Neutronique

Mireille Coste-Delclaux, Cheikh Diop, Anne Nicolas, Bernard Bonin

▶ **To cite this version:**

Bernard Bonin (Dir.). Neutronique. CEA Saclay; Groupe Moniteur, 2013, E-den, Une monographie de la Direction de l'énergie nucléaire, CEA, 9782281113716. cea-01152822

HAL Id: cea-01152822
https://cea.hal.science/cea-01152822

Submitted on 18 May 2015

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.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:23 Page 1

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:23 Page 2

Monographies DEN

Une monographie de la Direction de l'énergie nucléaire
Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives,
91191 Gif-sur-Yvette Cedex
Tél. : 01 64 50 10 00

Comité scientifique
Georges Berthoud, Gérard Ducros, Damien Féron, Yannick Guérin, Christian Latgé, Yves Limoge, Gérard Santarini, Jean-Marie Seiler, Etienne Vernaz, Directeurs de Recherche.

Responsable de thème : Mireille Coste-Delclaux, Cheikh M'Backé Diop, Anne Nicolas.

Ont participé à la rédaction de cette monographie :
Catherine Andrieux, Pascal Archier, Anne-Marie Baudron, David Bernard, Patrick Blaise, Patrick Blanc-Tranchant, Bernard Bonin, Olivier Bouland, Stéphane Bourganel, Christophe Calvin, Maurice Chiron, Mireille Coste-Delclaux, Frédéric Damian, Cheikh M'Backé Diop, Éric Dumonteil, Clément Fausser, Philippe Fougeras, Franck Gabriel, Emmanuel Gagnier, Danièle Gallo, Jean-Pascal Hudelot, François-Xavier Hugot, Tan Dat Huynh, Cédric Jouanne, Jean-Jacques Lautard, Frédéric Laye, Yi-Kang Lee, Richard Lenain, Sylvie Leray, Olivier Litaize, Christine Magnaud, Fausto Malvagi, Dominique Mijuin, Claude Mounier, Sylvie Naury, Anne Nicolas, Gilles Noguère, Jean-Marc Palau, Jean-Charles le Pallec, Yannick Pénéliau, Odile Petit, Christine Poinot-Salanon, Xavier Raepsaet, Paul Reuss, Edwige Richebois, Bénédicte Roque, Éric Royer, Cyrille de Saint-Jean, Alain Santamarina, Olivier Sérot, Michel Soldevila, Jean Tommasi, Jean-Christophe Trama, Aimé Tsilanizara.

Directeur de la Publication : Christophe Béhar.

Comité éditorial : Bernard Bonin (Rédacteur en Chef), Olivier Provitina, Michaël Lecomte, Alain Forestier.

Administrateur : Alexandra Bender.

Éditeur : Jean-François Parisot.
Maquette : Pierre Finot.

Correspondance : la correspondance peut être adressée à l'Éditeur ou à CEA / DEN Direction scientifique, CEA Saclay 91191 Gif-sur-Yvette Cedex.
Tél. : 01 69 08 16 75

© CEA Saclay et Groupe Moniteur (Éditions du Moniteur), Paris, 2013.

ISBN 978-2-281-11371-6
ISSN en cours

La reproduction des informations contenues dans ce document est libre de tous droits, sous réserve de l'accord de la rédaction et de la mention d'origine.

En couverture : Modélisation de la géométrie d'un cœur de réacteur nucléaire à eau sous pression par le code de transport APOLLO3®.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:23 Page 3

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives

e-den

Une monographie de la Direction
de l'énergie nucléaire

La neutronique

EDITIONS LE MONITEUR

DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE cea

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:23 Page 4

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:23 Page 5

Préface

Après un départ fulgurant au cours des années 50, où elle représentait pour beaucoup l'espoir d'une source d'énergie durable et à coût compétitif, l'énergie nucléaire a connu, dans les années 80-90, un rejet de la part d'une majorité de l'opinion publique dans plusieurs pays occidentaux, rejet qui a conduit à un brutal coup d'arrêt de son développement.

En effet, si les chocs pétroliers des années 1973 et 1979 ont marqué le début de programmes d'équipements massifs dans quelques pays lourdement pénalisés par les importations de pétrole – comme la France et le Japon –, ils ont paradoxalement été suivis d'une brusque interruption des investissements nucléaires aux États-Unis d'abord, puis en Europe occidentale. Pourtant, les tensions répétées sur le marché du pétrole et le début des inquiétudes sur le caractère épuisable des ressources naturelles et les effets prévisibles sur le climat et l'environnement liés à leur combustion massive auraient dû, au contraire, les renforcer.

Les raisons de cette pause sont certainement multiples et s'expliquent, en partie, par les accidents de Three Mile Island, en 1979, et de Tchernobyl, en 1986, qui eurent un fort impact sur les opinions publiques. Le récent accident de Fukushima ravive légitimement ces mêmes questionnements, même si le contexte est fort différent. Moins que les interrogations sur la capacité technique des réacteurs à résister aux événements les plus improbables, il pose plus que jamais la question de la préparation des exploitants et de la chaîne décisionnelle en charge de la gestion d'un dysfonctionnement grave des dispositifs de sauvegarde, en cas de défaillance d'un équipement.

En France, alors que l'implantation des centrales nucléaires n'avait, à une exception près, pas suscité de véritable débat dans la population, une attitude de refus s'est fait jour à la fin des années 80 sur la question des déchets nucléaires. Face aux difficultés croissantes rencontrées par l'Agence nationale pour la gestion des déchets radioactifs (ANDRA) à la recherche d'un site pour l'implantation d'un laboratoire souterrain, le gouvernement de l'époque décidait de suspendre les travaux, établissait un moratoire d'un an et saisissait du problème l'Office parlementaire d'évaluation des choix scientifiques et technologiques (OPECST).

En reprenant l'essentiel des recommandations de l'Office, notamment la définition d'un programme de recherche diversifié, mais aussi les prémices d'un dialogue démocratique avec les populations concernées, la loi du 30 décembre 1991 sur la gestion des déchets nucléaires a largement contribué à apaiser le débat. Après quinze ans de recherches sur les différentes solutions de gestion à long terme des déchets radioactifs, la loi du 28 juin 2006 a permis d'établir le cadre d'ensemble de cette gestion désormais admise comme une nécessité.

Ce début de siècle est, en outre, marqué par une prise de conscience collective que la réponse aux besoins en énergie de notre génération ne peut pas se concevoir sans tenir compte du respect de l'environnement et sans préserver le droit des générations futures à satisfaire ces mêmes besoins. C'est le concept du développement durable auquel notre société sera inévitablement confrontée.

L'origine anthropique du réchauffement de la planète, sous l'effet de l'accroissement considérable des rejets de gaz à effet de serre, n'est plus aujourd'hui contestée. Seules l'ampleur

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:23 Page 6

et les conséquences de ce réchauffement font encore l'objet de débats. Les pays industrialisés, qui sont en grande partie à l'origine de la situation actuelle, ont une responsabilité particulière qui doit les inciter à diminuer de manière volontariste les émissions de ces gaz. L'énergie nucléaire qui échappe par nature à ce type d'émissions tout en étant capable de produire une énergie relativement abondante, fiable et économiquement compétitive, doit donc tout naturellement s'imposer.

Même si la situation mondiale reste encore contrastée et plus particulièrement en Europe, plusieurs pays (Chine, Corée du Sud, Finlande, Inde, Afrique du Sud, Pologne, Émirats arabes unis…) ont d'ores et déjà décidé d'investir fortement dans le développement de cette énergie, et maintiennent cette option après l'accident de Fukushima. D'autres sont sur le point de franchir le pas, notamment la Grande-Bretagne et les États-Unis qui paraissent déterminés à lancer avant la fin de la décennie des projets de construction de nouvelles centrales nucléaires, un processus interrompu depuis trente ans.

En France, suite au débat national sur les énergies qui s'est tenu au premier semestre 2003, la loi d'orientation sur l'énergie adoptée en juin 2005 a consacré la décision de construire un réacteur démonstrateur EPR pour préparer la relève des centrales actuellement en service.

De nombreux signes donnent donc à penser qu'une relance de l'énergie nucléaire est en train de se produire à l'échelle mondiale. Néanmoins, l'avenir du nucléaire dans notre pays, comme dans d'autres, dépendra beaucoup de sa capacité à traiter correctement les deux préoccupations suivantes :
- La première touche à son acceptabilité sociale ; il importe que l'utilisation du nucléaire se fasse dans des conditions de sûreté et de sécurité optimales, en produisant un minimum de déchets ultimes et que ceux-ci soient parfaitement maîtrisés au plan de leur impact éventuel sur la santé et sur l'environnement. Le choc de l'accident de Fukushima ne fait que renforcer cette exigence de la sûreté, en tant que priorité absolue ;
- la seconde concerne la disponibilité de ses ressources ; il est important de garantir l'approvisionnement en combustible sur le long terme, en préparant le recours à des filières plus économes de la matière fissile naturelle et surtout plus indépendantes des fluctuations de ses marchés.

Ces sujets sont au cœur des missions de la Direction de l'énergie nucléaire du CEA. Celle-ci est, en effet, un acteur majeur de la recherche visant à soutenir l'industrie nucléaire dans l'amélioration de la sûreté et de la compétitivité des réacteurs, à fournir aux Pouvoirs publics les éléments de choix sur la gestion à long terme des déchets nucléaires et, enfin, à développer les systèmes nucléaires du futur. Ces systèmes, essentiellement les réacteurs à neutrons rapides, sont porteurs d'améliorations très prometteuses sur le plan de la gestion des déchets et de l'utilisation des matières premières.

Étant un fervent partisan d'une diffusion de la connaissance scientifique et technique la plus large possible, il me paraît de première importance que ces travaux de recherche, qui font appel à une grande diversité de disciplines scientifiques et qui se situent souvent au meilleur niveau mondial, soient présentés et expliqués à tous ceux qui souhaitent forger leur propre opinion sur l'énergie nucléaire. C'est pourquoi, je salue avec une sincère satisfaction la publication de ces monographies DEN dont la consultation attentive sera très certainement une source incomparable d'informations pour leurs lecteurs que j'espère nombreux.

Je remercie tous ceux, chercheurs et ingénieurs, qui en contribuant à la réalisation de ce dossier, ont eu à cœur de faire partager leur expérience et leur savoir.

Bernard BIGOT,
Administrateur général du CEA

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:23 Page 7

Introduction

Qu'est-ce que la neutronique ?

Le neutron, que l'on soupçonnait être, avec le proton, l'un des constituants du noyau atomique, fut mis en évidence par le chercheur britannique James Chadwick, en 1932. En bombardant une cible de béryllium par les particules α d'un émetteur radioactif, il observa le rayonnement des neutrons éjectés par la réaction : ${}^{4}_{2}He + {}^{9}_{4}Be \Rightarrow {}^{1}_{0}n + {}^{12}_{6}C$.

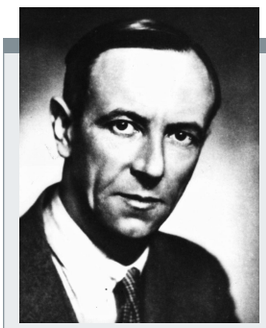
Dans les matériaux qui s'y prêtent, ces particules sont susceptibles de **diffuser*** et de se ralentir jusqu'à ce qu'elles soient absorbées. En effet, étant, comme leur nom l'indique, électriquement neutres, les neutrons n'interagissent qu'avec les noyaux des atomes, dix-mille à cent mille fois plus petits que les atomes eux-mêmes, et voyagent ainsi quasiment dans du vide. Leurs parcours sont de l'ordre du centimètre – soit cent millions d'atomes traversés – et peuvent même s'étendre, à vol d'oiseau, sur des décimètres dans les matériaux qui les diffusent bien, tels l'eau, l'eau lourde ou le graphite. La neutronique, née avec l'expérience de Chadwick, peut ainsi être définie comme **l'étude du cheminement des neutrons dans la matière.**

En 1938, en Allemagne, la fission induite par neutron est découverte par **Otto Hahn** (à gauche, 1879-1968), **Fritz Strassmann** et **Lise Meitner** (à droite, 1878-1968).

Quelques années plus tard, en 1938, en Allemagne, la **fission*** induite par neutron fut découverte par Otto Hahn, Fritz Strassmann et Lise Meitner ; en 1939, en France, Frédéric Joliot-Curie mit en évidence l'émission de deux ou trois neutrons secondaires, lors de la fission.

Les physiciens comprirent vite que cela permettait d'envisager une réaction en chaîne : neutrons => fissions => neutrons => fissions => etc. (fig. 1). Cette réaction doit dégager une quantité considérable d'énergie (200 MeV par fission, soit typiquement un million de fois plus qu'une réaction chimique si elle peut être auto-entretenue). Il fallut alors compléter la définition précédente : **… et l'étude des conditions d'une réaction en chaîne**, en particulier du facteur de multiplication, rapport entre l'effectif des neutrons (ou des fissions) à une génération donnée et l'effectif à la génération précédente.

Dans un réacteur nucléaire, la réaction en chaîne est contrôlée grâce à des dispositifs appropriés (barres de contrôle, poisons consommables…) de façon à maintenir constante la population de neutrons. Dans ce cas, le facteur de multiplication des neutrons est égal à 1 et le réacteur est dit « **critique*** ». Si ce facteur est plus grand que 1, la population de neutrons croît exponentiellement en fonction du temps et le réacteur est dit « **sur-critique*** ». Enfin, s'il est inférieur à 1 la population des neutrons s'éteint : le réacteur est dit « **sous-critique*** ».



Sir **James Chadwick** (1891-1974) physicien britannique, découvreur du neutron par l'étude de la réaction, toujours utilisée aujourd'hui pour des sources de neutrons : ${}^{4}He + {}^{9}Be \Rightarrow {}^{1}n + {}^{12}C$

« Poursuivant l'étude entreprise par Rutherford du bombardement des éléments légers par des particules α, le physicien allemand Bothe découvrit (1931) que le béryllium, ainsi bombardé, émet un rayonnement beaucoup plus pénétrant que le rayonnement γ. Frédéric Joliot et Irène Joliot-Curie découvrirent (1932) que ce rayonnement de Bothe traversant des structures hydrogénées, telle la paraffine, projette vers l'avant des protons de grande énergie. Enfin, le physicien anglais Chadwick, reprenant ces expériences avec une chambre de Wilson remplie d'hydrogène, d'hélium ou d'azote, montra que les noyaux des atomes de ces divers éléments sont projetés par le rayonnement de Bothe comme si ce rayonnement était constitué par des projectiles neutres (ne laissant aucune trace ionisée dans les gaz traversés) de diamètre comparable à ceux des noyaux et ayant une masse voisine de celle du proton. Il nomma cette nouvelle particule nucléaire neutron (symbole n) et admit qu'elle était arrachée au noyau de l'atome de béryllium par la réaction ${}^{4}He + {}^{9}Be \Rightarrow {}^{12}C + n$. »

Extrait des compléments (1970) de **Francis Perrin** à l'ouvrage de son père **Jean Perrin**, *Les Atomes* (1913).

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:23 Page 8

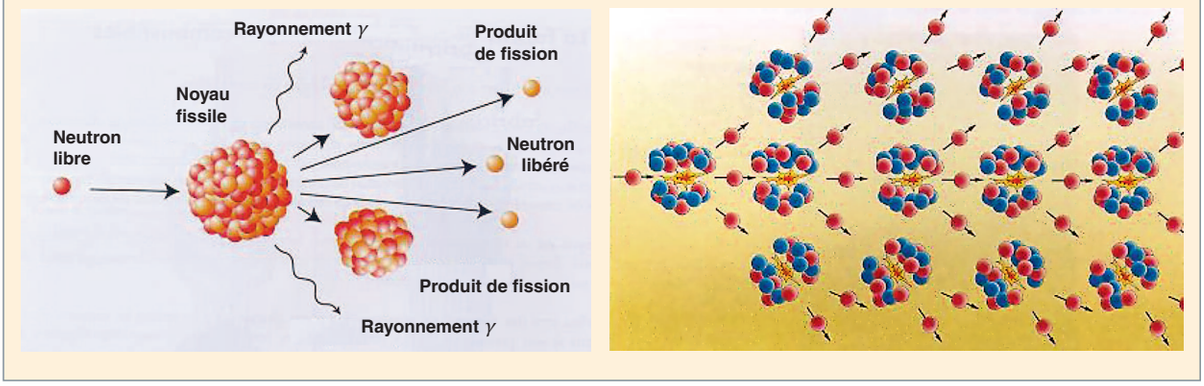


Fig. 1. Fission nucléaire et réaction en chaîne.

Quelques caractéristiques du processus de fission

Le bilan énergétique de la fission

La réaction de fission libère une énergie correspondant à la différence d'énergie entre les états initiaux et finals, soit environ 200 MeV, correspondant principalement à la différence d'énergie de liaison du noyau lourd initial et des produits de fission. Cette énergie est libérée essentiellement sous la forme d'énergie cinétique des fragments de fission (tableau 1). Ceux-ci étant excités et radioactifs libèrent à leur tour de l'énergie sous forme de rayonnements *bêta* et *gamma*, ainsi que des neutrinos, qui emportent eux aussi une petite partie de l'énergie de la réaction. Les produits de fission ayant un parcours très faible dans la matière, on peut considérer que leur énergie cinétique est dissipée localement sous forme de chaleur dans le combustible. Il n'en va pas de même pour les contributions neutron, *bêta*, *gamma* et neutrino, qui peuvent être à la fois différées dans le temps (cas de la désintégration radioactive des produits de fission donnant lieu à la une dissipation de puissance dite « résiduelle ») et déposées loin du lieu de la fission (radioprotection).

Tableau 1

Bilan énergétique en MeV de la fission induite par des neutrons sur différents noyaux lourds

D'après M.F. James, " Energy Released in Fission", *Journal of Nuclear Energy*, vol. 23, p. 529, 1969.

	U 235	U 238	Pu 239	Pu 241
Fragments de fission	166,2	166,9	172,8	172,2
Neutrons	4,8	5,5	5,9	5,9
***Gammas* prompts**	8,0	7,5	7,7	7,6
***Gammas* des produits de fission**	7,2	8,4	6,1	7,4
***Bêtas* des produits de fission**	7,0	8,9	6,1	7,4
Neutrinos/antineutrinos	9,6	11,9	8,6	10,2
Énergie totale libérée par fission	202,7	205,9	207,2	210,6

Deux familles de neutrons issus de la fission : neutrons prompts et neutrons retardés

La fission d'un noyau lourd peut se faire de façon très variée et l'on recense plus d'un millier de fragments de fission. Certains d'entre eux, appelés « précurseurs », sont situés en dehors de la vallée de stabilité des noyaux et subissent, par conséquent, une (ou plusieurs) décroissance(s) radioactive(s) *bêta*. Dans quelques cas, l'énergie de séparation d'un neutron du noyau fils est relativement faible, et l'énergie d'excitation de ce noyau est supérieure à l'énergie de séparation. Le noyau a alors la possibilité d'émettre un neutron. Les neutrons provenant de cette seconde émission sont « en retard » par rapport aux neutrons de fission : l'intervalle de temps entre fission et émission de neutrons retardés est régi par la loi de décroissance radioactive *bêta* des noyaux précurseurs. L'ordre de grandeur du décalage va de la fraction de seconde à quelques dizaines de secondes.

Les neutrons retardés sont peu nombreux, par rapport aux **neutrons prompts** émis instantanément lors des fissions : dans le cas de l'uranium 235, seuls 0,66 % (660 **pcm***) de l'ensemble des neutrons naissant par fission apparaissent de manière retardée. Le décalage par rapport à la fission, pour ces neutrons est important, en pratique de l'ordre de 11 s environ. Cette faible proportion suffit pourtant à modifier le comportement cinétique de la population globale, en augmentant notablement le temps moyen entre deux générations successives de neutrons. C'est grâce à ce phénomène physique que la réaction en chaîne est contrôlée dans les réacteurs nucléaires.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:23 Page 9

La première réaction en chaîne auto-entretenue et contrôlée fut réalisée, dans le cadre du projet Manhattan, par Enrico Fermi dès 1942 dans la première pile de Chicago (CP1). Si, dans cette expérience, la puissance de la pile ne dépassa pas quelques watts, très vite des réacteurs délivrant une grande puissance – d'abord destinés à produire du plutonium pour les premières bombes atomiques, ensuite pour la production d'électricité – furent construits ; il fallut ajouter une troisième composante à la définition de la neutronique : **… et l'étude des modifications de la température et de la composition de la matière dues aux réactions nucléaires**.

La neutronique : du phénomène microscopique à la grandeur macroscopique

À la base, la neutronique, branche de la physique nucléaire, est une science du microscopique : l'étude des interactions entre les neutrons et les noyaux atomiques dont les principales sont décrites dans le tableau 2 .
L'occurrence de ces réactions nucléaires induites par les neutrons est caractérisée par les sections efficaces microscopiques (voir encadré).

Les échelles en espace et en temps de la neutronique

Son double visage – microscopique et macroscopique – et la variété de ses objectifs font que la neutronique met en jeu des échelles d'espace et de temps extrêmement larges, comme indiqué dans le tableau ci-dessous.

Échelles en espace de la neutronique	
10^{-15} m	Distance d'interaction neutron-noyau.
10^{-3} à 10^{-2} m	**Libre parcours*** des **neutrons*** (avant interaction).
10^{-1} à 1 m	Parcours à vol d'oiseau des neutrons (avant absorption).
1 mètre à plusieurs dizaines de mètres	Dimension d'un **réacteur nucléaire***.
Échelle en temps de la neutronique	
0 à 10^{-14} s	Interaction neutron-noyau.
10^{-9} s	Parcours élémentaire d'un **neutron rapide***.
10^{-7} s	Explosion nucléaire dans une arme.
10^{-5} s	Parcours élémentaire d'un **neutron thermique***.
10^{-6} à 10^{-3} s	Temps de vie des neutrons dans les réacteurs.
10^{-2} s	Transitoire dans un **accident de criticité***.
10 s	Retard moyen à l'émission des **neutrons retardés***.
10^{2} s	Transitoire dans une mise à l'équilibre thermique.
1 jour	Transitoire dû au **xénon*** 135.
1 à 4 ans	Irradiation d'un **combustible nucléaire***.
50 ans	Ordre de grandeur de la durée de vie d'un réacteur nucléaire.
300 ans	Extinction radioactive des **produits de fission***.
10^{3} à 10^{6} ans	Extinction radioactive des **actinides*** artificiels.
2.10^{9} ans	Âge du réacteur naturel d'**Oklo***.

Les deux grandeurs fondamentales que la neutronique cherche à déterminer dans un réacteur sont la population neutronique et la composition isotopique. Ces grandeurs doivent être connues de façon détaillée à tout instant et en tout point du réacteur, que ce soit en fonctionnement normal ou accidentel.

Les variables dont dépendent ces grandeurs sont décrites dans le tableau 3.

La neutronique est une discipline qui présente la particularité d'utiliser des données microscopiques issues du monde quantique (sections efficaces microscopiques…) pour calculer des grandeurs macroscopiques (puissance volumique d'un réacteur…). C'est donc aussi, et surtout, une science du macroscopique : selon une modélisation très similaire à celle de la mécanique des fluides, la population des neutrons est caractérisée par sa densité en tout point – nombre de particules par unité de volume – et est assimilée à un fluide continu évoluant dans le système.

Les objectifs et enjeux de la neutronique

L'objectif principal de la neutronique est la conception et le suivi des réacteurs, en particulier les réacteurs électronucléaires. Mais d'autres problématiques de la science ou de l'industrie font aussi appel aux neutroniciens :

- L'évaluation du risque de criticité dans les installations manipulant des matières fissiles, notamment les usines du cycle du combustible des réacteurs ;
- l'étude des couvertures des (futurs) réacteurs à fusion thermonucléaire ;
- les études de protection contre les rayonnements (de neutrons, et de photons *gamma* posant des problèmes très similaires) ;
- l'évaluation de la **fluence*** reçue par la cuve des réacteurs ;
- l'étude de l'activation des structures par les neutrons en vue du démantèlement d'une installation nucléaire, par exemple ;
- l'incinération de déchets nucléaires ;
- l'utilisation des neutrons en imagerie, pour l'examen des structures moléculaires ou cristallines, et en médecine ;
- l'utilisation des neutrons en analyse par activation…

Dans son acception élargie, la neutronique se décline donc selon les domaines suivants :

- La physique du cœur d'un réacteur en fonctionnement normal ou accidentel ;
- la criticité de la matière fissile traitée dans les opérations intervenant dans le cycle du combustible ;
- la radioprotection des installations nucléaires ;
- l'instrumentation nucléaire en cœur ou hors cœur.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:23 Page 10

Tableau 2

Principaux processus nucléaires se déroulant dans un réacteur

Les processus photo-nucléaires [(γ, n), (γ,f), …] ne sont pas décrits ici.

${}^{A}_{Z}X$ désigne un noyau cible de numéro atomique Z et de nombre de masse A.

Interaction sans formation d'un noyau composé			**Notation usuelle du type de la réaction**
Diffusion* potentielle (élastique)	$n + {}^{A}_{Z}X \rightarrow n + {}^{A}_{Z}X$	Toujours possible.	(n, n)
Interactions passant par la formation d'un noyau composé			
Diffusion résonnante élastique	$n + {}^{A}_{Z}X \rightarrow n + {}^{A}_{Z}X$	Toujours possible.	(n, n)
Diffusion résonnante inélastique	$n + {}^{A}_{Z}X \rightarrow n' + {}^{A}_{Z}X^{*}$ ${}^{A}_{Z}X^{*} \rightarrow \gamma + {}^{A}_{Z}X$	Seuil : premier niveau d'énergie de ${}^{A}_{Z}X$.	(n, n')
Diffusion (n, 2n)	$n + {}^{A}_{Z}X \rightarrow n_1 + n_2 + {}^{A-1}_{Z}X$	Seuil : énergie de séparation d'un neutron de ${}^{A}_{Z}X$.	(n, 2n)
Capture* radiative	$n + {}^{A}_{Z}X \rightarrow \gamma + {}^{A+1}_{Z}X$	Toujours possible.	(n, γ)
Capture donnant une particule chargée légère	$n + {}^{A}_{Z}X \rightarrow p + {}^{A}_{Z-1}Y$ $n + {}^{A}_{Z}X \rightarrow \alpha + {}^{A-3}_{Z-2}Y$ etc.	Généralement à seuil ; parfois sans seuil.	(n, p) (n,α)
Fission*	$n + {}^{A}_{Z}X \rightarrow PF_1 + PF_2 + \nu n$ (ν compris entre 0 et 7, généralement 2 ou 3)	Sans seuil pour les noyaux lourds impairs en neutrons ; sinon seuil (hormis l'« effet tunnel »).	(n, f)

Principaux phénomènes radioactifs se déroulant dans un combustible nucléaire			**Notation usuelle du type de phénomène**
Désintégration alpha	${}^{A}_{Z}X \rightarrow {}^{A-4}_{Z-2}Y + {}^{4}_{2}He$	${}^{4}_{2}He$ est un noyau d'hélium 4 aussi appelé « **particule alpha*** »	(α)
Désintégration bêta moins	${}^{A}_{Z}X \rightarrow {}^{A}_{Z+1}Y + e^{-} + \bar{\nu}$	e^{-} est un électron aussi appelé particule « **bêta moins*** » $\bar{\nu}$ est un **antineutrino***	(β^{-})
Désintégration bêta plus	${}^{A}_{Z}X \rightarrow {}^{A}_{Z-1}Y + e^{+} + \nu$	e^{+} est un positon aussi appelé particule « **bêta plus*** » ν est un **neutrino***	(β^{+})
Capture électronique	$e^{-}_{atomique} + {}^{A}_{Z}X \rightarrow {}^{A}_{Z-1}Y$	$e^{-}_{atomique}$ est un électron appartenant au cortège électronique de l'atome ${}^{A}_{Z}X$.	(C.E.)
Transition isomérique	${}^{A}_{Z}X^{*} \rightarrow {}^{A}_{Z}X + \gamma$	${}^{A}_{Z}X^{*}$ est un isomère se désexcitant en émettant un **rayonnement *gamma**** noté « γ ».	(T.I.)
Émission de neutrons retardés	${}^{A}_{Z}X^{*} \rightarrow {}^{A-1}_{Z}X + n$	${}^{A}_{Z}X^{*}$ est un produit de fission appelé « précurseur de neutrons retardés »	
Fission spontanée	${}^{A}_{Z}X \rightarrow PF_1 + PF_2 + \nu n$	${}^{A}_{Z}X$ est un **noyau lourd*** (ν : nombre de neutrons émis)	(fs)

Les équations de la neutronique

Les équations de la neutronique décrivent le transport des neutrons dans la matière et les modifications de la composition de cette dernière suite aux processus nucléaires induits. Des simplifications peuvent être faites.

Les interactions neutrons-électrons sont totalement négligeables, car elles ne peuvent se faire que par interaction faible.

Les interactions neutrons-neutrons sont, elles aussi, négligeables ; cela est une question de densité : il y a dans un réacteur de puissance environ 1 neutron pour 10^{14} noyaux atomiques. À l'état libre, les neutrons disparaissent par radioactivité, mais cela est aussi totalement négligeable dans les réacteurs, car la période radioactive (~1 000 s) est très longue devant le temps de cheminement des neutrons (moins d'une milliseconde).

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:23 Page 11

Une donnée de base importante de la neutronique : les sections efficaces microscopiques

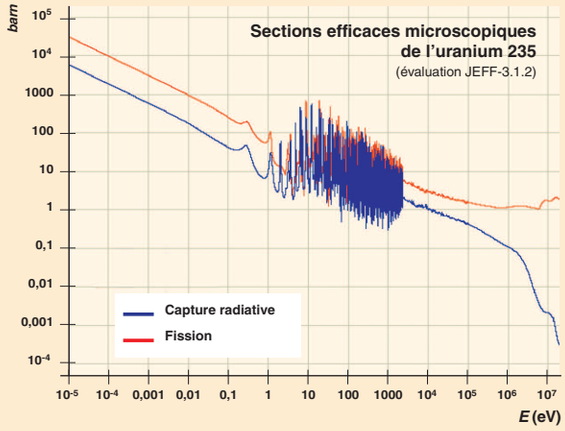


Fig. 2. Sections efficaces microscopiques de capture et de fission de l'uranium 235, en fonction de l'énergie du neutron incident.

La section efficace microscopique σ d'un noyau caractérise la probabilité qu'a un neutron d'interagir avec celui-ci : on peut imaginer une section efficace comme la section droite d'un noyau vue par un neutron qui se présente ; mais cette image est trop simple, car elle n'explique pas les variations souvent très nombreuses et très importantes de sections efficaces avec la vitesse du neutron incident – les résonances –, dues aux niveaux d'énergie des noyaux et au caractère quantique de l'interaction.

La section efficace microscopique s'exprime en barns (1 barn = 10^{-24} cm^2) et permet de relier le taux de réaction R au flux scalaire de neutrons ϕ et au nombre de noyaux cibles par unité de volume N :

$R = N\sigma\phi$

Les neutrons présents dans le réacteur n'induisent pas seulement des fissions (sinon la réaction en chaîne ne serait pas équilibrée), mais toute une série de **réactions nucléaires**, plus ou moins probables.

On distingue autant de sections efficaces microscopiques que de réactions nucléaires possibles entre le neutron incident et le noyau cible.

Pour les énergies incidentes de neutrons qui sont celles de la physique des réacteurs, il existe deux types de réactions possibles :

1. La **diffusion potentielle élastique*** qui est la simple réflexion du neutron par la barrière de potentiel du noyau. La collision est de même type que celle de deux boules de billard. Il s'agit du mécanisme le plus probable de ralentissement des neutrons.

2. La quasi-totalité des autres réactions se fait par un unique mécanisme : la formation d'un **noyau composé***, constitué du noyau initial et du neutron incident. Ledit noyau composé est excité, car le neutron lui apporte son énergie de liaison et son énergie cinétique.

Le noyau composé « choisit » ensuite sa voie de désexcitation, indépendamment de son mode de formation. On citera :

- la **diffusion résonnante élastique*** : qui laisse le noyau dans son état fondamental (le noyau composé choisit de retourner vers le système qui lui a donné naissance) ;
- la **diffusion résonnante inélastique*** : où l'identité du noyau heurté est inchangée, mais ce noyau est amené dans l'un ou l'autre de ses états excités ;
- la **capture radiative*** : dans laquelle le noyau composé se désexcite par la seule émission d'un (ou plusieurs) photon(s) ;
- la **fission*** : dans laquelle le noyau composé se désexcite en se fragmentant en deux ou trois fragments de fission de masse intermédiaire avec émission de quelques neutrons ;
- et d'autres réactions moins courantes.

Une des difficultés de la neutronique consiste à prendre en compte de manière précise la variation très complexe des sections efficaces microscopiques en fonction de la vitesse (ou de l'énergie) du neutron (voir fig. 2).

En dépit d'une densité faible, la population des neutrons est nombreuse, de l'ordre de 10^8 neutrons par cm^3, et peut donc être décrite de façon statistique.

Ce traitement statistique peut se faire par la méthode de Monte-Carlo. Cette méthode, dite « stochastique », qui avait déjà été imaginée par Fermi, est aujourd'hui couramment mise en œuvre grâce aux puissants ordinateurs dont on dispose. Elle consiste en un échantillonnage d'histoires de neutrons – souvent plusieurs millions à plusieurs milliards – reconstituées le plus exactement possible par simulation informatique (tirage au sort des événements selon les lois de probabilité correctes, dans le processus markovien qu'est le cheminement d'un neutron).

Mais le traitement « déterministe », le seul qui était envisageable dans les débuts de la neutronique, reste encore aujourd'hui celui qui est le plus couramment mis en œuvre, car beaucoup plus performant en terme de rapport coût/précision. La population des neutrons dans un système est très analogue à celle d'un gaz parfait : c'est la raison pour laquelle les neutroniciens ont pu reprendre, en l'adaptant, l'équation que Boltzmann avait écrite pour les gaz, en 1879, c'est-à-dire un demi-siècle avant la découverte du neutron.

Dans un réacteur nucléaire, la population neutronique est régie par l'équation de Boltzmann ou « équation du transport » et la composition isotopique (dont dépend la population neutronique) par les équations de Bateman ou « équations d'évolution ».

L'équation de Boltzmann

L'équation de Boltzmann établit le bilan de la population neutronique en fonction des variables – espace, vecteur vitesse (ou énergie et direction), temps – dont dépend cette dernière, en tenant compte des différents types de réactions nucléaires susceptibles de créer ou de faire disparaître des neutrons (voir *infra* le chapitre intitulé « Les méthodes de la neutronique », p. 43 et suiv.).

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:23 Page 12

Les données nécessaires à la résolution de l'équation de Boltzmann sont les données nucléaires des différents nucléides présents dans le réacteur et les concentrations de ces derniers, ainsi que d'éventuelles sources externes de neutrons. Ces grandeurs sont résumées dans le tableau 4.

La résolution de l'équation de Boltzmann fournit le flux de neutrons, grandeur caractérisant la population neutronique. On peut déduire du flux les grandeurs dérivées telles que les taux de réaction. Le tableau 5 présente l'ensemble de ces grandeurs physiques.

Il faut noter que la propagation des photons *gammas*, fondamentale dans le cadre de la radioprotection, est régie par une équation de Boltzmann similaire à celle des neutrons.

Les équations de Bateman

Les réactions nucléaires n'ont pas seulement une influence sur la population de neutrons ; elles font également varier la population de noyaux atomiques. L'évolution des concentrations des différents nucléides est régie par les équations de Bateman, ensemble d'équations de bilan en espace et en temps, tenant compte des créations et des disparitions par réactions nucléaires et processus de décroissance radioactive (voir *infra*, le chapitre intitulé « Les méthodes de la neutronique », p. 43 et suiv.).

Les données nécessaires à la résolution des équations de Bateman sont les données de décroissance des différents nucléides présents dans le réacteur et les taux de réaction issus de la résolution de l'équation de Boltzmann. Ces grandeurs sont résumées dans le tableau 6.

La résolution des équations de Bateman fournit les concentrations des différents nucléides présents dans le réacteur (qui figurent parmi les données de l'équation de Boltzmann) et les activités associées.

Le tableau 7 (p. 13) présente l'ensemble de ces grandeurs physiques. Les grandeurs dérivées telles que les puissances résiduelles (α, β, γ et neutron), les sources de rayonnements et les radio-toxicités s'en déduisent directement.

Tableau 3

Les variables usuelles de la neutronique

Grandeur	Notation usuelle	Définition	Unité usuelle
Point	$\vec{r}$	Position dans le système.	cm
Vitesse	v	Vitesse du neutron.	cm.s^{-1}
Phase	$\vec{\Omega}$	Direction du neutron.	sr
Temps	t	Instant considéré, temps.	s
Espace des phases	$P \equiv (\vec{r}, E, \vec{\Omega})$	Point dans l'espace des phases.	–
Énergie	E	Énergie du neutron.	eV, keV, MeV
Léthargie	$u = ln\frac{E_0}{E}$	Grandeur sans dimension caractérisant l'énergie du neutron par rapport à une énergie arbitraire E_0.	–

Tableau 4

Données de l'équation de Boltzmann pour le transport des neutrons

Grandeur	Notation usuelle	Définition	Unité usuelle
Concentration	$N_i(\vec{r}, t)$	Nombre d'atomes d'espèce i par unité de volume en $\vec{r}$, à un instant t donné.	cm^{-3}
Section efficace microscopique	$\sigma(E)$	Section droite de la « cible » (noyau atomique « vu » par un neutron).	barn (b)
Section efficace macroscopique	$\Sigma(\vec{r}, E, t) = N(\vec{r}, t)\sigma(E)$	Probabilité de collision par unité de longueur.	cm^{-1}
Libre parcours moyen	$\frac{1}{\Sigma(\vec{r}, E, t)}$	Distance moyenne parcourue avant la collision suivante.	cm
Kerma fission	κ	Énergie déposée dans le réacteur.	MeV
Multiplication par fission	ν	Nombre moyen de neutrons émis par fission.	–
Spectre de fission	$\chi(E, E')$	Proportion de neutrons émis à l'énergie E' suite à une fission induite par un neutron d'énergie E.	MeV^{-1}
Source	$S(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$	Émission de neutrons par unité de volume en $\vec{r}$, d'énergie en E, d'angle solide dans la direction $\vec{\Omega}$ et de temps en t.	cm^{-3}. MeV^{-1}. sr^{-1}.s^{-1}

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:23 Page 13

Tableau 5

Grandeurs physiques fondamentales déduites de la résolution de l'équation de Boltzmann pour le transport des neutrons

Grandeur	Notation usuelle	Définition	Unité usuelle
Densité de neutrons	$n\,(\vec{r}\,,\,E,\vec{\Omega},\,t)$	Nombre de neutrons par unité de volume en $\vec{r}$, par unité d'énergie en E, par unité d'angle solide dans la direction $\vec{\Omega}$, à un instant t donné.	$cm^{-3}.MeV^{-1}.sr^{-1}$
Flux en phase	$\psi\,(\vec{r}\,,\,E,\vec{\Omega},\,t) = n\,(\vec{r}\,,\,E,\vec{\Omega},\,t)\,\upsilon$	Nombre de neutrons de vitesse υ traversant perpendiculairement une surface unité située en $\vec{r}$, de normale $\vec{\Omega}$, par unités d'énergie en E, d'angle solide dans la direction $\vec{\Omega}$ et de temps en t.	$cm^{-2}.MeV^{-1}.sr^{-1}.s^{-1}$
Flux scalaire	$\phi\,(\vec{r}\,,\,E,\,t)$	Intégrale en angle du flux en phase.	$cm^{-2}.MeV^{-1}.\,s^{-1}$
Flux total	$\Phi\,(\vec{r}\,,\,t)$	Intégrale en énergie du flux scalaire.	$cm^{-2}.s^{-1}$
Courant	$\vec{J}(\vec{r},E,\vec{\Omega},t) = \vec{\Omega}\,\psi(\vec{r},E,\vec{\Omega},t)$	$\vec{J}(\vec{r},E,\vec{\Omega},t).\vec{N}$ Nombre de neutrons traversant une surface unité située en $\vec{r}$ de normale $\vec{N}$ par unités d'énergie en E, d'angle solide dans la direction $\vec{\Omega}$ et de temps en t.	$cm^{-2}.MeV^{-1}.sr^{-1}.s^{-1}$
Taux de réaction	$\tau_i(\vec{r},E,t) = \Sigma_i(\vec{r},E,t)\phi(\vec{r},E,t)$	Nombre de réactions de type i par unités de volume en $\vec{r}$, d'énergie en E et de temps en t.	$cm^{-3}.\,MeV^{-1}.\,s^{-1}$
Taux de réaction intégré en énergie	$\tau_i\,(\vec{r}\,,\,t)$	Nombre de réactions de type i par unités de volume en $\vec{r}$, et de temps en t.	$cm^{-3}.\,s^{-1}$
Fluence	$F(\vec{r},t) = \int_0^t \Phi(\vec{r},t')dt'$	Flux total intégré sur le temps, nombre de neutrons reçus par unité de surface en $\vec{r}$, au bout du temps t.	cm^{-2} ou $kilobarn^{-1}$
Taux de combustion (ou *burn-up*)	$Bu = \int \frac{\kappa}{\varrho}\Sigma_f(\vec{r},E,t)\phi(\vec{r},E,t)d^3rdEdt$	Énergie thermique produite par unité de masse où ϱ est la masse spécifique du combustible (métaux lourds seulement).	MWj/t
Facteur de multiplication	k	Effectif d'une génération rapporté à celui de la génération précédente	–
Réactivité	$\rho = \frac{k-1}{k}$	Écart à l'état critique $\rho < 0$: état sous-critique $\rho = 0$: état critique $\rho > 0$: état sur-critique	pcm (pour cent mille)

Tableau 6

Données des équations de Bateman

Grandeur	Notation usuelle	Définition	Unité usuelle
Constantes de décroissance partielle	$\lambda_{\alpha,i}$, $\lambda_{\beta^-,\,i,}$ …	Probabilité de désintégration par unité de temps du nucléide i, suivant un processus radioactif donné.	s^{-1}
Taux de réaction microscopique intégré en énergie	$\int_E \sigma_{q,k\leftarrow m}\,(E)\phi(\vec{r},E,t)dE$	Taux microscopique de formation (resp. de disparition) d'un nucléide k (resp. m).	s^{-1}
Rendements de fission	$Y_{i\leftarrow f}\,(E)$	Rendement de fission du nucléide i pour une fission induite par un neutron d'énergie E sur un noyau fissile f.	–

Tableau 7

Grandeurs physiques fondamentales déduites de la résolution des équations de Bateman

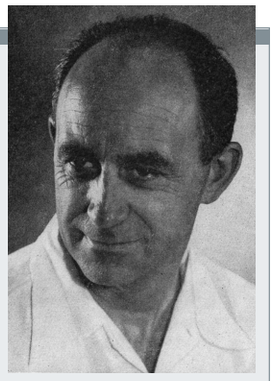
Grandeur	Notation usuelle	Définition	Unité usuelle
Concentration	$N_i\,(\vec{r}\,,\,t)$	Nombre d'atomes du nucléide i par unité de volume en $\vec{r}$ à un instant t donné.	cm^{-3}
Activité	$A_i\,(\vec{r}\,,\,t) = \lambda N_i\,(\vec{r}\,,\,t)$	Nombre de désintégrations du nucléide i par unité de volume en $\vec{r}$ et par unité de temps en t, relatives au processus radioactif de constante λ.	$Bq.cm^{-3}$

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:23 Page 14

Couplage des équations

On notera qu'en toute rigueur, les **équations de Boltzmann et de Bateman*** sont couplées entre elles, car les taux de réaction dépendent du flux des neutrons, lequel flux dépend lui-même de la composition du système. Cependant, dans la pratique, on peut découpler ces équations en les résolvant séparément sur des intervalles de temps successifs suffisamment courts pour pouvoir négliger, sur chacun de ces intervalles, les variations de composition isotopique dans l'équation de Boltzmann et de flux dans les équations de Bateman.

Aux équations de Boltzmann et de Bateman, il faut joindre les équations explicitant les effets de température et de contre-réactions thermo-hydrauliques.

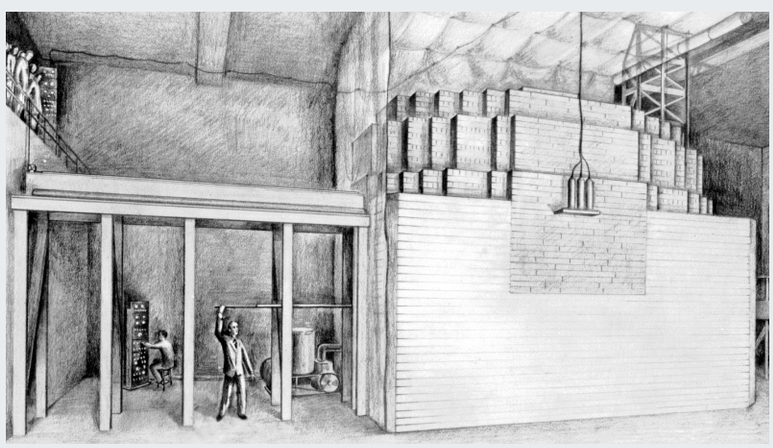


Enrico Fermi (1901-1954) obtiendra le prix Nobel (1938) pour ses travaux non pas en neutronique, mais sur la radioactivité *bêta*. **Enrico Fermi** et son équipe construisent et font fonctionner la première pile atomique de l'histoire de l'humanité, sous les gradins des tribunes du terrain de football de l'Université de Chicago. Il établit la formule des quatre facteurs, toujours utilisée aujourd'hui, et esquisse la théorie de l'autoprotection des résonances. Il est remarquable que, dès cette « première », Fermi ait pensé à tous les aspects fondamentaux des réacteurs nucléaires : le contrôle, la commande, la radioprotection et la sûreté (arrêt d'urgence), ainsi qu'au dialogue nécessaire entre les acteurs assurant ces différentes fonctions.

De gauche à droite : **Frédéric Joliot-Curie** (1900-1958), prix Nobel de Chimie en 1935 avec son épouse **Irène Joliot-Curie** pour la « synthèse de nouveaux éléments radioactifs »(découverte de la radioactivité artificielle), **Hans von Halban** (1908-1964), **Lew Kowarski** (1907-1979). En 1939, ils mettent en évidence l'émission de deux ou trois neutrons secondaires, lors de la fission.

Le développement de la neutronique en France : recherche, industrie et enseignement

Le savant américain d'origine hongroise, **Leó Szilárd**, avait prédit au début de l'année 1939, dans une lettre envoyée à **Frédéric Joliot-Curie**, la production de plusieurs *neutrons* à la suite de la cassure d'un *noyau d'uranium* provoquée par un *neutron*. En avril de la même année, dans son laboratoire du Collège de France, **Frédéric Joliot-Curie** et ses collaborateurs **Hans Halban** et **Lew Kowarski**, rejoints par **Francis Perrin**, mettent en évidence ce phénomène à l'origine de l'émission de 2 ou 3 neutrons, et ce, une semaine avant l'équipe américaine de **Leó Szilárd** et **Enrico Fermi**. Ils comprennent très vite l'intérêt pratique que l'on peut tirer de ce phénomène de fission nucléaire – la production d'énergie – et cernent les conditions dans lesquelles ce processus est favorisé (neutrons ralentis interagissant avec des noyaux d'ura-



La pile atomique de Chicago. Si l'on peut trouver des photos des premières couches de l'empilement, il ne nous est resté qu'un dessin et une peinture reconstituant de mémoire, plusieurs mois après, la pile de Chicago. Elle divergea le 2 décembre 1942 en dégageant quelque 0,5 watt. Les jours suivants, Enrico Fermi la fit monter à quelques centaines de watts, avant de la démonter.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:23 Page 15

nium 235). En témoignent les trois brevets déposés les 1er, 2 et 4 mai 1939 au nom de la Caisse Nationale de la Recherche Scientifique (CNRS). Dans le brevet du 4 mai, **Francis Perrin** établit une formule de la *masse critique*. L'équipe française s'attache tout de suite à acquérir de l'eau lourde (le deutérium avait été découvert par l'américain **Harold Urey**, également en 1932) en vue de construire une pile atomique (l'expression « réacteur nucléaire » n'existe pas encore).

Le commencement de la Seconde Guerre mondiale arrête ce projet, et ce sont finalement **Enrico Fermi** et son équipe qui construiront et feront fonctionner la première pile atomique de l'histoire de l'humanité, sous les gradins des tribunes du terrain de football de l'Université de Chicago. **Enrico Fermi** avait préalablement établi la célèbre formule de neutronique donnant le facteur de multiplication des neutrons dans un milieu fissile, la « **formule des quatre facteurs** », qui lui permettra de prédire la *masse critique* de cette première pile atomique. Constituée de 6 tonnes d'uranium métal, de 50 tonnes d'oxyde et 400 tonnes de graphite, matériau ralentisseur de neutrons et peu absorbant, elle diverge le 2 décembre 1942. Contrôlée par des barres de cadmium, matériau absorbant de neutrons thermiques, elle délivrera, à sa première divergence, volontairement pour des raisons de radioprotection, moins d'un watt de puissance.

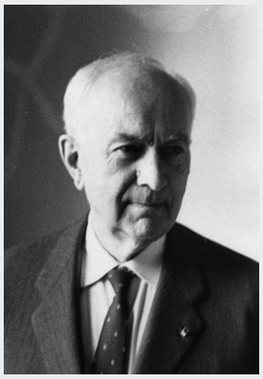
Dès après la fin de la Seconde Guerre mondiale, le Commissariat à l'Énergie Atomique (CEA), créé par ordonnance le 18 octobre 1945, construit, à l'intérieur du Fort de Châtillon à Fontenay-aux-Roses en région parisienne, la première pile atomique française, **ZOÉ** (pour puissance Zéro, Oxyde d'uranium, Eau lourde) qui diverge le 15 décembre 1948, à 12 h 12.

À l'occasion des 50 ans du CEA, s'est tenu le 12 février 1996, à Paris, un colloque intitulé « **Naissance d'une discipline scientifique : la neutronique** », ouvert par **Georges Vendryes** et au cours duquel se sont succédé six communications, retraçant les grandes étapes du développement de la neutronique en France et la vision conceptuelle et prospective qu'en ont ses acteurs : celle de **Jean Bussac** sur « Le rôle du CEA dans les premiers développements de la neutronique », de **Paul Reuss** sur « L'évolution des paradigmes en neutronique », de **Daniel Paya** sur « La physique nucléaire et la neutronique », de **Jean-Baptiste Thomas** sur « Les applications de la neutronique. Les réacteurs à neutrons thermiques », de **Massimo Salvatorès** sur « Les applications de la neutronique. Les réacteurs à neutrons rapides », de **Pierre Bacher** sur « Les problèmes de formation dans le domaine de la neutronique ».

Après l'ère des pionniers (**Frédéric Joliot-Curie**, **Hans Halban**, **Lew Kowarski**, **Francis Perrin**, **Irène Joliot-Curie**, **Bertrand Goldschmidt**…), se développent la *neutronique théorique*, d'une part, et la *neutronique expérimentale*, d'autre part, sous l'impulsion et la direction de **Jacques Yvon**, professeur de physique théorique à l'Université de Strasbourg, spécialiste de la mécanique statistique. L'une des figures de proue des théoriciens de la nouvelle génération est **Jules Horowitz**, souvent présenté comme le fondateur de l'École française de neutronique et dont le nom a été donné au réacteur expérimental RJH.

En 1952, **Jacques Yvon** cède la direction du Service de Physique Mathématique (SPM) qu'il dirigeait depuis 1949, date de sa création au sein du CEA, à **Jules Horowitz**, pour prendre la direction d'une nouvelle entité le « Département des Études de Piles » (DEP). Les unités du CEA/DEN dont l'activité est axée sur le développement de codes et méthodes de calcul et la neutronique expérimentale sont filles du DEP et du SPM.

L'équipe ZOÉ, en décembre 1948 ; du premier rang au dernier rang et de gauche à droite : André Ertaud, Bertrand Goldschmidt, Maurice Surdin, Lew Kowarski, Frédéric Joliot-Curie, Eugène le Meur, Jules Guéron, Jacques Stohr, Roland Echard, José Foglia, Hubert de Laboulaye, Roger Martin, Henry Fauquez, Edmond Jaly, Roger Beauge, Jacky Weill, Jacques Pottier, Jules Chimot, André Berthelot, Jacques Cordeaux, Anatole Rogozinski, Victor Raievski, Georges Valladas, Gaston Clairet, Maurice Nel, Robert Bonnerue.



Jacques Yvon (1901-1979) fut chef du Service de Physique Mathématique, puis Haut-commissaire (1970-1975).

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:23 Page 16

Jules Horowitz (1921-1995) est souvent considéré comme le fondateur de l'« École française de neutronique », au Service de Physique Mathématique ; il fut ensuite Directeur des Piles atomiques puis, de la Recherche fondamentale au CEA.

Jules Horowitz inaugure la période d'élaboration des modèles physico-mathématiques de la physique des réacteurs nucléaires. Le *modèle de thermalisation des neutrons* de **Jules Horowitz** et **Michel Cadilhac** et la *formule ABH* (**Amouyal-Benoist-Horowitz**) donnant le *facteur d'utilisation thermique* en sont deux exemples.

De son côté, **Georges Vendryes** a en charge d'asseoir la neutronique sur une base expérimentale large et solide, notamment avec les mesures de *sections efficaces* auxquelles le réacteur à eau lourde EL2, construit sur le site de Saclay, est prioritairement affecté. Des « maquettes critiques » seront construites et exploitées sur les différents sites du CEA, Fontenay-aux-Roses, Saclay et Cadarache (AQUILON, ALIZÉ, PROSERPINE, MASURCA, MINERVE, MARIUS, CÉSAR, ÉOLE…) s'inscrivant pleinement dans cette perspective.

Une troisième génération de neutroniciens émerge au début des années soixante, travaillant encore avec des tables numériques et des machines mécaniques à assistance électrique telles que la bruyante *Frieden* (du nom de l'endroit où elles sont fabriquées).

Les premières thèses de neutronique sont soutenues, à l'instar de celle de **Pierre Benoist** sur la « Théorie du coefficient de diffusion des neutrons dans un réseau comportant des cavités » (1964) ; les premiers **codes de neutronique** voient le jour, spécifiques d'une filière : COREGRAF pour la filière *uranium naturel-graphite-gaz*, CRUEL pour celle à *Eau lourde*, COPPÉLIA puis EVEREST pour celle à *Eau ordinaire* et, enfin, HÉTAÏRE pour celle à *neutrons rapides*.

Mais ces codes ne résolvent pas encore l'*équation de Boltzmann* qui gouverne le cheminement des neutrons. Ce défi est relevé avec succès vers la fin des années soixante, grâce aux ordinateurs, sonnant alors le glas des modèles phénoménologiques trop « problème-dépendants », mais néanmoins conservés dans l'enseignement académique pour leur vertu pédagogique.

Le code de neutronique APOLLO initialement développé par **Alain Hoffmann**, **Françoise Jeanpierre**, **Alain Kavenoky**, **Michel Livolant** et **Henri Lorain**, à l'origine dédié à la filière des réacteurs à eau sous pression appartient à cette nouvelle séquence de l'histoire de la physique des réacteurs nucléaires où la neutronique, les techniques numériques et l'informatique se trouvent organiquement liées.

Si des modèles tombent en désuétude, de nouvelles problématiques se font jour ou d'anciennes doivent être reformulées afin de résoudre l'équation de Boltzmann avec un ratio temps de calcul/précision acceptable pour une utilisation industrielle. Citons en exemple la problématique fondamentale de l'homogénéisation dont **Richard Sanchez** fait une revue éclairante dans un article intitulé *« Assembly homogenization techniques for core calculations »*.

La puissance croissante des ordinateurs a permis non seulement de développer des codes neutroniques dits « déterministes », comme ceux précédemment cités, mais aussi, dans le même temps, des codes utilisant une méthode probabiliste, la *méthode de Monte-Carlo*, pour résoudre l'équation de Boltzmann. Dans ce dernier cas, on simule, « sans approximation », l'histoire individuelle des neutrons dans le réacteur nucléaire, le prix à payer étant un temps de calcul bien plus élevé que celui requis par les codes déterministes. Les tout premiers logiciels de transport des neutrons par la méthode de Monte-Carlo – ZEUS, POKER – sont écrits au CEA, dans les années 60. Leur successeur, TRIPOLI, dont le développement a été initié par **Jean-Claude Nimal**, voit sa première version sortir dans le courant des années 70.

L'INSTN créé en 1956 : le bâtiment d'origine. Un réacteur dédié à l'enseignement, ULYSSE, y a été installé. Il a assuré pendant de nombreuses années (1961-2007) la formation des futurs techniciens et ingénieurs nucléaires.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:23 Page 17

INSTN : vue du nouveau bâtiment adossé à l'ancien.

La bibliographie commentée du *Précis de neutronique* de **Paul Reuss** fournit de nombreuses références relatives, en particulier, à la production scientifique en France dans le domaine de la neutronique : thèses, articles et ouvrages.

Le souci de formation en génie nucléaire ou atomique suit l'activité de R&D et le déploiement des différentes filières industrielles de réacteurs nucléaires pour la production d'énergie. Des « Cours de Génie atomique » sont dispensés à partir de 1954 et seront donnés dans le cadre de l'Institut national des sciences et techniques nucléaires (INSTN) de Saclay dont **Jean Debiesse** fut le premier directeur, à partir de 1956. Préfacés par **Francis Perrin**, ils seront édités par les Presses Universitaires de France, en 1963. L'INSTN essaime ensuite à Cherbourg, Grenoble et Cadarache. En 1961, **Jules Horowitz**, en accord avec **Jean Teillac**, alors professeur à l'Université de Paris, directeur de l'Institut de physique nucléaire d'Orsay, crée le Diplôme d'Études Approfondies (DEA) de *Physique des réacteurs nucléaires*. Cet enseignement se poursuit aujourd'hui dans le cadre du *Master International Nuclear Energy* co-organisé par le CEA/INSTN, l'Université Paris Sud 11, le consortium des Grandes Écoles ParisTech et les industriels EDF, AREVA et GDF Suez. Il accueille chaque année des étudiants de plus d'une dizaine de pays. Progressivement, des modules d'enseignement de la neutronique ont intégré des cursus universitaires et de Grandes Écoles.

De nouvelles collections du génie atomique ont vu le jour, la plus récente étant celle dirigée par **Joseph Safieh** et éditée par l'INSTN et EDP Sciences.

Présentation de la monographie

Cette monographie est volontairement axée sur la **physique du cœur** qui vise à caractériser l'état du cœur d'un réacteur et à en comprendre le comportement en situations normale et accidentelle. Pour cela, il faut en particulier déterminer sa distribution de puissance, ainsi que sa composition en nucléides en chacun de ses points et à tout instant. La démarche du neutronicien, qui consiste à concevoir pour des configurations spécifiques des schémas de calcul optimisés est mise en relief. Ces schémas de calcul mettent en œuvre des bibliothèques de données nucléaires et des codes de calcul résolvant les équations de Boltzmann et de Bateman. Le contenu de cette monographie a cependant été élargi à quelques applications relatives aux domaines précédemment cités.

Cette monographie donne une vision globale de ce qu'est la neutronique, en faisant ressortir son caractère multidisciplinaire. Des encadrés ont été insérés ; les uns, sur fond orange ou vert, rappellent des notions fondamentales ; les autres, sur fond grisé, rapportent une information d'ordre historique et/ou conceptuel. Cet ouvrage doit être appréhendé comme un éclairage sur la neutronique, complémentaire de ceux existant de longue date ou plus récents tels que le *Précis de neutronique* de P. Reuss, *Applied Reactor Physics* de A. Hébert de l'École Polytechnique de Montréal, *La Physique des réacteurs nucléaires* de S. Marguet d'EDF ou le *Nuclear Computational Science: A Century in Review* co-édité par E. Sartori et Y. Azmy ou encore le *Handbook of Nuclear Engineering – Nuclear Engineering Fundamentals* de D. Cacuci.

Le lecteur souhaitant approfondir un point particulier pourra se référer aux indications bibliographiques fournies au fil du texte. Celles-ci l'aideront aussi à compléter son information sur les contributions au développement de la neutronique des nombreuses personnes dont les noms n'ont pu être mentionnés dans l'espace imparti.

Les sections de cette monographie sont successivement consacrées aux données nucléaires et à leur traitement, aux équations générales de la neutronique et à certaines méthodes emblématiques permettant leur résolution, aux principaux codes de neutronique et à l'apport du calcul haute performance avec l'avènement des superordinateurs, à la neutronique expérimentale et à la qualification, et, enfin, à différentes applications de la neutronique.

Bibliographie

AZMY (Y.) and SARTORI (E.) [editors], *Nuclear Computational Science: A Century in Review*, Springer Science+Business Media B.V., 2010.

BUSSAC (J.), REUSS (P.), *Traité de Neutronique - Physique et calcul des réacteurs nucléaires avec application aux réacteurs à eau pressurisée et aux réacteurs à neutrons rapides*, Paris, Hermann, 1978, 1985 (2e édition).

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:23 Page 18

CACUCI (D.) [editor], *Handbook of Nuclear Engineering – Nuclear Engineering Fundamentals*, (5 volumes), Springer, 2010.

GOLDSCHMIDT (B.), *Le Complexe atomique – Histoire politique de l'énergie nucléaire*, Paris, Fayard, 1980.

HÉBERT (A.), *Applied Reactor Physics*, Montréal, Presses internationales Polytechnique, 2009.

HOFFMANN (A.), JEANPIERRE (F.), KAVENOKY (A.), LIVOLANT (M.), LORAIN (H.), *APOLLO : code multigroupe de résolution de l'équation du transport pour les neutrons thermiques et rapides*, note CEA-N-1610, mars 1973.

KHAIRALLAH (A.) et RECOLIN (J.), « Calcul de l'Autoprotection Résonnante dans les Cellules Complexes par la Méthode des Sous-Groupes » (code HETAÏRE), *Proc. Seminar Numerical Reactor Calculations*, IAEA-SM-154/37, Vienna, January 17-21,1972.

MARGUET (S.), *La Physique des réacteurs nucléaires*, Éditions Lavoisier TEX & DOC, Paris, 2011.

PINAULT (M.), *Frédéric Joliot-Curie*, Odile Jacob, Paris, 2000.

REUSS (P.), COSTE-DELCLAUX (M.), « Development of Computational Models used in France for Neutron Resonance Absorption in Light Water Lattices », *Progress in Nuclear Energy*, vol. 42, n° 3, pp. 237-282, 2003.

REUSS (P.), *Précis de neutronique*, Les Ulis - France, EDP Sciences / INSTN, 2003 ; Traduction anglaise : *Neutron Physics*, EDP Sciences / ENEN /INSTN, 2008.

REUSS (P.), « Saga française de la neutronique », Leçon inaugurale donnée au *Génie atomique*, INSTN/Saclay, 25 octobre 2010.

REUSS (P.), *Du noyau atomique au réacteur nucléaire – La saga de la neutronique française*, Les Ulis, France, EDP Sciences, 2013.

SALVATORES (M.), « *Naissance d'une discipline scientifique : la neutronique* » (un colloque présenté par), 50 ans du CEA, Paris, 12 février 1996.

SANCHEZ (R.), « Assembly homogenization techniques for core calculations », *Progress in Nuclear Energy*, 51, pp. 14-31, 2009.

SEGRÈ (E.), *Les Physiciens modernes et leurs découvertes – Des rayons X aux Quarks*, Paris, Fayard, Coll. Le temps des Sciences, 1984.

LEFEBVRE (V.), *Au cœur de la matière : 50 ans de recherches au CEA de Saclay*, Paris, Le Cherche-Midi, 2002.

Paul REUSS
Institut national des sciences et techniques nucléaires
et Cheikh M. DIOP
Département de modélisation des systèmes et des structures

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:23 Page 19

Les données nucléaires

Pour décrire le cheminement des neutrons dans la matière, les **réactions en chaîne*** et les modifications de la composition de la matière dues aux réactions nucléaires, la neutronique a besoin de données de base : **sections efficaces microscopiques*** caractérisant les probabilités d'interaction entre les neutrons et la matière, observables post-fission (spectre et multiplicité des neutrons émis par **fission***, **rendements de fission***), données de **décroissance radioactive*** des radionucléides formés par les réactions nucléaires en jeu, nature et énergie des rayonnements émis. La détermination de ces données se fait à l'aide d'expériences et de modèles théoriques de physique nucléaire. Le travail complexe d'analyse de l'ensemble de ces données est mené par des experts **évaluateurs***. Il conduit à la production de bases de données nucléaires internationales.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:23 Page 20

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:23 Page 21

De la mesure à l'évaluation des données nucléaires

Les besoins en données nucléaires évaluées pour la physique des réacteurs nucléaires s'expriment au travers des études liées aux réacteurs actuels, mais aussi au travers de concepts innovants de réacteurs de générations III (par exemple **EPR***) et IV (**ASTRID***). Les conclusions des dossiers de **qualification*** des **formulaires*** et outils de calcul fondés sur la bibliothèque de données nucléaires évaluées **JEFF*** *(Joint Evaluated Fission and Fusion file)* permettent de déterminer les précisions cibles sur les paramètres neutroniques et de pointer les biais provenant des données nucléaires. Plusieurs actions doivent donc être menées de front : (i) la participation/initiation/soutien aux mesures microscopiques des sections efficaces auprès d'installations existantes ou nouvelles, (ii) le développement de nouveaux outils et codes d'évaluation des données nucléaires pour une maîtrise croissante en termes de modélisation physique et d'estimation des incertitudes (le code **CONRAD***), (iii) l'évaluation des données nucléaires associées et (iv) le traitement de ces données nucléaires, afin de les utiliser dans les codes de calcul de neutronique (le système GALILÉE).

La mise en œuvre se fait dans un contexte de collaboration étroite au sein du CEA (DAM-DEN-DSM), ainsi qu'avec des organismes nationaux et internationaux. L'ensemble de ces travaux est promu *via* le groupe JEFF [1] de l'OCDE/AEN.

Les sections efficaces dans le domaine des résonances résolues, non résolues et le continuum

La modélisation des sections efficaces neutroniques est fondée sur des modèles de réactions nucléaires dont les paramètres (*e.g.* les caractéristiques des **résonances***) ne sont pas prédits avec suffisamment de précision à l'heure actuelle par des théories physiques microscopiques. Ils sont donc ajustés sur un jeu d'observations (mesures). On analyse alors trois types d'expériences, les expériences microscopiques, les expériences intégrales analytiques qui ciblent l'influence d'un nucléide particulier et des expériences maquettes qui sont représentatives de concepts de réacteurs. Ces dernières seront détaillées dans le paragraphe consacré à la qualification des données nucléaires (voir *infra*, p. 162-182).

Les expériences microscopiques par « temps de vol »

Parmi les données de base nécessaires aux calculs de neutronique, les sections efficaces jouent un rôle essentiel. Les sections efficaces en fonction de l'énergie du neutron incident sont dites « microscopiques », par opposition ici aux sections efficaces intégrales dont les résultats sont des quantités intégrées sur le spectre en énergie des neutrons incidents. En Europe, seules deux installations permettent d'effectuer ce genre de mesures : l'accélérateur linéaire GELINA *(GEel LINear Accelerator)* de l'Institut des Matériaux et des Mesures de Référence (IRMM) installé à Geel (Belgique) et l'installation n-TOF située au CERN à Genève (Suisse). Toutes deux utilisent la technique du « temps de vol », qui consiste à mesurer précisément le temps mis par un neutron entre le moment de sa création et le moment où il interagit avec une cible. La connaissance de ce temps de vol du neutron et de la distance parcourue par celui-ci permet d'en déduire son énergie. Nous allons décrire brièvement l'installation de Geel avec laquelle le CEA entretient depuis de nombreuses années une collaboration très fructueuse.

L'installation GELINA

Cette installation est l'une des plus puissantes sources de neutrons au monde, qui se caractérise à la fois par sa très grande résolution en énergie, mais aussi par son large spectre en énergie (de quelques milli-électronvolts à plusieurs millions d'électronvolts). Son principe de fonctionnement (voir fig. 3) repose sur l'accélération d'un faisceau pulsé d'électrons très intense qui vient heurter une cible rotative d'uranium. Typiquement, ces bouffées d'électrons (d'une durée de quelques nanosecondes) sont émises 800 fois par seconde. En pénétrant dans une cible rotative d'uranium naturel, les électrons perdent leur énergie en créant un **rayonnement de freinage***, dit « de **Bremsstrahlung*** », qui produit des réactions produisant un neutron [réactions (γ, n)] ou créant une fission [réaction de photofission (γ, f)]. Les réactions (γ, n) donnent naissance à un spectre de neutrons pouvant aller jusqu'à plusieurs dizaines de MeV, alors que les réactions (γ, f) fournissent un spectre de fission dont l'énergie moyenne est d'environ 2 MeV. Afin de créer des neutrons de plus basse énergie (notamment pour couvrir la zone thermique), les neutrons sont ralentis dans deux conteneurs en béryllium contenant de l'eau et placés au-dessus et en-dessous de la cible rotative. Une fois émis puis ralentis, les neutrons passent dans les bases de vol où des dispositifs de plomb, de cuivre et de paraffine assurent la collimation du faisceau. Environ 4,3 x 10^{10} neutrons par bouffée d'électrons sont créés [2].

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:23 Page 22

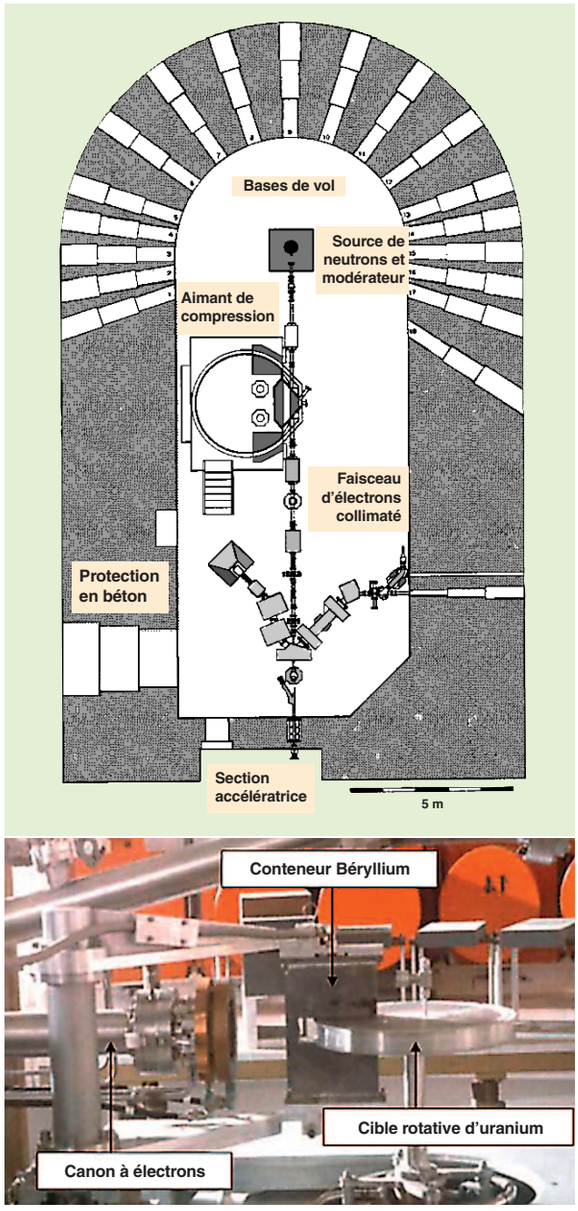


Fig. 3. Schéma général de la partie accélératrice des électrons (haut) de l'installation GELINA à Geel (Belgique). La salle des cibles où sont créés les neutrons (bas) débouche sur les bases de vol dont les longueurs varient de 8 à 400 m (photos IRMM).

Parmi les mesures réalisées par temps de vol, celles « de transmission », consistant à mesurer la fraction de neutrons transmise à travers un échantillon placé sur le trajet du faisceau de neutrons, sont indispensables à l'évaluation des sections efficaces induites par neutron. La figure 4 montre un exemple d'une telle mesure réalisée avec des échantillons d'hafnium naturel de trois épaisseurs différentes [3]. L'analyse des résonances clairement visibles sur cette figure consiste à modéliser, à l'aide de la *théorie de la matrice R* (voir paragraphe ci-après), les structures observées en tenant compte de nombreuses corrections expérimentales.

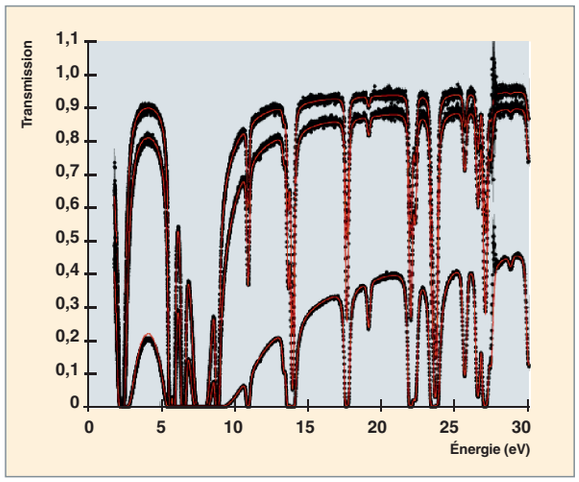


Fig. 4. Mesures de transmission réalisées avec trois échantillons d'hafnium naturel de 15 mm, 2 mm et 1 mm d'épaisseur [3]. Les structures observées correspondent aux résonances des six isotopes du hafnium.

Les mesures intégrales analytiques de sections efficaces

Le projet Mini-Inca à l'Institut Laue Langevin (ILL) de Grenoble

Dans le cadre de l'étude de faisabilité de la **transmutation*** d'un certain nombre d'**actinides mineurs***, le CEA, en collaboration avec l'Institut Laue Langevin (ILL) de Grenoble (France), a mis en place un dispositif capable de mesurer les sections efficaces (capture et fission) intégrées sous différents spectres neutroniques [4]. Ce projet expérimental « Mini-Inca » s'est déroulé auprès du réacteur de l'Institut Laue Langevin qui délivre un flux de neutrons parmi les plus élevés au monde (1,5 x 10^{15} n/s/cm^2). Ces mesures de sections efficaces dites « intégrales », c'est-à-dire « moyennées » sur un spectre d'énergie du neutron incident, utilisent différents canaux d'irradiation placés dans le cœur du réacteur. Selon la position de l'échantillon à l'intérieur de ces canaux, il est possible de faire varier l'intensité et le spectre des neutrons incidents, comme l'illustre la figure 5.

Ainsi, dans le canal V4, un échantillon placé à une hauteur de 100 cm sera irradié par un flux de neutrons purement **thermiques***, tandis qu'à 0 cm (très proche du combustible du réacteur), une composante de neutrons **épithermiques*** apparaît (environ 15 %).

Après l'irradiation, le **taux de capture*** de l'échantillon peut être mesuré par spectroscopie *alpha* et/ou *gamma*, afin d'en déduire la section efficace de capture. De même, l'utilisation de chambres à fission miniaturisées fabriquées par le Service de Physique Expérimentale (SPEX) du CEA permet de déterminer le **taux de fission*** à partir duquel la section efficace de fission peut être calculée.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:23 Page 22

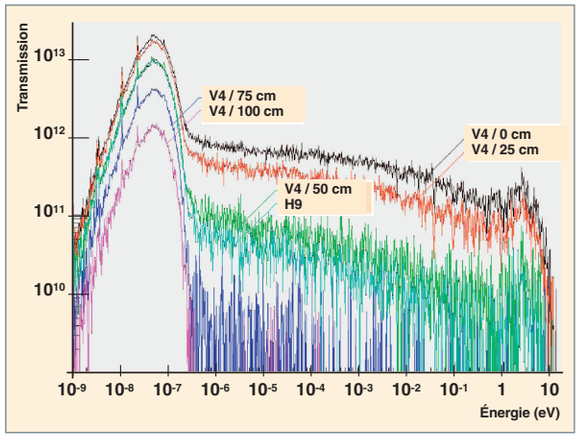


Fig. 5. Variation de l'intensité et du spectre de neutrons servant à irradier un échantillon dont on veut mesurer la section efficace. Selon le canal (V4 ou H9) et selon la position de l'échantillon à l'intérieur du canal, différents flux d'irradiation peuvent être obtenus (figure de O. Bringer [5]).

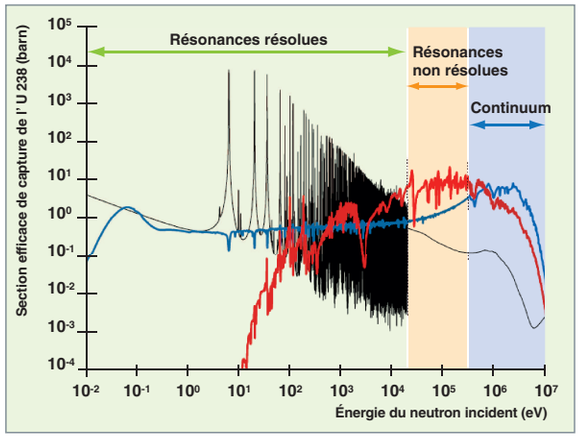


Fig. 6. Représentation de la section efficace de capture de l'U 238 (JEFF-3.1.1) et des flux de neutrons représentatifs d'un Réacteur à Neutrons Rapides (RNR) refroidi au sodium (courbe rouge) ou d'un Réacteur à Eau sous Pression (REP) [courbe bleue]. Les trois grands domaines en énergie (résonances résolues, résonances non résolues et continuum) sont également représentés.

Les modèles de réactions nucléaires

Dans les domaines d'énergie de 0 eV à 20 MeV, domaine d'énergie de la physique des réacteurs, le calcul des sections efficaces neutroniques est fondé sur le modèle du noyau composé qui suppose que l'interaction neutron-noyau se déroule en deux étapes distinctes : la formation du noyau composé du noyau-cible et du neutron incident, puis sa décroissance, supposée par ailleurs indépendante du mode de formation.

La section efficace neutronique d'un noyau caractérise la probabilité qu'a un neutron d'interagir avec ce noyau. Cette probabilité peut devenir très grande, lorsque l'énergie du neutron incident est telle que l'énergie conférée au noyau composé est proche de l'énergie de l'un de ses niveaux d'excitation. Cela se traduit par une brusque remontée de la section efficace d'interaction entre le neutron et le noyau au voisinage de ces énergies. On dit alors que, pour ces énergies, le noyau « présente des résonances » ou bien qu'il est « résonnant ». Ces résonances sont bien séparées en énergie à basse énergie d'excitation (domaine des résonances résolues). Leur espacement diminue quand l'énergie d'excitation augmente (domaine des résonances non résolues) jusqu'à s'annuler (domaine du continuum).

Une des grandes difficultés de l'évaluation des données nucléaires vient de ce caractère résonnant des sections efficaces neutron-noyau, qui leur confère une dépendance en énergie à la fois complexe et très forte (fig. 6).

Le travail d'évaluation des sections efficaces neutroniques consiste à établir avec les codes CONRAD [6], **ECIS*** [7] et **TALYS*** [8], un ensemble cohérent de paramètres de modèles de réactions nucléaires permettant de décrire le domaine des résonances (résolues et non résolues) et le « continuum » jusqu'à quelques dizaines de MeV.

La figure 6 présente les limites de chaque région dans le cas de la section efficace de capture de l'uranium 238.

CONRAD, un outil pour l'évaluation des sections efficaces

Le développement du code CONRAD, pour *« COde for Nuclear Reaction Analysis and Data assimilation »*, correspond aux efforts déployés au sein du CEA pour se doter d'un outil moderne de modélisation des réactions nucléaires prenant en compte la propagation des incertitudes associées. Ce code permet de produire des évaluations utiles à la physique des réacteurs. Plus précisément, il permet l'analyse et l'évaluation des sections efficaces neutron-noyau totales et partielles (capture radiative, fission...) dans le domaine d'énergie allant de l'électronvolt au méga-électronvolt. Les paramètres de modèles de réactions nucléaires (matrice R, modèles optiques) sont estimés par ajustement des résulats de calcul sur des expériences microscopiques (transmission, rendement de capture...) et intégrales. CONRAD fournit, de surcroît, un cadre pour l'amélioration des modèles associés à la fission. Enfin, il permet l'estimation des incertitudes sur les paramètres de modèles de réactions nucléaires, en tenant compte de l'ensemble des incertitudes expérimentales, puis l'estimation des covariances sur les sections efficaces.

Les modèles de réactions nucléaires évoqués ont été soit développés dans l'outil (matrice R), soit intégrés *via* des interfaces (codes ECIS et TALYS). L'objectif majeur de CONRAD est de permettre l'intégration des différents modèles de physique nucléaire dans un cadre générique.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:23 Page 24

Matrice de collision et sections efficaces

Les deux étapes de formation et de décroissance du noyau composé peuvent être définies par la notion de voie de réaction [9], dénommée c et caractérisée par :

- les paires de particules, avant ou après la réaction ;
- leurs **spins*** (i et I) ;
- leur moment angulaire orbital relatif (ℓ) et sa projection (m) ;
- le spin de la voie ($s = i + I$) et sa projection (m_s) ;
- le moment angulaire total (J).

Le calcul des sections efficaces fait intervenir la matrice de collision U qui décrit la transition entre les fonctions d'onde entrantes et sortantes.

La section efficace partielle d'une voie d'entrée c vers une voie de sortie c' s'exprime alors par :

$$\sigma_{cc'} = \pi\bar{\lambda}_c^2 g_J |\delta_{cc'} - U_{cc'}|^2 \quad (1)$$

avec $g_J = \dfrac{2J+1}{(2I+1)(2i+1)}$

$\bar{\lambda}_c$ étant la longueur d'onde réduite associée à la voie c.
La section efficace totale de la voie c est une fonction linéaire de la matrice de collision :

$$\sigma_c = 2\pi\bar{\lambda}_c^2 \sum_{c'} g_J (1 - Re(U_{cc'})) \quad (2)$$

Les modèles de réactions nucléaires fournissent alors la forme et le comportement, en fonction de l'énergie de cette matrice de collision.

Domaine des résonances résolues

Le formalisme de la matrice R [9] permet de déterminer la forme des éléments de la matrice de collision dans le domaine des résonances résolues.
Pour des neutrons, celle-ci s'exprime par :

$$U_{cc'} = e^{-i(\varphi_c + \varphi_{c'})} \left\{ \delta_{cc'} + 2iP_c^{\frac{1}{2}} [(1 - RL^0)^{-1} R]_{cc'} P_{c'}^{\frac{1}{2}} \right\}$$

avec $L^0_{cc'} = (S_c + iP_c - B_c)\delta_{cc'}$ (3)

où φ_c est le déphasage de sphère dure, P_c et S_c sont respectivement le facteur de pénétrabilité et de décalage de la barrière de potentiel et B_c est une condition aux limites. Enfin, les éléments de la matrice R sont définis par :

$$R_{cc'} = \sum_{\lambda} \frac{\gamma_{\lambda c}\gamma_{\lambda c'}}{E_\lambda - E} \quad (4)$$

où $\gamma_{\lambda c}$ représente les amplitudes de voie, E_λ l'énergie du niveau λ et E l'énergie cinétique (dans le référentiel du laboratoire) de la particule incidente.

Les amplitudes de voie et les énergies des niveaux (pris réels et indépendants de l'énergie par un choix judicieux des valeurs des conditions limites B_c) sont ajustées par comparaison avec des mesures de sections efficaces. Les largeurs de voie $\Gamma_{\lambda c}$ sont données par : $\Gamma_{\lambda c} = 2\gamma_{\lambda c}^2 P_c$.
La structure résonnante apparaît explicitement dans les termes $(E_\lambda - E)$ qui se trouvent au dénominateur de la matrice R.

Domaine des résonances non résolues et continuum

Le domaine en énergie des résonances non résolues est un domaine intermédiaire entre le domaine des résonances résolues et le « continuum ». Sachant que l'espacement entre les résonances, ainsi que la résolution temporelle des spectromètres par temps de vol ne permettent plus l'analyse individuelle des résonances, le travail d'évaluation consiste alors à décrire le comportement des sections efficaces en fonction de plusieurs paramètres appelés « paramètres moyens ». À plus haute énergie, les calculs reposent sur la résolution de l'équation de Schrödinger en utilisant un potentiel complexe, $V + iW$ (contrairement à la matrice R qui utilise un potentiel carré réel), représentant l'interaction neutron incident avec l'ensemble des **nucléons*** de la cible. Ces potentiels sont appelés « potentiels optiques » par analogie avec l'optique quantique. Cette résolution directe de l'**équation de Schrödinger*** est implémentée dans les codes CONRAD (pour les noyaux sphériques) et ECIS.
L'évaluateur doit s'assurer que la formulation « moyennée » de la matrice R et l'utilisation des calculs de modèles optiques permettent une continuité des sections efficaces sur ces deux domaines d'énergie.

La section efficace totale moyenne

Dans le domaine des résonances non résolues, la section efficace totale moyenne peut s'obtenir à l'aide de la matrice de collision moyennée ($\overline{U_{cc'}}$) :

$$\bar{\sigma}_c = 2\pi\bar{\lambda}_c^2 g_J (1 - Re(\overline{U_{cc}})) \quad (5)$$

Les éléments de la matrice de collision « moyennée » dans le cadre de la théorie de la matrice R sont obtenus en fonction des paramètres moyens, comme l'espacement moyen des niveaux $<D_\ell>$, la fonction densité $<S_\ell>$, la largeur neutronique réduite moyenne $<g\Gamma_n^\ell>$. Une première estimation de ces paramètres est possible en réalisant une analyse statistique des résonances. Cette analyse permet, de surcroît, de mettre en évidence des niveaux manquants, des spins de résonances mal assignés ou encore des résonances dues à des impuretés dans l'échantillon.

