</sup> Eu	-	2 + 1
Total	15	10 + 12

Un dessin simplifié de la géométrie est présenté sur la Figure 5.4. Les Tableaux 5.2 et 5.3 donnent le nombre d'échantillons (et l'isotope majoritaire qu'il contient) irradiés pour chaque aiguille expérimentale. On retrouve notamment un total de 20 échantillons d'<sup>235</sup>U espacés axialement de façon régulière. Leurs positionnements permettent de fournir des informations précises pour le problème de la normalisation de la fluence.

### 5.1.1.2 Mesure des ratios isotopiques par méthode ICPMS

Les résultats expérimentaux utilisés pour l'interprétation des expériences PROFIL sont des compositions isotopiques avant et après irradiation. Les variations atomiques fournissent des informations intégrales sur les sections efficaces de capture, de fission et (n,2n). Ce travail se concentre uniquement sur les sections efficaces de capture.

La détermination de la composition des échantillons est réalisée par méthode ICPMS (*Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry*). Pour chaque échantillon  $k$ , la mesure par spectrométrie de masse fournit des ratios isotopiques précis, de la forme  $(N_i^k/N_j^k)$ , avant et

après irradiation (respectivement  $t_0$  et  $t_0 + \delta t$ ). La mesure est décrite par les variations de ratio suivants :

$$E_{ij}^k(\delta t) = \Delta \left( \frac{N_i^k}{N_j^k} \right) = \frac{N_i^k(t_0 + \delta t)}{N_j^k(t_0 + \delta t)} - \frac{N_i^k(t_0)}{N_j^k(t_0)}. \quad (5.1)$$

Pour les sections efficaces de capture de l' $^{235}\text{U}$ , l' $^{238}\text{U}$  et du  $^{239}\text{Pu}$ , les variations de ratios isotopiques respectives  $\Delta(N_{236\text{U}}^k/N_{235\text{U}}^k)$ ,  $\Delta(N_{239\text{Pu}}^k/N_{238\text{U}}^k)$  et  $\Delta(N_{240\text{Pu}}^k/N_{239\text{Pu}}^k)$  ont des incertitudes relatives comprises entre 0,1 % et 0,2 % seulement. Dans les interprétations précédentes [87, 88], les grandeurs  $E_{ij}^k(\delta t)$  sont supposés indépendantes. En pratique, les corrélations entre les différentes mesures par ICPMS ne sont pas données par les expérimentateurs. Dans ce travail, les incertitudes expérimentales sur chaque variation de ratio sont traitées comme des incertitudes statistiques. La contribution de l'incertitude systématique est prise en compte via deux coefficients de recalage de la fluence définis dans la section ci-dessous.

### 5.1.1.3 Coefficient de recalage de fluence

L'interprétation des expériences PROFIL est réalisée à l'aide du code déterministe ERANOS [76, 77]. Le schéma de calcul repose sur différentes hypothèses (que l'on ne détaille pas ici) qui sont utilisées afin d'obtenir un flux neutronique moyen par cycle, pendant le temps d'irradiation  $\delta t$ . La dispersion des variations de ratios  $C/E$ , observée pour les échantillons d' $^{235}\text{U}$ , suggère une sur-estimation du niveau global de la fluence. La stratégie utilisée pour résoudre l'inconsistance de ces résultats, entre les valeurs calculées et expérimentales, consiste à normaliser les résultats à l'aide de la section efficace de fission de l' $^{235}\text{U}$ . Pour ce faire, deux coefficients de recalage sont introduits dans les calculs ERANOS. Pour chaque aiguille PROFIL  $p$  ( $p = 1,2,3$ ), le flux neutronique  $\phi_p$  intégré sur la période d'irradiation  $\delta t$  est reconstruit comme suit :

$$\phi_p(\delta t, z_p) = \varphi_p \int_0^{\delta t} \phi_{th_p}(t, z_p) dt, \quad (5.2)$$

où  $\phi_{th_p}$  est le flux "brut" calculé par ERANOS. Le premier coefficient de recalage  $z_p$  est appelé Coefficient de Recalage Axial (CRA). Il définit la position axiale (en cm), de l'échantillon placé au centre de l'aiguille. Ce paramètre est introduit pour compenser les approximations faites sur la position axiale de l'aiguille, mais également sur la modélisation des barres de contrôle, pour lesquelles une côte moyenne a été pris en compte par cycle pendant le calcul. Le second paramètre, sans dimension,  $\varphi_p$  est appelé Coefficient de Recalage

de la Fluence (CRF). Il reflète les informations manquantes ou imprécises sur les conditions d'opération du réacteur, la longueur des cycles et la puissance du réacteur, par exemple.

L'Équation 5.2 suppose que la forme du flux axiale au centre des assemblages porteurs des aiguilles expérimentales est correctement calculée. On suppose également que le spectre neutronique, dans les zones d'intérêt, est bien calculé. L'impact de telles hypothèses sur les tendances intégrales des sections efficaces de capture est faible, car ces paramètres de recalage vont être déterminés à l'aide des échantillons d' $^{235}\text{U}$  placés axialement de façon régulière, du bas au haut des aiguilles PROFIL.

### 5.1.2 Méthode de propagation des incertitudes

Le CRA  $z_p$  et le CRF  $\varphi_p$  sont ajustés tels que les valeurs calculées pour les échantillons d' $^{235}\text{U}$  correspondent aux valeurs expérimentales pour chaque aiguille ( $p = 1,2,3$ ). La procédure d'ajustement se base sur l'inférence Bayésienne décrit dans le Chapitre 2. Le code CONRAD est donc utilisé.

#### 5.1.2.1 Modèle d'ajustement

On note  $\vec{x} = (z_p, \varphi_p)^T$  le vecteur comportant les coefficients de recalage. Soit  $M_x$  la matrice de covariance correspondant à ces paramètres. Pour chaque aiguille des PROFIL ( $p = 1,2,3$ ), les valeurs moyennes et les matrices de covariance *a posteriori* sont déterminées à l'aide d'un ajustement analytique de type GLS. On définit les valeurs *a priori* par  $\vec{x}_0 = (z_{p_0}, \varphi_{p_0})^T$ . On suppose que les coefficients sont initialement peu connus et indépendants, rendant alors la matrice de covariance *a priori* diagonale :

$$M_{x_0} = \begin{pmatrix} \text{var}(z_{p_0}) & 0 \\ 0 & \text{var}(\varphi_{p_0}) \end{pmatrix}, \quad (5.3)$$

En pratique, les valeurs relatives des incertitudes non informatives des coefficients  $z_{p_0}$  et  $\varphi_{p_0}$  sont prises égales à 10 % (cf. Tableau 5.4).

Les mesures considérées, ici  $E_{ij}^k(\delta t)$ , correspondent aux mesures isotopiques de la variation de ratio définie par l'Équation 5.1. Les mesures choisies, pour le recalage, sont présentées dans les Sections 5.1.2.2 et 5.1.4.1. Ces mesures sont comparées avec les valeurs calculées par le code ERANOS  $C_{ij}^k(\delta t)$ . Les incertitudes expérimentales sont données par l'analyse ICPMS (cf. Section 5.1.1.2). Aucune corrélation n'est considérée entre les grandeurs observées. Par conséquent, la matrice expérimentale  $M_E$  est également supposée diagonale. Le schéma de

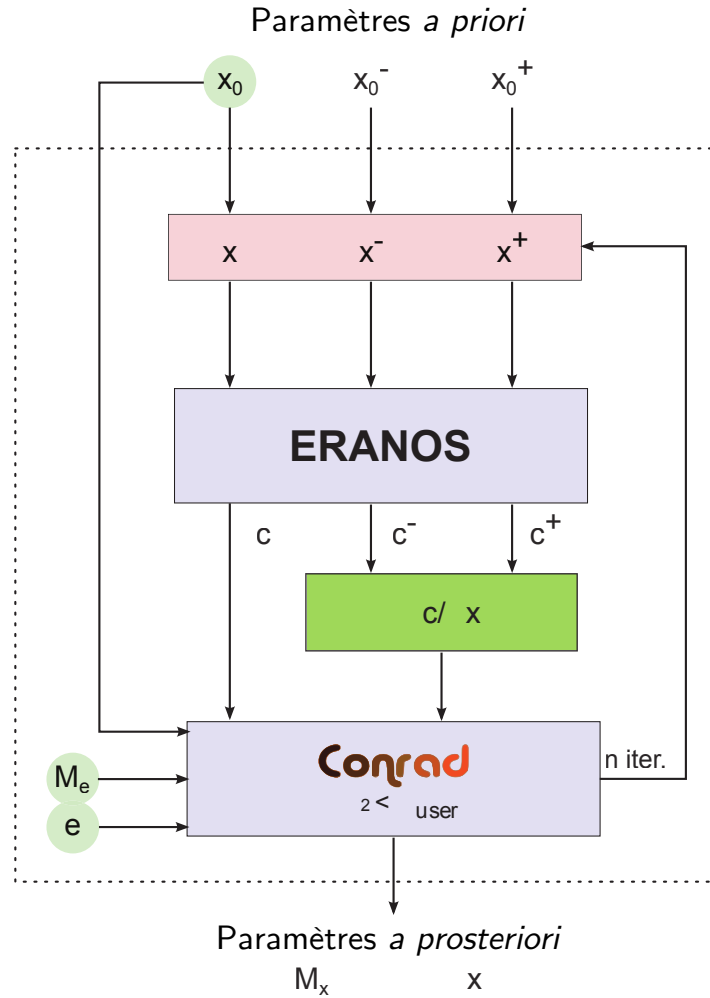


FIGURE 5.5. Schéma de la procédure d'ajustement utilisé pour déterminer les valeurs des coefficients de recalage  $\vec{x} = \{z_p, \varphi_p\}$  et leur matrice de covariance  $M_x$ . Les dérivées  $\Delta c / \Delta x$  sont calculées par perturbation directe. Le nombre d'itérations  $n$  dépend du critère de convergence choisi par l'utilisateur  $\varepsilon_{user}$



TABLEAU 5.4. Coefficients d'ajustement et leurs incertitudes a priori pour les aiguilles PROFIL et PROFIL-2 ( $p = 1,2,3$ )

Paramètres	Valeurs initiales et incertitudes		
$z_{p_0}$	154,0	± 15,4 cm	(10%)
$\varphi_{p_0}$	1,0	± 0,1	(10%)

l'ajustement établi pour trouver l'*a posteriori*, est présenté sur la Figure 5.5. Chaque élément de la matrice dérivée  $G_x$  est calculé par une perturbation directe de  $\pm 1\%$  des coefficients d'ajustement. Le critère de convergence  $\varepsilon_{\text{user}}$  a été pris égal à  $10^{-5}$ . Grâce à la linéarité du problème, seulement deux itérations suffisent pour converger vers les  $\langle C/E \rangle$  optimaux, c'est-à-dire proche de l'unité.

### 5.1.2.2 Procédure de marginalisation

Une fois que l'on obtient les paramètres *a posteriori*, il est nécessaire de réaliser une étape de marginalisation. Le traitement analytique présenté dans le Chapitre 2 est utilisé ici. On rappelle l'expression de la matrice de covariance après marginalisation :

$$\Sigma = M_x + (G_x^T G_x)^{-1} G_x^T G_\theta M_\theta G_\theta^T G_x (G_x^T G_x)^{-1}. \quad (5.4)$$

avec  $M_x$  la matrice de covariance *a posteriori* après simple ajustement,  $M_\theta$  la matrice de covariance des paramètres de nuisance et  $\Sigma$  la matrice de covariance sur les paramètres ajustés  $z_p$  et  $\varphi_p$  obtenue après marginalisation. Les éléments de la matrice de dérivées  $G_x$  sont calculés par perturbation directe.

La marginalisation est nécessaire, car les coefficients d'ajustement sont trouvés grâce aux variations de ratio aux réactions nucléaires. Une analyse de sensibilité, réalisée par les outils de perturbation dans ERANOS, permet de montrer que les différentes variations de ratio sont sensibles principalement aux réactions de capture et de fission de  $^{235}\text{U}$  et de  $^{238}\text{U}$ . On néglige par la suite les autres contributeurs minoritaires. Les paramètres de nuisance et les covariances associées sont décrits comme suit :

$$\vec{\theta} = \begin{pmatrix} \vec{\theta}_{235\text{U}} \\ \vec{\theta}_{238\text{U}} \end{pmatrix}, \quad M_\theta = \begin{pmatrix} M_{\theta_{235\text{U}}} & 0 \\ 0 & M_{\theta_{238\text{U}}} \end{pmatrix}, \quad (5.5)$$

où chaque  $\vec{\theta}_i$  ( $i = ^{235}\text{U}, ^{238}\text{U}$ ) contient les valeurs des sections efficaces de capture et de fission, moyennées sur la structure à 33 groupes d'ECCO :

$$\vec{\theta}_i = (\sigma_{f_1}^i \dots \sigma_{f_{33}}^i, \sigma_{\gamma_1}^i \dots \sigma_{\gamma_{33}}^i)^T. \quad (5.6)$$

La matrice contenant les dérivées  $G_{\theta_i}$  est déduite de l'analyse de sensibilité réalisée par ERANOS.  $M_{\theta_i}$  est une matrice carré définie, dans ce cas, par :

$$M_{\theta_i} = \begin{pmatrix} M_{\sigma_f^i} & M_{\sigma_f^i, \sigma_\gamma^i} \\ M_{\sigma_\gamma^i, \sigma_f^i} & M_{\sigma_\gamma^i} \end{pmatrix}. \quad (5.7)$$

Les incertitudes sur les coefficients d'ajustement CRA et CRF dépendent grandement de la matrice des paramètres de nuisance  $M_{\theta_i}$ . Le choix des matrices de covariance pour les sections efficaces de capture et de fission de  $^{235}\text{U}$  et de  $^{238}\text{U}$  sont discutés dans la section suivante.

### 5.1.3 Les données nucléaires de $^{235}\text{U}$ et de $^{238}\text{U}$

La Section 5.1.1.3 présente la méthodologie utilisée pour chaque aiguille PROFIL, dont l'objectif est de minimiser les dispersions axiales des  $C/E$  pour les échantillons d' $^{235}\text{U}$  et d'obtenir des  $\langle C/E \rangle$  proche de l'unité. Cependant, les incertitudes finales dépendent des matrices de covariance de  $^{235}\text{U}$  et  $^{238}\text{U}$ .

#### 5.1.3.1 Section efficace de fission de $^{235}\text{U}$

La section efficace de fission de  $^{235}\text{U}$  est l'une des réactions la plus étudiée par le passé et par un groupe de travail dédié de l'AIEA (qui s'occupe d'évaluer les références en terme de section efficace). La dernière version de l'évaluation standard a été réalisée en 2006 [90]. Cette section efficace est considérée comme un standard pour l'énergie thermique des neutrons (25,3 meV) et de 0,15 MeV à 200 MeV avec des incertitudes inférieures à 1 %. En dessous de 0,15 MeV, les sections efficaces et incertitudes données par l'AIEA sont seulement recommandées.

La Figure 5.6 compare l'évaluation de l'AIEA à celle de JEFF-3.1.1. Les deux évaluations sont présentées avec la même structure en groupe d'énergie. Pour les énergies où la fission de  $^{235}\text{U}$  est un standard, on remarque le bon accord entre les deux courbes (moins d'1 % de différence). De plus fortes fluctuations sont observées pour des énergies entre quelques eV et 0,15 MeV. Un meilleur accord entre les deux évaluations est trouvé lorsque l'on utilise un maillage énergétique plus large. Les résultats obtenus avec la structure à 33 groupes d'ECCO

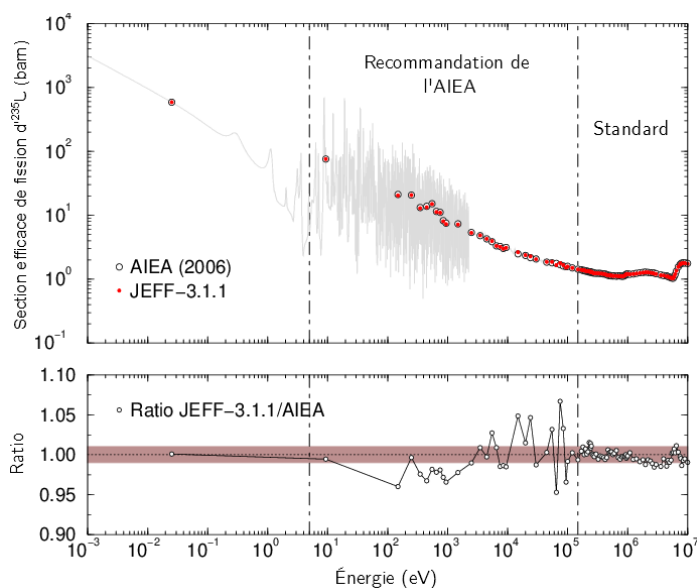


FIGURE 5.6. Section efficace de fission de  $^{235}\text{U}$  recommandée par l'AIEA, comparée à celle de JEFF-3.1.1.

sont donnés dans le Tableau 5.5. Le ratio  $\Delta(\text{J311}/\text{STD})$  devient plus faible qu'1 %, sauf pour des énergies comprises entre 15 keV et 20 keV, ou pour des énergies supérieures à 10 MeV. Ces résultats montrent que la section efficace de fission de  $^{235}\text{U}$  de la bibliothèque JEFF-3.1.1 peut être utilisée comme référence, pour résoudre le problème du recalage de la fluence.

Des comparaisons additionnelles avec la dernière version de JEFF (JEFF-3.2) et avec ENDF/B-VII.1 sont également incluses dans le Tableau 5.5. Dans le cas de la bibliothèque américaine, la section efficace de fission est quasiment équivalente à celle de l'AIEA. Par contre, le bon accord est dégradé lorsque l'on compare avec la bibliothèque JEFF-3.2. Par cette simple analyse, on s'attend à des coefficients de recalage similaire que l'on utilise l'évaluation de JEFF-3.1.1 ou de ENDF/B-VII.1.

TABLEAU 5.5. Section efficace de fission multigroupe (en barns) de  $l^{235}\text{U}$  des bibliothèques JEFF-3.1.1, JEFF-3.2 et ENDF/B-VII.1. La section efficace de l'AIEA est considérée comme un standard pour les énergies entre 0,15 MeV et 200 MeV

	Structure à 33 groupes d'ECCO (eV)		AIEA (2006)	JEFF-3.1.1		JEFF-3.2		ENDF/B-VII.1	
				Valeur	$\Delta$ (/STD)	Valeur	$\Delta$ (/STD)	Valeur	$\Delta$ (/STD)
33	<	0.10		573.94		573.94		573.94	
32	0.10	- 0.54		151.33		151.33		151.33	
31	0.54	- 4.00		299.39		29.94		29.94	
30	4.00	- 8.32		16.89		16.89		16.89	
29	8.32	- 13.71		69.07		69.07		69.07	
28	13.71	- 22.60		49.02		49.02		49.02	
27	22.60	- 40.17		48.68		48.68		48.68	
26	40.17	- 67.90		37.91		37.91		37.91	
25	67.90	- 91.66		29.03		29.03		29.03	
24	91.66	- 148.63		20.98		20.98		20.98	
23	148.63	- 304.32		19.81		19.81		19.81	
22	304.32	- 454.00		13.13		13.13		13.13	
21	454.00	- 748.52		12.71		12.71		12.71	
20	748.52	- 1234.10		8.44		8.44		8.44	
19	1234.10	- 2034.68		6.59		6.59		6.59	
18	2034.68	- 3354.63	5.23	5.26	1.006	5.32	1.017	5.22	0.998
17	3354.63	- 5530.84	4.32	4.33	1.002	4.19	0.970	4.29	0.993
16	5530.84	- 9118.82	3.27	3.25	0.994	3.34	1.021	3.22	0.985
15	9118.82	- 15034.39	2.82	2.83	1.004	2.78	0.986	2.80	0.993
14	15034.39	- 24787.52	2.32	2.36	1.017	2.34	1.009	2.33	1.004
13	24787.52	- 40867.71	2.03	2.04	1.005	2.04	1.005	2.02	0.995
12	40867.71	- 67379.47	1.81	1.81	1.000	1.85	1.022	1.81	1.000
11	67379.47	- 111090.00	1.61	1.60	0.994	1.67	1.037	1.61	1.000
10	111090.00	- 183156.40	1.44	1.44	1.000	1.48	1.028	1.44	1.000
9	183156.40	- 301973.80	1.30	1.30	1.000	1.27	0.977	1.29	0.992
8	301973.80	- 497870.70	1.20	1.20	1.000	1.17	0.975	1.20	1.000
7	497870.70	- 820850.00	1.12	1.12	1.000	1.12	1.000	1.12	1.000
6	820850.00	- 1353353.00	1.19	1.19	1.000	1.15	0.966	1.19	1.000
5	1353353.00	- 2231302.00	1.26	1.25	0.992	1.25	0.992	1.26	1.000
4	2231302.00	- 3678794.00	1.22	1.21	0.992	1.25	1.025	1.22	1.000
3	3678794.00	- 6065307.00	1.09	1.08	0.991	1.16	1.064	1.09	1.000
2	6065307.00	- 10000000.00	1.65	1.64	0.994	1.68	1.018	1.65	1.000
1	10000000.00	- 19640330.00	1.97	1.94	0.985	2.01	1.020	1.97	1.000

### 5.1.3.2 Matrices de covariance de $^{235}\text{U}$ et $^{238}\text{U}$

Les précédents analyses de sensibilités démontrent la dépendance des paramètres de recalage aux sections efficaces de capture et de fission de  $^{235}\text{U}$  et de  $^{238}\text{U}$  et à leurs incertitudes. Cet impact est étudié en utilisant les matrices de covariances de COMAC-V0 [52] et de JENDL-4 [49].