À plus haute énergie, les calculs de modèles optiques fournissent directement une valeur en fonction de l'énergie de cette matrice de collision, $U_{cc'}(E)$, et ce uniquement pour une voie d'entrée c de la réaction nucléaire (par exemple, la voie neutron). La section efficace totale de la voie d'entrée c s'écrit :

$$\bar{\sigma}_c = 2\pi\bar{\lambda}_c^2 g_J (1 - Re(U_{cc})) \quad (6)$$

Les sections efficaces partielles moyennes

Le modèle statistique Hauser-Feshbach est utilisé pour décrire le processus de désexcitation du noyau composé (section effi-

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:23 Page 25

cace de capture radiative, section efficace de fission, section efficace de diffusion élastique et inélastique). Il utilise la notion de transmission de voie de réaction T_c.

Dans le cadre de la théorie de Hauser et Feshbach, les sections efficaces partielles s'écrivent en fonction des coefficients de transmission de la manière suivante :

$$\bar{\sigma}_{cc'} = \sigma_p \delta_{cc'} + \pi \bar{\lambda}_c^2 g_J \frac{T_c T_{c'}}{\sum_c T_c} W_{cc'} \qquad (7)$$

Le premier terme $\sigma_p \delta_{cc'}$ concerne la réaction directe *(shape elastic)*, $\pi \bar{\lambda}_c^2 g_J \frac{T_c T_{c'}}{\sum_c T_c}$ provient de la composante noyau composé et $W_{cc'}$ est un terme correspondant aux fluctuations et interférences entre les voies.

Pour chaque voie de réaction, les transmissions sont calculées à partir de modèles nucléaires. Pour la voie neutron, par exemple, nous avons : $T_c(E) = 1 - |U_{cc}|^2$ (ou encore $T_c(E) = 1 - |\overline{U_{cc}}|^2$ pour le domaine des résonances non résolues).

Pour la fission, la notion de pénétrabilité de barrière de fission permet le calcul de ces coefficients avec plus ou moins de finesse : formalisme rudimentaire de type Hill-Wheeler ou plus perfectionné (approximation **WKB*** ou Cramer-Nix).

Modélisation des sections efficaces de fission

L'effort de recherche actuel porte sur l'utilisation, dans les évaluations [10], de la théorie de Lynn relative au traitement de la matrice R moyenne qui permet un calcul plus exact des sections efficaces moyennes des actinides dans le domaine des résonances non résolues (paramètres moyens plus adaptés et plus représentatifs de la voie de fission). Par ailleurs, on s'oriente dans CONRAD et TALYS vers l'utilisation accrue de données microscopiques (niveaux collectifs, orbitales de niveaux individuels, densité de niveaux du continuum) associées à une modélisation soit phénoménologique, soit plus fondamentale des barrières de fission en fonction de l'application. L'approche fondamentale repose sur des calculs de surface équipotentielle, éventuellement multidimensionnelle.

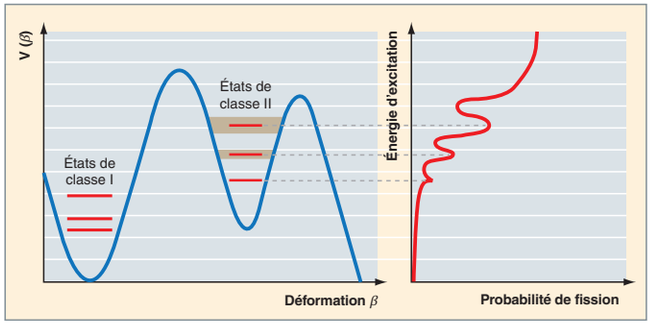


Fig. 7. Barrière de fission à deux bosses, en fonction de la déformation du noyau fissionnant (gauche) et probabilité de fission associée (droite).

Le calcul d'une barrière à deux bosses (voir fig. 7) en utilisant un formalisme de type Cramer-Nix [11] met en évidence la présence d'états du noyau dans le deuxième puits de potentiel qui se manifestent sous forme de résonances dans la probabilité de fission (visibles expérimentalement). Celle-ci, habituellement voisine de zéro pour les noyaux fertiles avec une énergie d'excitation en dessous du seuil de fission est alors amplifiée ponctuellement (en énergie). Ces approches permettent, par conséquent, un calcul plus précis des transmissions de la voie de fission.

Incertitudes sur les données nucléaires

La part la plus importante de l'incertitude sur les résultats des calculs de neutronique provient de l'incertitude sur les données nucléaires de base. Pour valider les marges prises sur les paramètres de conception des futurs réacteurs ou assurer une propagation des incertitudes sur les paramètres neutroniques des réacteurs existants, il faut donc assurer une maîtrise *a priori* des incertitudes sur les données nucléaires. Afin d'inclure des matrices de variance/covariance explicitant les corrélations entre les diverses données nucléaires dans les prochaines évaluations, un travail conséquent de ré-analyse des mesures microscopiques, de développement de méthodes mathématiques d'évaluation de toutes les composantes des incertitudes, qu'elles proviennent des expériences ou des modèles, est en cours et devra se concrétiser pour les futures bases de données nucléaires.

CONRAD : un outil d'analyse des incertitudes

Dans le cadre de CONRAD, l'estimation des paramètres de modèle repose sur le concept d'inférence bayésienne. Si l'on suppose que l'on cherche la probabilité d'obtenir les paramètres $\vec{x}$, que U est la connaissance préalable sur ces paramètres et que $\vec{y}$ est un nouveau jeu de mesures, le théorème de Bayes généralisé aux variables continues donne la relation entre les densités de probabilité $[p(.)]$ suivantes :

$$p\left(\vec{x}|\vec{y},U\right) = \frac{p\left(\vec{x}|U\right) p(\vec{y}|\vec{x},U)}{\int d\vec{x'}\, p\left(\vec{x'}|U\right) p(\vec{y}|\vec{x'},U)} \qquad (8)$$

La densité de probabilité $p\,(\vec{x}|U)$ est appelée *a priori*. La quantité $p\,(\vec{y}|\vec{x},\,U)$ représente la fonction de vraisemblance qui nous indique la vraisemblance des mesures sachant U si les paramètres $\vec{x}$ sont inconnus. La quantité $p\,(\vec{x}|\vec{y},\,U)$ est la densité de probabilité *a posteriori* de $\vec{x}$. Cette relation (8) peut donc être comprise comme étant l'actualisation d'une connaissance *a priori* par une fonction de vraisemblance *(likelihood)* de nouvelles mesures :

$$posterior\left[p\left(\vec{x}|\vec{y},U\right)\right] \propto prior\left[p\left(\vec{x}|U\right)\right] likelihood\left[p(\vec{y}|\vec{x},U)\right] \qquad (9)$$

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:23 Page 26

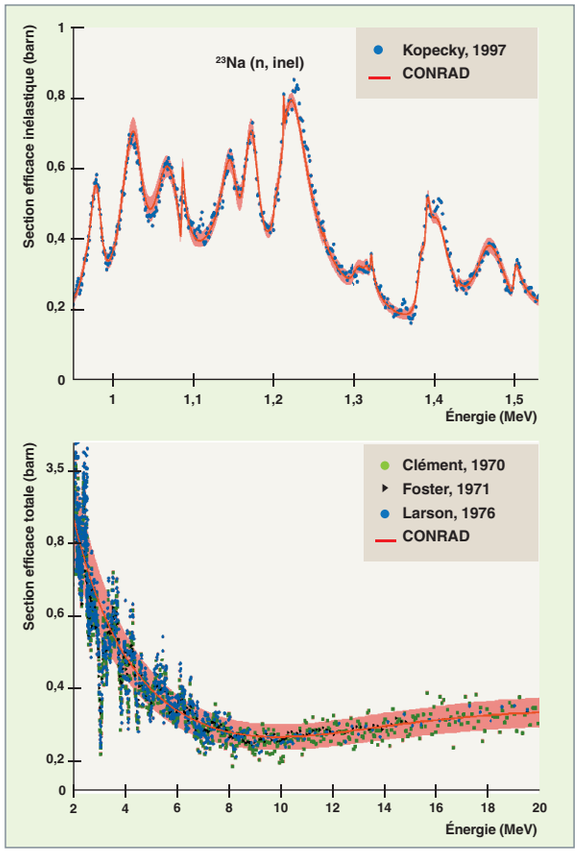


Fig. 8. Analyse de la section efficace inélastique et totale du sodium [14].

L'objectif de l'estimation des paramètres des modèles nucléaires est d'obtenir leur distribution *a posteriori* (valeurs moyennes et valeurs de la matrice de covariance, dans le cas d'une résolution analytique).

Dans l'évaluation de ces données, les mesures apportent, en outre, leur lot de paramètres propres (normalisation, résolution, etc.). Ces derniers sont utiles pour simuler l'expérience et ainsi rendre possible l'ajustement. Les paramètres de ce type sont dénommés « paramètres de nuisance ». L'influence des incertitudes des paramètres de nuisance sur la matrice de covariance des paramètres de modèle (résultant de l'ajustement) est considérable. C'est pourquoi des méthodes mathématiques originales de marginalisation [12][13] ont été développées dans CONRAD.

La figure 8 présente un exemple de marginalisation d'une normalisation expérimentale réalisée lors d'une analyse du sodium [14]. Les incertitudes obtenues pour cette analyse sans utiliser de méthodes de marginalisation auraient été totalement irréalistes : inférieures au %.

Les observables post-fission

Spectre et multiplicité des neutrons prompts de fission

Les caractéristiques des neutrons prompts de fission émis lors de la désexcitation des fragments de fission font partie des données essentielles utilisées dans les calculs de neutronique. Ces caractéristiques figurent, par conséquent, dans les bibliothèques internationales de données nucléaires. Des efforts importants, tant sur le plan expérimental que théorique, sont toujours en cours pour affiner notre connaissance du spectre des neutrons prompts émis. La photographie située en haut de la figure 9 montre un dispositif très simple utilisé récemment dans le cadre d'une collaboration CEA/IRMM [15].

Ce dispositif comprend une chambre à ionisation (dédiée à la détection des deux fragments de fission), ainsi qu'un scintillateur de type NE213, dédié à la détection des neutrons de fission. Une cible mince (quelques nanogrammes par cm^2) de Cf 252 était déposée au centre de la chambre. La mesure en coïncidence des deux fragments issus de la fission spontanée du californium et d'un neutron prompt de fission permet de

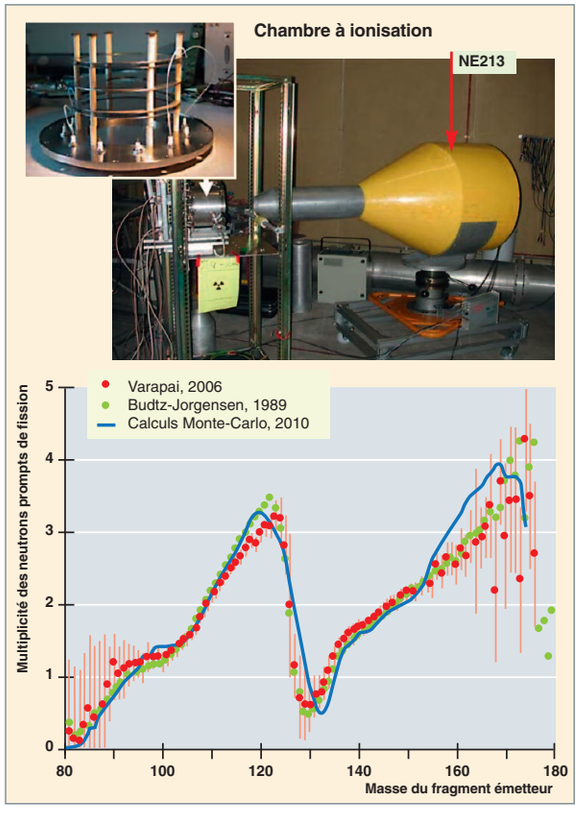


Fig. 9. Dispositif expérimental pour la mesure des neutrons prompts en coïncidence avec les fragments de fission [15]. La figure du bas montre la multiplicité mesurée [15, 16] des neutrons en fonction de la masse du fragment émetteur (courbe dite « en dents de scie ») que la simulation Monte-Carlo de la décroissance des produits de fission (courbe bleue [17]) reproduit correctement.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 27

déterminer des corrélations entre les propriétés du fragment émetteur (masse, énergie cinétique…) et les caractéristiques du neutron (multiplicité, spectre…).

Par ailleurs, une approche de type Monte-Carlo permettant de suivre en détail la décroissance des fragments par émission de neutrons et de rayons *gamma*, et ce sur l'ensemble de la distribution en masse, en charge et en énergie cinétique des fragments, a également été initiée par le CEA [17]. Pour les spectres de neutrons de fission, cette approche permet d'aller au-delà du modèle de Madland-Nix [18] (modèle sur lequel reposent la plupart des évaluations présentes dans les bibliothèques de données) qui ne considère qu'une vue globale du processus de désexcitation des fragments, sans prendre en compte explicitement toute la chaîne de décroissance. Les premiers résultats du code Monte-Carlo FIFRELIN sont très encourageants, comme le montre la partie inférieure de la figure 9 où le nombre moyen de neutrons prompts (multiplicité) émis en fonction de la masse du fragment émetteur a été calculé et comparé aux données expérimentales. La simulation de la totalité de la cascade de décroissance des fragments émis lors du processus de fission permet, en outre, d'accéder à d'autres observables utiles pour les applications : les spectres de rayonnements *gammas* prompts, leur multiplicité moyenne [19], ainsi que la distribution du nombre de quanta émis, les rendements de fission ou encore la composante prompte des énergies dégagées.

Rendements de fission

La connaissance des **rendements indépendants et cumulatifs*** de certains produits de fission émis lors des réactions de fission induite par neutrons est très importante pour la physique des réacteurs (calculs de puissance résiduelle, production des neutrons retardés par calcul de sommation, normalisation du taux de fission dans un réacteur, à partir de la mesure d'émission *gamma* d'un produit de fission…). Dans les bibliothèques de données nucléaires (JEFF, ENDF/B-VII ou JENDL), ces rendements présentent des différences importantes, avec parfois des incertitudes associées souvent trop grandes, compte tenu des exigences actuelles et des progrès accomplis, par ailleurs, sur d'autres données nucléaires (sections efficaces). Dans ce contexte, de nouvelles campagnes de mesures auprès du spectromètre de masse « Lohengrin » de l'Institut Laue Langevin de Grenoble (ILL) – fruit d'une large collaboration entre l'ILL, le Laboratoire de Physique Subatomique et de Cosmologie (LPSC) et le CEA – ont été initiées [20, 21].

Le spectromètre de masse « Lohengrin » (représenté schématiquement sur la partie gauche de la figure 10), est un instrument particulièrement bien adapté à l'étude des rendements des produits de fission, notamment grâce à son excellente résolution en masse. Sous l'action combinée d'un champ magnétique et d'un champ électrostatique, cet instrument permet la sélection des produits de fission en fonction de leur masse et de leur énergie cinétique. En rajoutant une chambre à ionisation à l'extrémité du spectromètre, l'information sur la charge nucléaire du produit de fission sélectionné devient accessible. Dès lors, il est possible d'étudier les rendements isotopiques et isobariques, ainsi que les distributions en énergie cinétique des produits de fission émis lors d'une réaction de fission induite par neutrons thermiques (n_{th}). Un exemple de distribution en masse des produits de fission issus de la réaction U 235 (n_{th},f) est donné sur la partie droite de la figure 10.

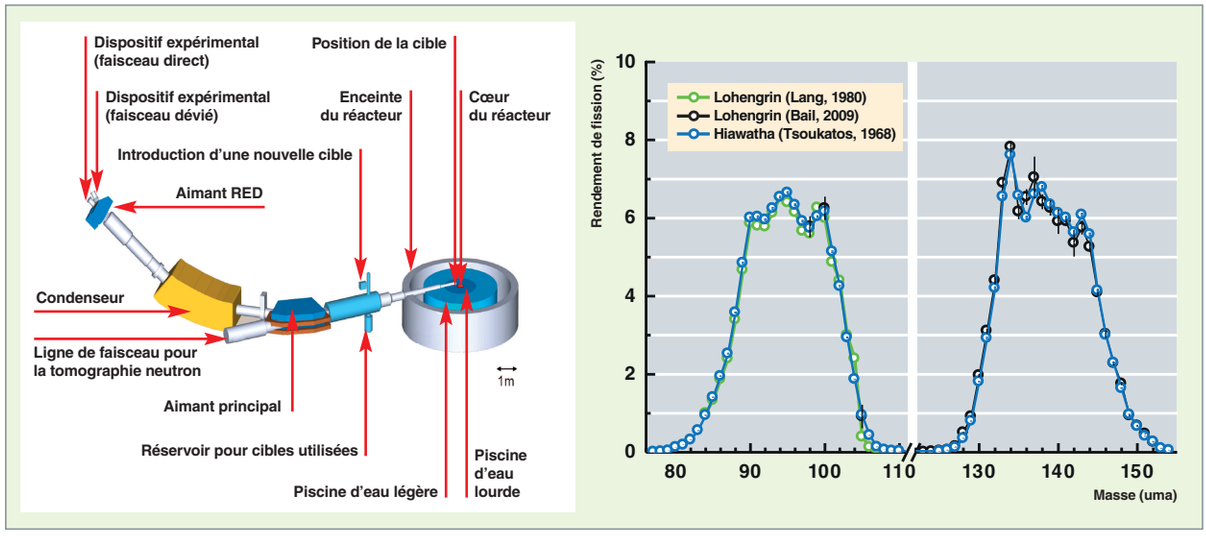


Fig. 10. Vue schématique du spectromètre de masse « Lohengrin » situé à l'Institut Laue Langevin de Grenoble (gauche). Distribution en masse des produits de fission émis lors de la réaction U 235 (n_{th}, f) [droite].

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 28

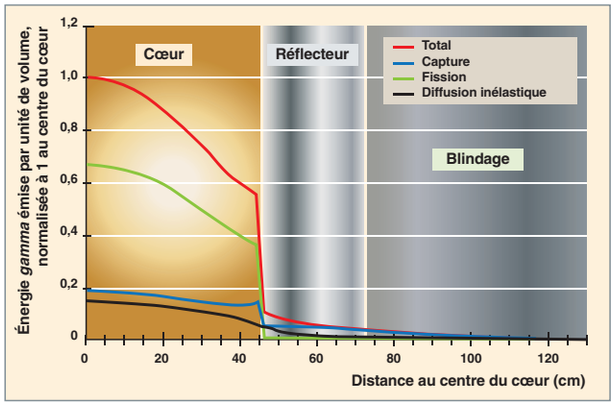


Fig. 11. Source de l'échauffement photonique dans un réacteur nucléaire.

L'amélioration de l'évaluation des échauffements nucléaires

L'échauffement des matériaux dans les réacteurs (**barres de commande*** en B_4C, Hf…, combustibles, baffle lourd, dispositifs expérimentaux) est un des paramètres dimensionnant l'EPR, le réacteur d'irradiation Jules Horowitz **RJH***, ainsi que les concepts de réacteurs de quatrième génération. On entend par échauffement nucléaire, au sens large, le dépôt d'énergie des particules chargées, suite aux processus nucléaires. Ainsi, on distingue : les dépôts locaux d'énergie des réactions neutroniques (fragments de fission, α des réactions (n, α), noyaux de recul...), les dépôts d'énergie photonique et les dépôts d'énergie des désintégrations radioactives *(α, β)*. Trois grandeurs intégrales seront concernées : **dose*** et **débit de dose*** pour les échauffements, **dpa*** et production de gaz *via* les réactions (n, α), fissions et décroissance radioactive β des actinides pour l'estimation des dommages d'irradiation dans les matériaux du réacteur.

La figure 11 montre les différentes sources de production primaire de l'échauffement photonique dans les composants du réacteur (cœur, réflecteur). Les *gammas* de fission sont responsables de plus de 60 % de l'échauffement photonique en cœur (20 % pour les captures et un peu moins pour les inélastiques). L'évaluation des données nucléaires de production *gamma* est un préalable à toute interprétation d'expériences intégrales et se fondera essentiellement sur des données et modèles de structure nucléaires et des données et modèles de désexcitations électromagnétiques des niveaux (qu'ils soient discrets ou dans le continuum).

Conclusion

Les données nucléaires pour la physique des réacteurs doivent permettre la caractérisation précise (données qualifiées et incertitudes réduites) des grandeurs physiques des systèmes nucléaires électrogènes (réacteurs et cycle de GEN II, III et IV), des réacteurs expérimentaux (RJH, ÉOLE, MINERVE, MASURCA, CABRI…) et des réacteurs de propulsion navale. Cela demande de poursuivre une activité à la fois de mesures (intégrales ou différentielles), d'évaluation (pour la base de données JEFF), de modélisation et de validation. La collaboration, au CEA, entre les directions s'avère être essentielle afin de mutualiser les compétences. Les défis associés à la future bibliothèque nucléaire JEFF-4 portent sur des modèles de réactions nucléaires qui comporteront de plus en plus d'ingrédients microscopiques, sur l'évaluation des données associées aux observables post-fissions, sur les données nucléaires relatives aux échauffements nucléaires et, enfin, sur l'évaluation des incertitudes.

Références

[1] A.J. Koning *et al. « Status of the JEFF Nuclear Data Library »*, Proceedings of the International Conference on Nuclear Data for Science and Technology, Nice, France, 2007.

[2] http://www.irmm.jrc.be/about_IRMM/laboratories/Pages/gelina_neutron_time_of_flight_facility.aspx

[3] G. Noguère, E. Rich, C. de Saint-Jean, O. Litaize, P. Siegler and V. Avrigeanu, "Average neutron parameters for hafnium", *Nucl. Phys.* A831, pp.106-136, 2009.

[4] G. Fioni *et al.*, *« The Mini-Inca project: Experimental study of the transmutation of actinides in high intensity neutron fluxes »*, Proceedings of the International Conference on Nuclear Data for Science and Technology, Tsukuba, Japan, 2001.

[5] O. Bringer, *Mesure des sections efficaces de capture et potentiels d'incinération des actinides mineurs dans les haut-flux de neutrons. Impact sur la transmutations des déchets*, thèse INP Grenoble, 2007.

[6] C. de Saint-Jean *et al.*, "Uncertainly Evaluation of Nuclear Reaction Model Parameters using Integral and Microscopic Measurements with the Conrad Code", *Proceedings of International Conference on Nuclear Data for Science and Technology (ND-2010)*, Jeju Island (Korea), April 2010.

[7] J. Raynal, *code ECIS95*, Note CEA-N-2772, 1994.

[8] A.J. Koning, S. Hilaire, M.C. Duijvestijn, "TALYS : Comprehensive nuclear reaction modeling", *Procceedings of the International Conference on Nuclear Data for Science and Technology*, Santa Fe, New Mexico, USA, 2004.

[9] A.M. Lane et R.G. Thomas, R-Matrix Theory of Nuclear Reactions, *Rev. Mod. Phys.*, 30,2, pp. 257-353, 1958.

[10] O. Bouland *et al.*, "Recent Advances in Modeling Fission Cross Section over Intermediate Structures", *Compound Nucleus Reactions,* 2009, Workshop (Bordeaux), *European Physical Journal*, 08001, p. 6, V2, 2010.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 29

Le projet JEFF de création d'une base de données nucléaires de référence internationale

Les données nucléaires de base (sections efficaces, spectres de particules émises…) initialement utilisées en **Physique des réacteurs nucléaires** proviennent de diverses compilations, parmi lesquelles la compilation anglaise **UKNDL** : *United Kingdom Nuclear Data Library* [1]. L'évaluation d'origine américaine **ENDF/B-IV**, délivrée en 1975 par le ***Nuclear Data Center*** du ***Brookaven National Laboratory***, a été également largement utilisée jusque dans le courant des années 80 [2]. Elle comporte les sections efficaces pour 90 nucléides allant de l'hydrogène au Curium 244.

C'est en 1981 que débute, sous les auspices de l'**Agence pour l'Énergie Nucléaire (AEN)** de l'**OCDE**, le ***« Joint Evaluated File Project »*** **(JEF)** regroupant les efforts des Européens et des Japonais pour constituer une base de données nucléaires de référence dans le domaine des applications de la fission nucléaire. Les domaines visés sont la physique du cœur, la radioprotection, le cycle du combustible, le démantèlement des réacteurs nucléaires.

La première ***« Joint Evaluated File »***, **« JEF-1 »**, est produite en 1985. Elle comporte les données nucléaires de base pour 300 nucléides. Elle est le fruit de la collaboration entre l'Autriche, la France, la République Fédérale d'Allemagne, l'Italie, le Japon, les Pays-Bas, le Royaume-Uni, la Suède et la Suisse. Les données de JEF-1 sont au format américain ENDF-5. Les bénéficiaires de JEF-1 sont exclusivement les membres de la *Banque de Données (Data Bank)* de l'AEN, [3].

Le **CEA**, sous l'impulsion initiale notamment de **Massimo Salvatores**, a activement travaillé à l'élaboration des évaluations successives : **JEF-1**, **JEF-2** [4], **JEFF-3** [5]. L'évaluation **JEFF-3** – ***Joint Evaluated Fission and Fusion File*** – résulte du regroupement en une « file » unique des évaluations **JEF** et **EFF** – ***European Fusion File*** –, l'élaboration de cette dernière ayant été conduite par **Harm Gruppelaar** de l'***Energy Research Center of the Netherlands*** **(ECN)** de Petten aux Pays-Bas à partir de 1985. Plus récemment, la ***European Activation File*** **(EAF)** contenant les valeurs de sections efficaces pour plus de 15 000 réactions d'activation induites par un neutron et dont l'élaboration a été initiée par **EURATOM/UKAEA**, a aussi été intégrée dans JEFF-3. Cette évaluation s'est conformée au format ENDF-6 américain.

Les contributions du CEA, son lien fort avec les applications électronucléaires et ses capacités d'essais physiques, constituent l'un des atouts du projet JEFF. Dans le futur, les objectifs principaux du projet seront de préserver ou d'améliorer les performances de la base de données pour les réacteurs actuels et en projet (EPR, **RJH***), et pour les applications RNR, en particulier **ASTRID***, de proposer des matrices de covariance réalistes couvrant les applications ci-dessus, de réaliser des avancées conséquentes sur la connaissance physique des principaux noyaux (Actinides, Produits de fission) répercutées dans des fichiers de qualité toujours plus grande.

Récemment, à l'initiative du *Laurence Livermore National Laboratory*, une réflexion internationale a été engagée pour définir un nouveau format modernisé et mondialement partagé des données nucléaires de base [6].

Bibliographie

[1] K. Parker, "The Aldermaston Nuclear Data Library", AWRE Report No. O-70/63 (September 1963); J. S. Story, R. W. Smith, "The 1981 Edition of the United Kingdom Nuclear Data Library: A Status Summary", September 1981.

[2] ENDF/B-IV General purpose file (Ed.) D. Garber: "ENDF/B Summary Documentation", BNL-17541, 2nd Edition, 1975.

[3] JEF Report 1, *Index of the JEF-1 Nuclear Data Library, Volume I, General Purpose File*, OECD NEA Data Bank, July 1985 ; http://www.oecd-nea.org/dbdata/nds_jefreports/

[4] JEFF Report 17, *The JEF-2.2 Nuclear Data Library*; OECD NEA Data Bank (April 2000).

[5] JEFF Report 22, *The JEFF-3.1.1 Nuclear Data Library*; OECD NEA Data Bank (May 2009).

[6] Working Party on International Nuclear Data Evaluation Co-operation (WPEC) Subgroup 38, *Beyond the ENDF format: A modern nuclear database structure:* http://www.oecd-nea.org/science/wpec/sg38/

[11] J.D. Cramer et J.R. Nix, "Exact Calculation of the Penetrability Through Two-Peaked Fission Barriers", *Phys. Rev.* C 2, pp. 1048–1057, 1970.

[12] C. de Saint-Jean *et al.*, "A Monte-Carlo Approach to Nuclear Model Parameter Uncertainties Propagation", *Nucl. Sci. Eng.* 161, 363, 2009.

[13] B. Habert *et al.*, "Retroactive Generation of Covariance Matrix of Nuclear Model Parameters Using Marginalization Techniques", *Nucl. Sci. Eng.* 166, p. 276, 2010.

[14] P. Archier *et al.*, "Modelling and Evaluation of Na 23 Cross Sections" *GEDEPEON Workshop on Nuclear Data Evaluation*, OECD/NEA databank, 2010.

[15] N. Varapai, *Développement d'un dispositif expériental basé sur la digitalisation des signaux et dédié à la caractérisation des fragments de fission et des neutrons prompts émis*, Thèse Université de Bordeaux I, 2006.

[16] C. Budtz-Jorgensen *et al.*, "Simultaneous Investigation of Fission Fragments and Neutrons in Cf 252 (sf)", *Nucl. Phys.* A 490, 307, 1988.

[17] O. Litaize and O. Serot, "Investigation of phenomenological models for the Monte-Carlo simulation of the prompt fission neutron and *gamma* emission", *Phys. Rev. C 82*, 054616, 2010.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 30

[18] D.G. Madland et R.J. Nix, “New calculation of prompt fission neutron spectra and average prompt neutron multiplicities”, *Nucl. Sci. Eng. 81*, p. 213, 1982.

[19] D. Régnier, O. Litaize, O. Sérot, *Preliminary Results of a Full Hauser-Feshbach Simulation of the Prompt Neutron and Gamma Emission from Fission Fragments*, Scientific Workshop on Nuclear Fission Dynamics and the Emission of Prompt Neutrons and *Gamma* Rays, Biarritz, France, 28-30 November 2012.

[20] A. Bail, *Mesures de rendements isobariques et isotopiques des produits de fission lourds sur le spectromètre de masse Lohengrin*, Thèse Université de Bordeaux I, 2009.

[21] A. Bail, O. Serot, L. Mathieu, O. Litaize, T. Materna, U. Koster, H. Faust, A. Letourneau, S. Panebianco, “Isotopic yield measurement in the heavy mass region for Pu 239 thermal neutron induced fission” *Phys. Rev. C 84*, 034605, 2011.

Cyrille de Saint-Jean, Olivier Sérot, Pascal Archier, David Bernard, Olivier Bouland, Olivier Litaize et Gilles Noguère
Département d'étude des réacteurs

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 31

Le traitement des données nucléaires

L'aboutissement du travail de mesures et d'analyse décrit précédemment est la production de fichiers d'évaluations nucléaires, plus simplement appelés **« évaluations* »**. Ces fichiers contiennent, sous la forme la plus compacte possible, les informations permettant de reconstruire toutes les données nucléaires nécessaires à la modélisation d'un système nucléaire. Ces évaluations partagent, en général, un même format informatique d'origine américaine qui a été adopté au plan international : c'est le format dénommé ENDF-n où n est un chiffre arabe spécifiant la version de ce format. Les évaluations produites actuellement sont au format ENDF-6 *(Evaluated Nuclear Data Format, version 6)* [1].

Les données présentes dans les évaluations

Les données présentes dans les évaluations concernent :
- Les réactions nucléaires induites par les neutrons ;
- les réactions nucléaires induites par les photons ;
- les interactions électromagnétiques induites par les photons dites « réactions photo-atomiques » ;
- les données de décroissance radioactive ;
- les rendements de produits de fission pour une fission spontanée ou induite par un neutron ;
- les données relatives au transport des particules chargées (protons, deutons, tritium, hélium 3…) ;
- les incertitudes associées.

Les réactions nucléaires induites par les neutrons

La majorité des données décrivant les réactions nucléaires induites par les neutrons se trouvent dans des sous-bibliothèques *(sub-libraries)* des fichiers internationaux d'évaluation. Ces données sont décrites dans le tableau 8. Elles sont fournies pour environ 400 nucléides dans le domaine d'énergie allant de 10^{-5} eV à au moins 20 MeV. Les bibliothèques d'évaluations les plus récentes sont : ENDF/B-VII [2], JEFF-3.1.1 [3], JENDL-4.0 [4], CENDL-3.1 [5], ROSFOND [6].

La descriptions des produits issus de la fission induite par capture d'un neutron nécessite des données supplémentaires : les **rendements de fission***, pour chaque noyau fissile. Ces rendements se trouvent dans les *« files »* dites *« Fission Yields »* (FY) des fichiers d'évaluation précédemment cités.

La figure 12 (page suivante) permet de comparer les rendements en nombre de masse des produits de fission pour une fission induite par un neutron thermique sur un noyau d'uranium 235 ou de plutonium 239.

Pour traiter les liaisons chimiques de certains noyaux liés dans un édifice moléculaire (hydrogène dans l'eau, hydrogène dans l'hydrure de zirconium, zirconium dans l'hydrure de zirconium…) dans le domaine thermique, des données de thermalisation peuvent être fournies dans des *« files »* spécifiques.

Toutes ces données servent essentiellement à calculer la **propagation des particules (neutrons, photons…)** et les **sources de particules secondaires**.

Tableau 8

Nature de l'information contenue dans la sous-bibliothèque « réactions nucléaires induites par les neutrons »	
Numéro de *« file »* (MF)	**Nature de l'information stockée**
1	Informations générales sur le contenu de l'évaluation.
2	Paramètres de **résonance***.
3	**Sections efficaces*** des neutrons.
4	Distributions angulaires des neutrons secondaires.
5	Distributions en énergie des neutrons secondaires.
6	Distributions énergie/angle des particules secondaires.
7	Données pour les lois de diffusion des neutrons thermiques.
8	Production d'états isomériques.
12	Multiplicité des photons issus des réactions neutroniques.
14	Distributions angulaires des photons issus des réactions neutroniques.
15	Distributions en énergie des photons issus des réactions neutroniques.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 32

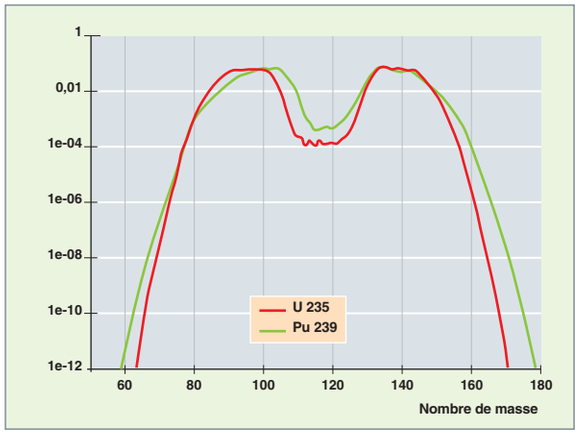


Fig. 12. Rendement de masse des produits de fission pour l'U 235 et le Pu 239.

Remarque

Il existe des évaluations particulières, contenant uniquement des sections efficaces, qui sont dédiées à des domaines d'application particuliers.

- **L'activation des structures sous flux neutronique**. On peut citer l'évaluation EAF 2010 [7] qui donne, pour 816 noyaux cibles, les sections efficaces de près de 66 000 réactions d'activation (sections efficaces partielles) pour un domaine d'énergie allant de 10^{-5} eV à 60 MeV.

- **La dosimétrie**. Dans l'évaluation IRDF-2002 *(International Reactor Dosimetry File)* [8] se trouvent des sections efficaces d'activation particulières utilisées, par exemple, pour l'évaluation de la fluence neutronique reçue par les structures sous irradiation.

Les réactions induites par les photons

Les photons peuvent interagir avec l'atome (interactions photo-atomiques [9]) ou avec le noyau (interactions photo-nucléaires [10]). Dans le domaine d'énergie allant jusqu'à 20 MeV, les interactions photo-atomiques sont largement prédominantes pour résoudre l'équation du **transport*** (effet photoélectrique, diffusions cohérentes et incohérentes et création de paires e^+, e^-). En revanche, les interactions photo-nucléaires sont à l'origine de sources secondaires de neutrons qu'il faut évaluer.

Ces données servent essentiellement à calculer la propagation des photons et les sources secondaires de neutrons.

Les données de décroissance radioactive

La matière peut contenir des radionucléides naturels ou devenir radioactive suite à des réactions nucléaires.

Les données relatives aux noyaux radioactifs sont les suivantes :

- Les sections efficaces des noyaux radioactifs, en distinguant l'état fondamental des états isomériques ;
- les modes de décroissance (β^-, β^+, C.E., T.I., α, …) ;
- les périodes de désintégration ou demi-vies ;
- les rapports de branchements entre plusieurs voies possibles de désintégration ;
- les rendements de fission spontanée ;
- les multiplicités neutroniques de la fission spontanée ;
- les énergies moyennes mises en jeu dans les transitions radioactives ;
- les intensités et les spectres en énergie des particules émises.

Ces grandeurs peuvent être trouvées dans différentes sous-bibliothèques. Il faut noter la création, en Europe, de la base de données NUBASE [11], *« A Database of Nuclear and Decay Properties »,* qui comporte les données de structure (spin, masse, parité…) pour plus de 3 000 noyaux. Un autre ouvrage de référence est *« Atomic Mass Evaluation »* [12].

Ces données sont indispensables pour calculer **l'évolution isotopique au cours du temps** d'un combustible.

Les données relatives au transport des particules chargées

Les particules chargées apparaissent à la suite des processus d'interaction nucléaire ou photo-atomique. Ces particules sont, par exemple, les *alpha* et *bêta* pour les processus radioactifs, les électrons de recul de l'effet Compton ou photo-électrique, les paires (électron-positon) issues de la matérialisation des rayons *gamma*. Ces phénomènes donnent naissance à ce que l'on appelle la **cascade électromagnétique** qui est une sorte de propagation arborescente d'électrons, de positons et de *gammas*.

Les données sont essentiellement :
- Les sections efficaces des réactions nucléaires induites par les particules chargées ;
- les sections efficaces de bremsstrahlung (ou rayonnement de freinage) ;
- les sections efficaces de diffusion des électrons/positons dans la matière ;
- les pouvoirs d'arrêt des électrons/positons et des ions dans la matière.

Ces données sont disponibles soit sous forme de valeurs tabulées (évaluations EEDL [13], pour les sections efficaces induites par électrons), soit déterminées par des programmes informatiques permettant de les calculer (ESTAR, PSTAR, ASTAR [14] pour les pouvoirs d'arrêt et les parcours des électrons, positons et *alphas*).

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 32

Les incertitudes sur les données nucléaires

Dans la mesure du possible, on cherche à attribuer une incertitude à la valeur calculée d'une grandeur physique. Cette incertitude résulte d'incertitudes de natures différentes : incertitudes sur les données physiques de base, incertitudes dues à la méthode de calcul, incertitudes sur les données technologiques, etc. La connaissance de ces incertitudes est cruciale pour la sûreté, l'optimisation d'un dimensionnement. Ces incertitudes ont aussi une incidence économique. Dans la plupart des calculs de neutronique, les incertitudes sur les données nucléaires de base sont prépondérantes, d'où l'intérêt de bien les connaître et de disposer de méthodes permettant d'évaluer leur impact sur l'incertitude associée à la grandeur physique recherchée.

C'est en vue de tels calculs d'incertitudes que sont constituées les sous-bibliothèques 30 à 40 des évaluations en format ENDF. Elles contiennent les données de covariances (c'est-à-dire d'incertitudes avec les corrélations éventuelles) relatives aux données nucléaires décrites dans les *« files »* 1 à 10 du tableau 8 (voir *supra*, p. 31).

Le traitement des données nucléaires

Pour être utilisables dans les codes de modélisation des systèmes nucléaires (codes de transport et d'évolution), les données nucléaires présentes dans les évaluations doivent généralement subir un **traitement** à la fois **physique**, **numérique** et **informatique**. Celui-ci découle de la nature des informations stockées dans les évaluations, de la nature du problème physique étudié et des méthodes numériques mises en œuvre dans les codes utilisés. Le produit final du traitement est une **bibliothèque de données physiques** (**bibliothèque d'application**) exploitable par le code de modélisation concerné.

La représentation des données nucléaires

De façon générale, les données nucléaires caractérisant l'interaction d'un neutron ou d'un photon avec un nucléide ou un élément dépendent de l'énergie E de la particule incidente et de la température T de la cible. Dans les bibliothèques d'application, la dépendance en énergie peut être représentée de façon continue (ponctuelle) ou discrète (multigroupe), alors que la dépendance en température est généralement traitée de façon continue.

Représentation ponctuelle

La donnée nucléaire D est représentée par un ensemble de couples de valeurs $(x_i, D(x_i))$ où x_i caractérise le paramètre dont dépend la donnée D et $D(x_i)$ est la valeur de la donnée pour ce paramètre. À cette description est associée une loi d'interpolation permettant de recalculer la donnée pour n'importe quelle valeur du paramètre x (énergie incidente ou température).

Représentation multigroupe

Cette représentation est associée à la dépendance en énergie (de la particule incidente) d'une donnée D. Le domaine en énergie est subdivisé en intervalles appelés « **groupes*** (d'énergie) », les bornes en énergie de ces intervalles formant alors un **maillage multigroupe***. Sur chacun de ces groupes g, la donnée nucléaire ponctuelle D est représentée par une valeur moyenne D^g appelée « valeur multigroupe ».

Dans le cas des sections efficaces, une autre représentation est aussi couramment utilisée : la représentation par tables de probabilité multigroupes.

Représentation par tables de probabilité multigroupes

Cette représentation [15] nécessite aussi la définition d'un maillage multigroupe. Sur chaque groupe, la section efficace ponctuelle est représentée par un certain nombre de couples (p_i, σ_i), σ_i décrivant les paliers pouvant être atteints par la section efficace dans ce groupe et p_i la probabilité que le palier σ_i soit atteint.

La figure 13 montre les trois représentations de la section efficace pour l'uranium 238.

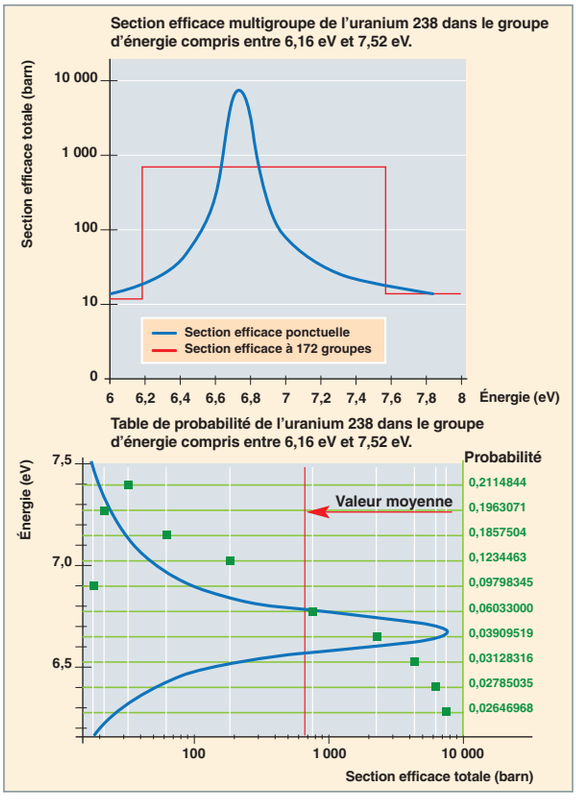


Fig. 13. Différentes représentations d'une section efficace : en haut, représentations ponctuelle et multigroupe ; en bas, représentations ponctuelle et par table de probabilité multigroupe.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 34

Les différentes étapes du traitement des données nucléaires

On distingue deux grandes étapes dans le traitement des données : la génération des données ponctuelles à une température donnée et la génération des données multigroupes. Pour les sections efficaces, il faut ajouter l'étape de génération des tables de probabilité.

Dans la suite sont détaillées les étapes du traitement sur deux types de données : les sections efficaces et les distributions en angle et en énergie des neutrons secondaires.

Le traitement des sections efficaces

Sections efficaces ponctuelles

Quelle que soit la représentation finale des sections efficaces dans un code de modélisation, la première étape de traitement est toujours la reconstruction des sections efficaces nucléaires ponctuelles en fonction de l'énergie du neutron incident E dans le référentiel du laboratoire pour un noyau-cible au repos, c'est-à-dire pour T = 0 Kelvin. Cette reconstruction est faite en utilisant divers formalismes nucléaires. Les plus usités sont le formalisme de Breit et Wigner simple niveau ou multiniveaux et le formalisme de Reich et Moore, approximations dérivant du formalisme général de la « matrice R » [16]. Les données de ces formalismes sont les paramètres des résonances stockés dans les évaluations. La grille de points en énergie sur laquelle la section efficace est reconstruite est associée à une interpolation linéaire permettant la reconstruction à n'importe quelle énergie E avec respect d'un critère de précision imposé (écart relatif entre la valeur interpolée et la valeur exacte).
La section efficace ponctuelle à T Kelvin est ensuite calculée en tenant compte de l'effet **Doppler*** par convolution de la section efficace à 0 Kelvin avec la distribution de vitesses du noyau cible.

Cette description est la plus précise. C'est celle qui est utilisée dans les codes de transport des neutrons par la méthode de Monte-Carlo « à énergie continue » pour décrire le domaine des **résonances résolues*** des nucléides.

La figure 14 montre l'effet Doppler sur les sections efficaces de l'uranium 238, en fonction de la température.

Sections efficaces multigroupes

La valeur moyenne sur chaque groupe g d'une section efficace est obtenue en pondérant sur le groupe g la section efficace ponctuelle par un flux de pondération Φ_w « représentatif » du spectre neutronique du système nucléaire à modéliser et ne dépendant que de l'énergie. Par exemple, pour traiter un réacteur à neutrons thermiques, le flux de pondération est, au-dessus de 1 MeV, un spectre de fission, entre 1 MeV et quelques eV un spectre de ralentissement et en dessous, un spectre thermique (maxwellien).

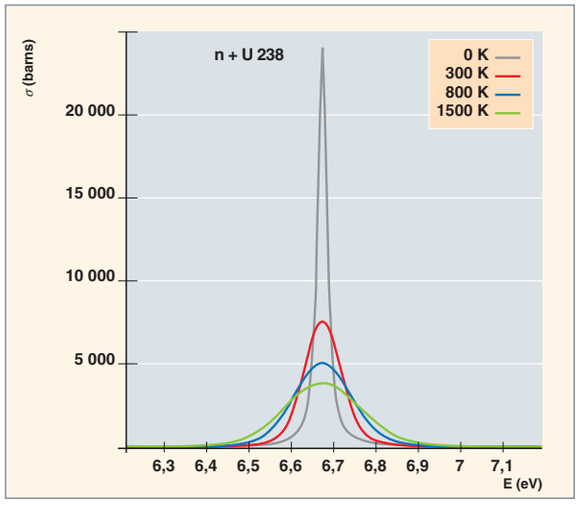


Fig. 14. Section efficace ponctuelle totale de l'uranium 238 à différentes températures.

$$\sigma^g = \frac{\int_g \sigma(E)\Phi_w(E)dE}{\int_g \Phi_w(E)dE}$$

Cette description est utilisée par les codes de transport multigroupes des particules, Monte-Carlo et déterministes. Cette technique très simple de mise en groupes peut s'avérer insuffisamment précise pour les nucléides résonnants quand le maillage en énergie est relativement large. Dans ce cas, les sections efficaces multigroupes sont recalculées dans le code de transport avec une fonction de pondération (appelée « facteur de structure fine ») prenant en compte les résonances de tous les noyaux présents dans le cas particulier à traiter. Ce problème sera repris dans le paragraphe traitant du phénomène d'autoprotection dont la modélisation nécessitera des données supplémentaires qui seront alors décrites.

Tables de probabilité

Les paliers des tables de probabilité (TP) sur un groupe g peuvent être vus comme les points d'une formule de quadrature sur le groupe g dont les poids sont proportionnels aux probabilités associées. Il y a donc différentes façons d'établir ces tables suivant le choix des fonctions pour lesquelles on impose que la formule de quadrature soit exacte. Lorsque l'on choisit de préserver les moments de la fonction section efficace totale, les tables de probabilité conduisent à des formules de quadrature de Gauss, ce qui leur confère des propriétés mathématiques très intéressantes.

Cette troisième représentation peut être utilisée dans les codes Monte-Carlo « à énergie continue » pour décrire le domaine des résonances non résolues des nucléides et dans les codes Monte-Carlo et déterministes multigroupes pour décrire tout le domaine en énergie.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 35

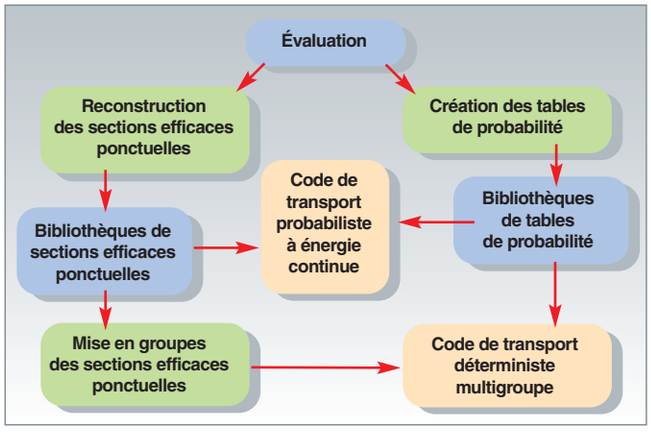


Fig. 15. Schéma simplifié d'élaboration des bibliothèques pour les codes de transport Monte-Carlo et déterministes.

La figure 15 donne le schéma simplifié d'élaboration des bibliothèques de sections efficaces pour les codes de transport Monte-Carlo et déterministes.

Le traitement des distributions en angle et en énergie des neutrons secondaires

Après une collision élastique ou inélastique, correspondant à un niveau d'excitation discret du noyau résiduel, entre un neutron et un nucléide, on peut déduire de la distribution en angle des neutrons secondaires dans le référentiel du centre de masse leur distribution en énergie dans le référentiel du laboratoire. Ces distributions sont données dans les évaluations nucléaires pour plusieurs valeurs de l'énergie incidente et sont associées à une loi d'interpolation.

Elles sont utilisées telles quelles ou transformées en plages équiprobables de cosinus de déviation μ par les codes de transport Monte-Carlo. La figure 16 décrit la distribution en angle du neutron diffusé par collision élastique sur un noyau d'oxygène 16 pour une énergie du neutron incident de 18 MeV dans le référentiel du laboratoire. L'axe des abscisses représente le cosinus de l'angle de déviation dans le référentiel du centre de masse (CdM). Les énergies indiquées sont les énergies correspondantes du neutron émergent dans le référentiel du laboratoire.

En ce qui concerne les codes de transport déterministes, la représentation la plus courante est le développement en polynômes de Legendre des matrices décrivant le transfert d'énergie d'un groupe vers un autre.

Le traitement des données de décroissance

Le traitement des données de décroissance conduit à l'élaboration des chaînes de **décroissance radioactive***. La figure 17 page suivante montre, par exemple, la chaîne de décroissance de l'uranium 238 qui conduit à l'isotope stable du plomb de nombre de masse 206. Les durées indiquées à gauche des nucléides donnent leur demi-vie.

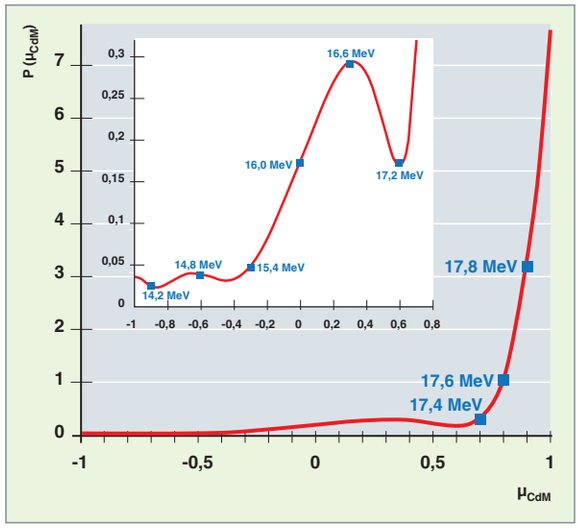


Fig. 16. Distribution en angle à la suite de la collision élastique d'un neutron de 18 MeV sur de l'O16.

Les systèmes de traitement des données nucléaires

Il existe dans le monde plusieurs systèmes de codes capables de réaliser partiellement ou en totalité ce traitement des données nucléaires neutron et *gamma*. On peut citer :

- Le système NJOY [17] élaboré au Centre de Los Alamos, distribué par RSICC *(Radiation Shielding Information and Computational Center)* d'Oak Ridge aux USA et l'OCDE/AEN :

- le code CALENDF [18] développé au CEA et également distribué par l'OCDE/AEN ;

- le système AMPX [19] développé au centre d'Oak Ridge et distribué par RSICC *(Radiation Shielding Information and Computational Center)* d'Oak Ridge aux USA ;

- le système PREPRO [20], maintenu et distribué par l'Agence Internationale de l'Énergie Atomique, à Vienne, en Autriche.

Le développement du système de traitement des données nucléaires pour les codes de transport, d'évolution et de radioprotection, GALILÉE [21], complète l'effort déployé au CEA (avec le développement du système CONRAD) pour disposer d'un ensemble d'outils propres visant à évaluer et traiter les données nucléaires et leurs incertitudes qui sont à la base de toute modélisation neutronique. Le système GALILÉE s'appuie sur le nouveau code TREND *(Treatment and Representation of Evaluated Nuclear Data)* dont les modèles physiques sont essentiellement issus du code CALENDF.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 36

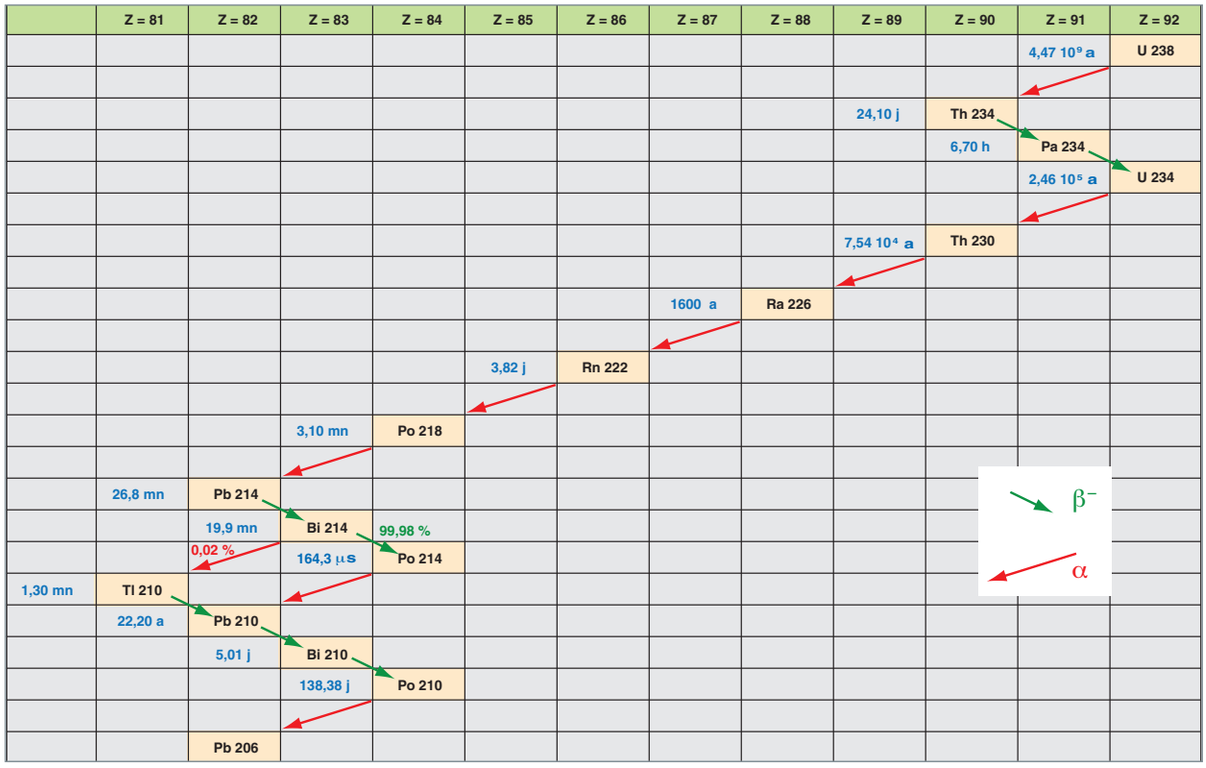


Fig. 17. Schéma simplifié de la chaîne de décroissance radioactive de l'uranium 238.

Avec les outils CONRAD et GALILÉE, le CEA se dote donc d'un dispositif complet et cohérent permettant à la fois de créer et de traiter les données nucléaires, ce qui fait de lui un acteur majeur du domaine.

Références

[1] *ENDF-6 Formats Manual*, Edited by A. Trkov, M. Herman and D.A. Brown, BNL-90365-2009 Rev.2, 2011.

[2] M. B. Chadwick *et al.*, « ENDF/B-VII.0: Next Generation of Evaluated Nuclear Data Library for Nuclear Science and. Technology », Nuclear Data Sheets, 107, 2931-3060, 2006.

[3] A. Santamarina *et al.*, *The JEFF-3.1.1 Nuclear Data Library - Validation Results from JEF-2.2 to JEFF-3.1.1*, JEFF Report 22, OECD 2009 NEA No 6807, 2009.

[4] K. Shibata *et al.*, « JENDL-4.0: A New Library for Nuclear Science and Engineering », *J. Nucl. Sci. Technol.* 48(1), 1-30, 2011. http://www.jstage.jst.go.jp/article/jnst/48/1/48_1/_article/

[5] R. Xu *et al.*, « The Updated Version of Chinese Evaluated Nuclear Data Library (CENDL-3.1) », *International Conference on Nuclear Data for Science and Technology*, Jeju Island, Korea, April 26-30, 2010.

[6] http://www-nds.iaea.org/ndspub/download-endf/ROSFOND-2010/backup/

http://www.ippe.ru/podr/abbn/english/libr/rosfond.php

[7] J.C. Sublet *et al.*, *The European Activaion File : EAF-2010 neutron-induced cross section library*, EASY documentation Series CCFE-R (10) 05.

[8] http://www-nds.iaea.org/irdf2002/

[9] http://www-nds.iaea.org/indg_phat.html

[10] http://www-nds.iaea.or.at/photonuclear/

[11] G. Audi, O. Bersillon, J. Blachot, A.H. Wapstra, « The NUBASE evaluation of nuclear and decay properties », *Nuclear Physics A*, vol. 729, 2003, pp. 3-128.
http://csnwww.in2p3.fr/amdc/web/nubase_fr.html

[12] G. Audi, A.H. Wapstra et C. Thibault, « The AME2003 Atomic Mass Evaluation », *Nucl. Phys.* Vol. 729, Issue 1, pp. 129-676, 2003.

[13] http://www.oecd-nea.org/dbdata/data/manual-endf/nds_eval_eedl.pdf

[14] http://physics.nist.gov/PhysRefData/Star/Text/contents.html

[15] P. Ribon, J. M. Maillard, *Les Tables de probabilité. Application au traitement des sections efficaces pour la neutronique*, Note CEA-N-2485, CEA/Saclay, France, 1986.

[16] A.M. Lane and R.G. Thomas, « R-Matrix Theory of Nuclear Reactions », *Rev. Mod. Phys.*, 30, 2, pp. 257-353, 1958.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 37

Le traitement des sections efficaces pour les codes de physique des réacteurs nucléaires au CEA

Pour les besoins de ses premiers codes de calcul de neutronique le CEA a développé des outils de traitement des sections efficaces. Parmi ceux-ci, on peut citer les codes [1] :

- **MICRAL** et **CELADON** ayant pour fonction l'élaboration de sections efficaces multigroupes à partir de compilations de données de base ;
- **AUTOSECOL** regroupant deux codes antérieurement écrits, **CARLRÉSONNE** et **SECOL** dédiés au traitement des sections efficaces dans le domaine des résonances ;
- **SEFAC**, dérivé de **CARLRÉSONNE**, calculant des facteurs d'autoprotection dans le domaine des résonances et utilisé pour le calcul des réacteurs à neutrons rapides ;
- **SEMUL** et **MODERATO** chargés d'élaborer des matrices de thermalisation ou de fonctions utilisées dans des modèles de thermalisation.

C'est au début des années 80 que le système de traitement des sections efficaces **NJOY** [2], produit par **Robert E. MacFarlane** du Los Alamos National Laboratory (LANL) aux États-Unis et distribué par le ***Radiation Shielding Information Center*** (RSIC aujourd'hui RSICC : *Radiation Safety Information Computational Center*) d'Oak Ridge (ORNL), a été introduit au CEA. Sous l'impulsion de **Jean Gonnord**, c'est sur la base du système NJOY que le CEA développera et maintiendra jusque dans les années 1990 le système de traitement des sections efficaces baptisé **THÉMIS** [3], assurant d'une part la cohérence des sections efficaces (origine, traitement : reconstruction, élargissement Doppler, mise en groupes…) entre les voies de calcul de transport déterministe et probabiliste Monte-Carlo tant pour les applications de neutronique (REP et RNR) que de radioprotection et d'autre part offrant des fonctionnalités inédites de consultation, de manipulation, de conversion de format de stockage ainsi que de visualisation sur écran des données nucléaires traitées.

C'est à la même époque que le code français de traitement des évaluations nucléaires, **CALENDF** [4], a vu le jour. Ce code, développé au CEA par **Pierre Ribon**, est essentiellement dédié à la production de tables de probabilité de sections efficaces dans les domaines résolu et non résolu des résonances. L'originalité de ce code réside dans le traitement du domaine non résolu par reconstruction d'un ou plusieurs échantillons de « pseudo sections efficaces ponctuelles », et dans la méthode d'établissement des tables de probabilité par conservation des moments des sections efficaces. Ce code, toujours en développement, est distribué en France depuis 2002 par l'**OCDE/AEN** [5]. Les premiers codes de transport utilisant **CALENDF** ont été le code déterministe **ECCO** [6] pour sa méthode de sous-groupes et le code de Monte-Carlo **TRIPOLI-3** [7] pour le traitement du domaine non résolu.

Le système NJOY et le code CALENDF sont encore, aujourd'hui, les outils de production des bibliothèques des codes de transport et d'évolution du CEA.

Cependant, en raison notamment de l'évolution de l'environnement informatique et des exigences accrues en matière de maîtrise des outils d'évaluation et de traitement des données nucléaires de base, de cohérence, de traçabilité et de souplesse dans l'utilisation qui en est faite, le CEA est conduit à refondre son système de traitement des données nucléaires dédiées au calcul des réacteurs nucléaires : **GALILÉE** est le nom de ce nouveau système fondé sur le code **TREND** en cours de développement.

Références

[1] P. Reuss, *Traité de Neutronique*, p. 648, Paris, Hermann, 1985.

[2] R. E. MacFarlane, D. W. Muir, R. M. Boicourt, *The NJOY Nuclear Data Processing System*, LA-9303-M / ENDF-324, LANL, May 1982.

[3] G. Dejonghe, J. Gonnord, A. Monnier, J. C. Nimal, "THEMIS-4: A Coherent Punctual and Multigroup Cross Section Library for Monte Carlo and SN Codes from ENDF/B4", May 1983 ; Seminar on *NJOY-91 and THEMIS for the processing of Evaluated Nuclear Data Files*, OCDE/AEN, Saclay, April 7-8, 1992.

[4] P. Ribon, J. M. Maillard, *Les tables probabilité. Application au traitement des sections efficaces pour la neutronique*, Note CEA-N-2485, CEA/Saclay, France, 1986.

[5] J.C. Sublet, P. Ribon, M. Coste-Delclaux, CALENDF-2010: *User Manual*, Rapport CEA-R-6277, 2011.

[6] G. Rimpault *et al.*, "Algorithmic Features of the ECCO Cell Code for Treating Heterogeneous Fast Reactor Subassemblies", *International Topical Meeting on Reactor Physics and Computations*, Portland, Oregon, May 1-5, 1995.

[7] S. H. Zheng, T. Vergnaud, J.C. Nimal, "Neutron cross section probability tables in TRIPOLI-3 Monte Carlo code", *Nuclear Science and Engineering*, 128, pp. 321-328, 1998.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 38

[17] R.E. MacFarlane, D.W. Muir, D.C. George, *NJOY99.0 : Code System for Producing Pointwise and Multigroup Neutron and Photon Cross-Sections from ENDF/B Data*, PSR-480/NJOY99.0 – *RSICC Peripheral Shielding Routine Collection* – Contributed by Los Alamos National Laboratory - 2000.

[18] J.C. Sublet, P. Ribon, M. Coste-Delclaux, *CALENDF-2010: User Manual*, CEA-R-6277, 2011.

[19] M. E. Dunn and N. M. Greene, "AMPX-2000: A Cross-Section Processing System for Generating Nuclear Data for Criticality Safety Applications", *Trans. Am. Nucl. Soc.* 86, pp. 118-119, 2002.

[20] D. E. Cullen, "PREPRO2012: 2012 ENDF/B Pre-processing Codes", IAEA-NDS-39, Rev. 15, octobre 2012.

[21] M. Coste-Delclaux, « GALILÉE: A nuclear data processing system for transport, depletion and shielding codes », *International Conference on the Physics of Reactors "Nuclear Power: A Sustainable Resource"*, Casino-Kursaal Conference Center, Interlaken, Switzerland, September 14-19, 2008.

Mireille Coste-Delclaux, Cheikh M. Diop,
Cédric Jouanne et Claude Mounier
Département de modélisation des systèmes et des structures

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 39

Les données nucléaires de haute énergie : la spallation

Dans un réacteur de fission et même de fusion, les réactions nucléaires impliquent essentiellement des neutrons dont l'énergie s'étend, au grand maximum, jusqu'à une vingtaine de MeV. C'est pourquoi, jusqu'à une date récente, les bibliothèques de données nucléaires ne concernaient que ces réactions.

Il existe cependant d'autres applications qui mettent en jeu des réactions nucléaires de plus haute énergie ou d'autres types de particules. C'est le cas, par exemple, des réacteurs sous-critiques assistés par accélérateurs (**ADS***), envisagés pour la transmutation des déchets nucléaires ou comme outils d'irradiation, et des sources de spallation qui fournissent des neutrons pour les besoins de la recherche sur les matériaux. Ces systèmes font appel à un faisceau de protons accélérés jusqu'à une énergie de l'ordre du GeV bombardant une cible constituée d'un élément lourd (tungstène, mercure, plomb-bismuth). Il s'y produit alors un processus appelé « **spallation*** », au cours duquel de nombreuses particules, essentiellement des neutrons, sont éjectées laissant un noyau plus petit que le noyau initial. Certaines des particules émises ont une énergie suffisamment élevée pour induire une nouvelle réaction avec un noyau voisin (fig. 18). De proche en proche, dans une cible épaisse, cela conduit à la génération d'un grand nombre de neutrons dont la plupart vont s'échapper de la cible. On peut ainsi produire des flux intenses de neutrons utilisables directement, après ralentissement, dans une source de spallation ou pour compenser la sous-criticité dans un ADS.

Dans ces systèmes se posent des problèmes spécifiques dus aux réactions de haute énergie qui ont lieu dans la cible, mais aussi dans les matériaux environnants. Dans la cible, chaque proton incident, directement ou lors des réactions secondaires, conduit à la production, par spallation, de près de 25 neutrons et 3 noyaux résiduels en moyenne, dont la plupart sont radioactifs. Les noyaux de période courte posent un problème de radioprotection en cas d'intervention ou d'accident : en particulier, les éléments volatils dans le cas d'une cible liquide. Les noyaux de période longue doivent être pris en compte dans l'estimation de la radio-toxicité à long terme. Enfin, les neutrons créés lors des réactions de spallation ont un spectre en énergie s'étendant jusqu'à des valeurs très supérieures à ce que l'on trouve dans des réacteurs, même de fusion. Bien qu'en proportion du nombre total de neutrons, ils soient peu nombreux, les neutrons de haute énergie sont susceptibles de poser des problèmes de blindage.

Tous ces aspects doivent être évalués de façon précise dès la conception. Pour cela, on utilise généralement des codes de simulation dits « codes de transport de haute énergie » qui décrivent la propagation, le ralentissement et les interactions de toutes les particules, incidentes et secondaires, dans l'ensemble du système. Pour traiter les interactions nucléaires, le code de transport fait intervenir les probabilités de réaction **(sections efficaces*)** et les caractéristiques (nature, énergie, angle) de toutes les particules et noyaux produits dans ces réactions. Deux gammes différentes en énergie doivent être distinguées : les énergies intermédiaires, entre 20 et 200 MeV, et les hautes énergies au-delà. Aux énergies intermédiaires, les codes utilisent, comme à plus basse énergie, des bibliothèques de données évaluées qui contiennent des données tabulées de sections efficaces, spectres en énergie et angles des particules légères et taux de production des résidus pour toute la gamme d'énergie et de noyaux considérés. En fait, les bases de données sont produites grâce à des codes qui contiennent un ensemble de modèles de réactions nucléaires dont les paramètres sont ajustés sur des expériences bien

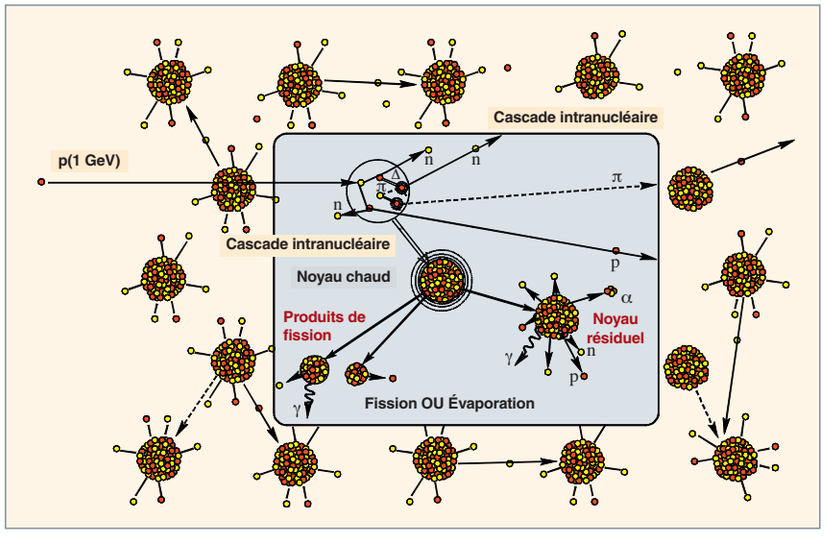


Fig. 18. Le mécanisme de la spallation dans une cible épaisse.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 40

choisies et qui produisent ensuite l'ensemble des données sur toute la gamme en énergie et pour toutes les voies de réaction. En revanche, aux énergies supérieures à 200 MeV, le nombre de voies de réaction possibles est trop important pour utiliser des bibliothèques : les sections efficaces et les caractéristiques des particules émises sont alors calculées à chaque interaction par des modèles de physique nucléaire inclus directement dans le code de transport. L'amélioration de la qualité et de la fiabilité des codes de simulation nécessite, dans les deux cas, à la fois des mesures expérimentales de qualité qui permettent de contraindre les modèles de physique décrivant les réactions, des développements théoriques permettant d'améliorer ces modèles et des validations, grâce à des mesures intégrales.

La modélisation de la spallation

La spallation est généralement décrite comme un processus en deux étapes : la première, rapide (quelques 10^{-22}s), est une succession de collisions entre le projectile et les nucléons du noyau, comme des chocs entre boules de billard. On l'appelle « cascade intranucléaire ». Ces collisions conduisent à l'éjection d'un certain nombre de particules énergétiques (nucléons, **pions***). À la fin de ce processus, l'énergie incidente est distribuée sur l'ensemble des nucléons du noyau, et celui-ci se retrouve dans un état excité. La seconde étape, beaucoup plus lente, est la désexcitation. Elle se traduit par l'émission de particules de basse énergie (des neutrons surtout, mais aussi des protons, des *alphas* ou même des fragments plus lourds). Dans le cas des noyaux lourds, la fission en deux noyaux plus petits entre aussi en compétition avec l'émission de particules. En fin de désexcitation, des photons *(gammas)* sont aussi émis.

La modélisation consiste donc, le plus souvent, à coupler deux modèles : un modèle de cascade intranucléaire et un modèle de désexcitation. Dans le premier, les ingrédients principaux sont l'interaction nucléon-nucléon, bien connue, le potentiel retenant les nucléons dans le noyau et le traitement semi-classique du principe de Pauli. La désexcitation est traitée par un modèle statistique qui évalue la probabilité d'émission d'une particule, à partir des états disponibles et de la probabilité de la réaction inverse (capture de la particule par le noyau). Dans le cas de la fission, interviennent les barrières de fission et la façon dont se séparent les deux fragments. Ces ingrédients peuvent être des paramétrisations phénoménologiques ou peuvent être obtenus à partir de modèles plus microscopiques.

L'objectif est d'aboutir à un couple de modèles dont les ingrédients et les paramètres auront été déterminés à partir de l'analyse de données expérimentales, puis confrontés à l'ensemble des données disponibles afin de les valider et de les fixer une fois pour toutes.

Les mesures élémentaires

On ne peut atteindre cet objectif que si l'on a une bonne compréhension des mécanismes de la réaction de spallation. Pour cela, il faut disposer de données élémentaires expérimentales de qualité couvrant l'ensemble du domaine en énergie et en masse. Aux énergies considérées, contrairement à ce qui se passe à plus basse énergie où les effets de structure jouent un plus grand rôle, les variations selon la nature du noyau ou selon l'énergie de la réaction sont lentes. On peut donc se contenter d'explorer quelques régions du tableau périodique des éléments, avec des pas en énergie relativement grands. En revanche, si l'on veut bien maîtriser les différentes étapes du mécanisme, il est nécessaire d'avoir des données concernant les taux de production et les caractéristiques de tous les produits de la réaction (neutrons, particules chargées, résidus). L'idéal serait, en fait, de mesurer simultanément tous ces produits, événement par événement. De nombreuses expériences ont été réalisées dans le cadre de programmes européens permettant une coordination des résultats. Les différentes équipes du CEA ont plus particulièrement participé à l'obtention de données concernant la production de neutrons sur l'accélérateur SATURNE (désormais fermé) et la mesure des résidus auprès de l'accélérateur du GSI en Allemagne (fig. 19). Pour la production des noyaux résiduels, des avancées considérables ont été réalisées grâce à la technique de la cinématique inverse qui a permis de mesurer simultanément l'ensemble des noyaux produits dans une réaction et leur vitesse de recul. Cette méthode utilise un faisceau d'ions lourds bombardant une cible de protons, en fait de l'hydrogène liquide. L'avantage est que les noyaux ainsi produits sont fortement focalisés vers l'avant, du fait de la vitesse d'entraînement. Il devient alors facile de les identifier grâce à une succession d'aimants et de détecteurs. Les distributions isotopiques mesurées à GSI ont notamment aidé à tester le comportement des modèles nucléaires, en ce qui concerne la compétition entre l'émission de neutrons, de particules chargées et la fission. On est passé ensuite à une seconde génération d'expériences, toujours en cinématique inverse au GSI, de mesure simultanée de différents produits de la réaction, par exemple résidus et particules légères, qui permettent d'accéder aux caractéristiques du noyau avant désexcitation et, par conséquent, de mieux contraindre séparément les modèles de cascade et de désexcitation.

Plus généralement, la qualité des données expérimentales a permis une meilleure compréhension du mécanisme de la réaction et des raisons des défauts des modèles existants. De nouveaux modèles ont donc été développés en collaboration avec des théoriciens, en particulier, le modèle de cascade intra-nucléaire de Liège, INCL4, et le modèle de désexcitation ABLA, du groupe de GSI à Darmstadt. Cette combinaison INCL4-ABLA a été introduite dans des codes de transport de haute énergie, couramment utilisés pour la conception des ADS et se trouve donc maintenant disponible pour l'ensemble de la communauté. Récemment, une inter-comparaison des

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 41

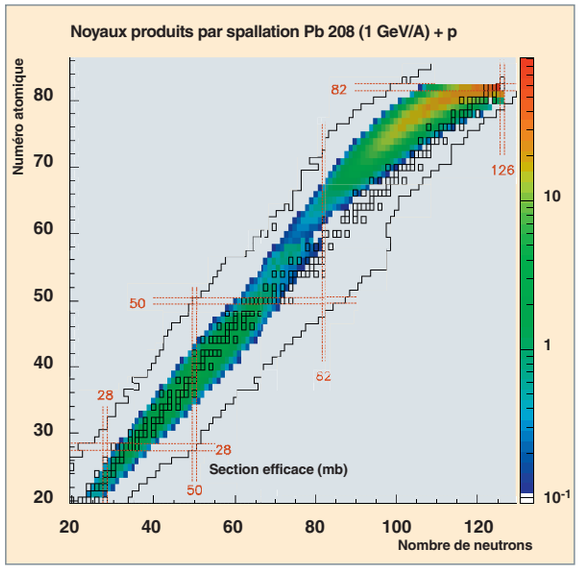


Fig. 19. Les nombreux noyaux dont le taux de production a été mesuré dans une expérience utilisant un faisceau de plomb de 1 GeV par nucléon au GSI, Darmstadt. Les carrés représentent les noyaux stables.

modèles de spallation utilisés dans les codes de transport, organisée par l'AIEA, a montré que INCL4-ABLA était le modèle donnant le meilleur accord avec l'ensemble des données disponibles, en particulier en ce qui concerne les taux de production des résidus.

Les mesures intégrales

Une fois les modèles de physique intégrés dans les codes de transport, il est nécessaire de tester ceux-ci sur des expériences intégrales afin d'évaluer leur degré de prédictibilité des grandeurs utiles pour les applications. On fait alors des mesures sur des cibles, dites « épaisses », représentatives d'une cible de spallation. Par exemple, une expérience de mesure des produits de fission volatils sur une cible épaisse de Plomb-Bismuth, réalisée au CERN, a confirmé que les nouveaux modèles reproduisent de façon bien meilleure que les anciens les taux de production observés. De même, les spectres en énergie des neutrons s'échappant d'une cible épaisse sont relativement bien reproduits par les modèles. Cela indique que les calculs de fuites de neutrons de haute énergie, importants pour les problèmes de blindage et de radioprotection, peuvent être considérés comme suffisamment fiables. La cible de spallation, MEGAPIE, en plomb-bismuth, qui a été irradiée avec succès pendant quatre mois par le faisceau intense de protons de la source SINQ à l'Institut Paul Scherrer de Zürich, a été le premier test en vraie grandeur d'une cible en métal liquide telle que celles envisagées pour les ADS. Après une période de décroissance de la radioactivité, de nombreux échantillons ont été prélevés et sont en cours d'analyse, ce qui permettra de répondre aux questions concernant les résidus produits et les dommages causés aux matériaux.

L'ensemble de ces études, originellement motivées par les ADS et les sources de spallation, devrait conduire, à terme, à des codes de simulation fiables pouvant être utilisés dans de nombreux autres domaines : spatial, pour la radioprotection des astronautes, les dégâts sur les composants électroniques (en effet, le rayonnement cosmique est constitué majoritairement de particules légères dont le spectre présente un maximum autour du GeV), médical dans le cadre des traitements par hadronthérapie ou la production d'isotopes, astrophysique, radioprotection auprès des accélérateurs de particules…

Bibliographie

Filges (D.) and Goldenbaum (F.), *Handbook of Spallation Research Theory, Experiments and Applications*, Wiley VCH, Berlin, 2010.

Gudowski (W.), "Accelerator-driven Transmutation Projects. The importance of Nuclear Physics Research for Waste Transmutation", *Nuclear Physics A* 654, pp. 436c-457c,1999.

Aït Abderrahim (H.), Baeten (P.), De Bruyn (D.), Heyse (J.), Schuurmans (P.) and Wagemans (J.), "MYRRHA, a Multi-purpose Hybrid Research Reactor for High-end Applications", *Nuclear Physics News*, vol. 20, Issue 1, pp. 24-28, 2010.

Bauer (G.S), Salvatores (M.) and Heusener (G.), "MEGAPIE, a 1 MW pilot experiment for a liquid metal spallation target", *Journal of Nuclear Materials*, 296, pp. 17-33, 2001.

Boudard (A.), Cugnon (J.), Leray (S.) and Volant (C.), "Intranuclear cascade model for a comprehensive description of spallation reaction data", *Physical Review* C 66, 044615 -1 to 28, 2002.

Leray (S.) *et al.*, "Results from the IAEA Benchmark of Spallation Models", *Journal of the Korean Physical Society*, 59(2), pp. 791-796, 2011.

Zanini (L.) *et al.*, "Experience from the post-test analysis of MEGAPIE", *Journal of Nuclear Materials*, 415(3): pp. 367-377, 2011.

Leray (S.), "Specific features of particle/matter interaction for accelerator-driven sub-critical reactors", *Materials Issues for Generation IV Systems: Status, Open Questions and Challenges*, (Editors: V. Ghetta, D. Gorse, D. Mazière, V. Pontikis), pp. 559-573, 2008.

Sylvie Leray
Institut de recherche sur les lois fondamentales de l'univers.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 42

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 42

Sur les fondements de l'équation du transport

La propagation des neutrons dans un milieu donné relève d'une famille de processus de transport rassemblant des phénomènes aussi variés que la propagation de la lumière (photons) dans la matière stellaire ou dans l'atmosphère terrestre, la dynamique des gaz raréfiés, la physique des plasmas, l'orientation dans l'espace des macromolécules, le trafic autoroutier, etc., comme l'exposent **J. J. Duderstadt** et **W. R. Martin** dans leur ***Transport Theory*** [1]. Ces processus sont régis par les **équations de la théorie cinétique** (à ne pas confondre ici avec les équations de la cinétique des réacteurs nucléaires). On reprend, dans ce qui suit, les grandes lignes de l'exposé que font ces deux auteurs sur le lien entre la théorie du transport et la théorie cinétique, car il présente l'intérêt de replacer l'équation du transport dans un cadre plus général et d'en saisir les fondements. Par ailleurs, il montre la connexion existant entre les formulations stochastique et déterministe du problème du transport reliant celles-ci aux mesures d'une grandeur physique d'intérêt effectuées lors d'une expérience.

L'**équation de Boltzmann** et l'**équation du transport des neutrons** sont deux exemples d'équations de la théorie cinétique. En fait, l'équation du transport des neutrons est un cas particulier de l'équation de Boltzmann dans lequel un « gaz » de neutrons se déploie dans un « gaz » de nucléides. Les processus de transport des neutrons sont caractérisés par le fait que les particules (molécules de gaz ou neutrons) ont des **libres parcours moyens*** bien plus grands que la portée du potentiel d'interaction entre particules (réaction nucléaire, voir *infra*, p. 9), qui dès lors, est supposé ponctuel.

L'équation de Boltzmann, que l'on établit souvent directement, peut être dérivée, de plusieurs manières, d'une équation aux dérivées partielles de la mécanique statistique plus générale, l'**équation de Liouville**, elle-même établie à partir des **équations de Hamilton**. On passe ainsi des équations microscopiques qui gouvernent le mouvement de chacune des particules d'un système physique donné aux équations de la théorie cinétique permettant d'accéder à des grandeurs macroscopiques « moyennes » et mesurables expérimentalement.

La discipline cadre théorique de ce passage du microscopique au macroscopique est la **mécanique statistique de non-équilibre** *("Nonequilibrium Statistical Mechanics").*

Pour préciser le lien entre ces deux niveaux de description de l'état d'un système physique, on considère un système physique constitué de N particules. Chaque particule i de cet ensemble est caractérisée, à un instant donné t, par sa position $\vec{r}_i(t)$ et sa vitesse $\vec{v}_i(t)$. On note $\Gamma_N(t)$ l'ensemble des positions et des vitesses des N particules à l'instant t : $\Gamma_N(t) \equiv \{\vec{r}_i(t), \vec{v}_i(t)\}_{i=1,N}$ où les $\vec{r}_i(t)$ et les $\vec{v}_i(t)$ sont gouvernées par les lois de la mécanique. Soit G une grandeur physique macroscopique caractérisant le système et donc dépendant de son état : à un instant t fixé la grandeur G prend la valeur $G(\Gamma_N(t))$. Une mesure de G consiste à en calculer la moyenne $<G>$ sur une durée T d'observation :

$$< G >_T = \frac{1}{T}\int_0^T G(\Gamma_N(t))dt \; ; \; < G > = \lim_{T\to\infty} < G >_T$$

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 44

À présent, considérons non plus un système unique de N particules, mais une collection de systèmes macroscopiquement identiques de N particules. Soit Γ_N une configuration possible dans l'espace des phases de ces systèmes. À Γ_N nous pouvons alors associer une densité de probabilité $\rho(\Gamma_N)$; la valeur moyenne de G, $<G>$, est alors obtenue par :

$$< G > = \int \rho(\Gamma_N) G(\Gamma_N)\, d\Gamma_N$$

Le postulat fondamental de la mécanique statistique est que les moyennes $<G>$ sont identifiées comme des mesures de la grandeur macroscopique G qui ne sont autres que les moyennes temporelles $<G>_T$. Par conséquent, nous pouvons écrire l'égalité :

$$\int \rho(\Gamma_N) G(\Gamma_N)\, d\Gamma_N = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int_0^T G(\Gamma_N(t))dt = <G>$$

Très schématiquement, cette égalité représente l'**hypothèse d'ergodicité** introduite par **W. Gibbs** (il semble cependant que Boltzmann [2], [3] ait été le premier à introduire le **concept d'ergodicité**). Cette hypothèse stipule que l'on peut remplacer l'étude d'un système unique par celle d'une collection de systèmes macroscopiquement identiques affectés de conditions initiales arbitraires différentes.

La densité de probabilité $\rho(\Gamma_N)$ est obtenue *via* l'**équation de Liouville** mentionnée plus haut.

On est ainsi passé de l'espace à **6 × N dimensions** du **niveau microscopique** à l'espace à **6 dimensions** (celui d'une configuration « moyenne ») du « **niveau cinétique** ».

En fait, dans le cas d'une population de neutrons, dont le comportement est markovien et dont un certain nombre peut disparaître par absorption, par exemple, la densité $\rho(\Gamma_N)$ se déduit des **équations de Chapman-Kolmogorov**.

En « contractant » encore une fois les dimensions pour ne retenir que les trois dimensions d'espace, on atteint le « **niveau hydrodynamique** » auquel appartiennent les **équations de Navier-Stokes** et l'**équation de la diffusion des neutrons**.

C'est donc une **grandeur moyenne** (le flux en phase) qui satisfait l'**équation de Boltzmann** ou du **transport**. Les **méthodes déterministes** mises en œuvre pour la résolution de cette équation ne donnent plus accès à l'histoire individuelle de chaque particule du système étudié.

La méthode probabiliste de Monte-Carlo, appliquée à la résolution de l'équation du transport, simule explicitement la collection des systèmes physiques équivalents considérés plus haut, dans le cadre de l'hypothèse ergodique, puis opère en fin de simulation la moyenne statistique de l'ensemble des résultats produits par chacune des simulations, à l'image d'un ensemble de mesures qui seraient faites et « moyennées » dans un cadre purement expérimental. Cette moyenne est une estimation statistique du résultat recherché. Le niveau microscopique est préservé, en ce sens que les caractéristiques (positions, énergies, événements) de l'histoire simulée de chacune des particules des systèmes peuvent être stockées, analysées, retraitées.

On remarquera que l'approche déterministe donne *a priori* **en tout point de l'espace des phases** la valeur (moyenne) de la grandeur physique d'intérêt. Ce ne peut être le cas, dans la pratique, avec une simulation naturelle probabiliste, pour une simple raison de statistique : la probabilité pour qu'une particule simulée donne lieu à un événement en un point donné de l'espace est quasiment nulle.

Références

[1] J. J. Duderstadt, W. R. Martin, *Transport Theory*, New York, John Wiley & Sons, USA, 1979.

[2] L. Boltzmann, « Weitere Studien über das Wärmegleicgewicht unter Gasmolekülen », *Wiener Berichte*, 66, pp. 275-370, 1872.

[3] L. Boltzmann, *Théorie cinétique des gaz*, Trad. française, Éditions Jacques Gabay, 1987.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 45

Les équations fondamentales de la neutronique

Dans le cœur d'un réacteur nucléaire, la propagation des neutrons est couplée à la transmutation des milieux dans lesquels ceux-ci se propagent. En effet, l'irradiation neutronique et la température du combustible, du modérateur et de l'ensemble des structures existantes présentent des variations spatiales et temporelles significatives. Il s'ensuit que la composition en nucléides des milieux irradiés varie en espace et en temps. Cela explique que la neutronique traite deux équations fondamentales couplées, régissant dans l'espace et dans le temps, l'une le déplacement des neutrons, et l'autre l'évolution des compositions isotopiques.

L'équation intégro-différentielle de Boltzmann : le transport des neutrons

La solution de l'équation de Boltzmann donne la densité de la population des neutrons en fonction du temps et de l'espace. Cette équation s'applique aussi au transport des photons qui interviennent également dans les études de réacteurs, en particulier dans les calculs de protection contre les rayonnements et les calculs d'échauffement des matériaux.

Le comportement quantique des neutrons se manifeste lors des collisions avec les noyaux, mais, pour le neutronicien, ces collisions peuvent être considérées comme des événements ponctuels et instantanés, dont seules les conséquences l'intéressent. Selon l'énergie du neutron incident et le noyau avec lequel il interagit, différents types de réactions peuvent se produire : le neutron peut être **absorbé***, **diffusé*** ou encore provoquer la **fission*** du noyau. On rappelle que la probabilité de chaque réaction est caractérisée par une grandeur appelée « **section efficace microscopique*** ». Entre deux collisions, les neutrons se comportent comme des particules classiques, décrites par leur position et leur vitesse. Non chargés (particules neutres), ils se déplacent en ligne droite, au moins pour les courtes distances pour lesquelles on peut négliger l'effet de la gravitation.

L'établissement de l'équation de Boltzmann en neutronique repose sur les hypothèses et simplifications suivantes :

- Le nombre de neutrons dans le système considéré est suffisamment important pour pouvoir définir une densité de neutrons. Les conditions d'un réacteur nucléaire, avec un ordre de grandeur de 10^8 neutrons par cm^3, satisfont cette hypothèse ;
- les interactions neutron-neutron peuvent être négligées vis-à-vis des interactions neutron-matière. Le rapport entre la densité des neutrons et la densité du milieu de propagation (eau, oxyde d'uranium…) est de l'ordre de 10^{-15}, ce qui justifie cette approximation. Cette hypothèse est d'une grande importance, puisqu'elle conduit à une formulation linéaire de l'équation de Boltzmann, beaucoup plus simple que la version non linéaire utilisée dans la théorie cinétique des gaz ;
- les effets relativistes sont négligés. Dans un réacteur, les neutrons produits par fission ont une énergie cinétique maximale de l'ordre de 20 MeV, correspondant à 2 % de leur masse au repos ;
- la décroissance radioactive du neutron en proton ($n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e$) peut être négligée, dans la mesure où son temps de vie dans le réacteur, avant d'être absorbé, est beaucoup plus faible que son temps de décroissance. En effet, son temps de vie est compris entre 10^{-5} et 10^{-3} secondes selon les filières et sa période de décroissance radioactive est de l'ordre de 10 minutes.

L'équation de Boltzmann exprime le bilan du nombre des neutrons dans un volume élémentaire $D \equiv d\vec{r}\,.\,dE.\,d\vec{\Omega}$ autour du point $P \equiv (\vec{r}\,,\,E,\,\vec{\Omega}\,)$ de l'espace des phases et dans l'intervalle de temps élémentaire dt, autour de l'instant t.

Six termes sont impliqués dans ce bilan :
a) La disparition algébrique des neutrons du domaine D par fuite à travers les surfaces délimitant le volume élémentaire autour du point $\vec{r}$ (bilan net des neutrons entrant et sortant) dans l'intervalle de temps dt :

$$-\vec{\Omega}.\vec{\nabla}\psi(\vec{r},E,\vec{\Omega},t)d\vec{r}.\,dE.\,d\vec{\Omega}.\,dt$$

- $\psi(\vec{r}\,,\,E,\,\vec{\Omega}\,,\,t)$: flux en phase en $(\vec{r}\,,\,E,\,\vec{\Omega}\,,\,t)$ [voir introduction].

b) La disparition des neutrons du domaine D, par absorption et diffusion, les absorptions faisant disparaître les neutrons et les diffusions les faisant passer à une autre énergie et les envoyant dans une autre direction, dans l'intervalle de temps dt :

$$-\sum_k N_k(\vec{r},t)\,\sigma_k(E)\psi(\vec{r},E,\vec{\Omega},t)d\vec{r}.\,dE.\,d\vec{\Omega}.\,dt$$

- $N_k(\vec{r},t)$: concentration des nucléides k au point $\vec{r}$ et à l'instant t,
- $\sigma_k(E)$: section efficace microscopique totale du nucléide k pour un neutron incident d'énergie E.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 46

Espace des phases, densité et flux de neutrons

En physique des réacteurs, les populations de neutrons font l'objet d'un traitement statistique. On les décrit en faisant appel à la notion de densité neutronique, qui représente le nombre moyen de neutrons observé par unité de volume. Cette densité neutronique est cependant une notion plus générale que la notion de densité usuelle, car le volume élémentaire à considérer n'est pas seulement un volume dans l'espace physique.

Il faut, en effet, décompter les neutrons non seulement dans l'espace, mais aussi selon leur vitesse qui n'est pas la même pour tous et qui joue un rôle fondamental sur leur devenir. Cette densité est également, en général, fonction du temps. Au total, pour décrire complètement une population de neutrons, il faut donc faire intervenir trois variables d'espace, trois variables de vitesse et la variable temps. Dans la pratique, les matériaux utilisés dans les réacteurs sont isotropes. Leurs propriétés (en particulier, leurs sections efficaces) ne dépendent alors que du module de la vitesse (ou de l'énergie) des neutrons incidents, et non pas de leur direction. C'est pourquoi on distingue souvent le module de la vitesse (ou directement l'énergie cinétique des neutrons) et la direction des neutrons. Cette distinction est réalisée en introduisant le vecteur unitaire bâti sur le vecteur vitesse : $\vec{\Omega} = \frac{\vec{v}}{v}$.

Au final, la **densité** (qualifiée de « densité en phase ») est notée $n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$. Elle permet d'exprimer le nombre moyen de neutrons compris, à l'instant t, dans un volume élémentaire d'un espace à six dimensions appelé l'**« espace des phases* »**.

De surcroît, il est souvent plus aisé de travailler avec la grandeur $\psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = vn(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$, appelée **« flux angulaire »** ou **« flux en phase »**, qui représente le nombre de neutrons d'énergie E traversant à l'instant t, au point $\vec{r}$, une surface unitaire perpendiculaire à la direction de propagation $\vec{\Omega}$. On définit aussi le **flux scalaire** $\varphi(\vec{r}, E, t)$ comme l'intégrale sur toutes les directions du flux angulaire : $\phi(\vec{r}, E, t) = \int_{4\pi} \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) d\vec{\Omega}$. L'intérêt de connaître le flux scalaire est que le nombre de réactions nucléaires produites par unité de volume et de temps, appelé **« taux de réaction* »**, noté $\tau(\vec{r}, E, t)$, est calculé comme le produit du flux scalaire et de la **section efficace macroscopique** correspondant à la réaction nucléaire considérée, de section efficace microscopique $\sigma(E)$:

$$\tau(\vec{r}, E, t) = N(\vec{r}, t)\sigma(E)\phi(\vec{r}, E, t) = \Sigma(\vec{r}, E, t)\phi(\vec{r}, E, t)$$

où $N(\vec{r}, t)$ représente la concentration du nucléide cible des neutrons au point $\vec{r}$ et à l'instant t.

c) L'arrivée de neutrons dans le domaine D résultant des diffusions. Il s'agit des neutrons qui, avant la collision, étaient à une autre énergie et se déplaçaient dans une autre direction, et qui sortent de la collision à l'énergie E et dans la direction $\vec{\Omega}$ dans l'intervalle de temps dt :

$$\sum_k N_k(\vec{r}, t) \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \, \sigma_{s,k}(E' \to E, \vec{\Omega}' \to \vec{\Omega}) \psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}', t) d\vec{r}.dE.d\vec{\Omega}.dt$$

• $\sigma_{s,k}(E' \to E, \vec{\Omega}' \to \vec{\Omega})$: section efficace microscopique de transfert faisant passer le neutron de l'énergie E' à l'énergie E et de la direction $\vec{\Omega}'$ à la direction $\vec{\Omega}$, lors d'une diffusion sur un nucléide k. La nature isotrope des matériaux vis-à-vis des neutrons implique que dans le processus de diffusion, pour un angle de déviation donné après collision, les directions d'émergence qui forment un cône de révolution autour de l'axe défini par la direction d'incidence, sont toutes équiprobables. C'est la raison pour laquelle les sections efficaces différentielles de diffusion peuvent être réécrites avec un produit scalaire : $\sigma_{s,k}(E' \to E, \vec{\Omega}' \to \vec{\Omega}) = \sigma_{s,k}(E' \to E, \vec{\Omega}'.\vec{\Omega})$.

Pour les méthodes de traitement de l'équation du transport, il est usuel de représenter ces sections efficaces différentielles sous la forme d'un développement sur la base des polynômes de Legendre $P_n(\mu)$:

$$\sigma_{s,k}(E' \to E, \vec{\Omega}'.\vec{\Omega}) = \sigma_{s,k}(E' \to E, \mu) = \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1)\, \sigma_{sn,k}(E' \to E) P_n(\mu)$$

d) La source de **neutrons prompts*** émis par fission induite ou par fission spontanée dans le domaine D et dans l'intervalle de temps dt :

$$\frac{1}{4\pi} \sum_k N_k(\vec{r}, t) \int_0^\infty dE' \, \nu_{p,k}(E') \sigma_{f,k}(E') \chi_{p,k}(E' \to E) \phi(\vec{r}, E', t) \, d\vec{r}.dE.d\vec{\Omega}.dt$$
$$+ \frac{1}{4\pi} \sum_k \nu_{p,fs,k} \lambda_{fs,k} N_k(\vec{r}, t) \chi_{p,fs,k}(E) \, d\vec{r}.dE.d\vec{\Omega}.dt$$

• $\sigma_{f,k}(E')$: section efficace microscopique de fission du nucléide k, pour un neutron incident d'énergie E',
• $\nu_{p,k}(E')$: nombre moyen de neutrons prompts émis à la suite d'une fission induite sur un noyau k par un neutron incident d'énergie E',
• $\chi_{p,k}(E' \to E)$: spectre en énergie des neutrons prompts émis de manière isotrope à la suite d'une fission induite sur un noyau k par un neutron incident d'énergie E',
• $\phi(\vec{r}, E', t)$: flux scalaire en $(\vec{r}, E', t)$ [voir introduction],
• $\nu_{p,fs,k}$: nombre moyen de neutrons prompts émis par fission spontanée du nucléide k,
• $\lambda_{fs,k}$: constante de décroissance radioactive de fission spontanée du nucléide k,
• $\chi_{p,fs,k}(E)$: spectre des neutrons prompts émis de manière isotrope par fission spontanée du nucléide k.

e) La source de neutrons retardés émis par fission induite ou spontanée dans le domaine D et dans l'intervalle de temps dt. Ces neutrons proviennent de **produits de fission*** radioactifs particuliers, **supposés émis au moment de la fission**, dénommés **précurseurs***. Ces noyaux ont la propriété de pouvoir décroître par la voie (β^-, n), décroissance β^- suivie de

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 47

l'émission immédiate d'un neutron. Comme la décroissance radioactive d'un noyau précurseur, suivant cette voie, conduit à l'émission d'un neutron unique, la source de neutrons retardés s'écrit :

$$\frac{1}{4\pi}\sum_k \lambda_{d,k} N_k(\vec{r},t)\chi_{d,k}(E)\ d\vec{r}.\,dE.\,d\vec{\Omega}.\,dt$$

• $\lambda_{d,k}$: constante partielle de décroissance radioactive du nucléide k, correspondant à la voie (β^-, n),
• $\chi_{d,k}(E)$: spectre en énergie des neutrons retardés émis de manière isotrope par le nucléide k.

f) Les sources de neutrons externes :

$$S_{ext}(\vec{r},E,\vec{\Omega},t)d\vec{r}.\,dE.\,d\vec{\Omega}.\,dt$$

La variation du flux en phase dans le temps :

$$\frac{1}{v}\frac{\partial\psi(\vec{r},E,\vec{\Omega},t)}{\partial t}d\vec{r}.\,dE.\,d\vec{\Omega}.\,dt$$

est égale à la somme algébrique des six quantités précédemment recensées. Cette égalité conduit à l'équation intégro-différentielle de Boltzmann satisfaite par le flux angulaire des neutrons, $\psi\ (\vec{r},\ E,\ \vec{\Omega},\ t)$:

$$\frac{1}{v}\frac{\partial\psi(\vec{r},E,\vec{\Omega},t)}{\partial t} = -\vec{\Omega}.\vec{\nabla}\psi(\vec{r},E,\vec{\Omega},t) - \sum_k N_k(\vec{r},t)\,\sigma_k(E)\psi(\vec{r},E,\vec{\Omega},t) \quad (1)$$
$$+\sum_k N_k(\vec{r},t)\int_0^\infty dE'\int_{4\pi} d\vec{\Omega}'\,\sigma_{s,k}(E'\to E,\vec{\Omega}'\to\vec{\Omega})\psi(\vec{r},E',\vec{\Omega}',t)$$
$$+\frac{1}{4\pi}\sum_k N_k(\vec{r},t)\int_0^\infty dE'\,\nu_{p,k}(E')\sigma_{f,k}(E')\chi_{p,k}(E'\to E)\phi(\vec{r},E',t)$$
$$+\frac{1}{4\pi}\sum_k \nu_{p,fs,k}\lambda_{fs,k}N_k(\vec{r},t)\chi_{p,fs,k}(E)+\frac{1}{4\pi}\sum_k \lambda_{d,k}N_k(\vec{r},t)\chi_{d,k}(E)+S_{ext}(\vec{r},E,\vec{\Omega},t)$$

Cette écriture de l'équation de Boltzmann est générale, car elle ne préjuge pas de la nature des nucléides. C'est ainsi que, dans son application à une configuration physique donnée, la section efficace de fission $\sigma_{f,k}(E')$, par exemple, prendra une valeur nulle, si le nucléide k n'est pas fissile, ou que la constante partielle de décroissance $\lambda_{d,k}$ prendra une valeur nulle si le nucléide k n'est pas précurseurs de neutrons retardés.

On pourrait écrire une dépendance en temps pour les sections efficaces microscopiques qui correspondrait à une variation de la température. Elle est omise ici.

L'équation de Boltzmann existe aussi sous une forme intégrale, forme qui constitue le point de départ de certaines méthodes numériques, en particulier les méthodes de type Monte-Carlo (voir le sous-chapitre sur les formes dérivées des équations fondamentales).

Dans des situations particulières (études de criticité et de radioprotection conduites dans le cadre du cycle du combustible, par exemple) d'autres sources de neutrons sont prises en considération, parmi lesquelles :

a) La source de neutrons issus de réactions nucléaires de type (α, n) :

$$\frac{1}{4\pi}\sum_k \zeta_{(\alpha,n)}^{(k)}(E)\,\lambda_{\alpha,k}N_k(\vec{r},t)\,d\vec{r}.\,dE.\,d\vec{\Omega}.\,dt$$

• $\zeta_{(\alpha,n)}^{(k)}(E)$: rendement de production de neutrons d'énergie E par les réactions (α, n) engendrées par les particules *alpha* émises par décroissance radioactive du noyau k,
• $\lambda_{\alpha,k}$: constante de décroissance radioactive α du noyau k.

b) La source de neutrons provenant de réactions photonucléaires (γ, n), $(\gamma, 2n)$, (γ, f), etc. :

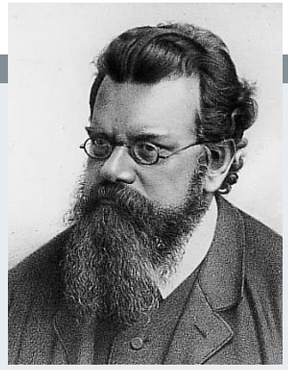
$$\sum_k N_k(\vec{r},t)\int_0^\infty dE'_\gamma\int_{4\pi} d\vec{\Omega}'_\gamma\sum_q \sigma_{\gamma,q,k}(E'_\gamma\to E,\vec{\Omega}'_\gamma\to\vec{\Omega})\,\psi_\gamma(\vec{r},E'_\gamma,\vec{\Omega}'_\gamma,t)d\vec{r}.\,dE.\,d\vec{\Omega}.\,dt$$

• $\sigma_{\gamma,q,k}(E'_\gamma\to E,\vec{\Omega}'_\gamma\to\vec{\Omega})$: section efficace différentielle de production de neutrons à l'énergie E dans la direction $\vec{\Omega}$ par la réaction photonucléaire de type q du nucléide k,
• $\psi_\gamma(\vec{r},\ E'_\gamma,\ \vec{\Omega}'_\gamma,\ t)$: flux de *gammas* (particules neutres) dont l'obtention se fait également en résolvant une équation de propagation analogue à celle établie pour les neutrons. On notera que :

- dans le domaine d'énergie des réacteurs nucléaires les *gammas* émis ont des énergies situées dans l'intervalle (0, 20 MeV) et, par conséquent, leur propagation dans la matière est gouvernée par l'effet Compton, l'effet photoélectrique et l'effet de paires (électron-positons),
- ce terme de source de neutrons couple la propagation des neutrons et celle des *gammas*.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 48

Ludwig Eduard Boltzmann (1844-1906)



Il a enseigné la physique expérimentale, la physique théorique, les mathématiques dans plusieurs universités : Munich, Leipzig, Graz, Vienne. Excellent professeur, son auditoire vient aussi d'Angleterre, des États-Unis et du Japon.

Ludwig Eduard Boltzmann est né à Vienne le 20 février 1844. Son diplôme de doctorat, obtenu en 1866, sanctionne ses travaux de thèse consacrés à la **théorie cinétique des gaz**. Celle-ci avait été dirigée par **Jožef Stefan**, physicien et homme de lettres réputé, de culture slovène, auquel on doit la loi sur le **rayonnement du corps noir**, **loi de Stefan-Boltzmann**. C'est, en effet, **L. E. Boltzmann** qui en fournira la justification théorique. À la fois expérimentateur et théoricien, ce dernier contribue au développement de la plupart des domaines de la physique de son temps.

Cependant, son apport majeur réside dans la révolution qu'il opère dans la **conception atomiste de la matière**. Une des grandes questions posées est la suivante : *comment prédire les propriétés macroscopiques d'un système physique donné en partant de la myriade d'atomes qui le composent ?* Afin d'y répondre, **L. E. Boltzmann** pose les bases de la **mécanique statistique** issue d'une idée géniale, audacieuse et courageuse : celle d'allier la **mécanique analytique** issue des travaux antérieurs de Newton, D'Alembert, Lagrange, Hamilton… au **calcul des probabilités** dont les fondements théoriques seront plus tardivement établis par des mathématiciens comme Émile Borel, Henri Lebesgue, dans le cadre de la **théorie de la mesure** [1, 2].

Il peut sembler aujourd'hui étrange que la **mécanique statistique** de **Boltzmann** soit apparue, aux yeux de tous ses homologues contemporains, comme ayant une orientation passéiste, pour ne pas dire ringarde. Cela s'explique peut-être, en partie, par deux facteurs :

- L'ambiance philosophique dominante du positivisme promu entre autres par **Ernst Mach** et **Auguste Comte**, marquée par une attitude de défiance vis-à-vis du **calcul des probabilités** [3] ;
- la notion d'**énergie** elle-même, à cette époque, objet d'une véritable révolution conceptuelle, au point que, pour un **Wilhelm Ostwald**, chimiste et physicien de renom, ami proche de **Ludwig Boltzmann**, tout est **énergie**. Cette entité devint synonyme de modernité, détrônant, dès lors, l'entité « archaïque » **matière**. La physique du continu se devait de supplanter la physique du discontinu.

Les traces du combat scientifique et épistémologique tragique mené par **Ludwig Boltzmann** pour installer, au sein de la communauté scientifique européenne de la fin du XIXe siècle, le nouveau paradigme de recherche associé à la **mécanique statistique** sont nettement visibles sur plusieurs des pages ses ***Leçons sur la théorie des gaz***.

Intellectuellement marginalisé, sujet à des accès de mélancolie et d'angoisse, d'une santé fragile, **L. Boltzmann**, presque paradoxalement, n'a pas su ou pas pu saisir l'opportunité de l'émergence de deux nouvelles physiques, la **physique nucléaire** et la **mécanique quantique**, qui auraient pu l'aider à défendre, face au monde savant, sa vision de la Nature.

Ludwig Boltzmann met fin à ses jours le 5 septembre 1906 à Duino, près de la ville de Trieste où il passait des vacances. La postérité lui donnera formidablement raison, au-delà, sans doute, de ce qu'il était en mesure d'imaginer.

Quelques références

[1] L. Boltzmann, « Weitere Studien über das Wärmegleichgewicht unter Gasmoilekülen », *Wiener Berichte*, 66, pp. 275-370, 1872.

[2] L. Boltzmann, *Leçons sur la théorie des gaz, Parties I et II*, édition française : Éditions Jacques Gabay, 1987, réimpression de l'édition originale de la traduction française publiée en 1902 pour la partie I et 1905 pour la partie II par Gauthier-Villars.

[3] S. Callens, *Les Maîtres de l'erreur – Mesure et probabilité au XIXe siècle*, Paris, Presses Universitaires de France, 1997.

http://www.ipnl.in2p3.fr/delphi/laktineh/monitorat/public_html/boltzmann/boltzmann.htm

Tombe de Ludwig Boltzmann dans le cimetière central *(Zentralfriedhof)* à Vienne en Autriche.

L. E. Boltzmann a établi l'équation qui porte son nom, généralisant du même coup la loi de distribution des vitesses de Maxwell. Il donne une interprétation statistique de l'entropie que résume la loi $S = k \, Log \, W$, écrite en épitaphe sur le haut de sa pierre tombale, unifiant ainsi la mécanique et la thermodynamique, et reliant le peu probable au plus probable.

Source : http://fr.wikipedia.org/wiki/Ludwig_Boltzmann#Biographie

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 49

Les équations de Bateman généralisées : évolution des nucléides

Les équations générales gouvernant l'évolution temporelle de la concentration $N_k(\vec{r},t)$ des noyaux atomiques des nucléides k, au cours de l'irradiation, dérivent du bilan au point $\vec{r}$, et dans l'intervalle de temps élémentaire dt autour de l'instant t, des nucléides k qui :

a) apparaissent par réactions nucléaires :

$$\sum_{m\neq k} \varsigma_{k\leftarrow m}(\vec{r},t)N_m(\vec{r},t)dt$$

- $\varsigma_{k\leftarrow m}(\vec{r},t)$: taux de réaction microscopique relatif à la formation du nucléide k à partir du nucléide m :

$$\varsigma_{k\leftarrow m}(\vec{r},t) = \sum_q \int_0^\infty \sigma_{q,k\leftarrow m}(E)\phi(\vec{r},E,t)dE$$

- $\sigma_{q,k\leftarrow m}(E)$: section efficace microscopique de la réaction q induite par neutron d'énergie E sur le nucléide m conduisant à la formation du nucléide k,

b) apparaissent par désintégration radioactive :

$$\sum_{m\neq k} \lambda_{k\leftarrow m}N_m(\vec{r},t)dt$$

- $\lambda_{k\leftarrow m}$: constante de décroissante radioactive d'un nucléide de type m vers le nucléide k considéré,

c) disparaissent par réactions nucléaires :

$$-\varsigma_k(\vec{r},t)N_k(\vec{r},t)dt$$

- $\varsigma_k(\vec{r},t)$: taux de réaction microscopique relatif à la disparition du nucléide k :

$$\varsigma_k(\vec{r},t) = \sum_q \int_0^\infty \sigma_{q,k}(E)\phi(\vec{r},E,t)dE$$

- $\sigma_{q,k}(E)$: section efficace microscopique de la réaction q induite par neutron d'énergie E sur le nucléide k, conduisant à la disparition du nucléide k,

d) disparaissent par désintégration radioactive :

$$-\lambda_k N_k(\vec{r},t)dt$$

- λ_k : constante de décroissante radioactive totale du nucléide de type k (tous noyaux d'arrivée confondus).

L'expression de la variation par unité de temps du nombre de nucléides $N_k(\vec{r},t)$, au point $\vec{r}$ et au temps t conduit à un système d'équations différentielles couplées, appelées « **équations d'évolution** » :

$$\frac{dN_k(\vec{r},t)}{dt} = \sum_{m\neq k} \varsigma_{k\leftarrow m}(\vec{r},t)N_m(\vec{r},t) + \sum_{m\neq k} \lambda_{k\leftarrow m}N_m(\vec{r},t) - \lambda_k N_k(\vec{r},t) - \varsigma_k(\vec{r},t)N_k(\vec{r},t) \quad (2)$$

Elles sont aussi connues sous le nom d'**équations de Bateman* généralisées**, du nom du mathématicien anglais **Harry Bateman** [1] ayant fait sa carrière aux États-Unis, qui a fourni une solution générale aux équations différentielles de décroissance radioactive.

L'établissement présenté ci-dessus de l'équation de Boltzmann (1) et de celles de Bateman (2) montre qu'elles sont couplées, formant un système **neutroniquement** fermé.

Bibliographie

[1] Bateman (H.), "The solution of a system of differential equations occurring in the theory of radioactive transformations", *Proceedings Cambridge Philosophical Society*, vol. 15, pp. 423-427, 1910.

Mireille Coste-Delclaux, Cheikh M. Diop, Fausto Malvagi et Anne Nicolas
Département de modélisation des systèmes et structures

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 50

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 51

La démarche du neutronicien

Les études de conception et d'exploitation des réacteurs s'appuient sur la simulation numérique. Il est donc impératif d'élaborer des méthodes de calcul à la fois très précises, rapides et robustes.

Pour résoudre l'équation de Boltzmann et les équations de Bateman généralisées le neutronicien doit choisir les voies de calcul les mieux adaptées au réacteur étudié.

Trois facteurs s'opposent à une résolution aisée des équations de Boltzmann et Bateman :

- La complexité technologique (dimensions, structures…) et de fonctionnement d'un cœur de réacteur nucléaire ;
- le nombre élevé de variables dont dépendent les équations : elles sont au nombre de sept ;
- le caractère évolutif, souligné plus haut, des sections efficaces macroscopiques, $\Sigma(\vec{r}, E, t) = N(\vec{r}, t)\,\sigma(E, t)$, qui varient dans le temps, avec des échelles très différentes :
  - quand la température du système évolue (par une excursion de puissance, par exemple) la densité du milieu varie, ainsi que les sections efficaces microscopiques (par **effet Doppler***) ; la géométrie peut également être modifiée ;
  - quand le combustible est irradié, sa composition en nucléides s'en trouve modifiée.

De surcroît, les échelles de temps diffèrent considérablement selon les phénomènes étudiés :

- de l'ordre de la microseconde pour la contre-réaction Doppler ;
- de l'ordre de quelques dizaines de minutes à quelques heures pour l'**empoisonnement*** du cœur (par le **xénon*** 135 ou le **samarium*** 149) ;
- de l'ordre de quelques années pour la durée de passage des combustibles en cœur.

Lorsque le réacteur est finement décrit en énergie, angle et espace, l'équation de Boltzmann nécessite la prise en compte de près de 1 000 milliards d'inconnues (voir *infra*, p. 62-63, « Discrétisation de l'espace des phases »). La puissance actuelle des ordinateurs ne permet pas toujours de résoudre des problèmes d'une telle dimension. Il est donc indispensable d'introduire des simplifications et des découplages en relation avec la physique particulière de la filière calculée. Le choix de ces simplifications et découplages consiste en la définition de ce que les physiciens des réacteurs appellent le **schéma de calcul***.

Le neutronicien tire parti des observations fondamentales suivantes :

1) la densité de neutrons dans un réacteur est suffisamment faible pour considérer qu'il n'y a pas d'interaction neutron-neutron. L'équation de Boltzmann est alors linéaire en flux, à condition de considérer les sections efficaces macroscopiques indépendantes du flux, ce qui constitue une approximation tout à fait valide, dans la mesure où l'évolution des situations du cœur peuvent être modélisées par une succession d'états stationnaires.

2) Lorsque le réacteur est critique ou proche de la criticité, l'équation de bilan (équation de Boltzmann en régime stationnaire) traduit qu'en tout point la production de neutrons est égale aux disparitions (fuites + absorptions).

3) Dans la résolution de l'équation de bilan neutronique, on peut remplacer un milieu hétérogène par un milieu homogène équivalent, si celui-ci ne perturbe pas le calcul de son environnement.

4) La solution de l'équation de Boltzmann sur la configuration hétérogène finement discrétisée peut être utilisée pour obtenir des grandeurs neutroniques moyennées en espace et en énergie ; ces grandeurs peuvent elles-mêmes être utilisées dans une nouvelle formulation homogène de l'équation de Boltzmann qui respectera chacun des termes du bilan : production, fuites et absorptions.

Il en résulte qu'un calcul déterministe du réacteur peut être effectué en deux étapes principales. La première est le calcul fin des assemblages combustibles supposés se répéter à l'infini. Il fournit les grandeurs neutroniques représentatives de l'assemblage qui sont utilisées dans la seconde étape. Celle-ci est dédiée aux calculs des échanges neutroniques entre assemblages avec prise en compte des conditions aux limites réelles du cœur.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 52

Ainsi :

- La première étape, dite « **calcul d'assemblage*** » consiste en un calcul détaillé (tant en espace qu'en énergie) d'un motif élémentaire du cœur (un assemblage combustible, un assemblage de contrôle, etc.). Ce calcul d'un objet, à l'échelle du **libre parcours moyen*** d'un neutron (quelques cm), est réalisé en résolvant l'équation du transport sur une coupe horizontale de l'assemblage, donc à deux dimensions, et en supposant que ce motif se répète à l'infini ou qu'il occupe la totalité de l'espace (calcul en « milieu infini »). L'essentiel de l'hétérogénéité est ainsi pris en compte, à condition que les hétérogénéités soient moins marquées axialement que radialement (c'est généralement le cas). Ce calcul fin permet de procéder à une « réduction de données » qui fournit les caractéristiques neutroniques (sections efficaces macroscopiques) d'une « pâte » homogène dite « équivalente » qui représente, soit l'assemblage complet (homogénéisation totale), soit chaque type de portion d'assemblage (par exemple, crayon combustible et modérateur/caloporteur qui l'entoure) le constituant (homogénéisation par morceaux). Cette « **homogénéisation*** » spatiale s'accompagne d'une « **condensation*** » en énergie : le nombre de **groupes*** utilisés pour décrire la variation en énergie de ces sections efficaces « homogénéisées » est fortement réduit par rapport au nombre de groupes de la bibliothèque multigroupe d'entrée. Le facteur de réduction dépend du type de réacteur, notamment des variations spatiales du **spectre*** des neutrons.

- La seconde étape (le calcul de cœur proprement dit) consiste à résoudre, en deux ou trois dimensions, une équation exacte ou approchée de l'équation du transport (équation de la diffusion, par exemple) en remplaçant dans le cœur chaque assemblage ou chaque type de cellule par la « pâte » homogène équivalente définie lors de la première étape. On traite ainsi un objet de grande taille, mais avec un modèle réduit tant en espace qu'en énergie. C'est à partir de ce calcul qu'on fournit les différentes grandeurs utiles (réactivité, efficacité des absorbants, coefficients de contre-réactions, distribution de taux de réaction, isotopie…).

Dans ces deux étapes, le neutronicien est amené à détailler quels modèles, quels solveurs, quelles discrétisations seront les plus adaptés pour résoudre efficacement et précisément le problème qui lui est posé. Les avancées de l'informatique et des méthodes numériques ouvrent régulièrement des perspectives d'amélioration.

Ce type de schéma n'est pas exempt de limitations, parmi lesquelles on peut citer, d'une part l'hypothèse de calcul en réseau infini des constantes d'un assemblage – ce qui permet de découpler le calcul fin dans l'assemblage du calcul d'échange de neutrons entre assemblages – et, d'autre part, les approximations de l'équation du transport (diffusion, transport simplifié) éventuellement retenues dans la seconde étape. Les différences des modélisations utilisées durant les deux étapes du calcul de cœur font qu'il est, le plus souvent, indispensable de procéder à une étape dite « d'**équivalence*** » entre les deux, qui permet de corriger les manques d'une simple **homogénéisation / condensation*** [1], [2].

C'est toutefois le seul type de schéma qualifié, actuellement opérationnel, pour traiter un cœur en trois dimensions en prenant en compte l'usure du combustible et les contre-réactions. En effet :

- Le calcul « direct » par résolution en trois dimensions (3D) de l'équation du transport par la méthode déterministe sur le cœur entier d'un réacteur de grande taille est encore hors de portée sans simplifications du modèle spatial et / ou énergétique. Les seuls calculs directs possibles (et réalisés) sont en 2D et concernent de petits réacteurs (réacteurs expérimentaux) ou une partie de grands réacteurs (1/8^{e} du cœur d'EPR, par exemple). Ces calculs sont encore très longs, même si l'on ne prend pas en compte l'évolution du combustible.

- Le calcul « direct » par résolution en trois dimensions (3D) de l'équation du transport par la méthode de Monte-Carlo couplée à un code d'évolution déterministe est réalisable. Cependant, cette méthode impose le calcul des taux de réactions avec une incertitude statistique partout acceptable et pose le problème du traitement de la propagation de ces incertitudes dans les calculs couplés transport/évolution.

Le travail du neutronicien consiste ainsi à concevoir des modélisations et des schémas de calcul permettant d'obtenir les grandeurs physiques recherchées, tout en optimisant le rapport précision / coût de calcul.

Dans la pratique, selon les échelles de temps considérées pour la description de l'état neutronique d'un réacteur, le neutronicien distingue habituellement :

- le comportement « statique » du système physique étudié pour lequel l'équation de Boltzmann est résolue en régime stationnaire (indépendant du temps), voir *infra*, p. 56-59 ;

- l'évolution temporelle « lente » de la composition du combustible nucléaire gouvernée par les équations de Bateman, voir *infra*, p. 107-113 ;

- les phases transitoires « rapides » gouvernées par les équations de la cinétique durant lesquelles les neutrons retardés jouent un rôle prépondérant, voir *infra*, p. 59-60 et p. 115-124.

La distinction de ces différentes échelles de temps permet de poser les hypothèses pertinentes facilitant la résolution des équations concernées.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 52

Calcul industriel des réacteurs nucléaire : paradigmes de modélisation

(d'après R. Sanchez et P. Reuss)

La résolution de l'équation du transport sous sa forme continue (en énergie, en espace, en angle, en temps) n'est pas compatible avec les exigences des études industrielles de routine ou de projet qui doivent être réalisées en des durées contraintes. Certains calculs doivent pouvoir délivrer des résultats en quelques secondes. Pour répondre à ce défi, le **neutronicien** a mis au point diverses techniques de résolution de l'équation du transport, s'appuyant toutes sur une discrétisation de l'espace des phases et des méthodes numériques sophistiquées [1], [2] se rattachant à des paradigmes de modélisation déterministes brièvement rappelés ci-après. Ces paradigmes concernent notamment le traitement en énergie de la propagation des neutrons, le traitement de l'hétérogénéité géométrie / composition du réacteur, le couplage entre traitements énergétique et spatial, la reconstruction de la distribution fine de la puissance dégagée par le cœur du réacteur. Ils font intervenir le **concept fondamental d'équivalence** qui spécifie **la nécessité de préserver les taux de réaction lorsque l'on passe de la configuration réelle à la configuration modélisée du réacteur nucléaire**.

• **Le traitement multigroupe de l'équation du transport**. Il s'agit du passage de l'équation continue en énergie à celle discrétisée en énergie. À l'équation continue, on substitue un ensemble d'équations dites « multigroupes » dont le nombre est celui du nombre de groupes d'énergie partitionnant le domaine d'énergie des neutrons, de 0 à 20 MeV. En effet, les équations multigroupes sont obtenues par intégration de l'équation continue sur chacun des groupes d'énergie. Les grandeurs physiques continues sont alors remplacées par des grandeurs correspondantes multigroupes. Ce passage du continu au discret conduit, en particulier, à remplacer les sections efficaces continues en énergie par des sections efficaces constantes dans chaque groupe d'énergie : ce sont les **sections efficaces multigroupes** [3],[4]. La problématique alors posée est la détermination de ces sections efficaces multigroupes, de façon que les taux de réactions multigroupes préservent les taux de réaction prédits par l'équation continue. On désigne cette problématique par l'expression de « **mise en groupes* des sections efficaces** ». La difficulté réside ici dans le fait que la détermination des sections efficaces multigroupes permettant d'assurer la préservation des taux de réaction issus de la résolution de l'équation continue suppose de connaître le flux angulaire des neutrons, celui-ci étant justement l'inconnue du problème à résoudre. De ce fait, les sections efficaces multigroupes qui seraient ainsi définies ne correspondraient plus à celles de milieux isotropes, car elles dépendraient de l'angle et de l'espace.

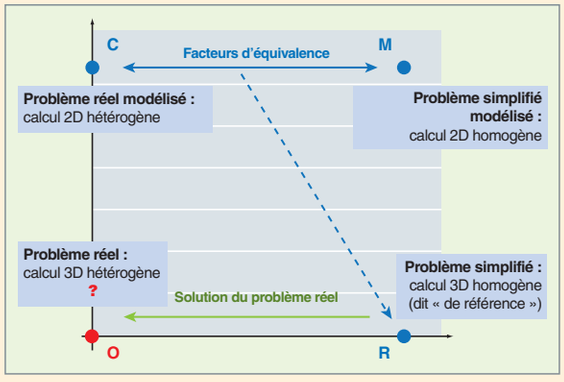


Schéma de principe de l'équivalence sur l'exemple d'un calcul de cœur 3D hétérogène.
Dans l'état actuel des capacités de calcul, le point O ne peut encore être calculé directement (c'est un objectif à atteindre). Grâce à une équivalence, on approche la solution exacte en effectuant les calculs C, M et R qui, eux, sont réalisables.

La mise en groupes affecte également les lois de transfert d'un neutron d'un groupe dans un autre par diffusions élastique et inélastique discrète pour lesquelles l'énergie et la direction après collision sont complètement corrélées : elle a pour effet de créer une **anisotropie artificielle du transfert entre les groupes** [5], d'autant plus marquée que le découpage en groupes d'énergie est fin.

La modélisation du **phénomène d'autoprotection des résonances** occupe une place centrale dans la problématique générale de la mise en groupes. Dans le domaine des résonances, la mise en groupes des sections efficaces peut être réalisée par différentes méthodes dont la **méthode de Livolant-Jeanpierre** [6] et la **méthode des sous-groupes** [7], [8]. Elles permettent de produire des sections efficaces multigroupes dites « autoprotégées » dans un découpage énergétique à groupes relativement larges (en énergie) et en nombre relativement réduit, 100 à 500, adaptés à des calculs de transport en géométries homogènes et hétérogènes bi-dimensionnelles (voir *infra*, p. 64-67).

• **Les techniques d'homogénéisation pour les calculs de cœurs** [9 à 17]. Le calcul tridimensionnel déterministe du cœur d'un réacteur nucléaire de puissance oblige à imaginer de nouvelles modélisations adaptées à des systèmes complexes de grande taille, comportant un nombre important de composants hétérogènes, pour lesquels un calcul direct n'est guère possible ou bien nécessite un temps et/ou des ressources de calcul (puissance et nombre de processeurs des ordinateurs…) prohibitifs pour des études de routine ou de projet. Le but de l'**homogénéisation** est de **remplacer** les **composants hétérogènes** par des **composants homogènes**, de façon que le calcul du système homogénéisé donne des valeurs moyennes précises. La solution du problème homogénéisé ne peut pas préserver dans le détail la solution du problème hétérogène original. Il s'ensuit que le processus d'homogénéisation s'accompagne d'une perte d'information et que seules les valeurs moyennes de la solution pourront être préservées.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 54

Les techniques d'homogénéisation sont mises en œuvre au niveau des **assemblages**. Elles reposent sur :

- La définition et la réalisation du (ou des) **calcul(s) de référence hétérogènes** qui spécifient les valeurs que doit préserver l'opération d'homogénéisation ;

- l'utilisation conjointe de la **théorie du mode fondamental** et du concept de **fuites critiques** ;

- des méthodes d'**équivalence** où interviennent des **facteurs de discontinuité** du **courant** (FDC) ou du **flux** (FDF) des neutrons *entre assemblages homogénéisés*.

• **La reconstruction du flux hétérogène**. Le but d'un calcul de cœur est d'obtenir des taux de réaction et la distribution de puissance spatialement détaillés et, en particulier, de prédire le pic de puissance dans le cœur. En conséquence, une fois que le calcul de cœur a été effectué, une méthode de reconstruction doit être employée pour obtenir les résultats détaillés désirés. Il s'agit d'un problème inverse qui est résolu avec l'une des techniques suivantes :
- la *technique de factorisation*,
- la *reconstruction par le transport*,
- la *technique multi-échelle*,
qui combinent, chacune de manière différente, les résultats provenant du calcul de cœur avec ceux issus du calcul de transport de référence.

Il existe une méthode plus précise mais plus coûteuse, appelée « **homogénéisation dynamique** », qui détermine le flux de neutrons du transport détaillé en homogénéisant itérativement les assemblages de manière à prendre en compte les échanges inter-assemblages moyens du calcul de cœur. Cette méthode, qui fait converger simultanément le calcul de cœur et celui des assemblages en transport, ne nécessite donc pas de reconstruction.

Depuis quelques années, les calculs Monte-Carlo fournissent des résultats de référence qui offrent la possibilité d'une « validation numérique » des méthodes ci-dessus. Cela est détaillé *infra*, p. 165-170.

Références

[1] R. Sanchez, J. Mondot, Z. Stankovski, A, Cossic, I. Zmijarevic, "APOLLO2: a user oriented, portable, modular code for multigroup transport assembly calculations", *Nuclear Science and Engineering*, 100, pp. 352-362, 1988.

[2] R. Sanchez, I. Zmijarevic, M. Coste-Delclaux, E. Masiello, S. Santandrea, E. Martinolli, L. Villatte, N. Schwartz, N. Guler, "APOLLO2 Year 2010", *Nuclear Engineering and Technology*, vol. 42, n° 5, pp. 474-499, October 2010.

[3] N. Hfaiedh, *Nouvelle Méthodologie de Calcul de l'Absorption Résonnante*. Thèse de doctorat, Université Louis Pasteur Strasbourg I, 2006.

[4] P. Mosca, *Conception et développement d'un mailleur énergétique adaptatif pour la génération des bibliothèques multigroupes des codes de transport*, Thèse de Doctorat, Université Paris Sud 11, Orsay, France, 2009.

[5] A. Calloo, *Développement d'une nouvelle modélisation de la loi du choc dans les codes de transport multigroupes : application au calcul des réacteurs de Génération III et IV*, Thèse de Doctorat de l'Université de Grenoble, France 2012.

[6] M. Livolant, F. Jeanpierre, *Autoprotection des résonances dans les réacteurs nucléaires*, Rapport CEA-R-4533- 1974.

[7] G. Rimpault et *al.*, "The ERANOS Code and Data System for Fast Reactor Neutronic Analysis", *Proc. Int. Conf. PHYSOR 2002*, Seoul, Korea, October 7-10, 2002.

[8] M. Coste, S. Mengelle, "Implementation of a sub-group method for self-shielding calculations in APOLLO2 code", *International Conference on the Physics of Reactors, PHYSOR 96*, Vol I, pp. 323-331, Mito, Ibaraki, Japan,1996.

[9] D.S. Selengut, "Diffusion coefficients for heterogeneous systems", *Transactions of the American Nuclear Society*, 3, 398, 1960.

[10] E.W. Larsen, "Neutron transport and diffusion in inhomogeneous media", I. J. Math. Phys. 16 (7), pp. 1421-1427, 1975.

[11] A. Kavenoky, "The SPH Homogenization Method", AIEA, Comité technique en physique des réacteurs, Würenlingen, Suisse, 1978 ; *Proc. Specialists Meeting on Homogenization Methods in Reactor Physics*, AIEA, Lugano, 1978.

[12] A. Hébert, *Développement de la méthode SPH : Homogénéisation de cellules dans un réseau non uniforme et calcul des paramètres de réflecteur*, Thèse de Doctorat, Université Paris Sud XI, Orsay, 1980, Note CEA-N-2209, 1981.

[13] P. Benoist, *Homogenization, Theory in Reactor Lattices*, Note CEA-N-2471, février 1986.

[14] K.S. Smith, "Assembly homogenization techniques for light water reactor analysis", *Progress in Nuclear Energy*, 17 (3), pp. 303-335, 1986.

[15] R. Sekkouri, *Analyse des techniques d'homogénéisation et des schémas de calcul pour les réacteurs à eau*, Thèse de Doctorat, Université Paris Sud XI, Orsay, 1994.

[16] Ph. Magat, *Analyse des techniques d'homogénéisation spatiale et énergétiques dans la résolution de l'équation du transport des neutrons dans les réacteurs nucléaires*, Thèse de Doctorat, Université Aix-Marseille I, 1997.

[17] R. Sanchez, "Assembly homogenization techniques for core calculations", *Progress in Nuclear Energy*, 51, pp. 14-31, 2009.

Richard Lenain et Anne Nicolas
Département de modélisation des systèmes et structures

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 55

Les formes dérivées des équations fondamentales

Dans les systèmes sous flux considérés ici, le processus d'émission de neutrons lié à la fission spontanée des nucléides est parfaitement négligeable. Il est donc écarté.

Les calculs de transport stationnaires

La plupart du temps, un réacteur fonctionne en régime stationnaire, c'est-à-dire à puissance constante. Il s'ensuit que sa population de neutrons est constante : à chaque génération, on a le même nombre de neutrons qu'à la génération précédente. On dit alors que le réacteur est **critique***. Dans un réacteur sur-critique, le nombre de neutrons augmente avec le temps, et, *a contrario*, dans un réacteur sous-critique, le nombre de neutrons diminue avec le temps.

Pour décrire un réacteur critique, on cherche une solution stationnaire de l'équation de Boltzmann, où les sources de neutrons sont limitées aux sources de fission induite. Pour décrire cette source, on utilise le nombre total de neutrons émis (**neutrons prompts*** et **neutrons retardés***) et le spectre d'émission des seuls neutrons prompts qui représentent la quasi-totalité des neutrons émis par fission. On fait donc abstraction de l'impact du spectre d'émission des neutrons retardés, après s'être assuré du bien-fondé de cette hypothèse.

Forme intégro-différentielle de l'équation de Boltzmann stationnaire

On est, par conséquent, conduit à résoudre l'équation :

$$\vec{\Omega}.\vec{\nabla}\psi(\vec{r},E,\vec{\Omega}) + \sum_k N_k(\vec{r})\,\sigma_k(E)\psi(\vec{r},E,\vec{\Omega}) \qquad (1)$$

$$= \sum_k N_k(\vec{r}) \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\vec{\Omega}'\,\sigma_{s,k}(E'\to E,\vec{\Omega}'\to\vec{\Omega})\psi(\vec{r},E',\vec{\Omega}')$$

$$+ \frac{1}{4\pi}\sum_k N_k(\vec{r}) \int_0^\infty dE'\,\nu_{t,k}(E')\sigma_{f,k}(E')\chi_{p,k}(E'\to E)\phi(\vec{r},E')$$

- $\nu_{t,k}(E')$: nombre moyen de neutrons (prompts et retardés) émis de manière isotrope à la suite d'une fission induite sur un noyau k par un neutron incident d'énergie E'.

L'équation (1) décrit un équilibre parfait entre productions et disparitions des neutrons, qui seul peut conduire à un état stationnaire.

Forme intégrale de l'équation de Boltzmann stationnaire

On peut écrire l'équation de Boltzmann stationnaire sous une forme telle que toutes les variables de l'espace des phases apparaissent dans des opérateurs intégraux. Cette forme intégrale de l'équation de Boltzmann est utilisée dans deux types de traitements du transport des neutrons : la méthode des probabilités de collision et la méthode de Monte-Carlo.

La forme intégrale de l'équation de Boltzmann peut soit se déduire de l'équation (1) établie dans le chapitre traitant des équations fondamentales de la neutronique, soit s'établir directement.

La figure 20 (page suivante) montre que le flux angulaire $\psi(\vec{r},\,E,\,\vec{\Omega})$ cherché au point de l'espace des phases $(\vec{r},\,E,\,\vec{\Omega})$ résulte de deux termes :

- Les neutrons émis en $\vec{r}\,' = \vec{r} - s\vec{\Omega}$ à l'énergie E et dans la direction $\vec{\Omega}$, $S(\vec{r}-s\vec{\Omega},\,E,\,\vec{\Omega})$. Ces neutrons ont une probabilité $\exp(-\int_0^s \Sigma(\vec{r}-s'\vec{\Omega},E)\,ds')$ d'arriver en $(\vec{r},\,E,\,\vec{\Omega})$ sans subir de collision. En intégrant sur toutes les distances s séparant le point d'émission $\vec{r}\,'$ et le point $\vec{r}$ d'arrivée, on obtient le premier terme qui contribue au flux angulaire $\psi(\vec{r},\,E,\,\vec{\Omega})$:

$$\int_0^\infty ds\,exp(-\int_0^s \Sigma(\vec{r}-s'\vec{\Omega},E)\,ds')\,S(\vec{r}-s\vec{\Omega},E,\vec{\Omega})$$

- les neutrons d'énergie E' et de direction $\vec{\Omega}'$ qui subissent une diffusion en $\vec{r}\,' = \vec{r} - s\vec{\Omega}$ qui leur confère une énergie E et une direction $\vec{\Omega}$:

$$\int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\vec{\Omega}'\,\Sigma_s(\vec{r}-s\vec{\Omega},E'\to E,\vec{\Omega}'\to\vec{\Omega})\psi(\vec{r}-s\vec{\Omega},E',\vec{\Omega}')$$

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 56

Par le même raisonnement que précédemment, on obtient le second terme qui contribue au flux angulaire $\psi(\vec{r},\ E,\ \vec{\Omega})$:

$$\int_0^\infty ds\ exp(-\int_0^s \Sigma(\vec{r}-s'\vec{\Omega},E)\,ds')\int_0^\infty dE'\int_{4\pi} d\vec{\Omega}'\,\Sigma_s(\vec{r}-s\vec{\Omega},E'\to E,\vec{\Omega}'\to\vec{\Omega})\psi(\vec{r}-s\vec{\Omega},E',\vec{\Omega}')$$

En régime stationnaire, l'équation intégrale du transport s'écrit donc :

$$\psi(\vec{r},E,\vec{\Omega}) = \int_0^\infty ds\ exp(-\int_0^s \Sigma(\vec{r}-s'\vec{\Omega},E)\,ds')\ S(\vec{r}-s\vec{\Omega},E,\vec{\Omega}) \qquad (2)$$
$$+\int_0^\infty ds\ exp(-\int_0^s \Sigma(\vec{r}-s'\vec{\Omega},E)\,ds')\int_0^\infty dE'\int_{4\pi} d\vec{\Omega}'\,\Sigma_s(\vec{r}-s\vec{\Omega},E'\to E,\vec{\Omega}'\to\vec{\Omega})\,\psi(\vec{r}-s\vec{\Omega},E',\vec{\Omega}')$$

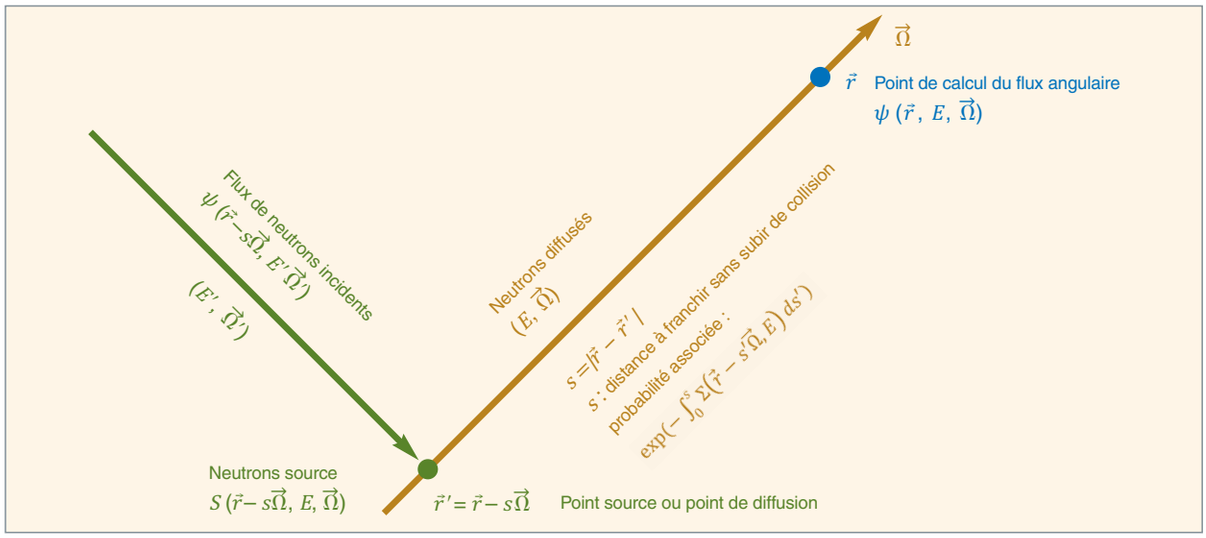


Fig. 20. Établissement de l'équation intégrale de Boltzmann en régime stationnaire. Le flux angulaire $\psi(\vec{r},\ E,\ \vec{\Omega})$ résulte des neutrons provenant de la source $S(\vec{r}-s\vec{\Omega},\ E,\ \vec{\Omega})$ et de la source de diffusion $\Sigma_s(\vec{r}-s\vec{\Omega},\ E'\to E,\ \vec{\Omega}'\to\vec{\Omega})\ \psi(\vec{r}-s\vec{\Omega}',\ E',\ \vec{\Omega}')$.

Équation critique – Introduction du coefficient de multiplication effectif

Pour avoir une solution stationnaire à l'équation, **quel que soit l'état réel du système** (critique, sur-critique ou sous-critique), on modifie l'équation (1) en divisant les sources de fission par un facteur qui permet de rétablir l'équilibre entre productions et disparitions. Ce facteur est appelé « **facteur de multiplication effectif*** » ou k_{eff}. L'équation (1) devient alors l'équation (3),

$$\vec{\Omega}.\vec{\nabla}\psi(\vec{r},E,\vec{\Omega}) + \sum_k N_k(\vec{r})\,\sigma_k(E)\psi(\vec{r},E,\vec{\Omega}) \qquad (3)$$
$$= \sum_k N_k(\vec{r})\int_0^\infty dE'\int_{4\pi} d\vec{\Omega}'\,\sigma_{s,k}(E'\to E,\vec{\Omega}'\to\vec{\Omega})\psi(\vec{r},E',\vec{\Omega}')$$
$$+\frac{1}{k_{eff}}\frac{1}{4\pi}\sum_k N_k(\vec{r})\int_0^\infty dE'\,\nu_{t,k}(E')\sigma_{f,k}(E')\chi_{p,k}(E'\to E)\phi(\vec{r},E')$$

qui est une équation aux valeurs propres. On peut montrer que k_{eff} est la plus grande valeur propre et que $\psi(\vec{r},\ E,\ \vec{\Omega})$ est la fonction propre associée.

On appelle (3) le problème critique associé et la solution $\psi(\vec{r},\ E,\ \vec{\Omega})$ est dénommée flux critique. On peut aussi montrer que le k_{eff} introduit dans l'équation s'accorde avec la définition de facteur de multiplication comme le rapport entre les neutrons de génération $(i+1)$ et les neutrons de génération i.

Le problème aux valeurs propres (3) est résolu par une méthode connue sous le nom d'« **itération de la puissance*** » : on commence avec une distribution d'essai de la source (habituellement une constante en espace et un spectre de Watt en énergie) et on résout le problème à source fixe qui en résulte. Avec le flux ainsi calculé, on met à jour la distribution des sources de fissions, et ainsi de suite, selon le schéma itératif :

$$\vec{\Omega}.\vec{\nabla}\psi^{(n)}(\vec{r},E,\vec{\Omega}) + \sum_k N_k(\vec{r})\,\sigma_k(E)\psi^{(n)}(\vec{r},E,\vec{\Omega}) = \sum_k N_k(\vec{r})\int_0^\infty dE'\int_{4\pi} d\vec{\Omega}'\,\sigma_{s,k}(E'\to E,\vec{\Omega}'\to\vec{\Omega})\psi^{(n)}(\vec{r},E',\vec{\Omega}') \qquad (4)$$
$$+\frac{1}{k_{eff}^{(n-1)}}\frac{1}{4\pi}\sum_k N_k(\vec{r})\int_0^\infty dE'\,\nu_{t,k}(E')\sigma_{f,k}(E')\chi_{p,k}(E'\to E)\phi^{(n-1)}(\vec{r},E')$$

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 57

Analogie formelle entre les équations intégrales de Boltzmann et de Bateman

En faisant apparaître la densité de collision $\zeta(\vec{r},\ E,\ \vec{\Omega}) = \Sigma(\vec{r},\ E)\ \psi(\vec{r},\ E,\ \vec{\Omega})$, l'équation intégrale de Boltzman en régime stationnaire pour un problème à source fixe dans un milieu non multiplicateur s'écrit :

$$\zeta(\vec{r},E,\vec{\Omega}) = \Sigma(\vec{r},E)\int_0^{\infty} ds\ exp(-\int_0^{s}\Sigma(\vec{r}-s'\vec{\Omega},E)\,ds')\,S(\vec{r}-s\vec{\Omega},E,\vec{\Omega})$$
$$+\,\Sigma(\vec{r},E)\int_0^{\infty} ds\ exp(-\int_0^{s}\Sigma(\vec{r}-s'\vec{\Omega},E)\,ds')\ \int_0^{\infty}dE'\int_{4\pi}d\vec{\Omega}'\frac{\Sigma_s(\vec{r}-s\vec{\Omega},\ E'\to E,\vec{\Omega}'\to\vec{\Omega})}{\Sigma(\vec{r}-s\vec{\Omega},E')}\,\zeta(\vec{r}-s\vec{\Omega},E',\vec{\Omega}')$$

Dans le cas où le flux provoquant les transmutations de nucléides est indépendant du temps, les équations de Bateman peuvent être réécrites sous la forme intégrale suivante :

$$N_k(\vec{r},t) = \int_0^t \sum_{m\neq k}\mu_{k\leftarrow m}(\vec{r},t')N_m(\vec{r},t')e^{-\mu_k(\vec{r})(t-t')}dt' + \int_0^t U_k(\vec{r},t')e^{-\mu_k(\vec{r})(t-t')}dt'$$

- $\mu_k(\vec{r}) = \lambda_k + \varsigma_k(\vec{r})$
- $\mu_{k\leftarrow m}(\vec{r}) = \lambda_{k\leftarrow m} + \varsigma_{k\leftarrow m}(\vec{r})$
- $U_k(\vec{r},t')$: taux de production du nucléide k au point $\vec{r}$ et à l'instant t'.

On définit l'« activité généralisée » de l'ensemble des nucléides comme le vecteur dont la composante k est donnée par la relation :

$$A_k(\vec{r},t) = \mu_k(\vec{r})N_k(\vec{r},t)$$

L'« activité généralisée » satisfait l'équation intégrale suivante :

$$\forall k\quad A_k(\vec{r},t) = \mu_k(\vec{r})\int_0^t\sum_{m\neq k}\frac{\mu_{k\leftarrow m}(\vec{r})}{\mu_m(\vec{r})}A_m(\vec{r},t')e^{-\mu_k(\vec{r})(t-t')}dt' + \mu_k(\vec{r})\int_0^t U_k(\vec{r},t')e^{-\mu_k(\vec{r})(t-t')}dt'$$

L'analogie formelle entre le transport en régime stationnaire et la transmutation en un point $\vec{r}$ donné est explicitée dans le tableau ci-dessous :

Tableau 9

Analogie formelle entre le transport en régime stationnaire et la transmutation

Transport stationnaire	**Évolution en un point**
Espace : $\vec{r}$	Temps : t
Énergie : E (variable continue)	Espèce de nucléide : k (variable discrète)
Direction : $\vec{\Omega}$	Irréversibilité du temps : $t > 0$
Flux en phase : $\psi(\vec{r},\ E,\ \vec{\Omega})$	Concentration en radionucléides : $N_k(\vec{r},t)$
Section efficace macroscopique totale : $\Sigma(\vec{r},\ E)$	Taux de transmutation microscopique total : $\mu_k(\vec{r})$
Densité de collision : $\zeta(\vec{r},\ E,\ \vec{\Omega}) = \Sigma(\vec{r},\ E)\ \psi(\vec{r},\ E,\ \vec{\Omega})$	Activité généralisée : $A_k(\vec{r},t) = \mu_k(\vec{r})\ N_k(\vec{r},t)$
Source de neutrons : $S(\vec{r},\ E,\ \vec{\Omega})$	Activité source : $S = U_k(\vec{r},t)$
Équation intégrale du transport : $\zeta = TC\zeta + TS$	Équation intégrale de la transmutation : $A = TCA + TS$
T opérateur intégral de déplacement en espace : $TS(\vec{r},E,\vec{\Omega}) = \Sigma(\vec{r},E)\int_0^{\infty}ds\ S(\vec{r}-s\vec{\Omega},E,\vec{\Omega})\ exp(-\int_0^{s}\Sigma(\vec{r}-s'\vec{\Omega},E)\,ds')$	T opérateur intégral de déplacement en temps : $TU_k(\vec{r},t) = \mu_k(\vec{r})\int_0^t U_k(\vec{r},t')e^{-\mu_k(\vec{r})(t-t')}dt'$
C opérateur de diffusion : $C\zeta(\vec{r},E,\vec{\Omega}) = \int_0^{\infty}dE'\int_{4\pi}d\vec{\Omega}'\frac{\Sigma_s(\vec{r},E'\to E,\vec{\Omega}'\to\vec{\Omega})\zeta(\vec{r},E',\vec{\Omega}')}{\Sigma(\vec{r},E')}$	C opérateur de transmutation : CA vecteur dont la k^e composante est donnée par : $[CA]_k(\vec{r},t) = \sum_{m\neq k}\frac{\mu_{k\leftarrow m}(\vec{r})}{\mu_k(\vec{r})}A_m(\vec{r},t)$

Références

P. H. Wilson, "Analog Monte Carlo Methods for Simulating Isotopic Inventories in Complex Systems", *Nuclear Science and Engineering*, 152, 3, pp. 243-255, March 2006.

C. M. Diop, "Integral form of nuclide generation and depletion equations for Monte-Carlo simulation. Application to perturbation calculations", *Annals of Nuclear Energy*, 35, pp. 2156-2159, 2008.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 58

Flux adjoint, importance et fonction de Green

L'**équation adjointe* de l'équation de Boltzmann** est également largement utilisée en neutronique. Le **flux adjoint*** est la solution de cette équation. Il s'interprète comme le nombre moyen de neutrons issus de l'histoire d'un neutron initial d'une énergie fixée, placé en un point donné de l'espace. En régime sous-critique, ce nombre est fini. Par contre, en régime critique ou sur-critique, la somme des descendants des générations successives est infinie, ce qui pose un problème d'interprétation. On est donc amené « *à refuser la notion de flux adjoint pour un système sur-critique et à considérer que le flux adjoint d'un cas critique est la limite du flux adjoint du cas sous-critique, lorsque sa réactivité (négative) tend vers zéro… Dans un système critique, une fraction infinitésimale des neutrons a une descendance infinie : l'évaluation de la limite pose donc un problème du type* “ $0 \times \infty$ ”. » [1]

Ce nombre moyen de descendants mesure l'**importance*** [2] du neutron initial considéré pour l'entretien de la réaction en chaîne. D'où son alias d'**importance** souvent utilisé. Contrairement au flux sa nature mathématique est une fonction et non une densité.

Le flux adjoint intervient pour traiter différents problèmes de neutronique, par exemple :

- En cinétique où il sert à définir des coefficients cinétiques effectifs utilisés pour la cinétique d'un réacteur point ;
- en cinétique et neutronique expérimentale pour faire des calculs de perturbation et concevoir/interpréter des mesures de réactivité [3] ;
- en transport et en évolution pour calculer les profils de sensibilité permettant d'effectuer des calculs d'incertitude sur des grandeurs physiques d'intérêt par propagation des incertitudes existant sur les données physiques du problème à résoudre (sections efficaces…) ;
- en transport Monte-Carlo pour accélérer la simulation ;
- en transport pour réaliser des études paramétriques telles que celles relatives à la détermination des réponses de détecteurs en fonction de la distribution de la puissance du cœur du réacteur, ainsi qu'il est montré ci-après.

On considère un détecteur k occupant une zone d'espace Z, caractérisé par une fonction réponse ou sensibilité s_k (section efficace macroscopique, par exemple). La réponse associée au flux scalaire de neutrons $\phi\,(P)$, où P représente le couple de variables $(\vec{r}\,, E)$, s'écrit :

$$R_k(Z) = \int_Z s_k(P)\,\phi(P)dP \qquad (1)$$

Le flux $\phi\,(P)$ résulte d'une source de neutrons $S(P')$ circonscrite dans un domaine Z' de l'espace. Supposons que l'on veuille étudier le comportement de la réponse $R_k(Z)$ en fonction de diverses distributions de sources $S(P')$. Il est toujours possible de faire un calcul de transport pour chacune des distributions de sources à considérer. Une autre voie de calcul consiste à résoudre l'équation adjointe du transport en prenant pour terme source la sensibilité du détecteur $s_k(P)$ pour $P \in Z$. La résolution de cette équation fournit le flux adjoint $\psi^+(P)$ et l'on peut montrer que $R_k(Z)$ est également donnée par :

$$R_k(Z) = \int_{Z'} S(P')\,\psi^+(P')dP' \qquad (2)$$

L'intérêt de cette expression pour des calculs paramétriques est manifeste, puisqu'il suffit de n'effectuer qu'un unique calcul de transport adjoint et de convoluer le flux adjoint obtenu avec les différentes distributions de sources envisagées pour déterminer les réponses $R_k(Z)$ correspondantes.

On notera le lien du flux adjoint avec les fonctions de Green $G(P'\to P)$:

$$R_k(Z) = \int_Z s_k(P)\,dP \int_{Z'} S(P')\,G(P' \to P)dP'$$
$$= \int_{Z'} S(P')\,dP' \int_Z s_k(P)G(P' \to P)dP$$

et donc en comparant avec (2) :

$$\psi^+(P') = \int_Z s_k(P)G(P' \to P)dP \qquad (3)$$

Références

[1] P. Reuss, *Précis de neutronique*, p. 370, Les Ulis, EDP Sciences/INSTN, 2003.

[2] J. Lewins, *Importance – The Adjoint Function*, Pergamon Press, 1965.

[3] J. Bussac, P. Reuss, *Traité de Neutronique*, chapitre xxv : “Théorie des perturbations”, pp. 403-415, Paris, Hermann, 1985.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 59

Le facteur de multiplication à l'étape (n) est calculé comme le rapport entre le flux à l'étape (n) et le flux à l'étape $(n-1)$. Le problème aux valeurs propres est ainsi résolu comme une succession de problèmes à source fixe, jusqu'à la convergence numérique.

L'équation (3) nécessite une résolution numérique souvent complexe, en raison du nombre très élevé d'inconnues, lié à la dimension 6 de l'espace des phases $(\vec{r},\ E,\ \vec{\Omega})$. Elle a pour solution le flux angulaire $\psi\ (\vec{r},\ E,\ \vec{\Omega})$, alors que l'on pourrait se contenter de la connaissance du flux scalaire pour calculer les taux de fission.

Les équations de la cinétique spatiale

Pour traiter de façon générale un problème dépendant du temps, il faut partir du système d'équations couplées établi au chapitre traitant des équations fondamentales de la neutronique.

Il est d'usage de distinguer l'évolution temporelle du cœur du réacteur sur une gamme allant de la fraction de seconde à quelques minutes (changements de puissance, phases de démarrage et d'arrêt du réacteur, situations accidentelles) et l'évolution du combustible par modification de sa composition isotopique sur des échelles de temps allant de quelques heures à plusieurs mois. Ce dernier aspect est partiellement traité *infra*, p. 107-113, dans le chapitre intitulé : « Méthodes de résolution des équations de Bateman généralisées ».

La *cinétique* consiste à prédire l'évolution de la population de neutrons aux échelles de temps où le phénomène d'émission des neutrons retardés joue un rôle déterminant sur l'évolution de la réactivité. Elle est cruciale pour le pilotage des réacteurs en situation normale et accidentelle.

Comme la source de neutrons retardés s'exprime en fonction des concentrations des noyaux précurseurs, il faut connaître l'évolution en temps de ces nucléides particuliers. En revanche, l'échelle de temps étant relativement courte, on peut négliger, pour le transport des neutrons, l'évolution en fonction du temps des concentrations des nucléides.

On note P l'ensemble des noyaux précurseurs de neutrons retardés. Il est important de rappeler que ces noyaux ont la propriété de **pouvoir** décroître par la voie $(\beta^-,\ n)$, décroissance β^- suivie de l'émission immédiate d'un neutron. Mais cette voie n'est pas leur unique mode de décroissance. Dans le cas particulier du brome 87, qui est un des principaux précurseurs de neutrons retardés, sa décroissance par la voie $(\beta^-,\ n)$ n'a lieu que dans 0,02 % des cas.

Si on note F l'ensemble des nucléides fissiles qui est disjoint de l'ensemble P, on peut écrire l'équation d'évolution des concentrations des précurseurs, relativement au seul phénomène d'émission de neutrons retardés. Pour distinguer cette équation de celle dérivée de l'équation de Bateman, où toutes les causes d'évolution seraient prises en compte, on note C_p la concentration d'un précurseur p.

La contribution principale à la production des précurseurs est la fission induite. La contribution principale à la disparition des précurseurs, relativement au seul phénomène d'émission de neutrons retardés, est leur décroissance radioactive par la voie $(\beta^-,\ n)$. En négligeant les autres causes de variation, on obtient, pour un précurseur p de l'ensemble P l'équation suivante :

$$\frac{dC_p(\vec{r},t)}{dt} = -\lambda_{d,p} C_p(\vec{r},t) + \sum_{k\epsilon F} N_k(\vec{r})\beta_p^{(k)} \int_0^\infty dE'\, \nu_{t,k}(E')\sigma_{f,k}(E')\phi(\vec{r},E',t) \quad (5)$$

C'est un bilan au point $\vec{r}$ et à l'instant t d'un quelconque nucléide précurseur p. Dans cette équation,

- $\lambda_{d,p}$: constante partielle de décroissance radioactive du nucléide p, correspondant à la voie $(\beta^-,\ n)$,
- $\nu_{t,k}\ (E')$: nombre total moyen de neutrons émis lors d'une fission induite par un neutron incident d'énergie E' sur le nucléide k,
- $\beta_p^{(k)}\ \nu_{t,k}\ (E')$: nombre de neutrons retardés issus d'un précurseur p né de la fission induite à l'énergie E' sur le nucléide k,
- $N_k\ (\vec{r})\ \beta_p^{(k)}\ \int_0^\infty dE'\ \nu_{t,k}\ (E')\ \sigma_{f,k}\ (E')\ \phi\ (\vec{r}\,,E',\ t)$: production du précurseur p par fission induite sur le nucléide k, sachant qu'à un neutron retardé émis correspond un noyau précurseur formé.

Habituellement, on paramétrise l'**émission en temps des neutrons retardés**, pour chaque noyau fissile $k \in F$, en regroupant les processus d'émission par les noyaux précurseurs (environ cent cinquante) en six ou huit familles notées par le couple d'indices $(k,\ i)$. À chaque famille sont associées une constante de décroissance moyenne $\lambda_i^{(k)}$ rendant compte du rythme avec lequel sont produits les neutrons retardés issus de cette famille (elle correspond donc à la pondération des constantes de décroissance partielle $\lambda_{d,p}$ des différents noyaux précurseurs regroupés dans la famille) et une proportion de neutrons retardés $\beta_i^{(k)}$. La concentration des « précurseurs » de la famille $(k,\ i)$ est notée $C_i^{(k)}$. Elle est donnée par l'équation :

$$\frac{dC_i^{(k)}(\vec{r},t)}{dt} = -\lambda_i^{(k)} C_i^{(k)}(\vec{r},t) + N_k(\vec{r})\beta_i^{(k)} \int_0^\infty dE'\, \nu_{t,k}(E')\sigma_{f,k}(E')\phi(\vec{r},E',t) \quad (6)$$

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 60

En utilisant la paramétrisation des précurseurs, nous pouvons écrire la source de neutrons retardés de l'équation du transport sous la forme :

$$\frac{1}{4\pi}\sum_{k\in F}\sum_{i}\lambda_i^{(k)}C_i^{(k)}(\vec{r},t)\chi_{d,i}^{(k)}(E)$$

où $\chi_{d,i}^{(k)}(E)$ est la proportion de neutrons retardés de la famille (k, i) émis à l'énergie E.

L'équation du transport se réécrit alors sous la forme :

$$\frac{1}{v}\frac{\partial\psi(\vec{r},E,\vec{\Omega},t)}{\partial t} \qquad (7)$$

$$= -\vec{\Omega}.\vec{\nabla}\psi(\vec{r},E,\vec{\Omega},t) - \sum_k N_k(\vec{r})\,\sigma_k(E)\psi(\vec{r},E,\vec{\Omega},t)$$

$$+\sum_k N_k(\vec{r})\int_0^\infty dE'\int_{4\pi}d\vec{\Omega}'\,\sigma_{s,k}(E'\to E,\vec{\Omega}'\to\vec{\Omega})\psi(\vec{r},E',\vec{\Omega}',t)$$

$$+\frac{1}{4\pi}\sum_{k\in F}N_k(\vec{r})\int_0^\infty dE'\,\nu_{p,k}(E')\sigma_{f,k}(E')\chi_{p,k}(E'\to E)\phi(\vec{r},E',t)$$

$$+\frac{1}{4\pi}\sum_{k\in F}\sum_i\lambda_i^{(k)}C_i^{(k)}(\vec{r},t)\chi_{d,i}^{(k)}(E) + S_{ext}(\vec{r},E,\vec{\Omega},t)$$

Les équations couplées (6) et (7) sont appelées « **équations de la cinétique spatiale** ».

Mireille Coste-Delclaux, Cheikh M. Diop, Fausto Malvagi et Anne Nicolas
Département de modélisation des systèmes et structures

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 61

Méthodes déterministes de résolution de l'équation de Boltzmann en situation stationnaire

B. Davison et **J. B. Skypes** [1], dans leur ouvrage pionnier *Neutron Transport Theory*, paru en 1957, précisent que si les problèmes soulevés par la théorie du transport des particules neutres ont été identifiés et en partie résolus avant même la découverte du neutron, par des astrophysiciens comme **K. Schwarzschild** et **E. A. Milne**, puis plus tard par **S. Chandrasekhar** qui étudiait les transferts radiatifs, par un *effet boomerang*, les méthodes développées par la suite autour du transport des neutrons ont bénéficié au traitement des transferts radiatifs. La variété des situations à étudier en physique des réacteurs (multiplicité des formes, des matériaux, des dimensions, les hétérogénéités, les situations stationnaires et non stationnaires…) est à la source des nombreuses méthodes, développées dans le cadre de la théorie du transport des neutrons. L'examen de l'ensemble de ces méthodes fait apparaître différentes stratégies de calcul relevées par **J. J. Duderstadt** et **W. R. Martin** [2] et synthétisées dans le tableau 10 suivant le degré de complexité du problème de transport à résoudre :

- Modèles simples analytiques ayant pour finalité l'analyse d'un aspect particulier du comportement de la population de neutrons. Par exemple, la théorie du ralentissement permet de comprendre l'allure du spectre en énergie des neutrons, ainsi que les particularités du comportement des neutrons pénétrant dans une résonance ;

Tableau 10

Types de problèmes de transport des neutrons et stratégies de calcul

A : résolution analytique possible N : résolution numérique

	Géométries					
	Unidimensionnelle			Bidimensionnelle		Tridimensionnelle
Nature du problème	**infinie**	**semi-infinie**	**finie**	**x-y et r-z**		**générale**
Énergie						
Monocinétique	A	A	A	N	N	N
Multigroupe	A	A, N	N	N	N	N
Continue	A	A, N	N	N	N	N
Direction						
Isotrope	A	A	A	N	N	N
Anisotrope	A	A	N	N	N	N
Milieu						
Vide	A	A	A	A	A	A
Purement absorbant	A	A	A	A	A	A
Homogène	A	A	A	N	N	N
Hétérogène	N	A	N	N	N	N
Sources						
Localisée : point, fil, plane	A	A	A	N	N	N
Fonction de Green	A	A	A	N	N	N
Pulsée ou oscillante	A	A	A	N	N	N
Sans ou avec conditions aux limites	-	A	N	N	N	N
Quelconque	N	N	N	N	N	N
Dépendance en temps						
Stationnaire à source fixe	A	A	A	N	N	N
Stationnaire critique	A	A	A	N	N	N
Source pulsée ou oscillante	A	A	A	N	N	N

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 62

- approximations qui « altèrent » la forme d'origine de l'équation du transport. L'équation de la diffusion en est un exemple ;

- méthodes numériques déterministes – méthode S_N, méthode des caractéristiques, par exemple – ou stochastiques comme la méthode de Monte-Carlo permettant de traiter des configurations complexes.

L'approche **déterministe*** choisie pour résoudre sur ordinateur l'équation de Boltzmann en régime stationnaire repose sur une discrétisation de l'espace des phases. Plusieurs types de discrétisations existent pour une même variable et des modélisations peuvent être conjointement introduites. Toutes ces options possibles de discrétisation et de modélisation associées débouchent sur la mise au point d'autant de méthodes numériques de résolution de l'équation de Boltzmann, chacune présentant des avantages et des inconvénients.

Cette section décrit en premier lieu et de manière succincte, le passage de l'équation du transport continue à une forme discrétisée de cette même équation. Ce sont ensuite les grands principes de quelques-unes des méthodes numériques déterministes emblématiques de la neutronique, qui sont successivement présentés.

La discrétisation de l'espace des phases

La connaissance du flux angulaire $\psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$, défini dans la section précédente, permet d'accéder à d'autres grandeurs d'intérêt à évaluer. Parmi celles-ci, le flux scalaire $\phi(\vec{r}, E)$ joue un rôle fondamental, car c'est à partir de celui-ci que sont calculés les différents taux de réaction dont la connaissance est indispensable pour calculer un réacteur nucléaire.

La résolution déterministe de l'équation de Boltzmann stationnaire a recours à la discrétisation de toutes les variables de l'espace des phases, à savoir l'espace $\vec{r}$, l'énergie E et la direction $\vec{\Omega}$. L'usage est de discrétiser d'abord la variable énergie et, ensuite, les variables de direction et d'espace.

Le domaine en énergie des neutrons allant de 0 à 20 MeV est découpé en intervalles conventionnellement appelés « **groupes d'énergie*** » ou de manière encore plus concise **groupes*** (voir *supra*, p. 33). Par exemple, le code neutronique APOLLO résout l'équation du transport à 172 groupes ou à 281 groupes ou encore à 12 000 groupes selon la spécificité de la configuration physique étudiée et des modélisations adoptées pour représenter la variation importante des sections efficaces neutroniques dans les résonances. Dans la suite un groupe quelconque du domaine en énergie sera noté g.

La discrétisation angulaire (variable $\vec{\Omega}$) comporte généralement de l'ordre de 100 à 1 000 directions dans le but d'obtenir une bonne description du flux angulaire. On note $\vec{\Omega}_n$ la n^{ème} direction de la discrétisation angulaire.

Dans un réacteur nucléaire, la taille du système est de l'ordre du mètre, et la taille des hétérogénéités locales (l'épaisseur de la gaine du combustible, la longueur caractéristique du gradient de flux dans le crayon, etc.) est de l'ordre du millimètre. Il faut, par conséquent, découper l'espace (variable $\vec{r}$) en 10^3 mailles par dimension, ce qui donne 10^9 mailles spatiales. On note i une maille quelconque du domaine spatial.

L'application d'une telle discrétisation à l'équation du transport conduit à remplacer les dérivées par des différences finies, par exemple, et les intégrales par des sommes discrètes ou formules de quadrature. Au flux angulaire $\psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$ se substituent les formes discrétisées $\psi_i^g(\vec{\Omega}_n)$, $\psi^g{}_{i-1/2}(\vec{\Omega}_n)$ et $\psi^g{}_{i+1/2}(\vec{\Omega}_n)$ qui représentent le flux angulaire des neutrons dans le groupe d'énergie g, au milieu de l'intervalle i et aux bornes notées $(i - 1/2)$ et $(i + 1/2)$ de cet intervalle et dans la direction $\vec{\Omega}_n$. En raison du caractère linéaire de l'équation du transport, la discrétisation du flux angulaire conduit à l'obtention d'un système d'équations linéaires dont les $\psi_i^g(\vec{\Omega}_n)$, $\psi^g{}_{i-1/2}(\vec{\Omega}_n)$ et $\psi^g{}_{i+1/2}(\vec{\Omega}_n)$ sont les inconnues à déterminer. Pour pouvoir effectivement résoudre ce système, il convient de disposer d'autant d'équations que d'inconnues ; à cette fin, on y adjoint, d'une part, des conditions aux limites (les valeurs du flux angulaires aux frontières du cœur du réacteur, par exemple), et, d'autre part, des relations modélisant la variation spatiale du flux entre le milieu des intervalles en espace et leurs extrémités respectives. Permettant une écriture compacte, le formalisme matriciel est souvent utilisé pour écrire le système d'équations à résoudre.

En reprenant pour les différentes discrétisations les ordres de grandeur **les plus élevés** qui ont été mentionnés plus haut, on aboutit à $10^9 \times 10^3 \times 10^4 = 10^{16}$ volumes élémentaires de l'espace des phases. Par conséquent, on est amené à résoudre, à chaque pas de temps, des systèmes linéaires à 10^{17} degrés de liberté !

Historiquement, on comprend pourquoi les modèles analytiques ou semi-analytiques ont initialement dominé la physique des réacteurs nucléaires, permettant ainsi de réduire drastiquement ce nombre de degrés de liberté, tout en étant efficace. Progressivement, certains de ces modèles ont été associés à des techniques numériques de plus en plus sophistiquées que la disponibilité de calculateurs électroniques, puis d'ordinateurs, a fait émerger.

La figure 21, ci-après, indique quelques-unes des principales méthodes de résolution de l'équation du transport utilisées en neutronique :

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 62

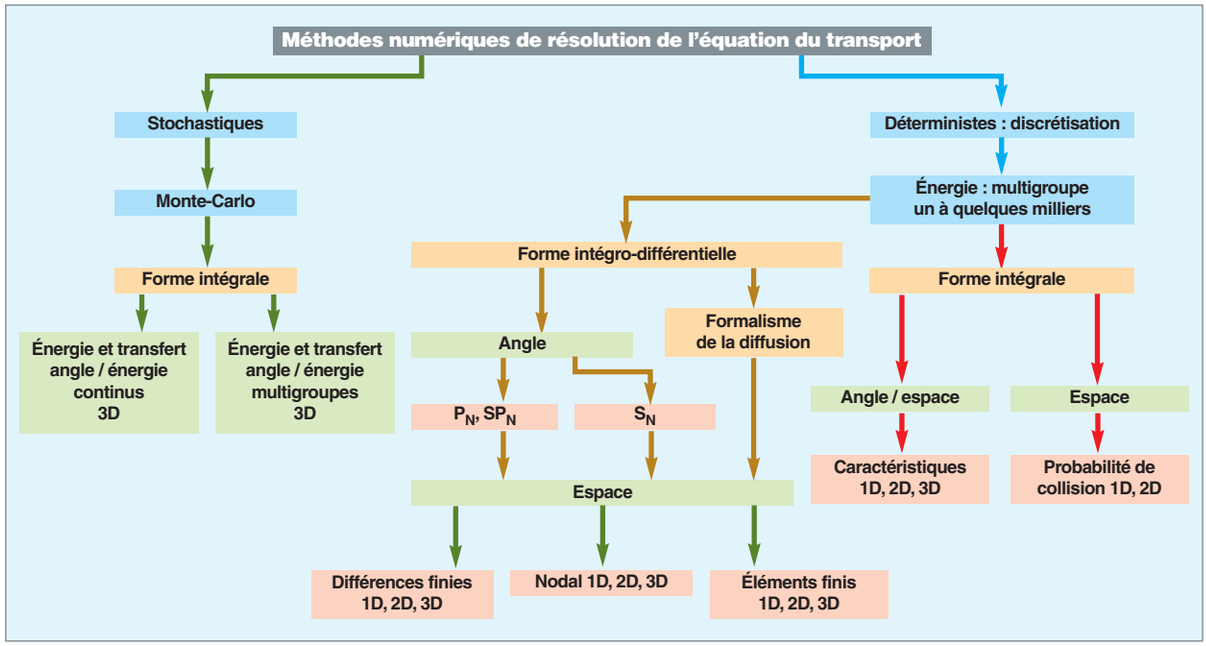


Fig. 21. Classification des différentes méthodes numériques de résolution de l'équation du transport des neutrons (voir aussi Y. Azmy, *International School in Nuclear Engineering*, Saclay, 2010).