L'évaluation des covariances de  $^{238}\text{U}$  dans COMAC est issu d'un travail réalisé au CEA de Cadarache, à l'aide du code CONRAD. Pour  $^{235}\text{U}$ , COMAC reprend l'évaluation de la bibliothèque ENDF/B-VII.1. Les sections efficaces de  $^{235}\text{U}$  et de  $^{238}\text{U}$ , leurs incertitudes relatives et leurs corrélations sont présentées sur les Figures 5.7 et 5.8. Elles ont été reconstruites en utilisant la structure à 33 groupes d'ECCO. La comparaison des différentes courbes confirme que les covariances disponibles sont différentes. On constate notamment des incertitudes non réalistes pour la section efficace de capture de  $^{235}\text{U}$ , comme le montre la Figure 5.9. En effet, des écarts importants apparaissent sur une plage en énergie allant de 2 keV à 800 keV. Les incertitudes données par COMAC-V0, atteignant parfois 35 %, sont trop importantes vis-à-vis des données expérimentales disponibles dans la base EXFOR [26]. Dans le but de calculer les  $\langle C/E \rangle$  avec des incertitudes réalistes, il a été obligé, dans ce travail de prendre en compte ces résultats en sélectionnant les bonnes variations de ratio dans la stratégie de recalage de la fluence présenté par la suite.

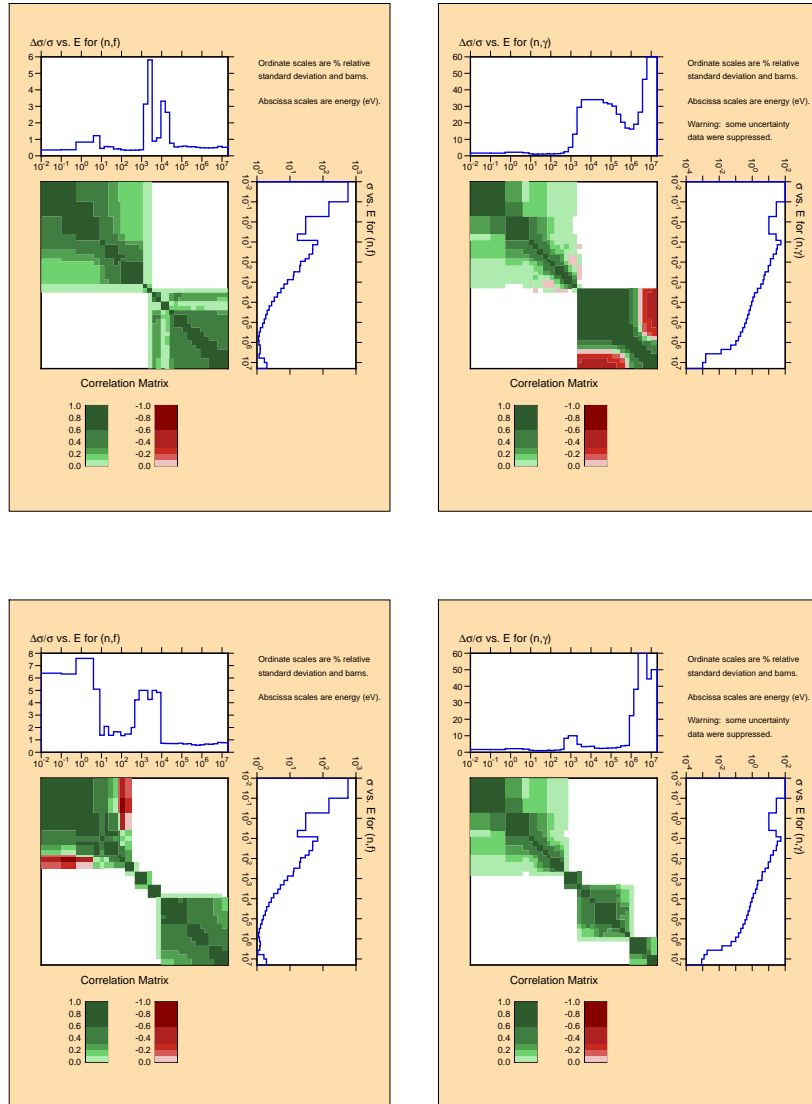


FIGURE 5.7. Section efficace de fission de  $^{235}\text{U}$  (à gauche) et de capture (à droite), incertitudes relatives et matrices de corrélation prise dans COMAC-V0 (en haut) et celles reconstruites avec JENDL-4 (en bas) avec la structure 33 groupes d'ECCO.

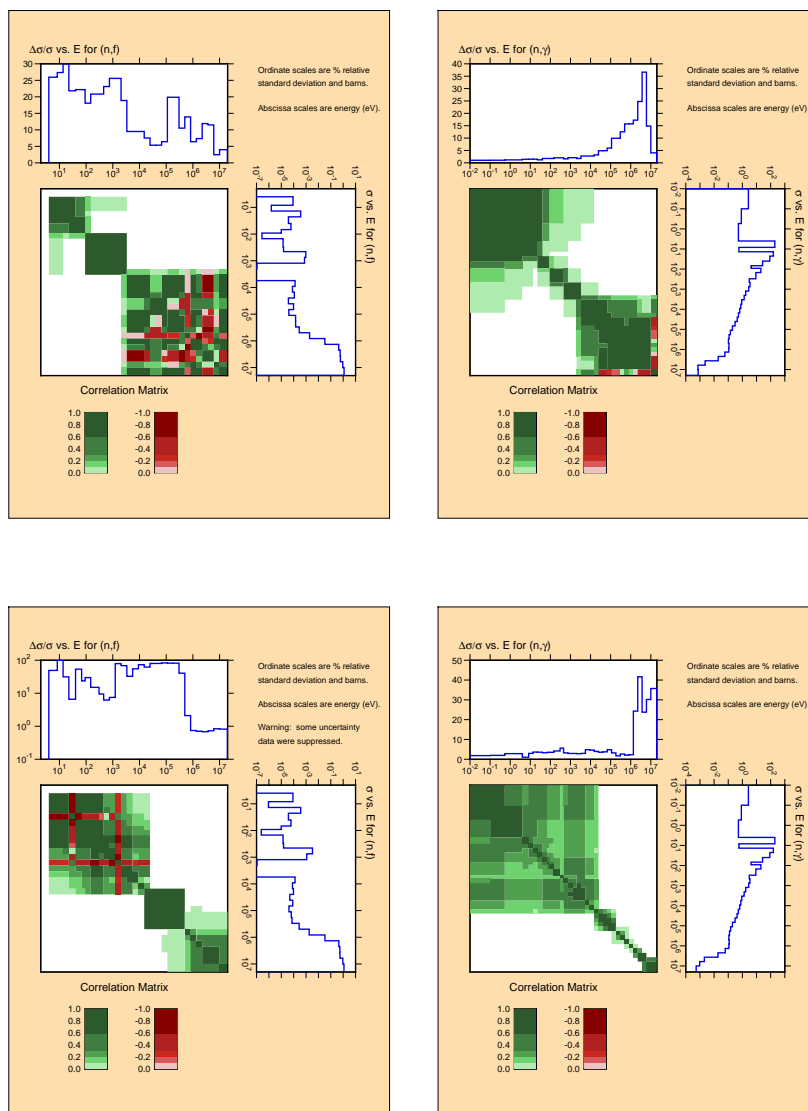


FIGURE 5.8. Section efficace de fission de  $^{238}\text{U}$  (à gauche) et de capture (à droite), incertitudes relatives et matrices de corrélation prise dans COMAC-V0 (en haut) et celles reconstruites avec JENDL-4 (en bas) avec la structure 33 groupes d'ECCO.

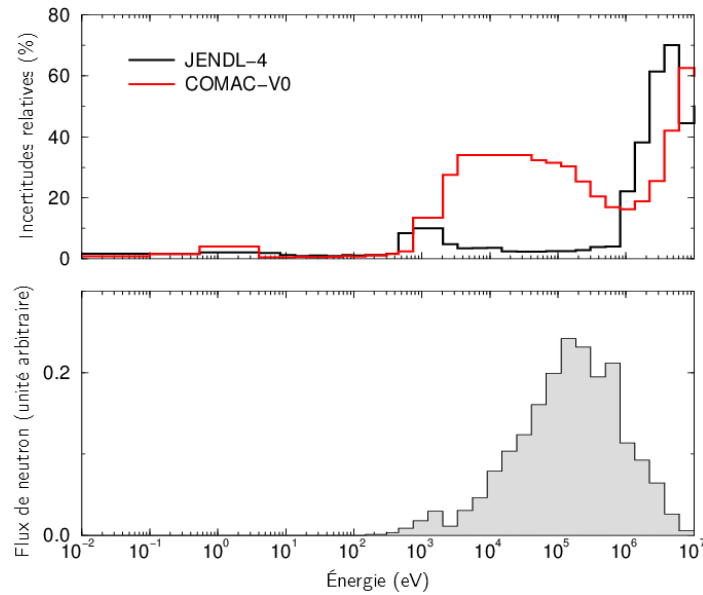


FIGURE 5.9. La figure du haut compare les incertitudes de la section efficace de capture de  $^{235}\text{U}$  de COMAC-V0 et de JENDL-4, calculées sur la structure à 33 groupes d'ECCO. La figure de dessous montre le flux PROFIL qui indique les énergies de neutron d'intérêt.

#### 5.1.4 Résultats et discussion pour PROFIL-2A

Le recalage de la fluence est usuellement fait en utilisant des mesures relatives à la fission de  $^{235}\text{U}$ . Pour des raisons détaillées dans la référence [88], les précédentes analyses des expériences PROFIL ont été réalisées en utilisant les variations de ratio  $^{235}\text{U}/^{238}\text{U}$ , mesurés dans les échantillons d' $^{235}\text{U}$ . Or, ce ratio est partiellement sensible à la capture de  $^{235}\text{U}$ , sujet à des incertitudes importantes. Des comparaisons entre les deux stratégies peuvent être trouvées dans la publication plus détaillée de ces travaux [89]. Pour pallier ce problème, ce travail se base sur une nouvelle variation de ratio :  $(^{235}\text{U}+^{236}\text{U})/^{238}\text{U}$ . Par la suite, seules les performances obtenues sur ce choix de ratio sont détaillées, en utilisant l'exemple de l'aiguille A de l'expérience PROFIL-2 ( $p = 2$ ).

##### 5.1.4.1 Recalage de la fluence basé sur les ratios $(^{235}\text{U}+^{236}\text{U})/^{238}\text{U}$

Dans le cas de l'aiguille A ( $p = 2$ ) de l'expérience PROFIL-2, six des sept échantillons d' $^{235}\text{U}$  ont été pris en compte pour l'ajustement. CONRAD est ainsi utilisé pour déterminer les valeurs moyennes et covariances des paramètres de recalage  $z_2$  et  $\varphi_2$ . D'après l'Équation 5.1, les valeurs expérimentales d'intérêt ont la forme suivante :



TABLEAU 5.6. Sensibilités obtenues à l'aide des outils de perturbation disponibles dans le code ERANOS des variations de ratio  $^{235}\text{U}+^{236}\text{U})/^{238}\text{U}$  aux sections efficaces de capture et de fission de  $l^{235}\text{U}$ ,  $l^{238}\text{U}$  et  $l^{236}\text{U}$

Sections efficaces	ratio $(^{235}\text{U}+^{236}\text{U})/^{238}\text{U}$
$^{235}\text{U}(\text{n},\text{f})$	1,07
$^{235}\text{U}(\text{n},\gamma)$	-0,04
$^{238}\text{U}(\text{n},\text{f})$	-0,02
$^{238}\text{U}(\text{n},\gamma)$	0,14
$^{236}\text{U}(\text{n},\text{f})$	< 0,01
$^{236}\text{U}(\text{n},\gamma)$	0,01

TABLEAU 5.7. Valeurs et incertitudes obtenues sur les coefficients de recalage calculés avec JEFF-3.1.1 lorsque les matrices COMAC-V0 et JENDL- $\gamma$  sont utilisées pour l'analyse de PROFIL-2A.

Coefficients de recalage	Valeurs des paramètres <i>a priori</i>	ratio $(^{235}\text{U}+^{236}\text{U})/^{238}\text{U}$	
		COMAC-V0	JENDL-4
$\varphi_2$	1,0 $\pm$ 0,1 (10%)	0,963 $\pm$ 0,013 (1,4%)	0,963 $\pm$ 0,012 (1,2%)
$z_2$	154,0 $\pm$ 15,4 (10%)	151,2 $\pm$ 0,3 (0,2%)	151,2 $\pm$ 0,2 (0,1%)
$\text{cor}(z_2, \varphi_2)$	0	0,53	0,27

$$E_{(235U+236U)238U}^k(\delta t) = \Delta \left( \frac{N_{235U}^k + N_{236U}^k}{N_{238U}^k} \right), k = 1..6, \quad (5.8)$$

où la variation de  $^{236}\text{U}$  pendant la période d'irradiation est également prise en compte. Les analyses de sensibilités (*cf.* Tableau 5.6) confirment que l'on peut négliger la contribution de la section efficace de capture de  $^{235}\text{U}$ . En effet, le coefficient de sensibilité approche la valeur de zero (-0,04 %)

Les résultats du Tableau 5.7 montre le bon ajustement, avec des  $\langle C/E \rangle$  proche de l'unité. Les valeurs ajustées préconisent une diminution de  $\Delta z_2 = -2.8$  cm de la position nominal des échantillons, et de réduire la fluence calculée d'un  $\Delta\varphi_2 = -3.8\%$ . Ces résultats sont similaires à ceux trouvés lors des précédentes interprétations avec les bibliothèques JEFF-3.0 et JEFF-3.1, car l'évaluation de  $^{235}\text{U}$  est identique.

Dans le Tableau 5.7, on constate que l'on obtient une incertitude sur la fluence de 1,4 %, preuve supplémentaire que la procédure est bien indépendante de la section efficace de capture de  $^{235}\text{U}$ . Par conséquence, les incertitudes déterminées en utilisant COMAC-V0 ou JENDL-4 sont sensiblement identiques. Ce résultat peut être généralisé aux autres bibliothèques de fichiers évalués tant que la fission de  $^{235}\text{U}$  correspond aux recommandations de l'AIEA. Les problèmes spécifiques aux écarts entre l'évaluation de JEFF-3.2 et JEFF-3.1.1 (*cf.* Tableau 5.5) sont discutés dans la publication plus détaillée de ces travaux [89].

#### 5.1.4.2 Résultats pour $^{235}\text{U}(\mathbf{n},\gamma)$ , $^{238}\text{U}(\mathbf{n},\gamma)$ et $^{239}\text{Pu}(\mathbf{n},\gamma)$

Les résultats pour les principaux actinides du cycle uranium / plutonium sont fournis dans le Tableau 5.8. Ils sont déduits grâce aux variations de ratio isotopiques  $\Delta(N_{236U}^k/N_{235U}^k)$ ,  $\Delta(N_{239Pu}^k/N_{238U}^k)$  et  $\Delta(N_{240Pu}^k/N_{239Pu}^k)$  mesurés dans l'expérience PROFIL-2A. Le nombre de ratio expérimental, utilisé pour la procédure de minimisation, est respectivement égal à 6, 3 et 2 (*cf.* Tableau 5.2). L'interprétation est faite avec JEFF-3.1.1 avec les matrices de covariances issues de la base COMAC-V0.

Avant l'ajustement des coefficients de recalage ( $z_2 = z_{2_0} = 154.0$  cm et  $\varphi_2 = \varphi_{2_0} = 1.0$ ), les résultats  $\langle C/E \rangle$  sont caractérisées par une grande dispersion autour de l'unité. L'accord entre les valeurs calculées et les mesures expérimentales est bien meilleur lorsque les valeurs des paramètres de recalage listées dans le Tableau 5.7 ( $z_2 = 151.2$  cm et  $\varphi_2 = 0.963$ ) sont utilisées. Les présents résultats (avec JEFF-3.1.1) et ceux obtenus lors des précédentes interprétations (JEFF-3.0 et JEFF-3.1) sont similaires. Ce qui est expliqué par le fait qu'il n'y a pas eu de changement des évaluations de ces isotopes entre les différentes versions.

TABLEAU 5.8. Tendances intégrales en terme de  $\langle C/E \rangle$  pour les sections efficaces de capture de  $^{235}\text{U}$ ,  $^{238}\text{U}$  et du  $^{239}\text{Pu}$  obtenues suite à l'interprétation de l'expérience PROFIL-2A. La bibliothèque de données évaluées JEFF-3.1.1 en association avec la base de covariance COMAC-V0 sont utilisées.

Réactions neutronique	Résultats $\langle C/E \rangle$		Incertitudes relatives	
	Avant recalage	Après recalage	Avant marginalisation	Après marginalisation
$^{235}\text{U}(n,\gamma)$	1,044	1,000	0,1%	1,9%
$^{238}\text{U}(n,\gamma)$	0,950	1,018	0,2%	1,1%
$^{239}\text{Pu}(n,\gamma)$	1,027	0,982	0,1%	1,9%

La conclusion la plus importante concerne l'incertitude finale entre 1 % et 2 % ( $1\sigma$ ), prenant en compte ainsi les incertitudes provenant de l'interprétation et du recalage. Les résultats de la dernière colonne du Tableau 5.8 confirment que les incertitudes données par la procédure d'ajustement (sans marginalisation) sont négligeables par rapport à celles obtenues après marginalisation. La stratégie établie permet de propager les incertitudes sur les paramètres de recalage de la fluence sur les résultats  $\langle C/E \rangle$ .

### 5.1.5 Bilan et résultats finaux

L'utilisation de l'assimilation de données intégrales, à l'origine développée pour améliorer les données nucléaires évaluées, a été utilisée et modifiée pour déterminer les incertitudes sur les paramètres de recalage des expériences PROFIL et PROFIL-2. La prise en compte et la propagation des incertitudes sur les paramètres de nuisances, c'est-à-dire dans ce cas, les matrices de covariance des sections efficaces de capture et de fission de  $^{235}\text{U}$ , de  $^{238}\text{U}$  et de  $^{236}\text{U}$  a été fait en utilisant la technique de marginalisation de CONRAD. La sélection du variation de ratio  $(^{235}\text{U}+^{236}\text{U})/^{238}\text{U}$  pour le recalage n'est sensible quasiment qu'à la section efficace de fission de  $^{235}\text{U}$ . Cette stratégie permet d'obtenir des tendances avec des incertitudes d'environ 1,5% sur de nombreux produits de fission et actinides. L'ensemble des résultats issus de l'interprétation des expériences PROFIL et PROFIL-2 sont présentés sur la Figure 5.10. Ce sont ces résultats qui permettront, par la suite, de réaliser des assimilations sur les données nucléaires de base.

Enfin, d'autres résultats portant sur les rendements de fission de  $^{235}\text{U}$  ont été obtenus durant la thèse. Les résultats associés sont présentés en Annexe F.

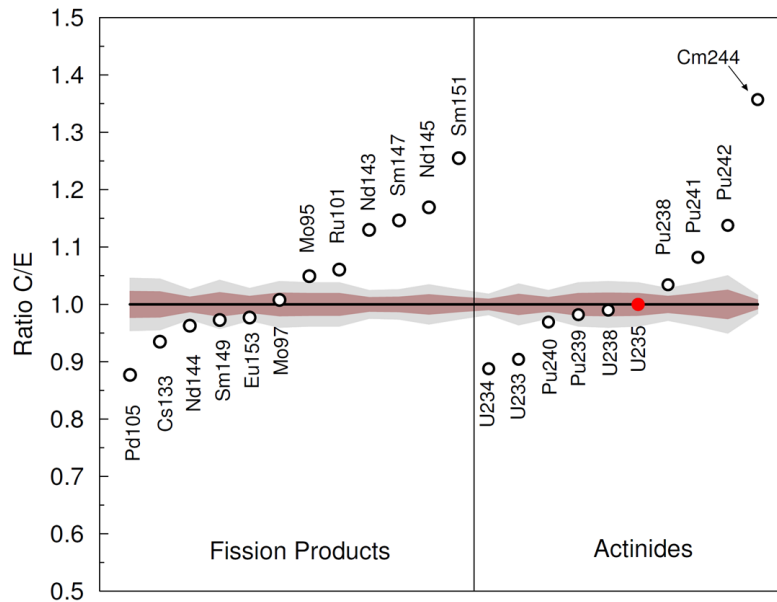


FIGURE 5.10.  $\langle C/E \rangle$  représentatifs des sections efficaces de capture obtenus suite à l'interprétation des expériences PROFIL et PROFIL-2 avec JEFF-3.1.1. Les bandeaux représentent les incertitudes dues au recalage de la fluence à  $1\sigma$  et  $2\sigma$

## 5.2 Utilisation d'expériences intégrales pour $^{238}\text{U}$

L'objectif de cette section est d'utiliser des expériences intégrales pour voir l'impact sur les incertitudes des sections efficaces de capture et de fission de  $^{238}\text{U}$ , sur la base de JEFF. Des comparaisons avec une nouvelle description des sections efficaces pour des neutrons rapides par les évaluateurs de l'AIEA sont également réalisées. On choisit d'utiliser les mesures d'indice de spectre dans le réacteur MASURCA (configuration ZONA2A) pour la section efficace de fission de  $^{238}\text{U}$ . On utilise les expériences d'irradiation PROFIL et PROFIL-2 pour la section efficace de capture. Cette partie permet d'illustrer la méthode d'assimilation décrite dans le Chapitre 4. Une approche multigroupe est utilisée dans cette partie. Les énergies concernées par ces expériences correspondent à un spectre rapide ( $E > 1 \text{ keV}$ ). L'évaluation JEFF-3.1.1 est utilisée comme information *a priori*. Les analyses expérimentales, obtenues avec cette évaluation pour ces deux expériences, sont décrites dans les références [91, 35]. Des résultats préliminaires obtenues avec une nouvelle évaluation, produite par l'AIEA, ont également été présentés au NEMEA-7 *workshop* [92, 93]. Cette évaluation est appelée "ib33". La Figure 5.11 illustre les sections efficaces de capture et de fission de  $^{238}\text{U}$ . Les  $\langle C/E \rangle$  associés à JEFF-3.1.1 sont excellents, permettant ainsi de faire un retour directement sur les incertitudes, car on n'a pas de changement de tendance.