Le nombre minimal d'inconnues associées au calcul de cœur d'un réacteur nucléaire de puissance

La discrétisation imposée par la résolution numérique de l'équation de Boltzmann conduit aux ordres de grandeurs **minimaux** suivants pour un **REP** de 900 MWe :

- **Nombre d'assemblages** : **150** de 4 m de hauteur ;
- **nombre de crayons/cellules** (combustible, gaine, zone modératrice) par assemblage : 17 x 17 = **289** ;
- **nombre total de cellules** : 150 x 289 = **43 350** ;
- **nombre de régions concentriques dans la zone combustible** : **3** ;
- **nombre de régions par cellule** : 3 + 2 = **5**
- **nombre de régions axiales** : **40**. La longueur d'un crayon est de 4 m, le gradient axial du flux étant a priori plus petit que son gradient radial, nous avons pris une hauteur de région de 10 cm ;
- **nombre de régions par cellule** : 5 x 40 = **200** ;
- **nombre de cellule dans tout le cœur** : **8.6 10^6** ;
- **nombre de groupes d'énergie** : **100** ;
- **nombre total de valeurs du flux scalaire** (inconnues) sur tout le cœur : 8,6 10^6 x 100 = **8,6 10^8**.

Si le flux scalaire est construit à partir du flux angulaire (cas de la méthode S_N par exemple) ce dernier doit être également calculé. Environ **250 directions angulaires** doivent donc encore être définies conduisant à un **nombre d'inconnues** – valeurs recherchées du flux angulaire – de l'ordre de :

8,6 10^8 x 250 ~ **2 10^{11}**

La résolution du système d'équations linéaires correspondant doit se faire par des itérations sur la source de fission, sur les groupes d'énergie thermique et fait appel à des techniques d'accélération.

Les besoins en **mémoire ordinateur** associés à une telle résolution sont estimés à **quelques Gigaoctets**.

Il a été indiqué plus haut que la résolution de l'équation du transport par des méthodes numériques fait intervenir des formules de quadrature en remplacement des intégrales continues. Il s'agit d'une approximation numérique entachée d'une certaine erreur qui dépend de la finesse de la discrétisation des domaines respectifs de variation des variables concernées.

En considérant, à titre d'illustration, une quadrature trapézoïdale, en désignant par d la dimension du problème traité (par exemple, les trois dimensions de l'espace) et par n le nombre total de nœuds de la discrétisation, on montre que l'erreur commise est proportionnelle à :

$$1/n^{\frac{2}{d}}$$

Cette expression représente le taux de convergence de la quadrature choisie en fonction de la finesse de la discrétisation. On constate donc que l'obtention d'une convergence cible (valeur imposée de l'erreur) est d'autant plus coûteuse en temps de calcul que la dimension d du problème à résoudre est élevée.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 64

Libre parcours moyen et discrétisations en espace et en énergie

Le libre parcours moyen d'un neutron dans la matière est la distance moyenne qu'il parcourt avant d'interagir. Celle-ci dépend de la densité de noyaux-cibles $N(\vec{r})$, et de la section efficace microscopique d'interaction $\sigma(E)$:

$$\lambda(\vec{r},E) = \frac{1}{N(\vec{r})\sigma(E)} = \frac{1}{\Sigma(\vec{r},E)}$$

Le libre parcours moyen est l'inverse de la section efficace macroscopique totale et dépend donc, en un point donné, de l'énergie du neutron. On peut définir autant de libres parcours moyens que de types d'interactions : dans la définition précédente, on substitue alors à la section efficace microscopique (resp. macroscopique) totale, la section efficace microscopique (resp. macroscopique) partielle considérée.

Quelques ordres de grandeur : dans le dioxyde d'uranium UO_2 enrichi à 5 %, pour des neutrons lents de quelques centièmes d'eV, le libre parcours moyen de fission est de l'ordre du cm (le diamètre d'un crayon combustible), et le libre parcours moyen de capture est d'une vingtaine de cm (la dimension transversale d'un assemblage). Cependant, la section efficace des premières résonances de capture de l'uranium 238 avoisine les 10 000 barns, ce qui correspond à un libre parcours moyen d'une cinquantaine de micromètres !

Pour faire un calcul neutronique correct, la discrétisation spatiale du système neutronique à étudier doit être de l'ordre de grandeur du libre parcours moyen.

À titre de comparaison, la convergence de la méthode stochastique Monte-Carlo est contrôlée par une erreur statistique variant comme $1/\sqrt{n}$ où n représente cette fois-ci le nombre d'histoires de neutrons simulées dans le système physique étudié. Cette expression montre que le comportement de l'erreur statistique est indépendante de la dimension d du problème considéré.

La comparaison du comportement de la convergence des deux approches déterministe et stochastique explique pourquoi la méthode de Monte-Carlo devient attractive, lorsqu'augmente la dimension du problème à résoudre.

La discrétisation en énergie

La résolution de l'équation du transport est rendue particulièrement complexe par la variation en énergie de certaines données, comme les sections efficaces neutroniques des noyaux présents dans un réacteur.

On rappelle que la section efficace microscopique d'un noyau caractérise la probabilité qu'a un neutron d'interagir avec ce noyau. Cette probabilité peut devenir très grande, lorsque l'énergie du neutron incident est telle que l'énergie conférée au noyau composé est proche de l'énergie de l'un de ses niveaux d'excitation. Cela se traduit par une brusque remontée de la section efficace d'interaction entre le neutron et le noyau, au voisinage de ces énergies. Pour ces énergies, le noyau présente des résonances ; il est dit **« résonnant* »** (voir fig. 22).

L'équation du transport peut être résolue, soit de façon ponctuelle (équation de Boltzmann ponctuelle), soit de façon multigroupe. Dans la première approche, la variation « exacte » en énergie des données est traitée et la répartition ponctuelle des neutrons en fonction de l'énergie est calculée. Dans la seconde approche, le domaine en énergie est discrétisé en un certain nombre de groupes d'énergie, et seule une répartition moyenne des neutrons à l'intérieur de chaque groupe est évaluée. Conventionnellement, ici, le premier groupe est

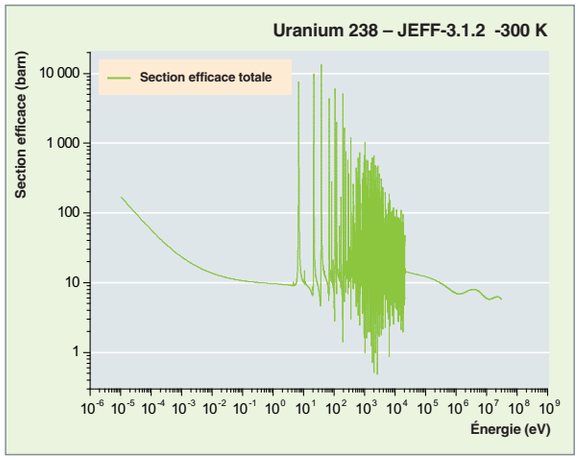


Fig. 22. Section efficace microscopique totale de l'uranium 238.

celui avec l'énergie maximale, et le dernier celui avec l'énergie minimale, car les neutrons issus de la fission naissent majoritairement à haute énergie (~ 2 MeV) et se ralentissent jusqu'aux énergies thermiques (< ~ 1eV). On adopte, en général, un découpage ayant en nombre « raisonnable » de groupes, c'est-à-dire de l'ordre de quelques centaines à quelques milliers. Ce nombre de groupes est à comparer au nombre de points utilisés pour représenter la variation ponctuelle en énergie des sections efficaces dans les calculs Monte-Carlo de référence (plusieurs dizaines, voire plusieurs centaines de milliers de points).

On appelle **flux angulaire multigroupe** $\phi^g(\vec{r},\vec{\Omega})$ l'intégrale du flux angulaire ponctuel $\phi(\vec{r},E,\vec{\Omega})$ dans le groupe, c'est-à-dire :

$$\psi^g(\vec{r},\vec{\Omega}) = \int_g \psi(\vec{r},E,\vec{\Omega})\,dE$$

De même, on appelle **flux scalaire multigroupe** $\phi^g(\vec{r})$ l'intégrale du flux scalaire ponctuel $\phi(\vec{r},E)$ dans le groupe, c'est-à-dire :

$$\phi^g(\vec{r}) = \int_g \phi(\vec{r},E)\,dE$$

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 65

Pour obtenir les équations donnant les flux multigroupes, on intègre l'équation de Boltzmann sur chacun des groupes. Ces équations sont appelées « équations multigroupes ».

À titre d'exemple, dans le cas d'un problème stationnaire avec source externe, on obtient les équations multigroupes suivantes pour le flux angulaire :

$$\vec{\Omega}.\vec{\nabla}\psi^g(\vec{r},\vec{\Omega}) + \sum_k N_k(\vec{r})\,\sigma_k^g\,\psi^g(\vec{r},\vec{\Omega}) = \sum_k N_k(\vec{r}) \sum_{g'} \int_{4\pi} d\vec{\Omega}'\,\sigma_{s,k}(g' \to g, \vec{\Omega}' \to \vec{\Omega})\,\psi^{g'}(\vec{r},\vec{\Omega}') + S_{ext}^g(\vec{r},\vec{\Omega}) \quad (1)$$

Ces équations ne contiendraient pas d'approximation si on définissait les sections efficaces multigroupes σ_k^g et les **sections efficaces multigroupes de transfert*** $\sigma_{s,k}(g' \to g, \vec{\Omega}' \to \vec{\Omega})$ comme des moyennes pondérées par le flux angulaire ponctuel en énergie $\psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$, ce qui impliquerait une dépendance en espace et en angle de ces sections efficaces multigroupes. En pratique, pour s'affranchir de la dépendance angulaire, ces sections efficaces sont pondérées par le flux scalaire $\phi(\vec{r}, E)$, ce qui conduit à des sections efficaces multigroupes ne dépendant que de l'espace. Par exemple, la section efficace multigroupe totale est définie par :

$$\sigma^g(\vec{r}) = \frac{\int_g \sigma(E)\phi(\vec{r},E)\,dE}{\int_g \phi(\vec{r},E)\,dE} \quad (2)$$

Malgré cette simplification, l'obtention des données nucléaires multigroupes reste un des problèmes les plus délicats de la neutronique, qui requiert encore aujourd'hui des modélisations complexes connues sous le terme de « formalisme d'**autoprotection*** ». À titre d'illustration, nous décrivons dans le paragraphe suivant le formalisme d'autoprotection utilisé dans le code APOLLO2.

Le formalisme d'autoprotection

Définition des sections efficaces multigroupes

Les données de l'équation multigroupe sont les sections efficaces multigroupes. Ces sections sont définies de façon que, pour chaque groupe g, le taux de réaction multigroupe (produit de la section efficace multigroupe par le flux scalaire multigroupe, solution de l'équation multigroupe de Boltzmann) soit égal à la valeur intégrée sur le groupe g du taux de réaction ponctuel (produit de la section efficace ponctuelle par le flux scalaire solution de l'équation ponctuelle de Boltzmann). On cherche donc à conserver, dans chaque groupe g, le nombre de réactions observées entre un neutron et un noyau, par unité de temps et de volume.

Par commodité, les équations de ce paragraphe sont écrites en fonction de la variable « **léthargie*** » et non en fonction de la variable « énergie ».

La section efficace multigroupe dans le groupe g, pour la réaction nucléaire de type q induite par un neutron, σ_q^g, est donc obtenue en écrivant la préservation des taux de réaction :

$$\sigma_q^g(\vec{r})\,\phi^g(\vec{r}) = \int_g \sigma_q(u)\phi(\vec{r},u)du \quad (3)$$

Dans l'équation (3), $\phi(\vec{r},u)$ représente le flux scalaire au point $\vec{r}$ et à la léthargie u, $\phi^g(\vec{r})$ le flux scalaire multigroupe au point $\vec{r}$, dans le groupe g.

Les taux de réaction sont des grandeurs qui dépendent de l'espace, par l'intermédiaire du flux (sauf dans le cas d'un milieu homogène infini). Il en est donc de même pour les sections efficaces multigroupes $\sigma_q^g(\vec{r})$.

En toute rigueur, il n'est donc pas possible de définir une fois pour toutes les sections efficaces multigroupes des noyaux et de créer des bibliothèques de sections efficaces multigroupes indépendantes de la géométrie.

L'équation (3) montre toute la complexité de l'obtention de ces sections.

- Les taux de réaction ponctuels à préserver (membre de droite de l'équation (3)) sont inconnus puisque le flux ponctuel $\phi(\vec{r},u)$ est inconnu ;
- Le flux multigroupe $\phi^g(\vec{r})$ est solution de l'équation multigroupe de Boltzmann dont on cherche à calculer les données (sections efficaces multigroupes $\sigma_q^g(\vec{r})$) ;
- Les sections efficaces ponctuelles $\sigma_q(u)$ peuvent avoir un comportement résonnant en fonction de la léthargie.

Il est naturel d'essayer de simplifier l'équation (3) en utilisant, à la place du flux réel inconnu $\phi(\vec{r},u)$, un spectre de pondération connu (représentatif du réacteur à traiter) qui soit indépendant de l'espace : $\phi_w(u)$. C'est ce qui est fait lors de la création des bibliothèques de données multigroupes (voir *infra*, p. 33-35).

Nous pouvons donc distinguer deux méthodes d'obtention des sections efficaces multigroupe :

- Celles utilisant le flux réel $\phi(\vec{r},u)$,
  - Les sections efficaces multigroupes sont appelées « **sections efficaces multigroupes autoprotégées*** ».
  - Elles sont données par l'équation (3).
  - Elles dépendent de l'espace et ne pourront être obtenues que lorsque le flux réel sera connu.

- Celles utilisant un spectre de pondération connu $\phi_w(u)$:
  - Les sections efficaces multigroupes sont appelées **sections efficaces multigroupes « à dilution infinie »**. La terminologie utilisée sera expliquée par la suite ;

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 66

- elles sont notées $\sigma^{g}_{q,\infty}$ et sont données par l'équation (4) ;
- elles sont indépendantes de l'espace et peuvent être calculées une fois pour toutes, en amont du calcul de transport, lors de la création des bibliothèques multigroupes.

$$\sigma^{g}_{q,\infty} = \frac{\int_g \sigma_q(u)\phi_W(u)du}{\int_g \phi_W(u)du} \qquad (4)$$

Il faut s'interroger sur la pertinence des sections efficaces multigroupe « à dilution infinie ». En dehors de leur domaine de résonances, les noyaux ont des sections efficaces qui varient lentement et de façon régulière avec la léthargie. Dans ce cas, l'influence du spectre de pondération utilisé pour « moyenner » leurs sections efficaces est faible et la pondération simplifiée décrite par l'équation (4) est pertinente.

Pour les noyaux résonnants, dans le domaine des résonances, cette simplification est généralement inacceptable (maillage multigroupe grossier). En effet, les sections efficaces peuvent varier plusieurs fois et de plusieurs décades, à l'intérieur d'un groupe du maillage multigroupe (fig. 23). Les sections efficaces multigroupe autoprotégées devront donc être calculées par l'équation (3) dans la géométrie spécifique du cas à traiter.

Le phénomène physique d'autoprotection

Le phénomène physique d'autoprotection peut être décrit de la façon suivante. Dans un milieu donné, le flux neutronique se creuse, en fonction de l'énergie, de façon d'autant plus accentuée que la section efficace macroscopique de ce milieu est grande. Les taux de réaction ont donc des variations, en fonction de l'énergie, beaucoup plus lentes que les sections efficaces et que le flux. C'est cette compensation des effets au niveau du calcul des taux de réaction qui est désignée par le terme d'**« autoprotection »**.

Le calcul des sections efficaces multigroupes, lorsqu'il est effectué en utilisant le flux réel qui se creuse au niveau des résonances, prend en compte le phénomène d'autoprotection et conduit donc à des **sections efficaces multigroupes autoprotégées**.

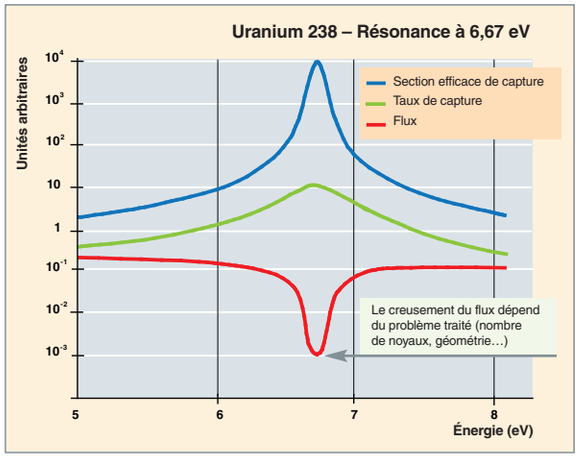


Fig. 23. Le phénomène d'autoprotection.

Le phénomène d'autoprotection a un aspect énergétique et un aspect spatial. En effet, il intervient aux énergies des **résonances*** des nucléides et dans les matériaux contenant des nucléides résonnants.

Pour illustrer l'aspect spatial de l'autoprotection, prenons l'exemple d'un neutron de 6,67 eV (donc, à l'énergie de la première résonance de l'U 238). Ce neutron possède, dans le dioxyde d'uranium, un libre parcours moyen de 80 µm seulement, ce qui signifie qu'il ne pourra pénétrer profondément à l'intérieur du crayon combustible d'un réacteur à neutrons thermiques. La périphérie des crayons sera donc irradiée différemment du centre. Les calculs de neutronique doivent pouvoir décrire ce phénomène, ce qui imposera un maillage très fin en périphérie de crayon, si l'on a recours à un calcul maillé.

L'aspect énergétique du phénomène d'autoprotection est schématisé sur la figure 23.

Pour l'uranium 238, dans le cas de la résonance à 6,67 eV, la section efficace de capture varie d'environ quatre décades, le flux d'un peu moins de trois décades en sens inverse, alors que le taux de réaction ne varie que d'environ une décade.

Enjeux de la modélisation du phénomène d'autoprotection

La prise en compte du phénomène d'autoprotection dans le cadre d'un code de transport multigroupe est indispensable. Prenons l'exemple du calcul d'une cellule contenant un crayon combustible composé d'uranium 238 et d'uranium 235, avec un maillage en énergie d'une centaine de groupes. Si le calcul est effectué en utilisant les sections efficaces multigroupes à dilution infinie de l'uranium 238, au lieu de ses sections efficaces multigroupes autoprotégées, le taux d'absorption de l'uranium 238 dans son domaine de résonances est surestimé d'un facteur 2 et la valeur du coefficient de multiplication effectif, qui caractérise le bilan de la réaction en chaîne s'établissant dans un système nucléaire, est sous-estimée de 25 %. Les ordres de grandeur des quantités calculées sont perdus.

Le phénomène d'autoprotection doit donc être modélisé dans les codes de transport multigroupes avant tout calcul de flux. Pour ces codes, cette modélisation peut donc être vue comme la dernière étape du traitement des sections efficaces.

Dans les réacteurs à neutrons thermiques, les résonances les plus importantes à traiter sont les résonances d'absorption des noyaux lourds. Mais pour les réacteurs à neutrons rapides ou pour des calculs spécifiques (calculs de réflecteurs, par exemple), il faut aussi prendre en compte les résonances de diffusion des noyaux plus légers, comme le sodium ou le fer.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 67

Principes de la modélisation du phénomène d'autoprotection

Comme le montre l'équation (3), le calcul des sections efficaces multigroupe autoprotégées d'un noyau résonnant passe par l'estimation du flux réel $\phi(\vec{r}, u)$ qui dépend des variables d'espace et d'énergie. Or, le domaine en énergie pour lequel les noyaux présentent des résonances est essentiellement le domaine du ralentissement (de quelques centaines de keV à quelques eV). Le flux utilisé pour calculer les sections efficaces multigroupes autoprotégées est donc obtenu en résolvant une équation de ralentissement. La répartition spatiale du flux est calculée par le biais d'une discrétisation des milieux contenant le noyau résonnant en différentes régions d'autoprotection notées α. On fait l'hypothèse que, dans chaque région d'autoprotection α, le flux est ponctuel en léthargie et constant en espace. Il est noté $\varphi_\alpha(u)$ et est utilisé pour le calcul des sections efficaces multigroupes autoprotégées dans la région α.

Cette modélisation permet d'associer à un noyau résonnant un jeu de sections efficaces multigroupes spécifique à chaque région d'autoprotection α. Pour une réaction de type q, ces sections efficaces sont données, dans chaque groupe en énergie g, par l'équation (5) :

$$\sigma_{q,\alpha}^{g} = \frac{\int_g \sigma_q(u)\varphi_\alpha(u)du}{\varphi_\alpha^g} \qquad (5)$$

où φ_α^g est le flux multigroupe dans le groupe g et la région α.

Il existe deux familles de méthodes permettant de réaliser le calcul des sections efficaces multigroupes autoprotégées pour les noyaux résonnants.

Méthodes procédant par équivalence avec un milieu homogène infini

On peut dériver de l'équation du ralentissement une équation appelée « équation de structure fine ». Cette équation est établie en milieu homogène infini dans l'encadré ci-après (p. 68).

Pour les méthodes procédant par équivalence avec un milieu homogène infini, on choisit d'utiliser pour $\varphi_\alpha(u)$ (dans l'équation (5)), le facteur de structure fine solution de l'équation de structure fine dans la région d'autoprotection α. Le calcul d'autoprotection s'effectue alors en deux étapes :

- Comme les taux de réaction ponctuels associés à ce facteur de structure fine ne peuvent être calculés directement dans le cadre de la modélisation du phénomène d'autoprotection (description fine des transferts en énergie « perdue » dans un calcul multigroupe), le calcul d'autoprotection les évalue en effectuant une équivalence avec un milieu homogène infini pour lequel ces taux de réaction sont connus grâce à des tabulations effectuées en amont du code de transport, à l'étape de création des bibliothèques (voir encadré ci-après, p. 68) ;
- une fois les taux de réactions ponctuels obtenus, le calcul d'autoprotection effectue une deuxième équivalence appelée « équivalence multigroupe » qui calcule les sections efficaces multigroupes qui préservent ces taux de réaction.

La partie délicate de ce calcul est l'obtention des taux de réaction à préserver. Cette partie nécessite, en effet, une modélisation physique de l'opérateur de ralentissement résonnant. La partie « équivalence multigroupe » se ramène, quant à elle, à la résolution d'un système non linéaire.

Les méthodes de ce type, dédiées initialement aux réacteurs à neutrons thermiques, sont mises en œuvre dans plusieurs codes de transport multigroupe, par exemple APOLLO, WIMS, HELIOS, CASMO, LANCER02, DRAGON (voir tableau des codes de neutronique, p. 138-139).

Méthodes de type « sous-groupes »

Les méthodes de type « sous-groupes » étaient dédiées, à l'origine, aux réacteurs à neutrons rapides.

Elles reposent sur l'hypothèse fondamentale que les sections efficaces résonnantes et les densités de collision (sources de ralentissement) ne sont pas corrélées. Cette hypothèse est vérifiée dans le domaine non résolu des noyaux (domaine prépondérant, dans le cas des réacteurs à neutrons rapides) ou dans tout le domaine en énergie, pourvu que le maillage multigroupe soit suffisamment fin. Ces méthodes sont des méthodes de référence dans leur domaine d'application. Elles sont présentes dans le code **ECCO*** et dans le code **APOLLO***.

Ces méthodes, qui ne demandent aucune modélisation de l'opérateur de ralentissement résonnant, permettent d'obtenir les sections efficaces multigroupes autoprotégées par une résolution directe de l'équation du ralentissement dans chaque région d'autoprotection α. Ces sections efficaces sont alors données par l'équation (6).

$$\sigma_{q,\alpha}^{g} = \frac{\int_g \sigma_q(u)\phi_\alpha(u)du}{\int_g \phi_\alpha(u)du} \qquad (6)$$

Les méthodes de type « sous-groupes » peuvent aussi être « étendues », de façon à élargir leur domaine d'application aux réacteurs à neutrons thermiques, dans le cadre d'un découpage multigroupe grossier. C'est ce qui est fait dans le code WIMS ou le code DRAGON. Les méthodes qui en résultent ne peuvent alors plus être considérées comme des méthodes de référence.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 68

Factorisation du flux - Notion de structure fine

Du fait du caractère résonnant des sections efficaces, le flux a aussi un caractère résonnant. On a coutume de factoriser le flux scalaire ϕ en un flux macroscopique Υ qui est le flux régnant hors des résonances et qui a donc une variation très lente en fonction de la léthargie, et un facteur de structure fine φ qui caractérise le comportement résonnant du flux dans la résonance. Ce facteur est sans dimension. L'équation permettant de le calculer s'appelle l'« équation de structure fine ». Elle est obtenue en factorisant le flux scalaire dans l'équation du ralentissement.

Pour un milieu homogène infini contenant un noyau résonnant dont les données sont indicées par 0 et des noyaux modérateurs dont les données sont indicées par 1, l'équation du ralentissement s'écrit :

$$\left(N_0\sigma_0(u) + \Sigma_1(u)\right)\phi(u) = N_0 r_0\phi(u) + \mathrm{R}_1\phi(u)$$

- N_0 : nombre de noyaux résonnants par unité de volume,
- $\sigma_0(u)$: section efficace microscopique totale du noyau résonnant à la léthargie u,
- $\Sigma_1(u)$: section efficace macroscopique totale des noyaux modérateurs à la léthargie u,
- $r_0\phi(u)$: opérateur microscopique de ralentissement sur le noyau résonnant,
- $R_1\phi(u)$: opérateur macroscopique de ralentissement sur les noyaux modérateurs.

Cette équation de bilan traduit le fait qu'il y a autant de neutrons qui disparaissent par chocs que de neutrons qui apparaissent par ralentissement à une léthargie u donnée.

Le flux macroscopique et le facteur de structure fine sont respectivement donnés par :

$$\begin{cases} \Upsilon(\mathrm{u}) = \dfrac{\mathrm{R}_1\phi(u)}{\Sigma_1(u)} \\ \varphi(\mathrm{u}) = \dfrac{\phi(u)}{\Upsilon(u)} \end{cases}$$

L'opérateur microscopique de ralentissement sur le noyau résonnant s'exprime par :

$$r_0\phi(u) = \int_{u-\varepsilon_0}^{u} \sigma_{s0}\left(u' \to u\right)\phi\left(u'\right)du'$$

où ε_0 est le gain maximum en léthargie sur le noyau résonnant (de l'ordre de $\frac{4}{a}$ pour un noyau lourd, a étant le rapport de la masse du noyau à celle du neutron).

En substituant le flux réel par le produit du facteur de structure fine et du flux macroscopique dans l'équation du ralentissement et en faisant l'approximation $r_0(\varphi\Upsilon)(u) \approx \Upsilon(u) r_0\varphi(u)$, approximation justifiée par le fait que le domaine d'intégration de l'opérateur r_0 est très petit et que le flux macroscopique $\Upsilon(u)$ varie très peu en fonction de la léthargie, on obtient :

$$\left(\sigma_0(u) + \frac{\Sigma_1(u)}{N_0}\right)\varphi(u) = r_0\varphi(u) + \frac{\Sigma_1(u)}{N_0}$$

Le paramètre σ_b, quotient de la section efficace macroscopique totale des noyaux modérateurs par le nombre de noyaux résonnants par unité de volume :

$$\sigma_b = \frac{\Sigma_1(u)}{N_0}$$

caractérise la dilution du noyau résonnant dans les noyaux modérateurs. Il est appelé « section de dilution ». On obtient donc l'**équation dite « de structure fine »** :

$$(\sigma_0(u) + \sigma_b)\varphi(u) = r_0\varphi(u) + \sigma_b$$

Quand le nombre de noyaux résonnants est nul, la section de dilution devient infinie. Il n'y a alors plus de phénomène d'autoprotection, puisqu'il n'y a plus de résonances. C'est ce qui explique la terminologie « sections efficaces multigroupes à dilution infinie » pour les sections efficaces multigroupes calculées sans prendre en compte le phénomène d'autoprotection (voir l'équation (4)).

Dans le cas d'un milieu homogène infini contenant un seul noyau résonnant, l'équation de structure fine est résolue, pour une série de températures et de dilutions, par des codes disposant des données nucléaires ponctuelles. Ces calculs sont généralement faits par les systèmes de traitement à l'étape de création des bibliothèques multigroupes.

Les résultats sont conservés sous forme de tabulations, en fonction de la température et de la dilution, des différents taux de réaction (absorption, diffusion et production) du noyau résonnant sur un maillage multigroupe donné. Ces taux sont appelés « taux effectifs » et font partie des données de base des méthodes d'autoprotection procédant par équivalence avec un milieu homogène infini.

Traitement des mélanges de noyaux résonnants

Un point particulièrement délicat de la modélisation du phénomène d'autoprotection est le traitement des mélanges de noyaux résonnants. Ce traitement est souvent effectué par des méthodes simplifiées, parmi lesquelles :

- Les méthodes itératives : chaque noyau résonnant est calculé séparément, les autres noyaux résonnants étant considérés comme des noyaux modérateurs avec des sections efficaces constantes par groupe. Ces calculs peuvent être itérés.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 69

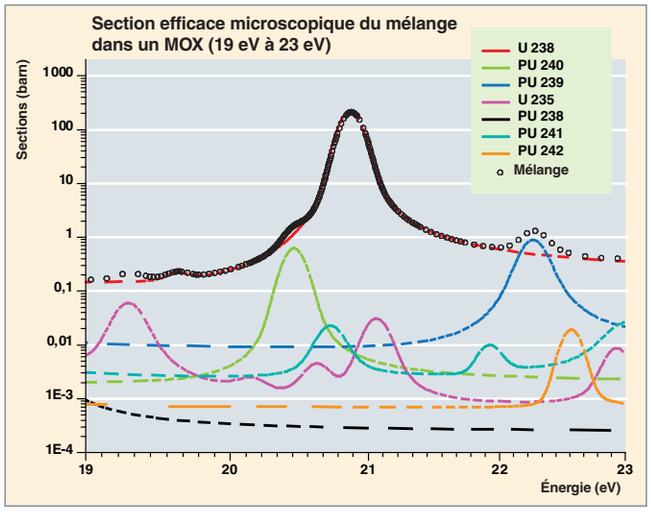


Fig. 24. Combustible MOX : Recouvrements de résonances et section efficace microscopique du mélange.

- Les méthodes de type « Williams » : les taux de réaction du noyau dans le mélange sont calculés à partir des taux de réaction du noyau seul (quand on remplace les autres noyaux résonnants par leurs sections potentielles) et d'un facteur correctif (caractérisant le mélange résonnant) évalué grâce à un calcul multigroupe fin.

Ces méthodes simplifiées ne prennent pas correctement en compte le creusement du flux qui est dû à l'ensemble des résonances de tous les noyaux présents. Une difficulté apparaît donc lorsque les noyaux formant le mélange résonnant présentent des recouvrements de résonances. Ce problème est illustré dans la figure 24 où sont tracées les sections efficaces des noyaux résonnants présents dans un combustible mixte composé d'oxyde d'uranium et de plutonium (MOX) dans le domaine en énergie allant de 19 eV à 23 eV.

L'idée de base du traitement développé dans le code APOLLO2 est de considérer le mélange résonnant comme une entité résonnante unique dont la section efficace est celle du mélange. Cette section est représentée en cercles noirs dans la figure 24.

Le traitement des mélanges résonnants est présenté dans le cadre de la méthode procédant par équivalence avec un milieu homogène infini, méthode appelée « Livolant-Jeanpierre », du nom de ses deux concepteurs qui l'ont élaborée dans le code APOLLO1, à la fin des années 60.

On ne s'intéresse ici qu'au calcul des taux de réaction à préserver lors du calcul des sections efficaces multigroupes autoprotégées car, comme cela a déjà été mentionné, c'est cette partie qui nécessite une modélisation physique. Ces taux sont issus de la résolution de l'équation de structure fine dans chaque région d'autoprotection. Cette équation est écrite en utilisant la méthode des probabilités de collision (voir p. 00) pour traiter la variable spatiale.

Pour établir cette équation dans une géométrie donnée, il faut faire l'hypothèse que le flux macroscopique est spatialement plat, hypothèse qui, jusqu'à présent, n'a pas été mise en défaut.

Pour un mélange de M noyaux résonnants, l'équation de structure fine s'écrit de la façon suivante :

$$\begin{cases} \varphi_\alpha(u) = \sum_\beta C_{\alpha\beta}(u) R_{0\beta}\varphi_\beta(u) + S_\alpha(u) \\ R_{0\beta}\varphi_\beta(u) = \sum_{m=1}^{M} a_{0m\beta} r_{0m\beta}\varphi_\beta(u) \end{cases} \quad (7)$$

- $\varphi_\alpha(u)$: facteur de structure fine dans la région α
- $r_{0m\beta}\,\varphi_\beta(u)$: opérateur de ralentissement du composant m du mélange résonnant dans la région β
- $a_{0m\beta}$: proportion, dans le mélange résonnant, du composant m dans la région β

Dans cette équation, la matrice C, dérivée de la matrice des probabilités de collision, traduit le couplage spatial entre les différentes régions d'autoprotection et le vecteur S, les sources dues aux noyaux non résonnants.

Modélisation de l'opérateur de ralentissement résonnant

Dans le cadre d'un calcul multigroupe sur un maillage grossier, on a perdu toute information fine sur les transferts en énergie. On ne peut donc plus traiter de façon exacte le couplage en énergie dû aux opérateurs de ralentissement résonnant. Par conséquent, on simplifie l'équation (7) en introduisant une modélisation de ces opérateurs. Plusieurs modèles de ralentissement existent, soit « physiques », c'est-à-dire liés à une forme ou à une distribution des résonances, soit « mathématiques », c'est-à-dire généraux. On peut citer les modèles :

- NR : « *Narrow Resonance* », qui traite une résonance étroite isolée dans un groupe ;
- WR : « *Wide Resonance* », qui traite une résonance large isolée dans un groupe ;
- ST : qui traite une distribution STatistique de résonances étroites dans un groupe ;
- TR : « Toute Résonance », qui traite n'importe quelle distribution de résonances.

Dans le cas du traitement des mélanges, on a utilisé le modèle TR qui approche l'opérateur r_{0m} par :

$$\forall u \in g \quad r_{0m}\varphi^{TR}(u) = \sum_{g' \le g} \pi_m(g', g) \langle \sigma_{s0m}\varphi \rangle^{g'} \quad (8)$$

Dans cette expression, $\pi_m(g', g)$ est la probabilité moyenne pour le neutron d'être diffusé par le noyau résonnant m du

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 70

groupe g' dans le groupe g et $\langle \sigma_{s0m}\varphi\rangle^{g'}$ est le taux moyen de diffusion du noyau résonnant m dans le groupe g'.

La modélisation « TR » a une propriété fondamentale qui est utilisée dans la suite : plus le maillage multigroupe est fin, plus la modélisation « TR » écrite sur ce maillage est précise.

La modélisation « TR » des opérateurs de ralentissement lourd permet de résoudre de façon approchée l'équation (7) et donc d'en déduire dans chaque région d'autoprotection α, un flux approché noté $\varphi_\alpha^{TR}(u)$. Grâce à des formules de quadrature spécifiques déduites des tables de probabilité de chaque noyau du mélange résonnant, des taux de réaction approchés sont calculés dans le groupe g, pour chaque composant m du mélange et chaque région d'autoprotection α. Ils s'écrivent pour la réaction q :

$$T_{q0m\alpha}^{g,TR} = \int_g \sigma_{q0m}(u)\varphi_\alpha^{TR}(u)du \qquad (9)$$

Équivalence avec un milieu homogène infini

Les taux obtenus par l'équation (9) sont entachés de l'erreur de modélisation sur les opérateurs de ralentissement résonnant. Pour s'affranchir de cette erreur, on procède, pour chaque groupe résonnant g, chaque région d'autoprotection α et chaque composant m du mélange à une équivalence avec un milieu homogène infini contenant le mélange de noyaux résonnants à une certaine dilution à définir.

Pour expliciter cette équivalence, on écrit l'équation de structure fine pour le mélange en milieu homogène infini, en modélisant les opérateurs de ralentissement par le modèle TR précédemment décrit dans l'équation (8) :

$$\left(\sum_{m=1}^{M} a_{0m}\sigma_{0m}(u)+\sigma_b\right)\varphi(u)=\sum_{m=1}^{M} a_{0m}\sum_{g'\le g}\pi_m(g',g)\langle\sigma_{s0m}\varphi\rangle^{g'}+\sigma_b \qquad (10)$$

Cette équation permet d'obtenir une expression analytique du facteur de structure fine, qui est paramétrée par la dilution σ_b.

Le principe de l'équivalence est le suivant :

- Pour chaque groupe résonnant g, chaque région d'autoprotection α et chaque composant m du mélange, on cherche un milieu homogène infini caractérisé par sa dilution (dite « équivalente »), de façon que le taux d'absorption calculé avec le modèle TR soit le même pour le composant m dans le milieu homogène infini et dans la région d'autoprotection α.

- Suivant que le mélange résonnant est constitué d'un seul noyau ou de plusieurs noyaux, le traitement est différent.
  - Dans le cas particulier où le mélange résonnant est composé d'un seul noyau, on interpole, pour la dilution équivalente obtenue, les tabulations de taux effectifs « exacts » du noyau calculés en milieu homogène infini (voir encadré « Factorisation du flux – Notion de structure fine »).

  - Dans le cas d'un milieu homogène infini contenant un mélange de noyaux résonnants, l'équation de structure fine ne peut plus être résolue une fois pour toutes en amont du calcul de transport, puisque les proportions des différents noyaux du mélange sont inconnues. Il faut donc simuler, lors du calcul d'autoprotection, la résolution « exacte » de l'équation de structure fine en milieu homogène infini. Cela est réalisé en approchant les opérateurs de ralentissement résonnants par leurs approximations TR effectuées sur un maillage multigroupe extrêmement fin comprenant plus d'une dizaine de milliers de groupes. Cette modélisation est alors quasi exacte, comme expliqué ci-dessus.

- On en déduit, enfin, les taux « corrigés » dans chaque groupe résonnant g et chaque région d'autoprotection α.

Cette équivalence est résumée dans la figure 25 ci-dessous.

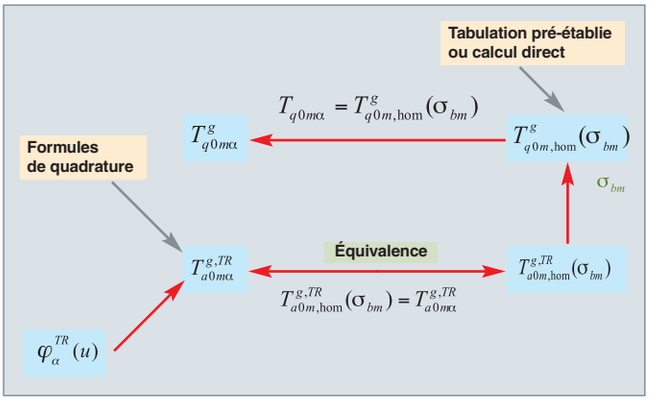


Fig. 25. Équivalence entre taux de réaction homogènes et hétérogènes pour un mélange de noyaux résonnants.

Lors du calcul pour un noyau seul, les formules de quadrature peuvent être établies une fois pour toutes et stockées dans les bibliothèques multigroupes, alors que pour un mélange de noyaux résonnants, comme les proportions relatives ne sont pas connues, elles doivent être calculées « au vol ».

Modélisation d'un mélange d'isotopes résonnants : exemple de validation sur un calcul d'assemblage de réacteur à eau bouillante.

L'exemple présenté ici est tiré de l'étude du *benchmark* international ATRIUM-10 MOX. Il s'agit du calcul d'un assemblage de réacteur à eau bouillante. Les grandeurs physiques calculées sont le facteur de multiplication effectif des neutrons, k_{eff}, et les taux de réaction d'absorption pour différents nucléides résonnants : uranium 238, plutonium 239, plutonium 240 et plutonium 241. La démarche de validation repose sur la comparaison des résultats issus de trois types de calcul :

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 71

- Un calcul de référence avec le code de transport Monte-Carlo TRIPOLI-4® (cent millions d'histoires de neutrons ont été simulées) ;
- un calcul APOLLO2, noté ITER, qui utilise la méthode itérative de calcul des sections efficaces multigroupes autoprotégées ;
- un calcul APOLLO2, noté MEL, qui utilise la méthode de traitement des mélanges résonnants.

Les deux calculs APOLLO2 ont utilisé un maillage en énergie à 172 groupes, et le calcul d'autoprotection a été réalisé entre 13,71 eV et 203,995 eV, domaine correspondant aux groupes 64 à 82.

L'assemblage ATRIUM 10 est un assemblage 10 x 10 contenant :

- Des crayons « MOX » dont le combustible est de l'oxyde mixte PUO_2/UO_2 avec six types d'enrichissements différents en plutonium (cellules MOX1 à MOX6) ;
- des crayons absorbants composés d'oxyde d'uranium et de gadolinium (cellules UOXG).

Les crayons « MOX » sont sur base d'uranium appauvri (enrichissement massique de 0,2 % en uranium 235). Les crayons absorbants sont sur base d'uranium enrichi (enrichissement massique de 3,95 % en uranium 235). L'assemblage traité est sans croix de contrôle insérée.

La figure 26 représente la géométrie d'un huitième d'assemblage ATRIUM 10.

La comparaison des coefficients de multiplication effectifs entre les deux calculs APOLLO2 et le calcul TRIPOLI-4® est donnée dans le tableau 11.

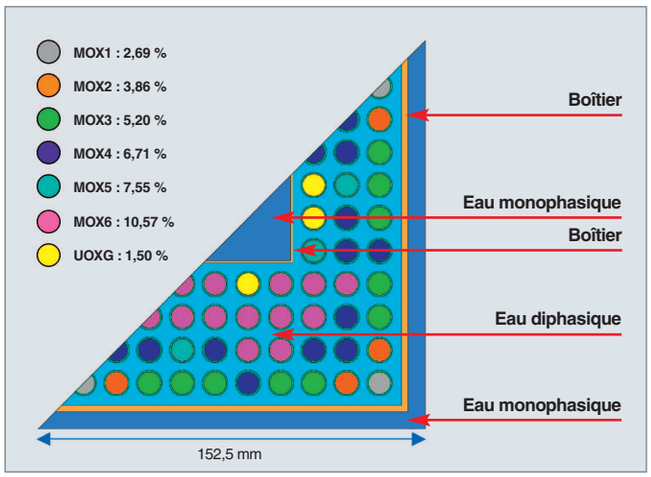


Fig. 26. Géométrie d'un huitième d'assemblage ATRIUM 10.

Tableau 11

Coefficients de multiplication effectifs TRIPOLI-4® et APOLLO2 pour un assemblage ATRIUM-10 MOX

	k_{eff}	σ TRIPOLI-4®	Écart en **pcm***
TRIPOLI-4®	1,14016	11 pcm	
Calcul ITER	1,13637		-379 ± 33
Calcul MEL	1,13795		-221 ± 33

Bien qu'aucun des résultats des deux calculs APOLLO2 ne soit dans les barres d'erreur à trois écarts types de TRIPOLI-4®, on note que l'utilisation du modèle de traitement direct des mélanges résonnants permet d'avoir une amélioration significative du résultat du calcul, de l'ordre de 160 pcm. Cette conclusion est confirmée par la comparaison détaillée, groupe par groupe et noyau par noyau, des calculs déterministes et stochastiques.

À titre d'illustration, la figure 27 représente l'absorption résonnante dans les crayons de type « MOX6 » dont la teneur en plutonium est la plus forte et qui sont donc les plus sensibles au phénomène de recouvrement de résonances (voir fig. 28). Le graphe inférieur représente les taux de référence (exprimés en pcm) calculés par TRIPOLI-4®. Le graphe supérieur représente les écarts relatifs exprimés en % entre les calculs APOLLO2 et le calcul TRIPOLI-4®. Avec la méthode MEL, dans les crayons de type « MOX6 », l'absorption résonnante intégrée entre les groupes 64 et 82 est calculée de façon très précise, puisque l'écart relatif est de 0,16 %, alors qu'il était de 4,27 % avec la méthode itérative. De plus, les écarts relatifs dans tous les groupes sont réduits de 16,4 % à 2,3 %, ce qui est un excellent résultat. Les améliorations les plus visibles sont apportées dans les groupes 69, 73 et 82 où l'on observe

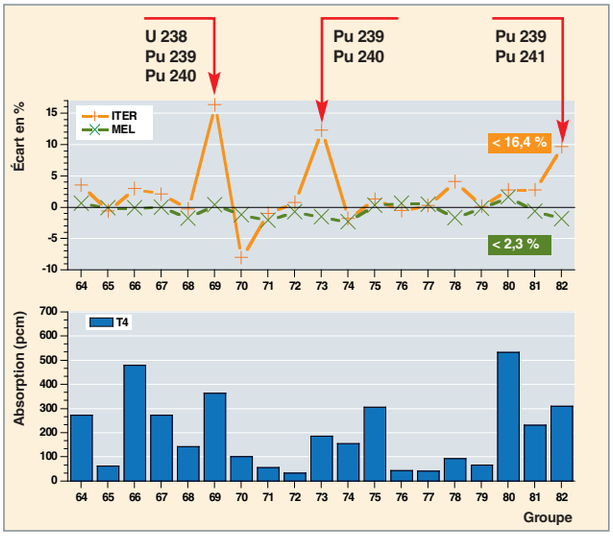


Fig. 27. Absorption résonnante dans les crayons « MOX6 » : comparaison des modèles d'autoprotection dans le cas de recouvrement de résonances, par rapport à la référence Monte-Carlo TRIPOLI4® (notée T4). On note l'apport du modèle de traitement des mélanges.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 72

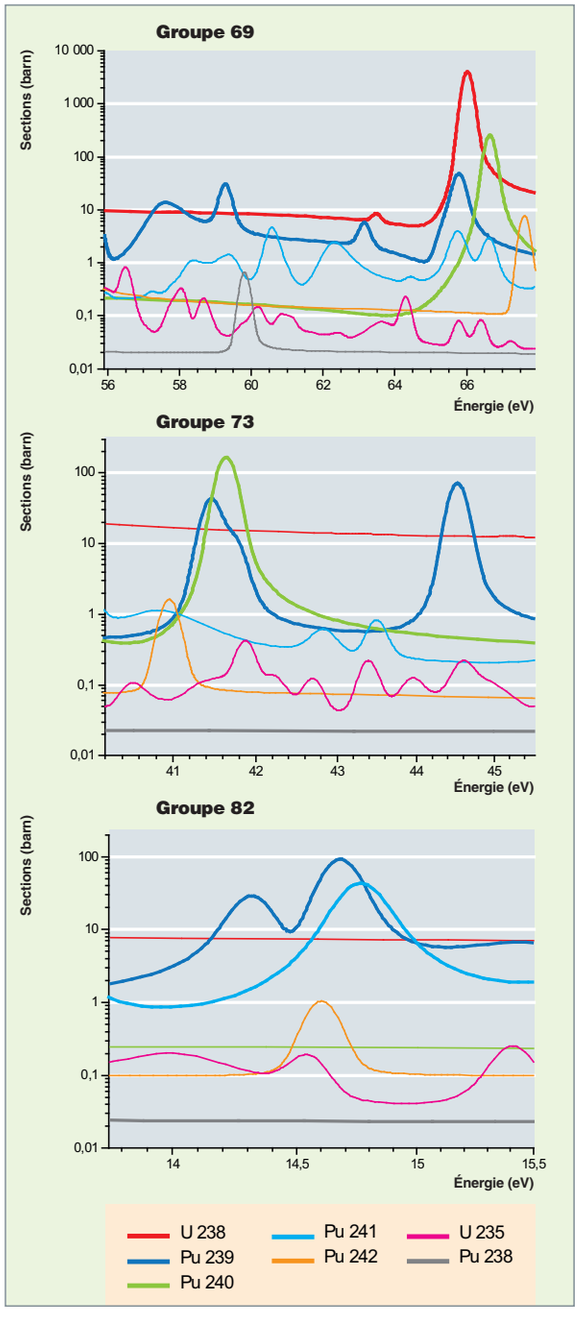


Fig. 28. Recouvrements de résonances dans les crayons « MOX6 ».

respectivement des recouvrements de résonances entre l'uranium 238, le plutonium 239 et le plutonium 240, le plutonium 239 et le plutonium 240, le plutonium 239 et le plutonium 241. Ces recouvrements sont visibles dans la figure 28.

Perspectives

La modélisation du phénomène d'autoprotection est une des modélisations les plus délicates d'un code de transport déterministes multigroupe, mais elle a atteint désormais une certaine maturité.

Les méthodes procédant par équivalence avec un milieu homogène infini ont été sophistiquées à l'extrême pour prendre en compte des géométries complexes, des profils de température dans le combustible, des recouvrements de résonance…

Les méthodes de type « sous-groupes » qui, par nature, sont beaucoup plus simples et plus précises, puisqu'elles ne requièrent aucune modélisation de l'opérateur de ralentissement, ne sont adaptées qu'au domaine non résolu ou aux maillages multigroupe fins. La puissance informatique étant sans cesse croissante, l'avenir est certainement dans l'utilisation de ces méthodes. Le prix à payer est l'utilisation d'un maillage énergétique suffisamment fin, mais le calcul d'autoprotection peut être réalisé sur un maillage différent de celui du calcul de flux.

La discrétisation en angle pour un groupe d'énergie donné

La discrétisation liée à la variable direction $\vec{\Omega}$ de l'espace des phases est appelée « discrétisation en angle ». Elle tire parti de l'isotropie des matériaux traversés, déjà signalée.

Il y a deux méthodes principalement utilisées pour traiter la variable angulaire : l'une est une *méthode de collocation*, connue sous le nom de *méthode des ordonnées discrètes* ou de *méthode* S_N ; l'autre est une méthode de développement du flux angulaire sur la base des harmoniques sphériques, connue sous le nom de *méthode* P_N ou *méthode des harmoniques sphériques*.

La méthode S_N

La **méthode S_N** consiste à choisir un ensemble de directions discrètes dans 4π stéradians : $\{\vec{\Omega}_n ; n = 1, N\}$ et à écrire l'équation du transport pour ces directions. Si l'on considère l'équation du transport stationnaire à source, pour un seul groupe g, on peut écrire :

$$\vec{\Omega}_n . \vec{\nabla}\psi^g(\vec{r},\vec{\Omega}_n) + \Sigma^g(\vec{r})\psi^g(\vec{r},\vec{\Omega}_n) = \int_{4\pi} d\vec{\Omega}'\, \Sigma_s(\vec{r}, g \to g, \vec{\Omega}' \to \vec{\Omega}_n)\psi^g(\vec{r},\vec{\Omega}') + S_n^g(\vec{r},\vec{\Omega}_n) \quad (11)$$

Pour évaluer l'intégrale sur les angles, on utilise une formule de quadrature du type :

$$\int_{4\pi} d\vec{\Omega} f(\vec{\Omega}) = \sum_{n=1}^{N} w_n f(\vec{\Omega}_n) \quad (12)$$

En ayant ainsi choisi les N directions $\vec{\Omega}_n$ et les N poids w_n, on peut écrire N fois l'équation (11) pour n =1,…N, et avoir un système d'équations, couplées par les sources, à résoudre pour les inconnues $\psi_n^g = \psi^g(\vec{r},\vec{\Omega}_n)$. Ce sont des équations

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 73

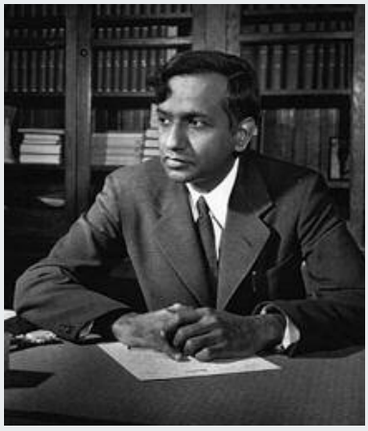
Aux sources de la méthode *aux ordonnées discrètes* ou *méthode* S_N

Gian Carlo Wick est un physicien théoricien italien auquel on doit des contributions majeures en théorie quantique des champs. Dans ses travaux il a été conduit, pour la résoudre, à approximer une équation intégro-différentielle par un système d'équations différentielles, en remplaçant le terme intégral par une **formule de quadrature** [1] :

$$\int_{-1}^{+1} f(\mu)d\mu \approx \sum_{j=1}^{n} a_j f\left(\mu_j\right)$$

Formule de quadrature de Wick permettant d'approximer l'intégrale d'une fonction arbitraire $f(\mu)$ définie dans l'intervalle [-1, +1].

Gian Carlo Wick
1909-1992



Subrahmanyan Chandrasekhar
1910-1995

Plusieurs voies existent pour en déterminer les constantes a_j et μ_j. **G. C. Wick** propose, comme meilleur choix, la **quadrature de Gauss*** qui rend exacte l'équation ci-dessus pour tout polynôme en μ de degré inférieur à 2^{n-1}.

Subrahmanyan Chandrasekhar est un astrophysicien et un mathématicien américain, d'origine indienne, co-lauréat du Prix Nobel de physique de 1983. Pour traiter des problèmes de transfert radiatif, S. Chandrasekhar reprend le schéma proposé par G. C. Wick, le développe significativement pour en faire une large utilisation [2].

La méthode initialement introduite par G. C. Wick se popularise alors sous le nom de « *Wick-Chandrasekhar discrete ordinate method* ». La démonstration mathématique de sa convergence n'interviendra qu'en 1958. Elle est due au mathématicien **P. M. Anselone** [3].

À partir des années 50, au *Los Alamos Scientific Laboratory* de l'Université de Californie, elle est appliquée au transport des neutrons par **B. G. Carslon**, **C. E. Lee** et **K. D. Lathrop** [4]. Elle est alors souvent appelée « **méthode S_N** » (*S* pour « *Angular Segmentation* », « *N* » pour l'ordre de la quadrature angulaire). Les premiers codes de calcul traitant le transport des neutrons par des méthodes déterministes font leur apparition. P. M. Anselone reprend son étude de la convergence de la méthode aux ordonnées discrètes, cette fois-ci, dans le cadre de la résolution numérique de l'équation du transport des neutrons, dans un document publié par *Oak Ridge National Laboratory* [5]. K. D. Lathrop en étudie les effets de raies, sorte de « talon d'Achille » de la méthode dans des configurations lacunaires, par exemple. Plusieurs lignées historiques de codes S_N à une, deux et trois dimensions d'espace sortent des laboratoires nationaux américains, d'**ANISN** à **TORT** en passant par **TWOTRAN** et **TWODANT**, codes qui par la suite seront largement utilisés dans la communauté nucléaire mondiale *via* leur distribution par **RSICC*** et l'**OCDE/AEN***, tant pour les calculs de neutronique / criticité que pour ceux de radioprotection.

Le CEA développe, au cours des années 80, les codes ***S_N* BISTRO** [6] incorporé par la suite dans le code de réseau **APOLLO2** et **SN1D** dédié aux études de radioprotection. Un développement original a été d'introduire dans le code SN1D [7] des sections efficaces représentées par des **tables de probabilités**, permettant ainsi d'améliorer significativement le calcul de propagation des neutrons en fonction de leur énergie [8] dans des configurations à forte atténuation du flux des neutrons.

Quelques références historiques

[1] G. C. Wick, "Über ebene Diffusionsproblem", Zs. f. Phys., 121, 702, 1943.

[2] S. Chandrasekhar, *Radiative Transfer*, Oxford, Clarendon Press, 1950 ; réédition : New York, Dover, 1960.

[3] P. M. Anselone, "Convergence of the Wick-Chandrasekhar Approximation Technique in Radiative Transfer" *Astrophys. J.*, 128, 124; 130, 881, 1958.

[4] K. D. Lathrop, "The Early Days of the S_N method", SLAC-PUB 5829, December 1992 ; B. G. Carlson, "A solution of the transport equation by S_N approximations", LA- 1599, Los Alamos Scientific Laboratory, 1953, revised version, LA 1891, 1955 ; B. G. Carlson, C. E. Lee, "Mechanical Quadrature and Transport Equations", LAMS-2573, *Physics*, TID-4500, June 1961.

[5] P. M. Anselone, A. G. Gibbs, "Convergence of the Discrete Ordinates Method for the Transport Equation", ORNL-4984, UC-32, *Mathematics and Computers*, July 1974.

[6] G. Palmiotti, J.M. Rieunier, C. Gho, M. Salatores, "BISTRO Optimized Two Dimensional S_N Transport Code", *Nucl. Sc. Eng.* 104, 26, 1990.

[7] G. Dejonghe, L. Luneville, SN1D : "Code de protection nucléaire à une dimension", Rapport interne CEA, 1983.

[8] L. Luneville, *Méthode multibande aux ordonnées discrètes. Formalisme et résultats*, Note CEA-N-2832, 1998.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 74

différentielles en espace, auxquelles il faut encore appliquer une discrétisation spatiale.

Il existe une infinité de choix possibles pour les directions et les poids. Par exemple, en géométrie plane unidimensionnelle, l'angle se réduisant à la seule variable $\mu = cos\theta$ (avec θ l'angle entre la direction de propagation et l'axe de référence), il est usuel de choisir les $\{\mu_n, w_n\}$ correspondant à une **quadrature de Gauss***.

La méthode S_N est très largement utilisée malgré sa faiblesse intrinsèque qu'est l'« **effet de raies** » : en présence d'une source de neutrons très localisée dans un milieu peu diffusif, certaines des directions choisies peuvent complètement « manquer » une vue directe de la source et, par conséquent, conduire à des flux presque nuls non physiques. On pallie ce défaut par un raffinement du maillage angulaire.

La méthode P_N

La méthode P_N consiste à utiliser un développement de la dépendance angulaire du flux en harmoniques sphériques $Y_m^\ell(\vec{\Omega})$ (à une dimension celles-ci deviennent les **polynômes de Legendre**, d'où le nom de la méthode) selon l'expression :

$$\psi(\vec{r},\vec{\Omega}) = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{\ell=-m}^{m} \psi_m^\ell(\vec{r})\, Y_m^\ell(\vec{\Omega}) \qquad (13)$$

Puisque les harmoniques sphériques forment un ensemble orthonormé et complet, on sait que l'équation (13) est toujours vraie, même si, dans la pratique, on est obligé de tronquer le développement après les premiers termes. Pour obtenir des équations pour les inconnues $\psi_m^\ell(\vec{r})$, il faut prendre les moments de l'équation du transport par rapport aux harmoniques sphériques. Il s'ensuit un système d'équations couplées, différentielles en espace.

Les coefficients des équations P_N sont assez compliqués à exprimer analytiquement (sauf dans le cas à une dimension). De surcroît, les équations obtenues par projection de l'équation du transport sur les harmoniques sphériques sont fortement couplées et donc nécessitent des algorithmes de résolution spécifiques. En revanche, la méthode P_N ne présente pas de problèmes notoires comme l'effet de raies de la méthode S_N.

Les difficultés de mise en œuvre de la méthode P_N à trois dimensions expliquent pourquoi peu de codes industriels choisissent cette approche.

La méthode du transport simplifié SP_N

Dans les années 60, pour diminuer la grande complexité des équations P_N pour les problèmes multidimensionnels et rendre possible leur résolution, E.M. Gelbard [3] a proposé une nouvelle approximation baptisée « P_N simplifiée » ou SP_N. Le principe de la méthode est de construire un opérateur généralisant l'opérateur de diffusion et prenant en compte la majorité des effets de transport. L'idée de Gelbard était de supposer que localement la solution du transport était équivalente à la solution d'une équation en géométrie plane et donc pouvait se résoudre par une méthode P_N 1D. Ceci permet de réduire le nombre d'harmoniques à prendre en compte qui croît alors en N au lieu de N^2. Dans la méthode proposée, le passage des équations locales aux équations 3D était obtenu par une méthode empirique et formelle. Après une phase de sommeil d'une trentaine d'années due au manque de puissance des ordinateurs pour résoudre ces équations, et également au manque de justification théorique, un regain d'intérêt s'est produit dans les années 1990 lorsque Pomraning [4] et Larsen, Morel and McGhee [5] ont présenté indépendamment des analyses asymptotiques qui justifiaient la méthode empirique de Gelbard.

Les équations SP_N peuvent également être obtenues par un principe variationnel. Ce principe fut tout d'abord proposé par Pomraning pour le milieu infini et le choc anisotrope en théorie monocinétique et fut étendu ensuite par Brantley et Larsen [6], dans le cadre des équations SP_3, à un milieu fini avec prise en compte de conditions aux limites, choc isotrope et description multigroupe de la variable énergie.

On présente ici l'analyse faite par Pomraning qui part de la constatation suivante : si l'équation du transport est localement en géométrie plane, alors la solution SP_N est aussi solution de l'équation du transport. Cette hypothèse se justifie, par exemple, pour un calcul homogène quand on se trouve loin des interfaces entre les différents milieux.

On considère un **système de coordonnées local** $(\vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$. La direction $\vec{\Omega}$ peut alors s'écrire :

$$\vec{\Omega} = \sqrt{1-\mu^2}\, \cos\varphi\ \vec{i} + \sqrt{1-\mu^2}\, \sin\varphi\ \vec{j} + \mu\, \vec{k}$$

où μ est le cosinus de l'angle polaire et φ est l'angle azimutal.

On fait l'hypothèse que, dans ce système, la solution a une faible dépendance suivant la direction azimutale (hypothèse de symétrie plane) et qu'elle a également une faible dépendance en x et en y. En introduisant un facteur ε quantifiant cette faible variation, et en passant à la limite $(\varepsilon \to 0)$, on obtient une équation du type transport 1D dans le système local. Cependant dans ce système local, la direction $\vec{\Omega}$ dépend de l'espace (puisque ce système varie en espace), ce qui n'est pas le cas dans l'équation du transport. Il faut donc faire l'hypothèse supplémentaire que le système local $(\vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$ varie lentement en espace (variation quantifiée par le coefficient ε). Avec cette hypothèse, le terme de fuite s'écrit :

$$\vec{\nabla}.(\vec{\Omega}\psi) = \vec{\Omega}.\vec{\nabla}\psi + (\vec{\nabla}.\vec{\Omega})\psi = \mu\frac{\partial\psi}{\partial z} + O(\varepsilon)$$

On obtient ainsi un problème local en géométrie plane qui peut être résolu exactement par la méthode P_N. Si l'on décompose

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 75

la solution $\psi^{1D}(z,\mu)$du problème local en géométrie plane sur la base des polynômes de Legendre, on peut écrire :

$$\psi^{1D}(z,\mu) = \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n^{1D}(z) P_n(\mu)$$

On tronque ce développement à un ordre N choisi impair. Les coefficients du développement (harmoniques) vérifient le système couplé suivant :

$$\begin{cases} \dfrac{d\psi_1^{1D}}{dz} + \Sigma_{r0}\psi_0^{1D} = S \\ \dfrac{n+1}{2n+1}\dfrac{d\psi_{n+1}^{1D}}{dz} + \Sigma_{rn}\psi_n^{1D} + \dfrac{n}{2n+1}\dfrac{d\psi_{n-1}^{1D}}{dz} = 0 \\ \Sigma_{rN}\psi_N^{1D} + \dfrac{N}{2N+1}\dfrac{d\psi_{N-1}^{1D}}{dz} = 0 \end{cases}$$

pour $1 \le n \le N$.

On rappelle que :

$$\begin{cases} \Sigma_{rn} = \Sigma - \Sigma_{sn} \\ \Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega}'.\vec{\Omega}) = \Sigma_s(\vec{r},\mu) = \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1)\,\Sigma_{sn}(\vec{r}) P_n(\mu) \end{cases}$$

Le problème est d'obtenir l'approximation de ψ à partir de ψ_1^{1D}. On procède de la façon suivante (par analogie avec le flux scalaire et le courant dans l'équation de la diffusion) :

- pour les n pairs, on peut écrire en prenant en compte la faible dépendance de ψ selon x et y :

$$\begin{cases} \psi_n = \psi_n^{1D} + O(\varepsilon) \\ \vec{\nabla}\psi_n = \dfrac{\partial\psi_n}{\partial x}\vec{\imath} + \dfrac{\partial\psi_n}{\partial y}\vec{\jmath} + \dfrac{\partial\psi_n}{\partial z}\vec{k} = \dfrac{d\psi_n^{1D}}{dz}\vec{k} + O(\varepsilon) \end{cases}$$

- pour les n impairs, on définit un vecteur $\vec{\psi}_n$ à partir de l'harmonique 1D qui vérifie :

$$\begin{cases} \vec{\psi}_n = \psi_n^{1D}\vec{k} \\ \vec{\nabla}.\vec{\psi}_n = \dfrac{d\psi_n^{1D}}{dz} \end{cases}$$

Cela permet d'écrire les équations suivantes dans le système global avec une erreur en $0(\varepsilon)$. Faire tendre ε vers zéro ramène à une équation 1D dans le système global.

$$\begin{cases} \vec{\nabla}.\vec{\psi}_1 + \Sigma_{r0}\psi_0 = S \\ \dfrac{n+1}{2n+1}\vec{\nabla}\psi_{n+1} + \Sigma_{rn}\vec{\psi}_n + \dfrac{n}{2n+1}\vec{\nabla}\psi_{n-1} = \vec{0} & 1 \le n \le N-1,\ n\ impair \\ \dfrac{n+1}{2n+1}\vec{\nabla}.\vec{\psi}_{n+1} + \Sigma_{rn}\psi_n + \dfrac{n}{2n+1}\vec{\nabla}.\vec{\psi}_{n-1} = 0 & 1 \le n \le N-1,\ n\ pair \\ \Sigma_{rN}\vec{\psi}_N + \dfrac{N}{2N+1}\vec{\nabla}\psi_{N-1} = \vec{0} \end{cases}$$

On obtient ainsi un système d'équations aux dérivées partielles. Les équations paires sont scalaires, les équations impaires sont vectorielles. Pour être fermé, on doit adjoindre à ce système un ensemble de conditions aux limites (par exemple flux pairs nuls sur les bords ou trace normale des flux impairs nulle sur les bords en cas de symétrie). À l'ordre 1, on retrouve les équations de la diffusion. L'harmonique 0 correspond au flux scalaire et l'harmonique 1 au courant.

Dans le cas de la géométrie plane ou pour un milieu infini homogène la méthode converge (quand n tend vers l'infini) vers la solution exacte du transport. Par contre, dans le cas général, elle converge vers une solution différente (mais proche) de la solution exacte du transport. Jusqu'à présent, aucune estimation a priori d'erreur n'a été obtenue pour mesurer l'écart entre la solution SP_N et la solution exacte.

Cette approximation est disponible pour le solveur MINOS pour les calculs statique et cinétique avec choc anisotrope [7]. La résolution se fait par élimination des harmoniques paires et résolution par éléments finis mixtes duaux. Elle est également disponible pour le solveur MINARET. On utilise dans ce cas une forme diagonalisée des équations précédentes [8], la résolution s'effectuant par élimination des harmoniques paires et discrétisation par éléments finis de Galerkin discontinus.

L'approximation de la diffusion

L'approximation de la diffusion permet de simplifier sous certaines hypothèses l'opérateur de transport de l'équation de Boltzmann, conduisant à une équation simple satisfaite par le **flux scalaire**.

La voie classique pour dériver l'équation de la diffusion de l'équation de Boltzmann passe par un développement de la dépendance angulaire du flux dans un groupe en énergie g, $\psi^g(\vec{r}, \vec{\Omega})$ sur la base des harmoniques sphériques.

L'approximation consiste à tronquer le développement aux deux premiers termes, en supposant que les sources sont isotropes dans le système du laboratoire :

$$\psi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) \cong \phi^g(\vec{r}) + \vec{J^g}(\vec{r}).\vec{\Omega} \qquad (14)$$

($\phi^g(\vec{r})$ et $\vec{J^g}(\vec{r})$ représentent les deux premiers moments du flux angulaire).

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 76

L'équation (14) a une interprétation physique correspondant à l'hypothèse d'une dépendance faible (au plus linéaire) du flux en fonction de la direction $\vec{\Omega}$. Si l'on introduit cette approximation dans l'équation de Boltzmann, on obtient, après diverses manipulations, l'équation suivante à laquelle satisfait le flux scalaire $\phi^g(\vec{r})$:

$$-\vec{\nabla}.D^g(\vec{r})\vec{\nabla}\phi^g(\vec{r}) + \Sigma_r^g(\vec{r})\phi^g(\vec{r}) = q^g(\vec{r}) \qquad (15)$$

Les termes sont définis comme suit :

• $-D^g(\vec{r})\vec{\nabla}\phi^g(\vec{r})$: courant de neutrons qui est proportionnel au gradient du flux ; c'est la **loi de Fick** :

$$\vec{J^g}(\vec{r}) = -D^g(\vec{r})\vec{\nabla}\phi^g(\vec{r}) \qquad (16)$$

$D^g(\vec{r})$: **coefficient de diffusion** donné par l'expression :

$$D^g(\vec{r}) = \frac{1}{3\Sigma_{tr}^g(\vec{r})} \qquad (17)$$

$\Sigma_{tr}^g(\vec{r})$: **section efficace de transport** dans le groupe g définie par :

$$\Sigma_{tr}^g(\vec{r}) = \Sigma^g(\vec{r}) - \bar{\mu}^g(\vec{r})\Sigma_s^g(\vec{r})$$

$\bar{\mu}^g(\vec{r})$: cosinus de l'angle moyen de diffusion dans le groupe g. Si les chocs sont isotropes dans le système du laboratoire, $\bar{\mu}^g(\vec{r})$ vaut 0 et la section efficace de transport est simplement la section efficace totale.

$\Sigma_s^g(\vec{r})$: section efficace macroscopique de diffusion dans le groupe g.

• $\Sigma_r^g(\vec{r})$: section de disparition du groupe g définie par :

$$\Sigma_r^g(\vec{r}) = \Sigma^g(\vec{r}) - \Sigma_s\left(\vec{r}, \vec{g}\rightarrow\vec{g}\right)$$

• $q^g(\vec{r})$: terme source.

Une deuxième manière d'aboutir à l'équation de la diffusion, en partant d'une **forme intégrale de l'équation de Boltzmann**, consiste à supposer que les sources et les chocs sont isotropes dans le système du laboratoire, et que le flux scalaire $\phi^g(\vec{r})$ et la section macroscopique totale sont faiblement dépendant de l'espace. On développe alors le flux scalaire $\phi^g(\vec{r})$ **en série de Taylor en espace** en l'arrêtant au premier ordre :

$$\phi^g(\vec{r}) \cong \phi^g(\vec{r}_0) + \vec{\nabla}\phi^g(\vec{r})\big|_{\vec{r}=\vec{r}_0}.(\vec{r}-\vec{r}_0) \qquad (18)$$

Après quelques transformations, on retrouve l'équation de la diffusion (15), mais avec un coefficient de diffusion égal à :

$$D^g(\vec{r}) = \frac{1}{3\Sigma^g(\vec{r})}$$

La troisième manière d'arriver à l'équation de la diffusion repose sur l'hypothèse que les absorptions du système sont très faibles et que les gradients de flux le sont aussi. On réécrit l'équation de Boltzmann en insérant un paramètre ε ($\varepsilon \ll 1$) qui mesure la « petitesse » des absorptions. Une analyse asymptotique de cette équation montre qu'au premier ordre, le flux scalaire doit satisfaire à l'équation de la diffusion (15). La particularité de cette dérivation est que les hypothèses ne sont plus faites sur la forme du flux (dépendance faible en espace ou en angle) que l'on ne connaît pas *a priori*, mais (du moins en partie) sur les coefficients de l'équation elle-même (la section efficace macroscopique d'absorption est faible devant la section efficace macroscopique totale).

Quels avantages présente l'équation de la diffusion, par rapport à l'équation du transport ?

En premier lieu, on est passé d'un espace des phases à 6 dimensions ($\vec{r}$, E, $\vec{\Omega}$) à un espace des phases à 4 dimensions ($\vec{r}$, E). Selon l'estimation que l'on avait donnée auparavant, cela peut réduire d'un facteur cent à mille le nombre de degrés de liberté d'une résolution numérique.

Par ailleurs, l'équation de la diffusion, que l'on rencontre dans plusieurs domaines de la physique (conduction de la chaleur, migration d'espèces chimiques dans un milieu, etc.) est une équation différentielle aux dérivées partielles parmi les plus simples et les plus étudiées des mathématiciens et des numériciens. Par conséquent, elle bénéficie de méthodes numériques de résolution très performantes et continuellement améliorées par les meilleurs spécialistes.

On peut, enfin, souligner que la diffusion est une approximation « robuste », dans le sens où même lorsque l'on s'éloigne de son domaine de validité, les résultats, à défaut d'être précis, sont qualitativement acceptables.

En pratique, la diffusion est applicable aux grands systèmes (la dimension d'un système étant mesurée en nombre de libres parcours moyens) presque homogènes, à l'image des réacteurs de puissance avec assemblages combustibles homogénéisés. Les industriels calculent souvent leurs réacteurs en théorie de la diffusion à quelques groupes d'énergie, avec des résultats satisfaisants, en utilisant comme coefficients de l'équation des grandeurs obtenues au moyen de calculs de transport précis. Ce point est détaillé *infra*, p. 193-213.

La discrétisation en espace pour un groupe d'énergie donné

Nous présentons dans ce chapitre trois types de méthodes de discrétisation spatiale : *les méthodes des différences finies*, *les méthodes nodales*, *les méthodes des éléments finis*.

On peut aussi citer *la méthode des probabilités de première collision*, fondée sur la forme intégrale de l'équation du trans-

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:24 Page 77

port, qui a été pendant de nombreuses années la méthode de prédilection des codes d'assemblage, dans le but de déterminer les sections efficaces multigroupes autoprotégées pour les calculs de cœurs de réacteurs. Cette méthode, qui souffre de l'approximation du choc isotrope dans le système du laboratoire, est aujourd'hui souvent remplacée par la *méthode des caractéristiques*, plus souple et plus précise. Néanmoins, elle a encore une place dans les calculs d'autoprotection, où le traitement en énergie est primordial. Une comparaison entre ces deux méthodes est présentée dans l'encadré p. 84.

La *méthode des différences finies* est très simple d'implémentation en géométrie cartésienne, cylindrique ou sphérique. Pour plus d'efficacité, on peut avoir recours avec succès à des *méthodes nodales* (ou *volumes finis*) d'ordre supérieur. Les méthodes des différences finies et les méthodes nodales sont souvent utilisées dans la communauté des neutroniciens pour résoudre l'équation de la diffusion.

Les *méthodes des éléments finis* ont été développées, à l'origine, par les mécaniciens et sont fondées sur le principe du calcul du minimum d'énergie. Elles peuvent être appliquées soit à la résolution de l'équation de la diffusion, soit à celle de l'équation du transport.

Les méthodes de discrétisation en espace pour un groupe d'énergie donné sont exposées ici dans le cadre de l'équation de la diffusion à source. On suppose que la discrétisation en énergie (multigroupe) est déjà réalisée et on se place dans un groupe g. Pour simplifier les notations, on omet volontairement dans la suite l'indice sur le groupe.

L'équation de la diffusion à source dans un groupe donné s'écrit :

$$-\vec{\nabla}.\left(D\vec{\nabla}\phi(\vec{r})\right) + \Sigma_r(\vec{r})\phi(\vec{r}) = q(\vec{r}) \qquad (19)$$

où $\phi(\vec{r})$ représente le flux scalaire (indépendant de la variable angulaire), $\Sigma_r(\vec{r})$ la section de disparition du groupe et $q(\vec{r})$ le terme source.

Dans la suite, et par un souci de simplification, on ne fera pas intervenir les conditions aux limites au bord du domaine de calcul. L'introduction de ces conditions aux limites modifie partiellement les équations discrètes, mais ne remet pas en cause leur fondement.

Les méthodes des différences finies

Une façon simple de résoudre l'équation de la diffusion des neutrons sur un maillage spatial est d'évaluer cette équation aux points du maillage en remplaçant les dérivées partielles par des différences finies.

Pour simplifier, mettons-nous dans le cadre d'une géométrie 1D, $\mathcal{R} = [x_0, x_{N+1}]$, sur laquelle on se donne un maillage spatial : $x_0 < x_1 < \cdots < x_{i-1} < x_i < x_{i+1} < \cdots < x_{N+1}$

En supposant le flux de neutrons suffisamment régulier, et en utilisant la *formule de Taylor* :

$$\phi(x) = \phi(x_0) + (x - x_0)\phi'(x_0) + \frac{1}{2}(x - x_0)^2\phi''(x_0) + O(x^3)$$

il est possible de remplacer l'opérateur différentiel de l'équation de la diffusion par un opérateur aux différences finies :

$$\vec{\nabla}.\left(D\vec{\nabla}\phi\right)(x_i) \cong \frac{D_i^+}{(x_{i+1} - x_i)}[\phi(x_{i+1}) - \phi(x_i)] - \frac{D_i^-}{(x_i - x_{i-1})}[\phi(x_i) - \phi(x_{i-1})]$$

où D_i^+ (resp. D_i^-) est la valeur du coefficient de diffusion dans l'intervalle $[x_{i-1}, x_i]$ (resp. $[x_i, x_{i+1}]$).

En écrivant l'équation de la diffusion aux points du maillage, et après avoir remplacé l'opérateur différentiel par l'opérateur aux différences précédent, on se ramène à résoudre un système matriciel dont les inconnues sont les valeurs du flux aux points du maillage :

$$A\emptyset = Q \; avec \; \emptyset = \begin{pmatrix} \phi(x_0) \\ \dots \\ \phi(x_{N+1}) \end{pmatrix}$$

Comme on l'a précédemment mentionné, on ne spécifiera pas ici le traitement des conditions aux limites.

Il est à noter que la matrice A est symétrique, définie positive et à diagonale dominante. De surcroît, elle est tri-diagonale (le flux en un point n'étant relié qu'à ses voisins proches). Les méthodes de résolution de systèmes linéaires, qu'elles soient directes ou itératives, sont donc bien adaptées à ce système.

On peut remarquer que si on utilise la formule de Taylor en faisant apparaître les points milieux $x_{i+\frac{1}{2}}$ des intervalles $[x_i, x_{i+1}]$, on obtient un système matriciel de même nature que celui obtenu précédemment, mais où les inconnues sont, dans ce cas, les points milieux du maillage. On parlera dans le premier cas de **différences finies** aux « **points** » des mailles, et dans le deuxième cas de **différences finies** aux « **centres** » des mailles.

La méthode des différences finies se généralise aisément aux géométries 3D cartésiennes et les propriétés de la matrice globale sont conservées. C'est pourquoi cette méthode a été employée dès le début de la conception des cœurs de réacteur à pas carré (type REP, par exemple). En effet, les méthodes itératives de résolution du système sont performantes et ne nécessitent que peu de place mémoire, ce qui était compatible avec les toutes premières générations d'ordinateur.

Par contre, la méthode des différences finies se généralise plus difficilement à des géométries à pas hexagonal (par exemple, aux réacteurs RNR).

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:25 Page 78

Cette méthode converge en $O(h^2)$ où h est le pas maximum du maillage spatial. Il est donc nécessaire d'augmenter largement le nombre de points de discrétisation, si l'on veut s'approcher de la solution exacte. Cela est encore plus vrai dans le cas de calculs de cœurs de réacteurs, homogénéisés au niveau de l'assemblage.

La difficulté de généralisation de la méthode des différences finies aux géométries hexagonales et la lente convergence spatiale ont amené les ingénieurs à développer de nouvelles méthodes d'approximation spatiale, en particulier les méthodes nodales.

Les méthodes nodales

Les méthodes nodales sont fondées sur une résolution semi-analytique de l'équation de la diffusion.

Pour illustrer la méthode, supposons une géométrie $\mathcal{R}$ cartésienne 2D, et considérons une maille $[x_i, x_{i+1}] \times [y_i, y_{i+1}]$ où les sections efficaces sont constantes en espace.

Intégrons l'équation de la diffusion (19) selon la direction x sur l'intervalle $[x_i, x_{i+1}]$, puis selon la direction y sur l'intervalle $[y_i, y_{i+1}]$, et notons :

$$\begin{cases} \phi^i(y) = \displaystyle\int_{x_i}^{x_{i+1}} \phi(x,y)dx\,, \qquad q^i(y) = \int_{x_i}^{x_{i+1}} q(x,y)dx \\ \Lambda^i(y) = -\left(D\dfrac{\partial\phi}{\partial x}(x_{i+1},y) - D\dfrac{\partial\phi}{\partial x}(x_i,y)\right) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \phi^j(x) = \displaystyle\int_{y_j}^{y_{j+1}} \phi(x,y)dy\,, \quad q^j(x) = \int_{y_j}^{y_{j+1}} q(x,y)dy \\ \Lambda^j(x) = -\left(D\dfrac{\partial\phi}{\partial y}\left(x,y_{j+1}\right) - D\dfrac{\partial\phi}{\partial y}\left(x,y_j\right)\right) \end{cases}$$

On obtient les équations différentielles selon x et y :

$$\begin{cases} -D\dfrac{d^2\phi^j}{dx^2}(x) + \Sigma_r\phi^j(x) = q^j(x) - \Lambda^j(x) \\ -D\dfrac{d^2\phi^i}{dy^2}(y) + \Sigma_r\phi^i(y) = q^i(y) - \Lambda^i(y) \end{cases} \qquad (20a)$$

$\Lambda^j(x)$ et $\Lambda^i(y)$ sont appelés les « **fuites transverses** » suivant x et y.

Enfin, l'intégration de l'équation de la diffusion sur $[x_i, x_{i+1}] \times [y_j, y_{j+1}]$ donne l'**équation de bilan** :

$$\int_{y_j}^{y_{j+1}} \Lambda^i(y)dy + \int_{x_i}^{x_{i+1}} \Lambda^j(x)dx + \Sigma_r\overline{\phi} = \overline{q} \qquad (20b)$$

avec $\overline{\phi} = \int_{x_i}^{x_{i+1}}\int_{y_j}^{y_{j+1}} \phi(x,y)dxdy$

et $\overline{q} = \int_{x_i}^{x_{i+1}}\int_{y_j}^{y_{j+1}} q(x,y)dxdy$

Pour établir cette équation, on remarque que :

$$\int_{y_j}^{y_{j+1}} \Lambda^i(y)dy = \int_{y_j}^{y_{j+1}} -\left(D\frac{\partial\phi}{\partial x}(x_{i+1},y) - D\frac{\partial\phi}{\partial x}(x_i,y)\right)dy$$
$$= -(D\frac{d\phi^j}{dx}(x_{i+1}) - D\frac{d\phi^j}{dx}(x_i))$$

Les méthodes nodales consistent à résoudre les équations différentielles selon les directions x et y, en prenant en compte l'équation de bilan. Cette résolution peut être faite de façon analytique ou en supposant une approximation polynomiale des inconnues.

Dans le cas de l'approximation polynomiale, on introduit une approximation des fuites transverses, soit plate, soit quadratique. La résolution du système d'équations (20a) et (20b) s'effectue alors pas à pas, de la manière suivante :

- L'intégration de l'équation différentielle selon y, en supposant $\Lambda^i(y)$ connu, donne une expression analytique de $\varphi^i(y)$ qui, une fois dérivée selon y, donnera une valeur de $\int_{x_i}^{x_{i+1}} \Lambda^j(x)dx$
- De même, l'intégration de l'équation différentielle selon x, en supposant $\Lambda^j(x)$ connu, donne une expression analytique de $\varphi^j(x)$ qui, une fois dérivée selon x, donnera une valeur de $\int_{y_j}^{y_{j+1}} \Lambda^i(y)dy$
- L'équation de bilan permet, enfin, de calculer les valeurs du flux intégré dans les mailles $\overline{\phi}$.

Les inconnues introduites dans cette formulation sont les fuites transverses à l'interface des mailles, et le flux dans les mailles. Cette formulation s'apparente à la formulation mixte en approximation éléments finis, décrite ci-après (p. 79 et suiv.), et des analogies, voire des équivalences, sont démontrables dans certains cas.

Ces méthodes ont été généralisées aux géométries hexagonales.

Elles souffrent cependant de leur absence de fondements mathématiques, ce qui rend difficile l'introduction de la notion d'opérateur adjoint (contrairement aux méthodes aux « éléments finis » décrites dans le paragraphe suivant) utilisée lors de calculs de perturbation sur lesquels se fondent les études de sensibilité à des variations de paramètres, comme les paramètres géométriques ou les données nucléaires.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:25 Page 79

Les méthodes des « éléments finis »

Grâce à la méthode de Rayleigh-Ritz il est possible de réécrire l'équation de diffusion des neutrons présentée dans le paragraphe précédent :

$$-\vec{\nabla}.\left(D\vec{\nabla}\phi(\vec{r})\right)+\Sigma_r\phi(\vec{r})=q(\vec{r}) \qquad (21)$$

sous une forme variationnelle équivalente. On suppose ici les sections efficaces constantes en espace.

La formulation primale et son approximation spatiale

La **formulation variationnelle primale** du problème, la plus immédiate à écrire, est :

Trouver $\phi \in V(\mathcal{R})$ tel que

$$\int_{\mathcal{R}} D\vec{\nabla}\phi.\vec{\nabla}w dr+\int_{\mathcal{R}}\Sigma_r\phi w dr=\int_{\mathcal{R}} qw dr \quad \forall\, w\in V(\mathcal{R})$$

où V est l'espace de Sobolev des fonctions qui sont L^2 intégrables sur le domaine spatial $\mathcal{R}$, ainsi que leurs dérivées.