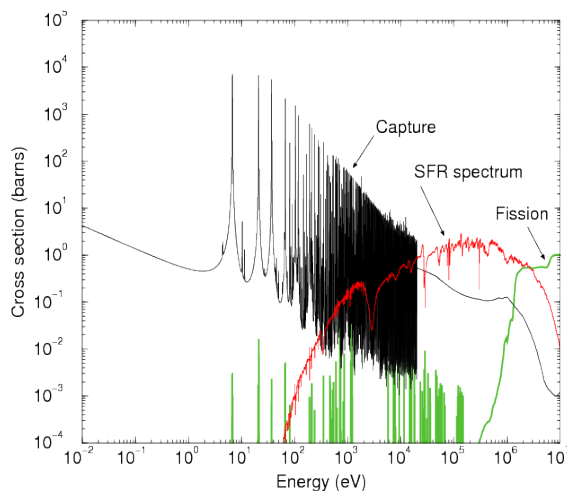


FIGURE 5.11. Sections efficaces de capture et de fission de l'  $^{238}\text{U}$  et spectre d'un réacteur à neutrons rapides normalisé en léthargie, en fonction de l'énergie

### 5.2.1 Description de l'expérience réalisée dans MASURCA

Un certain nombre de résultats des expériences intégrales réalisées dans le cœur MASURCA au CEA de Cadarache sont reportées dans la Référence [35]. L'interprétation a été réalisée avec le code ERANOS. Les résultats pour les indices de spectre  $^{238}\text{U}(n,f)/^{235}\text{U}(n,f)$  mesurés dans différentes configurations de cœur (MASURCA-1A', MASURCA-1B, CIRANO-ZONA2A, CIRANO-ZONA2B and MUSE4) sont donnés avec une incertitude entre 2,0% et 2,8%. Tous ces indices ont été calculés en utilisant la section efficace de fission de l' $^{235}\text{U}$  comme référence.

Dans ce travail, on utilise la valeur C/E obtenues dans la configuration ZONA2A du programme CIRANO (1994-1997). Ce dernier avait pour objectif d'investiguer l'usure du plutonium en fonction du temps dans les réacteurs à neutrons rapides via la substitution progressive de la couverture fertile par des réflecteurs en acier. La forme du spectre dans les expériences PROFIL, PROFIL-2 et CIRANO est sensiblement la même. L'incertitude expérimentale donnée est de 2,4% [35]. En tenant en compte de la contribution des incertitudes de la fission de l' $^{235}\text{U}$ , l'incertitude globale atteinte et prise en compte dans cette étude est de 3,0%.

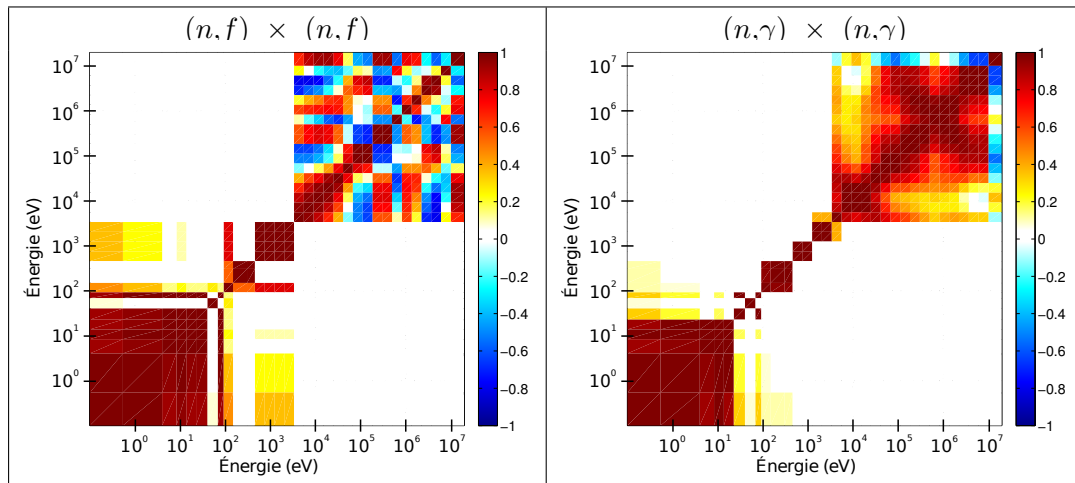


FIGURE 5.12. *Corrélations a priori pour les sections efficaces de fission (à gauche) et de capture à (droite) de  $^{238}\text{U}$  au-dessus d'1 keV*

### 5.2.2 Matrice de covariance *a priori*

La génération des covariances sur les sections efficaces en utilisant la technique d'ADI (présentée dans le Chapitre 4), requiert des informations *a priori*. Les matrices compilées dans la base COMAC, développée au CEA, sont utilisées. La méthodologie utilisée pour estimer les covariances multigroupes, dans cette base de données, est également celle présentée dans le Chapitre 3. On la retrouve également dans la référence [52]. La partie à haute énergie a été calculée à l'aide du code TALYS. L'optimisation des paramètres de modèle et la propagation des incertitudes expérimentales ont été réalisées avec le code CONRAD. Les matrices de corrélation sont représentées sur la Figure 5.12. On constate des corrélations très fluctuantes dans le domaine du continuum pour la fission, montrant qu'un travail d'évaluation supplémentaire à l'aide d'expérience microscopique est nécessaire.

### 5.2.3 Résultats *a posteriori* et discussion

Les résultats obtenus pour les expériences intégrales d'intérêt pour ce travail sont reportées dans le Tableau 5.9. Pour les expériences PROFIL, les valeurs des  $\langle C/E \rangle$  pour les différents échantillons ont été réduites à une seule valeur moyenne.

La comparaison des valeurs  $\langle C/E \rangle$  montre la bonne performance de l'évaluation "ib33". Les valeurs restent dans les limites des incertitudes. Le bon accord avec la mesure d'indice de spectre de MASURCA est importante, puisque la section efficace de fission de  $^{238}\text{U}$  de l'évaluation "ib33" repose sur les recommandations des standards définis par l'AIEA.

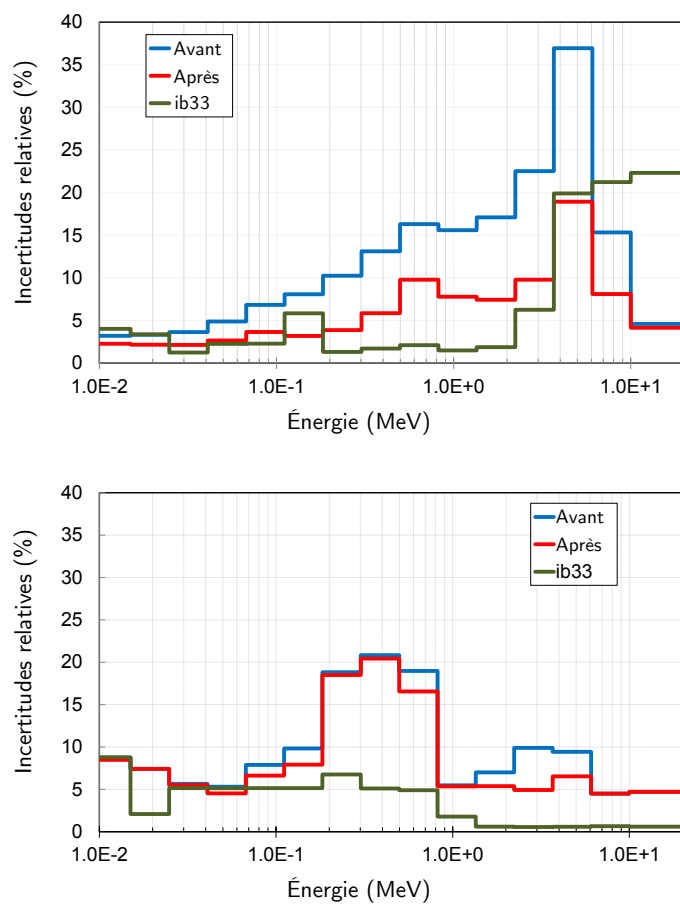
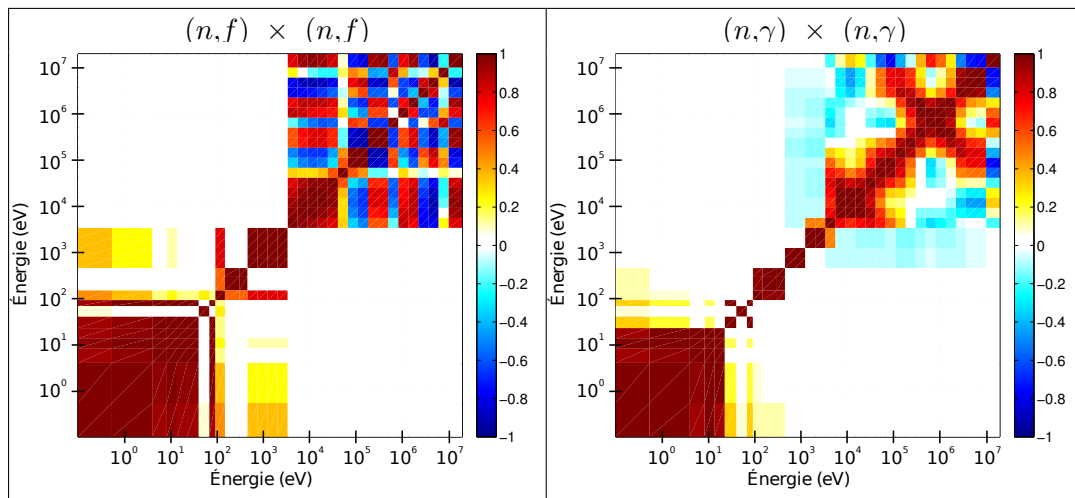


FIGURE 5.13. Incertitudes relatives, avant et après ajustement, des sections efficaces de capture (en haut) et de fission (en bas) pour  $l^{238}\text{U}$

TABLEAU 5.9.  $C/E$  obtenus pour les expériences PROFIL, PROFIL-2 et pour les indices de spectre mesurés dans la configuration ZONA2A de MASURCA

Benchmarks	Réaction	Incertitude	JEFF-311	JEFF-311 avec "ib33"
PROFIL, PROFIL-2	$^{238}\text{U}(n,\gamma)$	$\pm 2\%$	0,991	1,016
ZONA2A	$^{238}\text{U}(n,f)$	$\pm 3\%$	1,010	1,017

FIGURE 5.14. Corrélatons *a posteriori* pour les sections efficaces de fission (à gauche) et de capture à (droite) de  $l^{238}\text{U}$  au-dessus d'1 keV

Ces bons accords permettent de réaliser une analyse rétroactive, et déterminer de nouvelles matrices de variance pour la capture et la fission de  $l^{238}\text{U}$ . Les résultats de l'ADI sont présentées sur les Figures 5.13 et 5.14 et sont comparées avec l'"ib33". Comme attendu, l'incertitude relative sur la section efficace de capture et de fission est réduite significativement pour les énergies d'intérêt pour les réacteurs à neutrons rapides. Pour la réaction de fission, l'incertitude initiale proche de 10 % pour le plateau de la fission de première chance atteint des incertitudes plus réalistes, de l'ordre de 5 %. La structure des matrices de covariance pour le *prior* et le *posterior* sont également changées. On constate la création d'anti-corrélations proche de 30 keV pour la section de capture (*cf.* Figure 5.14). Par contre, peu de changements sont visibles pour la fission.

Finalement, ce travail montre la performance de la technique d'assimilation de données intégrales implémentée dans CONRAD, retranscrit dans la référence [91]. Les expériences intégrales, dédiées à des données nucléaires spécifiques, permettent de réduire significativement les incertitudes sur les sections efficaces. Bien que les incertitudes de l'évaluation "ib33" soient plus faibles que celles obtenues dans ce travail, probablement à cause d'une



non prise en compte d'incertitudes systématiques lors de l'évaluation microscopique, l'assimilation de données intégrales démontre que l'utilisation d'expériences intégrales permet de réduire considérablement les incertitudes, d'un facteur environs deux pour la section de capture reconstruite dans ce travail. Les anti-corrélations créées auront également des effets similaires de réduction d'incertitude. Elles sont clairement identifiées pour la section de capture, et plus difficilement visible pour la fission, à cause d'un *a priori* pas très satisfaisant à cause de fortes variations des corrélations dans le domaine du continuum. Enfin il est nécessaire de travailler *a priori* pour partir avec des incertitudes plus faibles issues d'un ajustement sur des expériences microscopiques.

### 5.3 Utilisation des résultats PROFIL et Jezebel pour le $^{239}\text{Pu}$

La Section 4.2 du Chapitre 4 présente les travaux d'assimilation des données intégrales, en considérant uniquement la section efficace de fission du  $^{239}\text{Pu}$  à titre d'illustration. Cependant, une étude **multigroupe** complète a été réalisée et est détaillée dans cette partie, avec notamment la prise en compte des autres réactions nucléaires importantes : capture radiative, inélastique, élastique, spectre de fission ( $\chi$ ) et le nombre de neutrons prompts émis par fission ( $\nu_p$ ). L'évaluation *a priori* a été construite sur la base de la bibliothèque JEFF-3.2, donnant de très bons résultats pour les expériences Jezebel (C/E=1). De plus, les résultats issus des expériences PROFIL et PROFIL-2 sont utilisés pour réduire les incertitudes sur la section efficace de capture. Les différentes incertitudes obtenues *a posteriori* sont présentées sur la Figure 5.15. Trois sections efficaces voient leurs incertitudes réduites :

- la capture radiative, principalement grâce aux expériences PROFIL ;
- la fission, principalement grâce à Jezebel ;
- l'inélastique, qui a également du poids dans l'expérience Jezebel.

Les autres incertitudes restent inchangées car soit elles sont déjà faibles, soit parce que le  $k_{\text{eff}}$  n'est pas sensible à ces autres réactions. Le Tableau 5.10 liste les sensibilités obtenues à l'aide du code PARIS pour l'expérience Jezebel.

Les matrices de corrélation des principales sections efficaces sont représentées sur la Figure 5.16. Les matrices *a priori* ont été présentées dans la Section 4.2 du Chapitre 4 (Figure 3.5 et Figure 3.6). Différentes interprétations peuvent être faites :

- des corrélations dans le domaine du continuum sont réduites pour la section efficace de fission, comme le montre la Section 4.2 du Chapitre 4. Les autres domaines sont peu impactés car le spectre neutronique de Jezebel est très rapide et ne concerne que le domaine du continuum. De plus, les expériences PROFIL n'ont pas d'effet sur la section de fission, car les expériences sont peu sensibles à la fission pour cette isotope ;

- des anti-corrélations apparaissent au niveau de la section de capture, entre le domaines des résonances résolues et le continuum. Cela s'explique car les expériences PROFIL couvrent les deux domaines en énergies. Cependant, le domaine du continuum est principalement concerné, comme l'indique la réduction de la corrélation dans cette zone d'énergie ;
- des anti-corrélations apparaissent au niveau de la section élastique, entre le domaines des résonances résolues et le continuum. Cet effet est également visible sur la Figure 5.15, au niveau des réductions des incertitudes sur la section élastique sur l'ensemble des domaines en énergie ;
- aucun changement notable au niveau des autres corrélations n'est observé.

Enfin, l'assimilation de données intégrales crée des corrélations croisées entre les données nucléaires du  $^{239}\text{Pu}$ . Elles sont montrées sur la Figure 5.17. On peut relever, par exemple, la création de fortes anti-corrélations entre les domaines du continuum pour le couple de réactions (n,f) et  $\nu_p$ . Cette dernière s'explique car ces deux grandeurs jouent un rôle similaire vis-à-vis de la population neutronique dans la boule Jezebel. On constate également la création d'anti-corrélation entre les domaines en énergie des différents isotopes, par rapport aux matrices *a priori*.

TABLEAU 5.10. Sensibilités du  $k_{eff}$  (Jezebel) aux principales sections efficaces multigroupes du  $^{239}\text{Pu}$ . Ces sensibilités ont été utilisées lors de l'assimilation de l'expérience Jezebel.

Groupe	Fission	Capture	Élastique	Inélastique	$\chi$	$\nu_p$
1	1,9276e-03	-7,0264e-07	3,0360e-05	1,1310e-05	2,8426e-03	2,6026e-03
2	2,4236e-02	-7,8835e-06	5,3664e-04	3,2604e-04	3,5899e-02	3,2022e-02
3	7,9145e-02	-4,5653e-05	2,3755e-03	4,3090e-03	1,2169e-01	1,0198e-01
4	1,4325e-01	-3,4182e-04	6,3837e-03	7,7756e-03	2,2212e-01	1,8978e-01
5	1,5372e-01	-9,0437e-04	9,7993e-03	8,3687e-03	2,2744e-01	2,0555e-01
6	1,2362e-01	-1,2001e-03	1,0882e-02	6,1709e-03	1,5936e-01	1,6371e-01
7	8,6189e-02	-1,3925e-03	1,1600e-02	4,1127e-03	9,3212e-02	1,1329e-01
8	5,4913e-02	-1,4344e-03	1,0909e-02	2,0595e-03	5,0468e-02	7,2822e-02
9	3,0490e-02	-1,2042e-03	7,9622e-03	8,9687e-04	2,5880e-02	4,1100e-02
10	1,5745e-02	-8,8623e-04	4,8323e-03	3,4264e-04	1,3214e-02	2,1779e-02
11	7,7195e-03	-5,9668e-04	2,5639e-03	1,0537e-04	6,6724e-03	1,0950e-02
12	3,5564e-03	-3,6963e-04	1,2161e-03	3,5336e-05	3,2224e-03	5,1009e-03
13	1,5845e-03	-2,1899e-04	5,3502e-04	1,4830e-05	1,5123e-03	2,2661e-03
14	7,1917e-04	-1,2920e-04	2,2495e-04	7,1529e-06	7,1960e-04	1,0274e-03
15	3,3168e-04	-7,7814e-05	9,6284e-05	4,4690e-06	3,4427e-04	4,7620e-04
16	1,6012e-04	-4,7335e-05	4,1051e-05	1,0499e-06	1,6415e-04	2,3231e-04
17	7,5700e-05	-2,6821e-05	1,7183e-05	-	7,9306e-05	1,1089e-04
18	3,7762e-05	-1,4645e-05	7,0460e-06	-	4,2386e-05	5,8837e-05
19	1,7591e-05	-7,4974e-06	2,9950e-06	-	2,0025e-05	2,7243e-05
20	8,8941e-06	-3,7295e-06	1,2855e-06	-	1,1643e-05	1,5574e-05
21	4,0781e-06	-1,9013e-06	4,7466e-07	-	5,5330e-06	7,1312e-06
22	1,5990e-06	-7,4600e-07	1,7704e-07	-	2,3481e-06	2,8786e-06
23	1,3539e-06	-7,5186e-07	6,2037e-08	-	2,2483e-06	2,8350e-06
24	3,7918e-07	-1,9587e-07	1,5967e-08	-	6,5283e-07	8,2575e-07
25	1,1253e-07	-5,6654e-08	5,2026e-10	-	2,8689e-07	3,4639e-07
26	1,2470e-07	-8,0561e-08	2,9665e-09	-	2,3640e-07	2,7892e-07
27	5,0047e-08	-1,6558e-08	8,4325e-09	-	6,7816e-08	7,0806e-08
28	2,5447e-08	-1,2874e-08	6,5744e-10	-	4,1311e-08	4,5390e-08
29	1,2212e-08	-8,4882e-09	1,1515e-10	-	2,6186e-08	2,7256e-08
30	1,6097e-08	-7,0074e-09	1,3901e-09	-	1,9855e-08	4,1252e-08
31	7,1500e-08	-2,0629e-08	2,5377e-09	-	1,3904e-18	1,7177e-07
32	1,6543e-07	-1,5841e-07	1,5104e-10	-	5,6882e-19	4,3999e-07
33	8,1394e-11	-7,8080e-11	1,0790e-14	-	3,2493e-19	2,6158e-10
Total	7,2746e-01	-8,9143e-03	7,0019e-02	3,4541e-02	9,6493e-01	9,6493e-01