Là encore, on fait abstraction des conditions aux limites.

Pour simplifier, on se restreint à la géométrie 1D et à son maillage spatial $\{x_i,\ i=0 \text{ à } N+1\}$ dont les points sont supposés également répartis dans l'intervalle $[x_0, x_{N+1}]$; h sera alors la distance entre deux points contigus.

Pour la **méthode des éléments finis d'ordre** k, on introduit le sous espace discret V_h de V défini par :

$$V_h=\left\{\phi_h\in C^0([x_0,x_{N+1}])\ tel\ que\ \phi_h|[x_i,x_{i+1}]\in\mathbb{P}_k, 0\le i\le N\right\}$$

où $\mathbb{P}_k$ est l'espace des polynômes de degré k. On note (w_ℓ) une base de V_h.

La **formulation discrète** du problème est :
Trouver $\phi_h \in V_h$ tel que :

$$\sum_{i=1,N}\int_{\mathrm{i}}^{i+1} D\vec{\nabla}\phi_h.\vec{\nabla}w_\ell dx+\sum_{i=1,N}\int_{\mathrm{i}}^{i+1}\Sigma_r\phi_h w_\ell dx = \sum_{i=1,N}\int_{\mathrm{i}}^{i+1} qw_\ell dx \quad \forall\, w_\ell$$

Il est ensuite relativement aisé de transformer ce problème en un système matriciel $A\phi = Q$ où les inconnues sont les coordonnées du flux ϕ_h dans la base (w_ℓ).

La formulation discrète se généralise évidemment à trois dimensions, avec un découpage du domaine $\mathcal{R}$ en polygones réguliers (parallélépipèdes rectangles, prismes, pyramides…) à bords droits ou courbes. Par exemple, en 2D sur un maillage cartésien, les bases de polynômes sont illustrées dans la figure 29.

On peut montrer que, dans le cas d'un domaine $\mathcal{R}$ suffisamment régulier, et sous conditions sur les sections efficaces, la solution du problème discret est bien une approximation du problème continu initial, et que l'erreur est en $0(h^{k+1})$.

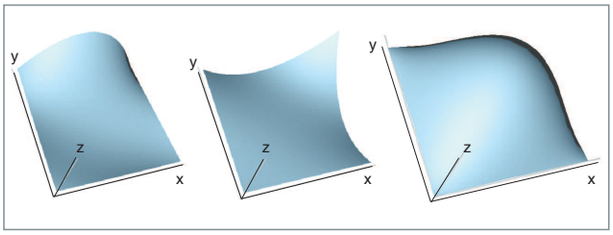


Fig. 29. Base de polynômes de degré 2 en 2D.

Remarque

- Il est possible de démontrer l'équivalence des approximations de type « différences finies » aux sommets des mailles et « éléments finis » d'ordre 1, à condition d'intégrer numériquement (intégration de Gauss-Lobatto) les intégrales qui interviennent dans la formulation discrète ;

- il a également été démontré qu'en utilisant une intégration de Gauss, il est possible d'obtenir une erreur en $0(h^{k+2})$; c'est ce qu'on appelle le phénomène de « **super convergence** ».

L'approximation du flux, telle qu'elle est proposée ici, donne une solution continue sur le domaine $\mathcal{R}$. En revanche, le courant (*i.e.* la dérivée du flux) n'est pas continu. Cette continuité du flux peut produire parfois des contraintes sur le découpage du domaine, en particulier à l'interface cœur-réflecteur où le flux thermique subit une remontée brusque de son niveau avant de s'annuler hors cœur. Ce phénomène est également visible à l'interface de deux assemblages de natures différentes (UOX et MOX, par exemple). Une bonne approximation de la réalité doit donc nécessiter un découpage fin du cœur au niveau de ces interfaces, pour « suivre au mieux » les brusques variations du flux.

Une alternative est de « relâcher » la contrainte de continuité du flux ; cela est possible en utilisant une formulation mixte du problème.

La formulation mixte du problème

En revenant à la formulation continue du problème donné par l'équation (21), on introduit l'inconnue auxiliaire $\vec{p}$ qui représente le courant :

$$\begin{cases}\vec{p}=-D\vec{\nabla}\phi(\vec{r})\\ \vec{\nabla}.\vec{p}+\Sigma_r\phi(\vec{r})=q(\vec{r})\end{cases}$$

La formulation variationnelle mixte du problème ainsi écrit est :

Trouver

$$(\phi,\vec{p})\in V(\mathcal{R})\times W(\mathcal{R})\ tel\ que :$$

$$\begin{cases}\int_{\mathcal{R}}\frac{1}{D}\vec{p}.\vec{q}d\vec{r}+\int_{\mathcal{R}}\phi\vec{\nabla}.\vec{q}d\vec{r}=0 & \forall\,\vec{q}\in W(\mathcal{R})\\ \int_{\mathcal{R}} w\vec{\nabla}.\vec{p}d\vec{r}+\int_{\mathcal{R}}\Sigma_r\phi w d\vec{r}=\int_{\mathcal{R}} qw d\vec{r} & \forall\, w\in V(\mathcal{R})\end{cases}$$

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:25 Page 80

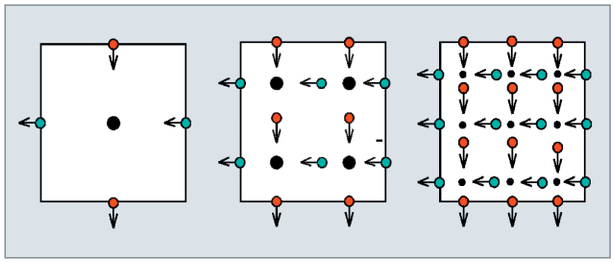


Fig. 30. Éléments finis mixtes Raviart-Thomas d'ordre 1, 2 et 3 en géométrie cartésienne (• : inconnue flux, •→ : inconnue courant).

où V est l'espace de Sobolev des fonctions L^2 intégrables (ainsi que leurs dérivées) et W est l'espace de Sobolev des fonctions vectorielles L^2 intégrables et à divergence L^2 intégrable.

La formulation discrète de ce problème est obtenue en se plaçant dans des espaces discrets de V et W. On ne donnera pas ici les conditions que doivent vérifier ces espaces, mais on illustrera simplement cette discrétisation dans le cas d'un maillage 2D cartésien. Dans ce cas particulier, les éléments finis utilisés sont représentés dans la figure 30.

Remarque

- La contrainte de continuité du flux a été relâchée, tout en conservant la continuité du courant dans la direction normale à l'interface ;

- il est possible de démontrer l'équivalence des approximations de type « différences finies » aux centres des mailles et « éléments finis » mixtes d'ordre 1, à condition d'intégrer numériquement (intégration de Gauss-Lobatto) les intégrales qui interviennent dans la formulation discrète.

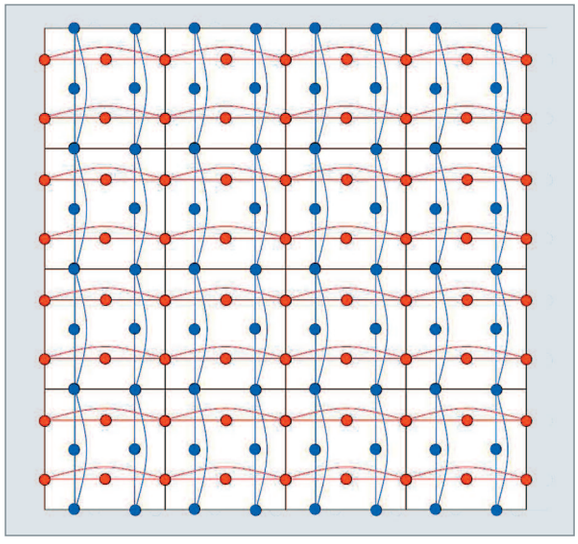


Fig. 31. Couplage des inconnues courant en géométrie cartésienne 2D.

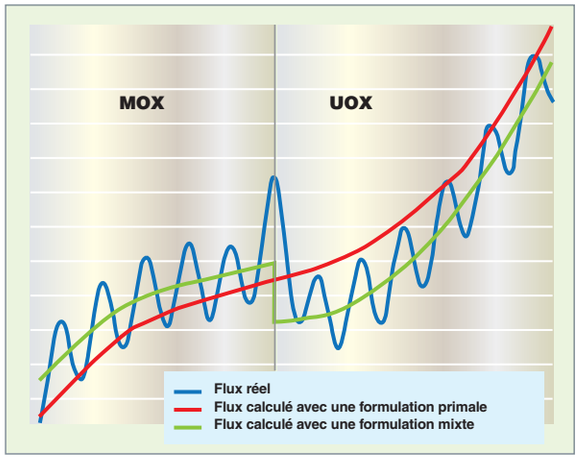


Fig. 32. Représentation schématique des flux calculés à une interface UOX/MOX.

La résolution du problème discret s'effectue sur l'inconnue « courant » après élimination de l'inconnue « flux » qui est interne à la maille. Dans le cas de maillages réguliers, cartésiens, voire hexagonaux, cette résolution peut être itérative, comme montré dans la figure 31. De surcroît, cette méthode se prête à une vectorisation efficace des calculs.

Du fait du relâchement de la contrainte de continuité du flux, il est possible de rajouter des contraintes physiques de « saut » du flux aux interfaces. L'utilisation des **ADF*** (**facteurs de discontinuité***), en particulier à l'interface d'assemblages UOX et MOX, permet alors de modéliser la discontinuité du flux.

La figure 32 **schématise** un flux réel (issu d'un calcul de transport fin effectué par un code de réseau), un flux calculé par une méthode aux éléments finis d'ordre 2 en formulation primale, qui est continu à l'interface mais qui ne respecte pas la valeur moyenne du flux réel et un flux calculé par une méthode aux éléments finis d'ordre 2 en formulation mixte, qui est discontinu à l'interface, mais qui respecte mieux la valeur moyenne du flux réel.

La discrétisation en angle et en espace pour un groupe d'énergie donné

Pour le calcul du flux angulaire dans un groupe donné, les discrétisations en angle et en espace interviennent simultanément. Dans ce cadre, nous allons présenter la méthode des éléments finis et la méthode des caractéristiques. On suppose pour simplifier, que les sections efficaces sont constantes en espace.

La méthode des éléments finis est particulièrement adaptée aux géométries non structurées.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:25 Page 81

La **méthode des caractéristiques**, qui exploite le comportement hyperbolique de l'équation du transport, est beaucoup utilisée pour les calculs d'assemblage, où l'on veut traiter des géométries non structurées (les crayons dans un réseau, les tubes guides, etc.), sans pour autant passer par un maillage, ce qui demanderait un grand nombre de mailles pour respecter les volumes fissiles (on sait qu'au premier ordre, une erreur de 1 % dans le volume du crayon peut induire une erreur de l'ordre de 1 000 pcm sur le k_{eff}).

La méthode des éléments finis

On considère à présent l'équation de transport à source dans un groupe donné :

$$\vec{\Omega}.\vec{\nabla}\psi(\vec{r},\vec{\Omega}) + \Sigma\psi(\vec{r},\vec{\Omega}) = q(\vec{r},\vec{\Omega}), \qquad \vec{r} \in \mathcal{R} \qquad (22)$$

où $q\ (\vec{r}, \vec{\Omega})$ regroupe les termes source de l'équation.

On peut écrire deux formulations variationnelles du problème de transport à source, l'une du second ordre se rapprochant de la formulation variationnelle obtenue pour l'équation de la diffusion, l'autre du premier ordre issue de l'équation (22).

La formulation paire de l'équation de transport

On suppose dans ce paragraphe que l'équation de transport est déjà discrétisée en angle *via* la méthode S_N. Les équations sont donc écrites pour une suite discrète de valeurs de $\vec{\Omega}$.

Nous avons décrit précédemment les méthodes aux « éléments finis » de résolution d'une équation du second ordre, l'équation de la diffusion.

Une façon simple de se ramener à ce type d'équation est de définir les inconnues suivantes :

$$\begin{cases} \psi^+(\vec{r},\vec{\Omega}) = \dfrac{1}{2}\left(\psi(\vec{r},\vec{\Omega}) + \psi(\vec{r},-\vec{\Omega})\right) \\ \psi^-(\vec{r},\vec{\Omega}) = \dfrac{1}{2}\left(\psi(\vec{r},\vec{\Omega}) - \psi(\vec{r},-\vec{\Omega})\right) \end{cases}$$

dénommées respectivement **« flux pair »** et **« flux impair »**.

En écrivant l'équation de transport pour les directions $\vec{\Omega}$ et $-\vec{\Omega}$ et en sommant (resp. soustrayant) ces deux équations, on peut écrire le système d'équations, appelé **« formulation pair-impair »** :

$$\begin{cases} \vec{\Omega}.\vec{\nabla}\psi^-(\vec{r},\vec{\Omega}) + \Sigma\psi^+(\vec{r},\vec{\Omega}) = q^+(\vec{r},\vec{\Omega}) \\ \vec{\Omega}.\vec{\nabla}\psi^+(\vec{r},\vec{\Omega}) + \Sigma\psi^-(\vec{r},\vec{\Omega}) = q^-(\vec{r},\vec{\Omega}) \end{cases}$$

La deuxième équation du système permet d'éliminer le flux impair et de se ramener à la **« formulation paire »** du système :

$$-\vec{\Omega}.\vec{\nabla}\left(\frac{1}{\Sigma}\vec{\Omega}.\vec{\nabla}\left(\psi^+(\vec{r},\vec{\Omega})\right)\right) + \psi^+(\vec{r},\vec{\Omega}) = q^+(\vec{r},\vec{\Omega}) - \vec{\Omega}.\vec{\nabla}\left(\frac{1}{\Sigma}q^-(\vec{r},\vec{\Omega})\right)$$

Cette équation est du second ordre, et les méthodes primales aux « éléments finis » permettent de calculer une approximation du flux pair.

La résolution itérative sur les directions est généralement accélérée par une méthode dite d'**« accélération synthétique »** qui permet de calculer une estimation d'erreur entre deux itérations par résolution d'une équation de la diffusion. Cette formulation paire de l'équation du transport rend naturelle l'équation de la diffusion synthétique associée.

Remarque

Il est possible de définir également une formulation mixte de l'équation de transport en conservant le flux impair comme inconnue, inconnue scalaire dans ce cas, alors qu'elle est vectorielle (le courant) dans le cas de la diffusion. Cette dernière formulation n'apporte pas d'amélioration quant à la résolution.

La méthode des éléments finis discontinus

Des méthodes aux « éléments finis » ont été également développées pour les équations aux dérivées partielles du premier ordre, comme l'équation du transport. L'une de ces méthodes est fondée sur des « éléments finis » discontinus aux interfaces des mailles. Associée à l'approximation S_N, cette méthode a l'avantage de pouvoir bénéficier d'une résolution maille par maille qui ne nécessite pas la construction, et donc la résolution, du système global sur toutes les inconnues.

La **formulation variationnelle** du problème (2) s'écrit :
Trouver $\psi \in V(\mathcal{R})$ tel que :

$$\int_{\mathcal{R}} \vec{\Omega}.\vec{\nabla}\psi\, w d\vec{r} + \int_{\mathcal{R}} \Sigma\psi w \mathrm{d}\vec{r} = \int_{\mathcal{R}} q w d\vec{r} \quad \forall\, w \in V(\mathcal{R})$$

où V est l'espace de Sobolev des fonctions L^2 intégrables ainsi que leurs gradients.

L'absence de continuité du flux impose le choix de la discrétisation. La méthode des « éléments finis » discontinus consiste à écrire le flux sur chaque maille K comme un polynôme, sans imposer la continuité du flux aux interfaces entre deux mailles adjacentes.

La **formulation discrète** s'écrit sur la maille K :

$$\int_K \vec{\Omega}.\vec{\nabla}\psi\, w d\vec{r} + \int_{\Gamma_e} \vec{\Omega}.\vec{n}_e\left(\psi_e^+ - \psi_e^-\right) w \mathrm{d}\vec{r} + \int_K \Sigma\psi\, w d\vec{r} = \int_K q w d\vec{r}$$

Γ_e représente une quelconque face « éclairée » de la maille (voir fig. 33), $\vec{n}_e$ est la normale à Γ_e, w est une fonction de base, c'est-à-dire un polynôme dont le degré dépend de l'ordre d'approximation demandé. Le flux sur les faces des mailles n'étant pas défini, l'intégrale de surface fait intervenir le saut de discontinuité du flux sur les faces éclairées : ψ_e^+ est le flux amont

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:25 Page 82

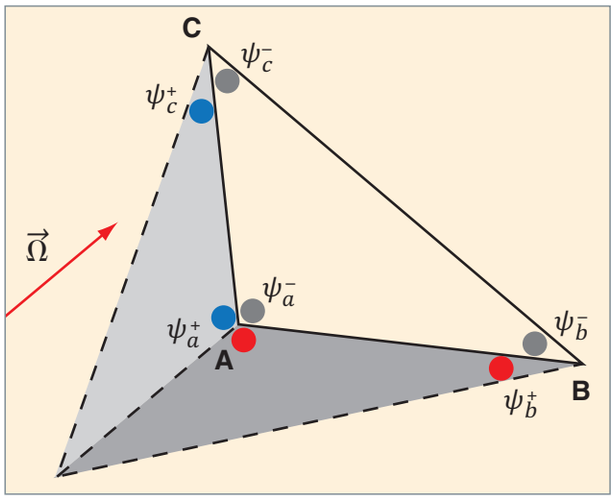


Fig. 33. Visualisation de la résolution sur le triangle ABC pour une direction $\vec{\Omega}$ donnée. Les faces « éclairées » sont les faces AC et AB.

(choix « *upwind* ») supposé connu, et ψ_e^- est le flux inconnu de la maille K restreint à la face Γ_e.

Ces équations sont résolues successivement sur chaque maille selon un front de propagation propre à chaque direction $\vec{\Omega}$.

À titre d'illustration, supposons le domaine $\mathcal{R}$ maillé en triangles. La direction $\vec{\Omega}$ est une direction fixée par la méthode S_N. On suppose une approximation linéaire du flux (w est un polynôme de degré au plus 1). Sur ABC (fig. 33), le flux ψ s'écrit :

$$\psi(x,y) = \psi_a^- w_A(x,y) + \psi_b^- w_B(x,y) + \psi_c^- w_C(x,y)$$

Il s'agit de calculer les trois flux ψ_a^-, ψ_b^-, ψ_c^-. La résolution a déjà été faite sur les deux triangles dont les côtés sont en pointillés. Les flux amont sont les flux évalués aux points bleus et rouges. Pour calculer les flux aux sommets du triangle ABC, on résout donc un système de trois équations à trois inconnues.

Remarque

- Il est possible d'écrire une formulation variationnelle de l'équation de transport dans un espace où le flux est continu. Il a cependant été démontré que la résolution souffre de problèmes d'oscillations.

- Il est possible de paralléliser la méthode de résolution, car les calculs sont locaux à la maille et les directions peuvent être traitées indépendamment les unes des autres moyenant une méthode itérative ;

- la méthode d'ordre k converge en $O(h^{k+1/2})$ vers la solution exacte ; on rappelle que les méthodes aux éléments finis décrites précédemment convergent en $O(h^{k+1})$.

Comme pour la résolution de la forme paire de l'équation, l'itération sur les directions angulaires est accélérée en résolvant un problème de diffusion. Pour assurer la cohérence de l'approximation des deux problèmes, transport et diffusion, une méthode aux « éléments finis » discontinus est utilisée pour le problème de la diffusion.

La forme variationnelle du problème de diffusion associé :

$$\int_K D\vec{\nabla}\phi.\vec{\nabla}w d\vec{r} + \int_{\Gamma_e} \alpha[\phi]\,[w]\,d\vec{r} + \int_{\Gamma_e} \vec{n_e}.\{D\vec{\nabla}\phi\}\,[w]\,d\vec{r} + \int_{\Gamma_e} \vec{n_e}.\{D\vec{\nabla}w\}\,[\phi]d\vec{r} + \int_K \Sigma\phi w d\vec{r} = \int_K q w d\vec{r}$$

Comme les flux ne sont pas définis sur les faces, les intégrales de surface font intervenir les opérateurs [] et {} qui sont, respectivement, le saut et la moyenne :

$$[\phi] = \phi^{ext} - \phi^{int} \text{ et } \{\phi\} = \frac{\phi^{ext}+\phi^{int}}{2}$$

La première intégrale de surface est un terme de stabilisation avec un paramètre de pénalisation α. La troisième intégrale est un terme de symétrisation de la matrice.

Le paramètre α est estimé en fonction des propriétés physiques des mailles, de part et d'autre de l'interface.

La méthode des caractéristiques

En mathématiques, la méthode des caractéristiques est une technique résolvant des équations aux dérivées partielles du premier ordre qui, en reformulant le problème dans un système de coordonnées curvilignes, identifie des courbes que l'on appelle « courbes caractéristiques » ou tout simplement « caractéristiques », le long desquelles l'équation aux dérivées partielles dégénère en une équation différentielle ordinaire.

Sa discrétisation en fait une technique numérique particulièrement bien adaptée à la résolution des équations aux dérivées partielles de type transport ([3], [4], [5], [6]). Elle est, en effet, actuellement l'une des plus employées pour les calculs industriels, car elle permet d'obtenir un bon rapport entre précision et temps de calcul, tout en facilitant la description précise de géométries complexes arbitraires (grâce à un maillage non structuré) et en assurant une solution rigoureuse (en prenant en compte des conditions aux limites très générales et un ordre d'anisotropie de choc quelconque). Cette méthode est disponible dans les codes APOLLO2 et APOLLO3 du CEA [7]. Elle a fait l'objet, au CEA, de nombreux travaux récents ([8], [9], [10]) sur lesquels s'appuie cette description. La méthode des caractéristiques est couramment utilisée dans le cadre du schéma multi-niveau APOLLO2-A mis en œuvre par AREVA, en partenariat avec le CEA pour le calcul industriel de réacteurs à eau sous pression et à eau bouillante [11].

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:25 Page 82

La méthode des caractéristiques est exposée en deux dimensions, en se plaçant à l'intérieur d'un groupe d'énergie g dont l'index est omis afin de simplifier les notations. Dans ce groupe, l'équation intégro-différentielle multigroupe de Boltzmann s'écrit :

$$\vec{\Omega}.\vec{\nabla}\psi(\vec{r},\vec{\Omega}) + \Sigma(\vec{r})\,\psi(\vec{r},\vec{\Omega}) = q(\vec{r},\vec{\Omega}) \qquad (23)$$

où $q\,(\vec{r},\vec{\Omega})$ regroupe les termes de source de l'équation.

Discrétisation en espace et en angle

La méthode des caractéristiques repose sur une discrétisation spatiale en régions homogènes et une discrétisation angulaire en ordonnées discrètes (fig. 34).

Variable spatiale : le domaine géométrique D, sur lequel l'équation (23) est résolue, est décomposé en un ensemble de I régions homogènes D_i constituant un maillage non structuré.

$$D = \bigcup_{i=1,I} D_i$$

On suppose que les sections efficaces et les termes sources sont spatialement constants par région :

$$\begin{cases} \Sigma(\vec{r}) = \Sigma_i \\ q(\vec{r},\vec{\Omega}) = q_i(\vec{\Omega}) \end{cases}, \qquad \forall \vec{r} \in D_i, i = 1, I \qquad (24)$$

Variable angulaire : on rappelle que la formulation aux ordonnées discrètes (S_N) consiste à choisir un ensemble fini de directions discrètes et de poids associés :

$$\{\vec{\Omega}_n, \omega_n\} n = 1, N$$

Les inconnues du problème deviennent les valeurs que le flux angulaire prend en ces directions discrètes. De surcroît, l'intégration angulaire d'une fonction $f(\vec{\Omega})$ arbitraire se fait en employant la formule de quadrature :

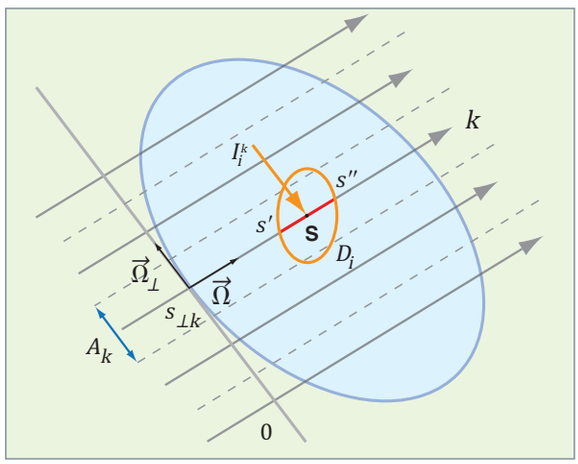


Fig. 34. Méthode des caractéristiques : discrétisation en espace et en angle.

$$\int_{4\pi} f(\vec{\Omega})\,d\vec{\Omega} = \sum_{n=1}^{N} \omega_n\, f(\vec{\Omega}_n) \qquad (25)$$

Pour chaque direction angulaire $\vec{\Omega}$, un ensemble de lignes caractéristiques interceptant les frontières des régions discrétisées du domaine fournit un ensemble discret de points entre lesquels l'approximation de régions homogènes (24) peut être faite.

Soit $\vec{\Omega}$ la direction de la droite caractéristique k, $\vec{\Omega}_\perp$ sa direction perpendiculaire. Tous les points de la droite caractéristique k peuvent s'écrire sous la forme : $\vec{r} = s_{\perp k}\vec{\Omega}_\perp + s\vec{\Omega}$ où $s_{\perp k}$ caractérise la trajectoire k et où s, qui représente l'abscisse curviligne le long d'une courbe caractéristique, varie. Pour simplifier, on note $\vec{r}_{0k} = s_{\perp k}\vec{\Omega}_\perp$.

La forme caractéristique de l'équation de transport sur la droite caractéristique k est la suivante :

$$\frac{d\psi(\vec{r}_{0k}+s\vec{\Omega},\vec{\Omega})}{ds} + \Sigma(\vec{r}_{0k}+s\vec{\Omega})\psi(\vec{r}_{0k}+s\vec{\Omega},\vec{\Omega}) = q(\vec{r}_{0k}+s\vec{\Omega},\vec{\Omega}) \qquad (26)$$

Dans le cas des neutrons, les courbes caractéristiques sont des lignes droites colinéaires à $\vec{\Omega}$.

Intégration le long d'une caractéristique

Équation de transmission

Par intégration sur une région de calcul D_i le long de la droite caractéristique k, la solution analytique de l'équation caractéristique (26) en un point quelconque $\vec{r}_{0k} + s\vec{\Omega}$ s'obtient en fonction de la solution analytique au point d'entrée $\vec{r}_{0k} + s'\vec{\Omega}$ par l'équation suivante :

$$\psi(\vec{r}_{0k}+s\vec{\Omega},\vec{\Omega}) = \psi(\vec{r}_{0k}+s'\vec{\Omega},\vec{\Omega})\,e^{-\tau(s)} + \int_{s'}^{s} ds_1\, q(\vec{r}_{0k}+s_1\vec{\Omega},\vec{\Omega})\,e^{-\tau(s_1)} \qquad (27)$$

où le parcours optique $\tau\,(s_1)$ est défini de la manière suivante :

$$\tau(s_1) = \int_{s'}^{s_1} \Sigma(\vec{r}_{0k}+s_2\vec{\Omega})ds_2 \qquad (28)$$

D'après l'hypothèse (24) stipulant que les sections efficaces et le terme source q sont spatialement constants dans la région de calcul D_i, l'équation (27) devient :

$$\psi(\vec{r}_{0k}+s\vec{\Omega},\vec{\Omega}) = \psi(\vec{r}_{0k}+s'\vec{\Omega},\vec{\Omega})\,e^{-\Sigma_i(s-s')} + \frac{q_i(\vec{\Omega})}{\Sigma_i}(1-e^{-\Sigma_i(s-s')}) \qquad (29)$$

En choisissant comme point courant le point de sortie $(\vec{r}_{0k} + s''\vec{\Omega})$ de la région D_i, on peut donc écrire : (30)

$$\psi(\vec{r}_{0k}+s''\vec{\Omega},\vec{\Omega}) = \psi(\vec{r}_{0k}+s'\vec{\Omega},\vec{\Omega})\,e^{-\Sigma_i l_i^k} + \frac{1-e^{-\Sigma_i l_i^k}}{\Sigma_i}\,q_i(\vec{\Omega})$$

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:25 Page 84

où $I_i^k = s'' - s'$

L'équation (30) est appelée « **équation de transmission** ».

Équation de bilan

Pour obtenir une information moyenne sur l'ensemble de la ligne caractéristique, il suffit de « moyenner » l'équation (29) sur le parcours optique en faisant varier s entre s' et s'' pour obtenir :

$$\bar{\psi}_i^k = \frac{\psi(\vec{r}_{0k} + s'\vec{\Omega}, \vec{\Omega}) - \psi(\vec{r}_{0k} + s''\vec{\Omega}, \vec{\Omega})}{\Sigma_i I_i^k} + \frac{q_i(\vec{\Omega})}{\Sigma_i} \qquad (31)$$

Cette équation, appelée « **équation de bilan** », permet d'obtenir des valeurs de flux « moyennées » le long d'une trajectoire, tout en garantissant de manière exacte la conservation du nombre de neutrons dans le système.

Intégration transverse

Pour traiter la coordonnée transverse $s_\perp$, nous devons définir, pour chaque direction $\vec{\Omega}$ un maillage dans la direction transverse. Une fois ce maillage défini (mailles A_k sur la figure 34), nous traçons l'ensemble des trajectoires k de direction $\vec{\Omega}$ passant par le centre des mailles transverses. L'ensemble des trajectoires ainsi obtenues est appelé « traçage ».

Il est important de noter que le traçage ne contient que des données géométriques : angle de propagation, liste des régions traversées et longueurs d'intersections correspondantes. Cette étape n'est réalisée qu'une fois et contient toutes les informations géométriques nécessaires au solveur.

Les équations précédentes (30) et (31) permettent d'obtenir les variations du flux angulaire le long d'une ligne caractéristique de direction $\vec{\Omega}$. Pour obtenir le flux angulaire moyen sur l'ensemble des régions, il faut prendre en compte la variable transverse $s_\perp$ le long de $\vec{\Omega}_\perp$, direction perpendiculaire à $\vec{\Omega}$.

Sur la région discrétisée D_i de volume V_i, le flux angulaire moyen $\bar{\psi}_i$ s'exprime comme :

$$\bar{\psi}_i(\vec{\Omega}) = \frac{1}{V_i}\int dV\ \psi(s_\perp\vec{\Omega}_\perp + s\vec{\Omega}, \vec{\Omega}) = \frac{1}{V_i}\int ds_\perp \int ds\ \psi(s_\perp\vec{\Omega}_\perp + s\vec{\Omega}, \vec{\Omega})$$

L'approximation de cette intégrale se fait à l'aide d'une formule de quadrature obtenue en considérant un ensemble de trajectoires parallèles recouvrant la région considérée. Le volume D_i (fig. 34) est balayé par un ensemble de lignes k qui définissent un tuyau d'aire transverse A_k, de longueur I_i^k, de flux moyen sur la ligne $\bar{\psi}_i^k$ La valeur moyenne $\bar{\psi}_i$ sur la région D_i peut donc être approchée par la formule suivante :

$$\bar{\psi}_i = \frac{\sum_k A_k I_i^k\, \bar{\psi}_i^k}{\sum_k A_k I_i^k} \qquad (32)$$

La sommation est faite sur les lignes caractéristiques k qui sont parallèles à $\vec{\Omega}$ et qui interceptent la région D_i.

Conditions aux limites

Il existe deux types de conditions aux limites fréquemment appliquées lors du calcul d'un assemblage de réacteur, selon que l'on considère la frontière du domaine comme ouverte ou fermée. Une frontière est considérée comme ouverte, lorsque des neutrons peuvent s'échapper du domaine par au moins une des zones délimitant la frontière. On parlera dès lors de « trajectoires ouvertes » (simples ou composées), lorsque la

La méthode des probabilités de collision et la méthode des caractéristiques

La méthode des probabilités de collision résout, dans chaque groupe d'énergie, l'équation intégrale en variable spatiale pour le flux scalaire. Cette méthode utilise l'approximation de flux plat par région. Elle fournit une matrice qui relie les sources aux flux scalaires par région, et dont les éléments peuvent s'interpréter comme des probabilités de collision. Comme pour la méthode des caractéristiques, le calcul de cette matrice utilise un traçage de trajectoires parallèles pour un ensemble fini de directions angulaires, et l'on montre que, pour la même partition en régions et les mêmes trajectoires, les méthodes des probabilités de collision et des caractéristiques donnent le même résultat pour des géométries 3D. On conclut que :

- La méthode des caractéristiques peut se voir comme une résolution itérative de la méthode des probabilités de collision ;
- l'idée courante selon laquelle la méthode des probabilités de collision ne fait pas d'hypothèse sur les flux angulaires est fausse.

Par contre, l'équivalence entre les méthodes des probabilités de collision et des caractéristiques n'est pas exacte en géométrie 2D *xy*. Ici, la méthode des probabilités de collision utilise des fonctions spéciales, les fonctions de Bickley-Naylor, qui intègrent exactement la dépendance sur l'angle polaire, tandis qu'avec la méthode des caractéristiques, cette dépendance est résolue par intégration numérique sur cet angle. Néanmoins, la méthode des probabilités de collision ne s'applique qu'à des problèmes avec choc isotrope et a donc besoin d'une correction du transport qui introduit une approximation difficilement contrôlable. En outre, elle conduit à un système algébrique qui nécessite l'inversion directe, et donc coûteuse, d'une matrice par groupe d'énergie. Tous ces inconvénients font que la méthode des probabilités de collision est employée seulement pour des problèmes avec relativement peu de régions et, souvent, avec des approximations dégradées (approximation **multicellule***). La méthode des caractéristiques reste donc le candidat idoine pour des grands calculs ou pour des calculs où l'anisotropie de la collision est importante.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:25 Page 85

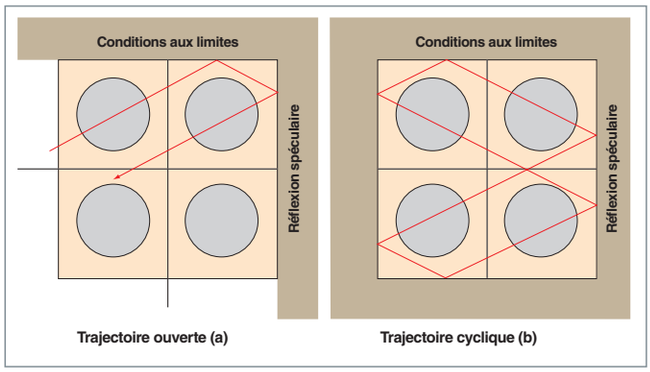


Fig. 35. Méthode des caractéristiques : trajectoires ouverte et cyclique.

frontière est ouverte et de « trajectoires cycliques », lorsque la frontière est fermée (fig. 35). Un traitement approfondi de ces conditions aux limites est disponible dans la référence [7].

Références

[1] B. Davison, J. B. Skypes, *Neutron Transport Theory*, Oxford, Clarendon Press, 1957.

[2] J. J. Duderstadt, W. R. Martin, *Transport Theory*, New York, John Wiley & Sons, USA, 1979.

[3] E.M. Gelbard, *Simplified Spherical Harmonics Equations and their Use in Shielding Problems*, WAPD-T-1182 (Rev.1), Bettis Atomic Power Laboratory, February 1961.

[4] G. C. Pomraning, "Asymptotic and variational derivations of the simplified PN Equations", *Ann. Nucl. Energy*, 20(9), pp. 623-637, 1993.

[5] E.W. Larsen, J.M. McGhee, J.E. Morel, "Asymptotic Derivation of the Simplified PN Equations", *Proceedings of Topical. Meeting, Mathematical Methods and Supercomputers in Nuclear Applications*, M&C+ SNA 93, Karlsruhe, Germany, April 19-23, 1993.

[6] P.S. Brantley, E.W. Larsen, "A variational derivation of the simplified P3 approximation", *Proceedings of ANS Meeting on Mathematical Models and Supercomputing for Nuclear Applications*, Saratoga Springs, New York, 1997.

[7] A.M. Baudron and J.J. Lautard, "MINOS: A Simplified PN Solver for Core Calculation", *Nuclear Science and Engineering*, 155(2), pp. 250-263, February, 2007.

[8] A.M. Baudron and J.J. Lautard, "Simplified PN Transport Core Calculations in the APOLLO3 System", *International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering*, M&C 2011, Rio de Janeiro, RJ, Brazil, May 8-12, 2011.

[9] M. J. Halsall, "CACTUS : a Characteristics solutions to the neutron transport equations in complicated geometries", AEEWR-1291, Atomic Energy Establishment, UK, 1980.

[10] S. G. Hong, N. Z. Cho, "CRX : a code for rectangular and hexagonal lattices based on the method of characteristics", *Annals of Nuclear Energy*, vol. 25, pp. 547-565, 1998.

[11] K.S Smith, J.D. Rhodes, "CASMO-4 Characteristics methods for two dimensional PWR and BWR core simulations", *Trans Am. Nucl. Soc.*, vol. 83, pp. 294-296, 2000.

[12] R. Sanchez, L. Li Mao, S. Santandrea: "Treatment of boundary conditions in trajectory-based deterministic transport methods", *Nuclear Science and Engineering*, vol. 140, pp. 23-50, 2002.

[13] R. Sanchez, I. Zmijarevic, M. Coste-Delclaux, E. Masiello, S. Santandrea, E. Martinolli, L. Villatte, N. Schwartz, N. Guler, "APOLLO2 year 2010", *Nuclear Engineering and Technology*, vol. 42, n°5, pp. 474-499, October 2010.

[14] F. Févotte, *Techniques de traçage pour la méthode des caractéristiques appliquées à la résolution de l'équation de transport des neutrons en domaines multidimensionnels*, rapport CEA-R-6212, février 2009.

[15] G. Grassi, *Conception de nouveaux schémas multigrilles appliquées à la méthode des caractéristiques pour la résolution de l'équation de transport des neutrons*, rapport CEA-R-6211, février 2009.

[16] S. Santandrea, J.-C. Jaboulay, P. Bellier, F. Févotte, H. Golfier, "Improvements and validation of the linear surface characteristics scheme", *Annals of Nuclear Energy*, vol. 36, pp. 46-59, 2010.

[17] E. Martinolli *et al.*, "APOLLO2-A – AREVA's new generation lattice physics code: methodology and validation", Proc Int Conf on Advances in Reactor Physics to Power the Nuclear Renaissance (PHYSOR 2010), Pittsburgh, PA, USA, May, 9-14, 2010.

Bibliographie

Formalisme d'autoprotection

Livolant (M.), Jeanpierre (F.), *Autoprotection des résonances dans les réacteurs nucléaires*, Rapport CEA-R-4533-1974.

Grandotto-Biettoli (M.), *AUTOSECOL, Un calcul automatique de l'autoprotection des résonances des isotopes lourds*, Note CEA-N-1961, 1977.

Williams (M. L.), "Correction of Multigroup Cross-Sections for Resolved Resonance Interference in Mixed Absorbers", *Nuclear Science and Engineering*, 83, pp. 37-49, 1983.

Rimpault (G.), Grimstone (M.J.), "Validation of New Subgroup Algorithms for Resonance Self-Shielding in Heterogeneous Structures", *Proc. Int. Top. Meet. on Advances in Nuclear Engineering Computation and Radiation Shielding*, Santa Fe, New Mexico, USA, April 9-13, 1989.

Reuss (P.), *Théorie de l'absorption résonnante des neutrons*, Note CEA-N-2679-1991.

Sanchez (R.), *Module d'autoprotection du code APOLLO2*, Note CEA N- 2765-1994.

Bouland (O.), *Amélioration du calcul de l'autoprotection des résonances résolues par un traitement quasi-exact du ralentissement des neutrons*, Thèse de doctorat, Université Paris XI, Orsay, 1994.

Hébert (A.), "The Ribon Extended Self-Shielding Model", *Nuclear Science and Engineering*, vol. 151, pp. 1-24, 2005.

Coste-Delclaux (M.), *Modélisation du phénomène d'autoprotection dans le code de transport multigroupe APOLLO2*, Rapport CEA R- 6114, 2006.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:25 Page 86

HFAIEDH (N.), *Nouvelle Méthodologie de Calcul de l'Absorption Résonnante*. Thèse de doctorat, Université Louis Pasteur Strasbourg I, 2006.

Méthode des éléments finis

LESAINT (P.) and RAVIART (P. A.), "On a Finite Element Method for Solving the Neutron Transport Equation", in *Mathematical Aspects of Finite Elements in Partial Differential Equations*, p. 89, C. A. De Boor, Ed., Academic Press, New York, 1974.

LAUTARD (J.J.), "New Finite Element Representation for 3D Reactor Calculations", *ANS/ENS Meeting*, Munich,Germany, April 1981.

KAVENOKY (A.) and LAUTARD (J. J.), "State of the Art in using Finite Element Methods for Neutron Diffusion Calculations", *ANS Topical Meeting on Advances in Reactor Computations*, Salt-Lake-City, USA,1983.

LAUTARD (J.J.) and MOREAU (F.), "A Fast 3D Parallel Diffusion Solver Based on a Mixed Dual Finite Element Approximation", *Int. Conf. on Mathematical Methods and Supercomputing in Nuclear Applications*, Karlsruhe, Germany, 1993.

ERN (A.), GUERMOND (J.-L.), *Theory and Practice of Finite Elements*, Springer, New York, 2004.

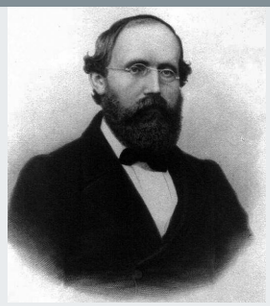
Aux sources de la méthode des caractéristiques

La **méthode des caractéristiques** est présentée, pour la première fois, par **Georg Friedrich Bernhard Riemann**, en 1859, dans un article intitulé « *Ueber die Fortpflanzung ebener Luftwellen von endlicher Schwingungsweite* » (« Sur la propagation d'ondes planes d'amplitude finie dans l'air ») [1]. Une présentation en est faite par deux auteurs, **H. M. Paynter** et **I. J. Busch-Vishniac**, dans la référence [2]. Cette méthode numérique présente un caractère générique pour traiter des problèmes linéaires ou non linéaires de propagation dans des milieux tant solides que liquides ou gazeux.

Dans le domaine d'études relevant de la résolution de l'équation du transport des neutrons, cette méthode a été introduite, pour la première fois, en 1972, par le britannique **J. R. Askew** dans son article « *A characteristics formulation of the neutron transport equation in complicated geometries* » [3]. L'un des intérêts de la **méthode des caractéristiques** est justement de permettre une plus grande flexibilité dans la discrétisation spatiale ("flexibilité géométrique") devant être faite du système physique étudié. Elle est particulièrement adaptée pour les maillages géométriques dits « non structurés ». Elle est aussi intéressante pour traiter le transport des neutrons dans des configurations physiques où le phénomène de « **streaming*** » est important, comme, par exemple, dans des géométries présentant des vides ou une forte atténuation du flux neutronique.

L'implémentation de la **méthode des caractéristiques** dans les codes de calcul de neutronique s'étend progressivement, ainsi que le montre les revues critiques qui en sont faites, en 1980, dans la référence [4] relative à **M. J. Halsall**, puis en 1981, dans la référence [5] par **R. E. Alcouffe** et **E. W. Larsen** du *Los Alamos National Laboratory*, aux États-Unis.

R. Sanchez est à l'origine de l'introduction de cette méthode dans les codes de neutronique du CEA [6-7]. Elle est aujourd'hui couramment appliquée à la résolution de problèmes à deux dimensions. Elle constitue l'une des méthodes de calcul de réseau offertes aux ingénieurs neutroniciens par le code **APOLLO** développé au CEA.



Georg Friedrich Bernhard Riemann (1826-1866) est un mathématicien allemand ayant apporté une contribution majeure à l'analyse et à la géométrie différentielle.

L'étape suivante est sa généralisation à trois dimensions d'espace.

Références

[1] *Abhandlungen der Gesellshaft der Wissenshaften zu Göttingen*, Mathematisch- physikalishe Klasse 8, pp. 43 -65 (1858-59).

[2] J. ACOUST, *"Remarks on Riemann's method of characteristics"*, Soc. Am. 84 (3), September 1988, pp. 813-821.

[3] Rapport technique AEEW-M 1108, *Atomic Energy Establishment*, Winfrith United Kingdom, 1972.

[4] M. J. HALSALL, "CACTUS, a Characteristics Solution to the Neutron Transport Equations in Complicated Geometries", AEEW-R 1291, *Atomic Energy Establishment*, Winfrith, Dorchester, Dorset, United Kingdom, April 1980.

[5] *A review of characteristic methods used to solve the linear transport equation*, LAUR-136, ANS/ENS Joint Topical Meeting, Mathematical Methods in Nuclear Engineering, April 26-29, 1981, Munich, FRG.

[6] R. SANCHEZ, A. CHETAINE, "A Synthetic Acceleration for a Two-Dimensional Characteristic Method in Unstructured Meshes", *Nuclear Science and Engineering*, 136, pp. 122–139, 2000.

[7] R. SANCHEZ, L. MAO, S. SANTANDREA, "Treatment of Boundary Conditions in Trajectory-Based Deterministic Transport Methods", *Nuclear Science and Engineering*, 140, pp. 23–50, 2002.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:25 Page 87

BERNADI (C.), MADAY (Y.), RAPETTI (F.), *Discrétisation variationnelle de problèmes aux limites elliptiques*, Springer, New York, 2004.

BAUDRON (A.M.), LAUTARD (J.J.), "MINOS: A Simplified Pn Solver for Core Calculation", *Nuclear Science and Engineering*, vol. 155, number 2, pp. 250-263, February 2007.

GUÉRIN (P.), BAUDRON (A.M.), LAUTARD (J.J.), "Domain Decomposition Methods for Core Calculations Using the MINOS Solver", *Joint International Topical Meeting on Mathematics & Computations and Supercomputing in Nuclear Applications*, M&C +SNA 2007, Monterey April 15-19, 2007.

WANG (Y.), *Adaptive Mesh Refinement Solution Techniques for the Multi-group SN Transport Equation Using a Higher-Order Discontinuous Finite Element Method*, PhD Thesis, Texas A&M University, 2009.

HÉBERT (A.), *Applied Reactor Physics*, Montréal, Presses Internationales Polytechnique, 2009.

MOLLER (J.Y.), *Résolution de l'équation du transport des neutrons dans les cœurs de réacteurs nucléaires par la méthode (Galerkin) des éléments finis discontinus courbes*, thèse de l'université Henri Poincaré, Nancy, 2011.

MOLLER (J.Y.) and LAUTARD (J.J.), "MINARET, A Deterministic Neutron Transport Solver for Nuclear Core Calculations", *International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering* (M&C 2011), Rio de Janeiro, RJ, Brazil, May 8-12, 2011.

Mireille COSTE-DELCLAUX, Cheikh M. DIOP, Franck GABRIEL, Jean-Jacques LAUTARD, Christine MAGNAUD, Fausto MALVAGI, Sylvie NAURY et Anne NICOLAS
Département de modélisation des systèmes et structures

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:25 Page 88

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:25 Page 89

Méthode Monte-Carlo de résolution de l'équation de Boltzmann

L'approche probabiliste de type Monte-Carlo permet de simuler la « réalité » à l'échelle microscopique pour remonter aux grandeurs physiques macroscopiques : les neutrons sont suivis individuellement et les événements considérés sont les interactions auxquelles ils donnent lieu avec les différents noyaux des atomes qui constituent le milieu traversé : diffusions, capture, fission, réactions (n, 2n), etc. Cette suite d'événements est désignée par le terme d'« histoire ». C'est en simulant suffisamment d'histoires de neutrons que l'on peut quantifier les grandeurs physiques macroscopiques d'intérêt. La population de neutrons dans le cœur d'un REP en fonctionnement normal produits par seconde est de quelque 10^{19}. La technologie actuelle ne permet pas encore de suivre autant de particules. Avec un échantillon représentatif d'un milliard (10^9) d'histoires, l'on détermine ainsi le facteur de multiplication effectif d'un cœur de REP avec une précision statistique de quelques pcm, et la puissance par assemblage à 1 % à un écart-type.

La méthode de Monte-Carlo appliquée à la résolution de l'équation du transport des neutrons est réputée « **exacte** » car capable de reproduire « **sans approximations** » les phénomènes d'interaction particule-matière (par opposition aux modélisations des méthodes déterministes : par exemple, pas d'approximation multigroupe) dans des systèmes physiques de **géométrie tridimensionnelle quelconque**. La contrepartie est cependant son « coût temporel » : la lenteur de la convergence statistique de la simulation qui induit une contrainte forte sur la taille des régions dans lesquelles les résultats sont recherchés, même si, dans certaines situations, il est possible d'obtenir une estimation du flux en un point de l'espace. Pour cette même raison, dans le cadre des études de neutronique, la résolution de l'équation de Boltzmann par la méthode de Monte-Carlo se fait généralement en situation stationnaire.

Les codes de transport des neutrons fondés sur la méthode de Monte-Carlo simulent la propagation des neutrons à partir des données nucléaires ponctuelles en énergie (sections efficaces, transferts énergétiques et angulaires, spectres d'émission de particules…) fournies dans les évaluations internationales (voir *supra*, p. 21-38). C'est la raison pour laquelle, on les qualifie souvent de **codes de transport Monte-Carlo à énergie continue** et qu'ils ont acquis le statut de **code de transport de référence** vis-à-vis des codes de transport déterministes.

Les principes généraux

L'application de la méthode de Monte-Carlo ([1], [2], [3]) pour résoudre l'équation de Boltzmann s'appuie sur la forme intégrale de celle-ci présentée *supra*, p. 55-57.

L'intérêt de cette forme intégrale est de faire apparaître les opérateurs utilisés pour effectuer la simulation des histoires des neutrons.

Avant d'exposer les principes généraux de l'application de la méthode de Monte-Carlo à la résolution de l'équation du transport, il est utile de rappeler la définition de deux grandeurs physiques : la réponse d'un détecteur et la densité de collision.

La réponse d'un détecteur, notée ici $R(Z)$, est l'expression couramment utilisée pour spécifier une grandeur physique d'intérêt (flux, un taux de réaction, par exemple) intégrée dans une zone Z circonscrite de l'espace des phases. Par définition, $R(Z)$ s'écrit :

$$R(Z) = \int_Z s_R(P)\psi(P)dP \qquad (1)$$

où $\psi(P)$ est le flux angulaire des neutrons au point P de l'espace des phases, défini par le triplet $(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$, et $s_R(P)$ est la fonction réponse ou sensibilité qui caractérise la grandeur $R(Z)$: $s_R(P) = 1$ pour le calcul du flux et $s_R(P) = \Sigma(\vec{r}, E)$ pour le calcul d'un taux de réaction macroscopique, par exemple.

La densité de collision des neutrons entrant en collision au point P a pour expression :

$$\zeta(P) = \zeta\left(\vec{r}, E, \vec{\Omega}\right) = \Sigma(\vec{r}, E)\psi\left(\vec{r}, E, \vec{\Omega}\right) = \Sigma(P)\psi(P) \qquad (2)$$

où $\Sigma(\vec{r}, E) = \Sigma(P)$ représente la section efficace neutronique macroscopique totale au point $\vec{r}$ et à l'énergie E du neutron.

Il est commode ici de réécrire l'expression donnant $R(Z)$ en introduisant la densité de collision des neutrons entrant en collision :

$$R(Z) = \int_Z \frac{s_R(P)}{\Sigma(P)}\zeta(P)dP \qquad (3)$$

La forme intégrale de l'équation de Boltzmann (voir encadré p. 57) peut être écrite avec la densité de collision $\zeta(P)$ sous la forme compacte ci-après :

$$\zeta(P) = \int_D K(P' \to P)\,\zeta(P') + Q(P) \qquad (4)$$

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:25 Page 90

où $K(P' \to P)$: est le **noyau de l'opérateur intégral de transport** qui fait passer la particule du point P' au point P de l'espace des phases D couvert par le système physique étudié.

Cet opérateur intégral est le produit de deux opérateurs déplacement et collision dont les noyaux sont notés respectivement : $T(\vec{r}\,' \to \vec{r}, E, \vec{\Omega})$ et $C(\vec{r}, E' \to E, \vec{\Omega}' \to \vec{\Omega})$:

• Le noyau de l'opérateur déplacement $T(\vec{r}\,' \to \vec{r}, E, \vec{\Omega})$:

$$T(\vec{r}' \to \vec{r}, E, \vec{\Omega}) d\vec{r} = \left[\exp\left(-\int_0^s \Sigma(\vec{r} - s'\vec{\Omega}, E)\, ds'\right)\right] \Sigma(\vec{r}, E)\, ds \tag{5}$$

avec : $\vec{r} = \vec{r}\,' + s'\vec{\Omega}$.

En interprétant la section efficace macroscopique $\Sigma(\vec{r}, E)$ comme une densité de probabilité (probabilité d'interaction par unité de longueur [en cm^{-1}]) l'expression (5) s'interprète comme le produit de la probabilité, $\exp\left(-\int_0^s \Sigma(\vec{r} - s'\vec{\Omega}, E)\, ds'\right)$ pour le neutron de ne pas avoir de collision sur le trajet de longueur s par la probabilité $\Sigma(\vec{r}, E)\, ds$ d'avoir une collision sur le trajet élémentaire compris entre s et $s + ds$. Autrement dit, $\left[\exp\left(-\int_0^s \Sigma(\vec{r} - s'\vec{\Omega}, E)\, ds'\right)\right] \Sigma(\vec{r}, E)$ s'interprète comme la densité de probabilité pour le neutron de franchir la distance $s = |\vec{r} - \vec{r}\,'|$ sans subir de collision et d'avoir une collision en $\vec{r}$.

• Le noyau de l'opérateur collision : $C(\vec{r}, E' \to E, \vec{\Omega}' \to \vec{\Omega})$

$$C(\vec{r}, E' \to E, \vec{\Omega}' \to \vec{\Omega}) = \frac{\Sigma_s(\vec{r}, E' \to E, \vec{\Omega}' \to \vec{\Omega})}{\Sigma(\vec{r}, E')} \tag{6}$$

où $\Sigma_s(\vec{r}, E' \to E, \vec{\Omega}' \to \vec{\Omega})$ est la section efficace macroscopique différentielle de diffusion des neutrons en énergie et en direction.

• $Q(P)$ représente les particules sources arrivant directement en P sans avoir subi de collisions :

$$Q(P) = \int_{DS} S(P_0) T(P_0 \to P) dP_0 \tag{7}$$

où DS désigne le domaine source dans l'espace des phases.

La décomposition en série de Neumann

On montre que $\zeta(P)$ solution de l'équation intégrale (4) peut être exprimée par un développement en série appelé « **décomposition en série de Neumann** » :

$$\zeta(P) = \sum_n^{\infty} \zeta_n(P) \tag{8}$$

dont chacun des termes $\zeta_n(P)$ a une interprétation physique (voir fig. 36) :

$\zeta_0(P) = Q(P)$ est la contribution à $\zeta(P)$ des neutrons directement issus de la source,
$\zeta_1(P)$ est la contribution à $\zeta(P)$ des neutrons ayant subi une collision et une seule,
$\zeta_2(P)$ est la contribution à $\zeta(P)$ des neutrons ayant subi deux collisions,
…
$\zeta_n(P)$ est la contribution à $\zeta(P)$ des neutrons ayant subi n collisions et s'écrit :

$$\zeta_n(P) = \int_{DS} \int_D \dots \int_D S(P_0) T(P_0 \to P_1) K(P_1 \to P_2) \dots K(P_{n-1} \to P) dP_0 dP_1 \dots dP_{n-1} \tag{9}$$

pour $n \geq 1$, les intégrations se faisant sur l'espace des phases.

On remarquera que le processus aléatoire de propagation des neutrons est un *processus discret* de type *markovien* : l'état de la particule à l'étape n est déterminé à partir de la connaissance de son état à l'étape immédiatement antérieure $(n-1)$, l'histoire d'une particule constituant une *chaîne de Markov*.

Cette décomposition $\zeta(P)$ de en *série de Neumann*, montre donc que les histoires de toute longueur arrivant dans la zone de résultat contribuent à la grandeur cherchée $R(Z)$.

Elle conduit naturellement à la résolution de l'équation du transport par la **méthode de Monte-Carlo**, c'est-à-dire en simulant (sur ordinateur) la chaîne des événements constituant l'histoire de chaque neutron source : diffusion, absorption, multiplication, fuite hors du système physique étudié.

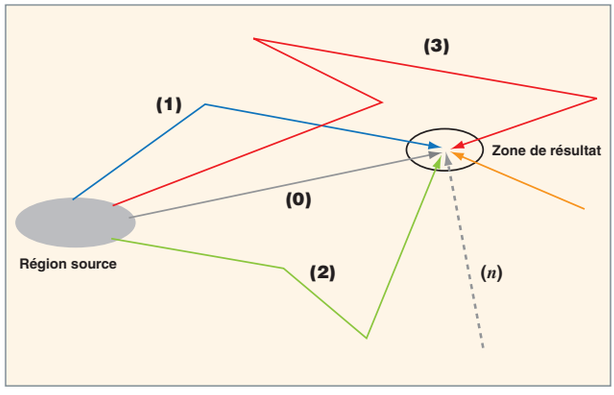


Fig. 36. Illustration de la décomposition en série de Neumann.
(n) : numéro d'ordre de la collision ou nombre de collisions subies par un neutron issu de la région source, avant d'arriver dans la zone résultat.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:25 Page 91

La résolution de l'équation du transport par la méthode de Monte-Carlo

La résolution de l'équation du transport par la méthode de Monte-Carlo consiste ainsi à :

a. Construire un processus statistique appelé « **jeu** » qui reproduit, à partir d'une source, l'histoire des particules émises représentée par un ensemble de trajectoires et de collisions bornant chaque trajectoire (diffusion, absorption…). On obtient alors une chaîne de sites d'événements : P_0, P_1, P_2, …, P_n…

b. définir une variable aléatoire $X(Z)$ que l'on associe à la grandeur cherchée $R(Z)$: $X(Z)$ est appelée « **estimateur** » de $R(Z)$. Lorsque, au cours de son histoire, un neutron pénètre dans la zone de résultat Z, on enregistre ce fait par l'attribution d'une valeur ϖ à $X(Z)$. Par exemple, en considérant l'expression (3), si une interaction a lieu en un point P de Z, alors on attribue à ϖ la valeur égale à : $(1 \times \frac{s_R(P)}{\Sigma(P)})$. La quantité ϖ est appelée « **encaissement** » ou « **score** ». Si, au cours de son histoire, le neutron n'a pas pénétré la zone de résultat, alors le score correspondant est $\varpi = 0$.

c. fixer des « règles du jeu », c'est-à-dire à définir les densités de probabilité avec lesquelles les événements sont choisis. Cela revient à choisir, pour les particules, leur parcours, la nature de l'interaction subie, leur énergie et leur direction après choc, dans le cas d'une diffusion. Cela est réalisé aléatoirement et en conformité avec les caractéristiques physiques de la source de particules et les lois physiques qui régissent leurs interactions avec la matière. Les densités de probabilité utilisées pour simuler l'histoire des particules doivent être telles que $E[X(Z)]$, espérance mathématique de $X(Z)$, satisfasse :

$$\mathrm{E}[X(Z)] = R(Z) \qquad (10)$$

d. réaliser le jeu M fois de manière indépendante : on simule M $(m = 1, M)$ histoires de particules. Dans la pratique, on simule N batchs (ou « lots » ou « cycles » ou « générations ») de M particules d'où résulte une estimation correspondante $\tilde{X}_\nu(Z)$ de $R(Z)$, $\nu = 1, N$. La quantité $\tilde{X}_\nu(Z)$ est obtenue par la moyenne empirique :

$$\tilde{X}_\nu(Z) = \frac{1}{M}\sum_{m=1}^{M} \varpi_{m,\nu}(Z) \qquad (11)$$

où $\varpi_{m,\nu}(Z)$ est le score associé à l'histoire m du batch ν.

e. estimer la grandeur $R(Z)$ cherchée en appliquant la *loi des grands nombres* (N doit être suffisamment grand). $R(Z)$ est approchée par la moyenne empirique $\bar{X}_N(Z)$ des quantités $\tilde{X}_\nu(Z)$:

$$\bar{X}_N(Z) = \frac{1}{N}\sum_{\nu=1}^{N} \tilde{X}_\nu(Z) \ , \qquad \lim_{N\to\infty} \bar{X}_N(Z) = R(Z) \qquad (12)$$

Le théorème central limite stipule que les quantités $\tilde{X}_\nu(Z)$ sont distribuées selon une gaussienne et la variance $\varepsilon^2_{\bar{X}_N(Z)}$ associée à $\bar{X}_N(Z)$ est estimée sans biais par :

$$\varepsilon^2_{\bar{X}_N(Z)} = \frac{1}{N(N-1)}\sum_{\nu=1}^{N} \left(\left(X_\nu(Z) - \bar{X}_N(Z)\right)^2\right. \qquad (13)$$

L'intervalle de confiance est défini par :

$$c(e) = probabilité\{\bar{X}_N(Z) - e \le X(Z) \le \bar{X}_N(Z) + e\} \qquad (14)$$

où e est un réel positif, $c(e)$ étant calculé pour une densité de probabilité gaussienne, compte tenu du *théorème central limite*.

Il est d'usage d'utiliser les valeurs suivantes de e et les valeurs correspondantes de l'intervalle de confiance :
- $e = \varepsilon_{\bar{X}_N(Z)}$, $c(e)$ = 0,689 (68,9 % de confiance)
- $e = 2\varepsilon_{\bar{X}_N(Z)}$, $c(e)$ = 0,954 (95,4 % de confiance)
- $e = 3\varepsilon_{\bar{X}_N(Z)}$, $c(e)$ = 0,997 (99,7 % de confiance).

En particulier, dans le domaine de la sûreté-criticité, la valeur calculée du facteur de multiplication effectif k_{eff} est donnée a minima à $3\varepsilon_{\bar{X}_N(Z)}$.

La figure 37, ci-dessous, schématise l'algorithme de la simulation de l'histoire de particules (le jeu) se propageant dans la matière.

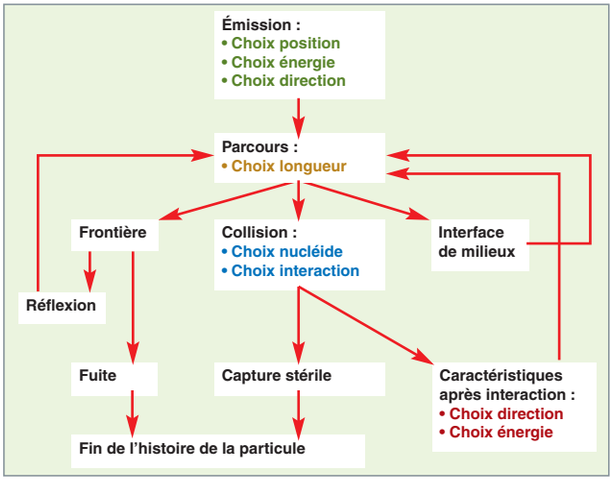


Fig. 37. Algorithme général de principe de la simulation de l'histoire d'une particule par la méthode de Monte-Carlo dans un milieu non multiplicateur de neutrons.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:25 Page 92

On peut effectuer deux types de simulations :

- Une **simulation naturelle** ou **analogue** qui utilise les lois naturelles d'occurrence des phénomènes physiques auxquels le neutron donne lieu ;

- une **simulation non analogue**, souvent nommée (maladroitement) « **simulation biaisée** », qui utilise des lois non naturelles d'occurrence des phénomènes physiques auxquels le neutron donne lieu, offrant la possibilité d'obtenir un résultat en un temps plus court que celui requis par la simulation analogue, à variance égale (voir encadré, p. 102).

Les lois de tirage des événements – construction du processus statistique

On a indiqué plus haut que la construction de l'histoire d'un neutron s'effectue à l'aide d'un échantillonnage (voir encadré) des événements successifs auxquels donne lieu ce neutron, de sa naissance à sa disparition. Ce choix des événements s'effectue à partir des lois de probabilité qui les régissent. Ces densités de probabilité sont définies comme indiqué ci-après.

Le premier événement d'une histoire est la naissance d'un neutron. Faire naître un neutron, c'est déterminer le point P_0 de l'espace des phases appartenant à la zone source d'où on le fait surgir. Ce point P_0 est choisi à l'aide d'une densité de probabilité $f_0\,(P_0)$ construite à partir de la distribution de la source $S_0\,(P_0)$ normalisée sur son domaine de définition DS dans l'espace des phases :

$$f_0(P_0) = \frac{S_0(P_0)}{\int_{DS} S_0(P_0)dP_0} \tag{15}$$

Dans la pratique la source se présente souvent comme un produit de fonctions dépendant respectivement de l'espace, de l'énergie et de la direction, voire du temps. Ces variables sont donc successivement échantillonnées à l'aide des densités de probabilité construites selon le principe énoncé ci-dessus. Sont ainsi fixées les caractéristiques physiques initiales du neutron requises pour amorcer sa propagation.

Le point P_0 étant connu, on choisit le point suivant P_1 de la chaîne d'événements à l'aide de la densité de probabilité $f_1\,(P_1)$ déduite du noyau de l'opérateur intégral de transport :

$$f_1(P_1) = \frac{K(P_0 \to P_1)}{\int_D K(P_0 \to P_1)dP_1} \tag{16}$$

Et ainsi de suite : le point P_i de la chaîne d'événements est choisi en connaissant le point P_{i-1} avec la densité de probabilité $f_i\,(P_i)$:

$$f_i(P_i) = \frac{K(P_{i-1} \to P_i)}{\int_D K(P_{i-1} \to P_i)dP_i} \tag{17}$$

Dans la pratique, les densités $f_i\,(P_i)$ se présentent sous forme factorisée, conformément aux expressions (5) et (6) : on effectue le choix du parcours du neutron, puis le choix de l'interaction et, s'il s'agit d'une diffusion ou d'une fission, celui des caractéristiques du neutron réémis (direction et énergie). L'expression (5) se prête directement à un échantillonnage conduisant au choix du parcours du neutron entre deux collisions successives.

Dans le cas d'une propagation dans un milieu homogène, la loi du parcours (densité de probabilité) déduite de (5) prend la forme simple suivante :

$$f\,(s) = \Sigma(E)\,\mathrm{e}^{-\Sigma(E)s} \tag{18}$$

où s est la longueur du parcours. Cette longueur est échantillonnée en inversant la fonction de répartition de la densité (18) :

$$s = -\frac{1}{\Sigma(E)}\ln(1-\xi) \tag{19}$$

où ξ est un nombre aléatoire uniformément choisi entre 0 et 1 (voir encadrés, p. 93 et 94).

L'expression (6) relative au noyau de l'opérateur de collision peut être explicitée de manière à faire apparaître les probabilités des différents événements associés à une collision (voir fig. 37) : choix du nucléide, choix du type d'interaction, choix de la direction et, éventuellement, de l'énergie du neutron après diffusion, si l'interaction choisie est une diffusion. Considérant un milieu constitué d'un mélange homogène de nucléides j, le noyau de l'opérateur de collision s'écrit :

$$C\left(\vec{r}, E' \to E, \vec{\Omega}' \to \vec{\Omega}\right) = \sum_j \frac{\Sigma_j(\vec{r}, E')}{\Sigma(\vec{r}, E')} \sum_i \left[\frac{\sigma_{sj}(E')}{\sigma_j(E')}\right] \frac{\sigma_{ij}(E')}{\sigma_{sj}(E')} \nu_{ij} f_{ij}(E' \to E, \vec{\Omega}' \to \vec{\Omega}) \tag{20}$$

- $\sigma_{sj}\,(E')$: section efficace microscopique de diffusion totale à l'énergie E' relative au nucléide j.
- $\sigma_j\,(E')$: section efficace microscopique totale à l'énergie E' relative au nucléide j.
- $\sigma_{ij}\,(E')$: section efficace microscopique de diffusion totale à l'énergie E' relative à la réaction nucléaire de type i (diffusion élastique, diffusions inélastiques, [n, 2n], fission) sur le noyau atomique j.
- $\Sigma_j\,(\vec{r}\,, E')$: section efficace macroscopique totale au point $\vec{r}$ à l'énergie E' relative au nucléide j.
- $\Sigma\,(\vec{r}\,, E') = \sum_j \Sigma_j\,(\vec{r}\,, E')$: section efficace macroscopique totale du milieu de propagation des neutrons, mélange homogène des nucléides j, au point $\vec{r}$ à l'énergie E'.
- ν_{ij} : multiplicité des neutrons produits lors de l'interaction i sur le nucléide j : réaction (n, 2n)… fission.
- $f_{ij}\,(E' \to E, \vec{\Omega}' \to \vec{\Omega})$: densité de probabilité de renvoi en énergie et en angle de la particule lors l'interaction de type i sur le nucléide j.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:25 Page 93

L'intérêt de (20) est de faire apparaître les probabilités et densité de probabilité suivantes, directement utilisées pour réaliser la simulation Monte-Carlo :

- $\frac{\Sigma_j(\vec{r},E')}{\Sigma(\vec{r},E')}$: probabilité de choix du nucléide j.
- $\frac{\sigma_{sj}(E')}{\sigma_j(E')}$: probabilité de non absorption (ou de survie) du neutron.
- $\frac{\sigma_{ij}(E')}{\sigma_{sj}(E')}$: probabilité de choix du type de diffusion.

- $f_{ij}\,(E'\to E, \vec{\Omega}'\to\vec{\Omega})$: densité de probabilité de renvoi en énergie et en angle de la particule lors de l'interaction de type i sur le nucléide j.

Dans les trois premiers cas, on a affaire à des probabilités discrètes.

Les encadrés ci-après décrivent respectivement le principe de l'échantillonnage des événements et les générateurs de nombres aléatoires utilisés.

Échantillonnage d'une variable aléatoire selon une loi de probabilité

Dans la pratique, comment choisir une valeur de la variable aléatoire x conformément à sa densité de probabilité $f(x)$?

On procède en deux étapes principales :

- Des générateurs de nombres aléatoires, uniformément répartis sur l'intervalle $(0, 1)$ de la droite réelle ont été mis au point et rendus disponibles sur ordinateurs. Il s'agit, en réalité, de nombres *pseudo-aléatoires* dont la qualité aléatoire depend de la performance du générateur qui les produit. À l'aide d'un générateur de nombres aléatoires approprié, un nombre aléatoire ξ est donc choisi ;

- la densité de probabilité $f(x)$ étant définie sur un segment (a, b) de la droite réelle, on établit la relation qui existe entre le nombre ξ échantillonné sur l'intervalle $(0, 1)$, selon une densité de probabilité uniforme constante égale à l'unité et la variable x distribuée sur l'intervalle (a, b) selon la densité $f(x)$. Cette relation est obtenue en écrivant l'égalité des fonctions de répartition :

$$\int_0^{\xi} 1d\xi' = \xi = \int_a^x f(x')dx'$$

Il existe une valeur de la variable x distribuée selon la densité $f(x)$ qui satisfait cette dernière égalité et qui s'obtient, en fonction de ξ, en résolvant cette équation en x.

Prenons l'exemple du choix d'un parcours s d'un neutron se déplaçant dans un milieu caractérisé par une section efficace macroscopique Σ (en cm^{-1}). La densité de probabilité associée à ce parcours s est :

$$f(s) = \Sigma\, e^{-\Sigma s}$$

On a donc :

$$\int_0^{\xi} 1d\xi' = \xi = \int_0^s f(s')ds' = \int_0^s \Sigma(E)e^{-\Sigma s'}ds'$$

d'où :

$$s = -\frac{1}{\Sigma}\ln(1-\xi)$$

Par exemple, si $\Sigma = 0{,}791$ cm^{-1} et $\xi = 0{,}8$ alors $s = 2{,}0347$ cm.

Dans le cas de probabilités discrètes p_i associées à un ensemble d'événements i possibles (par exemple, le type d'interaction du neutron avec un nucléide donné), la sélection de l'un d'entre eux s'effectue en identifiant l'intervalle de la fonction de répartition dans lequel se trouve le nombre aléatoire ξ uniformément échantillonné dans l'intervalle $(0, 1)$. Par conséquent, si $0 < \xi \le p_1$ c'est l'événement 1 qui est choisi ; si

$$\sum_{j=1}^{i-1} p_j < \xi \le \sum_{j=1}^{i} p_j$$

c'est l'événement i qui est choisi.

Par exemple, considérons les trois types d'événements induits par un neutron, diffusion, capture stérile et fission dont les sections efficaces macroscopiques respectives dans le milieu considéré et à une énergie donnée sont :

- diffusion : $\Sigma_s = 0{,}203$ cm^{-1}
- capture stérile : $\Sigma_c = 0{,}381$ cm^{-1}
- fission : $\Sigma_f = 0{,}207$ cm^{-1}

Les probabilités associées à chacun de ces trois types de réactions sont :

- diffusion : $p_s = \frac{\Sigma_s}{\Sigma} = 0{,}2566$
- absorption : $p_c = \frac{\Sigma_c}{\Sigma} = 0{,}4817$
- fission : $p_f = \frac{\Sigma_f}{\Sigma} = 0{,}2617$

En adoptant l'ordre arbitraire suivant des interactions : diffusion, absorption, fission :

- si la valeur échantillonnée de ξ a une valeur comprise entre 0 et $p_s = 0{,}2566$, par exemple $\xi = 0{,}11$, alors c'est la diffusion qui est sélectionnée ;

- si ξ a une valeur comprise entre $p_s = 0{,}2566$ et $p_s + p_c = 0{,}7383$, par exemple $\xi = 0{,}71$, c'est la capture stérile qui est choisie ;

- si, enfin, ξ prend une valeur comprise entre $p_s + p_c = 0{,}7383$ et $p_s + p_c + p_f = 1$, par exemple $\xi = 0{,}863$, c'est la fission que l'on simule.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:25 Page 94

Générateurs de nombres aléatoires

Un générateur de nombres aléatoires, ξ, est le moyen par lequel il est possible d'échantillonner une variable aléatoire d'une densité de probabilité donnée. Un générateur de nombres aléatoires a pour fonction de choisir au hasard – ou presque – un nombre réel dans l'intervalle $(0, 1)$. Ainsi, les nombres délivrés par les générateurs de nombres aléatoires sont qualifiés de *pseudo-aléatoires*, car ces générateurs ne sont pas (encore) en mesure de reproduire parfaitement le hasard. La qualité d'un générateur de nombres aléatoires est donc définie par sa capacité à reproduire le hasard. Cette qualité est reflétée par une série de propriétés dont la *stochasticité* et l'*uniformité de la distribution* des nombres aléatoires produits, soumises à des tests appropriés (*tests de Marsaglia* [1, 2, 3], *tests de Knuth* [4], *tests de L'Écuyer* [5, 6, 7]...)

Il existe plusieurs sortes de générateurs de nombres aléatoires disponibles sur ordinateurs :

- les générateurs congruentiels linéaires (*Linear Congruential Generator*, LCG [8]), tels que le DRAND48 [9],
- les générateurs à registre à décalage à rétroaction tels que le *Generalised Feedback Shift Register* (GFSR [10], [11], issu du *Multiplicative Lagged-Fibonacci Generator*) ou le *Mersenne Twister* (TGSFR) [12], [13],
- les générateurs à décalage *(« shift register »)* : SHR3 [14] (3-shift random number generator)…
- le générateur *« Blum Blum Shub »* [15]…

Le code de transport MCNP-5 utilise un générateur de nombres aléatoires congruentiel [16]. Le code de transport Monte-Carlo TRIPOLI utilise les générateurs DRAND48 en mode de fonctionnement *mono-processeur*, GFSR et Mersenne Twister en mode de fonctionnement *multiprocesseur* ou *parallèle*.

Exemple du générateur congruentiel linéaire.

Le générateur congruentiel linéaire produit une suite de nombres aléatoires ξ_i définie par la récurrence suivante :

$$X_{i+1} = (aX_i + c)\ (mod\ m),\ i = 1, \ldots, n,$$

- a : nombre entier positif choisi appelé le « multiplicateur »,
- c : nombre entier positif ou nul choisi appelé l'« incrément »,
- m : nombre entier positif appelé le « module »,

Le nombre aléatoire ξ_i à valeur réelle dans l'intervalle $(0, 1)$, est obtenu par la divison :

$$\xi_i = \frac{X_i}{m}$$

Ce processus itératif est amorcé par la donnée du premier terme de la suite, X_0 appelé la *« graine »* (*seed*, en anglais).

La suite (déterministe) ainsi définie de nombres aléatoires (pseudo-aléatoires) possède une période à l'issue de laquelle la suite se reproduit à l'identique. La qualité d'un générateur de nombres aléatoires s'apprécie aussi à la longueur de sa période (celle-ci devant être suffisamment longue), à sa *reproductibilité*, à sa *portabilité*, à sa *rapidité*.

À titre d'illustration, l'ordinateur IBM System/360 des années 70, machine à 32 bits, proposait le générateur congruentiel de nombres aléatoires suivant :

$$a = 7^5 \qquad c = 0 \qquad m = 2^{31} - 1 \qquad X_{i+1} = 7^5 X_i = 16807\ X_i$$

On montre que la période maximale de ce générateur est égale à $2^{31} - 2$, [17], [18].

Le tableau ci-dessous indique les périodes de générateurs de nombres aléatoires utilisés dans les codes de calcul Monte-Carlo :

Générateur de nombres aléatoires	Période	Utilisation
DRAND48	2^{48}	Monoprocesseur
GFSR	$2^{607} - 1$	Multiprocesseurs (simulations en parallèle) Technique de parallélisation : *« Leap Frog »*
MERSENNE TWISTER	$2^{19937} - 1$	Multiprocesseurs (simulations en parallèle) Technique de parallélisation : utilisation d'un autre générateur

Le générateur *Mersenne Twister* tire son nom du mathématicien français Marin Mersenne (1588-1648) ; un *nombre premier de Mersenne* est un nombre premier pouvant se mettre sous la forme $2^p - 1$ où p est aussi un nombre entier premier.

Des recherches sont menées pour construire un générateur quantique de nombres parfaitement aléatoires : *Quantum Random Number Generator*, QRNG, [19].

Références

[1] G. Marsaglia, and A. Zaman, "A new Class of Random Number Generators", *The Annals of Applied Mathematics*, Vol. 1, nº 3, 1991.

[2] G. Marsaglia, "Random numbers for C: The END?" electronic billboard sci.crypt. random-numbers, January 20, 1999.

[3] G. Marsaglia, and W. W. Tsang, "The 64-bit universal RNG", Statistics & Probability Letters, vol. 66, nº 2, 2004.

[4] D. E. Knuth, *The Art of Computer Programming*, Massachusetts, Addison-Wesley Reading, 1969.

[5] P. L'Ecuyer, "Random number generation", in W. Haerdle, J.E. Gentle and Y. Mori, *Handbook of Computational Statistics*, Springer Verlag, Chapter 2, pp. 35-70, 2004.

[6] L'Ecuyer, R. Simard, "Test01: A C Library for Empirical Testing of Random Number Generators", ACM Transactions on Mathematical Software, vol. 33, nº 4, art. 22, August 2007.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:25 Page 95

[7] X. Hugot, Y.K. Lee, "Verification Tool For Tripoli-4 Criticality Code Validation", *Proceedings of ICNC'2007*, St. Petersburg, p. 453, 2007.

[8] D. H. Lehmer, "Mathematical methods in large scale computing units", in *Proceedings of the Second Symposium on Large Scale Digital Computing Machinery*, Cambridge Harvard University Press, pp. 141-146, 1951.

[9] *DRAND48 Man*, Page: http://manpagesfr.free.fr/man/man3/drand48.3.html.

[10] T.G. Lewis, W.H. Payne, "Generalized Feedback Shift Register Pseudorandom Number", Algorithm, *Journal of the Association for Computing Machinery*, vol. 20, N° 3, July 1973.

[11] S. Aluru, G.M. Prabhu, J. Gustafson, "A random number generator for parallel computers", *Parallel Computing* 18, 1992.

[12] M. Matsumoto, T. Nishimura, "Mersenne Twister: A 623-dimensionally equidistributed uniform pseudorandom number generator", *ACM: Transactions on Modeling and Computer Simulations, Special Issue on Uniform Random Number Generation*, 1998.

[13] F. Panneton, P. L'Ecuyer, M. Matsumoto, "Improved Long-Period Generators Based on Linear Recurrences Modulo 2", *ACM Transactions on Mathematical Software*, 32, pp. 1-16, 2006.

[14] G. Marsaglia, "Xorshift RNGs", *Journal of Statistical Software*, vol. 8, Issue 14, July 2003.

[15] L. Blum, M. Blum, and M. Shub. "A Simple Unpredictable Pseudo-Random Number Generator", *SIAM Journal on Computing*, vol. 15, pp. 364-383, May 1986.

[16] F. Brown, Y. Nagaya, *The MCNP5 Random Number Generator*, LA-UR-02-3782, Los Alamos National Laboratory, American Nuclear Society Winter Meeting, Washington DC, November 17-21, 2002.

[17] R. Y. Rubinstein, *Simulation and the Monte-Carlo Method*, New York, John Wiley & Sons, Coll. Wiley Series in Probability and Mathematical Statistics, 1981, pp. 25-26.

[18] S.K. Park, K. W. Miller, "Random number generators: Good ones are hard to find", *Communications of ACM, Computing Practices*, vol. 31, n° 10, October 1988.

[19] P. J. Bustard, D. Moffatt, R. Lausten, G. Wu, I. A. Walmsley, B. J. Sussman, "Quantum random bit generation using stimulated Raman scattering", *Optics Express*, vol. 19, n°. 25, pp. 25173-25180, 5 December 2011.

Le « poids » d'un neutron

Dans une simulation strictement naturelle (ou *analogue*) le poids du neutron est égal à l'unité : un neutron représente un neutron et on le comptabilise pour un lorsqu'il atteint la zone de résultat.

Pour des raisons d'optimisation de temps de calcul, au lieu de simuler explicitement l'éventualité de l'absorption d'une particule, on préfère multiplier son poids valant l'unité au départ de la simulation par sa probabilité de survie égale au rapport de la section efficace de diffusion à la section efficace totale, $\frac{\sigma_{sj}(E')}{\sigma_j(E')}$, et ce à chaque collision.

Ce procédé justifie que le rapport $\frac{\sigma_{sj}(E')}{\sigma_j(E')}$ soit appelé *« facteur de capture implicite »*.

Comme $\sigma_{sj}(E') < \sigma_j(E')$, le poids w du neutron diminue au fur et à mesure des collisions qu'il subit et tend vers zéro, lorsque le nombre de collisions tend vers l'infini. En effet, considérons, pour simplifier, le transport monocinétique dans un milieu infini monoatomique. Dans ce cas, le poids du neutron après n collisions s'écrit $w_n = \left[\frac{\sigma_{sj}(E')}{\sigma_j(E')}\right]^n$. En faisant tendre le nombre de collisions vers l'infini, on a :

$$w_\infty = \lim_{n\to\infty} \left[\frac{\sigma_{sj}(E')}{\sigma_j(E')}\right]^n = 0.$$

Autrement dit, le neutron voit son « potentiel vital » et/ou « potentiel d'information » décroître de collision en collision. Pour un nombre de collisions suffisamment élevé, le neutron n'apporte donc plus de contribution significative au résultat cherché, et au regard du critère d'optimisation du temps de calcul, on le fait disparaître par un procédé statistique adéquat, appelé *« roulette russe »*, lorsque son poids passe en dessous d'un seuil fixé.

L'estimateur d'une réponse $R(Z)$ cherchée dépend donc du poids du neutron.

L'application de cette technique de simulation fournit un premier exemple d'une simulation qui n'est plus strictement naturelle, puisque l'on ne simule pas explicitement la capture, conduisant donc à réaliser une *simulation non analogue*.

Le tableau 12, page suivante, donne des ordres de grandeurs de quelques-unes des caractéristiques de simulations relatives au calcul du *facteur de multiplication* effectif des neutrons

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:25 Page 96

Tableau 12

Ordres de grandeurs relatifs à un *benchmark* de criticité

Ces simulations ont été effectuées sur un processeur Optéron à 1,8 GHz.

Nombre d'histoires de particules	Nombre total d'opérations d'échantillonnage	Nombre de tirages par histoire	Nombre de collisions par histoire	Nombre de tirages par collision	Précision statistique	Temps de calcul
$4\ 10^6$	10^9	256	32	8	20 pcm	900 s

(résolution du problème à valeurs propres) dans une configuration rencontrée dans les études de criticité du cycle du combustible.

L'encadré ci-dessous montre qu'à une réponse donnée on peut associer différentes formes mathématiques d'estimateur dont le choix est dicté par leur « vitesse » de convergence vers la valeur cherchée. Par exemple, dans un milieu peu dense l'« estimateur corde » converge plus vite que l'« estimateur collision ». Dans certaines situations, grâce à un « estimateur ponctuel » (dénommé en anglais *point kernel estimator*), une grandeur physique peut être calculée en un point de l'espace des phases : c'est le cas des milieux vides ou très peu denses.