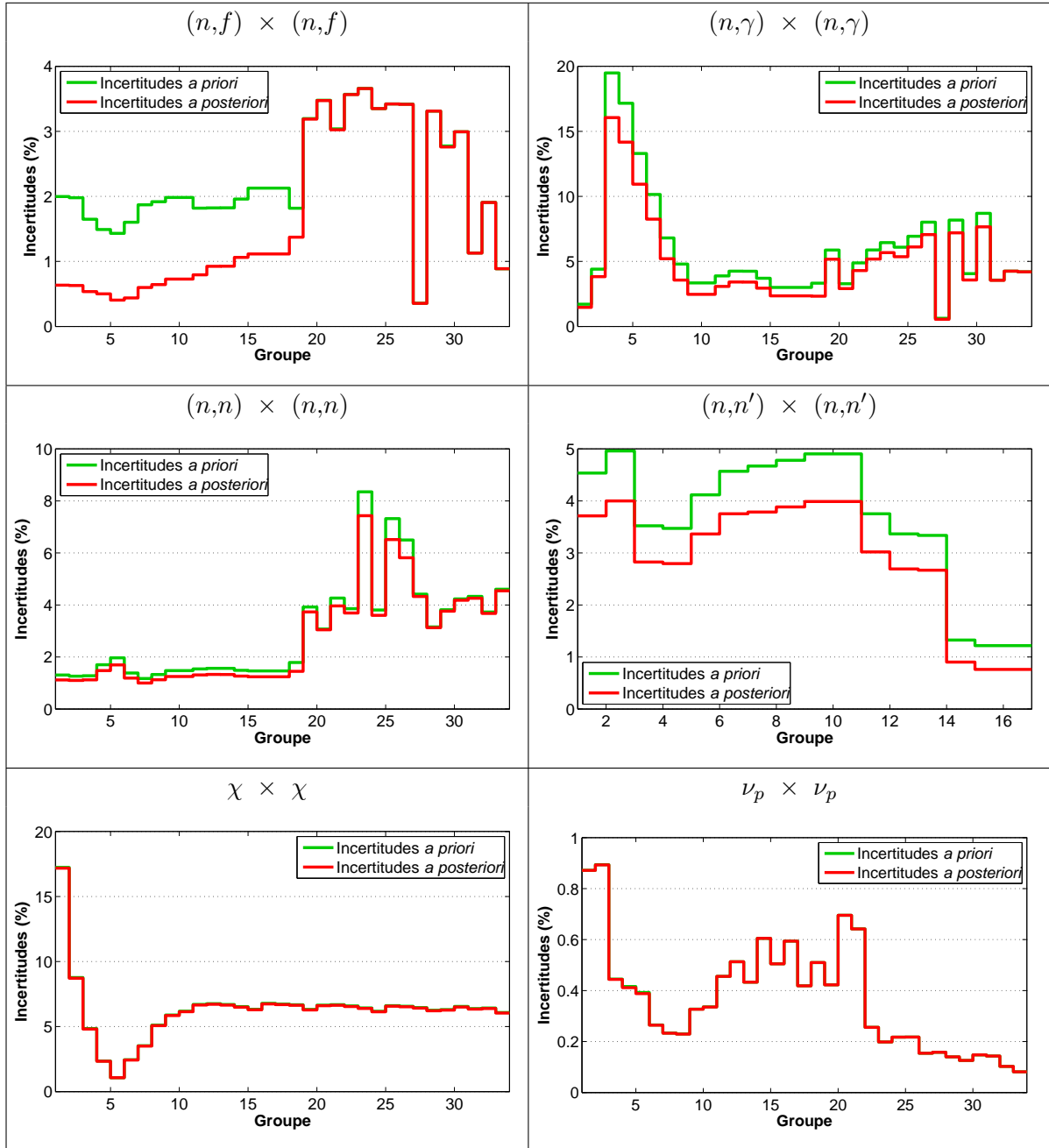


FIGURE 5.15. Incertitudes multigroupes (à 33 groupes en énergie), obtenues à partir de l'assimilation des expériences PROFIL et Jezebel, pour les principales sections efficaces du  $^{239}\text{Pu}$ . Les groupes rapides correspondent aux premiers groupes

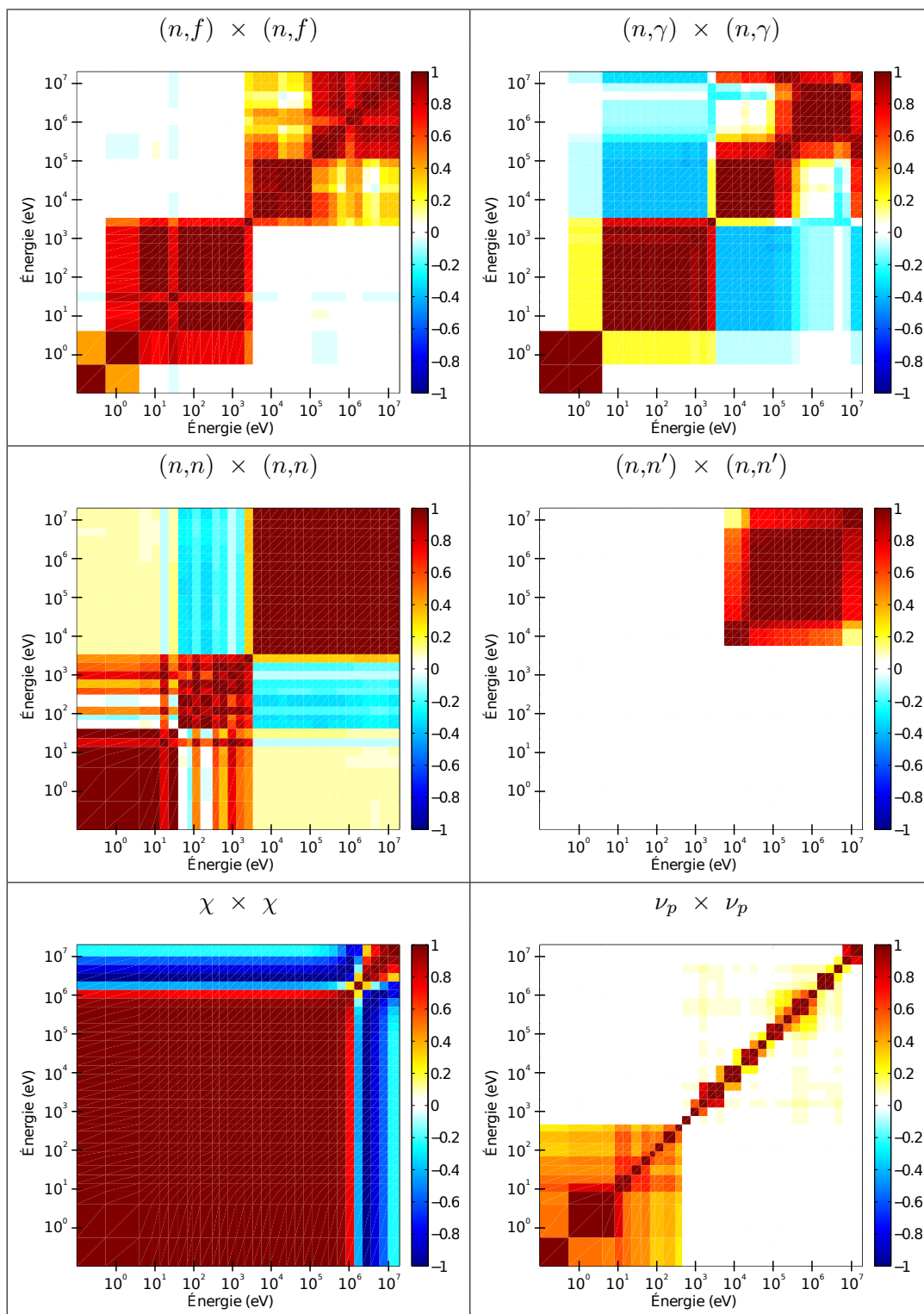


FIGURE 5.16. Matrices de corrélations multigroupes (à 33 groupes en énergie), obtenues à partir de l'assimilation des expériences PROFIL et Jezebel, pour les principales sections efficaces du  $^{239}\text{Pu}$

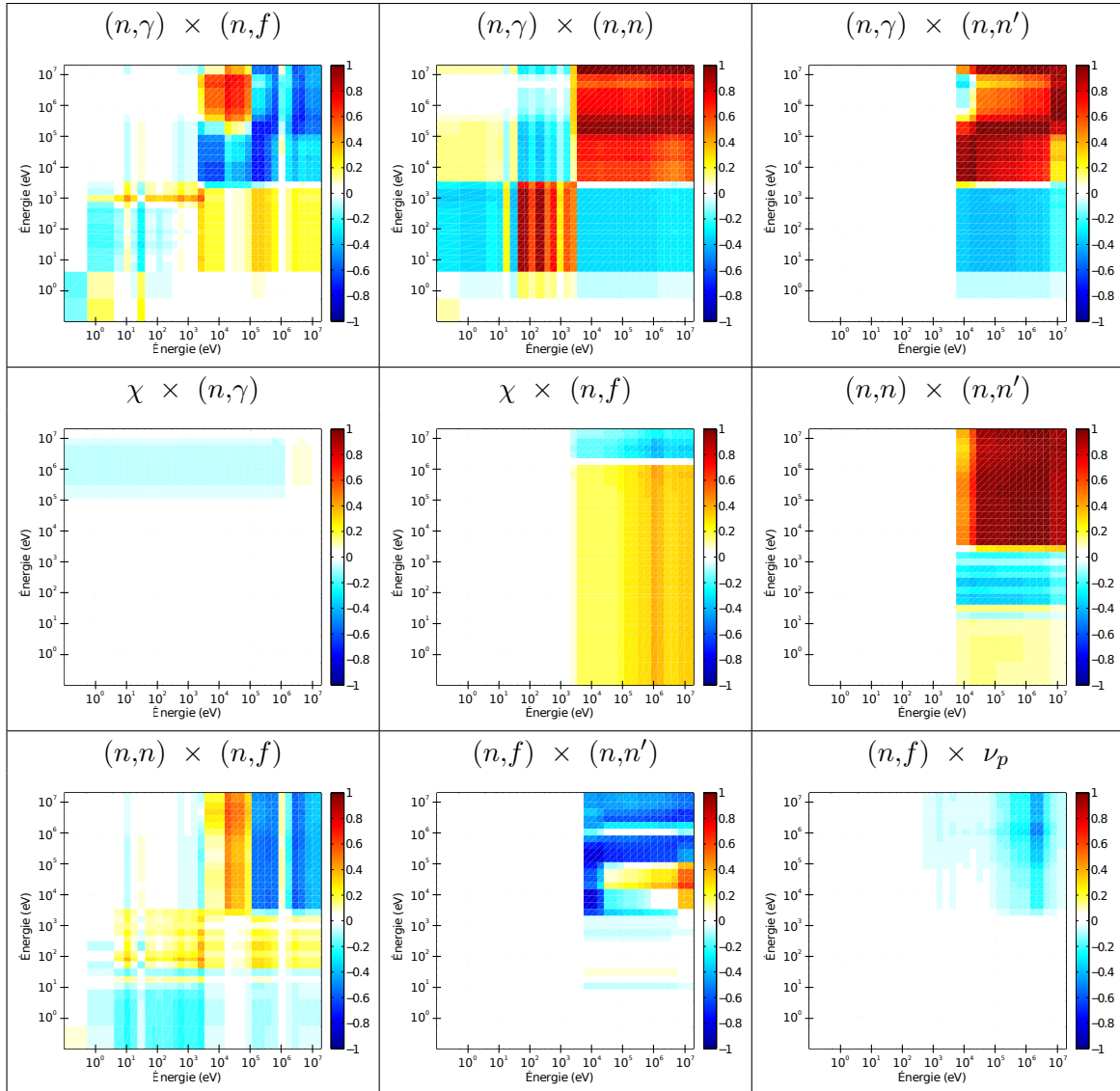


FIGURE 5.17. Matrices des corrélations croisées multigroupes (à 33 groupes en énergie), obtenues à partir de l'assimilation des expériences PROFIL et Jezebel, entre les principales sections efficaces du  $^{239}\text{Pu}$

## 5.4 Synthèse

Les interprétations des expériences PROFIL, PROFIL-2, Jezebel et ZONA2A avec prise en compte des incertitudes sont très importantes pour les données nucléaires dans le domaine non-résolu et du continuum. Les expériences intégrales peuvent être parfois complexes à analyser, comme cela a été vu dans la première partie de ce chapitre. Il est nécessaire d'effectuer un travail d'interprétation et de propagation d'incertitudes adapté aux difficultés rencontrées. Dans le cas des expériences PROFIL et PROFIL-2, le cœur même du problème, que ce soit d'un point de vue incertitude ou pour obtenir des valeurs expérimentales sur les grandeurs d'intérêt, repose sur la bonne estimation de la fluence, en fonction de la position des échantillons irradiés. La solution consiste à introduire deux coefficients de recalage, justifiés par des considérations expérimentales et calculatoires, afin d'ajuster le niveau de flux axial à l'aide de moniteurs de fluence que sont les échantillons d' $^{235}\text{U}$ . Les coefficients de recalage ont été déterminés à partir des mesures expérimentales  $(^{235}\text{U}+^{236}\text{U})/^{238}\text{U}$ . Ces variations de ratio dépendent majoritairement de la section efficace de fission de l' $^{235}\text{U}$ . L'utilisation des différents outils de CONRAD a permis de prendre en compte cette dépendance afin de propager correctement les incertitudes sur les grandeurs d'intérêt (seules les sections efficaces de capture sont présentées dans cette thèse).

Les différents résultats obtenus, grâce aux interprétations des expériences PROFIL et PROFIL-2, permettront de réduire les incertitudes sur les sections efficaces, à l'aide d'une Assimilation de Données Intégrales. Par exemple, la deuxième partie de ce chapitre montre que les incertitudes sur la section de capture de l' $^{238}\text{U}$  ont été réduites d'un facteur deux dans le domaine du continuum. Dans la perspective de réduction des incertitudes pour les réacteurs à neutrons rapides de dernière génération, de nouvelles expériences nommées PROFIL -R et PROFIL-M ont été réalisées dans les années 2000, afin de compléter les différents résultats des expériences PROFIL et PROFIL-M, mais également pour avoir à disposition de nouvelles données intégrales avec une plus grande maîtrise des biais et des incertitudes. A ce jour, le dépouillement des échantillons est relativement long et l'ensemble de l'interprétation ne peut être réalisé. Une première analyse de ces expériences, non détaillée dans ce document, montrent des résultats similaires aux expériences PROFIL et PROFIL-2 pour les isotopes de même nature, et apportent déjà des informations supplémentaires pour d'autres isotopes qui contribuent à l'anti-réactivité dans les réacteurs à neutrons rapides.

De plus, des études préliminaires réalisées pendant la thèse sur des benchmarks ICSBEP, et plus particulièrement des boules constituées d'un isotope majoritaire fissile réfléchi par de l' $^{238}\text{U}$ , ont mis en avant de nouvelles tendances pour la section efficace inélastique de l' $^{238}\text{U}$ , avec la possibilité d'une réduction des incertitudes (de l'ordre de 10 % sur le plateau de la section efficace). Une étude plus approfondie est en cours au CEA de Cadarache.

Une partie du chapitre avait pour objectif de dérouler une étude complète d'assimilation de données intégrales sur le  $^{239}\text{Pu}$ , en utilisant à la fois les expériences PROFIL et Jezebel. Les incertitudes sur la section efficace de fission multigroupe se voient principalement réduites, pour les groupes correspondant au domaine du continuum, passant en moyenne de 2% à environ 0,8%. Cette réduction s'explique par la grande sensibilité du  $k_{\text{eff}}$  à cette réaction. Il en va de même pour la section de capture avec Jezebel. Des anti-corrélations sont souvent créées, lors de l'assimilation intégrale, entre les domaines en énergie. Elles sont principalement expliquées par un effet similaire sur le  $k_{\text{eff}}$ . De façon moins prononcée, des corrélations croisées entre les données nucléaires sont aussi créées, s'expliquant soit par une compétition entre les sections efficaces lors de l'évaluation microscopique, créant plutôt des anti-corrélations ; soit par des effets opposés sur les observables, créant alors des corrélations. Les résultats sur les covariances du  $^{239}\text{Pu}$ , ont été reversés dans la base COMAC. Afin d'améliorer la connaissance sur les sections efficaces du  $^{239}\text{Pu}$ , il serait intéressant de rechercher un ensemble plus important d'expériences intégrales et de les incorporer dans le processus d'assimilation. D'ailleurs, un travail similaire a été réalisé pour la partie thermique de la section de capture du  $^{239}\text{Pu}$  et du  $^{240}\text{Pu}$  au sein du laboratoire [94].

Les conséquences des retours multigroupes sur les sections de capture et de fission de l' $^{238}\text{U}$  et du  $^{239}\text{Pu}$  présenté dans ce chapitre, implique une réduction de l'incertitude sur le coefficient multiplicateur d'un concept d'un réacteur à neutrons rapides de l'ordre de 400 pcm (passant de 1249 à 899). Il n'a pas été regardé durant ces travaux la répercussion sur d'autres grandeurs neutroniques, mais dans tous les cas, les résultats présenteront une incertitude plus faible.

Enfin, il serait intéressant de réaliser les retours intégraux de l'ensemble des échantillons des expériences d'irradiation dans Phénix, de manière similaire à ceux présentés pour l' $^{238}\text{U}$ , permettraient de réduire drastiquement les incertitudes des principaux éléments participant à la perte de réactivité dans les réacteurs à neutrons rapides ( $^{100}\text{Mo}$ ,  $^{103}\text{Rh}$ ,  $^{109}\text{Ag}$ ,  $^{141}\text{Pr}$ ,  $^{146}\text{Nd}$ ,  $^{150}\text{Sm}$ ,  $^{152}\text{Sm}$ ...). Il faut néanmoins disposer de l'élément nécessaire d'un point de vue microscopique, afin de réaliser le plus proprement que possible ces assimilations de données intégrales. Une étude sur les différents néodymes de fission est envisagée au sein du LEPh, pour ajuster les sections efficaces de capture et réduire les incertitudes en utilisant les expériences PROFIL. Cette étude permettrait d'améliorer les connaissances sur les sections efficaces de capture et compléter le travail réalisé sur les rendements de fission dans l'Annexe F.





# Conclusions générales & Perspectives

Les objectifs de cette thèse étaient de proposer des outils d'analyse pour l'évaluation des données nucléaires d'intérêt, nécessaire pour la simulation neutronique des réacteurs à neutrons rapides de génération IV. Les problématiques liées à la maîtrise des incertitudes ont été traitées tout au long de la thèse.

L'évaluation des données nucléaires, et plus particulièrement des sections efficaces neutroniques, est le fruit du travail des expérimentateurs et des théoriciens. Les premiers fournissent des données expérimentales, comprenant les valeurs moyennes et leurs incertitudes (statistiques et systématiques), les deuxièmes des modèles théoriques, autant physiques que possible. L'évaluateur est à la confluence de l'expérience et de la théorie, puisqu'il utilise ces deux ingrédients pour créer des fichiers évalués, socles des calculs neutroniques. Deux types d'expérience sont utilisés de manière complémentaire : les expériences différentielles et les expériences intégrales. Les premières donnent des informations sur la forme de la section efficace en fonction de l'énergie, tandis que les deuxièmes donnent des informations sur le niveau global de la section.

L'outil CONRAD, développé par le Laboratoire d'Étude Physique du CEA de Cadarache, propose des modèles expérimentaux et théoriques, ainsi que des outils d'analyse. Il est utilisé pour réaliser les assimilations de données, basées sur l'inférence Bayésienne. CONRAD était muni, initialement, d'une résolution analytique du problème d'ajustement (*Generalised Least Square*) et du traitement des incertitudes systématiques. Avec les capacités numériques actuelles, il est aisé de repartir de l'inférence Bayésienne, et de déterminer les distributions *a posteriori* des paramètres, à l'aide d'une méthode stochastique appelée BMC (*Bayesian Monte Carlo*). Cette approche pallie les hypothèses réalisées dans le cadre de la résolution analytique. Trois algorithmes de type Monte Carlo ont été implémentés dans CONRAD pendant la thèse :

- une méthode dite "Classique", traduisant l'inférence Bayésienne en une intégration par Monte Carlo, à l'aide d'un échantillonnage direct selon la distribution *a priori* des paramètres. Cette méthode, brute, à l'avantage d'être simple. Elle fonctionne parfaitement pour des ajustements avec peu de points expérimentaux, et une connaissance *a priori* raisonnable vis-à-vis des expériences utilisées. C'est-à-dire une distribution *a priori* recouvrant celle de la *vraisemblance*. L'inconvénient est le temps de calcul lorsque le problème ne remplit pas les conditions précédentes, avec des temps de convergence

alors beaucoup plus longs.

- une méthode dite “Importance”, basée sur le même concept d’intégration par Monte Carlo, mais cette fois en utilisant un échantillonnage autour d’une autre densité de probabilité appelée importance. Elle a été définie, pour cette thèse, à partir d’un ajustement analytique préalable. L’avantage est une convergence beaucoup plus rapide, même dans le cas de problèmes complexes. Cependant, cette méthode ne peut être considérée comme complètement stochastique. Il est possible de remettre en cause la solution issue de l’ajustement analytique, notamment dans le cas où des minima locaux sont présents ;
- une méthode dite “Metropolis”, développée sur la base des algorithmes de Metropolis-Hasting. Elle permet de dessiner la distribution *a posteriori* pour chaque tirage. L’avantage est que le problème numérique rencontré avec de nombreux points expérimentaux, avec la méthode “Classique”, est résolu ici, car la *vraisemblance* n’est pas directement évaluée. Cependant, elle est confrontée à des temps de calculs longs et des soucis de convergence. Des améliorations doivent lui être apportées en terme de précision des distributions *a posteriori* actuels, soit en changeant la méthode de réjection, soit en utilisant d’autres critères d’échantillonnage.

Ces méthodes peuvent être utilisées dans le cadre de l’évaluation à des fins de validation, ou pour fournir des distributions *a posteriori*. De plus, la distribution *a priori* peut être de n’importe quelle nature, non forcément gaussienne. Il a également été développé, sur les mêmes principes, des méthodes pour assimiler les incertitudes de type systématique. Bien que les différents algorithmes présentent de bons résultats, il est nécessaire de les optimiser pour réduire les temps de calcul trop longs. Pour ce faire, il serait intéressant de simuler les histoires en parallèle, sur plusieurs processeurs. De plus, ces méthodes peuvent très bien être utilisées pour réaliser des assimilations de données intégrales. Quelques résultats préliminaires, non exposés dans ce document, indiquent la bonne performance de ces algorithmes pour ces problématiques intégrales.

Ensuite, les méthodes traditionnelles d’évaluation, consistant principalement à utiliser une seule théorie, ne permettent pas de refléter des réalités physiques, telles que la continuité de la section ou des incertitudes expérimentales systématiques couvrant deux domaines en énergie distinct, par exemple. Des développements apportés au code CONRAD permettent de faire un ajustement d’une observable, telle qu’une section efficace, en utilisant en une seule fois les différentes théories en jeu et les différentes expériences. Cette méthode crée des corrélations fortes entre les théories, que ce soit au niveau des paramètres de modèles ou au niveau des sections efficaces. De telles considérations sont pourtant importantes, puisque usuellement, les évaluations sont différenciées et indépendantes. La possibilité de le faire en une fois dans CONRAD permet de s’affranchir de la non-corrélation entre les domaines.