Estimateurs de grandeurs physiques dans une simulation Monte-Carlo

Le tableau ci-dessous présente différents estimateurs du flux et celui du courant de particules franchissant une surface donnée :

Estimateurs volumiques du flux	Corde	$w\ell$
	Collision	$\dfrac{w}{\Sigma(\vec{r},E)}$
Estimateur surfacique du flux		$\dfrac{w}{\vec{\Omega}.\vec{n}}$
Estimateur (surfacique) du courant		w
Estimateur ponctuel du flux		$\propto w\dfrac{\Sigma_s(\vec{r},E'\to E,\vec{\Omega}'\to\vec{\Omega})}{\Sigma(\vec{r},E')}\dfrac{e^{-\tilde{\Sigma}}}{s^2}$

w : poids du neutron avant collision.
ℓ : parcours du neutron entre deux collisions.
Σ : section efficace macroscopique totale du milieu dans lequel le neutron se propage à une énergie donnée E.
Σ_s : section efficace macroscopique de diffusion du milieu dans lequel le neutron se propage à une énergie donnée E.
Σ_f : section efficace macroscopique de fission du milieu dans lequel le neutron se propage à une énergie donnée E.
$\vec{\Omega}$: est la direction de propagation du neutron.
$\vec{n}$: normale à la surface considérée.
$\tilde{\Sigma}$: parcours optique entre le point de collision et le point de calcul du flux :

$$\tilde{\Sigma}=\int_0^s \Sigma\left(\vec{r}-s'\vec{\Omega},E\right)ds'$$

où s est la distance entre le point de collision $\vec{r}\,' = \vec{r} - s\vec{\Omega}$ et le point de calcul $\vec{r}$.

L'estimation volumique du flux est effectuée dans un volume V donné de l'espace en « encaissant » (attribution du *score*) les valeurs prises par les estimateurs correspondants, lors de chaque événement se produisant dans le volume V. Les taux de réaction sont obtenus en multipliant le score par les sections efficaces (microscopiques ou macroscopiques) relatives aux réactions considérées.

L'expression de l'estimateur collision montre qu'il n'est pas défini pour un milieu vide, car alors, $\Sigma = 0$. Dans un tel milieu, on aura recours à l'estimateur corde qui comptabilisera les longueurs des traversées du volume V par les neutrons.

L'estimateur dit « ponctuel » est construit en considérant toute collision comme une source secondaire de neutrons. Le terme $\frac{e^{-\tilde{\Sigma}}}{s^2}$ apparaissant dans l'expression de cet estimateur correspond au flux sans choc au point de calcul engendré par une source de neutron unitaire placée à une distance s. L'estimateur « ponctuel » est adapté pour estimer des réponses dans le vide ou dans des milieux de très faible densité. *A contrario*, dans la matière, il soulève un problème de singularité dû à son comportement en $\frac{1}{s^2}$, car un site de collision peut se trouver très proche du point de calcul ou même coïncider avec celui-ci [4], [5], [6].

Le facteur de multiplication effectif des neutrons peut aussi être évalué avec différents estimateurs :

- $w\nu$: à chaque fission, on « encaisse » le nombre ν de neutrons de fission produits.
- $w\nu\frac{\Sigma_f}{\Sigma}$: à chaque interaction sur un noyau fissile, le nombre de neutrons de fission est comptabilisé.
- $w\ell\nu\Sigma_f$: à chaque parcours dans le milieu fissile (de longueur ℓ), on « encaisse » la valeur prise par cette expression.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:25 Page 97

Convergence statistique d'un calcul de transport par la méthode de Monte-Carlo

À un stade ou à un autre de leur réalisation, les études d'ingénierie (calculs industriels de cœur, conception / optimisation d'un réacteur, dimensionnement de protection, conception d'un château de transport…) sont marquées par cette exigence de calcul des grandeurs physiques d'intérêt avec la meilleure précision possible obtenue en un temps le plus réduit possible. Les codes de transport Monte-Carlo, dont le caractère naturellement chronophage comparé aux méthodes déterministes a été précédemment souligné, tentent de relever ce défi par la mise en œuvre de diverses stratégies visant à accélérer la convergence du calcul.

Stratégies de simulation Monte-Carlo

Les deux exemples qui suivent permettent d'aborder la problématique des stratégies de simulation Monte-Carlo en physique des réacteurs nucléaires.

Calcul de la distribution fine de puissance d'un cœur REP

Afin de pouvoir déterminer la distribution de puissance d'un cœur de REP, l'utilisateur d'un code de transport Monte-Carlo définit des « volumes d'encaissement » en espace et en énergie dans chacun desquels le flux de neutrons et les taux de fission seront calculés.

Pour un REP, le nombre de volumes spatiaux est égal à : *nombre de crayons x nombre de couronnes combustibles x nombre de pas axiaux*. L'obtention d'une cartographie fine de la puissance dans le cœur d'un REP nécessite de l'ordre de : 40 000 x 4 x 30 = 4,8 10^6 volumes (d'encaissements). Si l'on veut estimer un flux multigroupe dans une structure à 300 groupes en énergie on aboutit à un nombre d'encaissements de 40 000 x 4 x 30 x 300 = 1,44 10^9. Dans une simulation Monte-Carlo, chacun de ces volumes doit être visité par un nombre suffisant de neutrons afin de satisfaire la précision statistique requise sur chacune des grandeurs physiques calculées.

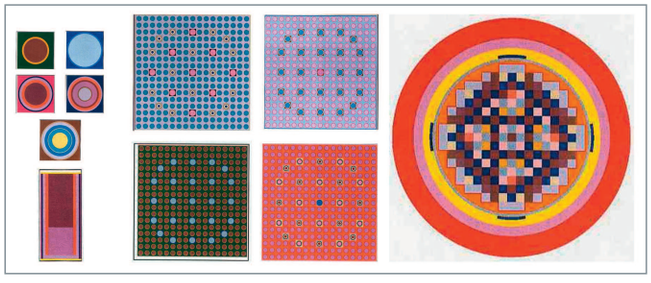


Fig. 38. Exemple de modélisation d'un cœur neuf REP pour le code de transport Monte-Carlo TRIPOLI-4®, de la cellule au cœur complet constitué de ses différents assemblages de 17x17 crayons combustibles.

Ces chiffres sont à multiplier par le nombre de types de grandeurs physiques à calculer, flux et taux de réaction. Si l'on envisage un calcul en évolution temporelle isotopique avec prise en compte de 200 nucléides pour faire une évaluation du bilan matière dans un cœur, on multiplie encore ce nombre d'encaissements, par exemple par un facteur 50 si l'on considère 50 pas de taux de combustion entre 0 et 60 000 MWj/t.

On comprend ainsi, qu'un nombre considérable d'histoires de neutron devront être simulées pour obtenir la valeur de chacune des réponses demandées avec une erreur statistique acceptable et que le calcul d'un si grand nombre de « réponses » aura bien entendu une incidence significative sur le temps de calcul.

Calcul d'atténuation du flux de neutrons dans les structures d'un réacteur nucléaire

L'atténuation d'un flux de neutrons par des écrans de matière, de l'ordre de plusieurs décades (jusqu'à 14 décades) est illustrée par la figure 39.

Dans de telles situations, l'atteinte de la convergence statistique dans des temps de simulation « raisonnable » est souvent illusoire, d'où le recours à des méthodes d'accélération de la simulation.

Convergence et facteur de qualité d'une simulation Monte-Carlo

On montre que la variance, σ^2, associée à une réponse calculée varie comme l'inverse du nombre n de particules simulées :

$$\sigma^2 = \frac{1}{n} \qquad (21)$$

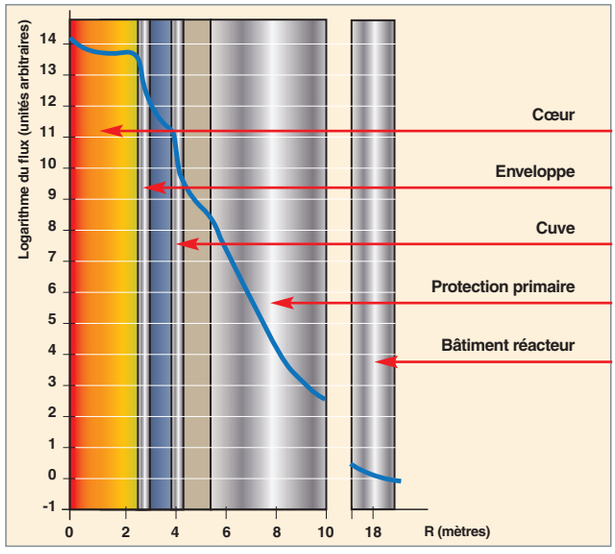


Fig. 39. Atténuation du flux sur 14 décades au bord d'un réacteur (d'après A. Baur, *Protection contre les rayonnements, aspects physiques et méthodes de calcul*, CEA, 1985, p. 12).

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:25 Page 98

Par conséquent, pour diminuer la variance d'un facteur 10, il faut simuler un nombre 100 fois plus élevé de neutrons. Le temps de calcul sera augmenté dans les mêmes proportions. Cela confirme que la méthode de Monte-Carlo appliquée en **simulation naturelle*** (ou **jeu analogue***) présente l'inconvénient déjà signalé de converger « lentement ».

Plusieurs stratégies s'offrent à l'utilisateur pour obtenir les résultats cherchés en un temps plus réduit :

- effectuer des calculs parallèles sur un réseau de machines ou, bien sûr, une machine massivement parallèle (sur le calcul haute performance, voir *infra*, p. 149-161) ;

- effectuer des calculs en deux étapes : calcul de référence au cours duquel on stocke les informations pertinentes relatives aux histoires de particules simulées, puis exploitation de ces informations par une fonctionnalité appropriée du code Monte-Carlo qui permet de faire des études paramétriques sous certaines conditions ;

- utiliser les ordinateurs les plus puissants disponibles ;

- mettre en œuvre des *techniques d'accélération de la convergence*, encore appelées *« techniques de réduction de la variance »*.

Ces stratégies sont résumées dans le tableau 13, en y indiquant des ordres de grandeurs de leur efficacité respective. Elles ne s'excluent pas l'une l'autre. La figure 40 montre la progression approximative du nombre d'histoires de neutron pouvant être simulées pour réaliser une étude avec le développement des ordinateurs, passant d'environ 5 000 dans les années 60, au milliard, au début des années 2000 et aux centaines de milliards en 2013.

Les trois premières stratégies améliorent la qualité « extrinsèque » de la simulation permettant d'obtenir des résultats statistiquement suffisamment convergés en un temps plus réduit.

En reprenant l'exemple précédent d'un REP, une évaluation approximative du temps de calcul requis pour obtenir par

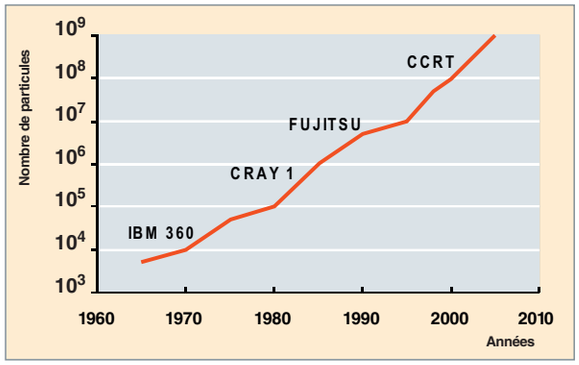


Fig. 40. Évolution temporelle du nombre d'histoires de particules simulées en fonction de l'accroissement de la puissance des ordinateurs.

simulation Monte-Carlo un taux de fission dans les volumes élémentaires d'un crayon combustible avec une précision statistique de 1 % serait d'environ 100 ans en utilisant un ordinateur monoprocesseur cadencé à 2 GHz. Cette durée tomberait donc théoriquement à environ une année avec une centaine de processeurs utilisés en parallèle et à quelques jours avec 10 000 processeurs.

La quatrième stratégie vise à améliorer la qualité « intrinsèque » d'une simulation Monte-Carlo. De manière générale la qualité d'une simulation Monte-Carlo se mesure à l'aide d'une grandeur appelée **« figure of merit » (FOM)**, définie par la relation :

$$FOM = \frac{1}{\sigma^2 t} \qquad (22)$$

où t est le temps de simulation et σ^2 la variance. La qualité de la simulation est d'autant meilleure, et donc la *figure de mérite* d'autant plus grande, qu'une petite valeur de σ^2 est atteinte en une durée (t) courte.

On remarquera que la *figure de mérite*, reste inchangée si on ne fait qu'augmenter le nombre de particules simulées puisque le temps de calcul et la variance sont respectivement proportionnel et inversement proportionnel au nombre de particules simulées.

Tableau 13

Stratégies de réduction des temps de calcul et d'amélioration de la qualité d'une simulation Monte-Carlo

Stratégie	Gain possible	Commentaire
Calcul parallèle	2 à 10 000	Proportionnel au nombre de processeurs.
Stockage information	100	Exploitation de l'information relative aux histoires de particules simulées une fois pour toutes pour faire des études paramétriques ou bien des calculs en reprise. Contrepartie : volume de stockage.
Progrès des processeurs	2	Application de la loi de Moore : la puissance des processeurs augmente d'un facteur 2, tous les deux ans.
Techniques d'accélération de la convergence	1 à 10^{15}	Efficacité sur plusieurs décades dans les problèmes à forte atténuation des neutrons. La mise au point de ce type de techniques pour les calculs de criticité est plus délicat, mais d'actualité.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:25 Page 99

Quelques spécificités de la convergence d'un calcul critique

Un calcul **critique***, tel qu'il a été défini *supra*, p. 56 (équation 3), vise à déterminer le **facteur de multiplication*** effectif k_{eff}, grandeur physique globale relative à l'ensemble du système fissile étudié. Comme dans l'approche déterministe, on met en œuvre la **méthode de l'itération de la puissance** dont le principe est illustré par la figure 41, à la fois pour un calcul déterministe (à gauche) et un calcul probabiliste Monte-Carlo (à droite).

La simulation Monte-Carlo s'effectue en simulant des batchs successifs, un batch d'ordre $(n+1)$ utilisant comme source de neutrons les neutrons de fission issus du batch précédent d'ordre (n). La source initiale étant arbitraire, au fur et à mesure que le nombre de batchs de neutrons simulés augmente, le système évolue vers une situation d'équilibre.

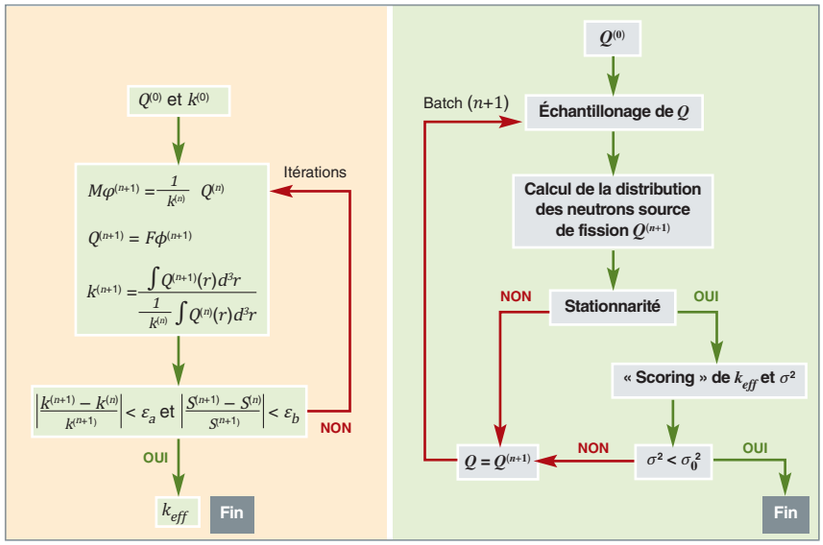


Fig. 41. Calcul du facteur de multiplication effectif, k_{eff}, par la ***méthode d'itération de la puissance***. Algorithmes déterministe à un groupe d'énergie (à gauche, source : J.J. Duderstadt, L. J. Hamilton, *Nuclear reactor Analysis*, John Wikey & Sons, 1976, p. 219) et probabiliste Monte-Carlo (à droite).

Sous sa forme intégro-différentielle (à gauche) l'équation aux valeurs propres résolue est de la forme $M\phi = \frac{1}{k_{eff}} F\phi$ avec $M = -\Omega.\overrightarrow{grad}\phi + \Sigma_a\phi$ et $F = \nu\Sigma_f\,\phi$. $Q^{(0)}$ représente la distribution (arbitraire) de la source initiale de neutrons permettant d'engager le processus de résolution itératif.

Le facteur de multiplication effectif des neutrons n'est pas la seule valeur propre satisfaisant l'équation critique. La convergence du processus itératif de résolution de cette équation fait intervenir les autres valeurs propres et vecteurs propres solutions de l'équation critique. Ainsi que le montrent les relations (23) et (24), ces modes propres (ou harmoniques d'ordre supérieur) « contaminent » le mode fondamental, cependant d'une manière qui décroît avec le nombre d'itérations. À l'itération $(n+1)$, en se limitant à l'impact de la deuxième harmonique, on a, en effet :

$$k_{eff}^{(n+1)} \approx k_1 \left[1 + constante \times \left(\frac{k_2}{k_1}\right)^n \left(\frac{k_2}{k_1} - 1\right)\right] \qquad (23)$$

$$\phi^{(n+1)} \propto \left[u_1 + constante \times \left(\frac{k_2}{k_1}\right)^{n+1}\right] \qquad (24)$$

où :

k_1 : est la première valeur propre correspondant à la valeur exacte du facteur de multiplication effectif k_{eff},

k_2 : est la deuxième valeur propre,

u_1 : est le premier vecteur propre correspondant au mode fondamental.

Les expressions (23) et (24) indiquent que la convergence dépend d'abord du rapport $\frac{k_2}{k_1}$ des deux premières valeurs propres de l'état critique, appelé **« rapport de dominance »** : plus k_2 est proche de k_1 plus la convergence est lente, et, par conséquent, plus le nombre d'itérations nécessaires pour atteindre la convergence est élevé, ce qui est, par exemple, le cas des systèmes physiques de grandes dimensions comme les réacteurs nucléaires de puissance.

On constate également, sur ces mêmes expressions, que le facteur de multiplication effectif converge « plus vite » que le flux de neutrons (ou que la distribution de source des neutrons qui lui est proportionnelle).

La figure 42 représente une configuration de calcul connue sous le nom de « Calcul du k_{eff} du monde » constituée d'unités fissiles sphériques, celle du centre étant la plus réactive.

La figure 43 montre l'évolution de son k_{eff} en fonction du nombre de batchs, pour différentes distributions initiales de la source de neutrons. On constate que l'atteinte de la convergence est plus ou moins « rapide » selon le cas. L'estimation du k_{eff} est faite en « moyennant » les valeurs de k_{eff} qui sont obtenues pour chacun des batchs simulés après l'**atteinte de l'équilibre** de la population des neutrons. L'atteinte de l'équilibre ou **atteinte de la stationnarité** est le stade d'évolution de la population des neutrons caractérisé par le fait que ceux-ci ont « perdu la mémoire » des conditions initiales du calcul, c'est à dire des conditions de leur naissance.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:25 Page 100

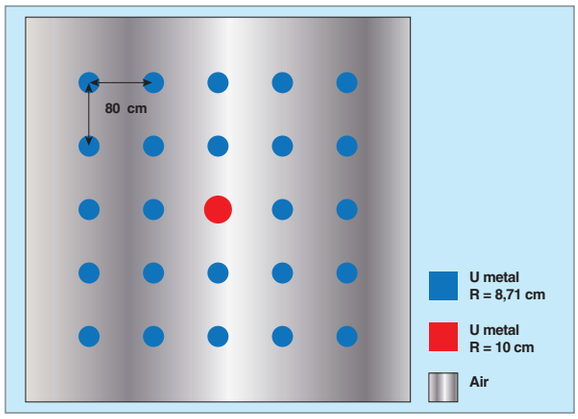


Fig. 42. Problème n° 4 du « OECD/NEA source convergence benchmark (Whiteside's problem, "k_{eff} of the world") » [7].

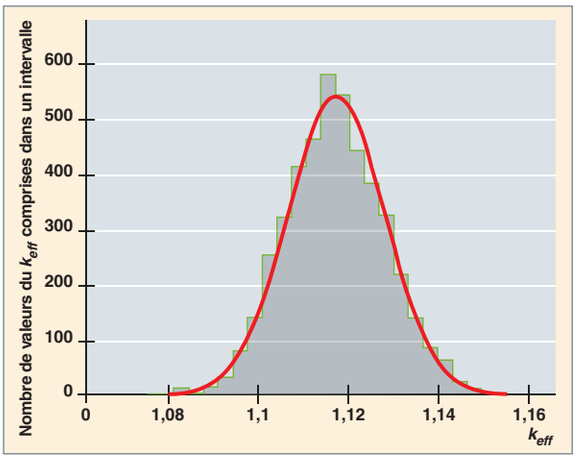


Fig. 44. Exemple d'histogramme du k_{eff} obtenu par la simulation Monte-Carlo du système critique schématisé sur la figure 42. L'histogramme obtenu après un nombre suffisant de cycles simulés a la forme gaussienne attendue. Les cycles précédant l'atteinte de l'équilibre ne sont pas pris en compte.

La figure 44 montre un exemple d'histogramme des valeurs du k_{eff} obtenues par la simulation Monte-Carlo.

Afin de vérifier que la distribution des valeurs du k_{eff} obtenues à chaque génération suit bien une loi normale, plusieurs tests statistiques sont aujourd'hui proposés dans les codes de transport Monte-Carlo, tels ceux de Kolmogorov ou de Cramer von Mises [8].

Vouloir améliorer la qualité de la simulation, au sens qui lui a été donné plus haut, conduit à envisager la problématique de la convergence d'un calcul critique par la méthode de Monte-Carlo, sous trois angles :

- Le diagnostic de la stationnarité de la population des neutrons dans le système fissile étudié ;

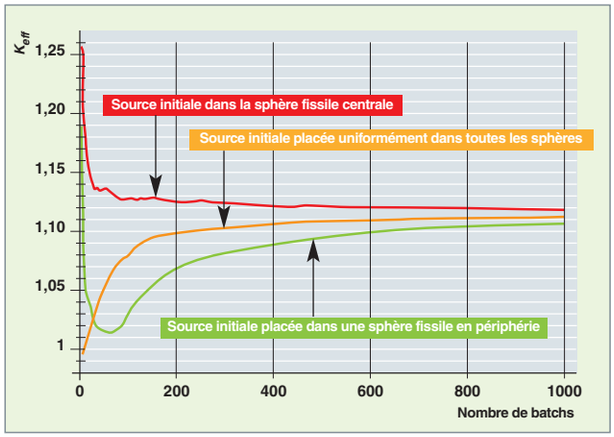


Fig. 43. Convergence du k_{eff} en fonction du nombre de batchs et pour différentes configurations de la source initiale (arbitraire) des neutrons : source initiale placée dans la sphère centrale la plus réactive, source initiale placée dans une sphère située en périphérie, source initiale uniforme dans toutes les unités fissiles.

- le calcul sans biais du facteur de multiplication des neutrons (k_{eff}) et de leur distribution ainsi que des variances respectives associées ;

- l'accélération de la convergence.

La recherche de critères pertinents diagnostiquant l'atteinte de la stationnarité

Dans la méthode de l'itération de la puissance, les neutrons de fission produits au cours du batch (n) constituent les neutrons source du batch ($n + 1$), ce qui induit une corrélation statistique entre l'ensemble des batchs simulés. L'enjeu de l'atteinte de la stationnarité de la population des neutrons est l'estimation sans biais du facteur de multiplication des neutrons (k_{eff}) et du flux des neutrons. Cette estimation sans biais sera garantie si les conditions d'application du théorème central limite sont réalisées, c'est-à-dire si les batchs de neutrons sont statistiquement indépendants. Mais comment détecter cette stationnarité ?

Des auteurs [9], [10], [11] ont proposé un critère entropique de diagnostic de l'équilibre de la population neutronique dérivé de la formulation microscopique qu'a faite Boltzmann de l'entropie. À cette fin, un maillage spatial est défini sur la géométrie du système et l'entropie, S, du système fissile considéré est déterminée par :

$$S = -\sum_{i=1}^{B} p_i \ln p_i \qquad (25)$$

où p_i représente le nombre de particules source dans une maille i divisé par le nombre total de particules et B le nombre total de mailles. Cette entropie est calculée à chaque batch. Lorsqu'elle se stabilise, la stationnarité est atteinte comme l'illustre la figure 45 (page suivante).

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:25 Page 101

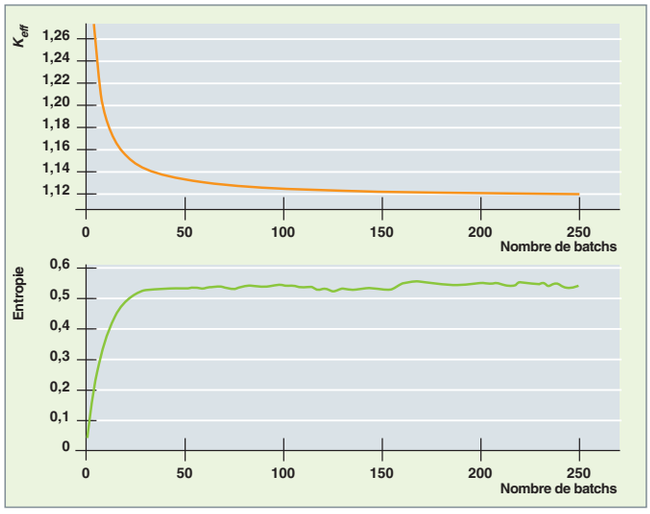


Fig. 45. Détection de la stationnarité de la source de neutrons par un calcul de l'entropie de Boltzmann. On observe une stabilisation relative de l'entropie pour un nombre de batchs de l'ordre de 50 (courbe du bas). L'estimation du k_{eff} est alors faite en « moyennant » les estimations obtenues pour tous les batchs à partir du 50e [11].

L'intérêt de ce critère fondé sur l'entropie est qu'il a un sens physique et qu'il permet d'explorer l'ensemble de l'espace des phases. Néanmoins, ce critère se révèle insuffisant, lorsque l'on a affaire à des systèmes faiblement couplés neutroniquement [12], à l'exemple d'un REP dont le rapport de dominance est proche de l'unité, en raison de ses dimensions : le centre du cœur et sa périphérie sont faiblement couplés. L'analyse de la variance permet d'identifier la nature de la difficulté à faire converger un calcul critique Monte-Carlo.

Le calcul de la variance du k_{eff} et du flux de neutrons

Dans la pratique, la stationnarité parfaite n'est jamais atteinte. Cela est dû à la corrélation entre cycles imposée par la méthode de l'itération de la puissance qui induit une propagation des fluctuations statistiques d'un batch aux suivants. Les formules (11), (12) et (13) appliquées au calcul des valeurs moyennes du k_{eff} et du flux de neutrons, ainsi qu'aux variances associées, ne sont plus appropriées, et l'on montre qu'elles doivent être remplacées par des expressions prenant en compte les différents modes propres du système fissile étudié, au risque sinon d'introduire des biais significatifs dans les estimations faites [13], [14]. En particulier, cette corrélation étant positive, ne pas en tenir compte conduit à sous-estimer la variance. Ces effets statistiques sont particulièrement importants pour les systèmes neutroniques de grande taille, tels que les REP pour lesquels le **rapport de dominance** est proche de l'unité. Dans la pratique, afin de réduire l'impact de ces biais sur les résultats, on s'assure que l'on a :

$$\frac{1}{N \text{ (nombre de neutrons simulés par batch)}} < \frac{1}{\sqrt{M \text{ (nombre de batchs)}}} \quad (26)$$

et que le nombre N est suffisamment élevé ($N > 1\,000$).

Une réduction « raisonnable » de ces fluctuations statistiques requiert donc de simuler un nombre suffisamment élevé de particules par batch et de batchs.

Ces problèmes ont été identifiés et analysés de longue date [13], [14]. La puissance des ordinateurs actuels et à venir ouvrant la perspective de véritables calculs de cœur de réacteur de puissance les ont remis sur le devant de la scène, et plusieurs auteurs les ont revisités proposant des approches calculatoires diverses de ces effets statistiques [8, 9, 12, 15, 16, 17, 18, 19, 20]… certaines implémentées dans les codes de transport Monte-Carlo. L'une d'entre elles consiste à réaliser des « paquets » de calculs de criticité indépendants [21] dont on moyenne ensuite les résultats, conformément aux relations (11), (12) et (13).

Accélération d'une simulation Monte-Carlo

La question posée ici est : comment pallier la lenteur naturelle d'une simulation Monte-Carlo ? C'est au moyen de *techniques d'accélération de la convergence* encore dénommées *techniques de réduction de la variance* que l'on estime une grandeur physique (flux, taux de réaction, etc.) avec une figure de mérite satisfaisante.

Cas des calculs critiques

En criticité, la technique actuellement la plus usitée consiste à initier le calcul de transport Monte-Carlo par une distribution de source de neutrons pré-calculée par un code déterministe. Elle permet de réduire efficacement la durée de la phase transitoire. Des travaux récents et en cours visent un objectif plus ambitieux, celui d'accélérer la convergence de la simulation, une fois la stationnarité atteinte [18], [19]. Entre autres approches explorées, la *méthode de Wielandt* (ou « de déflation ») est appliquée à la simulation Monte-Carlo du transport des neutrons, consistant à ramener le problème à résoudre à un problème dont le rapport de dominance est plus petit, ce qui, comme nous l'avons vu précédemment, favorise la vitesse de convergence de la méthode de l'itération de la puissance mise en œuvre.

Les techniques de biaisage en propagation

Un type particulier de techniques d'accélération, dénommées **« techniques de biaisage »**, consistent à *modifier artificiellement* les lois physiques régissant l'interaction particule-matière (probabilité de subir une collision sur un noyau donné, probabilité de provoquer une réaction donnée, probabilité de réémission à une énergie et dans une direction données lors d'une diffusion, etc.), de manière à favoriser les événements qui contribuent de manière significative au résultat cherché, tout en minimisant la dispersion statistique de leurs contributions. En contrepartie, l'estimateur associé à la grandeur physique considérée s'en trouve lui aussi modifié, comme le montre le court développement mathématique présenté dans

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:25 Page 102

l'encadré ci-contre. Relevant du même principe de base, différentes techniques de biaisage sont mises en œuvre dans un code de transport Monte-Carlo, parmi lesquelles :

- La technique dite de *« splitting-roulette »* qui gonfle ou diminue artificiellement la population de neutrons suivant les zones où ils se trouvent ;

- la technique dite de la *« transformation exponentielle »* dont le principe est exposé ci-après.

Le principe de la *« transformation exponentielle »*, repose sur un changement de variable qui fait passer du flux naturel $\psi(P)$ au flux biaisé $\psi^*(P)$, par l'intermédiaire d'une fonction $I(P)$ arbitraire :

$$\psi^*(P) = I(P)\psi(P) \qquad (27)$$

où P est un point de l'espace des phases $(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$.

La fonction $I(P)$ a pour rôle de définir les domaines de l'espace des phases qui sont importants vis-à-vis du résultat cherché. C'est pourquoi $I(P)$ est appelée **« fonction d'importance »**.

En introduisant ce changement de variable dans la forme intégro-différentielle de l'équation du transport, on obtient une nouvelle équation qui régit le flux biaisé $\psi^*(P)$ et dont la forme est similaire à l'équation du transport qui régit le flux de neutrons $\psi(P)$. Elle en diffère par les lois modifiées d'interaction particule-matière, en accord avec le tableau 14 (page suivante).

La quantité $\varepsilon(P) = \frac{|\vec{\nabla} I(P)|}{I(P)}$ est parfois appelée « paramètre de biaisage » et le vecteur $\vec{\Omega}_0(P) = \frac{\vec{\nabla} I(P)}{|\vec{\nabla} I(P)|}$ est dénommé « direction d'intérêt », c'est-à-dire la direction dans laquelle il convient de diriger les neutrons pour maximiser la figure de mérite.

La figure 46 permet d'illustrer le mécanisme de fonctionnement de la transformation exponentielle.

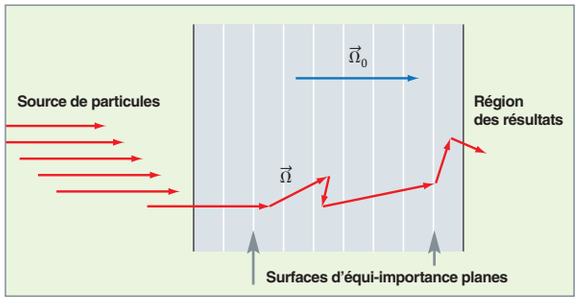


Fig. 46. Accélération d'un calcul de propagation de particules par la méthode de Monte-Carlo illustrée dans le cas de la propagation de neutrons (ou de *gammas*) dans un mur de protection. Sur cet exemple, la fonction d'importance $I(P)$ a été choisie de telle sorte que les surfaces d'équi-importance soient planes, la direction d'intérêt $\vec{\Omega}_0$ leur étant, par définition, en tout point perpendiculaire.

Principe des techniques de biaisage

Le problème à résoudre revient formellement à calculer l'espérance mathématique d'une grandeur physique Y définie par :

$$E[Y] = \int_D X g(X) dX$$

où X est une variable aléatoire estimateur « naturel » de Y et $g(X)$ la densité de probabilité associée à la variable aléatoire X définie sur un domaine D.

Désignons par $g^*(X)$ une densité de probabilité arbitraire associée à la variable aléatoire X. On peut écrire l'espérance mathématique de Y comme :

$$E[Y] = \int_D X g(X) dX = \int_D X \frac{g(X)}{g^*(X)} g^*(X) dX$$

Cela montre qu'il est possible d'estimer **sans biais** la grandeur Y en construisant une chaîne d'événements avec une densité de probabilité $g^*(X)$, différente de la densité de probabilité naturelle $g(X)$ pourvu que l'on prenne comme nouvel estimateur *sans biais* de la grandeur Y non plus X mais $X \frac{g(X)}{g^*(X)}$. Dans le contexte de la simulation du transport des neutrons par la méthode de Monte-Carlo et en pratique, cela revient, à chaque événement concerné, à multiplier (on dit aussi « corriger ») le **poids du neutron** (voir *supra*, p. 95) par la valeur prise par le rapport $X \frac{g(X)}{g^*(X)}$. La densité $g^*(X)$ est souvent appelée ici *« densité de probabilité biaisée »*.

Les vocables « biaisage », « biaisé », dérivés du terme anglais « biaising » portent à confusion, car l'estimation faite ici avec la densité biaisée $g^*(X)$ est rigoureusement sans biais.

La **capture implicite** est une illustration particulière de ce changement de densité de probabilité associée à l'occurrence d'un événement.

Le problème revient donc à trouver la densité $g^*(X)$ conduisant à la meilleure qualité possible de la simulation, au sens de la deuxième expression de l'espérance de Y, améliorant donc sensiblement la figure de mérite de la simulation Monte-Carlo.

On montre que si l'on prend pour $g^*(X)$ une forme construite avec la solution du problème adjoint (pour cela il faut résoudre l'équation du transport adjointe, voir *supra*, p. 58) alors on aboutit à une simulation idéale où la variance sur le résultat est nulle : cette simulation idéale est appelée **« jeu à variance nulle »**.

Cependant, le problème adjoint est au moins aussi complexe à résoudre que le problème direct. Autrement dit, ce résultat théorique ne peut être transposé tel quel dans la pratique. Sa résolution, dans le cadre d'hypothèses simplificatrices (milieu infini, particules monocinétiques…), inspire cependant des formes efficaces de la densité biaisée $g^*(X)$.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:25 Page 103

Tableau 14

Caractéristiques du biaisage, dans le cas de la transformation exponentielle

	Simulation naturelle	Simulation biaisée
Section efficace totale	$\Sigma(P)$	$\Sigma^*(P) = \Sigma(P) - \varepsilon(P)\vec{\Omega}_0(P).\vec{\Omega}(P)$ $\varepsilon(P) = \frac{\lvert\vec{\nabla}I(P)\rvert}{I(P)}$ $\vec{\Omega}_0(P) = \frac{\vec{\nabla}I(P)}{\lvert\vec{\nabla}I(P)\rvert}$
Densité de probabilité du parcours	$f(s)ds = \left[\exp(-\int_0^s \Sigma(\vec{r} - s'\vec{\Omega}, E)\, ds')\right]\Sigma(\vec{r}, E)ds$	$f^*(s)ds = \left[\exp(-\int_0^s \Sigma^*(\vec{r} - s'\vec{\Omega}, E)\, ds')\right]\Sigma^*(\vec{r}, E)ds$
Noyau de l'opérateur collision	$C(\vec{r}, E' \to E, \vec{\Omega}' \to \vec{\Omega})$	$C^*(\vec{r}, E' \to E, \vec{\Omega}' \to \vec{\Omega}) = \frac{I(\vec{r}, E, \vec{\Omega})}{I(\vec{r}, E', \vec{\Omega}')} C(\vec{r}, E' \to E, \vec{\Omega}' \to \vec{\Omega})$

En effet, à la densité naturelle du choix du parcours s, $f(s)$ on substitue la densité biaisée $f^*(s)$. D'après l'expression de $\Sigma^*(P)$, on constate que :

• $f^*(s)$ allonge en moyenne les parcours s lorsque les particules vont dans la direction d'intérêt $\vec{\Omega}_0(P)$:
$\vec{\Omega}_0(P).\vec{\Omega}(P) > 0$ et $\Sigma^*(P) < \Sigma(P)$

• $f^*(s)$ raccourcit en moyenne les parcours des particules qui vont en sens inverse de la direction d'intérêt $\vec{\Omega}_0(P)$:
et $\vec{\Omega}_0(P).\vec{\Omega}(P) > 0$ et $\Sigma^*(P) < \Sigma(P)$

Conformément à ce qui a été dit plus haut, le poids de la particule devra prendre en compte ce changement de loi du tirage du parcours, en étant multiplié par le rapport de la densité naturelle $f(s)$ à la densité modifiée $f^*(s)$:

$$\frac{f(s)}{f^*(s)} = \frac{\left[\exp(-\int_0^s \Sigma(\vec{r} - s'\vec{\Omega}, E)\, ds')\right]\Sigma(\vec{r}, E)}{\left[\exp(-\int_0^s \Sigma^*(\vec{r} - s'\vec{\Omega}, E)\, ds')\right]\Sigma^*(\vec{r}, E)}$$

Les figures 47 et 48 permettent de visualiser l'efficacité de l'application de cette technique d'accélération de la convergence dans le cas d'un transport stationnaire à source fixe. Des travaux récents proposent de la mettre en œuvre dans des calculs critiques.

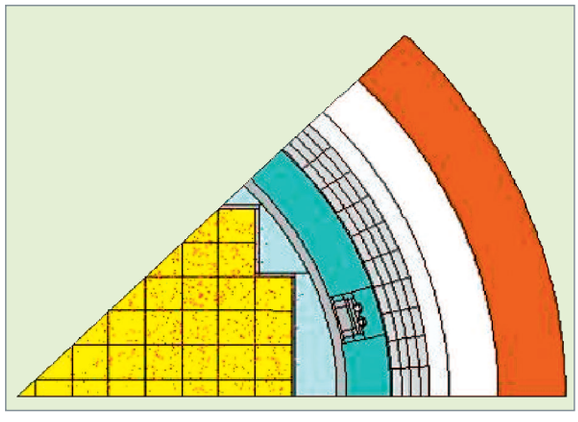


Fig. 47. Simulation naturelle ou analogue des neutrons naissant dans le cœur du réacteur : les points figurent l'emplacement des collisions subies par les neutrons. Trop peu de neutrons atteignent les structures externes du cœur (la cuve, en particulier) pour pouvoir évaluer avec une précision statistique acceptable la fluence neutronique à laquelle elles sont soumises. Cette simulation a été réalisée avec le code de transport Monte-Carlo TRIPOLI.

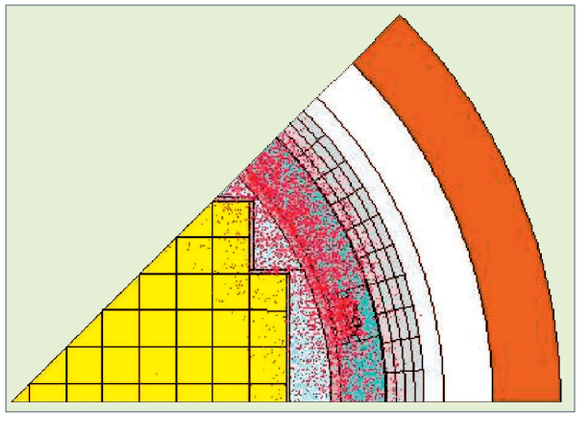


Fig. 48. Simulation non analogue ou « biaisée » des neutrons naissant dans le cœur du réacteur : la répartition des points figurant les sites des collisions subies par les neutrons montrent l'efficacité de la transformation exponentielle qui « pousse » les neutrons vers les zones d'intérêt, ici l'enveloppe et la paroi interne de la cuve du réacteur nucléaire pour lesquelles on cherche à estimer la fluence neutronique reçue. Cette simulation a été réalisée avec le code de transport Monte-Carlo TRIPOLI.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:25 Page 104

Dans le code de transport Monte-Carlo TRIPOLI, la fonction d'importance est construite automatiquement selon une approche adjointe et en utilisant un algorithme de plus court chemin issu de la théorie des graphes, l'**algorithme de Dijkstra** [22], [23]. Plusieurs autres techniques de réduction de la variance, comme la *roulette russe* et le *splitting* (fractionnement de neutrons en plusieurs autres neutrons) sont conjointement utilisées dans une même simulation. Des travaux sont en cours visant à améliorer la performance des fonctions d'importances $I(P)$ en utilisant, pour les construire, des techniques à base de **réseaux de neurones*** [24].

Perspectives

Dans le cadre de la physique des réacteurs nucléaires, la méthode de Monte-Carlo appliquée au transport des neutrons permet de traiter aussi bien des problèmes de physique du cœur (calcul de k_{eff}, distribution de puissance dans le cœur…) que ceux de radioprotection (calcul à source fixe : détermination de flux, d'échauffements, de débits de dose…) engendrés par la propagation des neutrons sur des distances variables pouvant aller jusqu'à plusieurs centaines de mètres (« effet de ciel », par exemple). Selon les mêmes principes, elle simule la propagation des rayonnements *gammas* produits dans une installation nucléaire. Par ailleurs, elle autorise, avec les avantages qui lui sont spécifiques (calcul à énergie continue et à trois dimensions), une simulation toujours plus fine de la réalité physique (« Up-scattering résonnant [25]), des calculs de perturbation de paramètres physiques et / ou de propagation d'incertitudes [26, 27, 28, 29] ainsi que le traitement du transport en milieu stochastique [30]. Enfin, la puissance toujours croissante des ordinateurs [31] ouvre la voie au traitement Monte-Carlo de la cinétique [32], et des couplages entre phénomènes physiques tels que le transport Monte-Carlo et l'évolution des nucléides (voir encadré, *infra*, p. 136-137) ou encore le transport Monte-Carlo et la thermohydraulique cœur [33].

Références

[1] N. Metropolis, S. Ulam, "The Monte Carlo Method", *Journal of the American Statistical Association*, 247, 44, pp. 335-34, 1949.

[2] I. Lux, L. Koblinger, *Monte Carlo Particle Transport Methods : Neutron and Photon Calculations*, CRC Press, 1991.

[3] J.C. Nimal, J. Rastoin, *Méthodes de Monte-Carlo*, Note CEA-N 533, avril 1965.

[4] H. Rief, A. Dubi, T. Elprin, "Track Length Estimation Applied to Point Detectors", *Nuclear Science and Engineering*, 87, pp. 59-71, 1984.

[5] F.H. Clark, "Variance of Certain Flux Estimators Used in Monte Carlo Calculations", Nuclear Science and Engineering, 27, pp. 235-239, 1967.

[6] N. Authier, J.P. Both, J.C. Nimal, "New Photon Biasing Schemes for the 'One-More-Collided-Flux-Estimator's Method", *Nuclear Science and Engineering*, 137, pp. 146-155, 2001.

[7] G. E. Whitesides, "A Difficulty in Computing the k-effective of the World," *Trans. Am. Nucl. Soc.*, 14, pp. 680, 1971.

[8] Y. Richet, "Suppression du régime transitoire initial des simulations Monte Carlo de criticité", *Thèse de Doctorat*, École des Mines de Saint-Étienne, décembre 2006.

[9] T. Ueki, F. B. Brown, D. K. Parsons, D.E. Kornreich, "Autocorrelation and Dominance Ratio in Monte Carlo Criticality Calculations", *Nuclear Science and Engineering*, 145, pp. 279-290, 2003.

[10] T. Ueki and F. B. Brown, "Stationarity Modeling and Informatics-Based Diagnostics in Monte Carlo Criticality Calculations", *Nuclear Science and Engineering*, 149, pp. 38-50, 2005.

[11] E. Dumonteil, A. Le Peillet, Y.-K. Lee, O. Petit, C. Jouanne, et A. Mazzolo, "Source Convergence Diagnostics using Boltzmann Entropy Criterion. Application to different OECD/NEA criticality benchmarks with the 3-D Monte Carlo code Tripoli-4", Physor, 2006.

[12] E. Dumonteil, T. Courau, "Dominance Ratio Assessment and Monte Carlo Criticality Simulations : Dealing with High Dominance Ratio Systems", *Nuclear Technology*, 112, pp. 120-131, November 2010.

[13] R. C. Gast and N. R. Candalore "Monte Carlo Eigenfunction Strategies and Uncertainties", *Proceedings of the NEACRP Meeting of a Monte Carlo Study Group*, ANL-72-2 (NEA-CRP-L-118), pp. 162, 1974 ; E.M. Gelbard, R.E. Prael, "Monte Carlo work at Argonne National Laboratory", *Proceedings of the NEACRP Meeting of a Monte Carlo Study Group*, ANL-72-2 (NEA-CRP-L-118), p. 202, 1974.

[14] J. Brissenden and A. R. Garlick, "Biases in the estimation of k-eff and its Errors by Monte Carlo Methods", *Annals of Nuclear Energy*, 13, 2, pp. 63-83, 1986.

[15] T. Ueki, T. Mori, and M. Nakagawa, "Error Estimations and their Biases in Monte Carlo Calculations", *Nuclear Sciences and Engineering*, 125, p. 1, 1997.

[16] L. Demaret, A. Nouri, L. Carraro, and O. Jacquet, "Accurate Determination of Confidence Intervals in Monte Carlo Eigenvalue Calculations", *Proceedings of ICNC'99*, p. 66, 1999.

[17] Y. Dufek, *Development of New Monte Carlo Methods in Reactor Physics – Criticality, Non-Linear Steady State and Burnup Problems*, PhD, Stockholm, Sweden, June 2009.

[18] P. David Griesheimer and R. Brian Nease, "Spectral Analysis of Stochastic Noise in Fission Source Distributions from Monte Carlo Eigenvalue Calculations", *Progress in Nuclear Science and Technology*, 2, pp. 706-715, 2011.

[19] S. Christoforou, J.E. Hoogenboom, "A Zero-Variance-Based Scheme for Monte Carlo Criticality Calculations", *Nuclear Science and Engineering*, 167, pp. 1, 91-104 (2011) ; S. Christoforou, A Zero-Variance-Based Scheme for Monte Carlo Criticality Simulations, *PhD, Technische Universtiteit Delft*, October 2010.

[20] F. X. Hugot, Y. K. Lee, F. Malvagi, "Recent R&D around the Monte-Carlo code TRIPOLI-4 for criticality calculation", *Proceedings of International PHYSOR-2008*, CD ROM, Interlaken, Switzerland, September 14-19, 2008.

[21] N. Petrov, N. P. Kolev, G. Todorova, F.X. Hugot, T. Visonneau, "TRIPOLI-4 Solutions of VVER-1000 Assembly and Core Benchmarks", *Proceedings of International Conference M&C 2009*, Saratoga Springs, New York, May 3-7, 2009.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:26 Page 105

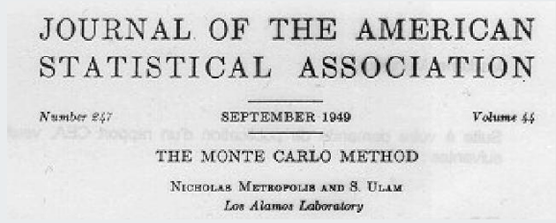
Aux sources de la méthode de Monte-Carlo

Dés
Antiquités égyptiennes,
Musée du Louvre. © D.R.

La notion de hasard est ancienne, comme en témoignent les dés ci-contre remontant à la haute Antiquité. L'invention de la **méthode de Monte-Carlo** est attribuée au naturaliste **Georges-Louis Leclerc**, **Comte de Buffon**, qui proposa une méthode probabiliste originale – passée à la postérité sous la désignation : *« expérience de "l'aiguille de Buffon" »* – permettant d'obtenir une estimation de la valeur du nombre π, [1].

Dans son mémoire, **Buffon** expose la problématique de son travail mathématique : *« L'Analyse est le seul instrument dont on se soit servi jusqu'à ce jour dans la science des probabilités, pour déterminer et fixer les rapports du hasard ; la Géométrie paroissoit peu propre à un ouvrage aussi délié ; cependant si l'on y regarde de près, il sera facile de reconnoître que cet avantage de l'Analyse sur la Géométrie, est tout-à-fait accidentel, et que le hasard, selon qu'il est modifié et conditionné, se trouve du ressort de la géométrie aussi-bien que de celui de l'analyse ; … »*. Il traite du problème ainsi posé en utilisant l'exemple du "jeu du franc-carreau". C'est dans la seconde partie de ce mémoire qu'intervient *"l'aiguille de Buffon"* : *« Je suppose que dans une chambre, dont le parquet est simplement divisé par des joints parallèles, on jette en l'air une baguette, et que l'un des joueurs parie que la baguette ne croisera aucune des parallèles du parquet, et que l'autre au contraire parie que la baguette croisera quelques-unes de ces parallèles ; on demande le sort de ces deux joueurs. On peut jouer ce jeu sur un damier avec une aiguille à coudre ou une épingle sans tête…»*

Par la suite, les travaux des mathématiciens, ceux de **G. F. Cantor** (1845-1918) sur la théorie des ensembles, de **E. Borel** (1871-1956), **H. Poincaré** (1854-1912), **A. A. Markov**, **H. Lebesgue**, **A. N. Kolmogorov**… sur les probabilités, les processus aléatoires et sur la théorie de la mesure, d'une part, et d'autre part, les travaux des physiciens **J. C. Maxwell** et **L. Boltzmann** sur la théorie des gaz (voir *supra*, p. 48), ont été déterminants pour déployer l'approche stochastique dans l'étude des phénomènes physiques.



JOURNAL OF THE AMERICAN STATISTICAL ASSOCIATION

Number 247 SEPTEMBER 1949 Volume 44

THE MONTE CARLO METHOD

NICHOLAS METROPOLIS AND S. ULAM
Los Alamos Laboratory

Avant qu'elle n'en portât le nom, la méthode de Monte-Carlo fut initialement utilisée par **E. Fermi** à Rome pour étudier le ralentissement des neutrons [2].

Cette méthode prend son essor, dans le contexte de la Seconde Guerre mondiale – mise au point de la bombe atomique à Los Alamos, aux États-Unis – et celui de l'avènement des premiers calculateurs électroniques et ordinateurs. Son nom – méthode de Monte-Carlo – serait le nom de code donné à un travail secret effectué au centre de recherche atomique de Los Alamos dans le Nouveau-Mexique, aux États-Unis. Elle sera développée par **J. von Neumann**, **S. Ulam** et **N. C. Metropolis** [3, 4]. La méthode de Monte-Carlo voit son utilisation s'étendre avec l'accroissement continu de la puissance des ordinateurs qu'accompagnent des ouvrages et des articles qui la présentent [5, 6, 7, 8, 9, 10, 11]. Le développement du code de transport de particules (neutron, *gamma*, électrons…) Monte-Carlo américain **MCNP***, s'inscrit dans l'héritage direct des pionniers de la méthode de Monte-Carlo [12]. En France, les tout premiers logiciels de transport des neutrons par la méthode de Monte-Carlo – ZEUS, POKER – sont écrits au CEA, dans les années 60 [7, 8, 9]. Leur successeur, **TRIPOLI***, voit sa première version sortir dans le courant des années 70 [13].

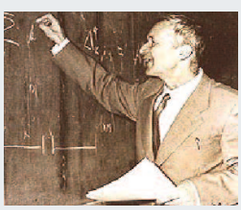
Quelques références historiques

[1] Comte de BUFFON, *Essai d'arithmétique morale, dans Histoire Naturelle générale et particulière*, Supplément, Tome Quatrième, pp. 95-105, 1777 (http://www.buffon.cnrs.fr/). En fait, ce travail mathématique avait été antérieurement soumis à l'Académie des Sciences française : le samedi 25 avril 1733, les mathématiciens A. Clairaut et P. L. Moreau de Maupertuis *« ont parlé ainsi sur un mémoire présenté par M. Le Clerc : "Nous avons examiné par ordre de l'Académie un Mémoire sur le jeu du Franc Carreau par M. Le Clerc…" »* (http://gallica.bnf.fr/ark:/12148/bpt6k55728h.f166).

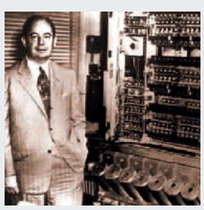
Georges-Louis Leclerc, Comte de Buffon (1707-1788).

Andrey Andreyevich Markov (1856-1922).

Henri Lebesgue (1875-1941).



Andrey Nikolaevich Kolmogorov (1903-1987).



John von Neumann (1903-1957).

Stanislaw Ulam (1909 -1984).

Nicholas Constantine Metropolis (1915-1999).

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:26 Page 105

[2] E. Segrè, Les Physiciens modernes et leurs découvertes – *Des rayons X aux Quarks*, Paris, Fayard, coll. “Le temps des Sciences”, p. 304, 1984.

[3] N. Metropolis, S. Ulam, “The Monte-Carlo Method”, *Journal of the American Statistical Association*, 247, 44, 335-34, 1949.

[4] N. Metropolis, “The Begining of the Monte-Carlo Method”, in *Los Alamos Science Special Issue*, pp. 125-130, 1987.

[5] J. Spanier, *Monte-Carlo Methods and their Application to Neutron Transport Problems*, WAPD-195, AEC Research and Development Report, Bettis Atomic Power Laboratory, Pittsburgh, Pennsylvanie, USA, July 1959.

[6] J. Spanier et E. M. Gelbard, *Monte-Carlo Principles and Neutron Transport Problems*, USA, Addison-Wesley Publishing Company, 1969.

[7] J.-C. Nimal, J. Rastoin, *Méthodes de Monte-Carlo*, Note CEA-N-533, 1965.

[8] C. Devillers, S. Katz, J.C. Nimal, *Quelques remarques sur la pondération dans les méthodes de Monte-Carlo*, Note CEA-N-644, 1967.

[9] J. M. Lanore, *Utilisation d'une méthode de Monte-Carlo pour la propagation des neutrons à grande distance*, Note CEA-N-934, 1968.

[10] J. M. Hammersley, D.C. Handscomb, *Les Méthodes de Monte-Carlo*, Paris, Dunod, coll. « Monographies Dunod », 1967.

[11] J. H. Halton, “A Retroscpective and Prospective Survey of the Monte Carlo Method”, *SIAM Review*, 12, 1, 1-63, January 1970.

[12] G. W. McKinney, J. W. Durkee, J. S. Hendricks, M. R. James, D. B. Pelowitz, L. S. Waters, F. X. Gallmeier, *MCNPX Overview*, LA-UR-06-6206, 2006.

[13] S. Katz, J. C. Nimal, *Programme de Monte-Carlo polycinétique à trois dimensions : TRIPOLI-01*, Note CEA-N-1919, 1976.

[22] P. J. Dossantos-Uzarralde, *Automatisation de la recherche des fonctions d'importance dans un code Monte-Carlo*, Thèse de doctorat, Université Paris 6, 1990 ; J.-P. Both, G. Dejonghe, J.-C. Nimal, P. J. Dossantos-Uzarralde and T. Vergnaud, “Automated importance generation and biaising techniques for Monte-Carlo shielding techniques by the TRIPOLI-3 code”, Proceedings of Physor 90 International Conference, (XII)-59–68, Marseille, France, April 1990 ; J.P. Both, J.C. Nimal, T. Vergnaud, “Automated Importance Generation and Biasing Techniques for Monte Carlo Shielding Techniques by the TRIPOLI-3 code”, *Progress in Nuclear Energy*, 24, pp. 273-281, 1990.

[23] B. Morillon, *Méthode de Monte Carlo non analogue – Application à la simulation des neutrons*, Thèse de doctorat, Université Paris XI-Orsay, Note CEA-N-2805, janvier 1996.

[24] E. Dumonteil, “On a New Variance Reduction Technique : Neural Network Biasing – A Study of Two Test Cases with the Monte Carlo Code TRIPOLI-4”, *Nuclear Technology*, 112, pp. 793-798, December 2009.

[25] A. Zoia, E. Brun, C. Jouanne, F. Malvagi, “Doppler broadening of neutron elastic scattering kernel in TRIPOLI-4®”, *Annals of Nuclear Energy 54*, 218-226, 2013.

[26] H. Rief, “Generalized Monte Carlo Perturbation Algorithms for Correlated Sampling and Second-Order Taylor Series Approach”, *Annals of Nuclear Energy*, 11, 9, pp. 455-476, 1984.

[27] G. Dejonghe, J. Gonnord, J.C. Nimal, “Perturbation Calculations by the Correlated Samples Method”, *Proceedings of the International Meeting on Advances Nuclear Engineering Computational Methods*, Knoxville, Tennessee, vol. 2, April 9-11, 1985).

[28] B. Morillon, *Perturbation dans le transport des neutrons par la méthode de Monte-Carlo*, Note CEA-N 2838, octobre 1998.

[29] Y. Nagaya, T. Mori, “Estimation of reactivityworth with differential operator sampling method”, *Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications and Monte Carlo 2010 (SNA + MC2010)*, Tokyo, Japan, October 17-21, 2010.

[30] A. Mazzolo, “Probability density distribution of random line segments inside a convex body: Application to random media”, *Journal of Mathematical Physics*, V. 44, 853-863, 2003.

[31] K. Smith, “Nuclear Mathematical and Computational Sciences: A Century in Review, A Century A new.” *Invited Keynote Speaker*. Gatlinburg, Tennessee, USA, May 2003.

[32] B. L. Sjenitzer and J. E. Hoogenboom, “A Monte Carlo method for calculation of the dynamic behaviour of nuclear reactors”, *Progress in Nuclear Science and Technology*, 2, pp. 716-721, 2011.

[33] J. Eduard Hoogenboom, Aleksandar Ivanov, Victor Sanchez, C. M. Diop, “A flexible coupling scheme for monte carlo and thermal-hydraulics codes”, *International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering* (M&C 2011), Rio de Janeiro, RJ, Brazil, on CD-ROM, Latin American Section (LAS) / American Nuclear Society (ANS) ISBN 978-85-63688-00-2, May 8-12, 2011.

Cheikh M. Diop, Éric Dumonteil,
François-Xavier Hugot et Fausto Malvagi
Département de modélisation des systèmes et des structures

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:26 Page 107

Méthodes de résolution des équations de Bateman généralisées

Les principes généraux

Un milieu irradié par un flux de neutrons a sa composition en nucléides qui évolue au cours du temps par **transmutation***, soit du fait des réactions nucléaires, soit à cause de la **décroissance*** radioactive des radionucléides formés.

Le tableau 15 regroupe les principaux phénomènes nucléaires responsables de la modification de la composition du milieu irradié. À la suite d'une réaction nucléaire ou d'un processus radioactif (indiqués en rouge), le noyau ${}^{A}_{Z}X$, de numéro atomique Z et de nombre de masse A, est transmuté en un autre noyau.

Tableau 15

Réactions nucléaires et processus radioactifs concourant à la modification de la composition isotopique dans un réacteur nucléaire

A \ Z	Z − 1	Z	Z + 1
A − 4			
A − 3 (n,α)			
A − 2	A − 2 (n,t)	A − 2 (n,3n)	
A − 1	A − 1 (n,d)	A − 1 n,(n,2n)	
A	A C.E., β+,(n,p)	A (n,n),(n,n')	A β-
A + 1		A + 1 (n,γ)	

Ces phénomènes nucléaires sont responsables de l'**évolution** spatiale et temporelle de la composition isotopique en **noyaux lourds** (NL) et en **produits de fission*** (PF) d'un combustible irradié par les neutrons. Il en est de même de l'évolution des **produits d'activation*** (PA) formés dans les structures d'un réacteur et de l'évolution des **produits de spallation** (PS) formés dans un **système hybride accélérateur-réacteur***, par exemple.

Ainsi, l'évaluation **JEFF-3.1.1*** comporte l'ensemble de ces nucléides dont un classement en noyaux lourds et produits de fission est donné par le tableau 16, page suivante :

Tableau 16

Répartition des nucléides de l'évaluation des données nucléaires JEFF-3.1.1 [1], [2] dans les catégories : noyaux lourds, produits de fission et systèmes fissiles

Nombre total de nucléides	3 852 (226 stables)
Noyaux lourds	863 (Z > 80 : Hg)
Produits de fission	1 314
Noyaux fissiles* (ou « systèmes fissiles »)	39

L'ensemble de ces nucléides pères et fils sont décrits sous forme de **chaînes de filiation** plus ou moins longues, suivant les cas. Ainsi, les chaînes de filiation des noyaux lourds et des produits de fission sont utilisées pour le calcul d'un réacteur nucléaire, en y opérant, le cas échéant, un certain nombre de simplifications, liées, par exemple, aux périodes des noyaux radioactifs ou à leur pouvoir capturant.

Plusieurs grandeurs physiques sont dérivées des concentrations $N_i(r, t)$ des nucléides i : **taux de réaction macroscopiques***, **puissances résiduelles*** *gamma*, *bêta*, *alpha* et sources de rayonnements correspondantes.

La dimension spatiale apparaissant dans les équations de Bateman généralisées est imposée à la fois par la distribution spatiale des concentrations des nucléides présents avant l'irradiation (concentrations initiales), et par le flux de neutrons *via* les différents taux de réaction. Ces équations doivent donc être résolues en cohérence avec le schéma numérique en espace (maillage spatial) adopté dans la résolution de l'équation du transport.

Dans le cas du combustible nucléaire où il y a une forte interdépendance entre le flux neutronique et les concentrations, les pas de temps de la discrétisation sont définis de telle sorte que le flux neutronique puisse y être supposé constant. Dans la pratique, ce n'est pas toujours le temps qui est utilisé comme variable, mais deux grandeurs qui sont représentatives de l'irradiation des éléments (voir le tableau 5, *supra*, p. 13) :

- La **fluence neutronique*** exprimée en neutrons par kilobarn (n/kb) ;
- le **taux de combustion*** exprimé en mégawatt jour par tonne (MWj/t).

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:26 Page 108

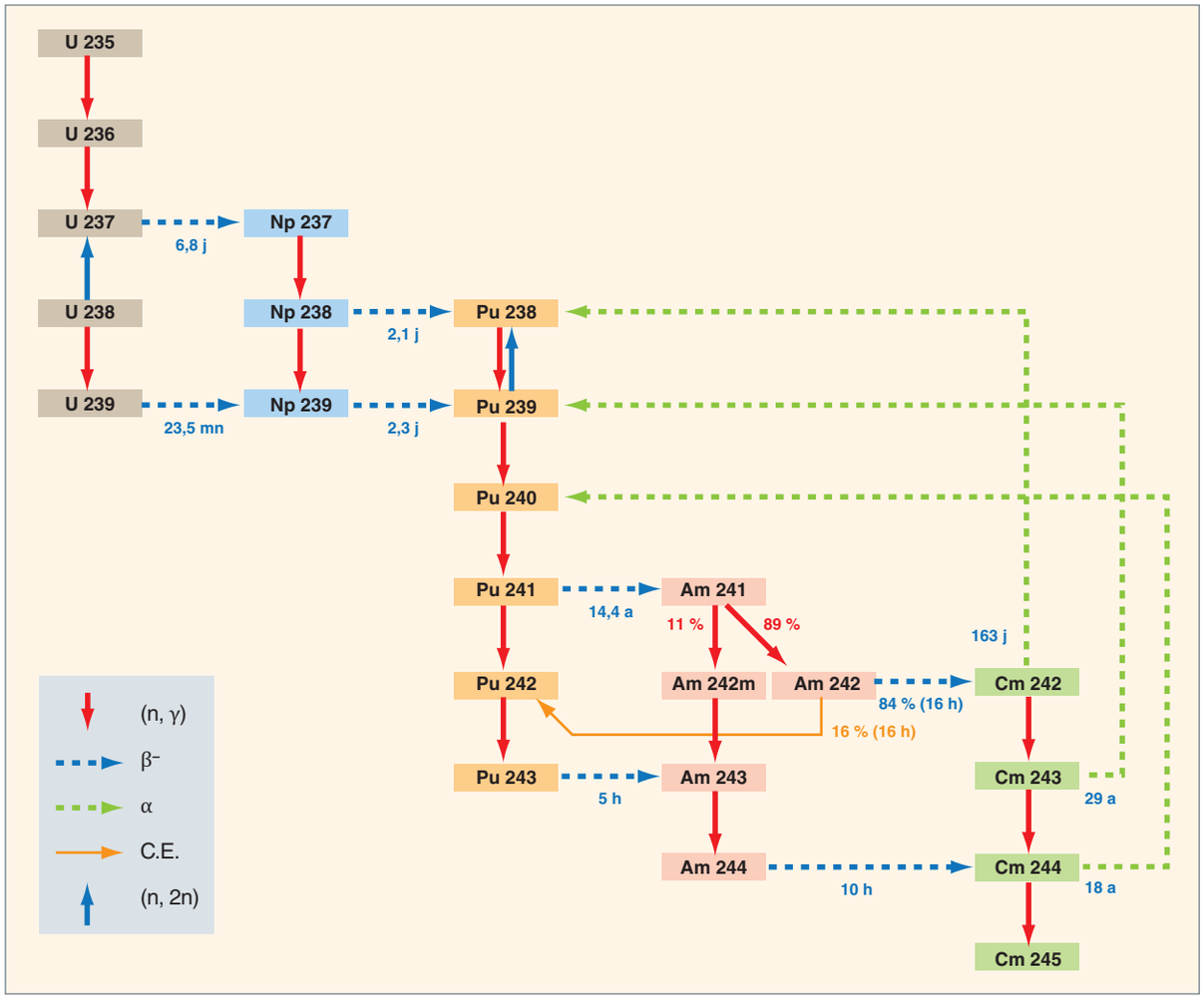


Fig. 49. Extrait d'une chaîne de filiation simplifiée de noyaux lourds présents dans un cœur de réacteur REL. Ce schéma montre comment se forment les actinides, et en particulier le plutonium, par le jeu combiné des réactions nucléaires et des désintégrations radioactives.

Par exemple, une irradiation d'un combustible UOx enrichi à 4,5 % de 45 000 MWj/t sera subdivisée en une cinquantaine de paliers d'irradiation, correspondant à une présence en réacteur de trois à quatre ans.

La résolution des équations de Bateman généralisées présentées *supra*, p. 49, est effectuée par diverses méthodes dont le choix est dicté par la nature du problème considéré :

- Recherche d'une solution analytique sous la forme d'une combinaison linéaire d'exponentielles ;
- méthode de l'exponentielle de matrice utilisant un développement limité de la fonction exponentielle ;
- méthodes numériques utilisant une discrétisation du temps (ou de la variable qui y est associée).

Les principes de la résolution analytique et de la résolution par la méthode numérique de type **Runge-Kutta** sont exposés ci-après. Suivent les résultats d'un calcul d'évolution illustrant, d'une part, la modification significative de composition du combustible en noyaux lourds au cours de son séjour dans le cœur du réacteur et, d'autre part, l'empoisonnement du cœur par deux produits de fission : le **xénon*** 135 et le **samarium*** 149.

La solution analytique des équations de Bateman

Lorsque la **chaîne de filiations*** est décrite de manière à ne contenir aucun chemin fermé, il est toujours possible d'ordonner les nucléides de manière que le calcul du $i^{ème}$ nucléide ne fasse intervenir que des nucléides déjà calculés.

Soit c_{ik} le coefficient conduisant au nucléide i depuis le nucléide k par décroissance et / ou par réaction nucléaire et b_i un terme source – fission induite par neutron en l'occurence – alimentant le nucléide i. Les coefficients c_{ik} et b_i sont supposés constants sur le palier d'irradiation considéré.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:26 Page 109

En omettant par raison de simplicité la variable spatiale, l'équation à résoudre donnant la concentration du nucléide i en fonction du temps t compté à partir du début du palier d'irradiation s'écrit :

$$\frac{dN_i(t)}{dt} = b_i + \sum_{k=1}^{i-1} c_{ik} N_k(t) - c_{ii} N_i(t) \quad (1)$$

La solution se met sous la forme :

$$N_i(t) = N_i^S + \sum_{k=1}^{i} F_{ik} e^{-c_{kk} t} \quad (2)$$

où les coefficients N_i^S et F_{ik} sont définis par :

$$N_i^S = \frac{1}{c_{ii}} \left[b_i + \sum_{k=1}^{i-1} c_{ik} N_k^S \right] \quad (3)$$

en supposant $c_{ii} \neq 0$

$$F_{ik} = \frac{1}{c_{ii} - c_{kk}} \left[\sum_{j=k}^{i-1} c_{ij} F_{jk} \right] \quad 1 \leq k \leq i-1 \quad (4)$$

en supposant $c_{ii} \neq c_{kk}$

$$F_{ii} = N_i(0) - N_i^S - \sum_{j=1}^{i-1} F_{ij} \quad (5)$$

où $N_i(0) = N_i(t = 0)$

On notera qu'en l'absence de flux, cette résolution est toujours moins onéreuse qu'une résolution par discrétisation numérique.

La résolution numérique des équations de Bateman

Lorsque l'on est en présence de chemins fermés, on a recours à un schéma de résolution numérique. Celui présenté ici est de type **Runge-Kutta d'ordre 4**, cet ordre étant choisi comme un bon compromis entre la précision et le coût du calcul.

Les équations d'évolution à résoudre peuvent s'écrire sous la forme matricielle générale suivante :

$$\frac{dN(t)}{dt} = S(t) + A(t)N(t) \quad (6)$$

- $N(t)$: vecteur des concentrations des nucléides considérés ;
- $S(t)$: vecteur terme source ;
- $A(t)$: matrice d'évolution dont les éléments non diagonaux contiennent les termes d'alimentation et les éléments diagonaux les termes de disparition des nucléides par radioactivité et / ou réaction nucléaire.

Les coefficients de la matrices sont définis par :

$$A_{ii}(t) = -\lambda_i - \varsigma_i(t) \quad (7)$$

$$A_{ij}(t) = \lambda_{i \leftarrow j} + \varsigma_{i \leftarrow j}(t) \quad (8)$$

où les termes λ_i, $\lambda_{i \leftarrow j}$, relatifs respectivement à la décroissance des nucléides i et j, et $\varsigma_i(t)$ et $\varsigma_{i \leftarrow j}(t)$, correspondant aux taux de réaction microscopiques associés aux nucléides i et j, ont été précédemment définis (voir *supra*, p. 49).

Nous voyons que, d'après les expressions (7) et (8), la matrice d'évolution dépend essentiellement du temps par l'intermédiaire du flux qui est une donnée fournie par les codes de transport. Ses valeurs peuvent être connues à chaque instant, soit parce qu'elles sont tabulées, soit parce qu'elles peuvent être interpolées à partir des valeurs tabulées. Si l'on effectue un calcul sur une plage d'irradiation « pas trop grande », on peut supposer la matrice d'évolution constante et égale à son expression au point milieu du palier.

Dans la pratique, lorsque le point milieu du palier n'est pas un point correspondant à un résultat tabulé, on calcule les éléments de la matrice d'évolution à partir des valeurs interpolées entre deux points de tabulation encadrant le point milieu d'évolution.

Cette hypothèse, conjuguée à la possibilité de connaître la matrice d'évolution à différentes valeurs du taux de combustion, peut justifier l'utilisation d'un schéma numérique de type Runge-Kutta sans re-calcul de la matrice d'évolution entre deux pas de temps élémentaires. Ce type de technique numérique doit effectivement son nom aux deux mathématiciens allemands qui l'ont mise au point, **Carl David Tolmé Runge** (1856-1927) et **Martin Wilhelm Kutta** (1867-1944).

Ce schéma numérique repose sur l'utilisation conjointe de la méthode d'Euler de résolution d'équations différentielles du premier ordre et du développement de Taylor à un ordre fixé de $N(t)$ et de sa dérivée. On pose :

$$G(N) = S(t) + A(t)N(t) \quad (9)$$

Le schéma Runge-Kutta d'ordre 4 s'écrit alors :

$$\begin{aligned} N^{(0)} &= N^{(n)} \\ N^{(1)} &= N^{(0)} + \frac{\Delta t}{2} G(N^{(0)}) \\ N^{(2)} &= N^{(0)} + \frac{\Delta t}{2} G(N^{(1)}) \\ N^{(3)} &= N^{(0)} + \Delta t\, G(N^{(2)}) \\ N^{(4)} &= \frac{\Delta t}{2} G(N^{(3)}) \\ N^{(n+1)} &= \frac{1}{3}(N^{(1)} - N^{(0)}) + \frac{2}{3} N^{(2)} + \frac{1}{3} N^{(3)} + \frac{1}{3} N^{(4)}) \end{aligned} \quad (10)$$

où Δt est la largeur du pas de discrétisation en temps.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:26 Page 110

L'erreur associée à ce schéma numérique est proportionnelle à Δt^4.

On a implicitement supposé que l'historique du flux neutronique était connu. Dans les calculs de cœur, le flux de neutrons n'est pas connu à l'avance : l'équation du transport et les équations d'évolution doivent être résolues simultanément. Dans les faits, elles sont résolues séquentiellement par pas de temps (ou de fluence neutronique ou de taux de combustion), en adjoignant au procédé numérique précédemment décrit une **procédure de « prédiction-correction »** qui anticipe la variation du flux neutronique sur l'intervalle de discrétisation considéré ; cette technique permet un calcul affiné des concentrations à la borne supérieure de cet intervalle.

Exemples de calculs d'évolution typiques en physique des réacteurs : l'évolution des noyaux lourds et des produits de fission

Évolution des noyaux lourds

Le combustible utilisé dans les réacteurs français actuels est soit du combustible à base d'uranium appelé UOx, soit un mélange uranium-plutonium appelé « MOx ». On peut distinguer dans ces combustibles, d'une part, les noyaux **fissiles*** tels que l'uranium 235, le plutonium 239, le plutonium 241, d'autre part, les noyaux **« fertiles* »** qui donnent par capture neutronique un noyau fissile ; l'uranium 238 qui, par capture d'un neutron suivie de désintégrations radioactives, donne un noyau fissile, le plutonium 239, est un exemple de noyau « fertile ».

Au cours de l'irradiation, des **produits de fission*** se forment dans le combustible, comme nous le verrons plus loin, ainsi que de nouveaux **noyaux lourds*** qui sont issus majoritairement des réactions de capture neutronique. Les nucléides produits et leur quantité dépendent de la composition initiale du combustible, ainsi que du spectre des neutrons. Les figures 50 et 51 illustrent respectivement, en fonction de l'irradiation, la formation ou la disparition des isotopes de l'uranium (U) et du plutonium (Pu) dans un combustible REP-UOx enrichi à 4,5 % et dans un combustible MOx à teneur initiale moyenne en plutonium de 5,6 %.

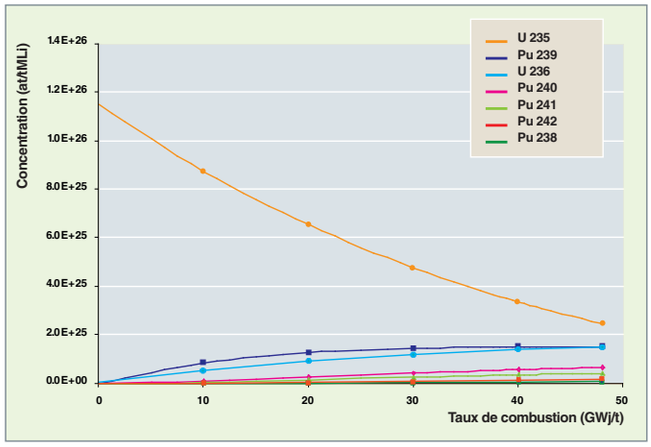


Fig. 50. Évolution des principaux noyaux U, Pu dans un combustible UOx.

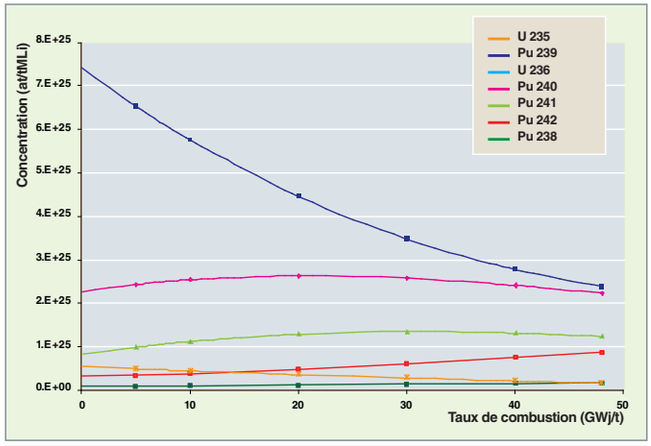


Fig. 51. Évolution des principaux noyaux U, Pu dans un combustible MOx.

Empoisonnement par les produits de fission

L'effet principal lié à l'apparition des **produits de fission*** dans le combustible est l'éventuelle perte de **réactivité*** due à leur capture neutronique. C'est ce que l'on appelle l'**empoisonnement***. Les **poisons*** les plus importants dans les réacteurs à neutrons thermiques, et dont nous examinerons les effets dans ce qui suit, sont le xénon 135 et le samarium 149.

En fin d'irradiation, l'empoisonnement de l'ensemble des produits de fission atteint une dizaine de milliers de **pcm*** dans les réacteurs à eau. Les quinze produits de fission les plus absorbants constituent à eux seuls plus de 80 % de la capture totale des produits de fission. Parmi eux figurent les nucléides suivants : Rh 103, Gd 155, Cs 133, Nd 143, Nd 145, Sm 151, Eu 153.

Cette anti-réactivité, pénalisante dans les réacteurs, peut cependant devenir un atout dans les études liées au cycle du combustible et, en particulier, dans le domaine de la sûreté-criticité. De nombreuses études ont été menées ces dernières

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:26 Page 111

années sur ce qu'on nomme le « **crédit *burn-up**** » et qui consiste à prendre en compte l'usure du combustible dans les études de sûreté-criticité.

Empoisonnement par le xénon 135

Le **xénon*** 135 est un gaz rare provenant de la fission suivant la chaîne présentée dans la figure 52.

C'est l'un des principaux poisons dans les réacteurs à neutrons thermiques, compte tenu d'une part de son rendement de fission important pour l'uranium 235 et le plutonium 239 (6,5 % et 7,2 %, respectivement) et d'autre part, de son exceptionnelle section efficace de capture dans le domaine thermique ($\sigma_c = 3.10^6$ *barns*). En fonctionnement normal, l'empoisonnement xénon est de l'ordre de 3 000 pcm dans un REP ; cette anti-réactivité asymptotique (la production et la disparition du xénon s'équilibrent) est obtenue au bout d'un jour ou deux de fonctionnement à flux constant.

En cas d'arrêt du réacteur, l'iode 135 n'est plus produit par fission et le xénon 135 ne disparaît plus par capture neutronique. La réserve d'iode 135 accumulée en fonctionnement décroît en formant du xénon 135 et le niveau de celui-ci augmente pour atteindre un maximum au bout d'environ dix heures, avant de décroître à nouveau. Dans un REP, l'anti-réactivité maximale due à ce « pic xénon » est d'environ 3 700 pcm, ce qui peut empêcher le réacteur de redémarrer instantanément. Il est donc indispensable de prendre en compte, dans la conception des cœurs, l'existence de ce phénomène.

De surcroît, cet **effet xénon** peut être à l'origine de perturbations de la répartition de puissance dans le cœur, du fait de sa section efficace de capture particulièrement élevée.

Empoisonnement par le samarium 149

La chaîne d'évolution conduisant au **samarium*** 149 est présentée en figure 53. Cet isotope est stable et a une section efficace d'absorption de 60 000 barns dans le domaine thermique. Après quelques semaines de fonctionnement, à l'équilibre, c'est-à-dire lorsqu'il y a autant de samarium formé que détruit, l'anti-réactivité apportée par le samarium 149 est d'environ 600 pcm.

Si l'on arrête brusquement le réacteur fonctionnant avec un flux constant depuis plusieurs semaines, la quantité de samarium stable demeure dans le réacteur et augmente, en raison de la décroissance du prométhéum 149 de période 53 heures (fig. 52). Cela conduit à un surcroît d'empoisonnement qui atteint une valeur limite proportionnelle au flux qui régnait dans le réacteur avant l'arrêt ; contrairement à l'effet xénon, il n'y a pas de passage par un maximum d'anti-réactivité. La quantité de samarium ne diminue que lorsque le réacteur redémarre, par absorption neutronique.

Références

[1] A. Santamarina *et al.*, *The JEFF-3.1.1 Nuclear Data Library – Validation Results from JEF-2.2 to JEFF-3.1.1*, JEFF Report 22, OECD 2009 NEA nº 6807, 2009.

[2] M.A. Kellett, O. Bersillon, R.W. Mills, *The JEFF-3.1/-3.1.1 radioactive decay data and fission yields sub-libraries*, JEFF Report 20, OECD 2009 NEA No. 6287, 2009.

Décroissance β^-

Fission → **Sn 135** → **Sb 135** → **Te 135** → **I 135** → **Xe 135** → **Cs 135** → **Ba 135**

Période	0,85 s	1,70 s	19,0 s	6,61 h	9,09 h	2.3 10^6 ans	Stable
Rendement cumulé (pour un neutron thermique induisant la fission)							
U 235	9,3 10^{-4}	1,8 10^{-1}	3,68	6,32	6,58	6,58	6,58
Pu 239	5,9 10^{-5}	3,9 10^{-2}	1,92	6,19	7,23	7,24	7,24

Fig. 52. Chaîne d'évolution du xénon 135.

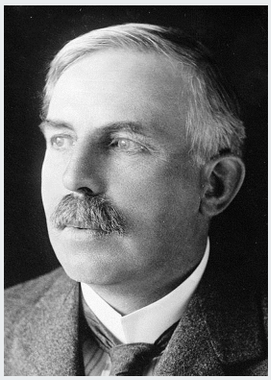
Décroissance β^-

Fission → **Ba 149** → **La 149** → **Ce 149** → **Pr 149** → **Nd 149** → **Pm 149** → **Sm 149**

Période	0,35 s	1,20 s	5,20 s	2,27 mn	1,73 h	53, 00 h	Stable
Rendement cumulé (pour un neutron thermique induisant la fission)							
U 235	1,5 10^{-3}	1,0 10^{-1}	8,3 10^{-1}	1,04	1,05	1,05	1,05
Pu 239	1,8 10^{-4}	3,9 10^{-2}	7,1 10^{-1}	1,21	1,25	1,25	1,25

Fig. 53. Chaîne d'évolution du samarium 149.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:26 Page 112



Ernest Rutherford
1871-1937
Prix Nobel de Chimie en 1908

Frederick Soddy
1877-1956
Prix Nobel de Chimie en 1921

LX. *Radioactive Change.* *By* E. RUTHERFORD, *M.A., D.Sc., Macdonald Professor of Physics, McGill University, and* F. SODDY, *M.A. (Oxon.).*

CONTENTS.

I. The Products of Radioactive Change, and their Specific Material Nature.
II. The Synchronism between the Change and the Radiation.
III. The Material Nature of the Radiations.
IV. The Law of Radioactive Change.
V. The Conservation of Radioactivity.
VI. The Relation of Radioactive Change to Chemical Change.
VII. The Energy of Radioactive Change and the Internal Energy of the Chemical Atom.

§ 1. *The Products of Radioactive Change and their Specific Material Nature.*

IN previous papers it has been shown that the radioactivity of the elements radium, thorium, and uranium is maintained by the continuous production of new kinds of matter which possess temporary activity. In some cases the new product exhibits well-defined chemical differences from the element producing it, and can be separated by chemical processes. Examples of this are to be found in the removal of thorium X from thorium and uranium X from uranium. In other cases the new products are gaseous in character, and

§ 4. *The Law of Radioactive Change.*

The view that the radiation from an active substance accompanies the change gives a very definite physical meaning to the law of decay of radioactivity. In all cases where one of the radioactive products has been separated, and its activity examined independently of the active substance which gives rise to it, or which it in turn produces, it has been found that the activity under all conditions investigated falls off in a geometrical progression with the time. This is expressed by the equation

$$\frac{I_t}{I_o} = \epsilon^{-\lambda t}$$

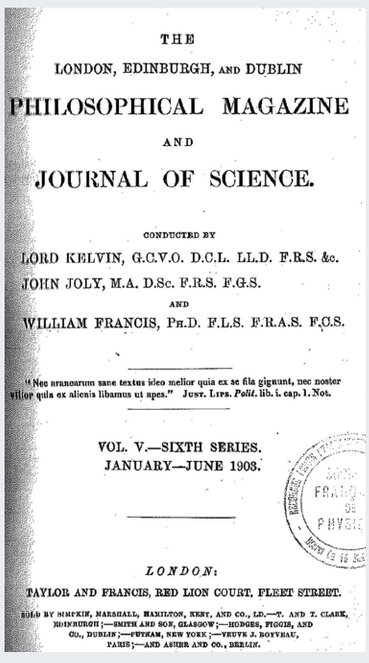
where I_o is the initial ionization current due to the radiations, I_t that after the time t, and λ is a constant. Each ray or

Ernest Rutherford, est un physicien et chimiste, né en Nouvelle-Zélande et ayant vécu en Angleterre. Expérimentateur exceptionnel, il élucide la **structure de l'atome** : noyau atomique chargé positivement entouré d'un cortège d'électrons chargés négativement. Il découvre les rayonnements *alpha* et *bêta* issus de l'uranium, en étudiant l'ionisation de l'air induite par ces rayonnements. Travaillant avec le chimiste **Frederick Soddy**, il établit, en 1902, le lien entre **radioactivité** et **changement d'espèce chimique** [1].

F. Soddy identifiera, un peu plus tard, des nucléides radioactifs de masses différentes ayant néanmoins les mêmes propriétés chimiques, ce qui a conduit à la notion d'**isotope**.