---

Cependant, il serait intéressant de prendre un cas où l'on dispose de nombreuses expériences sur des plages en énergie différentes, et de voir apparaître ou non une corrélation entre deux domaines en énergie. *A priori*, la présence d'expériences sur un seul domaine devrait enlever des corrélations alors que des expériences couvrant les deux domaines devraient en rajouter.

Une des problématiques rencontrée lors de l'évaluation dans le continuum pour fournir des incertitudes est le manque d'information disponible dans les fichiers évalués. Un travail présenté dans ce document explique les différentes procédures appliquées pour de tels cas, en considérant des fichiers évalués comme des expériences, et l'utilisation des incertitudes systématiques pour construire une matrice de covariance *a priori*, basée sur les avis d'expert ou recommandations. Les conséquences des méthodes présentées se traduisent par des matrices de covariance fortement corrélées.

Une autre piste d'amélioration de la cohérence de l'évaluation consiste à introduire le formalisme des multiplicateurs de Lagrange dans la résolution analytique de l'inférence Bayésienne. Cette méthode d'ajustement sous contrainte microscopique peut être utilisée pour imposer une continuité entre deux domaines théoriques. Cette continuité est obtenue en résolvant, au final, un problème de point-selle. Les solutions montrent que la continuité au niveau de la section est atteinte, mais également au niveau des matrices de corrélation. Il a été rendu possible, dans CONRAD, d'implémenter de nouvelles contraintes avec le formalisme des multiplicateurs de Lagrange, telles que la continuité de la dérivée, l'imposition d'un point de passage pour une observable...

L'ensemble des méthodes d'assimilation de données avec contrainte microscopique présenté précédemment ont tendance à corréler les matrices de covariance. C'est pourquoi des expériences intégrales sont utilisées pour réduire d'une part, les incertitudes, et d'autre part les corrélations. Les méthodes d'assimilation de données intégrales ont été présentées et montrent ces effets de réduction abaissant les incertitudes sur les grandeurs neutroniques d'intérêt pour les réacteurs à neutrons rapides, comme le coefficient multiplicateur (réduction d'un facteur deux).

Enfin, une partie de la thèse a été dédiée à l'interprétation des expériences intégrales, notamment PROFIL et PROFIL-2 dans le réacteur Phénix. Des outils d'analyse dans CONRAD ont été développés pour permettre de réaliser un ajustement de modèles extérieurs au code, avec des fichiers d'entrée particuliers. Ainsi, il a été rendu possible de propager des incertitudes de données nucléaires, lors du processus de recalage de la fluence, sur les sections efficaces de capture d'actinides et de produits de fission. De telles mesures intégrales ont permis de réaliser un premier retour sur la section efficace de capture de  $^{238}\text{U}$ , montrant les réelles capacités des outils d'assimilation de données intégrales. Les exploitations des résultats PROFIL et PROFIL-2, analogues à celles réalisées sur  $^{238}\text{U}$ , permettraient de réduire

les incertitudes des principaux isotopes ( $^{100}\text{Mo}$ ,  $^{103}\text{Rh}$ ,  $^{109}\text{Ag}$ ,  $^{141}\text{Pr}$ ,  $^{146}\text{Nd}$ ,  $^{150}\text{Sm}$ ,  $^{152}\text{Sm}$ ...) participant à la perte de réactivité d'un réacteur à neutrons rapides. De plus, l'interprétation des nouvelles expériences PROFIL-R et PROFIL-M, permettra, d'une part, de compléter la liste des isotopes, et d'autre part, d'apporter de nouvelles mesures pour les actinides principaux.

# Contexte historique des données nucléaires

---

## Sommaire

---

<b>A.1 D’Henry Becquerel à Ernest Rutherford . . . . .</b>	<b>162</b>
<b>A.2 De la découverte du neutron à la première réaction en chaîne . . .</b>	<b>165</b>

---

L’énergie nucléaire (et les disciplines associées comme la neutronique ou les données nucléaires) est très récente à l’échelle de la Terre. Seulement dix années séparent la découverte du neutron en 1932 par James Chadwick et la divergence du premier réacteur par Enrico Fermi. L’évolution a ensuite été rapide, avec la construction de la bombe à fission à la fin de la deuxième guerre mondiale, puis des premiers réacteurs de production d’électricité en 1954 (Experimental Breeder Reactor aux Etats-Unis). Le développement des centrales nucléaires dans le monde a été importante dans les années 70 et 80, justifiée par une volonté d’indépendance énergétique vis-à-vis du pétrole, mais également pour répondre au fort développement industriel et énergétique.

La modélisation de ces réactions nucléaires permet, via des bibliothèques de données nucléaires, de simuler un réacteur d’un point de la neutronique. Cette discipline, basé sur la physique du neutron, est très complexe et intervient dans plusieurs domaines de la physique sur différentes échelles en temps et en espace. La Figure A.1 illustre ces différentes échelles de façon non exhaustive. Elle commence par les interactions neutron-matière caractérisées par des propriétés de physique nucléaire. C’est avec un couplage de la neutronique à la thermohydraulique et à la thermomécanique des cœurs que l’on obtient une modélisation précise des centrales nucléaires.

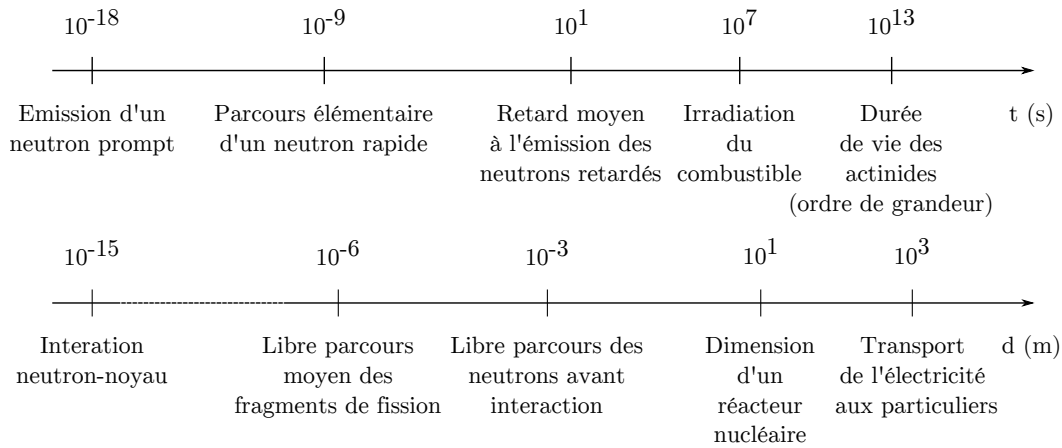


FIGURE A.1: Les différentes échelles de l'énergie nucléaire

## A.1 D'Henry Becquerel à Ernest Rutherford

La première découverte du monde de la physique nucléaire a été faite par Henri Becquerel qui, en 1896, identifie un rayonnement inconnu provenant de l'uranium. Ernest Rutherford publie, suite à ces découvertes, un papier essentiel [95]. Il y étudie le pouvoir ionisant de ce rayonnement sur l'air, en plaçant de l'uranium entre deux plaques chargées et en mesurant le courant créé. Le schéma expérimental est présenté sur la Figure A.2. Des échantillons d'uranium sont recouverts avec des feuilles métalliques d'épaisseurs différentes. Une atténuation plus ou moins forte peut être donnée selon l'épaisseur totale. Rutherford en déduit deux phénomènes physiques, nommé rayonnement  $\alpha$  avec un faible pouvoir de pénétration, et rayonnement  $\beta$  avec un plus grand pouvoir de pénétration. Une autre source de rayonnement  $\alpha$ , le radium, avait été découvert un an plus tôt par Pierre et Marie Curie sans pouvoir l'identifier.

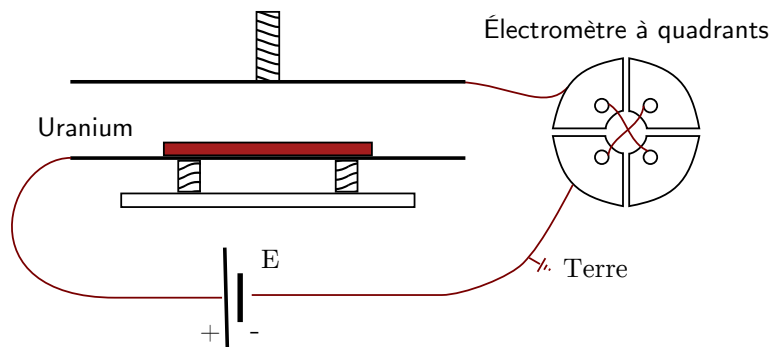


FIGURE A.2. Schéma expérimental inspiré des travaux de Rutherford [95]). L'électromètre mesure des variations de charge électrique entre les deux plaques, interprétées comme la radiation naturelle

Ernest Rutherford entreprend ses recherches sur la description du noyau atomique à l'aide des interactions rayonnements-matières. Son expérience [96], représentée sur la Figure A.3, utilise une source de radium, émetteur  $\alpha$ , une cible constituée d'un fin écran d'or et d'un écran fluorescent comme détecteur de particules  $\alpha$  [97]. Cet écran permet de visualiser la diffusion des  $\alpha$  selon différents angles. Le modèle du noyau est, à l'époque, celui de Thompson (appelé également "*plum pudding*")<sup>1</sup>. Or, pendant l'expérience, Rutherford constate la présence de particules  $\alpha$  diffusées avec des angles supérieurs à  $45^\circ$  (environ 1 particule  $\alpha$  sur 8000). Rutherford pense alors que l'atome est composé d'un noyau très petit, qui expliquerait pourquoi il y a peu d'interaction et donc peu de particules diffusées avec des angles importants. Rutherford suppose que la majorité de la masse de l'atome est concentrée dans une minuscule région, chargée positivement et entourée d'électrons. Cette description n'est pas complète, il lui manque la présence des neutrons et de la force nucléaire entre les nucléons. Cependant, son modèle permet d'obtenir des ordres de grandeur sur les dimensions du noyau.

De cette expérience découle la notion de section efficace. C'est une grandeur physique qui caractérise la probabilité d'interaction d'une particule incidente avec une cible immobile. Cette section efficace, dite microscopique, n'est pas dépendante des variables du faisceau incident et de la cible, mais est caractérisée par les propriétés des particules mises en jeu. La première modélisation théorique a été effectuée par Rutherford suite à son expérience. Elle permet l'obtention de la section efficace de diffusion de particules  $\alpha$  positivement chargées par un noyau également positivement chargé. On définit  $d\sigma$  la section efficace différentielle d'une particule  $\alpha$ ,  $d\Omega$  l'angle solide des particules diffusées et  $\theta$  l'angle défini sur la Figure A.4. On trouve alors la formule suivante :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left[ \frac{Z_1 Z_2}{16 E_c \pi \varepsilon_0} \right] \frac{1}{\sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)}$$

avec  $Z_1$  et  $Z_2$  les numéros atomiques des particules qui vont interagir,  $E_c$  l'énergie cinétique du système particule incidente/cible et  $\varepsilon_0$  la permittivité du vide.

---

1. Le modèle de Thompson décrit l'atome comme une boule de charge positive dans laquelle des charges négatives sont éparpillées



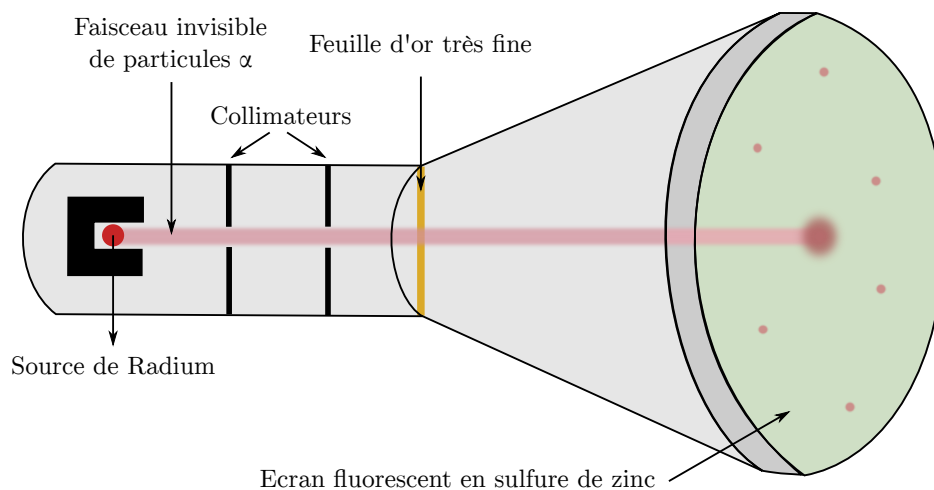


FIGURE A.3. Schéma expérimental simplifié d'Ernest Rutherford afin de mettre en avant l'interaction rayonnement matière entre des particules  $\alpha$  et de l'or

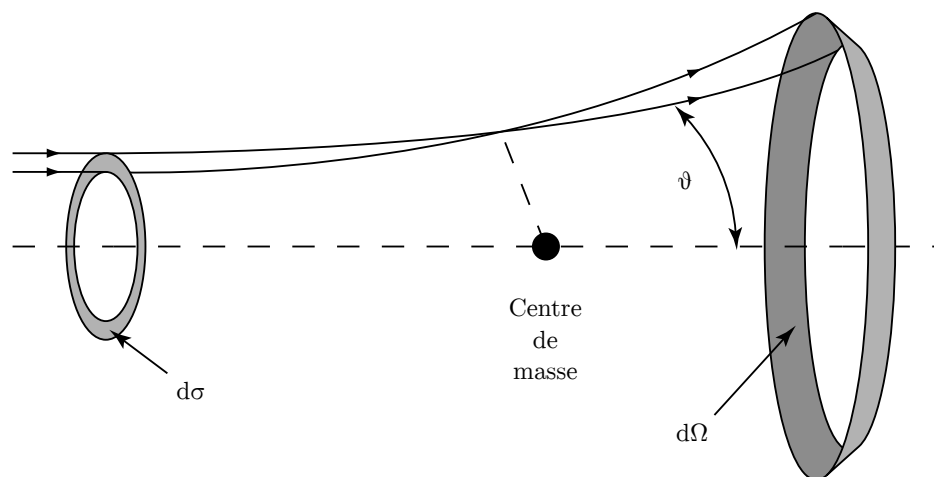


FIGURE A.4. Représentation microscopique de l'interaction de diffusion entre une particule incidente et un noyau cible

## A.2 De la découverte du neutron à la première réaction en chaîne

Il y a un siècle, on admettait malgré des difficultés théoriques que les noyaux atomiques étaient constitués de protons et d'électrons avec respectivement des charges positives et négatives. Les physiciens disposaient d'un éventail de modèles qualitatifs, empiriques et bien souvent contradictoires. C'est à partir de 1920 qu'Ernest Rutherford postule l'existence d'une particule neutre qui aurait une masse similaire aux protons [98]. Cette particule est recherchée dans les années 1920, au laboratoire Cavendish de Cambridge par Ernest Rutherford et ses collaborateurs, en particulier James Chadwick, mais sans succès. Par exemple, ils ont essayé de créer des neutrons en faisant passer des courants intenses d'électrons dans de l'hydrogène, dans l'optique de produire la réaction  $p + e \rightarrow n$ , mais ce fut inévitablement un échec.

Les techniques expérimentales disponibles à cette époque en physique nucléaire se résument par l'envoi de projectiles issus de corps naturellement radioactifs sur une cible. On pouvait alors observer ce qui en résultait. La détection des particules émises par la cible pendant l'irradiation n'était pas la même selon les pays : les Britanniques utilisent une chambre de Wilson, ou chambre à brouillard, permettant de visualiser les trajectoires des particules sortant de la collision et de les identifier. Les Allemands utilisent différentes versions du compteur Geiger, très sensible mais peu spécifique. Et les Français gardent une préférence pour la chambre d'ionisation, où l'intensité du courant permettait d'identifier la particule chargée traversant la chambre.

En 1930, les allemands Becker et Bothe rapportent un surprenant résultat : la réaction d'un  $\alpha$  sur le béryllium produit un rayonnement neutre qu'ils interprètent comme un rayonnement électromagnétique de forte énergie. La réaction envisagée est alors  ${}^4_2\text{He} + {}^9_4\text{Be} \rightarrow {}^{13}_6\text{C} + \gamma$ . Du côté français, Irène et Frédéric Joliot-Curie ont réalisé la même expérience en rajoutant un écran de paraffine, entre le béryllium et le détecteur par chambre d'ionisation. Ils publient en 1932 un résultat similaire à Becker et Bothe : ce rayonnement neutre est capable d'éjecter un flux intense de protons de 5,3 MeV d'un écran de paraffine selon la réaction suivante :  $\gamma + C_n H_{2n+2} \rightarrow B_n H_{2n+2} + p$ . Ce résultat n'est pas cohérent avec les émissions de proton puisqu'un bilan énergétique de la réaction impliquerait un gamma incident d'environ 50 MeV, violant alors le principe de conservation de l'énergie. Très rapidement après la publication des deux résultats précédents, James Chadwick décide de refaire les expériences avec une chambre de Wilson. Cette dernière est décrite sur la Figure A.5. Il déduit alors que le rayonnement inconnu n'est pas des photons  $\gamma$ , mais des corpuscules neutres. Il les nomme neutrons (symbole  $n$ ) et admit qu'elles sont arrachées au noyau de l'atome de béryllium par la réaction  ${}^4_2\text{He} + {}^9_4\text{Be} \rightarrow {}^{12}_6\text{C}^* + {}^1_0n \rightarrow {}^{12}_6\text{C} + \gamma$ . Chadwick publie ce résultat révolutionnant

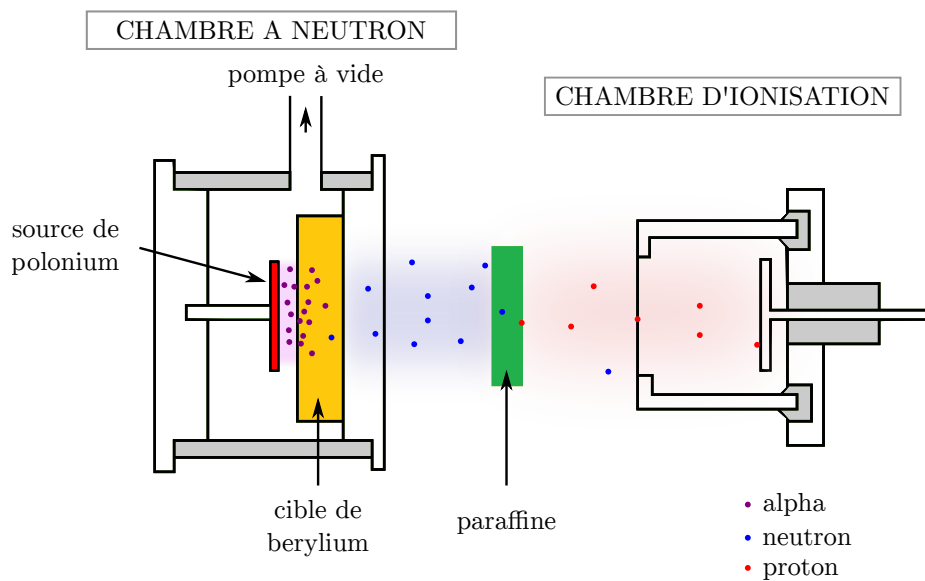


FIGURE A.5. Le schéma expérimental, mis en place par James Chadwick, a permis la découverte du neutron

le monde de la physique nucléaire le 27 février 1932 dans le journal *Nature* [99].

La découverte du neutron a été l'initiateur de la physique des réacteurs. La fission nucléaire induite par neutron a été découverte en Allemagne par Otto Hahn, Lise Meitner et Fritz Strassmann en 1938 [100]. L'équipe française, dont Frédéric Joliot-Curie, a mis en évidence que la séparation en deux fragments de fission était accompagnée de l'émission de plusieurs neutrons [101]. L'idée d'une réaction en chaîne est apparue rapidement et le premier réacteur critique (qui entretient une réaction en chaîne de façon contrôlée) a été conçu par Enrico Fermi dès 1942 avec la première pile de Chicago, dans le cadre du projet Manhattan.

# Éléments de neutronique

---

## Sommaire

---

<b>B.1</b>	<b>Le transport spatial</b> . . . . .	<b>168</b>
<b>B.2</b>	<b>Les disparitions (absorptions et diffusions)</b> . . . . .	<b>168</b>
<b>B.3</b>	<b>La source de diffusion</b> . . . . .	<b>168</b>
<b>B.4</b>	<b>La source de fission</b> . . . . .	<b>169</b>
<b>B.5</b>	<b>Les autres sources</b> . . . . .	<b>169</b>
<b>B.6</b>	<b>Formulation de l'équation de transport</b> . . . . .	<b>170</b>

---

Dans le cadre de la neutronique déterministe, la population de neutrons dans un réacteur est suffisamment importante pour pouvoir être décrite par la fonction densité  $n$  (*neutron.cm<sup>-3</sup>*). Il est néanmoins courant de privilégier l'usage du flux neutronique, noté  $\Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$ , s'exprimant en *neutrons.cm<sup>-2</sup>.s<sup>-1</sup>*. Il s'exprime à partir de la densité  $n$  et de la vitesse du neutron  $v$ , déterminée par son énergie  $E$  de la façon suivante :

$$\Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = v(E) \cdot n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) \quad (\text{B.1})$$

avec  $\vec{r}$  la variable spatiale,  $t$  la variable temporelle et  $\vec{\Omega}$  la variable angulaire caractérisant un neutron.

La détermination de l'équation du transport est obtenue par un bilan de la variation du nombre de neutrons  $n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$ , durant un intervalle de temps  $dt$ , dans un élément de volume  $dr$ , sur un intervalle en énergie  $dE$  et un angle solide  $d\vec{\Omega}$ . Le bilan neutronique fait intervenir des termes de transport spatial, de disparition, de sources de diffusion et de sources de neutrons. Les différents termes font intervenir des données nucléaires de base, indispensables pour les codes de calcul. C'est pourquoi elles sont de première importance.