E. Rutherford et **F. Soddy** étudient, en particulier, la famille radioactive du **Thorium** et établissent la **loi de décroissance exponentielle qui régit les chaînes de décroissance radioactive** [1], [5].

La conséquence de la découverte de cette loi dans la reconstitution de l'histoire de la Terre s'avéra considérable. **Buffon** (1707-1788), avec ses 80 000 ans, un moment révisés à quelques millions d'années, avait déjà mis à mal, par d'astucieuses expériences, l'âge de quelques milliers d'années que l'on attribuait communément à la Terre, en Europe. La géologie en essor du milieu du XIXe siècle annonça plusieurs centaines de millions d'années. Au début du XXe siècle, avec la radioactivité, l'âge de la Terre dépassa le milliard d'années, au grand dam du tout-puissant et « anti-darwinien » physicien **Lord Kelvin** (1824- 1907) qui resta longtemps arc-bouté sur un âge de cent millions d'années qu'il avait déduit de l'application de lois de la diffusion de la chaleur [3].



THE
LONDON, EDINBURGH, AND DUBLIN
PHILOSOPHICAL MAGAZINE
AND
JOURNAL OF SCIENCE.

CONDUCTED BY
LORD KELVIN, G.C.V.O. D.C.L. LL.D. F.R.S. &c.
JOHN JOLY, M.A. D.Sc. F.R.S. F.G.S.
AND
WILLIAM FRANCIS, PH.D. F.L.S. F.R.A.S. F.C.S.

"Nec aranearum sane textus ideo melior quia ex se fila gignunt, nec noster vilior quia ex alienis libamus ut apes." JUST. LIPS. *Polit.* lib. i. cap. 1. Not.

VOL. V.—SIXTH SERIES.
JANUARY—JUNE 1903.

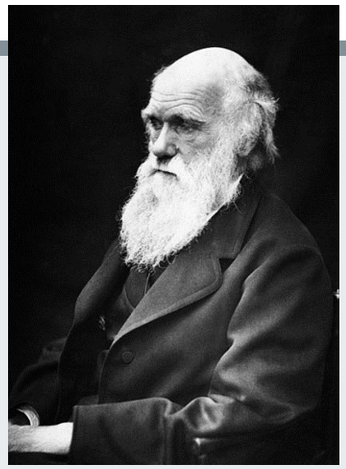
LONDON:
TAYLOR AND FRANCIS, RED LION COURT, FLEET STREET.
SOLD BY SIMPKIN, MARSHALL, HAMILTON, KENT, AND CO., LD.—T. AND T. CLARK, EDINBURGH;—SMITH AND SON, GLASGOW;—HODGES, FIGGIS, AND CO., DUBLIN;—PUTNAM, NEW YORK;—VEUVE J. BOYVEAU, PARIS;—AND ASHER AND CO., BERLIN.

À la suite de la

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:26 Page 113

théorie de l'évolution de **Charles Robert Darwin** (1809-1882) (et aussi d'**Alfred Russel Wallace** [1823-1913]), la **physique nucléaire** naissante contribuait ainsi à installer durablement un nouveau paradigme de l'histoire naturelle de la Terre, du système solaire, de l'Univers : diachronique, évolutif, filiatif.

C'est à **Harry Bateman**, mathématicien d'origine anglaise ayant émigré aux États-Unis, fortement intéressé par la physique-mathématique, que l'on doit la solution générale des équations différentielles régissant au cours du temps les concentrations des nucléides appartenant à des filiations radioactives [4], [5]. Ces équations sont couramment appelées **« équations de Bateman »**. Les équations de **Bateman *généralisées*** – ou **équations d'évolution** – qui tiennent compte, de surcroît, de l'irradiation par un flux de neutrons, à l'instar de ce qui se produit dans le cœur d'un réacteur nucléaire en fonctionnement, ont été résolues pour la première fois, en 1949, par **William Rubinson**, scientifique travaillant au *Département de Chimie du Brookhaven National Laboratory*, aux États-Unis [6].



Charles Robert Darwin
1809-1882

Harry Bateman
1882-1946

Références

[1] E. Rutherford, F. Soddy, "Radioactive Change", *Philosophical Magazine and Journal of Science*, Jan-Jun, pp. 576-591, 1903.

[2] http://www.larecherche.fr/idees/histoire-science/quel-age-a-terre-01-10-2009-86743

[3] Charles Darwin, *On the Origin of Species by Means of Natural Selection, or the Preservation of Favoured Races in the Struggle for Life*, London, John Murray, 1859.

[4] H. Bateman, "The solution of a system of differential equations occurring in the theory of radioactive transformations", *Proceedings Cambridge Philosophical Society*, vol. 15, pp. 423-427, 1910.

[5] R. D. Evans, *The Atomic Nucleus*, New York, Mac Graw-Hill Book Company, 1955.

[6] W. Rubinson, "The Equations of Radioactive Transformation in a Neutron Flux", *Journal of Chemical Phvsics*, vol. 17, number 6, pp. 542-547, June 1949.

Cheikh M. Diop, Tan Dat Huynh,
Anne Nicolas, Aimé Tsilanizara
Département de modélisation des systèmes et structures
et Bénédicte Roque
Département d'études des réacteurs

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:26 Page 114

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:26 Page 115

Méthodes de résolution en temps des équations couplées de la cinétique spatiale

Circonscrite au cadre de la neutronique, l'équation générale de Boltzmann régissant le flux de neutrons en tout point du cœur du réacteur à tout instant t, a été précédemment présentée *supra*, p. 60. Cette équation possède deux termes sources de neutrons correspondant respectivement aux **neutrons prompts*** et aux **neutrons retardés***. Le rôle crucial joué par les neutrons retardés pour le pilotage d'un réacteur nucléaire a déjà été évoqué. Il est illustré par l'encadré ci-contre.

En fonctionnement normal, on cherche à maintenir le réacteur dans un état d'équilibre caractérisé par un bilan nul entre les neutrons qui sont créés (essentiellement par fission induite par neutron) et les neutrons disparaissant par absorption et fuites hors du cœur du réacteur. Même en fonctionnement normal, le cœur d'un réacteur a ses propriétés physiques (composition isotopique, température, dimensions…) en constante modification du fait des processus physiques qui s'y déroulent de sorte que, dans la pratique, cet état critique est maintenu en agissant sur des dispositifs capables à tout moment de réduire à 0 l'écart à la criticité ($\delta k = 0$). Ce pilotage du réacteur est effectué en particulier grâce à des barres de contrôle dont l'insertion plus ou moins profonde dans le cœur du réacteur permet de maîtriser la valeur du paramètre δk.

Le présent chapitre est consacré à la cinétique des réacteurs nucléaires aux temps « courts » sur lesquels les neutrons retardés jouent un rôle particulièrement important.

Comme cela a été expliqué dans « La démarche du neutronicien », voir *supra*, p. 51, la complexité des configurations physiques réelles (hétérogénéités, grandes dimensions…) à étudier conduit à introduire des hypothèses raisonnablement simplificatrices pour résoudre les équations du transport et d'évolution. Le modèle dit **« de la cinétique ponctuelle* des réacteurs nucléaires* »**, décrit ci-après, découle de cette démarche. Il est caractérisé par deux équations différentielles linéaires du premier ordre couplées régissant respectivement l'évolution temporelle de la population totale des neutrons dans le réacteur et celle des précurseurs des neutrons retardés ; elles sont supposées valables en tout point du cœur du réacteur en faisant abstraction des variables d'espace et d'énergie. Sa présentation est précédée de l'énoncé des principes généraux guidant le passage des équations de la cinétique spatiale décrite *supra*, p. 59 et 60, à celles de la cinétique ponctuelle. C'est au cours de ce passage que sont introduites des grandeurs qualifiées d'**« effectives »** : elles jouent un rôle clé, car elles permettent de « préserver la physique » de la configuration réelle.

Enfin, un *distinguo* doit être opéré entre la **réactivité statique** qui mesure l'écart à la criticité d'un système fissile « figé » de référence et la **réactivité dynamique** qui inclut un terme supplémentaire résultant d'une pertubation du système de référence.

Rôle des neutrons retardés dans le pilotage des réacteurs

On prend l'exemple d'un réacteur à neutrons thermiques et on ne considère dans un premier temps, que la population des neutrons prompts qui représentent plus de 99 % de la population totale des neutrons (neutrons prompts + neutrons retardés). La durée de vie moyenne, ℓ, d'un neutron dans le domaine d'énergie thermique est de l'ordre de $\ell \approx 10^{-5}$ s.

On montre alors que le flux de neutrons en tout point du cœur du réacteur évolue exponentiellement en fonction du temps comme $e^{\frac{\delta k}{\ell}t}$ où δk est l'excédent du facteur de multiplication des neutrons, par rapport à l'unité : $\delta k = k_{eff} - 1$. On définit la **réactivité***, notée ρ, par $\rho = \frac{\delta k}{k_{eff}} = \frac{k_{eff}-1}{k_{eff}}$. L'état stable ou **critique*** du réacteur correspond à $\delta k = 0$ ou $\rho = 0$.
La grandeur $T = \frac{\ell}{\delta k}$ est la constante de temps qui caractérise l'évolution de la population des neutrons dans le réacteur considéré ; on la nomme **« période du réacteur »**.

Si $\delta k = 10^{-4}$ alors $T = 0{,}1\ s$, et en une seconde, le flux initial de neutrons se trouve multiplié par le facteur $e^{10} \approx 2{,}2\ 10^4$ rendant impossible le pilotage du réacteur.

Bien que peu nombreux en proportion (moins de 1 %), les neutrons retardés ont pour effet d'allonger très sensiblement la période du réacteur. Par exemple, les neutrons retardés dus à la fission induite sur l'uranium 235 font passer la période du réacteur de $T = 0{,}1\ s$ à $T = 866\ s$.

En une seconde, le flux initial de neutrons se trouve donc multiplié par le facteur $e^{\frac{1}{866}} \approx 1{,}00116$ rendant, par conséquent, possible le pilotage du réacteur.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:26 Page 116

Les principes généraux

On reprend, dans cette section, les grandes lignes de l'exposé fait sur ce sujet par J. Lewins dans la référence [1]. Conformément à ce qui a été dit plus haut, l'objectif est ici de décrire le comportement du réacteur nucléaire uniquement en fonction du temps. Pour cela, on repart des équations de la cinétique spatiale (*supra*, p. 59 et 60), en y faisant apparaître la densité totale de neutrons à la place du flux de neutrons :

$$\frac{\partial n(\vec{r},E,\vec{\Omega},t)}{\partial t} = -v\vec{\Omega}.\vec{\nabla}n\left(\vec{r},E,\vec{\Omega},t\right) - v\sum_k N_k(\vec{r})\,\sigma_k(E)n\left(\vec{r},E,\vec{\Omega},t\right) \quad (1)$$

$$+\sum_k N_k(\vec{r})\int_0^\infty dE'\int_{4\pi} d\vec{\Omega}'\,\sigma_{s,k}\left(E'\to E,\vec{\Omega}'\to\vec{\Omega}\right)v'n\left(\vec{r},E',\vec{\Omega}',t\right)$$

$$+\frac{1}{4\pi}\sum_k N_k(\vec{r})\int_0^\infty dE'\,\nu_{p,k}\left(E'\right)\sigma_{f,k}\left(E'\right)\chi_{p,k}\left(E'\to E\right)v'n(\vec{r},E',t)$$

$$+\frac{1}{4\pi}\sum_{k\in F}\sum_i \lambda_i^{(k)}C_i^{(k)}(\vec{r},t)\chi_{d,i}^{(k)}(E) + S_{ext}\left(\vec{r},E,\vec{\Omega},t\right)$$

$$\frac{dC_i^{(k)}(\vec{r},t)}{dt} = -\lambda_i^{(k)}C_i^{(k)}(\vec{r},t) + N_k(\vec{r})\beta_i^{(k)}\int_0^\infty dE'\,\nu_{t,k}(E')\sigma_{f,k}(E')v'n(\vec{r},E',t) \quad (2)$$

Dans un souci de clarté de l'exposé, on ne considère pas de source externe et on suppose l'existence d'un seul noyau fissile noté k_0.

Par ailleurs, on néglige la dépendance, en fonction de l'énergie du neutron incident, du nombre de neutrons émis par fission et du spectre de fission. Sous ces hypothèses, l'équation (1) se réécrit :

$$\frac{\partial n(\vec{r},E,\vec{\Omega},t)}{\partial t} = -v\vec{\Omega}.\vec{\nabla}n\left(\vec{r},E,\vec{\Omega},t\right) - v\sum_k N_k(\vec{r})\,\sigma_k(E)n\left(\vec{r},E,\vec{\Omega},t\right) \quad (3)$$

$$+\sum_k N_k(\vec{r})\int_0^\infty dE'\int_{4\pi} d\vec{\Omega}'\,\sigma_{s,k}\left(E'\to E,\vec{\Omega}'\to\vec{\Omega}\right)v'n\left(\vec{r},E',\vec{\Omega}',t\right)$$

$$+\frac{1}{4\pi}N_{k_0}(\vec{r})\nu_{p,k_0}\chi_{p,k_0}(E)\int_0^\infty dE'\,\sigma_{f,k_0}\left(E'\right)v'n(\vec{r},E',t)$$

$$+\frac{1}{4\pi}\sum_i (E)\lambda_i^{(k_0)}C_i^{(k)}(\vec{r},t)\chi_{d,i}^{(k_0)}$$

On utilise les notations simplifiées suivantes :

- $n \equiv n(\vec{r},\ E,\ \vec{\Omega},\ t)$
- $\chi_p \equiv \chi_{p,k_0}(E)$: spectre énergétique d'émission des neutrons prompts de fission.
- $\chi_{d,i} \equiv \chi_{d,i}^{(k_0)}(E)$: spectre énergétique des neutrons retardés de la famille i.
- $\beta_i \equiv \beta_i^{(k_0)}$: fraction de neutrons retardés de la famille i.
- $\lambda_i \equiv \lambda_i^{(k_0)}$: constante de décroissance de la famille i.
- $C_i \equiv C_i^{(k_0)}(\vec{r},\ t)$: concentration des précurseurs de la famille i.
- $\beta = \Sigma_i\ \beta_i$: fraction totale de neutrons retardés.
- $1-\beta$: fraction de neutrons prompts.

On définit les grandeurs suivantes :

- taux de disparition et de transfert des neutrons noté de façon simplifiée Rn :

$$Rn \equiv v\vec{\Omega}.\vec{\nabla}n\left(\vec{r},E,\vec{\Omega},t\right) + v\sum_k N_k(\vec{r})\,\sigma_k(E)n\left(\vec{r},E,\vec{\Omega},t\right) - \sum_k N_k(\vec{r})\int_0^\infty dE'\int_{4\pi} d\vec{\Omega}'\,\sigma_{s,k}\left(E'\to E,\vec{\Omega}'\to\vec{\Omega}\right)v'n\left(\vec{r},E',\vec{\Omega}',t\right)$$

- taux de production des neutrons par fission noté de façon simplifiée Fn :

$$Fn \equiv \frac{1}{4\pi}N_{k_0}(\vec{r})(\nu_{p,k_0}+\nu_{d,k_0})\int_0^\infty dE'\,\sigma_{f,k_0}(E')v'\int_{4\pi} d\vec{\Omega}\,n\left(\vec{r},E',\vec{\Omega},t\right)$$

En remarquant que le taux de production des neutrons prompts s'écrit :

$$\frac{1}{4\pi}N_{k_0}(\vec{r})\nu_{p,k_0}\chi_{p,k_0}(E)\int_0^\infty dE'\,\sigma_{f,k_0}\left(E'\right)v'n\left(\vec{r},E',t\right) = (1-\beta)\chi_p Fn$$

On réécrit les équations (3) et (2) sous la forme :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -Rn + (1-\beta)\chi_p Fn + \frac{1}{4\pi}\sum_i \chi_{d,i}\,\lambda_i C_i \quad (5)$$

$$\frac{dC_i}{dt} = -\lambda_i C_i + 4\pi\beta_i Fn \quad (6)$$

On introduit l'opérateur de production totale de neutrons:

$$Pn \equiv [1-\beta]\chi_p Fn + \sum_i \beta_i\chi_{d,i}Fn \quad (7)$$

On dérive, finalement, le système d'équations suivant :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = Pn - Rn - \sum_i \beta_i\chi_{d,i}Fn + \frac{1}{4\pi}\sum_i \chi_{d,i}\,\lambda_i C_i \quad (8)$$

$$\frac{dC_i}{dt} = 4\pi\beta_i Fn - \lambda_i C_i \quad (9)$$

Pour décrire le comportement du réacteur nucléaire uniquement en fonction du temps, on intègre les équations (8) et (9) en angle, en énergie et en espace sur tout le cœur du réacteur. Au préalable, on multiplie la seconde équation par le spectre en énergie des neutrons retardés $\chi_{d,i}$, puis les deux équations par une fonction poids à définir w.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:26 Page 117

$$\frac{\partial}{\partial t}\int\int\int w\, n\, d\vec{\Omega}dEd\vec{r} = \int\int\int w\, Pn\, d\vec{\Omega}dEd\vec{r} - \int\int\int w\, Rn\, d\vec{\Omega}dEd\vec{r} - \int\int\int w\, \beta_i \chi_{d,i} Fn\, d\vec{\Omega}dEd\vec{r} + \int\int\int w\, \frac{1}{4\pi}\sum_i \chi_{d,i}\, \lambda_i C_i\, d\vec{\Omega}dEd\vec{r} \quad (11)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\int\int\int w\, \chi_{d,i}\, C_i\, d\vec{\Omega}dEd\vec{r} = \int\int\int w\, 4\pi\beta_i \chi_{d,i}\, Fn\, d\vec{\Omega}dEd\vec{r} - \int\int\int w\, \lambda_i\, \chi_{d,i}\, C_i\, d\vec{\Omega}dEd\vec{r} \quad (12)$$

On définit, à présent, les **grandeurs cinétiques « effectives »** suivantes :

• nombre pondéré de neutrons dans le réacteur :

$$[n]_{eff} = \int\int\int w\, n\, d\vec{\Omega}dEdr$$

• nombre pondéré de précurseurs dans le réacteur :

$$[C_i]_{eff} = \frac{1}{4\pi}\int\int\int w\ \chi_{d,i}\, C_i\, d\vec{\Omega}dEdr$$

• nombre moyen de neutrons produits dans le réacteur :

$$[P]_{eff} = \frac{\int\int\int w\, Pn\, d\vec{\Omega}dEdr}{\int\int\int w\, n\, d\vec{\Omega}dEdr}$$

• fraction effective de neutrons retardés pour la famille i :

$$[\beta_i]_{eff} = \beta_i \frac{\int\int\int w\ \chi_{d,i}\, Fn\, d\vec{\Omega}dEdr}{\int\int\int w\, Pn\, d\vec{\Omega}dEdr}$$

• fraction effective de neutrons retardés :

$$[\beta]_{eff} = \sum_i [\beta_i]_{eff}$$

• nombre moyen de neutrons transférés d'un point de l'espace des phases à un autre dans le réacteur :

$$[R]_{eff} = \frac{\int\int\int w\, Rn\, d\vec{\Omega}dEdr}{\int\int\int w\, n\, d\vec{\Omega}dEdr}$$

• réactivité :

$$[\rho]_{eff} = \frac{[P]_{eff} - [R]_{eff}}{[P]_{eff}}$$

La réactivité apparaît comme la différence entre le terme de production et le terme de disparition et de transfert des neutrons normalisé par le terme de production.

• temps moyen de reproduction des neutrons dans le réacteur :

$$[\Lambda]_{eff} = \frac{1}{[P]_{eff}}$$

$[\Lambda]_{eff}$ est de l'ordre de 25 microsecondes dans un réacteur de puissance à neutrons thermiques.

Les deux équations (11) et (12) prennent alors les formes simples suivantes :

$$\frac{\partial [n]_{eff}}{\partial t} = \frac{[\rho]_{eff} - [\beta]_{eff}}{[\Lambda]_{eff}}[n]_{eff} + \sum_i \lambda_i [C_i]_{eff} \quad (13)$$

$$\frac{\partial [C_i]_{eff}}{\partial t} = \frac{[\beta_i]_{eff}}{[\Lambda]_{eff}}[n]_{eff} - \lambda_i [C_i]_{eff} \quad (14)$$

Par ailleurs, on peut montrer que la fonction poids w déduite de la résolution de l'équation adjointe de l'état critique :

$$0 = [P^+ - R^+]n_0^+ \quad (15)$$

est un choix optimal [1].

Du point de vue physique, cette pondération en angle, en énergie et en espace par la quantité adjointe n_0^+ de la densité critique n_0 signifie que tous les neutrons n'apportent pas la même contribution à la réactivité : cette contribution varie selon leur position dans l'espace des phases ; les neutrons qui naissent dans les régions où la densité neutronique est la plus élevée « pèsent » plus que ceux qui naissent en périphérie du cœur, ces derniers ayant une probabilité de fuite hors du réacteur plus élevée que les premiers.

La résolution directe des équations de cinétique spatiales (1) et (2) reste encore peu courante, en raison de son coût élevé en temps de calcul. Cependant, les puissances de calcul actuelles et futures permettent de l'envisager, tant par la voie déterministe que par la voie stochastique, comme le montrent les références [2] et [3].

Les équations (13) et (14) permettent de déterminer l'évolution temporelle, en fonction de la **réactivité**, du nombre pondéré de neutrons et de précurseurs dans le réacteur. Les quantités $[\rho]_{eff}$, $[\beta_i]_{eff}$ et $[\Lambda]_{eff}$ intervenant dans ces équations sont généralement déterminées en remplaçant dans leurs définition respectivement w et n par n_0^+ et n_0, ce qui nécessite la résolution de l'équation critique et celle de son équation adjointe.

Ces équations peuvent être établies directement dans le cadre de la **théorie de la cinétique ponctuelle**, souvent utilisée en physique des réacteurs nucléaires.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:26 Page 118

Les équations de la cinétique ponctuelle

Dans le cadre de la cinétique ponctuelle, la population neutronique est modélisée uniquement du point de vue temporel, en « moyennant » en angle, en espace et en énergie les propriétés du réacteur. Le modèle de la cinétique ponctuelle revient donc à supposer que tout le réacteur est concentré en un même point d'espace et que tous les neutrons ont le même vecteur vitesse.

L'évolution du nombre total de neutrons dépend de trois types de paramètres :

- Le facteur de multiplication effectif k_{eff} ;
- le temps de vie moyen des neutrons dans le réacteur ℓ ;
- les paramètres de neutrons retardés.

On a vu, au paragraphe établissant les équations de la cinétique spatiale (*supra*, p. 59 et 60) que les précurseurs de neutrons retardés ne sont pas traités individuellement : leurs contributions à la production de neutrons retardés sont réparties en quelques groupes ou **familles de noyaux précurseurs**. On note I ce nombre de familles. Les calculs classiques de réacteurs impliquent aujourd'hui six ou huit de ces familles, dont les caractéristiques sont, pour chacune (repérée par l'indice i, $1 \leq i \leq I$) :

- La quantité totale de neutrons retardés issus des noyaux appartenant à cette famille, notée β_i ;
- une constante de décroissance, notée λ_i (ou la vie moyenne associée, notée τ_i) rendant compte du rythme avec lequel sont produits les neutrons retardés issus de cette famille.

Ces caractéristiques, issues du lissage de mesures menées après activation de matériaux fissiles sont, dans le cas de l'uranium 235, regroupées dans le tableau 17, ci-dessous. On y trouve également, à la ligne « Valeur moyenne », les caractéristiques qu'il conviendrait d'utiliser, si l'on souhaitait réaliser un traitement de la production des neutrons retardés plus grossier, en regroupant l'ensemble des noyaux précurseurs en une seule famille.

Tableau 17

Constantes de décroissance, vies moyennes et proportions de neutrons retardés pour la fission de l'uranium 235
(données issues de JEFF3.1)

Groupes de précurseurs	λ_i (s^{-1})	$\tau_i = \frac{1}{\lambda_i}$ (s)	β_i (pcm)
1	1,247 10^{-2}	8,021 10^{1}	22
2	2,829 10^{-2}	3,535 10^{1}	102
3	4,252 10^{-2}	2,352 10^{1}	61
4	1,330 10^{-1}	7,516	131
5	2,925 10^{-1}	3,419	220
6	6,665 10^{-1}	1,500	60
7	1,635	6,117 10^{-1}	54
8	3,555	2,813 10^{-1}	15
Valeur moyenne	7,681 10^{-2}	1,302 10^{1}	665

On peut établir directement les équations de la cinétique ponctuelle en effectuant un bilan du nombre total de neutrons $n(t)$ et du nombre de précurseurs dans chaque famille $C_i(t)$.

Pendant un intervalle de temps dt, $n(t)\frac{dt}{\ell}$ neutrons disparaissent, donnant naissance par fission à, en moyenne, $n(t)\frac{dt}{\ell}k_{eff}(1-\beta)$ neutrons prompts. Dans ce même intervalle de temps, $\sum_i \lambda_i C_i(t)$ neutrons retardés naissent consécutivement à la décroissance des précurseurs.

Par ailleurs, pendant un intervalle de temps dt, $\lambda_i C_i(t)$ précurseurs de la famille i disparaissent alors que $n(t)\frac{dt}{\ell}k_{eff}\beta_i$ apparaissent.

On obtient ainsi les équations de la cinétique ponctuelle :

$$\begin{cases} \dfrac{dn(t)}{dt} = \dfrac{k_{eff}(1-\beta)-1}{\ell}n(t) + \displaystyle\sum_i \lambda_i C_i(t) \\ \dfrac{dC_i(t)}{dt} = \dfrac{k_{eff}\beta_i}{\ell}n(t) - \lambda_i C_i(t) \end{cases} \quad (16)$$

En exprimant le facteur de multiplication effectif en fonction de la réactivité ρ, $k_{eff} = \frac{1}{1-\rho}$, le système (16) se réécrit :

$$\begin{cases} \dfrac{dn(t)}{dt} = \dfrac{\rho-\beta}{\dfrac{\ell}{k_{eff}}}n(t) + \displaystyle\sum_i \lambda_i C_i(t) \\ \dfrac{dC_i(t)}{dt} = \dfrac{\beta_i}{\dfrac{\ell}{k_{eff}}}n(t) - \lambda_i C_i(t) \end{cases} \quad (17)$$

On remarque que ce système a la même forme que celui donné par les équations générales (13) et (14), les quantités effectives paramétrant ces équations, $[\rho]_{eff}$, $[\beta_i]_{eff}$ et $[\Lambda]_{eff}$, étant ici remplacées par les grandeurs ρ, β, et $\frac{\ell}{k_{eff}}$. Cette dernière grandeur, généralement notée ℓ^*, correspond au *temps de vie des neutrons dans un réacteur critique*.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:26 Page 119

En première approche, on peut considérer que le fonctionnement normal des réacteurs s'opère par succession de plages où la réactivité demeure constante (barres de contrôle, plus ou moins insérées, à des cotes maintenues pendant un certain temps).

Le système d'équations différentielles (17) est donc un système linéaire homogène à coefficients constants dont la solution est une combinaison linéaire de $(I+1)$ solutions particulières. On recherche ces solutions particulières, pour la population neutronique et pour la population des précurseurs, sous la forme :

$$\begin{cases} n_j(t) = A_j \exp(\omega_j t) \\ C_{ij}(t) = B_{ij} \exp(\omega_j t) \end{cases} \qquad 1 \le j \le I+1$$

où ω_j est un paramètre à déterminer.

La solution générale s'écrit donc :

$$\begin{cases} n(t) = \sum_{j=1}^{I+1} A_j \exp(\omega_j t) \\ C_i(t) = \sum_{j=1}^{I+1} B_{ij} \exp(\omega_j t) \end{cases}$$

On montre que les ω_j sont solution d'une équation en ω appelée « **équation de Nordheim*** » :

$$\rho = \ell^* \omega + \sum_i \frac{\beta_i \omega}{\omega + \lambda_i} \qquad (18)$$

Une fois les valeurs possibles des ω_j trouvées, la résolution du problème complet s'achève par la détermination des constantes A_j et B_{ij} à partir des conditions initiales $n(t=0)$ et $C_i(t=0)$.

Une façon pratique de procéder est de résoudre graphiquement l'équation de Nordheim. On met en évidence ses racines en traçant l'horizontale ρ dans un diagramme représentant la fonction $f(\omega)$ figurant au second membre de l'équation (18) (fig. 54).

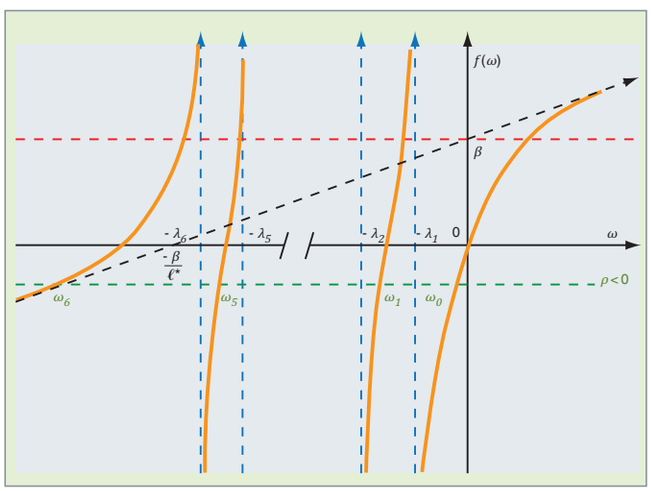


Fig. 54. Résolution graphique de l'équation de Nordheim. Cas d'une réactivité négative.

On constate, sur ce graphe, que l'on trouve toujours $(I+1)$ racines, si I est le nombre de familles de neutrons retardés. Parmi ces $(I+1)$ racines, I sont toujours négatives et correspondent à des transitoires, tandis que la dernière, du signe de la réactivité, correspond au mode dominant asymptotiquement.

Pour le cas des très grandes réactivités (qui correspondent à des conditions accidentelles), des considérations simples d'ordres de grandeur permettent d'expliciter l'expression de la plus grande racine de l'équation de Nordheim, notée ω_0. De manière approchée :

$$\omega_0 \simeq \frac{\rho - \beta}{\ell^*}$$

Cette expression peut encore s'écrire :

$$\omega_0 \simeq \frac{k_{eff}(1-\beta) - 1}{\ell}$$

où $k_{eff}\,(1-\beta)$ représente la contribution des seuls neutrons prompts au facteur de multiplication.

Cette formule montre que si $k_{eff}\,(1-\beta) > 1$ (ou $\rho > \beta$), le réacteur diverge en neutrons prompts seulement, la population de neutrons se multipliant alors avec la période :

$$T_0 \simeq \frac{\ell^*}{\rho - \beta} = \frac{\ell}{k_{eff}(1-\beta) - 1}$$

donc extrêmement rapidement, selon la loi :

$$n(t) = n_0 \exp\left(\frac{\rho - \beta}{\ell^*} t\right)$$

Le réacteur est, dans un tel cas, dit « critique prompt » et la valeur $\rho = \beta$ (β de l'ordre de 665 pcm pour l'uranium 235, d'après le tableau 17) apparaît comme une limite supérieure, au-delà de laquelle le comportement du réacteur est régi par les neutrons prompts.

En revanche, lorsque la réactivité est très petite et inférieure à β, le comportement du réacteur est décrit par :

$$\omega_0 \simeq \frac{\rho}{\tau}$$

où

$$\tau = \ell^* + \sum_i \frac{\beta_i}{\lambda_i} \simeq \sum_i \frac{\beta_i}{\lambda_i}$$

Le temps τ est caractéristique du noyau fissile et vaut de l'ordre de 0,0866 s, dans le cas de l'uranium 235.

La population de neutrons se multiplie alors avec la période :

$$T_0 \simeq \frac{\tau}{\rho} \simeq \frac{\tau}{k_{eff} - 1}$$

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:26 Page 120

selon la loi :

$$n(t) = n_0 \exp\left(\frac{\rho}{\tau} t\right)$$

Le pilotage du réacteur est donc tout à fait possible, lors de l'introduction de petites réactivités.

On peut aussi remarquer que l'arrêt complet de la réaction en chaîne n'est effectif qu'à la fin de l'émission de neutrons retardés, soit après quelques minutes.

La cinétique tridimensionnelle

La modélisation de situations incidentelles ou accidentelles d'un cœur de réacteur nécessite de prendre en compte la variation rapide de la population neutronique au sein du cœur du réacteur. L'accident enveloppe retenu pour le dimensionnement, vis-à-vis de l'évolution incontrôlée de la fission nucléaire, est l'éjection d'une **grappe de commande***. Cette éjection est provoquée par la rupture du mécanisme de commande de la grappe et est due à la différence de pression entre la cuve et l'enceinte. Elle entraîne un emballement local très violent de la fission nucléaire (quelques millisecondes), cependant limité par les contre-réactions neutroniques qui permettent l'arrêt immédiat du réacteur. On conçoit que ce type d'accident, pour être étudié avec précision, nécessite un modèle 3D de neutronique et de thermo-hydraulique associé. Les équations de la cinétique neutronique spatiale ont été présentées *supra*, p. 59 et 60.

Usuellement, on les résout sous la forme simplifiée suivante :

$$\frac{1}{v}\frac{\partial\psi(\vec{r},E,\vec{\Omega},t)}{\partial t} + \vec{\Omega}.\vec{\nabla}\psi\left(\vec{r},E,\vec{\Omega},t\right) + \Sigma(\vec{r},E,t)\psi(\vec{r},E,\vec{\Omega},t) = Q\left(\vec{r},E,\vec{\Omega},t\right) \quad t \in [t_0\ \ t_1] \tag{19}$$

avec :

$$Q\left(\vec{r},E,\vec{\Omega},t\right) = Q_s\left(\vec{r},E,\vec{\Omega},t\right) + Q_p(\vec{r},E,t) + Q_d(\vec{r},E,t)$$

$$Q_s\left(\vec{r},E,\vec{\Omega},t\right) = \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \int_0^{\infty} \Sigma_s(\vec{r},E'\to E,\vec{\Omega}.\vec{\Omega}',t)\psi\left(\vec{r},\mathrm{E}',\vec{\Omega}',t\right) dE'$$

$$Q_p(\vec{r},E,t) = \frac{1}{4\pi}\chi_p(E)\int_0^{\infty} \nu_p(\mathrm{E}')\Sigma_f\left(\vec{r},E',t\right)\phi(\vec{r},E',t)d\mathrm{E}'$$

$$Q_d(\vec{r},E,t) = \frac{1}{4\pi}\sum_i \lambda_i\ \chi_{d,i}(E)\ C_i(\vec{r},t)$$

On travaille ici avec un spectre de fission prompt moyen indépendant de l'énergie du neutron incident, un nombre moyen de neutrons prompts émis et des familles de précurseurs indépendantes du système fissile.

Après intégration de l'équation (2), la concentration $C(\vec{r},\ t)$ du précurseur i s'exprime en fonction du flux scalaire par :

$$C_i(\vec{r},t) = \mathrm{e}^{-\lambda_i(t-t_0)}C_{0i}(\vec{r},t) + \int_{t_0}^{t} \mathrm{e}^{-\lambda_i(t-s)} \int_0^{\infty} \beta_i\ \nu\Sigma_f(\vec{r},E',s)\phi(\vec{r},E',s)\ dE'ds \tag{20}$$

La résolution d'une telle équation est très coûteuse du fait qu'elle s'exprime dans un espace de dimension sept. On peut estimer les temps d'un calcul typique en supposant que l'espace est discrétisé en 10^3x10^3x10^2 points, que l'angle nécessite de l'ordre de 50 directions, que l'énergie est discrétisée en une vingtaine de groupes et que la discrétisation temporelle nécessite de l'ordre de 10^3 pas de 10^{-2}s. À cela, il faut rajouter les itérations nécessaires pour prendre en compte les contre-réactions thermo-hydrauliques. On obtient de l'ordre de 10^{11} inconnues. Chaque inconnue est couplée par un système matriciel. En estimant à 100 le taux de remplissage du système matriciel, on obtient une estimation de l'ordre de 10^{16} opérations flottantes pour une simulation cinétique tridimensionnelle.

Pour pallier ce coût important en temps de calcul, différentes approximations ont été proposées au cours des années, en fonction de la puissance disponible sur les ordinateurs.

Modèles de simplification

Le premier modèle simplificateur repose sur la discrétisation angulaire. On utilise le plus souvent un opérateur de diffusion ($-\vec{\nabla}.\mathrm{D}\vec{\nabla}$) pour lequel l'inconnue devient le flux scalaire : $\phi(\vec{r},\ E,\ t)$. Plus récemment, on a introduit l'opérateur SP_N (voir *supra*, p. 74) pour lequel l'inconnue est alors un ensemble d'harmoniques parmi lesquels le flux scalaire et le courant. À l'heure actuelle, grâce à la puissance des nouvelles machines parallèles, on peut résoudre des problèmes de cinétique en transport complet, les inconnues étant alors les flux angulaires.

Le second modèle concerne le modèle en temps. Il a conduit à de nombreuses variantes (méthodes adiabatique, quasi statique, quasi statique améliorée, quasi statique locale, quasi statique généralisée, multi-échelles, tridimensionnelle « monostep » ou « multisteps », etc.). Les approximations portent sur l'état initial ou sur le comportement dans le temps du système, ce qui peut, bien sûr, entraîner une perte en précision du modèle. L'utilisateur doit donc trouver un juste compromis pour le ratio temps/précision.

On a déjà décrit le modèle de la cinétique ponctuelle. Ce modèle ne permet d'obtenir que le comportement moyen du cœur. Il ne fournit donc pas d'informations locales en espace, ce qui le limite uniquement à la problématique du fonctionnement global du cœur et ne lui permet pas de traiter la problématique d'accidents graves.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:26 Page 121

Les premiers modèles 3D en temps, ont été développés à partir des années 60 [4, 5]. Ils s'appuient sur un principe de factorisation en espace et en temps avec une fonction de forme dépendant de l'espace et éventuellement du temps et une fonction d'amplitude dépendant du temps et éventuellement de l'espace :

$$\phi(\vec{r},\ E,\ t) = a\,(\vec{r},\ E,\ t)\ f\,(\vec{r},\ E,\ t) \qquad (21)$$

La méthode peut être vue comme une séparation des variations rapides et lentes du flux (par rapport au temps). Ainsi $a\,(\vec{r},\ E,\ t)$ est une fonction qui représente le comportement rapide en temps, et $f\,(\vec{r},\ E,\ t)$ est un flux de forme (en n/cm²/s) qui varie lentement en fonction du temps.

La méthode quasi statique (QS)

Le principe de la méthode quasi statique a été proposé par Henry en 1958. Dans ce modèle, seule l'amplitude $a\,(t)$ est calculée en fonction du temps et la forme f est conservée à sa valeur initiale $f\,(\vec{r},\ E,\ t_0)$:

$$\phi(\vec{r},\ E,\ t) = a\,(t)\ f\,(\vec{r},\ E,\ t_0)$$

L'amplitude, ne dépendant que du temps, est solution d'une équation de cinétique ponctuelle dont les coefficients s'obtiennent par projection de la forme sur une fonction de pondération qui est, de façon optimale, le flux adjoint. Le calcul de la forme peut être refait au cours du transitoire, pour un état statique donné, au prix du recalcul des coefficients de la cinétique ponctuelle.

La méthode quasi statique améliorée (IQS)

La séparation de variable effectuée dans la méthode quasi statique est une hypothèse forte. Rapidement, on la fit donc évoluer sous la forme Quasi Statique Améliorée (IQS). L'idée est d'introduire une dépendance lente en temps notée T pour la forme, tout en conservant une amplitude ponctuelle à variation rapide :

$$a\,(\vec{r},\ E,\ t) = a\,(t) \text{ et } f\,(\vec{r},\ E,\ t) = f\,(\vec{r},\ E,\ T)$$

Il faut cependant, du fait de la dépendance de f en temps, ajouter une condition de normalisation pour garantir l'unicité de la factorisation. Usuellement, dans la méthode IQS, on impose :

$$\iint \frac{1}{v}\frac{\partial f(\vec{r},E,t)}{\partial t}\phi^*(\vec{r},E,t_0)d\vec{r}\,dE\ = 0$$

Cette condition valide *a posteriori* l'hypothèse de variation lente en temps de la fonction de forme. Des fonctions de pondération autres que le flux adjoint $\phi^*(\vec{r},\ E,\ t_0)$ sont possibles. Cependant, on montre, par un raisonnement variationnel, qu'en utilisant le flux adjoint initial on minimise l'erreur sur le calcul.

On introduit donc deux échelles de discrétisation en temps, une première grossière $T \in [T_i\ T_{i+1}]$, sur laquelle on évalue la forme et une deuxième fine (subdivision de la précédente) $\Delta t_k\ \in [t_k\ t_{k+1}]$ sur laquelle on n'évalue que l'amplitude.

On résout alternativement :
- Un problème de cinétique ponctuelle donnant a en connaissant f ;
- un problème de cinétique 3D sur le pas de temps grossier donnant f en connaissant a.

La résolution se fait de la façon suivante. On considère les équations 3D où ϕ est substitué par le produit af. Pour obtenir la première équation sur l'amplitude a, on condense ces équations en espace et en énergie, après multiplication par le flux adjoint initial. La dérivée en temps du flux de forme disparaît grâce à la condition de normalisation. Pour obtenir les équations sur la forme, le traitement des équations est identique à celui d'un système complet 3D. Un terme supplémentaire apparaît pour prendre en compte la variation de l'amplitude, ce qui conduit à un système couplé avec l'amplitude qui peut être résolu par une méthode itérative de point fixe (dans la pratique une seule itération est effectuée). Pour la discrétisation en temps, la variation étant lente, on peut utiliser des schémas de bas niveau. Tous les plus grands codes de calcul de cœur (diffusion et transport) appliquent au moins une des méthodes quasi statiques (en général le quasi statique amélioré).

La méthode quasi statique améliorée est disponible par exemple pour le solveur en éléments finis MINOS du code CRONOS2 [6]. L'intégration de la méthode IQS dans le contexte MINOS a permis de bénéficier des avantages de la rapidité du solveur. Néanmoins, en pratique, pour obtenir une précision équivalente à celle d'une résolution 3D, on doit discrétiser très finement en temps [7].

La méthode quasi statique locale

Le défaut de la méthode précédente se situe dans la supposition forte d'une amplitude constante en espace et en énergie. Ainsi sur les pas de temps fins, on ne prend pas assez en compte les variations spatiales et énergétiques, liées par exemple à une forte hétérogénéité du milieu. Pour pallier ce défaut, on recherche d'autres approches reprenant en partie l'idée du quasi statique, pour son gain en temps de calcul, mais avec une condensation plus locale de la forme.

L'idée est de décomposer le domaine spatial en sous-domaines et de transposer localement les hypothèses globales du quasi statique. Sur les sous-domaines, on retrouvera donc une décomposition amplitude/forme quasi statique (amplitude ne dépendant que du temps et forme faiblement dépendante en temps). En adaptant, par exemple, ces sous domaines aux propriétés du milieu, on espère obtenir un modèle plus réaliste.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:26 Page 122

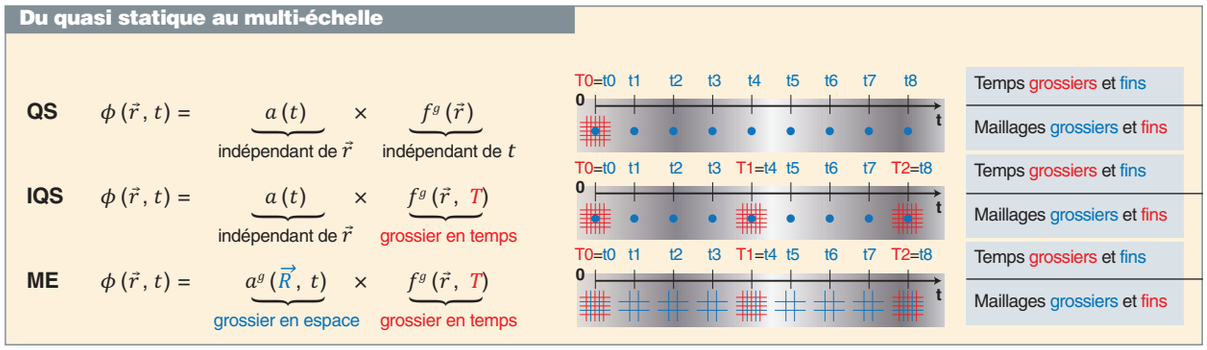


Fig. 54. Schéma de principe des modélisations en quasi statique, quasi statique amélioré et multi-échelle.

L'approche multi-échelle (ME)

On cherche ici à étendre le principe de la méthode quasi statique locale de façon à améliorer la précision du modèle tout en gardant les avantages d'une approximation locale. L'idée est de conserver la factorisation à deux échelles de temps, mais en introduisant, pour la fonction amplitude, une variation grossière en espace (sur un maillage spatial grossier, surmaillage du maillage fin de résolution) [8].

Dans cette approche, on est conduit à résoudre deux problèmes simultanés de cinétique sur des échelles différentes et en utilisant un même solveur. Dans le contexte MINOS, étudié par S. Chauvet [8], la représentation discontinue du flux facilite l'implémentation (il faut cependant imposer la continuité du courant normal). De plus, on profite pleinement des outils existants et optimisés dans l'environnement du code disponible, (MINOS par exemple). La problématique se situe essentiellement sur l'optimisation du ratio temps/précision.

Cette méthode permet, à partir des méthodes existantes, et en optimisant localement les méthodes de résolution adaptées au contexte (pas de temps grossier ou maillage spatial large) de gagner en temps de calcul par rapport à une méthode 3D complète.

La méthode de synthèse modale

La méthode de synthèse modale est une extension de la méthode quasi statique originale dans laquelle on cherche une solution sous forme d'une superposition de fonctions de forme connues (modes) et précalculées, notées f_m. Pour la méthode avec condensation en énergie, on utilise un développement sous la forme:

$$\phi(\vec{r},E,t) = \sum_m a_m(t) f_m(\vec{r},E)$$

Les équations donnant les coefficients $a_m(t)$ sont obtenues par condensation en pondérant par des fonctions poids et en intégrant sur le domaine spatial et énergétique. Il faut au préalable éliminer les équations différentielles de précurseurs grâce aux équations (20).

On obtient un système couplé d'équations intégro-différentielles sur les fonctions $a_m(t)$ qui se résout à l'aide d'une discrétisation en temps et d'un schéma « monostep » ou « multisteps ».

Pour que la solution du système existe, il faut que les différents modes soient linéairement indépendants. Un choix possible est d'utiliser les harmoniques en espace et énergie de l'opérateur statique ; le meilleur choix au sens variationnel pour les fonctions poids est alors d'utiliser les harmoniques adjointes.

La méthode de cinétique tridimensionnelle

Les premières applications des méthodes de cinétique tridimensionnelle datent des années 1970. Elles furent dans un premier temps appliquées sur une discrétisation en différences finies pour la variable d'espace (utilisation de l'opérateur de diffusion), une discrétisation multigroupe pour la variable d'énergie et un schéma « monostep »pour la variable temps. Pour les calculs tridimensionnels, la méthode aux différences finies s'est avérée trop coûteuse en mémoire et a été remplacée par des méthodes d'éléments finis qui conduisent à des matrices plus condensées et permettent une reconstruction facile à l'intérieur des mailles. On décrira cette approche tout d'abord utilisée dans le code CRONOS [6], puis dans le code APOLLO3® en SP_N (solveur MINOS [9]), et plus récemment en transport (solveur MINARET [10]) avec éléments finis discontinus (voir *supra*, p. 81).

On considère l'équation de la cinétique dans laquelle on a préalablement intégré les équations de précurseurs comme présenté plus haut et on utilise une discrétisation en énergie multigroupe.

On choisit, comme opérateur spatial, l'opérateur de diffusion et on considère un pas de temps $[T_p\ T_{p+1}]$ sur lequel on effectue une intégration en temps. L'équation de la cinétique devient, en supposant v^g constante sur un pas de temps :

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:26 Page 123

$$\frac{1}{v^g}(\phi^g_{p+1}(\vec{r}) - \phi^g_p(\vec{r})) + \int_{t_p}^{t_{p+1}} \left(\vec{\nabla}.D^g(\vec{r},t)\vec{\nabla}\phi^g(\vec{r},t) + \Sigma^g\ (\vec{r},t)\phi^g(\vec{r},t) \right)dt = \int_{t_p}^{t_{p+1}} Q^g\left(\vec{r},\vec{\Omega},t\right) dt$$

où on a posé : $\phi^g_p(\vec{r}) = \phi^g\left(\vec{r},t_p\right)$ et $\phi^g_{p+1}(\vec{r}) = \phi^g\left(\vec{r},t_{p+1}\right)$.

On fait ensuite des hypothèses sur les variations en temps des sections efficaces, du coefficient de diffusion et du flux que l'on écrit sous la forme :

$$\Sigma^g\ (\vec{r},t) = l_p(t)\ \Sigma^g_p(\vec{r}) + l_{p+1}(t)\ \Sigma^g_{p+1}(\vec{r})$$

$$D^g(\vec{r},t) = l_p(t)D^g_p(\vec{r}) + l_{p+1}(t)D^g_{p+1}(\vec{r})$$

$$\phi^g(\vec{r},t) = \omega_p(t)\phi^g_p(\vec{r}) + \omega_{p+1}(t)\phi^g_{p+1}(\vec{r})$$

avec :

$$\Sigma^g_q(\vec{r}) = \Sigma^g\left(\vec{r},t_q\right), \mathrm{D}^g_q(\vec{r}) = \mathrm{D}^g\left(\vec{r},t_q\right)$$

$$\forall\ g \in G\ ,\ q = p\ , p+1$$

Différents choix sur les fonctions $\omega_p(t)$ et $l_p(t)$ sont possibles. Les sections efficaces et le coefficient de diffusion sont supposés à variations linéaires sur le pas de temps. Pour le flux, le choix d'une variation linéaire en t conduit au schéma classique de Crank-Nikolson et le choix d'une représentation parabolique en t permet, en autres, d'obtenir le schéma implicite. Dans les simulations de transitoires accidentels, les deux schémas peuvent être utilisés successivement : le schéma de Crank-Nikolson plus précis est utilisé au cours de l'excursion de puissance et le schéma implicite plus stable est utilisé dans la phase de chute de la puissance due à la chute des barres de contrôle.

On considère ensuite une représentation spatiale sur une base d'éléments finis. Le flux est alors décomposé sous la forme :

$$\phi^g_q(\vec{r}) = \sum_i \phi^{ig}_q\ P_i(\vec{r}) \quad \forall\ g \in G\ , \qquad q = p\ , p+1$$

On remplace les $\phi^g_q(\vec{r})$ par leur représentation dans l'équation de la cinétique, intégrée sur le pas de temps. Après multiplication par des fonctions poids $P_j(\vec{r})$ (méthode de Galerkin), on intègre sur le domaine complet en espace. On obtient alors un système matriciel d'ordre $N \times G$ (N étant le nombre de nœuds dans la base d'éléments finis et G le nombre de groupes d'énergie). À chaque pas, on est conduit à résoudre un système linéaire :

$$A_{p+1}\phi^{ig}_{p+1} = A_p\phi^{ig}_p + Q^{ig}_p$$

Le système précédent est résolu par itérations en utilisant différentes méthodes d'accélération. La méthode de *« rebalancing »* par condensation sur les groupes d'énergie est très efficace ; elle est équivalente à un préconditionnement par une méthode quasi statique.

L'extension de la méthode au solveur SP_N MINOS (géométrie cartésienne et hexagonale) suit le même principe. Cependant du fait de l'approximation mixte utilisée, on introduit deux représentations différentes sur le pas de temps pour les flux pairs (scalaires) et les flux impairs (vectoriels). Le système matriciel à résoudre sur le pas de temps est écrit en termes de flux impairs. Le solveur permet, au choix de l'utilisateur, de prendre en compte le terme différentiel

$$\frac{1}{v}\frac{\partial}{\partial t}$$

de l'équation (19) uniquement sur le flux scalaire, sur le flux et le courant ou sur toutes les harmoniques.

La cinétique en transport S_N permet d'améliorer la modélisation dans les configurations fortement hétérogènes. Le code TORT-TD [11] permet d'effectuer de tels calculs pour des géométries cartésiennes et cylindriques. Le schéma en temps est un schéma implicite et la discrétisation en espace est de type différences finies. Plus récemment, la cinétique en transport S_N a été implémentée pour le solveur MINARET du code APOLLO3®. L'algorithme en temps est également « mono-step »implicite, la discrétisation spatiale utilise des éléments finis discontinus d'ordre quelconque et le maillage est déstructuré en radial et cylindrique en axial. L'utilisateur peut, au choix, prendre en compte le terme différentiel en temps

$$\frac{1}{v}\frac{\partial}{\partial t}$$

pour le flux scalaire uniquement ou pour toutes les composantes du flux angulaire. Le balayage en angle est parallélisé.

Un exemple d'application de la cinétique 3D est donné dans cette monographie dans le cas de l'accident de rupture d'un tube générateur de vapeur (voir *infra*, p. 225).

Références

[1] J. Lewins, *Nuclear Reactor Kinetics and Control*, Oxford, Pergamon Press, 1978.

[2] B. L. Sjenitzer and J. E. Hoogenboom, "A Monte Carlo method for calculation of the dynamic behaviour of nuclear reactors", *Progress in Nuclear Science and Technology*, vol. 2, pp. 716-721, 2011.

[3] B. L. Sjenitzer and J. E. Hoogenboom, "General purpose dynamic Monte Carlo with continuous energy for transient analysis", in *Proceedings PHYSOR* (Knoxville), 2012.

[4] G. R. Keepin, *Physics of Nuclear Kinetics*, Addison-Wesley, Massachussetts, 1965.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:26 Page 124

[5] A. Henry, "The application of reactor kinetics to the analysis of experiments", *Nuclear Science and Engineering*, 3, pp. 52-70, 1958.

[6] J.J. Lautard, S. Loubière and C. Fedon-Magnaud, "CRONOS a Modular Computational System for Neutronic Core Calculations", *Specialist IAEA meeting, Advanced Calculational Methods for Power Reactors*, Cadarache, France, 1990.

[7] M. Dahmani, A.M. Baudron, J.J. Lautard and L. Erradi, "Application of the nodal mixed dual technique of spatial reactor kinetics using the improved quasi static method", *Proc. ANS Topical Mtg., Mathematics and Computation, Reactor Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications*, vol. 1, Madrid, Spain, 1999.

[8] S. Chauvet, A. Nachaouia, A.M. Baudron and J.J Lautard, "A Multi-Scale Quasi-static Method for the Neutronic Kinetics", *International Conference on the Physics of Reactors*, Casino-Kursaal Conference Center, Interlaken, Switzerland, September 14-19, 2008.

[9] D. Schneider, J.C. Le Pallec, A.M. Baudron "Mixed dual finite element method for the solution of the 3D kinetic simplified PN transport equations", *Nuclear Mathematical and Computational Sciences*, Gatlinburg, Tennessee, April 6-11, 2003.

[10] A.M. Baudron, J.J. Lautard, Y. Maday, and O. Mula, "Towards a time-dependent neutron transport parallel solver" submitted to Proc SNA/MC conf. Paris, 2013.

[11] A. Seubert, A. Sureda, J. Bader, J. Lapins, M. Buck, E. Laurien, "The 3-D time-dependent transport code TORT-TD and its coupling with the 3D thermal-hydraulic code ATTICA3D for HTGR applications", *Nuclear Engineering and Design*, 251, pp. 173-180, 2012.

Anne-Marie Baudron, Patrick Blanc-Tranchant, Mireille Coste-Delclaux, Cheikh M. Diop, Jean-Jacques Lautard et Anne Nicolas
Département de modélisation des systèmes et structures

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:26 Page 125

Les codes de calcul de la neutronique et le calcul haute performance

Les études réalisées par les physiciens des réacteurs nécessitent d'accéder aux grandeurs physiques d'intérêt telles que la puissance du réacteur, les flux de particules, les concentrations des nucléides... Pour cela, il faut résoudre les équations qui gouvernent la propagation des neutrons dans l'espace et dans le temps *(équation de Boltzmann)* et celles qui régissent l'évolution temporelle des concentrations des nucléides présents et formés dans les différents matériaux composant le combustible et l'ensemble des structures du réacteur *(équations de Bateman généralisées)* (voir *supra*, p. 45-49).

La *simulation* numérique met en œuvre des outils de calcul qui résolvent les équations précitées. Ces outils reposent sur :

- Des *formalismes physico-mathématiques* qui décrivent les phénomènes physiques étudiés ;
- des *modélisations*, c'est-à-dire des descriptions du système physique et des phénomènes qui s'y déroulent à partir d'hypothèses pertinentes qui rendent les calculs et leur optimisation possibles ;
- des *techniques numériques* qui traitent les formalismes physico-mathématiques dans le cadre des modélisations définies ;
- l'*informatique* qui permet de mettre en œuvre sur les ordinateurs les algorithmes associés aux techniques numériques choisies.

Deux grandes classes d'approches algorithmiques existent pour résoudre l'équation de Boltzmann : les approches dites « déterministes » et les approches dites « stochastiques » ou « probabilistes ». Deux familles correspondantes de codes de calcul ont donc été développées.

- Les *codes déterministes* sont les outils qui sont usuellement employés pour réaliser les calculs de réacteurs en fonctionnement, en les couplant, quand nécessaire, aux codes de calculs de thermohydraulique ou de thermomécanique. L'équation de Boltzmann est résolue soit sous sa forme intégrale, soit sous sa forme intégro-différentielle. Les principales méthodes de résolution et les modèles utilisés sont détaillés *supra*, p. 61-86.
- Les codes fondés sur la *méthode de Monte-Carlo* qui résout l'équation de Boltzmann en partant de sa forme intégrale (voir *supra*, p. 89-106). Cette méthode est considérée comme la voie de calcul de référence.

À une modélisation donnée pour calculer un réacteur nucléaire (flux de particules, concentrations isotopiques, facteur de multiplication effectif, taux de réaction divers…), avec un compromis temps de calcul / précision fixé, correspond un choix portant sur différentes options offertes concernant :

- La représentation des données nucléaires ;
- la finesse de la discrétisation en espace, en énergie et en temps ;

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:26 Page 126

- les découplages de phénomènes physiques ;
- la voie de calcul : déterministe ou stochastique ;
- pour la voie déterministe, la méthode de résolution adoptée (méthode des caractéristiques, des possibilités de collision, méthodes nodales…) ;
- la description de l'anisotropie ;
- l'enchaînement de séquences de calcul ;
- …

Cet ensemble d'options dédiées au calcul d'un type de réacteur donné, avec un (ou des) objectif(s) précis (conception, validation d'outils, analyse de situations accidentelles…) est nommé **« schéma de calcul »** dont la notion est illustrée dansle chapitre intitulé « Le calcul neutronique des réacteurs », p. 193-213. Dans la pratique, un schéma de calcul est exécuté *via* des instructions spécifiques écrites dans un langage informatique de haut niveau appelé **« langage de commande »**. Ces instructions particulières qui spécifient les options de calcul choisies et les séquences de calcul à appliquer sont « encapsulées » dans des ensembles aisément maniables par les utilisateurs appelés **« procédures de calcul »**.

En règle générale, les **outils de calcul** utilisés pour une étude donnée se réfèrent à un ensemble cohérent, souvent appelé **« formulaire de calcul »**, qui comporte :

- Le (ou les) **logiciel(s) [ou codes] de calcul** ;
- les **données physiques de base** (bibliothèques de sections efficaces…) requises pour l'exécution du ou des logiciels ;
- les **schémas de calcul** et les **procédures de calcul** correspondantes ;
- le **dossier de vérification, validation et qualification** (expériences, *benchmarks*…), élément de démonstration de la capacité des outils de calcul utilisés à bien calculer ;
- la **documentation** associée aux logiciels, procédures, bibliothèques utilisés (notice d'utilisation, notice de principe, notice d'identification, notice descriptive du contenu des bibliothèques…).

Les limites d'utilisation, les biais et incertitudes du formulaire sont évalués et transmis à l'utilisateur. Par exemple, les formulaires NARVAL et HORUS 3D, décrits plus loin (p. 143-147), sont dédiés respectivement au calcul des réacteurs de propulsion nucléaire et au calcul du réacteur Jules Horowitz (RJH). Ils sont constitués : des codes de calcul APOLLO2 pour le calcul des bibliothèques de sections efficaces multiparamétrées, CRONOS2 pour le calcul de cœur 3D, TRIPOLI-4® pour le calcul de référence, DARWIN2 pour le calcul d'évolution, de bibliothèques de données nucléaires de base référencées, d'options de calcul validées et documentées, l'ensemble étant utilisable sur un domaine de qualification donné (voir *infra*, p. 165-182).

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:26 Page 127

Les principaux codes de calcul

Le chapitre consacré à la démarche du neutronicien a montré que pour des raisons de taille mémoire et de temps de calcul, des discrétisations adaptées et des découplages de phénomènes physiques sont mis en place pour la modélisation des réacteurs. Il a été indiqué que le calcul déterministe d'un réacteur était scindé en deux parties : la première traite la résolution détaillée de l'équation de Boltzmann, tant en espace qu'en énergie, sur une petite zone du cœur (un assemblage, un motif de quelques assemblages…). Cette étape permet de disposer de constantes homogénéisées en espace et condensées en énergie qui sont utilisées comme coefficients de l'équation de Boltzmann ou de la diffusion, pour la seconde partie du calcul. Cette dernière consiste à résoudre ces équations sur le cœur complet du réacteur, habituellement à trois dimensions, en retenant des maillages spatiaux et énergétiques moins détaillés que dans la première étape.

À l'origine, les codes de calcul étaient dédiés à l'une ou l'autre de ces étapes. Les codes actuellement utilisés portent encore la marque de cette division. La première étape des calculs est habituellement appelée **« calcul spectral* »** ou **« calcul de réseau* »**, alors que la seconde porte le nom de **« calcul de cœur* »** (voir *supra*, p. 51-54 et *infra*, p. 193-213). Dans les deux cas, les équations de Boltzmann (et de la diffusion) et de Bateman sont résolues en faisant appel à des techniques différentes liées aux problèmes à résoudre (voir chapitres précédents).

Les codes de calculs succinctement décrits ici sont :

- Le code de réseau **APOLLO2*** et le code de cœur **CRONOS2*** (utilisés essentiellement pour les réacteurs thermiques) ;
- le code d'évolution **DARWIN2*** ;
- le formulaire **ERANOS*** (dédié aux réacteurs à neutrons rapides) ;
- la nouvelle plate-forme multifilière : **APOLLO3®*** et **MENDEL*** ;
- le code de transport Monte-Carlo **TRIPOLI-4®***.

Quelques codes de calcul dits « simplifiés » sont également évoqués à la fin de cette revue.

Ces codes de calcul sont développés dans un cadre de partenariat avec les acteurs français du nucléaire. Ils bénéficient d'améliorations continues *via* les programmes de R&D et les diverses thèses de doctorat réalisées dans ce cadre.

APOLLO2

APOLLO2 [1, 2] est un code de calcul spectral multigroupe à deux dimensions résolvant l'équation du transport des neutrons en faisant appel à différentes méthodes :

- La méthode des *probabilités de collision* (exactes et selon une formulation approchée dite « multicellule ») [voir *supra*, p. 84] ;
- les *méthodes nodales en espace et S_N en angle, pour des géométries cartésiennes* (voir *supra*, p. 72-74) ;
- la *méthode des caractéristiques* (MOC), cette dernière étant disponible (voir *supra*, p. 82-85), pour des géométries quelconques, qui sont décrites par l'intermédiaire d'une interface homme-machine (IHM) appelée « SILÈNE » [3].

Il est possible de combiner les différentes méthodes de calcul de flux entre elles pour aboutir à une solution de qualité en un temps de calcul raisonnable.

Le développement de la méthode des caractéristiques, joint à des avancées algorithmiques et numériques, a permis de faire avec APOLLO2 des progrès notables en **physique des cœurs***, par la réalisation de calculs de cœur complet à deux dimensions (2D) avec une description géométrique exacte, sans passer par des phases d'homogénéisation.

APOLLO2 peut être utilisé avec n'importe quel découpage en énergie des sections efficaces : il existe une bibliothèque à environ 12 000 groupes d'énergie qui permet de réaliser des calculs de référence ; les calculs usuels sont effectués à environ 300 groupes d'énergie. La méthode de calcul de l'autoprotection des noyaux qui y est implémentée (voir *infra*, p. 65-72) est à la fois précise et originale ; c'est l'un des points forts du code. Elle est, en effet, fondée sur une *double équivalence en espace et en énergie* et sur l'utilisation de sections efficaces représentées sous forme de **tables de probabilité***. Le traitement exact des mélanges de noyaux est à souligner.

APOLLO2 effectue également des calculs d'évolution du combustible.

Le code est essentiellement utilisé pour calculer les réacteurs à spectre thermique ou épithermique ; il a été validé sur un grand nombre d'expériences critiques, dont celles réalisées

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:26 Page 128

dans le réacteur ÉOLE. Son domaine de validation couvre l'utilisation du combustible MOx et UOx, l'emploi de divers absorbants et poisons neutroniques **(B_4C, gadolinium, AIC*…)**. Après avoir été largement utilisé avec une **bibliothèque*** de sections efficaces issue de l'évaluation de données nucléaires JEF-2.2, il est maintenant associé à la nouvelle bibliothèque issue de l'évaluation de données nucléaires JEFF-3 (voir *supra*, p. 21-37). L'emploi de l'interface SILÈNE permet à l'utilisateur de produire des données de modélisation géométrique cohérentes pour APOLLO2 et pour le code de Monte-Carlo TRIPOLI-4®, ce qui conduit à réaliser de façon sûre, la validation des calculs.

La majeure partie des utilisations d'APOLLO2 vise à réaliser des bibliothèques multiparamétrées de sections efficaces homogénéisées en espace et condensées en énergie qui sont utilisées comme données d'entrée pour des calculs de cœur. APOLLO2 est le code spectral de tous les acteurs du nucléaire français (EDF, AREVA-NP, CEA). Il est aussi le code de réseau du projet européen NURISP (www.nurisp.eu/www/nurisp/index.php). Il fait, enfin, partie du *formulaire de criticité*

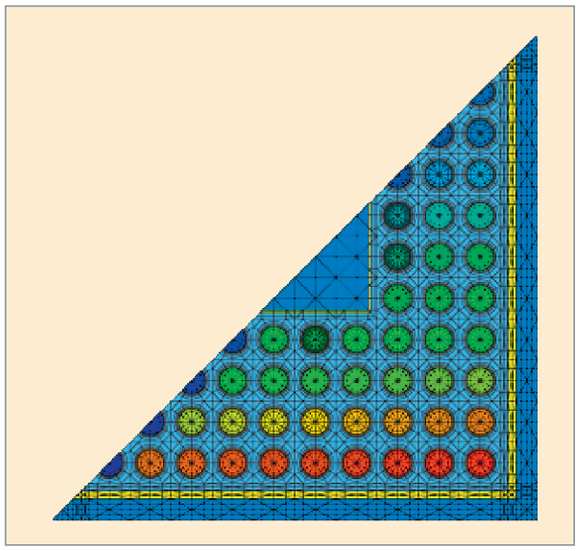


Fig. 55. APOLLO2, *benchmark* pour un assemblage BWR de type ATRIUM, demi-assemblage [4].

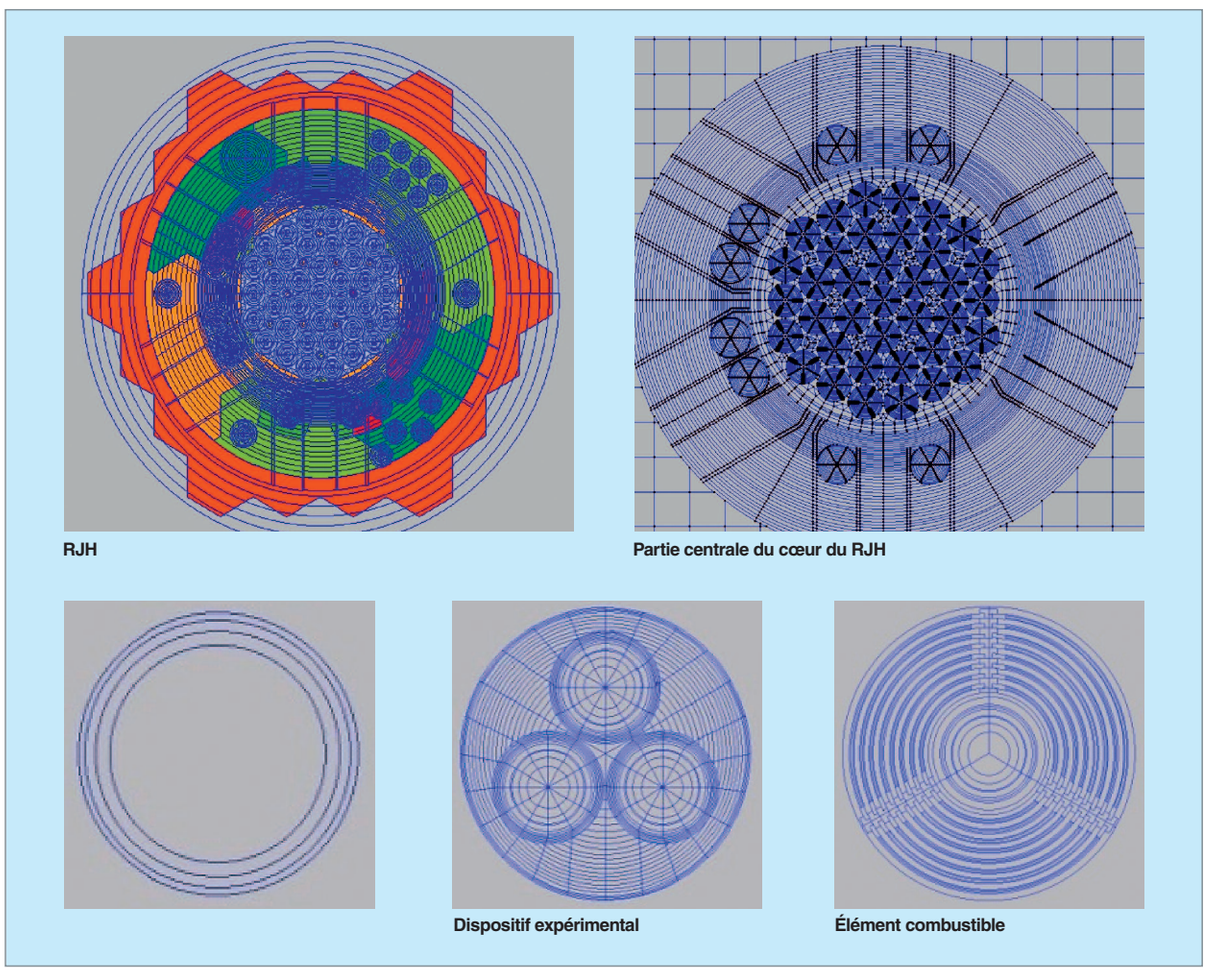
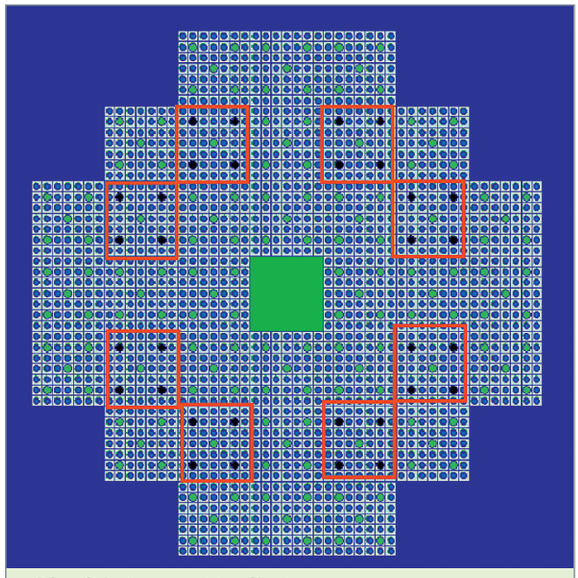
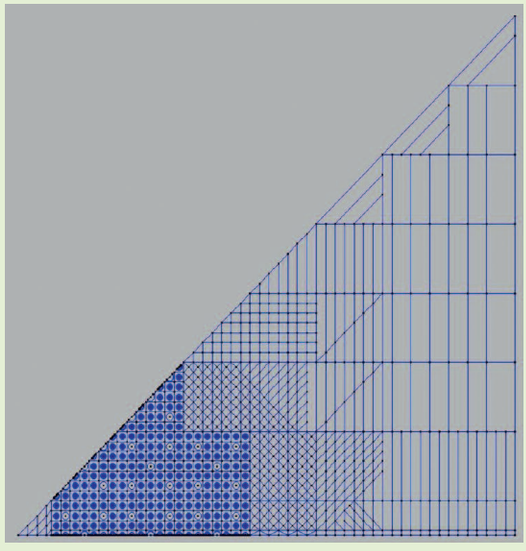


Fig. 56. APOLLO2, calculs pour le réacteur Jules Horowitz (RJH).

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:26 Page 129



Géométrie du cœur et du réflecteur



Maillage du cœur et du réflecteur

Fig. 57. APOLLO2, conception d'un réacteur expérimental.

CRISTAL (voir *infra*, p. 242) et du *formulaire de calcul de cycle* DARWIN (voir page suivante). Des modules d'édition, de condensation, d'homogénéisation, des fonctionnalités de reprise de calcul, d'archivage de résultats existent en grand nombre dans APOLLO2.

Les illustrations (fig. 55, 56 et 57) sont issues de calculs APOLLO2 réalisés dans différents cadres d'études. Elles montrent, sur l'exemple de réacteurs expérimentaux, les capacités de modélisation géométrique et les possibilités de raffinement de maillage offertes par le code APOLLO2.

CRONOS2

L'objectif du code CRONOS2 [5] [6] est le calcul des cœurs de réacteurs à **3D***, pour obtenir la réactivité, les nappes de puissance, les efficacités des absorbants, le comportement du cœur en évolution, en situation normale ou accidentelle…

CRONOS2 est un code multifilière : rien dans son organisation ou sa structure ne préjuge du type de réacteur à calculer. De ce fait, des schémas de calcul utilisant CRONOS2 ont été réalisés pour de très nombreux réacteurs : cœurs de réacteurs à plaques, cœurs de réacteurs à haute température (RHT), réacteurs à eau sous pression (REP, VVER), réacteurs à eau bouillante (REB), réacteur expérimental Jules Horowitz (RJH), réacteurs de recherche divers.

Alimenté par des *données neutroniques* provenant, par exemple, du code spectral APOLLO2, il résout soit l'équation du transport des neutrons, soit une version de cette équation dite de « *transport simplifié* SP_N (voir *supra*, p. 74) », soit l'équation de la diffusion. Ces *données neutroniques* sont des sections efficaces homogénéisées en espace et condensées en énergie, selon des maillages choisis par l'utilisateur. CRONOS2 permet de traiter l'évolution du combustible et, si nécessaire, des absorbants. Les chaînes d'évolution décrites sont quelconques et dépendent uniquement des bibliothèques, initialement réalisées dans APOLLO2, qui contiennent les sections efficaces des nucléides à traiter explicitement en évolution (noyaux lourds, produits de fission ou absorbants…).

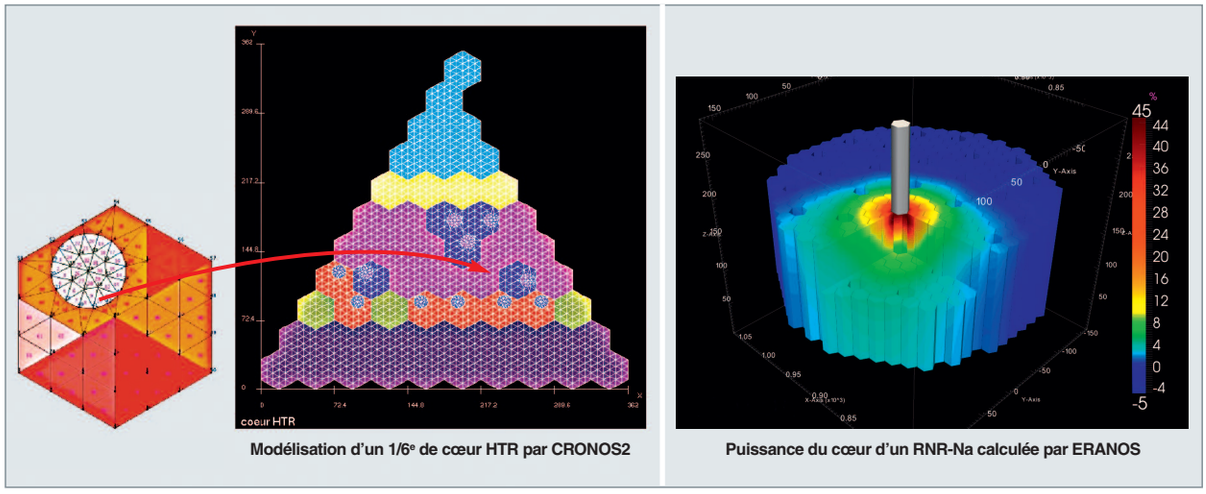
Les méthodes de calcul de flux disponibles dans CRONOS2 sont les méthodes nodales, les **éléments finis*** de Lagrange, **mixtes*** et **isoparamétriques***, les différences finies, décrites *supra*, p. 61-86.

CRONOS2 possède un modèle de thermohydraulique simplifié permettant de calculer les situations de fonctionnement normal et éventuellement incidentel.

Les types de géométries utilisables dans le code CRONOS2 sont les géométries cartésiennes ou hexagonales, qui correspondent à l'immense majorité des réacteurs existants. La description usuelle des cœurs par assemblages homogénéisés peut se révéler insuffisante. De récents développements donnant au code la capacité de traiter des éléments finis isoparamétriques ont ouvert des possibilités de raffinement de maillage pour modéliser des cœurs complexes, comme illustré ci-après pour un sixième de cœur RHT (en anglais HTR : *High Temperature Reactor*), et pour le cœur du RJH.

CRONOS2 est utilisé pour réaliser un grand nombre d'études (tant pour l'analyse que pour la conception) et d'expertises. En situations incidentelles ou accidentelles, il peut être couplé avec des codes de thermohydraulique et des codes systèmes (voir *infra*, p. 215-226). Il fait partie, au même titre

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:26 Page 130



Modélisation d'un 1/6e de cœur HTR par CRONOS2

Puissance du cœur d'un RNR-Na calculée par ERANOS

Fig. 58. Deux modélisations de cœurs de réacteur (à gauche, maillage d'1/6e de cœur HTR, à droite, remontée d'une barre de contrôle excentrée d'un cœur à faible vidange (CFV) induisant une augmentation locale de puissance de 45%).

qu'APOLLO2, de formulaires de calcul des réacteurs nucléaires, parmi lesquels on peut citer :

- NARVAL, pour la propulsion navale ;
- HORUS3D, pour le réacteur Jules Horowitz ;
- ANUBIS, destiné aux calculs d'exploitation du réacteur OSIRIS ;
- NEPHTIS, pour le calcul des réacteurs à haute température.

ERANOS

Le domaine d'application du système ERANOS [7] est celui des réacteurs à neutrons rapides, depuis les RNR « classiques » jusqu'aux réacteurs innovants de Génération IV.

Les bibliothèques de données nucléaires d'ERANOS sont actuellement fondées sur les données évaluées JEF-2.2, ainsi que sur celles issues de JEFF-3.1.1. Une bibliothèque à maillage fin en énergie (1 968 groupes) contient les noyaux principaux. Deux autres bibliothèques comportent l'ensemble des corps disponibles dans des maillages plus larges. Cet ensemble dépend de l'application envisagée (calcul de la partie rapide du spectre, de la partie thermique, calculs de protection). À la bibliothèque JEFF-2.2 correspond également une version ajustée dite ERALIB1 qui prend en compte le retour d'expérience à travers un processus d'ajustement statistique. Ce retour d'expérience est fondé sur près de 400 valeurs mesurées en maquettes critiques.

Les calculs de cellule ou de réseau sont réalisés par le code ECCO [8], inclus dans ERANOS, dans lequel l'équation du transport des neutrons est résolue au moyen de la méthode des probabilités de collision. L'autoprotection des résonances est fondée sur une méthode dite « des sous-groupes », avec la possibilité de traiter le ralentissement des neutrons avec un maillage fin en énergie (1 968 groupes), ce qui permet de réaliser des calculs de référence.

Le calcul de cœur est réalisé en résolvant l'équation de la diffusion ou du transport par différentes méthodes (uniquement S_N pour le transport) et avec différentes descriptions géométriques : 2D, 3D, géométries RZ, rectangulaire ou hexagonale.

ERANOS réalise aussi des calculs d'évolution.

Le calcul de sensibilités, d'incertitudes, de paramètres cinétiques est facilité par un grand nombre de fonctionnalités fondées sur la théorie des perturbations. Enfin, il existe des modules de calcul destinés à décrire le fonctionnement du réacteur (chargement, déchargement, gestion…), ainsi que de nombreuses possibilités d'édition des grandeurs manipulées dans le code.

DARWIN

DARWIN [9, 10] est le formulaire de calcul de la radioactivité dédié aux études portant sur l'ensemble du cycle du combustible, en cœur et hors cœur (fabrication, séjour en réacteur, stockage en piscine, transport, recyclage, stockage géologique…), ainsi qu'aux études de sûreté, toutes filières considérées. Il répond aux principaux problèmes posés par le cycle du combustible (comme par exemple, le contrôle des quantités de matières radioactives, l'évacuation de la puissance résiduelle, la protection contre les rayonnements, la détermination du niveau de contamination), par le calcul d'un ensemble de grandeurs physiques associées aux phénomènes de la radioactivité.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:26 Page 131

La grandeur fondamentale calculée est la concentration de chaque nucléide obtenue par la résolution des équations différentielles de Bateman généralisées (voir *supra*, p. 49 et p. 107-113).

Les autres grandeurs physiques déterminées par DARWIN sont les masses (bilan matière), les activités, les puissances résiduelles partielles (α, β, γ, neutrons) et totale, les sources des rayonnements émis, les radiotoxicités ; elles sont déduites des concentrations calculées.

DARWIN identifie et quantifie toutes les voies de formation d'un nucléide donné.

Les chaînes de filiations traitées correspondent principalement aux grandes familles de nucléides intéressant la physique des réacteurs nucléaires : les produits de fission, les noyaux lourds, les produits d'activation et, accessoirement, des produits de spallation. En fonction des applications, elles peuvent être complètes ou simplifiées.

Selon les études effectuées, les données d'entrée neutroniques sont issues de calculs de transport exécutés en amont, au moyen notamment d'APOLLO2, d'ÉRANOS ou de TRIPOLI-4®.

La nouvelle plate-forme : APOLLO3® et MENDEL

Le cycle de vie des codes de calcul pour les réacteurs nucléaires est d'une quarantaine d'années dont une période de pleine utilisation d'environ vingt ans : APOLLO2 et CRONOS2 ont été développés, en partant de la génération précédente (APOLLO1 et CRONOS1), depuis 1985. Or, si des développements nouveaux et novateurs ont été intégrés de façon continue dans ces outils, force est de constater que leur organisation interne (désignée par le terme d'« architecture logicielle ») devient, au fil du temps, inadaptée à traiter de façon aisée des configurations plus complexes. De surcroît, l'architecture des ordinateurs et la puissance des processeurs progressent considérablement, ce qui rend possible des calculs qui pouvaient être considérés comme utopiques au moment de la mise en chantier de ces codes.

Des raisons autres que celles-ci conduisent aussi les équipes en charge du développement des codes à passer à une nouvelle génération : les défis associés à la modélisation de nouvelles filières de réacteurs nucléaires, avec des cœurs très hétérogènes, des combustibles innovants, des géométries très diverses. Ainsi, les exigences formulées par les concepteurs des réacteurs de la 4e génération sont très stimulantes et structurantes, donnant des objectifs nouveaux à la R&D. Bien entendu, les concepteurs et physiciens des réacteurs nucléaires ne sont pas les seuls à être créatifs : les numériciens et physiciens produisent des modèles et des algorithmes innovants. Certains ont pu être mis en œuvre dans la génération actuelle de codes de calcul : par exemple, les nombreuses méthodes d'accélération des calculs de flux, le modèle d'autoprotection permettant le traitement rigoureux de mélanges de noyaux résonnants. D'autres, comme le passage à trois dimensions du code spectral, ou les échanges simples et naturels avec les calculs de Monte-Carlo, nécessitent de redéfinir l'architecture des codes pour être aisément réalisés. Les outils destinés aux activités d'évaluation et de traitement des données nucléaires, qui sont les données d'entrée clés des codes de neutronique, sont également soumis à des impératifs similaires de rénovation et d'innovation.