## B.1 Le transport spatial

Ce terme est un bilan spatial du nombre de neutrons  $n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$  dans l'élément de volume  $dr$ . Il reflète simplement la variation entre le nombre de neutrons sortant et entrant par la surface. L'expression de ce terme est donnée comme suit :

$$\left. \frac{\partial n}{\partial t} \right|_{stream} = -\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) \quad (\text{B.2})$$

Cette expression est analogue à la loi de Fick pour la diffusion de particules.

## B.2 Les disparitions (absorptions et diffusions)

Les neutrons, à une énergie  $E$ , peuvent interagir avec la matière contenue dans un élément de volume. Parmi les interactions possibles, le neutron peut se faire absorber par un atome ou diffuser en changeant de direction et d'énergie. Cette contribution s'écrit à partir de la section efficace totale  $\Sigma_t$  caractéristique du milieu où se produit l'interaction :

$$\left. \frac{\partial n}{\partial t} \right|_{disparition} = -\Sigma_t(\vec{r}, E) \cdot \Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) \quad (\text{B.3})$$

$\Sigma_t(\vec{r}, E)$  est la somme d'une composante d'absorption et une autre de diffusion, notées respectivement  $\Sigma_a(\vec{r}, E)$  et  $\Sigma_s(\vec{r}, E)$ .

Dans le cadre des réacteurs à neutrons rapides basés sur le cycle uranium/plutonium, les principaux contributeurs à ces disparitions sont la section efficace de capture de l' $^{238}\text{U}$  et les sections efficaces de capture et de fission du  $^{239}\text{Pu}$ .

## B.3 La source de diffusion

Ce terme permet de prendre en compte l'arrivée de neutrons d'énergie  $E$  dans la direction  $\vec{\Omega}$  après une réaction de diffusion au sein du volume élémentaire. La source de diffusion s'écrit à l'aide de la section efficace de diffusion  $\Sigma_s$ . La prise en compte des énergies et de l'angle incident des neutrons, avant interaction, se traduit par une double intégration :

$$\left. \frac{\partial n}{\partial t} \right|_{scat} = \int_0^\infty \int_{4\pi} \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \cdot \Phi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}', t) d\vec{\Omega}' dE' \quad (\text{B.4})$$

Dans le cadre des réacteurs à neutrons rapides à caloporteur sodium, les principaux contributeurs de la source de diffusion sont les sections efficaces élastiques et inélastiques du  $^{23}\text{Na}$  et de  $^{238}\text{U}$ .

## B.4 La source de fission

La fission des actinides contribue à la production de neutrons. Elle fournit des neutrons prompts de fission, émis lors du processus même de fission du noyau, et des neutrons retardés issus de la décroissance de certains fragments de fission.

La répartition en énergie des neutrons prompts de fission est donnée par le spectre d'émission du noyau fissionnant  $\chi_p$ . Le nombre de neutrons émis par fission est représenté par la grandeur  $\nu_p$ , dépendant de l'énergie du neutron incident. Le terme source provenant des neutrons prompts de fission s'écrit alors :

$$\left. \frac{\partial n}{\partial t} \right|_{\text{prompt}} = \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty \int_{4\pi} \nu_p(E') \cdot \chi_p \cdot \Sigma_f(\vec{r}, E') \cdot \Phi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}', t) d\vec{\Omega}' dE' \quad (\text{B.5})$$

Les neutrons retardés dépendent, quant à eux, du spectre d'émission  $\chi_{d,i}$  d'un des descendants du précurseur  $i$ , de la constante partielle de décroissance radioactive du nucléide  $i$  et de la densité des précurseurs notée  $c_i(\vec{r}, t)$  :

$$\left. \frac{\partial n}{\partial t} \right|_{\text{delay}} = \frac{1}{4\pi} \sum_i \chi_{d,i}(E) \cdot \lambda_i \cdot c_i(\vec{r}, t) \quad (\text{B.6})$$

Les principales sources de fission, dans un réacteur à neutrons rapides avec un cycle uranium/plutonium, sont le  $^{239}\text{Pu}$  et le  $^{241}\text{Pu}$  dans les assemblages fissiles (*i.e.* combustible) et  $^{238}\text{U}$  pour les assemblages fertiles neufs.

## B.5 Les autres sources

Afin d'être complet dans le bilan neutronique, il est nécessaire d'introduire un terme de source externe, faisant intervenir des productions de neutrons via des réactions peu probables. Par exemple, cette contribution fait intervenir les neutrons prompts de la fission spontanée, les réactions neutroniques ( $\alpha, n$ ) ou encore une source de spallation. L'ensemble de ces contributions est rassemblé dans un terme  $S$  :

$$\left. \frac{\partial n}{\partial t} \right|_{\text{ext}} = S(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) \quad (\text{B.7})$$

## B.6 Formulation de l'équation de transport

Finalement, les différentes contribution détaillées précédemment sont rassemblées (B.2 + B.3 + B.4 + B.5 + B.6 + B.7). Ainsi :

$$\begin{aligned}
\frac{1}{v} \frac{\partial \Phi}{\partial t} = \frac{\partial n}{\partial t} = & - \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \Phi (\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) \\
& - \Sigma_t (\vec{r}, E) \cdot \Phi (\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) \\
& + \int_0^\infty \int_{4\pi} \Sigma_s (\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \cdot \Phi (\vec{r}, E', \vec{\Omega}', t) d\vec{\Omega}' dE' \\
& + \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty \int_{4\pi} \nu_p (E') \cdot \Sigma_f (\vec{r}, E') \cdot \chi_p \cdot \Phi (\vec{r}, E', \vec{\Omega}', t) d\vec{\Omega}' dE' \\
& + \frac{1}{4\pi} \sum_i \chi_{d,i} (E) \cdot \lambda_i \cdot c_i (\vec{r}, t) \\
& + S (\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)
\end{aligned}$$

Le bilan neutronique, dépendant du temps, de l'espace, de l'angle et de l'énergie peut être condensé sous le format suivant :

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \Phi}{\partial t} = F_p \Phi + S_d + S - L \Phi \quad (\text{B.8})$$

avec :

- $F_p \Phi$  le terme de source de neutrons prompts issus de la fission ;
- $S_d$  le terme de source de neutrons retardés issu de la désintégration de certains produits de fission ;
- $S$  le terme de source de neutrons autre que les deux précédentes ((n,2n) par exemple) ;
- $L \Phi$  le terme de disparition de neutrons correspondant aux fuites des neutrons, à la diffusion et aux absorptions ((n, $\gamma$ ) et (n,n') par exemple).

# Résolution de l'inférence Bayésienne - algorithme de Metropolis

---

## Sommaire

C.1 Principe . . . . .	171
C.2 Résultats . . . . .	173

---

## C.1 Principe

L'algorithme de Metropolis-Hastings est un exemple d'algorithme faisant partie d'une classe particulière appelée chaîne de Markov [102]. Cette chaîne évolue selon un mécanisme de proposition et un mécanisme d'acceptation-rejet. L'algorithme proposé ici est similaire à ce que l'on peut trouver dans la littérature [103, 104]. L'étape de proposition vise à explorer l'espace, en proposant des états aléatoires selon une distribution donnée, ici *a priori*. Comme son nom l'indique, l'étape d'acceptation-rejet consiste à accepter une nouvelle proposition avec une certaine probabilité. Dans le cas contraire, l'algorithme retourne à l'état précédent sans retenir la nouvelle proposition (le précédent tirage sera alors gardé).

Soit  $N$  le nombre de tirages aléatoires simulés,  $\vec{x}_i^{prior}$  le  $i^{\text{ème}}$  tirage selon la densité de probabilité *a priori*  $p(\vec{x}|U)$ , et  $\vec{x}_i^{post}$  le vecteur des variables aléatoire correspondant au  $i^{\text{ème}}$  tirage. La probabilité d'acceptation du tirage  $i + 1$  dépend du rapport des *likelihoods* de ce tirage et du précédent. La loi de rejet est définie comme suit :

$$Si \frac{p(\vec{y}_{i+1}|\vec{x}_{i+1},U)}{p(\vec{y}_i|\vec{x}_i,U)} > \alpha, \text{ alors } \vec{x}_{i+1}^{post} = \vec{x}_{i+1}^{prior}. \text{ Sinon, } \vec{x}_{i+1}^{post} = \vec{x}_i^{post}. \quad (C.1)$$

avec  $\alpha$  un nombre aléatoire généré suivant une loi uniforme entre 0 et 1. La Figure C.1 résume de façon schématique le principe du Metropolis.



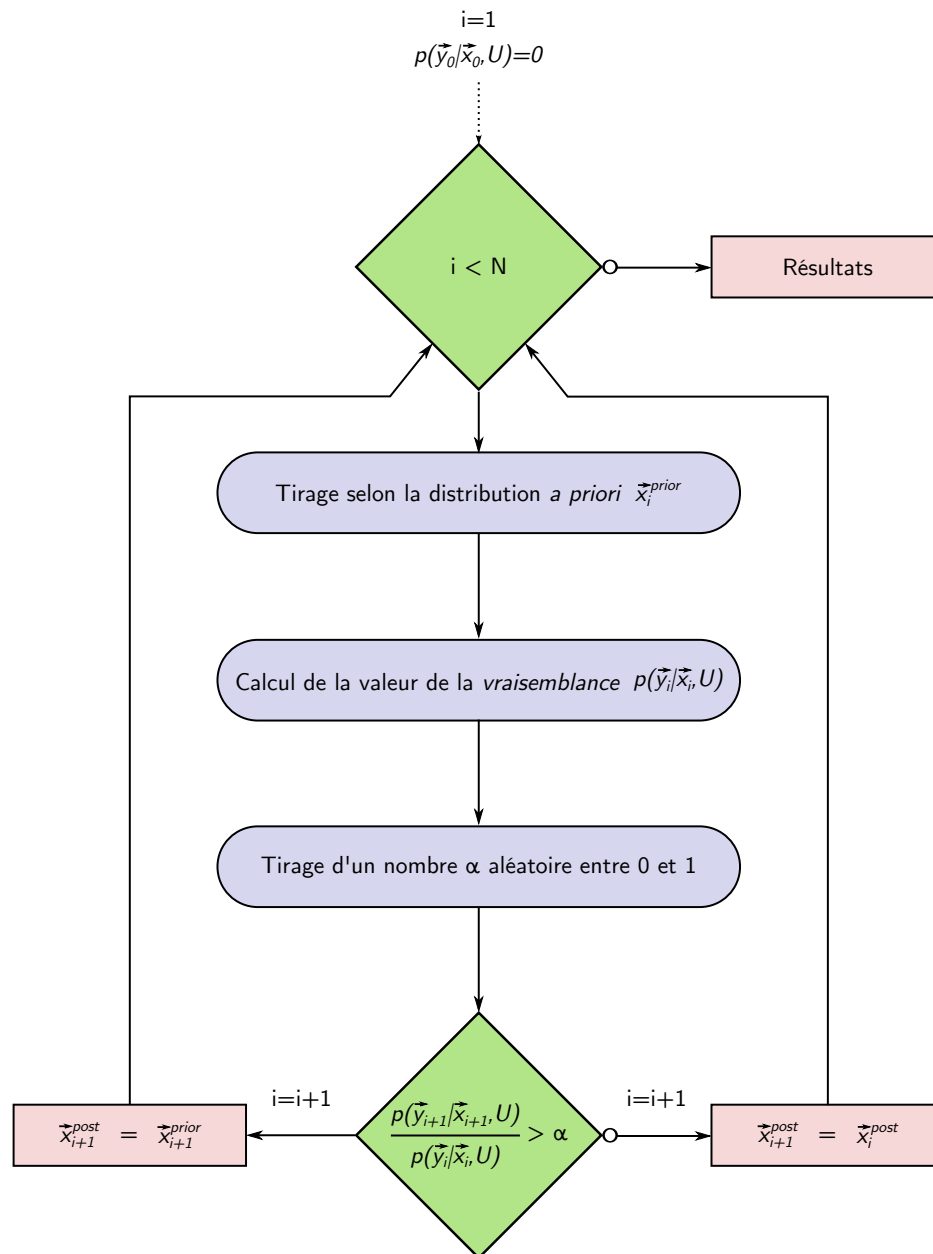


FIGURE C.1. Schéma de principe de l'algorithme BMC (Metropolis) avec  $N$  le nombre d'histoires simulées

Cet algorithme ressemble fortement à la méthode BMC Classique (*cf.* Section 2.3.1). Au lieu d'affecter un poids, la méthode Metropolis va rester autant de fois que nécessaire à la même valeur. Le fait de rester sur la même valeur est proportionnel au poids de la méthode Classique. Deux avantages dans l'utilisation de cette méthode peuvent être notés :

- la distribution *a posteriori* est directement construite au fur et à mesure ;
- il n'y a pas besoin d'évaluer les exponentielles, mais seulement leurs composantes. En effet, seule la comparaison entre deux *likelihoods* nous intéresse. Ces derniers étant des termes exponentiels, il est suffisant de comparer leurs composantes.

## C.2 Résultats

L'ajustement présenté sur le cas de l' $^{238}\text{U}$  dans la Section 2.4 du Chapitre 2 est repris. Les résultats obtenus sont présentés dans le Tableau C.1, avec les autres méthodes. L'ajustement avec l'algorithme Metropolis ne converge pas vers les mêmes valeurs que les autres méthodes (avec 2 millions d'histoires simulées, contrairement à moins d'1 millions pour les autres). En effet :

- les valeurs moyennes des paramètres *a posteriori*, pour la méthode Metropolis, se situent entre les valeurs moyennes de l'*a priori* et la solution.
- les incertitudes et la corrélation obtenue sur les paramètres de modèles sont plus faibles qu'avec les autres méthodes ;
- cependant, la valeur moyenne de l'incertitude  $\langle \delta_y \rangle$  *a posteriori* sur la section efficace est identique pour tous les cas.

Ces différences peuvent s'expliquer par une réjection trop importante des échantillonnages proche de la solution. Cela peut se voir sur les Figures C.2 et C.3, qui illustrent les distributions obtenues, qui ne sont pas gaussiennes.

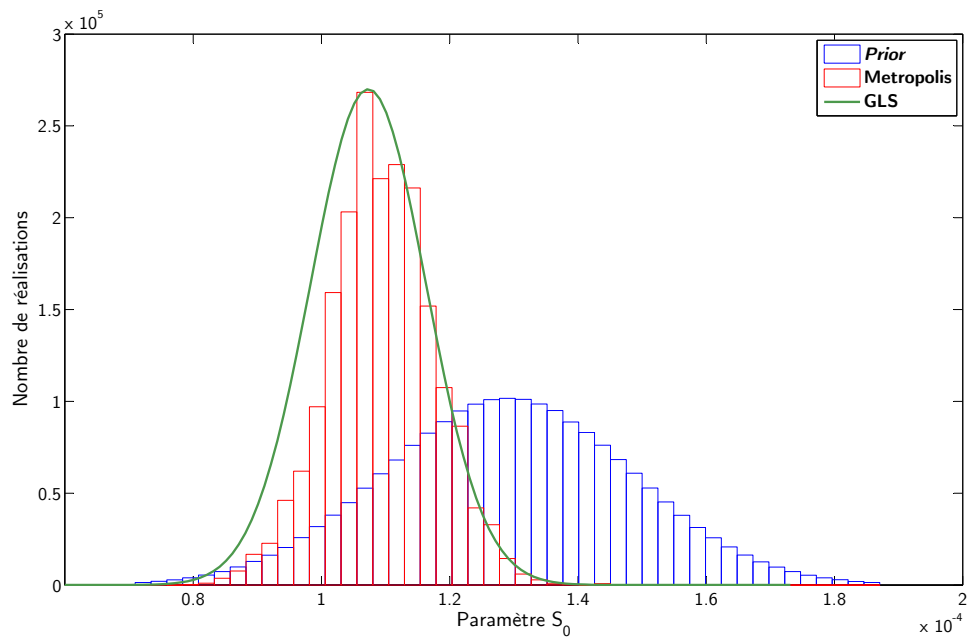


FIGURE C.2. Distribution de  $S_0$  obtenue par la méthode BMC Metropolis en rouge. En vert est tracée la densité de probabilité non-normalisée, déduite de l'ajustement analytique de type GLS

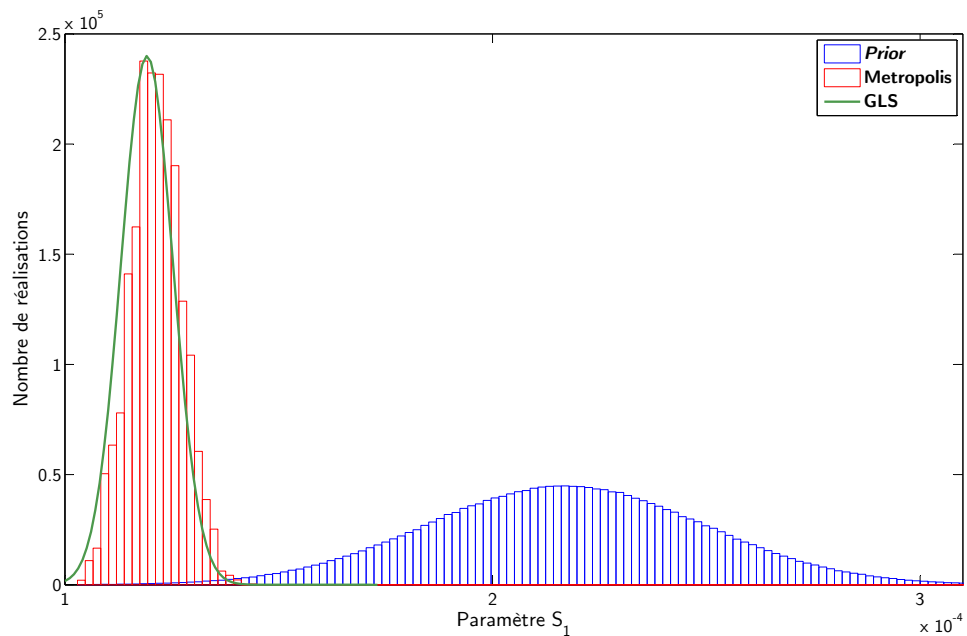


FIGURE C.3. Distribution de  $S_1$  obtenue par la méthode BMC Metropolis en rouge. En vert est tracée la densité de probabilité non-normalisée, déduite de l'ajustement analytique de type GLS

TABLEAU C.1. Comparaison entre les différentes méthodes implémentées dans CONRAD pour la section efficace totale de  $l^{238}\text{U}$

Grandeurs	<i>Prior</i>	GLS	Classique	Importance	Metropolis
$S_0$ ( $\times 10^{-4}$ )	1,290	1,073	1,072	1,073	1,094
$\delta S_0$ ( $\times 10^{-6}$ )	19,35	9,013	9,122	9,020	8,201
$S_1$ ( $\times 10^{-4}$ )	2,170	1,192	1,193	1,192	1,121
$\delta S_1$ ( $\times 10^{-6}$ )	32,55	6,089	6,135	6,095	6,090
Corrélation	0,000	-0,446	-0,425	-0,447	-0,376
$\langle \delta_y \rangle$ (%)	2,78	0,64	0,65	0,64	0,63



# Outils de probabilité

## Sommaire

D.1 Variable aléatoire unidimensionnelle . . . . .	177
D.2 Variable aléatoire multivariée . . . . .	178

## D.1 Variable aléatoire unidimensionnelle

Soit  $X$  une variable aléatoire continue. Si  $dx$  est un nombre réel positif infiniment petit, alors la probabilité que la valeur de la variable  $X$  soit incluse dans l'intervalle  $[x, x + dx]$  est égale à  $p(x)dx$ , soit :

$$P(x < X < x + dx) = p(x)dx$$

Par définition, la densité de probabilité vérifie la condition suivante :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} p(x)dx = 1$$

Pour rappel, la valeur moyenne est définie par :

$$E[x] = \bar{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} x \cdot p(x) dx$$

La variance est définie par :

$$\sigma_x^2 = \text{var}(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} (x - \bar{x}) \cdot p(x) dx$$

Dans la plupart des cas pour l'évaluation, on suppose que les lois de probabilité sont gaussiennes. La densité de probabilité gaussienne est donnée par la relation suivante :

$$p(x) = \frac{1}{\sigma_x \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x - \bar{x})^2}{2\sigma_x^2}\right)$$

## D.2 Variable aléatoire multivariée

Soit  $\vec{X}$  un vecteur aléatoire continu de taille  $n$ . Cela signifie que chaque composante est une variable aléatoire continue. Si  $d\vec{x}$  est un volume infiniment petit à  $n$  dimensions, alors la probabilité que la valeur de la variable  $\vec{X}$  soit incluse dans le volume  $[\vec{x}, \vec{x} + d\vec{x}]$  de dimension  $n$  est égale à  $p(\vec{x})d\vec{x}$ , soit :

$$P(\vec{x} < \vec{X} < \vec{x} + d\vec{x}) = p(\vec{x})d\vec{x}$$

Par définition, la densité de probabilité multivariée vérifie la condition suivante :

$$\int_{\mathbb{R}^n} p(\vec{x})d\vec{x} = 1$$

La valeur moyenne est définie par :

$$E[\vec{x}] = \langle \vec{x} \rangle = \int_{\mathbb{R}^n} \vec{x} \cdot p(\vec{x}) d\vec{x}$$

Et  $\forall i \in \llbracket 1, n \rrbracket$  :

$$E[x_i] = \bar{x}_i = \int_{\mathbb{R}^n} x_i \cdot p(\vec{x}) d\vec{x}$$

La variance est définie par :

$$\text{var}(\vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^n} (\vec{x} - \langle \vec{x} \rangle) \cdot p(\vec{x}) d\vec{x}$$

Et  $\forall i \in \llbracket 1, n \rrbracket$  :

$$\sigma_{x_i}^2 = \text{var}(x_i) = \int_{\mathbb{R}^n} (x_i - \bar{x}_i) \cdot p(\vec{x}) d\vec{x}$$

Enfin, on peut exprimer la covariance entre deux composantes  $x_i$  et  $x_j$  :

$$\forall (i, j) \in \llbracket 1, n \rrbracket^2, \text{cov}(x_i, x_j) = \int_{\mathbb{R}^n} (x_i - \bar{x}_i) \cdot (x_j - \bar{x}_j) \cdot p(\vec{x}) d\vec{x}$$

Cette expression est équivalente à la suivante :

$$\text{cov}(x_i, x_j) = \left[ \int_{\mathbb{R}^n} x_i \cdot x_j \cdot p(\vec{x}) d\vec{x} \right] - \bar{x}_i \bar{x}_j$$

Dans la plupart des cas pour l'évaluation, on suppose que les lois de probabilité sont gaussiennes. La densité de probabilité multivariée gaussienne est donnée par la relation suivante :

$$p(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2} |\Sigma|^{1/2}} \exp \left( -\frac{1}{2} (\vec{x} - \langle \vec{x} \rangle)^T \Sigma^{-1} (\vec{x} - \langle \vec{x} \rangle) \right)$$

avec  $\Sigma = \text{cov}(x_i, x_j)$  la matrice de covariance et  $|\Sigma|$  le déterminant de la matrice  $\Sigma$ . Ces expressions sont similaires à celles des distributions *a priori*, *a posteriori* et du *likelihood* présentées dans le Chapitre 2.

# Propagation des incertitudes

## Sommaire

<b>E.1</b>	<b>Développement limité d'une fonction <math>C(\vec{x})</math></b>	<b>179</b>
<b>E.2</b>	<b>Calcul de l'espérance de <math>C(\vec{x})</math></b>	<b>180</b>
<b>E.3</b>	<b>Calcul de la covariance entre <math>C_k(\vec{x})</math> et <math>C_l(\vec{x})</math></b>	<b>180</b>
<b>E.4</b>	<b>Calcul de la variance entre de <math>C(\vec{x})</math></b>	<b>181</b>

Soit  $\vec{x}$  un vecteur aléatoire de taille  $n$ , d'espérance  $\mu$ , d'écart type  $\sigma$ , de covariance  $M$  et suivant la loi de probabilité  $f(\vec{x})$ . Ainsi :

$$\vec{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \vec{\mu} = \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \vdots \\ \mu_n \end{pmatrix}, \vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \vdots \\ \sigma_n \end{pmatrix}$$

et

$$M = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \dots & \text{cov}(x_1, x_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \text{cov}(x_1, x_n) & \dots & \sigma_n^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_{1,1} & \dots & m_{1,n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ m_{n,1} & \dots & m_{n,n} \end{pmatrix}$$

## E.1 Développement limité d'une fonction $C(\vec{x})$

On note  $C(\vec{x})$  une fonction des variables aléatoires de  $\vec{x}$ . Le développement limité au premier ordre de  $C(\vec{x})$  est donné par la relation :

$$C(\vec{x}) = C(\vec{\mu}) + \sum_{i=1}^n \frac{\delta C(\mu)}{\delta x_i} (x_i - \mu_i)$$



## E.2 Calcul de l'espérance de $C(\vec{x})$

Grâce au développement limité décrit précédemment, montrons que l'espérance de  $C(\vec{x})$ , noté  $E[C(\vec{x})]$ , est égale à  $C(\vec{\mu})$  :

$$\begin{aligned}
 E[C(\vec{x})] &= \int_{\vec{x}} C(\vec{x}) f(\vec{x}) d\vec{x} \\
 &= \int_{\vec{x}} \left( C(\vec{\mu}) + \sum_{i=1}^n \frac{\delta C(\mu)}{\delta x_i} (x_i - \mu_i) \right) f(\vec{x}) d\vec{x} \\
 &= C(\vec{\mu}) + \sum_{i=1}^n \frac{\delta C(\mu)}{\delta x_i} \int_{\vec{x}} (x_i - \mu_i) f(\vec{x}) d\vec{x} \\
 &= C(\vec{\mu}) + \sum_{i=1}^n \frac{\delta C(\mu)}{\delta x_i} \left[ \int_{\vec{x}} x_i f(\vec{x}) d\vec{x} - \mu_i \right]
 \end{aligned}$$

Or  $\forall i \in \llbracket 1, n \rrbracket$ ,  $\int_{\vec{x}} x_i f(\vec{x}) d\vec{x} = \mu_i$ . D'où  $\boxed{E[C(\vec{x})] = C(\vec{\mu})}$

## E.3 Calcul de la covariance entre $C_k(\vec{x})$ et $C_l(\vec{x})$

Soit  $c_{k,l} = \text{cov}(C_k(\vec{x}), C_l(\vec{x}))$  la covariance recherchée. Par définition, on a :

$$c_{k,l} = E[(C_k(\vec{x}) - E[C_k(\vec{x})])(C_l(\vec{x}) - E[C_l(\vec{x})])]$$

D'après la relation sur la moyenne trouvée précédemment, on a :

$$c_{k,l} = E[(C_k(\vec{x}) - C_k(\vec{\mu}))(C_l(\vec{x}) - C_l(\vec{\mu}))]$$

Développons :

$$\begin{aligned}
 c_{k,l} &= E \left[ \left( \sum_{i=1}^n \frac{\delta C_k(\mu)}{\delta x_i} (x_i - \mu_i) \right) \left( \sum_{j=1}^n \frac{\delta C_l(\mu)}{\delta x_j} (x_j - \mu_j) \right) \right] \\
 &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{\delta C_k(\mu)}{\delta x_i} \frac{\delta C_l(\mu)}{\delta x_j} E[(x_i - \mu_i)(x_j - \mu_j)] \\
 &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{\delta C_k(\mu)}{\delta x_i} \frac{\delta C_l(\mu)}{\delta x_j} m_{i,j}
 \end{aligned}$$

On rappelle que  $m_{i,j}$  est la covariance entre  $x_i$  et  $x_j$ . Ainsi, cette relation est utilisée pour propager les incertitudes des paramètres de modèles aux sections efficaces ponctuelles dans ce manuscrit.

## E.4 Calcul de la variance entre de $C(\vec{x})$

La variance est un cas particulier de la covariance. En effet, la variance est, au final, la covariance entre  $C(\vec{x})$  et  $C(\vec{x})$ . Ainsi, on obtient la relation suivante :

$$\text{var}(C(\vec{x})) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{\delta C(\mu)}{\delta x_i} \frac{\delta C(\mu)}{\delta x_j} m_{i,j}$$

Soit  $S_{C,x_i}(\mu)$  la sensibilité de la grandeur calculée  $C(\vec{x})$  au paramètre  $x_i$ , définie par :

$$S_{C,x_i}(\mu) = \frac{\delta C(\mu)}{\delta x_i} \cdot \frac{x_i}{C(\mu)}$$

En notant  $S$  le vecteur sensibilité, de composante  $S_{C,x_i}(\mu)$ , on obtient la relation suivante, usuellement appelé règle du sandwich :

$$\delta C = \sqrt{S^T M S}$$

Dans le cas du calcul d'un  $k_{eff}$  et d'une propagation des incertitudes des sections efficaces sur ce dernier,  $S$  est le vecteur des sensibilités du  $k_{eff}$  aux sections efficaces multigroupes et  $M$  est la matrice de covariance de ces sections efficaces multigroupes. Si on travaille à 33 groupes d'énergie,  $S$  sera de taille 33 et  $M$  une matrice carrée de taille 33 également. Cette méthode a été utilisée en début du Chapitre 4, pour réaliser une assimilation de données intégrales sur sections efficaces multigroupes.

Dans le cas du calcul d'un  $k_{eff}$  et d'une propagation des incertitudes des sections efficaces sur ce dernier,  $S$  est le vecteur des sensibilités du  $k_{eff}$  aux paramètres de modèles et  $M$  est la matrice de covariance de ces paramètres. Si on travaille avec 10 paramètres,  $S$  sera de taille 10 et  $M$  une matrice carré de taille 10 également. Cette méthode a été utilisée en début du Chapitre 4, pour réaliser une assimilation de données intégrales sur les paramètres de modèles. Pour comparer les résultats obtenus entre les deux méthodes d'assimilation, une propagation d'incertitude des paramètres de modèles, après ajustement, a été réalisé pour obtenir les covariances sur les sections efficaces multigroupes, en utilisant ce qui a été décrit dans cette annexe.



# Rendements mesurés pour l' $^{235}\text{U}$ dans PROFIL et PROFIL-2

---

## Sommaire

---

<b>F.1</b>	<b>Importance des rendements de fission . . . . .</b>	<b>184</b>
<b>F.2</b>	<b>Évaluation des rendements des néodymes de fission . . . . .</b>	<b>185</b>
<b>F.3</b>	<b>Résultats de l'interprétation des expériences PROFIL et PROFIL-2</b>	<b>186</b>

---

La fission nucléaire fait l'objet de nombreuses études depuis ces derniers trois quart de siècle. De nombreux modèles théoriques ont été proposés, mais aucun n'arrive à modéliser entièrement ce phénomène complexe : la fission fait intervenir des propriétés de structures nucléaires auxquelles il faut associer des considérations dynamiques.

La **fission nucléaire** est un processus au cours duquel un noyau lourd est scindé en deux noyaux légers. Les **fragments de fission** sont émis directement après la fission, dans un état instable. Ils vont émettre des **particules promptes** (gammas ou/et neutron) afin de libérer de l'énergie pour atteindre un état fondamental. On appelle **produits de fission** ces isotopes. Étant excédentaires en neutrons, ils vont émettre des **particules retardées** (gamma, neutron, électron) pour rejoindre la vallée de stabilité.

Le **rendements indépendant** d'un isotope de masse  $A$  et de charge nucléaire  $Z$  correspond à la proportion de cet isotope créée lors de la fission, après émission des particules promptes, et avant les désintégrations  $\beta^-$ . Les **rendements cumulés** sont les isotopes créés lors de la fission après émission des particules  $\beta^-$ , et donc bien après les émissions de particules promptes.

## F.1 Importance des rendements de fission

Il n'existe pas de modèle théorique assez précis pour prédire, avec une précision suffisante, les rendements des produits de fission. Ces rendements de fission sont importants puisqu'ils sont utilisés dans le domaine nucléaire.

- La mesure de la fluence en réacteur peut être obtenue en regardant la concentration des produits de fission qui ont une section efficace de capture assez faible. Cette caractéristique permet d'obtenir une concentration directement proportionnelle à la fluence (*cf.* Équation (F.1)). Les principaux isotopes que l'on regarde sont les néodymes de fission, car ils ont des sections d'absorption très faibles.

$$\tau_{PF}(t) = \sum_{NL} \left[ \frac{A}{Z} NL \right] (t) \cdot \sigma_{f,NL}(t) \cdot \phi(t) \cdot Y_{NL \rightarrow PF} \quad (\text{F.1})$$

- La gestion des déchets nucléaires radioactifs est au centre des études aujourd'hui. L'Équation (F.1) ci-dessus montre que la concentration des produits de fission est proportionnelle aux rendements de fission. Améliorer la connaissance sur ces derniers permettrait d'avoir une meilleure estimation des productions de déchets nucléaires.
- Le calcul du nombre de neutrons retardés moyens  $\bar{\nu}_d$ , paramètre neutronique important dans la physique des réacteurs, dépend également de la valeur des rendements de fission. Il est possible d'obtenir cette grandeur en sommant sur tous les produits de fission les rendements de fission  $Y_{PF}$  multipliés par la probabilité d'émettre un neutron  $P_{n,NF}$  (*cf.* Équation (F.2)). L'incertitude de  $\bar{\nu}_d$  résulte alors de chaque contribution.

$$\bar{\nu}_d = \sum_{PF} Y_{PF} \cdot P_{n,NF} \quad (\text{F.2})$$

- Les produits de fission ayant une section efficace de capture et un rendement important jouent un rôle important dans la réactivité des réacteurs. Afin de mieux gérer ces effets, les sections efficaces de ces noyaux ainsi que leurs rendements ont encore besoin d'être améliorés : le tableau 1.2 donne les vingt produits de fission qui représentent 85% de l'anti-réactivité pour un combustible de type UOX à 40GWj/t.

Il est ainsi légitime de vouloir approfondir la connaissance sur ces rendements de fission. Cette annexe a pour objectif de donner des valeurs expérimentales intégrales issues de l'interprétation des expériences PROFIL, sur les rendements des néodymes pour la fission de  $^{235}\text{U}$ . Une première partie porte sur les évaluations des rendements des néodymes de fission, ainsi qu'une description de la partie du fichier ENDF utilisé. Les différences entre les bibliothèques pour ces rendements de fission cumulés sont présentées. Les résultats obtenus avec les interprétations des expériences PROFIL, pour  $^{235}\text{U}$ , sont donnés dans un deuxième temps. Ce sont des résultats expérimentaux supplémentaires qui peuvent être utilisés lors de l'évaluation des rendements de fission.

## F.2 Évaluation des rendements des néodymes de fission

Les évaluations des rendements de fission indépendants et cumulés sont nombreuses et diffèrent selon la bibliothèque de donnée nucléaire. Effectivement, les évaluateurs n'ont pas toujours les mêmes données expérimentales à disposition et produisent ainsi des fichiers d'évaluations différents. La Table F.1 montre les rendements des néodymes pour la fission de  $^{235}\text{U}$ , du  $^{239}\text{Pu}$  et du  $^{241}\text{Pu}$  pris dans les principales bibliothèques de donnée nucléaire JEFF-3.1.1, ENDF/B-VII et JENDL-4.0. Les valeurs aux points thermiques sont issues d'expérience microscopique, alors que les rendements à 400 keV proviennent principalement de mesure en réacteur, avec un spectre rapide. Les rendements donnés dans la librairie, pour les énergies de 400 keV, sont alors des rendements effectifs (valides sur un spectre rapide).

TABLEAU F.1. *Différentes évaluations (ENDF/B-VII, JEFF-3.1.1 et JENDL-4.0) pour les rendements des néodymes de  $^{235}\text{U}$*

Isotope	Bib.	Valeur (25 meV)	Inc. (%)	Valeur (400 keV)	Inc. (%)	Valeur (14 MeV)	Inc. (%)
$^{143}\text{Nd}$	ENDF	0.059558	0.3	0.057312	0.5	0.038151	2.8
	JEFF	0.059541	1.4	0.055327	1.0	0.040233	13.5
	JENDL	0.059478	0.4	0.057220	0.5	0.038212	2.8
$^{144}\text{Nd}$	ENDF	0.054996	0.3	0.052686	0.7	0.031721	2.8
	JEFF	0.054745	1.0	0.050943	1.5	0.031552	1.2
	JENDL	0.054914	0.4	0.052786	0.7	0.031769	2.8
$^{145}\text{Nd}$	ENDF	0.039334	0.3	0.037757	0.5	0.027090	6.0
	JEFF	0.039439	1.1	0.037965	1.8	0.028073	20.2
	JENDL	0.039272	0.4	0.037677	0.5	0.027129	6.0
$^{146}\text{Nd}$	ENDF	0.029969	0.4	0.029214	0.5	0.021987	11.0
	JEFF	0.029866	1.0	0.029267	1.8	0.023028	21.5
	JENDL	0.029936	0.4	0.029168	0.5	0.022022	11.0
$^{148}\text{Nd}$	ENDF	0.016735	0.4	0.016834	0.5	0.011978	11.0
	JEFF	0.016808	0.7	0.016966	1.2	0.005951	5.8
	JENDL	0.016706	0.4	0.016795	0.6	0.011994	11.0
$^{150}\text{Nd}$	ENDF/	0.006532	0.5	0.006858	0.5	0.005109	11.0
	JEFF	0.006507	1.0	0.007024	2.4	0.004798	15.4
	JENDL	0.006523	0.5	0.006845	0.5	0.005117	11.0

Les évaluateurs rendent accessibles ces informations nécessaires pour les codes de calcul neutronique via les fichiers ENDF [46] (*Evaluated Nuclear Data File*). En particulier, on

s'intéresse ici aux données stockées concernant les rendements de fission. Ces informations sont transcrites dans le block de données MF8 (cf. Figure F.1). On retrouve ensuite les rendements cumulés dans la MT454 et les rendements indépendants dans la MT459.

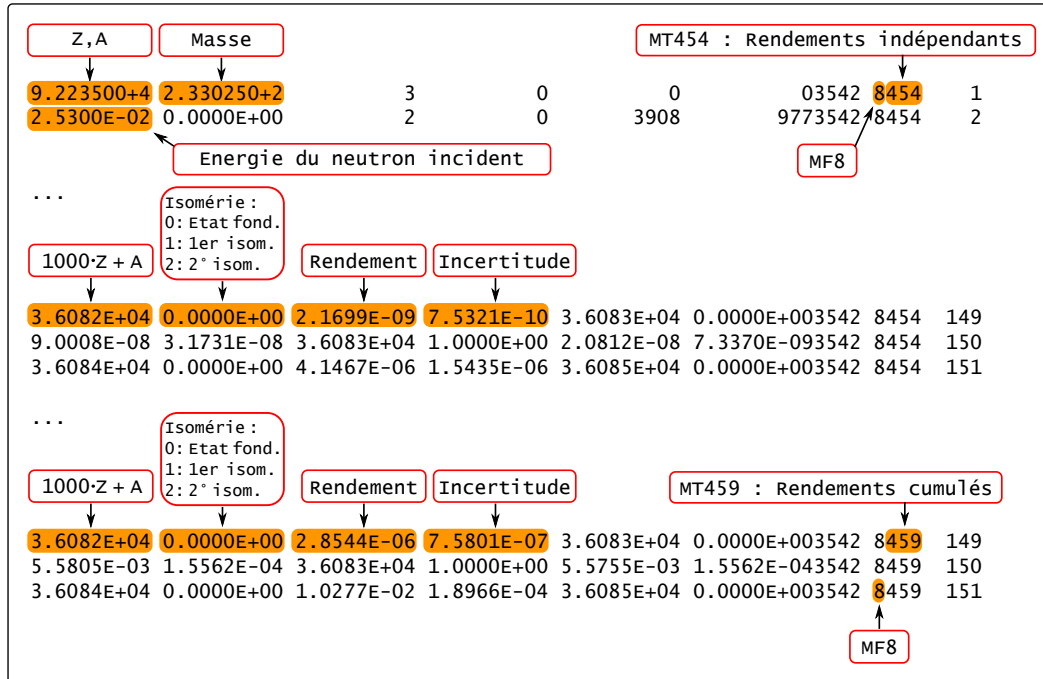


FIGURE F.1: Organisation des données dans le format ENDF

### F.3 Résultats de l'interprétation des expériences PROFIL et PROFIL-2

Ces expériences sont riches en information notamment pour les sections de capture des isotopes majoritaires des différents échantillons irradiés. En pratique, les recalages de la fluence sont réalisés grâce aux ratios de concentration  $^{A}\text{Nd} / ^{235}\text{U}$ , car les néodymes ont des sections efficaces de capture très faible. Ici nous avons utilisé un autre recalage ne faisant pas intervenir les rendements de fission (cf. Section 5.1 du Chapitre 5). Au total, six échantillons d' $^{235}\text{U}$  ont été irradiés dans chacune des aiguilles. Tous ces échantillons n'ont pas pu être analysés pour des raisons expérimentales (problème de dissolution des échantillons par exemple). Les expérimentateurs donnent pour la plupart des échantillons les ratios  $^{143}\text{Nd} / ^{235}\text{U}$ ,  $^{144}\text{Nd} / ^{235}\text{U}$ ,  $^{145}\text{Nd} / ^{235}\text{U}$ ,  $^{146}\text{Nd} / ^{235}\text{U}$ ,  $^{148}\text{Nd} / ^{235}\text{U}$  et  $^{150}\text{Nd} / ^{235}\text{U}$ . Le nombre de mesures disponibles est indiqué dans la Table F.2.

Les études menées dans le Chapitre 4, sur les sections efficaces de capture avec les ex-

TABLEAU F.2. *Mesures disponibles des ratios de concentration des néodymes sur la concentration de  $^{235}\text{U}$*

Ratio	PROFIL-1	PROFIL-2A	PROFIL-2B
$^{143}\text{Nd} / ^{235}\text{U}$	6	2	1
$^{145}\text{Nd} / ^{235}\text{U}$	6	2	1
$^{146}\text{Nd} / ^{235}\text{U}$	6	2	1
$^{148}\text{Nd} / ^{235}\text{U}$	6	3	3
$^{150}\text{Nd} / ^{235}\text{U}$	6	2	1

TABLEAU F.3. *Valeurs expérimentales des rendements cumulés effectifs des néodymes pour la fission de  $^{235}\text{U}$*

Rendement de Fission Cumulé	Valeurs Expérimentales	Incertitude Relative (%)
$Y_{^{235}\text{U}}(^{143}\text{Nd})$	0,05633	1,5
$Y_{^{235}\text{U}}(^{145}\text{Nd})$	0,03714	1,5
$Y_{^{235}\text{U}}(^{146}\text{Nd})$	0,02838	1,5
$Y_{^{235}\text{U}}(^{148}\text{Nd})$	0,01649	1,5
$Y_{^{235}\text{U}}(^{150}\text{Nd})$	0,00670	1,5

périences PROFIL et PROFIL-2, permettent également d'obtenir des résultats sur les rendements cumulés effectifs des néodymes pour la fission de  $^{235}\text{U}$ . Les résultats issus de la réduction de données de l'ensemble des échantillons irradiés, sont listés le Tableau F.3.





# Bibliographie

- [1] GENIV INTERNATIONAL FORUM. "Annual Report 2014". <http://www.gen-4.org>, 2014.
- [2] Y. NIEVERGELT. A Tutorial History of Least Squares with Applications to Astronomy and Geodesy. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, **121**, p. 32–72, 2000.
- [3] T. BAYES. An Essay Towards Solving a Problem in the Doctrine of Chances. *Philos. Trans. R. Soc. London.*, **53**, p. 370, 1763.
- [4] D. REGNIER. *Contribution à l'étude des gammas prompts de fission*. Thèse de doctorat, Université de Grenoble, October 2013.
- [5] W.D. MYERS. Droplet model nuclear density distributions and single-particle potential wells. *Nuclear Physics A*, **145**(2), p. 387–400, 1970.
- [6] M. HERMAN, R. CAPOTE, B.V. CARLSON, P. OBLOŽINSKÝ, M. SIN, A. TRKOV, H. WIENKE et V. ZERKIN. EMPIRE: Nuclear Reaction Model Code System for Data Evaluation. *Nuclear Data Sheets*, **108**, p. 2655–2715, 2007.
- [7] ANTHONY FODERARO. *The Elements of Neutron Interaction Theory*. The MIT Press, 2003.
- [8] A.M. LANE et R.G. THOMAS. R-Matrix Theory of Nuclear Reactions. *Reviews of Modern Physics*, **30**, p. 257–353, Apr 1958.
- [9] G. BREIT et E WIGNER. Capture of Slow Neutrons. *Physical Review*, **49**(7), p. 519–531, April 1936.
- [10] C.W. REICH et M.S. MOORE. Multilevel Formula for the Fission Process. *Physical Review*, **111**(3), p. 929–933, August 1958.
- [11] F.H. FROHNER. Evaluation and Analysis of Nuclear Resonance Data. *JEFF Report*, **18**, 2000.
- [12] C.E. PORTER et R.G. THOMAS. Fluctuations of Nuclear Reaction Widths. *Physical Review*, **104**, p. 483–491, 1956.
- [13] E.P. WIGNER. International Conference on Neutron Physics by Time of Flight. *ORNL report*, **2309**, 1957.

- [14] A. GILBERT et A.G.W. CAMERON. A composite nuclear-level density formula with shell corrections. *Canadian Journal of Physics*, **43**, p. 1446–1496, 1965.
- [15] F.H. FROHNER et O. BOULAND. Treatment of external levels in neutron resonance fitting: application to the non-fissile nuclide  $^{52}\text{Cr}$ . *Nuclear Science and Engineering*, **137**, p. 70, 2001.
- [16] P. MOLDAUER. Theory of average neutron reaction cross section in the resonance region. *Nuclear Physics C*, **11**, p. 426, 1975.
- [17] P. MOLDAUER. Statistics and the average cross section. *Nuclear Physics*, **A344**, p. 185, 1980.
- [18] W. HAUSER et H. FESHACH. The inelastic scattering of neutrons. *Physical Review*, **87**, p. 366, 1952.
- [19] L. PAPINEAU. *Mises en évidence des fluctuations des sections efficaces du modèle statistique par l'étude de la réaction  $^{27}\text{Al} (d, \alpha) ^{25}\text{Mg}$* . Thèse de doctorat, Université de Paris, June 1965.
- [20] J.C. SUBLET, P. RIBBON et M. COSTE-DELCLAUX. CALENDF-2010 : User Manual. *CEA de Saclay*, **R-6277**, 2011.
- [21] P. ARCHIER. *Contribution à l'Amélioration des Données Nucléaires Neutroniques du Sodium pour le Calcul des Réacteurs de Génération IV*. Thèse de doctorat, Université de Grenoble, September 2011.
- [22] B. MORILLON et P. ROMAIN. Dispersive and global spherical optical model with a local energy approximation for the scattering of neutrons by nuclei from 1 keV to 200 MeV. *PHYSICAL REVIEW C*, **70**(014601), July 2004.
- [23] B. MORILLON et P. ROMAIN. Bound single-particle states and scattering of nucleons on spherical nuclei with a global optical model. *PHYSICAL REVIEW C*, **76**(044601), October 2007.
- [24] W. MONDELAERS et P. SCHILLEBEECKX. GELINA, a neutron time-of-flight facility for high-resolution neutron data measurements. *Notiziario Neutroni e Luce di Sincrotrone*, **11**(2), p. 19–25, July 2006.
- [25] N.J. DRINDAK, J.A BURKE, G. LEINWEBER, J.A. HELM, J.G HOOLE, R.C. BLOCK, Y. DANON, R.E. SLOVACEK, B.E. MORETTI, C.J. WERNER, M.E. OVERBERG, S.A. KOLDA, M.J. TRBOVICH et D.P. BARRY. Neutron Capture and Transmission Measurements and Resonance Parameter Analysis of Niobium. *Nuclear Science and Engineering*, **154**, p. 294–301, 2006.

- [26] IAEA. EXFOR Basics. *IAEA-NDS*, **206**, June 2008.
- [27] C. BASTIAN, A. BORELLA, F. GUNSING, J. HEYSE, S. KOPECKY, G. NOGUÈRE, P. SIEGLER et P. SCHILBEECKX. AGS, A Computer Code for Uncertainty Propagation in Time-Of-Flight Cross Section Data. In *Conference Proceedings of the American Nuclear Society's Topical Meeting on Reactor Physics*, 2006.
- [28] C.A. UTTLEY, C.M. NEWSTEAD et K.M. DIMENT. Neutron strength function measurements in the medium and heavy nuclei. *Nuclear Data For Reactors, In : Conference Proceedings. PARIS*, **1**, p. 165–174, 1966.
- [29] R. BARJON. *Physique des réacteurs nucléaires*. Grenoble : Institut des sciences nucléaires, Presse Universitaire de Grenoble, 1993.
- [30] OECD-NEA. International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments. *NEA/NSC/DOC(95)03/I-IX*, September 2012.
- [31] J.B. BRIGGS, A.N. ELLIS, Y. RUGAMA, N. SOPPERA et M. BOSSANT. Identification of Integral Benchmarks for Nuclear Data Testing Using DICE (Database for the International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments). *Journal of the Korean Physical Society*, **59**(2), p. 1115–1118, August 2011.
- [32] A. D'ANGELO *et al.* Analysis of Sample and Fuel Pin Irradiation in PHENIX for Basic Nuclear Data Validation. *Nuclear Science and Engineering*, **105**, p. 244, 1990.
- [33] M. POTIN-GAUTIER et H. PAUCOT. ICP-MS: couplage plasma induit par haute fréquence – spectrométrie de masse. *Techniques de l'ingénieur Spectrométries, TIB390DUO*, **P2720**, June 2010.
- [34] C. VAGLIO-GAUDARD. *Validation de données nucléaires du fer pour le calcul neutronique des réacteurs nucléaires*. Thèse de doctorat, Université de Grenoble, March 2010.
- [35] J.M. RUGGIERI, J.F. LEBRAT, G. NOGUÈRE et J. TOMMASI. JEFF-3.1 Nuclear Data Validation for Fast Reactors Analysis. In *PHYTRA1: Proceeding of the International Conference on Physics and Technology of Reactors and Applications*, 2007.
- [36] B. RICHARD. *Mesures de perturbations sur le réacteur CALIBAN : interprétation en terme de qualification des données nucléaires*. Thèse de doctorat, Université Paris Sud, February 2013.
- [37] A. GRUEL. *Développement et validation de schémas de calcul dédiés à l'interprétation des mesures par oscillation pour l'amélioration des données nucléaires*. Thèse de doctorat, Université de Grenoble, October 2011.

- [38] M. BUSTRAAN. STEK, the Fast-Thermal Coupled Facility of R.C.N. at Petten. *RCN*, **122**, August 1970.
- [39] N. DOS SANTOS. *Optimisation de l'approche de représentativité et de transposition pour la conception neutronique de programmes expérimentaux dans les maquettes critiques*. Thèse de doctorat, Université de Grenoble, September 2013.
- [40] P. ARCHIER, C. DE SAINT JEAN, O. LITAIZE, G. NOGUÈRE, L. BERGE, E. PRIVAS et P. TAMAGNO. CONRAD Evaluation Code: Development Status and Perspectives. *Nuclear Data Sheets*, **118**, p. 488–490, April 2014.
- [41] C. DE SAINT JEAN, B. HABERT, O. LITAIZE, G. NOGUÈRE et C. SUTEAU. Status of CONRAD, a nuclear reaction analysis tool. *EDP Sciences - ND2007*, April 2007.
- [42] J. RAYNAL. Notes on ECIS94. *CEA Saclay report*, **N-2772**, 1994.
- [43] A.J. KONING, S. HILAIRE et M.C. DUIJVESTIJN. TALYS-1.0. *ND2007*, 2007.
- [44] L. BERGE. *Contribution à la modélisation des spectres de neutrons prompts de fission. Propagation d'incertitude à un calcul de fluence cuve*. Thèse de doctorat, Université de Grenoble, September 2015.
- [45] P. TAMAGNO. *MACRO-MICROSCOPIC APPROACH OF FISSION CROSS SECTION Improved Models for Fission Cross Section Evaluation*. Thèse de doctorat, Université de Bordeaux, October 2015.
- [46] M. HERMAN et A. TRKOV. ENDF-6 Formats Manual, Data formats and procedures for the Evaluated Nuclear Data File ENDF/B-VI and ENDF/B-VII. *Brookhaven National Laboratory*, 2009.
- [47] A.J. KONING *et al.* Status of the JEFF Nuclear Data Library. *Journal of the Korean Physical Society*, **59**(2), p. 1057–1062, 2011.
- [48] M.B. CHADWICK *et al.* ENDF/B-VII.1 Nuclear Data for Science and Technology : Cross Sections, Covariances, Fission Product Yields and Decay Data. *Nuclear Data Sheets*, **112**(12), p. 2887–2996, December 2011.
- [49] K. SHIBATA *et al.* JENDL-4.0 : A New Library for Nuclear Science and Engineering. *Journal of Nuclear Science and Technology*, **48**(1), p. 1–30, 2011.
- [50] V.N. KOSHCHEEV *et al.* Verification of Neutron Data for Main Reactor Materials from RUSFOND Library based on Integral Experiments. *EPJ Web of Conferences*, **42**, 2013.
- [51] Z.G. GE *et al.* The Updated Version of Chinese Evaluated Nuclear Data Library (CENDL-3.1). *Journal of Korean Physical Society*, **59**(2), p. 1052–1056, August 2011.

- [52] C. DE SAINT JEAN, P. ARCHIER, G. NOGUÈRE, O. LITAIZE, C. VAGLIO-GAUDARD, D. BERNAD et O. LERAY. Estimation of multi-group cross section covariances of  $^{238,235}\text{U}$ ,  $^{239}\text{Pu}$ ,  $^{241}\text{Am}$ ,  $^{56}\text{Fe}$  and  $^{23}\text{Na}$ . *Proceedings of the International Conference PHYSOR 2012*, April 2012.
- [53] M. HERMAN *et al.* COMMARA-2.0 Neutron Cross Section Covariance Library. *Brookhaven National Laboratory*, **94830-2011**, March 2011.
- [54] D.L. SMITH. Summary of the Workshop on Neutron Cross Section Covariances. *Nuclear Data Sheets*, **109**(12), p. 2915–2922, December 2008.
- [55] B. HABERT. *Estimation des Incertitudes dans l'Évaluation des Sections Efficaces de Réactions Nucléaires*. Thèse de doctorat, Institut Polytechnique de Grenoble, November 2009.
- [56] C. SHANNON. A Mathematical Theory of Communication. *Bell System Technical Journal*, **27**, p. 379–423 and 623–656, October 1948.
- [57] C.P. ROBERT et G. CASELLA. Monte Carlo statistical methods. *Springer*, 2nd edition, 2004.
- [58] A. BJÖRCK. Numerical Methods for Least Squares Problems. *Handbook of Numerical Analysis*, **51**, 1996.
- [59] W.H. PRESS, S.A. TEUKILSKY, W.T. VETTERLING et B.P. FLANNERY. *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press. Cambridge University Press, cambridge university press edition, January 1993.
- [60] D.L. SMITH. A Unified Monte Carlo approach to fast neutron cross section data evaluation. *AccApp'07 : Eighth International Topical Meeting on Nuclear Applications and Utilization of Accelerators*, p. 736–743, 2007.
- [61] M.D. MCKAY, R.J. BECKMAN et W.J. CONOVER. "A Comparison of Three Methods for Selecting Values of Input Variables in the Analysis of Output from a Computer Code". *Technometrics*, **21**(2), p. 239–245, may 1979.
- [62] S.F. MUGHABGHAB. *Atlas of Neutron Resonances: Resonance Parameters and Thermal Cross Sections. Z= 1-100*. Elsevier, 2006.
- [63] B. HABERT, C. DE SAINT JEAN, G. NOGUÈRE, L. LEAL et Y. RUGAMA. Retroactive Generation of Covariance Matrix of Nuclear Model Parameters Using Marginalization Techniques. *Nuclear Science and Engineering*, **166**, p. 276–287, 2010.

- [64] C. DE SAINT JEAN, G. NOGUÈRE, B. HABERT et B. IOOSS. A Monte Carlo Approach to Nuclear Model Parameter Uncertainties Propagation. *Nuclear Science and Engineering*, **161**, p. 363–370, 2009.
- [65] B. HABERT, C. DE SAINT JEAN, G. NOGUÈRE, L. LEAL et Y. RUGAMA. Retroactive Generation of Covariance Matrix of Nuclear Model Parameters Using Marginalization Techniques. *Nuclear Science and Engineering*, **166**(3), p. 276–287, November 2010.
- [66] C. DE SAINT JEAN, P. ARCHIER, E. PRIVAS, G. NOGUÈRE, O. LITAIZE et P. LECONTE. Evaluation of Cross Section Uncertainties Using Physical Constraints : Focus on Integral Experiments. *Nuclear Data Sheets*, **123**, p. 178–184, January 2015.
- [67] E. BAUGE et P. DOSSANTOS-UZARRALDE. "Evaluation of the Covariance Matrix of  $^{239}\text{Pu}$  Neutronic Cross Sections in the Continuum Using the Backward-forward Monte-Carlo Method". *Journal of the Korean Physical Society*, **59**(2), p. 1218–1223, aug 2011.
- [68] R. CAPOTE *et al.* RIPL – Reference Input Parameter Library for Calculation of Nuclear Reactions and Nuclear Data Evaluations. *Nuclear Data Sheets*, **110**(12), p. 3107–3214, December 2009.
- [69] D.K. OLSEN *et al.* International Evaluation of Neutron Cross Section Standards. *Nuclear Data Sheets*, **110**(12), p. 3215–3324, December 2009.
- [70] C. ROUKI *et al.* "High resolution measurement of neutron inelastic scattering cross-sections for  $^{23}\text{Na}$ ". *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, **672**, p. 82–93, jan 2012.
- [71] F. BREZZI et M. FORTIN. *Mixed and Hybrid Finite Element Methods*. Springer Series in Computational Mathematics 15, Springer-Verlag, 1991.
- [72] P. AVERY. Applied Fitting Theory IV : Formulas for Track Fitting. *CBX 92-45*, [www.phys.ufl.edu/avery/fitting.html](http://www.phys.ufl.edu/avery/fitting.html), April 1999.
- [73] M. CUI. A sufficient condition for the convergence of the inexact Uzawa algorithm for saddle point problems. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, **139**, p. 189–196, 2002.
- [74] WORKING PARTY ON INTERNATIONAL NUCLEAR DATA EVALUATION CO-OPERATION OF THE NEA NUCLEAR SCIENCE COMMITTEE. *International Evaluation Co-operation*. OECD, 2013.
- [75] E. FORT *et al.* "Improved performances of the fast reactor calculational system ERANOS-ERALIB1 due to improved a priori nuclear data and consideration of additional specific integral data". *Annals of Nuclear Energy*, **30**, p. 1879–1898, may 2003.

- [76] G. RIMPAULT *et al.* The ERANOS code and data system for fast reactor neutronic analyses. *Proceedings of the International Conference, PHYSOR 2002, Seoul, Korea*, 2002.
- [77] J.M. RUGGIERI *et al.* ERANOS 2.1 : the international code system for GEN-IV fast reactor analysis. *Proceedings of the International Congress on Advances in Nuclear Power Plants, ICAPP06, Reno, USA*, 2006.
- [78] J.C. SUBLET, C. DEAN et D. PLISSON-RIEUNIER. ECCOLIB-JEFF-3.1 LIBRARIES. *Rapport CEA/DEN, R-6100*, 2006.
- [79] R. SANCHEZ *et al.* A user-oriented, portable, modular code for multigroup transport assembly calculations. *Nuclear Science and Engineering*, **100**(3), p. 352–362, November 1988.
- [80] J.P. BOTH, H. DERRIENNIC, B. MORILLON et J.C. NIMA. A survey of TRIPOLI-4. *In Proceedings of 8th Conference on Radiation Shielding, Arlington, USA*, p. 373–380, April 1994.
- [81] Y. NAUCHI et T. KAMEYAMA. Development of Calculation Technique for Iterated Fission Probability and Reactor Kinetic Parameters Using Continuous-Energy Monte Carlo Method. *Journal of Nuclear Science and Technology*, **47**(11), p. 977–990, December 2010.
- [82] G. TRUCHET. *Estimateurs Neutroniques Pondérés par le Flux Adjoint en Monte Carlo*. Thèse de doctorat, Université de Grenoble, October 2015.
- [83] R. LE TELLIER, D. FOURNIER et C. SUTEAU. Reactivity Perturbation Formulation for a Discontinuous Galerkin-Based Transport Solver and Its Use with Adaptive Mesh Refinement. *Nuclear Science and Engineering*, **167**(3), p. 209–220, March 2011.
- [84] R.E. MACFARLANE, D.W. MUIR, R.M. BOICOURT et A.C. KAHLER. The NJOY Nuclear Data Processing System, Version 2012. *Los Alamos National Laboratory*, December 2012.
- [85] G. PANINI et P. PEERANI. Production of an ECCO library. *Winfrith Technology Centre, CFSM/P(88)71*, 1988.
- [86] C.R. EATON et C.J. DEAN. Improvements to the GECCO Code. *Winfrith Technology Centre, CFSM/P(90)107*, 1990.
- [87] J. TOMMASI, E. DUPONT et P. MARIMBEAU. Analysis of Sample Irradiation Experiments in PHENIX for JEFF-3.0 Nuclear Data Validation. *Nuclear Science and Engineering*, **154**(2), p. 119–133, October 2006.



- [88] J. TOMMASI et G. NOGUÈRE. Analysis of the PROFIL and PROFIL-2 Sample Irradiation Experiments in PHENIX for JEFF-3.1 Nuclear Data Validation. *Nuclear Science and Engineering*, **160**(2), p. 232–241, October 2008.
- [89] E. PRIVAS, P. ARCHIER, C. DE SAINT JEAN, G. NOGUÈRE et J. TOMMASI. The use of nuclear data as nuisance parameters in the Integral Data Assimilation of the PROFIL experiments. *Nuclear Science and Engineering*, à paraitre, 2016.
- [90] A.D. CARLSON *et al.* International Evaluation of Neutron Cross Section Standards. *Nuclear Data Sheets*, **110**, p. 3215–3224, 2009.
- [91] E. PRIVAS *et al.* Generation of  $^{238}\text{U}$  Covariance Matrices by Using the Integral Data Assimilation Technique of the CONRAD Code. *Proceedings of the International Symposium on Reactor Dosimetry, ISRD15, Aix-en-Provence, France*, 2014.
- [92] R. CAPOTE *et al.* Evaluation of neutron induced reactions on  $^{238}\text{U}$  nucleus. *Proceeding of the NEMEA-77 workshop, Geel, Belgium*, 2013.
- [93] R. CAPOTE *et al.* Elastic and inelastic scattering of neutrons on  $^{238}\text{U}$  nucleus. *EPJ Web of Conferences*, **69**, p. art. 00008, 2014.
- [94] P. LECONTE *et al.* Feedback on  $^{239}\text{Pu}$  and  $^{240}\text{Pu}$  nuclear data and associated covariances through the CERES integral experiments. *Journal of Nuclear Science and Technology*, **52**, p. 1044–1052, 2015.
- [95] E. RUTHERFORD. Uranium Radiation and the Electrical conduction Produced by it. *Philosophical Magazine*, **47**, p. 109–163, January 1899.
- [96] E. RUTHERFORD. The Scattering of  $\alpha$  and  $\beta$  Particles by Matter and the Structure of the Atom. *Philosophical Magazine*, **21**, p. 669–688, May 1911.
- [97] H. GEIGER et E. MARSDEN. "On a Diffuse Reflection of the  $\alpha$ -Particles". *Proceedings of the Royal Society of London A*, **82**, p. 495–500, 1909.
- [98] E. RUTHERFORD. Bakerian Lecture. Nuclear Constitution of Atoms. *Proceedings of the Royal Society of London A*, **97**(686), p. 374–400, July 1920.
- [99] J. CHADWICK. Letters to the Editor: Possible Existence of a Neutron. *Nature*, **129**, February 1932.
- [100] L. MEITNER et O. R. FRISCH. Desintegration of Uranium by Neutrons; A New Type of Nuclear Reaction. *Nature*, **143**, p. 239–240, February 1939.
- [101] H. VON HALBAN, F. JOLIOT-CURIE et L. KOWARSKI. Liberation of Neutrons in the Nuclear Explosion of Uranium. *Nature*, **143**, p. 470–471, March 1939.

- 
- [102] C.J. GEYER. Practical Markov Chain Monte Carlo. *Statistical Science*, **7**(4), p. 473–511, 1992.
- [103] W.K. HASTINGS. Monte Carlo Sampling Methods Using Markov Chains and Their Applications. *Biometrika*, **57**(1), p. 97–109, April 1970.
- [104] N. METROPOLIS, A.W. ROSENBLUTH, M.N. ROSENBLUTH, A.H. TELLER et E. TELLER. Equations of state calculations by fast computing machines. *Journal of Nuclear Science and Technology*, **21**, p. 1087–1092, 1953.