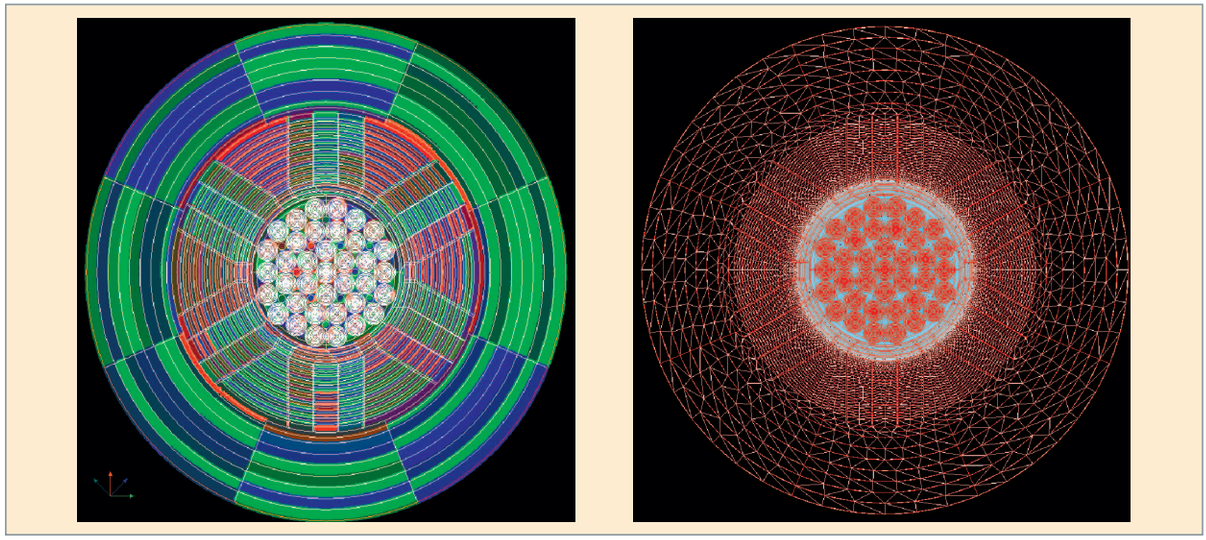


Fig. 59. APOLLO3®. Réacteur Jules Horowitz : calculs avec le solveur MINOS (solveur SP_N en maillage cartésien, figure de gauche) et le solveur MINARET (solveur diffusion en maillage « déstructuré », figure de droite) [11]

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:26 Page 132

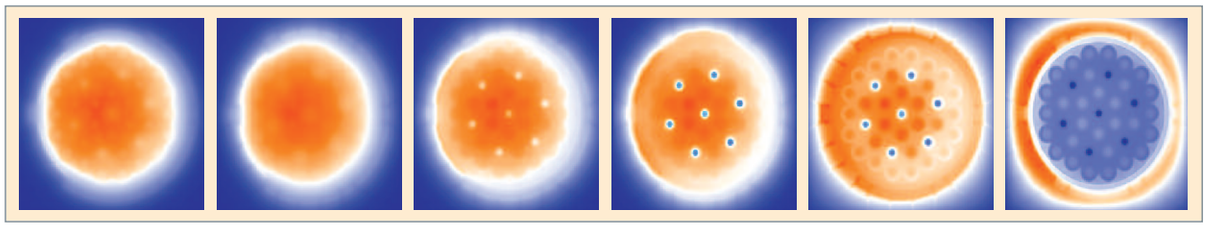


Fig. 60. APOLLO3®, distribution de flux, en fonction de l'énergie des neutrons dans le réacteur Jules Horowitz (par ordre d'énergies de neutrons décroissantes) [11].

Dans une démarche de rationalisation, la volonté d'unifier les outils dédiés au calcul des différentes filières de réacteurs nucléaires guide également l'élaboration de nouveaux codes de neutronique. C'est ainsi qu'APOLLO3® est le nouveau logiciel multi-filière en développement, offrant la particularité d'une organisation unique pour les parties « cœur » et « code spectral ». De nouvelles fonctionnalités s'y ajoutent, comme le calcul sur des maillages spatiaux déstructurés. Une première version d'APOLLO3® a été livrée aux utilisateurs en décembre 2012.

Un autre challenge pour APOLLO3® est la réalisation de calculs 3D généralisés avec une description exacte de la géométrie. Cela passe donc par l'exploitation de manière optimale des nouvelles architectures informatiques (calculateurs parallèles, co-processeurs… voir *infra*, p. 149-161) permettant de diminuer significativement les temps de calcul et d'utiliser les tailles mémoires nécessaires. Cela conduit à la réalisation des calculs en une seule étape, ce qui constitue un des objectifs « clés » du développement des codes de neutronique.

Le code APOLLO3® a été exécuté sur le calculateur **TERA100** du CEA, en mode parallèle, sur 33 000 cœurs de calcul, pour réaliser des calculs d'un cœur de réacteur refroidi au sodium. La démonstration a ainsi été faite de la possibilité d'effectuer en quelques heures des études qui auraient requis plusieurs mois sur les architectures conventionnelles.

L'évolution du combustible, que ce soit pour les calculs de cœur ou pour d'autres finalités (calculs de puissance résiduelle et d'activation, par exemple), est traitée par le code **MENDEL***. Celui-ci peut être utilisé de façon autonome ou être partagé par APOLLO3® et TRIPOLI-4®. Comparativement à son prédécesseur DARWIN, MENDEL a été restructuré, en particulier en ce qui concerne l'organisation des entrées (données nucléaires). Une des avancées de MENDEL réside aussi dans sa capacité à déterminer des incertitudes, le cas échéant en lien avec les modèles d'analyse statistique, en particulier via la plateforme URANIE [13].

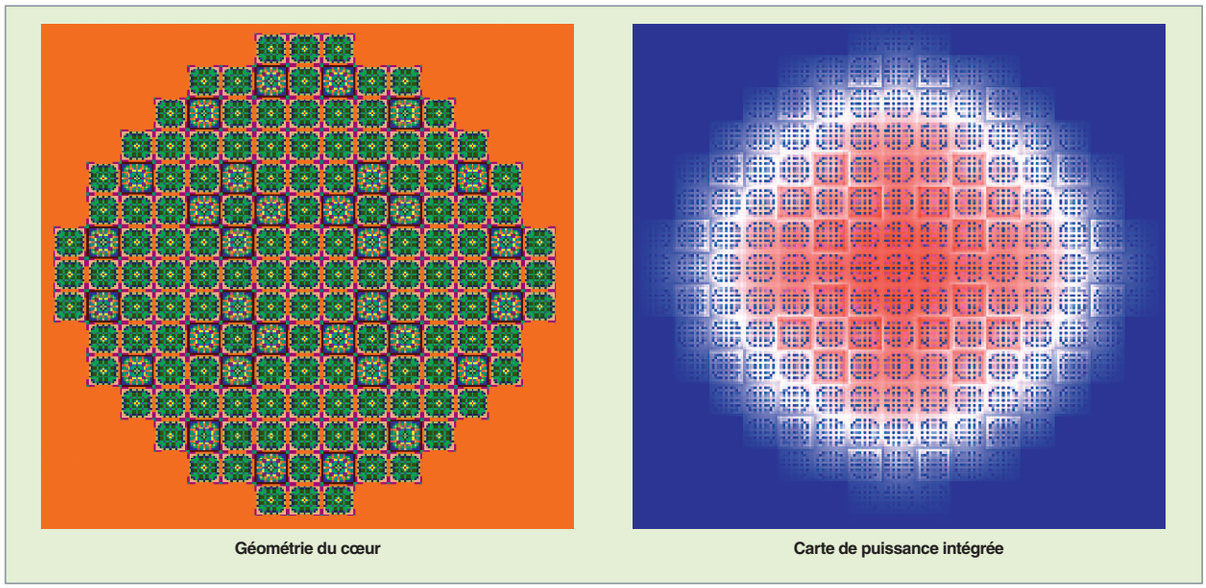


Fig. 61. APOLLO3®, réacteur à eau sous pression : calcul 3D hétérogène en transport SP_N. À gauche : géométrie du cœur. À droite : carte de puissance intégrée [12].

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:26 Page 133

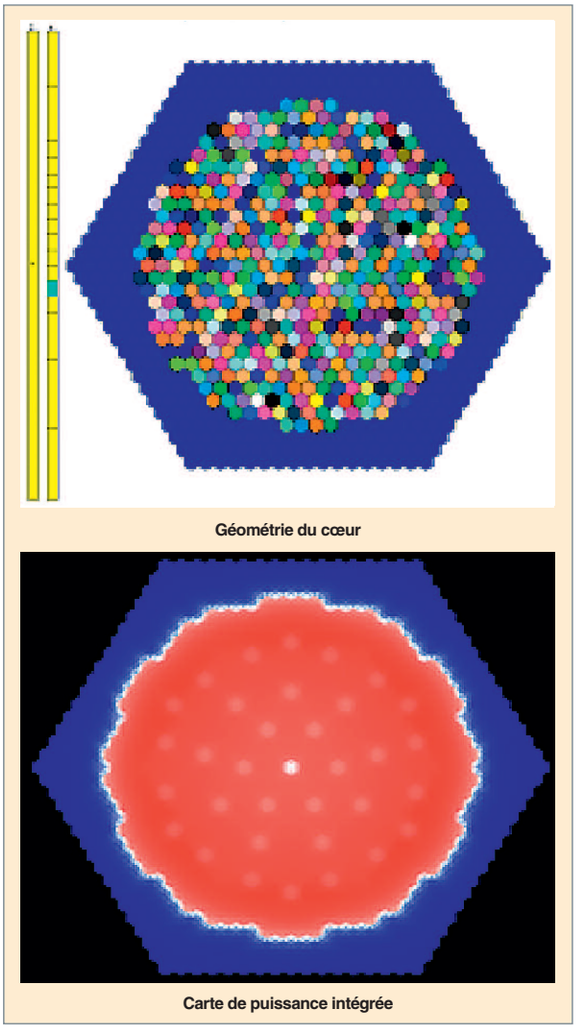


Fig. 62. APOLLO3®, réacteur à neutrons rapides refroidi au sodium : calcul 3D hétérogène en transport S_N.
En haut : géométrie du cœur. En bas : carte de puissance intégrée.

Le code Monte-Carlo TRIPOLI-4®

Le CEA développe la famille de codes TRIPOLI (TRIdimensionnel POLYcinétique) depuis les années 60. TRIPOLI-4® en représente la quatrième génération dont le développement novateur en langage C++ remonte au début des années 90 [14, 15].

TRIPOLI-4® résout l'équation du transport des neutrons et des photons par la méthode de Monte-Carlo (voir *infra*, p. 89-106) dans des géométries 3D, avec la représentation ponctuelle – ou « continue » – en énergie des sections efficaces des réactions nucléaires justifiant l'appellation « code à énergie continue ». Ses domaines d'application privilégiés sont la **physique du cœur*** (résolution du problème critique, détermination de la distribution de puissance), la **criticité*** (résolution du problème critique, sous critique à source), la **radioprotection*** (résolution d'un problème à source fixe). TRIPOLI-4® effectue le transport couplé des neutrons et des photons, ceux-ci résultant des réactions nucléaires induites par les neutrons.

Des fonctionnalités spécifiques, comme le traitement de la cascade électromagnétique (transport couplé électron-positon-photon), ont été implémentées, visant à étendre son champ d'utilisation à l'instrumentation nucléaire et aux applications médicales.

Il dispose de l'ensemble des fonctionnalités qu'un code généraliste à l'état de l'art propose à ses utilisateurs [16]. Il est disponible depuis 2004 auprès de la banque de données de l'**OCDE/AEN*** [17] et est utilisé par les industriels du nucléaire.

Les types de particules couramment simulées sont les neutrons et les photons d'énergie inférieure à 20 MeV. Les sections efficaces employées sont issues d'évaluations internationales au format ENDF-6 : JEF-2.2, JEFF-3, ENDF/B-VI et B-VII, JENDL-3.3, etc. Les sections efficaces ponctuelles en énergie sont utilisées au format « PENDF » directement issu du traitement de l'évaluation considérée (voir *supra*, p. 31-37).

Dans le code, les descriptions géométriques se font de façon native, aussi bien par définition de surfaces qu'en mode combinatoire de volumes. D'autres modes de description existent, en particulier par la « librairie » ROOT [18]. L'outil ROOT, développé et utilisé pour le dépouillement des expériences du CERN, peut être, en effet, couplé à TRIPOLI-4®, offrant ainsi à l'utilisateur de nouvelles formes géométriques et de puissantes fonctionnalités de pré- et post-traitement.

Les sources neutroniques et photoniques peuvent être décrites de manière quelconque, en espace, énergie, angle, mais aussi temps. Les scores possibles sont les flux de particules et les taux de réactions qui en dérivent, les courants, les dépôts d'énergie, les **dpa***, les **pka***, les productions de gaz, les débits de dose, ainsi que le k_{eff} et le β_{eff}. Des tests statistiques sont réalisés pour garantir à l'utilisateur une convergence correcte.

Plusieurs méthodes de réduction de variance existent pour optimiser les codes Monte-Carlo. Comme leur nom l'indique, à temps de calcul fixé et à résultat final (moyenne des **scores***) identique, elles permettent d'atteindre des variances des scores plus faibles, gage d'une meilleure précision. Dans les simulations de radioprotection, ces méthodes sont souvent indispensables pour amener les particules dans les zones d'intérêt.

Afin de répondre à ces problèmes de radioprotection, TRIPOLI-4® dispose de techniques performantes et automatiques de réduction de la variance (par exemple, attracteurs de particules vers les parties d'intérêt dans l'espace des phases). Il est également doté d'une fonctionnalité de calcul de perturbation mettant en œuvre la méthode des échantillons corrélés et celle fondée sur un développement de Taylor de la grandeur physique d'intérêt.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:26 Page 134

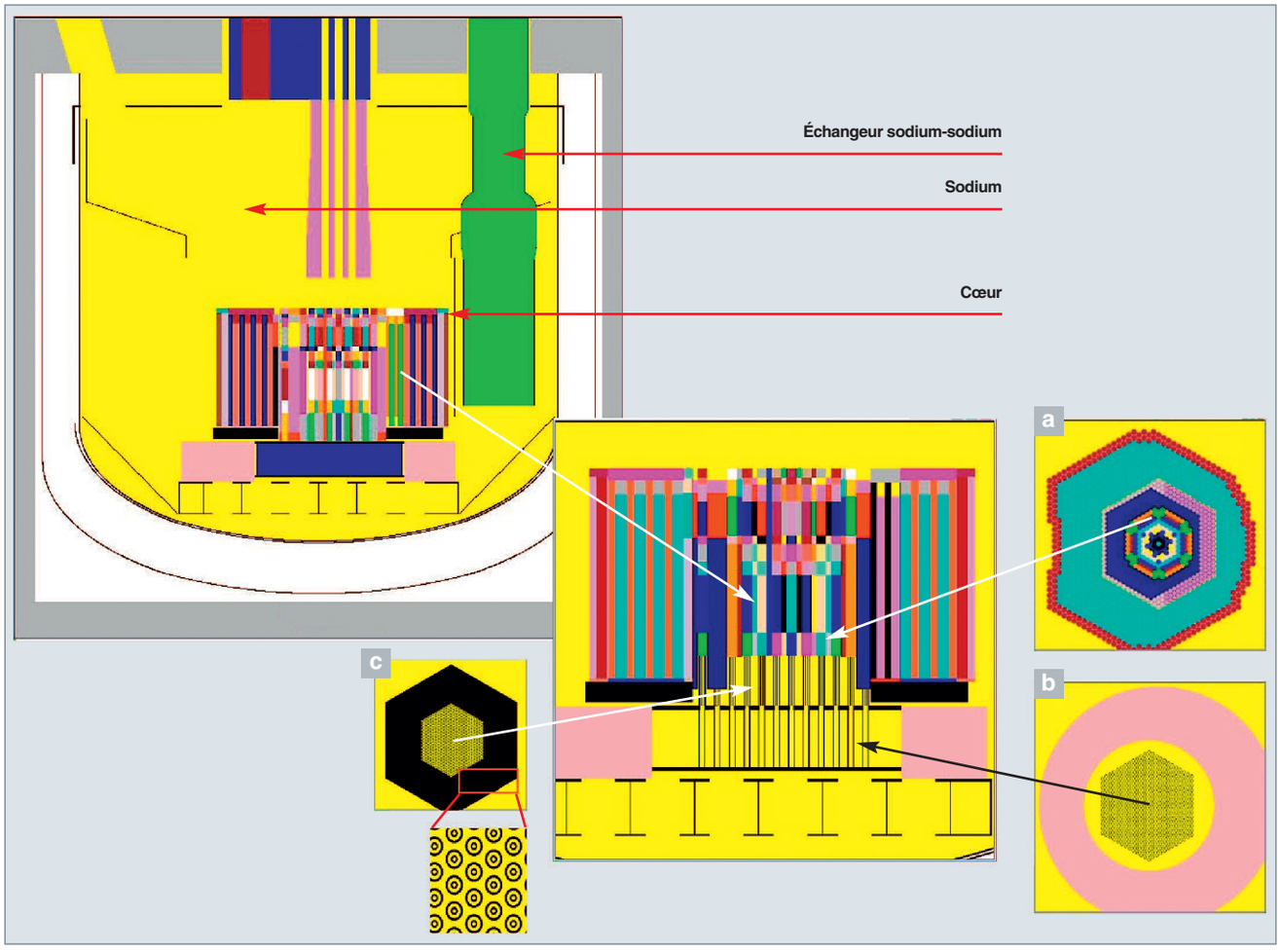


Fig. 63. TRIPOLI-4®, modélisation détaillée du réacteur PHÉNIX pour les calculs de démantèlement. (a), (b), (c) : coupes horizontales du cœur à différentes altitudes.

TRIPOLI-4® fonctionne en mode monoprocesseur, comme en mode parallèle, sur une architecture multiprocesseur. Des calculs TRIPOLI-4® en mode parallèle (voir fig. 65) ont permis de réaliser en 2010, des simulations de plus de 150 milliards de neutrons [20].

Le couplage du transport Monte-Carlo des neutrons à d'autres phénomènes physiques tels que l'évolution des nucléides dans un cœur de réacteur ou les phénomènes thermohydrauliques constitue un enjeu important et soulève des problèmes liés au caractère stochastique de ce couplage. Ceux-ci suscitent une R&D qui ambitionne, à plus ou moins long terme, de réaliser avec succès ce type de couplage en situation accidentelle. L'encadré ci-après (p. 136-137) décrit brièvement le couplage réalisé et opérationnel entre TRIPOLI-4® et MENDEL.

Le couplage du transport de neutrons par la méthode de Monte-Carlo avec le calcul de l'évolution isotopique du combustible ouvre des voies prometteuses pour la physique des réacteurs et le cycle du combustible. C'est ainsi que TRIPOLI-4® a déjà été utilisé parallèlement avec APOLLO2 pour examiner l'im-

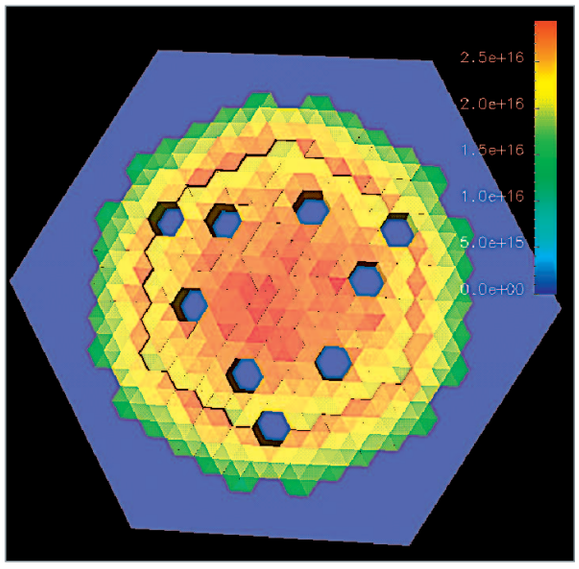


Fig. 64. TRIPOLI-4®, calcul du réacteur PHÉNIX : distribution de puissance par assemblage [19].

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:26 Page 134

pact d'un combustible UMo sur la durée du cycle et les performances du réacteur expérimental à haut flux (RHF) de l'Institut Laüe Langevin (ILL). L'adéquation entre les résultats des calculs probabilistes (TRIPOLI-4® et MENDEL) et déterministes (APOLLO2) a consolidé les réponses apportées par le CEA à l'exploitant [21], voir fig. 69 et 70.

Par ailleurs, des couplages transport Monte-Carlo – thermohydraulique voient également le jour, comme l'illustrent différents travaux de thèses [22], [23], et les développements réalisés, dans le cadre du projet européen NURISP [24] ou autres [25]. La perspective est d'être capable non seulement de réaliser des calculs de cœur 3D, notamment pour les REB qui présentent d'importants effets tridimensionnels, mais également des calculs de transitoires en situations accidentelles.

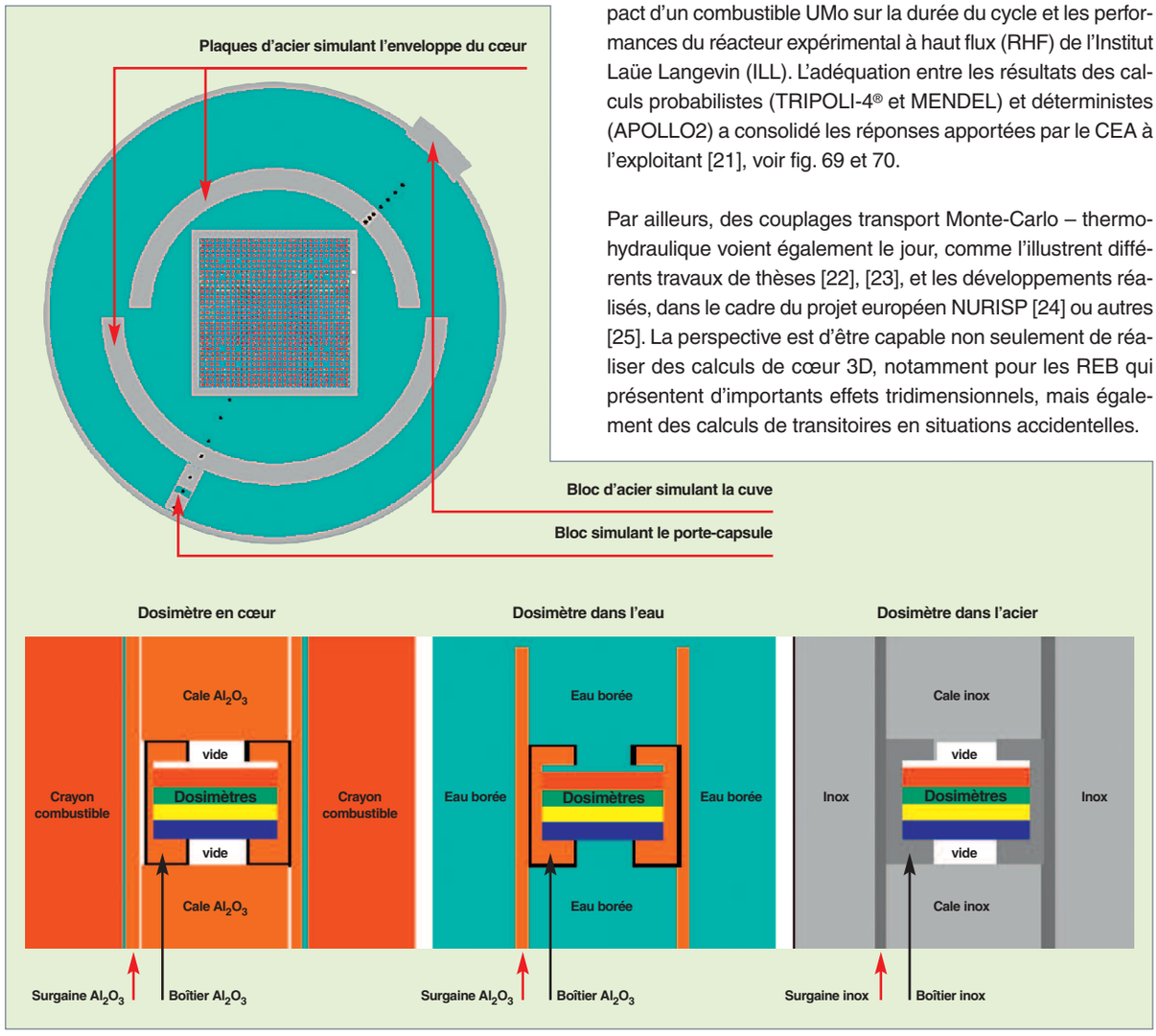


Fig. 65. TRIPOLI-4®, modélisation de l'expérience FLUOLE dans le réacteur expérimental ÉOLE (expérience visant à valider la détermination de la fluence neutronique reçue par la cuve d'un REP) et description des dosimètres retenus [20].

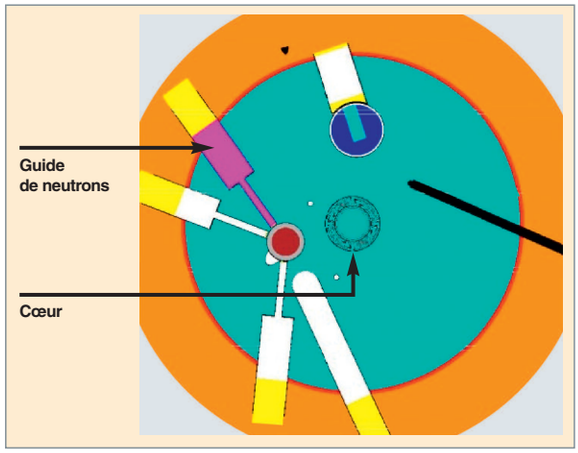


Fig. 69. Coupe horizontale du Réacteur à Haut Flux (RHF) de l'Institut Laüe Langevin [21].

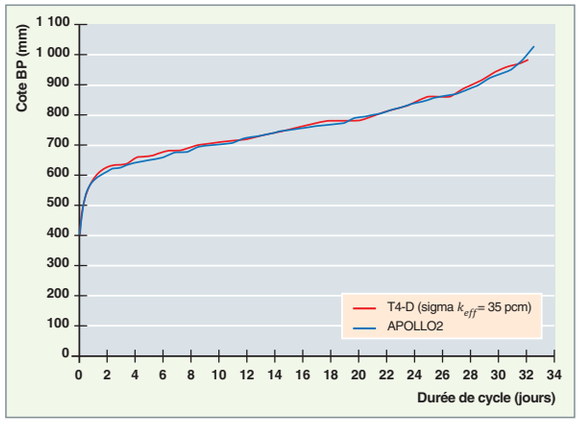


Fig. 70. Comparaison calcul-calcul TRIPOLI-4® / MENDEL avec le code déterministe APOLLO2 sur le calcul de la cote de barre de pilotage du RHF, au cours d'un cycle d'irradiation [21].

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:26 Page 136

Le Monte-Carlo évoluant, TRIPOLI-4®

Jusqu'au début des années 2000, les calculs de cœur, à l'aide des codes de transport Monte-Carlo, se faisaient pour un nombre limité de configurations figées, à des fins de validation de calculs déterministes. La puissance accrue des ordinateurs permet désormais d'envisager de tels calculs « en évolution » – ainsi que cela se fait dans un calcul de cœur déterministe – en couplant le solveur de transport des neutrons à celui résolvant les équations d'évolution temporelle des concentrations des nucléides (équations de Bateman) du combustible nucléaire. La terminologie anglaise utilisée pour désigner les codes de calcul effectuant ce type de couplage est *« Monte-Carlo burnup codes »* souvent reprise en français avec l'expression « **Monte-Carlo évoluant** ». Le tableau situé à la fin de cet encadré indique le nom donné à certains de ces codes en usage. Le couplage entre le code de Monte-Carlo **TRIPOLI-4®** et le solveur d'évolution de **MENDEL** est brièvement décrit ci-après.

Ces deux logiciels sont associés *via* des interfaces informatiques permettant de construire des schémas de couplages entre le calcul de transport et le calcul d'évolution, pilotées par ROOT [1]. Le couplage consiste à calculer, dans un premier temps, les flux et les taux de réaction avec le code de transport Monte-Carlo (en supposant les concentrations des milieux fixées), puis à utiliser ces résultats pour estimer les concentrations après irradiation pendant une durée donnée, à l'aide du code d'évolution (en supposant, cette fois, les flux fixés). En itérant sur cette séquence de calcul, on construit alors des schémas temporels d'évolution (par exemple de type « prédicteur-correcteur »). **TRIPOLI-4®** permet également de modifier la géométrie ou la composition des objets en cours de calcul, ainsi que de définir les conditions d'irradiation selon différents modes possibles (*via* les données du flux ou des taux de réaction, ou encore en mélangeant les deux approches). L'exécution peut être commandée de manière interactive ou non, en fonction du choix de l'utilisateur. Celui-ci peut également choisir un pilotage par mots-clés, ou en programmant lui-même ses séquences de calcul dans le jeu de données C++.

Le développement des schémas de calcul de type Monte-Carlo évoluant fait l'objet d'une forte activité de R&D, du fait de questions spécifiques soulevées par l'approche probabiliste comme, par exemple, la convergence statistique, la propagation des incertitudes. À cet égard, une attention particulière doit être apportée à l'étude de l'exactitude du résultat obtenu, car celui-ci peut être entaché de différentes erreurs systématiques (dites « biais ») qu'il convient de quantifier. Celles-ci peuvent être liées :

- À la discrétisation spatiale (hypothèse d'uniformité des concentrations dans les volumes élémentaires) et temporelle (hypothèse de stationnarité du flux dans chacun des intervalles de temps de la discrétisation en temps – ou en fluence ou en taux de combustion –, comme pour les calculs déterministes).

- au caractère aléatoire des taux de réaction estimés, propre au transport Monte-Carlo, qui induit un biais sur les concentrations calculées par les équations déterministes d'évolution [2]. Ce biais est dû au caractère non linéaire des équations d'évolution vis-à-vis des taux de réaction (ou du flux de neutrons) et se propage au fur et à mesure des différentes étapes de la procédure itérative. La figure 68, extraite de [3], met en évidence l'existence d'un tel biais sur un calcul de crayon combustible. Le comportement de ce biais a été étudié avec le code TRIPOLI-4® en effectuant plusieurs types de simulations : 1 x 1, 5 x 5, 10 x 10, 20 x 20, 100 x 100, et 1 000 x 1 000 où le premier nombre représente le nombre de batchs et le second le nombre de neutrons par batch. Cette étude met en relief l'importance du nombre des neutrons échantillonnés qui permet de diminuer arbitrairement cette source d'erreur.

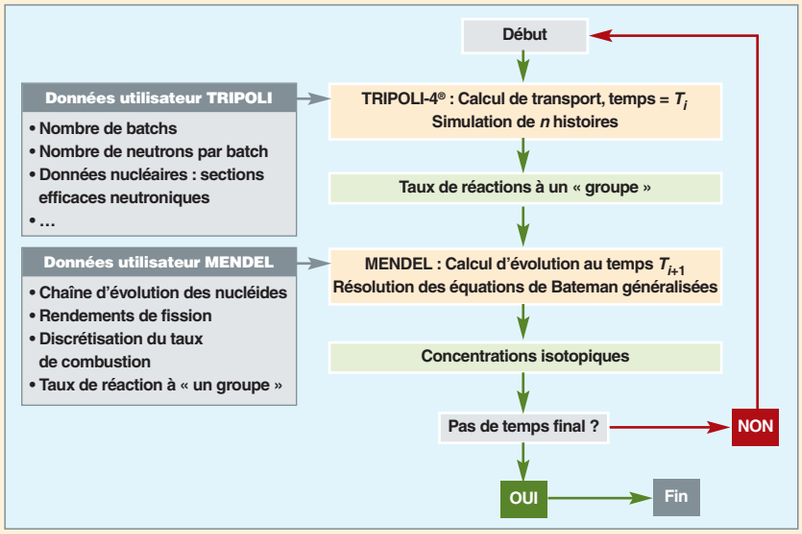


Fig. 67. Principe du couplage Boltzmann / Bateman avec le code de Monte-Carlo TRIPOLI-4® et le solveur d'évolution MENDEL.

Références

[1] http://root.cern.ch/drupal/

[2] E. Dumonteil, C.M. Diop, « Biases and statistical error bars in Monte Carlo burnup calculations : an unbiased stochastic scheme to solve Boltzmann/Bateman coupled equations », *Nuclear Science and Engineering*, vol. 167, N2, pp. 165-170, 2011.

[3] E. Brun, E. Dumonteil and F. Malvagi, « Systematic Uncertainty Due to Statistics in Monte-Carlo Burnup Codes: Application to a Simple Benchmark with TRIPOLI-4-D », *Progress in Nuclear Science and Technology*, vol. 2, pp. 879-885, 2011.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 127

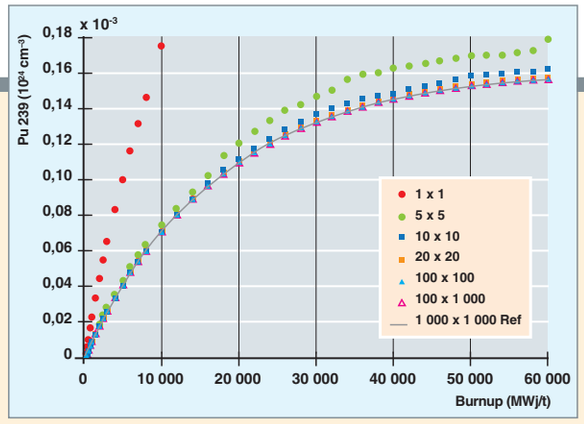


Fig. 68. Mise en évidence du biais de calcul sur la concentration de Pu 239 dans un calcul Monte-Carlo évoluant.

Le tableau suivant donne d'autres exemples de systèmes logiciels couplant un code de transport Monte-Carlo et un code d'évolution :

Exemples de systèmes logiciels couplant un code de transport Monte-Carlo et un code d'évolution

Nom du système logiciel couplé	Codes couplés	
	Code de transport Monte-Carlo	Code d'évolution
MOCUP *(Idaho National Engineering Laboratory, USA)*, 1995.	MCNP	ORIGEN2
MCB (*Royal Institute of Technology, Suède*), 1999.	MCNP	CINDER
MCWO, *(Idaho National Engineering & Environmental Laboratory, USA)*, 1999.	MCNP	ORIGEN2
MONTEBURNS *(Los Alamos National Laboratory, USA)*, 1999.	MCNP	ORIGEN2
MURE *(Laboratoire de Physique Subatomique et de Cosmologie de Grenoble, Institut de Physique Nucleaire d'Orsay, France)*, 2000.	MCNP(X)	module d'évolution propre
MCODE *(MIT, USA)*, 2002.	MCNP	ORIGEN2
ALEPH *(SCK -CEN, Belgique)*, 2005.	MCNP(X)	ORIGEN2
MCNP-ACAB *(Universidad Politecnica de Madrid, UPM, Espagne)*, 2005.	MCNP	ACAB
MCNPX *(Los Alamos National Laboratory, USA)*, 2006.	MCNPX	CINDER90
MCOR *(Pennsylvania State University, USA, AREVA, Erlangen, Allemagne)*, 2006.	MCNP	ORIGEN-S, puis KORIGEN
VESTA *(IRSN, France)* interface générique, 2008.	MCNP, MORET…	ORIGEN2, PHOENIX…

Les codes « simplifiés »

Dans certains cas, les exigences de simplicité et de rapidité de réalisation des calculs, la connaissance précise des situations à modéliser, leur systématique, ont conduit à développer des codes de calculs dits « simplifiés ».

On peut citer :

- Le code **NARMER** (successeur des codes MERCURE et NARCISSE), destiné à la radioprotection *gamma*, et qui permet de réaliser des calculs de débit de dose et d'échauffements par une méthode dite « d'atténuation en ligne droite ». Il est indispensable, pour l'utiliser, de disposer de bibliothèques d'entrées spécifiques (sections efficaces, facteurs d'accumulation) ; il est validé essentiellement par des comparaisons à des calculs de référence réalisés avec le code TRIPOLI-4® ;
- le code **CÉSAR*** [26], qui permet de faire des calculs de bilan matière de manière rapide ; il utilise des bibliothèques d'entrée issues majoritairement d'APOLLO2, et il est validé par comparaison à DARWIN ;
- le code **FAKIR**, qui détermine la puissance résiduelle des combustibles irradiés [27, 28].

Principaux codes de physique des réacteurs

Les codes de neutronique développés et utilisés dans la communauté mondiale de la physique des réacteurs nucléaires sont présentés dans les tableaux 19 à 20 ci-après, successivement relatifs au transport déterministe, au transport probabiliste par la méthode de Monte-Carlo et à l'évolution temporelle isotopique. Ce recensement n'est cependant pas exhaustif. Quelques-unes des principales caractéristiques de ces codes y sont indiquées. On peut noter que généralement, les industriels ont développé leur propre code de cœur.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 138

Tableau 18

Codes de neutronique déterministes

Ceux marqués d'une étoile comportent un solveur d'évolution isotopique.

Nom	Institution	Applications Équation	Bibliothèque de sections efficaces	Géométrie	Autoprotection	Solveur de flux
AEGIS*	Nuclear Engineering, Limited - Nuclear Fuel Industries - Nagoya University (Japon)	Réseau/cœur Transport	172 groupes	3D quelconque	Équivalence (URR) et maillage ultrafin (RRR)	2D : MOC
AGENT	Purdue University (États-Unis)	Cœur Transport	Sections efficaces macroscopiques autoprotégées	3D quelconque (par R-fonctions)	–	3D : couplage 2D (MOC)/1D(FDM)
ANC	Westinghouse (États-Unis)	Cœur Diffusion	PARAGON (2 groupes)	3D XYZ	–	3D : NEM
APOLLO2*	CEA (France)	Réseau/cœur Transport	172/281 groupes et plus	2D quelconque (MOC), réseau de cellules (Pij et SN))	Équivalence (RRR) sous-groupes (URR)	2D : Pij, MOC, S_N
APOLLO3* (TH)	CEA (France)	Réseau/cœur Transport	Réseau : 172/281 groupes et plus Cœur : sections efficaces microscopiques autoprotégées APOLLO2, ECCO, APOLLO3	2D quelconque (MOC), réseau de cellules (Pij et S_N) 3D quelconque	Équivalence, (RRR) sous-groupes (URR)	2D : Pij, MOC, S_N 3D : diffusion, transport SP_N, transport S_N, MOC
ATTILA*	LANL, puis Transpire Inc. (États-Unis)	Cœur Transport	Sections efficaces macroscopiques autoprotégées	3D quelconque (maillage tétraédrique)	–	3D : S_N
CASMO*	Studsvik Scandpower (États-Unis)	Réseau/cœur Transport	586 groupes	Réseau 2D LWR	Équivalence	2D : MOC
CHAPLET 3D	TEPCO - Osaka University (Japon)	Cœur Transport	Sections efficaces macroscopiques autoprotégées	3D quelconque	–	3D : couplage 2D (MOC)/1D(FDM ou MOC ou NEM)
CRONOS2* (TH)	CEA (France)	Cœur , Diffusion transport, transport simplifié	APOLLO2, ECCO (multigroupe)	3D XYZ, HEX-Z et triangulaire d'axe Z	–	3D : Diffusion, transport SP_N, transport S_N
DeCART (TH)	KAERI (Corée) - ANL (États-Unis)	Cœur transport	sections efficaces microscopiques	3D XYZ	sous-groupes	3D : CMFD : homogénéïsation 2D par MOC ; solution 1D axiale par NEM
DENOVO (dans **SCALE**)	ORNL (États-Unis)	Cœur transport	Sections efficaces macroscopiques autoprotégées	3D XYZ structurée	–	3D : S_N
TRIVAC	École Polytechnique Montréal (Canada)	Cœur Diffusion, transport simplifié	DRAGON	3D XYZ et HEX-Z	–	3D : diffusion, transport SP_N

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 139

CMFD : Méthode aux différences finies surmaillage grossier *(Coarse Mesh Finite Difference)*
FDM : Méthode aux différences finies *(Finite Difference Method)*
NEM : Méthode nodale *(Nodal Expansion Method)*
(TH) : Prise en compte des contre-réactions thermo-hydrauliques
XYZ : Géométrie 3D cartésienne
HEX-Z : Géométrie 3D hexagonale d'axe Z
RZ : Géométrie 2D cylindrique
RO : Géométrie 2D cylindrique
ROZ : Géométrie 3D cylindrique

Nom	Institution	Applications Équation	Bibliothèque de sections efficaces	Géométrie	Autoprotection	Solveur de flux
DRAGON*	École Polytechnique Montréal (Canada)	Réseau Transport	172 groupes	Réseau cartésien ou hexagonal	Équivalence (Stammler), sous-groupes	2D et 3D : Pij, MOC
ERANOS*	CEA (France)	Cœur Diffusion, transport	ECCO	RZ, XYZ, HEX-Z	–	2D : S_N(R-Z), 3D : P_N (XYZ ou HEX-Z)
ERANOS/ ECCO	CEA (France)	Réseau Transport	1968, 175, 172, 33 groupes	Réseau cartésien ou hexagonal	Sous-groupes	2D : Pij
HELIOS2*	Studsvik Scandpower (États-Unis)	Réseau Transport	177(n)/48(γ) ou 49(n)/18(γ) groupes	Réseau 2D quelconque	Sous-groupes (facteur Dancoff calcul en MOC)	2D : Pij, MOC («longues» et «courtes»)
Lancer 02*	Global Nuclear Fuel - GE Energy, Nuclear (États-Unis)	Réseau Transport	118/190 groupes	Réseau BWR	Modèles approchés (Wigner, Bell, Dancoff, Williams)	2D : MOC (après condensation des sections à 19 groupes)
PARAGON*	Westinghouse (États-Unis)	Réseau Transport	70 (n)/48(γ) groupes	Réseau cartésien de cellules	Équivalence (Stammler)	2D : Pij (cellules couplées par courants d'interface)
PARCS	Purdue University (États-Unis)	Cœur Diffusion	TRITON (multigroupe)	3D XYZ, HEX-Z, ROZ	–	3D : diffusion nodale
TRITON* (dans **SCALE**)	ORNL (États-Unis)	Réseau Transport	238/44 groupes et 27(n)/18(γ) groupes	2D quelconque	Transport Sn ou Pij à énergie ponctuelle (50 000 à 70 000 points)	2D : MOC (caractéristiques «courtes»)
SCOPE2*	Nuclear Engineering, Limited - Nuclear Fuel Industries - Nagoya University (Japon)	Cœur Transport	AEGIS (9 groupes)	3D XYZ crayon par crayon	–	Transport SP_3
SHARP/UNIC	ANL (États-Unis)	Réseau/cœur transport	>10 000 groupes	3D quelconque	Pas nécessaire	3D : P_N + éléments finis, MOC
SIMULATE*	Studsvik Scandpower (États-Unis)	Cœur Diffusion	CASMO	3D LWR	–	3D : diffusion nodale par synthèse 2D/10
PARTISN	LANL (États-Unis)	Cœur Transport	Sections efficaces macroscopiques autoprotégées	1D, 2D (XY, RZ, ou RO), 3D (XYZ ou ROZ)	–	3D : S_N
WIMS*	Serco (Royaume-Uni)	Réseau Transport	172 groupes	Réseau LWR, HWR, GCR	Équivalence (RRR), sous-groupes (URR)	2D : Pij, S_N, MOC 3D : MOC, Diffusion, Hybride Monte-Carlo

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 140

Codes de transport Monte-Carlo

Des codes de transport Monte-Carlo autres que ceux répertoriés dans le tableau 19 existent comme par exemple McCARD (Corée), COG11, TART2005 (États-Unis), MONACO dans SCALE, SPMC (Chine). On peut mentionner aussi les codes utilisés dans le domaine médical, celui de la physique des particules et, parfois, dans le domaine de la physique des réacteurs nucléaires : EGS4 (USA), FLUKA (Italie, CERN), GEANT4 (CERN), MCNPX (USA), PENELOPE (Espagne)… Ils concernent des domaines d'énergie beaucoup plus vastes que celui du tableau 19, allant jusqu'à plusieurs GeV et au-

Tableau 19

Exemples de codes de transport de particules par la méthode de Monte-Carlo : domaine d'énergie de 0 à 20 MeV

Quelques-unes de leurs spécificités sont précisées. Ceux marqués d'un # comportent ou peuvent utiliser un solveur d'évolution isotopique.

Nom	Institution	Particules	Types de problèmes	Représentation des sections efficaces	Géométrie 3D	Principales techniques de réduction de la variance	Parallélisme
KENO-6#	Oak Ridge National Laboratory, États-Unis	Neutrons	Valeur propre (k_{eff})	Ponctuelle ; multigroupe	Surfacique	–	Oui
MCBEND	AMEC, ANSWERS Software Service, Royaume-Uni	Neutrons photons couplés (n,γ)	Source fixe	Ponctuelle	Combinatoire ; trous	« *Splitting/roulette* » « *Woodcock tracking* »	–
MAVRIC	Oak Ridge National Laboratory, États-Unis	Neutrons photons couplés (n,γ)	Source fixe	Multigroupe	Surfacique	Importance (calcul adjoint avec code S_N)	Oui
MCNP-5#	Los Alamos National Laboratory, États-Unis	Neutrons photons couplés (n,γ) électrons positons	Valeur propre (k_{eff}) source fixe ; dépendant du temps	Ponctuelle, tables de probabilité	Surfacique, hiérarchique	« *Splitting/roulette* » (fenêtre de poids) Transformation exponentielle	Oui
MCU#	Kurchatov Institute, Russie	Neutrons photons électrons positons	Valeur propre (k_{eff}) ; source fixe ; dépendant du temps	Ponctuelle	Combinatoire, hiérarchique	« *Woodcock tracking* »	Oui
MC21#	Knolls Atomic Power Laboratory and the Bettis Atomic Power Laboratory, États-Unis	Neutrons Photons	Valeur propre (k_{eff}) ; source fixe ;	Ponctuelle, tables de probabilité	Combinatoire, hiérarchique	–	Oui
MONK#	AMEC, ANSWERS Software Service, Royaume-Uni	Neutrons	Valeur propre (k_{eff})	Ponctuelle ; multigroupe	Combinatoire ; trous ; import CAO	« *Woodcock tracking* »	Oui
MORET-4, 5	IRSN, France	Neutrons	Valeur propre (k_{eff}) et combinatoire	Multigroupe (APOLLO2, DRAGON) ponctuelle et tables de probabilité (URR)	Combinatoire	« *Woodcock tracking* »	–
MVP#	JAEA, Japon	Neutrons photons couplés (n,γ)	Valeur propre (k_{eff}) ; source fixe ; dépendant du temps	Ponctuelle, tables de probabilité (URR)	Combinatoire	« *Splitting/roulette* »	Oui
PRIZMA#	RFNC – Zababakhin Institute of Technical Physics, Russie	Neutrons photons particules chargées	Valeur propre (k_{eff}) ; source fixe ; dépendant du temps	Ponctuelle, tables de probabilité	–	Importance Transformation exponentielle	
SERPENT#	VTT Technical Research Centre of Finland	Neutrons	Valeur propre (k_{eff}) ; source fixe	Ponctuelle	Surfacique	« *Woodcock tracking* »	Oui
TRIPOLI-4©#	CEA, France	Neutrons photons couplé (n,γ) électrons positons	Valeur propre (k_{eff}) ; source fixe ; dépendant du temps	Ponctuelle, tables de probabilité (URR, possible RR) ; multigroupe autoprotégée (APOLLO-2)	Combinatoire et surfacique (panachage possible) Géométrie ROOT	Transformation exponentielle « *Splitting/roulette* »	Oui

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 141

delà, ainsi que de nombreux types de particules autres que les neutrons et les *gammas*, en particulier les particules chargées (protons, deutons, α, ions). Ils sont aptes à traiter les réactions de spallation (voir *supra*, p. 39 et réf. [29]) importantes dans le cadre de la problématique de la transmutation des déchets nucléaires.

Codes d'évolution

Tableau 20

Codes d'évolution temporelle des concentrations des radionucléides

Nom	Institution	Méthode de résolution	Nucléides
CINDER	Bettis Atomic Power Laboratory, Los Alamos National Laboratory, États-Unis	Analytique (chaînes d'évolution linéaires)	Noyaux lourds, produits de fission, produits d'activation, produits de spallation.
DARWIN MENDEL	CEA, France	Analytique Numérique Runge-Kutta (appartient à la famille des *« time step methods »* ou méthodes de discrétisation en pas de temps élémentaires)	Noyaux lourds, produits de fission, produits d'activation, produits de spallation
FISPACT	UKAEA, Culham Science Centre, Royaume-Uni	Formulation matricielle, résolution numérique	Produits d'activation (orienté études de radioprotection, comme celles relatives à l'activation neutronique des structures d'une machine à fusion thermonucléaire). Complémentaire du code FISPIN.
FISPIN	AMEC, ANSWERS Software Service, Royaume-Uni	Numérique, approximation du terme dérivée (appartient à la famille des *« time step method »* ou « méthode de discrétisation en pas de temps élémentaires »)	Noyaux lourds, produits de fission, quelques produits d'activation (matériaux de structure)
ORIGEN	Oak Ridge National Laboratory, États-Unis	Exponentielle de matrice	Noyaux lourds, produits de fission, produits d'activation, produits de spallation.

Références

[1] R. Sanchez, J. Mondot, Z. Stankovski, A, Cossic, I. Zmijarevic, « APOLLO2: a user oriented, portable, modular code for multigroup transport assembly calculations », *Nuclear Science and Engineering*, 100, pp. 352-362, 1988.

[2] R. Sanchez, I. Zmijarevic, M. Coste-Delclaux, E. Masiello, S. Santandrea, E. Martinolli, L. Villatte, N. Schwartz, N. Guler, « APOLLO2 Year 2010 », *Nuclear Engineering and Technology*, vol. 42, n° 5, pp. 474-499, October 2010.

[3] Z. Stankovski, « Implementation of the component concept in SILENE 2D/3D Pre & Post Processing GUI », M&C+SNA 2007, April 15-19, Monterey, USA, 2007.

[4] Igor Zmijarevic *et al.*, « Industrial application of APOLLO2 to Boiling Water Reactors », PHYSOR 2006, Vancouver, BC, Canada, September 10-14, 2006.

[5] J.J. Lautard, S. Loubière and C. Fedon-Magnaud, « CRONOS a Modular Computational System for Neutronic Core Calculations », *Specialist IAEA meeting, Advanced Calculational Methods for Power Reactors*, Cadarache, France, 1990.

[6] J.J. Lautard, C. Magnaud, F. Moreau, A.M. Baudron, *CRONOS2 : un logiciel de simulation neutronique des cœurs de réacteur*, Rapport scientifique DRN, SERMA/LENR/PU/00/2746/A, 2000.

[7] G. Rimpault *et al.*, « The ERANOS Code and Data System for Fast Reactor Neutronic Analyses », PHYSOR 2002, Seoul, Korea, 2002.

[8] G. Rimpault *et al.*, « Algorithmic Features of the ECCO Cell Code for Treating Heterogeneous Fast Reactor Subassemblies », *International Topical Meeting on Reactor Physics and Computations*, Portland, Oregon, May 1-5, 1995.

[9] A. Tsilanizara, C.M. Diop, B. Nimal, M. Detoc, L. Lunéville, M. Chiron, T.D. Huynh, I. Brésard, M. Eid, J.C. Klein, B. Roque, P. Marimbeau, C. Garzenne, J.M. Parize, C. Vergne, « DARWIN : An Evolution Code System for a Large Range Application », *Journal of nuclear Science and Technology*, Supplement 1, pp. 845-849, March 2000.

[10] L. San-Felice, R. Eschbach, P. Bourdot, A. Tsilanizara, T.D. Huynh, « Experimental Validation of The Darwin2.3 Package for Fuel Cycle Applications », PHYSOR 2012 – *Advances in Reactor Physics – Linking Research, Industry, and Education*, Knoxville, Tennessee, USA, April 15-20, 2012.

[11] P. Guérin, A. M. Baudron, J. J. Lautard, « Domain Decomposition Methods for Core Calculations Using The MINOS Solver », M&C+SNA 2007, Monterey, USA, April 15-19, 2007.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 142

[12] P. Guérin, A.M Baudron, J.J. Lautard, « A component mode synthesis method for 3D cell by cell SPn core calculation using the mixed dual finite element solver MINOS », M&C 2005, Avignon, France, September 12-15, 2005.

[13] A. Boulore, Ch. Struzik, F. Gaudier, « Modelling of the Uncertainty of Nuclear Fuel Thermal behavoiur using the URANIE framework », *The First International Conference on Advances in System Simulation*, SIMUL 2009, Porto, Portugal, September 20-25, 2009.

[14] J.P. Both, H. Derriennic, B. Morillon, J.C. Nimal, « A Survey of TRIPOLI-4 », *Proceedings of the 8th International Conference on Radiation Shielding*, Arlington, Texas, USA, pp. 373-380, April 24-28, 1994.

[15] J.P. Both, A. Mazzolo, Y. Péneliau, O. Petit, B. Roesslinger, *Notice d'utilisation du code TRIPOLI-4.3 : code de transport de particules par la méthode de Monte-Carlo*, rapport CEA-R-6043, 2003 ; TRIPOLI-4® Project Team, *TRIPOLI-4 User Guide*, CEA-R-6316, 2013.

[16] E. Brun, E. Dumonteil, F. X. Hugot, N. Huot, C. Jouanne, Y. K. Lee, F. Malvagi, A. Mazzolo, O. Petit, J. C. Trama, A. Zoia, « Overview of TRIPOLI-4® version 7 Continuous-Energy Monte Carlo Transport Code », ICAPP 2011, Nice, France, May 2-5, 2011.

[17] http://www.nea.fr/abs/html/nea-1716.html

[18] http://root.cern.ch/root/html

[19] F. X. Hugot, Y. K. Lee, F. Malvagi, « Recent R\&D around the Monte-Carlo code TRIPOLI-4® for criticality calculation », *Proceedings of International Conference*, PHYSOR 2008, CD-ROM, Interlaken Switzerland, 2008.

[20] D. Beretz, S. Bourganel, P. Blaise, C. Destouches, N. Huot, J.M. Girard, C. Doumergue, H. Philibert, R. Brissot, M. Dumont, « FLUOLE : A new relevant experiment for PWR pressure vessel surveillance », *Reactor Dosimetry State of Art 2008, Proceedings of the 13th International Symposium*, Akersloot, May 25-30, 2008.

[21] G. Campioni, B. Desbrière, « HFR Advanced Computation's Models », *Proceedings of International Conference*, PHYSOR 2008, CD-ROM Interlaken, Switzerland, 2008.

[22] N. Capellan, *Couplage 3D neutronique thermohydraulique. Développement d'outils pour les études de sûreté des réacteurs innovants*, Université Paris Sud XI, Orsay, France, 2009.

[23] F. Vaïana, *Couplage Neutronique- Thermohydraulique. Application au Réacteur à Neutrons Rapides refroidi à l'Hélium*, Thèse de doctorat, Université de Grenoble, France, 2009.

[24] J. E. Hoogenboom, A. Ivanov, V. Sanchez and C. Diop, « A Flexible Coupling Scheme for Monte Carlo and Thermal-hydraulics Codes », *The 2011 International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering*, M&C 2011, Rio de Janeiro, RJ, Brazil, May 8-12, 2011.

[25] David P. Griesheimer, « Common Monte-Carlo Design Tool (CMCDT) for Reactor Design and Analysis », http://www.ornl.gov/sci/nsed/outreach/presentation/2008/Griesheimer_seminar.pdf, *Knolls Atomic Power Laboratory and the Bettis Atomic Power Laboratory seminar*, April 9, 2008.

[26] J.M. Vidal, J.P. Groullier, A. Launay, Y. Berthion, A. Marc, SGN, H. Toubon, « CÉSAR: A Code for Nuclear Fuel and Waste Characterisation », *Proceedings of International Symposium Waste Management 2006*, February 26 – March 2, Tucson, Arizona, USA, 2006.

[27] T.D. Huynh, J.C. Nimal, M. Zachar, « FAKIR 5.0 A PC Code for Residual Decay Heat Power and Activity Calculation (Fuel After Heat Keyboard Instant Result) », *Proceedings of the 8th International Conference on Radiation Shielding*, April 24-28, 1998, pp. 113-120, Arlington, USA, 1994.

[28] T.D. Huynh, *Développement et mise au point de la bibliothèque physique du système PEPABAC (progiciel FAKIR) à l'aide des codes PEPIN et APOLLO 1*, Thèse, Université Paris 11, Orsay, 1995, Note CEA-N-2815, 1996.

[29] J.-C. David, *Spallation : comprendre pour prédire !?*, Thèse HDR, Université de Strasbourg, France 2012.

Cheikh M. Diop, Éric Dumonteil, Anne Nicolas, Odile Petit, Michel Soldevila, Jean-Christophe Trama, Aimé Tsilanizara,
Département de modélisation des systèmes et des structures.
Cyrille de Saint-Jean et Yannick Pénéliau
Département d'études des réacteurs.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 143

Les formulaires de calcul : deux exemples

NARVAL : formulaire neutronique appliqué aux réacteurs de propulsion navale

Malgré une grande similitude de comportement physique avec les réacteurs à eau sous pression, les réacteurs de propulsion nucléaire (P_N) présentent les caractéristiques suivantes : un cœur de petite taille, qui provoque des fuites importantes, une géométrie particulière, l'utilisation de **poisons consommables*** spécifiques et, enfin, le pilotage par des barres absorbantes mobiles hétérogènes. Tout cela en fait des objets qui s'éloignent des « standards » électrogènes terrestres et conduit à les modéliser de façon quelque peu différente.

NARVAL, formulaire Neutronique Appliqué aux Réacteurs de propulsion naVALe dont les prémices datent du début des années 90 et dont la première version a été livrée dès 1999 à AREVA-TA, est aujourd'hui arrivé à maturité avec sa quatrième version livrée en décembre 2009 et régulièrement améliorée.

Initialement fondé sur l'utilisation des bibliothèques de données nucléaires JEF-2.2 et l'enchaînement des codes APOLLO2 et CRONOS2 utilisés dans les filières **REL*** civiles, NARVAL comporte un grand nombre de procédures additionnelles spécifiques à la modélisation neutronique des cœurs de P_N. La première étape de ce formulaire consiste à résoudre le problème en énergie sur un motif élémentaire 2D correspondant à un assemblage du cœur, puis à effectuer un calcul de flux avec une méthode précise (méthode S_N) en utilisant pour la variable énergie un maillage fin (172 groupes d'énergie), cela associé à un calcul d'évolution des concentrations isotopiques. Cette étape permet de disposer de données précises constituant une bibliothèque d'entrée pour les calculs de cœur proprement dits. Dans une seconde étape, le calcul à l'échelle cœur, à trois dimensions, prenant en compte l'usure du cœur au cours de son irradiation, est effectué en utilisant la méthode de la diffusion après condensation des sections efficaces sur quatre macrogroupes d'énergie, homogénéisation spatiale des constantes neutroniques, et étape d'équivalence (voir *supra*, La démarche du neutronicien, p. 51-54) liée au changement d'équation (passage de l'équation du transport – exacte – à l'équation de la diffusion – simplifiée).

La *démarche de mise au point, de validation et de qualification* de NARVAL est synthétisée dans ce qui suit. En premier lieu, l'étape de *validation numérique* réalisée au temps zéro à l'aide du code de référence Monte-Carlo à énergie continue TRIPOLI-4® permet, outre le choix des options de calcul déterministe optimales, de quantifier les biais de modélisation aux trois niveaux d'échelle : cellule élémentaire, assemblage et cœur.

La *phase de qualification (ou validation expérimentale)* repose, quant à elle, sur l'utilisation du retour d'expérience des cœurs embarqués sur les navires, des prototypes à terre RNG et RES, et de la maquette critique AZUR. NARVAL simule alors l'irradiation de ces cœurs, les expériences les plus significatives, et calcule l'évolution de l'inventaire isotopique du combustible à une échelle très fine. Ses résultats peuvent alors être confrontés aux analyses isotopiques réalisées après dissolution soit de combustible, soit de poisons neutroniques irradiés.

Le *calcul d'un cœur de PN à trois dimensions* en évolution en géométrie hétérogène correspond à quelques dizaines de millions de mailles de calcul et prend actuellement de l'ordre de cent heures sur un calculateur LINUX 2.3 GHz – 16 Go de RAM. Ce formulaire est ainsi utilisé par AREVA-TA pour les études de conception et les études de sûreté.

Le formulaire NARVAL traite ces cœurs dans toute leur complexité actuelle avec des incertitudes associées aux paramètres clés pour la sûreté jugées satisfaisantes. Toutefois, étant donné les performances accrues visées par la maîtrise d'ouvrage CEA/DAM/DPN, en termes de durée de vie de ces cœurs, le formulaire doit évoluer pour améliorer encore le calcul des grandeurs intégrales telles que la réactivité globale du cœur ou l'efficacité intégrale des barres absorbantes et le calcul des grandeurs locales telles que les facteurs de puissance, les taux de combustion ou les concentrations isotopiques dans des configurations de plus en plus hétérogènes. L'utilisation de données nucléaires plus récentes issues de l'évaluation JEFF-3, de modèles physiques et de solveurs de flux plus performants, comme la méthode des caractéristiques implémentée dans le code APOLLO2, ou même des schémas hybrides associant NARVAL au code Monte-Carlo TRIPOLI-4®, est prévue pour la deuxième version majeure du formulaire (NARVAL2) envisagée à l'horizon 2014.

De surcroît, en réponse aux spécifications techniques de besoin émises par AREVA-TA, NARVAL s'adapte aux évolutions et innovations envisagées sur les cœurs de propulsion nucléaire, par ajout de fonctionnalités de calcul (nouvelles

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 144

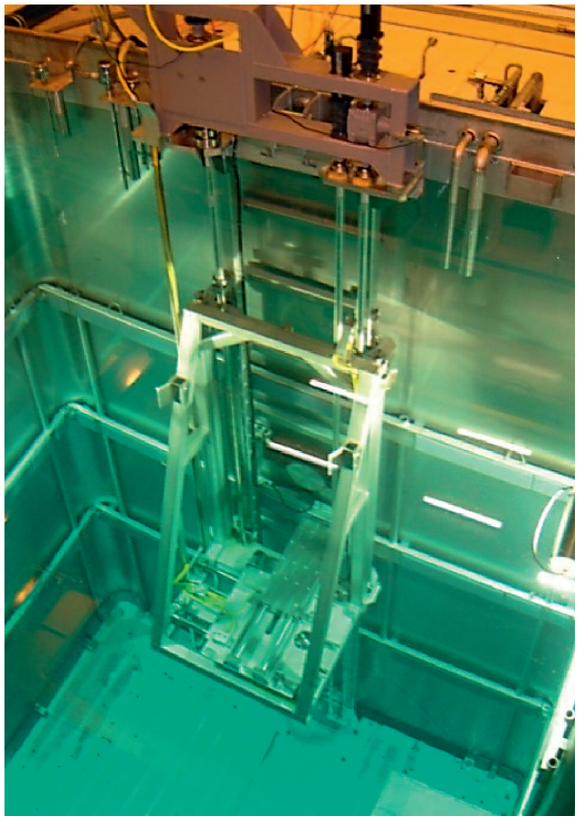


Fig. 71. Banc de gammamétrie immergé pour mesurer la ditribution fine de taux de combustion sur les plaques combustibles du réacteur RES.

méthodes et procédures permettant de traiter les problèmes de transitoires à l'aide de couplages entre disciplines telles que la thermo-hydraulique et la cinétique spatiale). Une attention particulière est également portée à l'amélioration de la souplesse d'utilisation et de la portabilité du formulaire, en réponse aux différentes contraintes d'utilisation d'AREVA-TA au cours des phases d'études de faisabilité, conception et sûreté.

En support à la démarche de qualification de NARVAL une réflexion est engagée sur la conception de nouveaux programmes expérimentaux ayant deux volets :

- Le premier concernant l'expertise de combustibles et de poisons irradiés ;
- le second concernant l'instrumentation des cœurs et les incertitudes cibles, en cohérence avec l'accroissement de la précision recherchée dans les formulaires.

À terme, il est prévu que NARVAL s'appuie sur le nouveau code de neutronique APOLLO3®.

HORUS3D : un nouvel outil de simulation neutronique pour le Réacteur Jules Horowitz

Afin de pouvoir répondre aux besoins de dimensionnement du futur **réacteur de recherche Jules Horowitz** (RJH), il a été nécessaire de développer un modèle de calcul permettant au maître d'œuvre AREVA-TA, sous la responsabilité du maître d'ouvrage CEA/DEN, de mener les études en support à la conception et à la rédaction des rapports de sûreté.

La chaîne complète d'outils de simulation dédiée aux études de conception s'appelle HORUS3D *(Horowitz Reactor simulation Unified System)*. Elle a été développée dans différentes unités du CEA, et elle concerne la neutronique, la photonique, le calcul de cycle, ainsi que la thermohydraulique du cœur et des systèmes. Pour les composants neutroniques rassemblés dans HORUS3D/N (N pour neutronique), cette chaîne est essentiellement fondée sur les codes APOLLO2, CRONOS2 et TRIPOLI-4®, et sur la bibliothèque de données nucléaires européenne JEFF-3.

Le cœur du RJH a subi de nombreuses évolutions au cours des études de faisabilité et de définition. Afin d'optimiser les performances du cœur en terme de flux, l'ingénierie a opté pour un arrangement irrégulier des assemblages dit « Pâquerette ». En outre, afin d'offrir la possibilité de faire varier la position des expériences placées hors cœur en cours d'irradiation, le réflecteur a été pourvu d'éléments mobiles placés dans des « rues d'eau », ce qui s'est fait au détriment de la symétrie et de la simplicité de la modélisation. Le résultat de ces choix technologiques est la nouvelle géométrie du réacteur, présentée sur la figure 72, ci-dessous.

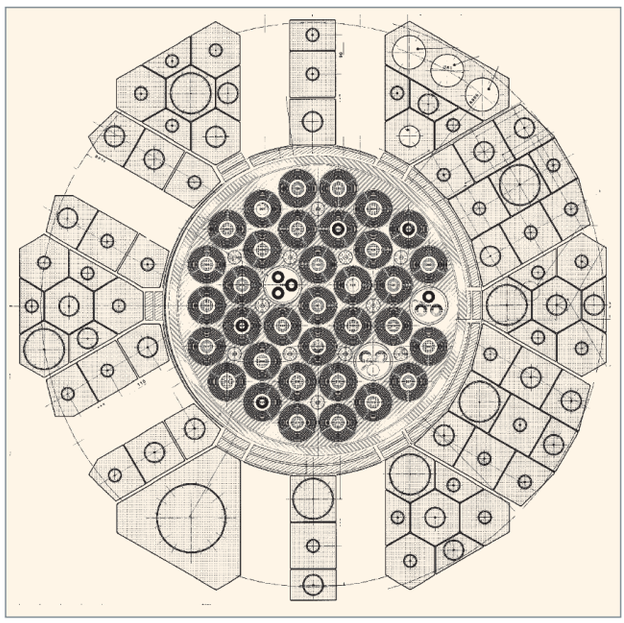


Fig. 72. Géométrie du cœur et du rélecteur du RJH «Pâquerette ».

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 145

Pour les calculs neutroniques, la solution la plus exacte eût été d'utiliser la méthode des caractéristiques, qui est actuellement la voie de référence pour les calculs déterministes en évolution, puisqu'elle favorise une description hétérogène de la géométrie. Elle permet de limiter les biais de modélisation, entre autres grâce à une description géométrique très précise, y compris dans le cas de géométries non structurées (voir *supra*, p. 82). Toutefois, le code APOLLO2 ne traite actuellement que des géométries à deux dimensions, ce qui n'autorise pas le traitement de l'ensemble des besoins liés à la conception d'un réacteur et des dispositifs expérimentaux, dans le cas du RJH. De ce fait, l'utilisation conjointe d'APOLLO2, CRONOS2 et TRIPOLI-4® a permis de satisfaire les exigences des concepteurs auxquelles APOLLO3® répondra à terme en traitant les géométries 3D en hétérogène.

À partir de 2007, HORUS3D/N a permis la prise en compte de la géométrie irrégulière dite « Pâquerette » du RJH à 3D avec CRONOS2 par la mise en œuvre de la méthode des « éléments finis isoparamétriques » spécialement adaptée pour les besoins en place mémoire liés à la complexité du maillage du RJH.

Les *éléments finis isoparamétriques conformes à pas triangulaire non régulier* permettent de représenter le cœur « Pâquerette » en mailles homogènes. L'élément clé est alors la modélisation des éléments combustibles par des dodécagones, conservant ainsi la symétrie de rotation par la prise en compte des raidisseurs support des plaques combustibles. La figure 73, ci-dessous, montre le découpage du cœur « Pâquerette » en «super-éléments finis» (SFE) hexagonaux, maillés avec l'outil SILÈNE (mailleur des codes APOLLO2, CRONOS2 et TRIPOLI-4®). Le maillage triangulaire spécifique à chaque hexagone permet de prendre en compte l'irrégularité du réseau et la complexité géométrique de l'interface réseau-caisson-réflecteur.

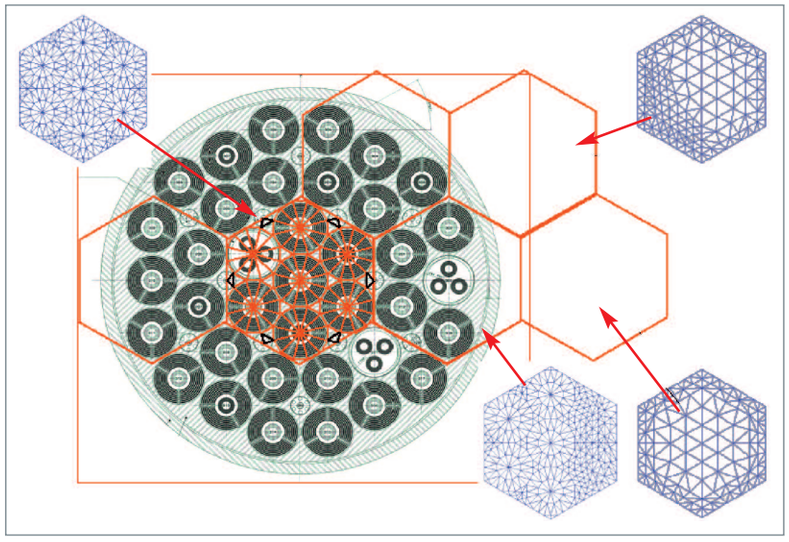


Fig. 73. Découpage du cœur RJH «Pâquerette » en macro éléments hexagonaux.

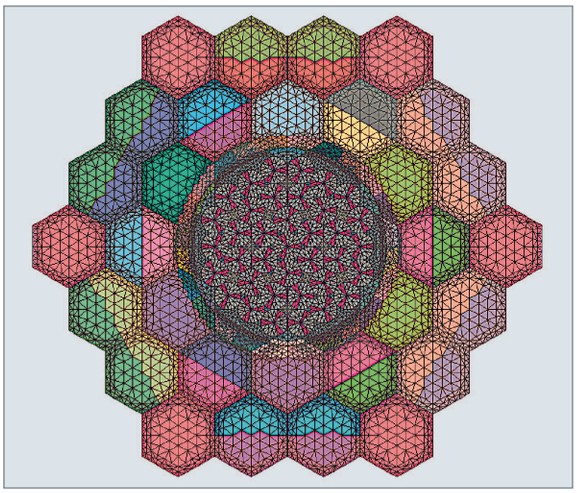


Fig. 74. Maillage CRONOS2 avec éléments finis isoparamétriques, généré par GAÏA.

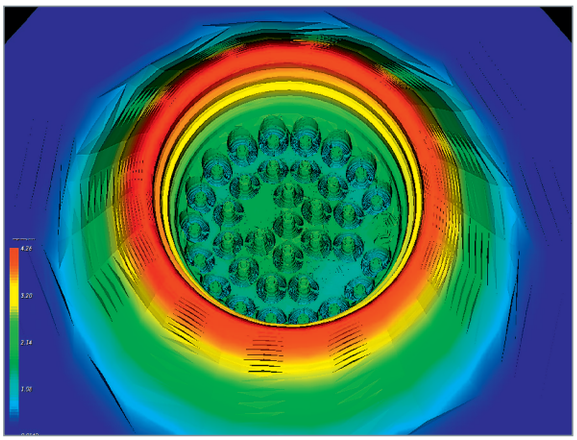


Fig. 75. Distribution 3D de flux thermique dans RJH calculée avec HORUS3D/N.

Une IHM dédiée, appelée « GAÏA », permet d'automatiser et de fiabiliser la modélisation du RJH. La première version du formulaire a été utilisée par la maîtrise d'œuvre AREVA-TA pour la fin des études de développement (fig. 74, 75).

Dans HORUS3D/N, la modélisation 3D homogène optimisée retenue nécessite de différencier 70 000 mailles en espace pour le calcul du flux et celui de l'évolution du combustible (modification au cours du temps de sa composition, en raison de l'irradiation). Le découpage énergétique pour le calcul du flux est à six groupes d'énergie (à titre d'exemple, le calcul des cœurs des réacteurs à eau sous pression est habi-

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 146

tuellement réalisé à deux groupes d'énergie, ceux des cœurs de propulsion navale à quatre groupes). Pour aboutir à une modélisation 3D du cœur homogène suffisamment précise, il est nécessaire de constituer des bibliothèques de données nucléaires homogénéisées en espace et condensées en énergie pour chaque composant du cœur (combustible, réflecteur et structures). Ces bibliothèques sont obtenues par des modélisations hétérogènes fines à 172 groupes d'énergie, en portant une attention particulière à la mise en forme des données de sections efficaces, du fait du phénomène d'autoprotection (voir *supra*, p. 65-72).

Les performances actuelles du schéma de calcul représentent le meilleur compromis entre précision et temps de calcul, et respectent les exigences de précision formulées par le maître d'œuvre. Sur une machine de type Pentium Linux séquencée à 3 GHz, un calcul en évolution requiert environ sept heures de temps CPU, selon la configuration.

Par rapport aux calculs de référence TRIPOLI-4®, la réactivité est prédite à mieux que 200 pcm dans une configuration peu perturbée et 400 pcm dans une configuration perturbée comportant des dispositifs expérimentaux et des absorbants de contrôle. L'écart sur la puissance par assemblage est inférieur à 2 %. Une illustration de la modélisation en géométrie hétérogène et à trois dimensions du RJH avec le code TRIPOLI-4® est donnée ci-dessous (fig. 76).

En évolution, HORUS3D/N est validé par rapport à un calcul de transport à vingt groupes d'énergie et à deux dimensions

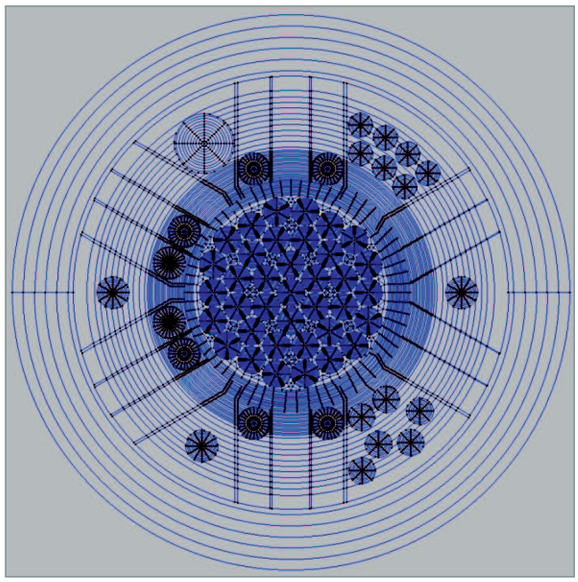


Fig. 78. Géométrie de calcul APOLLO2 du cœur RJH nu à deux dimensions.

utilisant le solveur TDT-MOC (méthode des caractéristiques) du code APOLLO2 (voir fig. 78). Entre les calculs APOLLO2 TDT-MOC et les calculs de référence TRIPOLI-4®, l'écart observé sur la réactivité est de 120 pcm. Les écarts par rapport aux valeurs TRIPOLI-4® sont de 1,6 % et 1,9 %, respectivement sur les distributions de puissances par assemblage et par plaque.

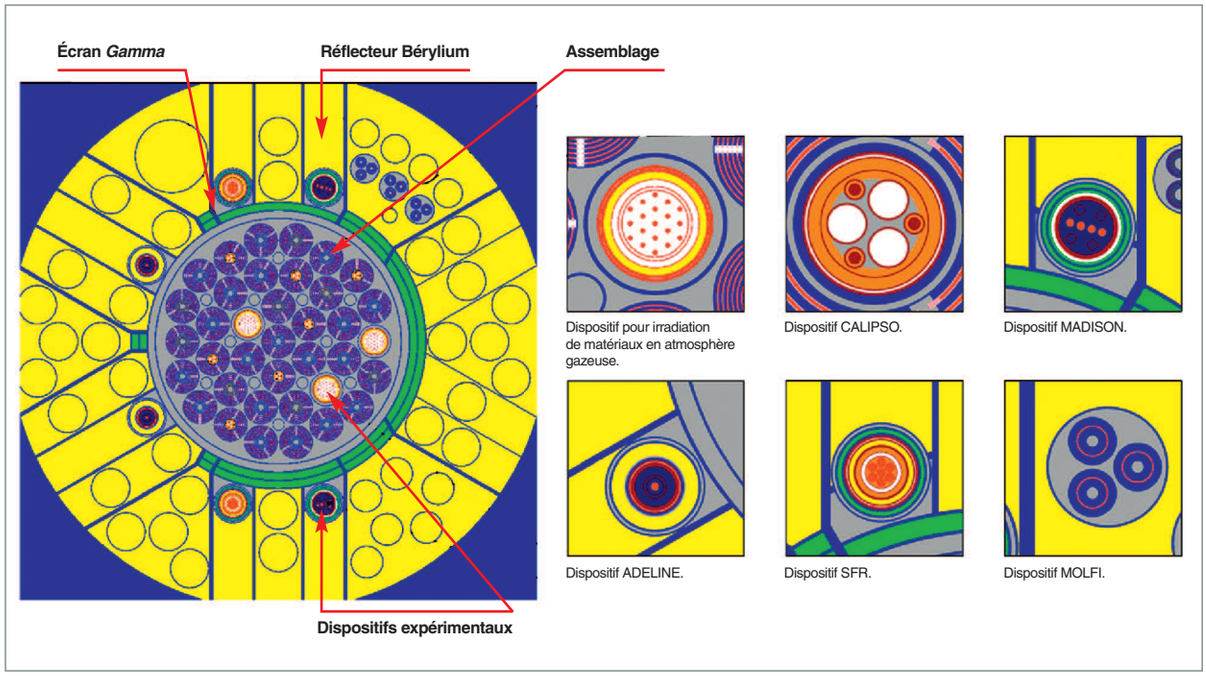


Fig. 76. Modélisation TRIPOLI-4® hétérogène du RJH, avec chargement expérimental maximum (dispositifs gaz, CALIPSO, MOLFI, MADISON, SFR et ADELINE).

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 147

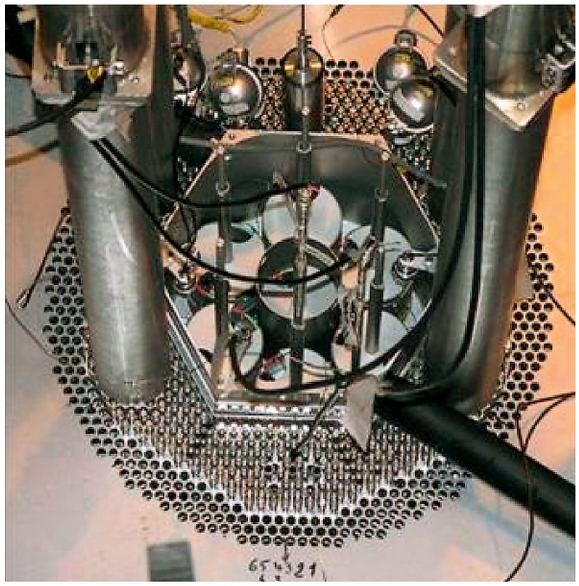


Fig. 71. Cœur AMMON en configuration de référence, chargé dans ÉOLE.

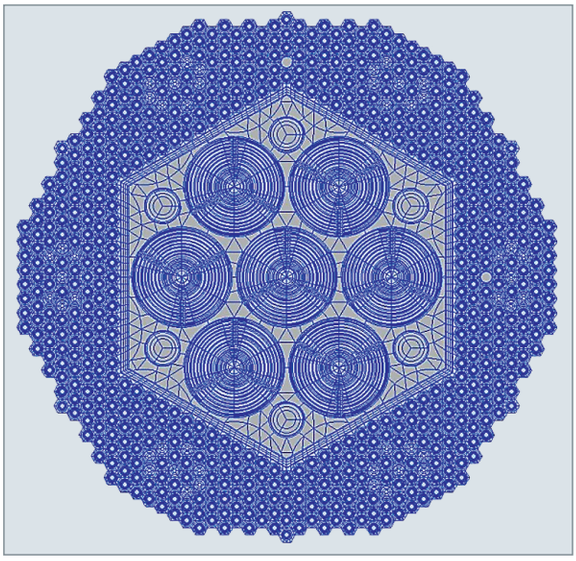


Fig. 79. Modélisation du cœur AMMON en configuration de référence, avec APOLLO2.

Les performances en termes de biais et d'incertitudes applicables aux études menées avec HORUS3D/N sont définies, suite à la qualification du formulaire, sur la base d'expériences conçues et réalisées par le CEA/DEN.

En particulier, des programmes expérimentaux élémentaires nommés VALMONT et ADAPh ont tout d'abord été réalisés, respectivement dans les réacteurs MINERVE, puis ÉOLE et MINERVE.

- Le programme VALMONT (Validation du combustible Aluminium Molybdène Uranium pour la NeuTronique), réalisé en 2004, a qualifié le calcul neutronique cœur avec combustible UMoAl hautement enrichi en uranium (HEU) permettant de réduire et de maîtriser les incertitudes associées ;

- le programme ADAPh (Amélioration des Données de bAse Photoniques), réalisé en 2005, a conduit à une première qualification du calcul des échauffements photoniques prompts et retardés dans les matériaux.

Le programme expérimental spécifique **AMMON*** – contenant sept assemblages RJH – dans le réacteur ÉOLE a débuté en 2010 et s'est poursuivi jusqu'en 2013. Il permettra *in fine* la qualification d'HORUS3D/N et P (P pour photonique) vis-à-vis de la majorité des grandeurs intégrales neutroniques et photoniques du RJH et des effets en réactivité.

Les outils logiciels actuels permettent de traiter un large spectre d'applications qui va au-delà de la physique des réacteurs proprement dite. Si la qualité intrinsèque de ces logiciels de calcul satisfait dans de nombreux cas l'utilisateur final, ce dernier manifeste toujours des attentes fortes, notamment en ce qui concerne leur souplesse d'emploi, leur automaticité, leur fiabilité, leur aptitude à des couplages, leur capacité à fournir des incertitudes sur les grandeurs calculées.

Le progrès des méthodes de calcul, la puissance croissante des ordinateurs, le perfectionnement des logiciels de modélisation géométrique, le développement de puissants logiciels de traitement de grands volumes de données, laissent augurer une transformation significative de la pratique de l'ingénieur d'études.

Le système de calcul de nouvelle génération en cours de développement APOLLO3® vise à répondre avec une efficacité accrue à ces enjeux.

Anne Nicolas,
Département de modélisation des systèmes et des structures
Jean-Pascal Hudelot et Jean-Marc Palau
Département d'études des réacteurs

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 148

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 149

Le calcul haute performance

Introduction

Dans le domaine de la physique des réacteurs nucléaires, le **Calcul Haute Performance** ouvre la voie à des évolutions et des changements dans la manière d'effectuer une simulation numérique et de l'utiliser. Le Calcul Haute Performance – *High Performance Computing* : **HPC**, en anglais – désigne l'ensemble des méthodes de traitement d'applications complexes par des machines puissantes capables de gérer d'importants volumes d'informations numériques.

Les évolutions des codes de calcul (algorithmes, méthodes numériques…) et l'utilisation efficace de puissances de calculs croissantes font continuellement progresser la précision et la finesse des modélisations [1].

Les informations ainsi obtenues par la simulation numérique sont également plus complètes, grâce à la généralisation des **calculs tridimensionnels**, la prise en compte d'une part des **phénomènes multi-physiques*** et d'autre part d'un plus grand nombre de composants des centrales simulés de manière simultanée (traitement en trois dimensions du cœur du réacteur et de la chaudière, avec couplage des phénomènes neutroniques et thermohydrauliques). On atteint ainsi des précisions *a priori* bien meilleures dans des temps du même ordre de grandeur que ceux correspondant à des modèles simplifiés utilisés de manière courante.

Ces progrès constants dans le domaine de la modélisation et de la simulation numérique sont indispensables pour :

- Réduire les incertitudes ;
- optimiser les conceptions des installations et donc les coûts afférents ;
- améliorer la sûreté ;
- optimiser le fonctionnement des installations ;
- améliorer la connaissance de la physique.

En fonction des objectifs que l'on cherche à atteindre à l'aide du HPC, différentes techniques peuvent être utilisées. On peut classer en quatre grandes catégories les objectifs qui mobilisent le HPC :

- **Les calculs multi-paramétrés** : c'est la technique de base pour l'optimisation. Le HPC est un excellent outil pour prendre en compte plus de paramètres et réduire le *« time to market »* de la solution optimisée. Cela permet également l'utilisation de techniques d'apprentissage, comme les **réseaux de neurones***, afin de trouver automatiquement un ensemble optimisé de paramètres ;

- **une physique à très haute résolution** : c'est celle qui s'approche au plus près de la réalité physique en tentant de simuler au mieux l'ensemble des phénomènes physiques aux différentes échelles de temps, d'espace et d'énergie, ce qui nécessite immanquablement une plus grande capacité mémoire et une puissance de calcul accrue.

- **une physique plus réaliste** en utilisant systématiquement le modèle physique le plus réaliste possible à la place d'un modèle simplifié ou de valeurs pré-établies. Cela implique, non seulement une plus grande puissance de calcul, mais également des systèmes couplés robustes et faciles d'utilisation.

- **la simulation en temps réel** : qui existe déjà, mais on peut imaginer améliorer la modélisation afin d'obtenir des simulateurs plus réalistes et de diminuer le nombre d'hypothèses.

Désormais, le HPC est assimilé à l'utilisation des **superordinateurs***. Même si l'on peut considérer cela comme quelque peu réducteur, il est clair que de la station de travail de l'ingénieur au supercalculateur, le calcul intensif réside en la capacité à utiliser un grand nombre de **cœurs de calcul***, et ce de manière simultanée (ou en parallèle). Sans prétention à l'exhaustivité, les paragraphes qui suivent présentent les grandes lignes de l'utilisation du HPC dans les codes de transport neutronique Monte-Carlo et déterministe, ainsi que ses perspectives de développement, incluant l'évolution des architectures matérielles.

Le HPC pour les simulations en Monte-Carlo

La méthode de Monte-Carlo pour résoudre l'équation du transport des neutrons est un excellent candidat, naturel, pour exploiter le parallélisme. Comme le processus de simulation est fondé sur un traitement statique des trajectoires indépendantes des particules, chaque particule peut être simulée par un processeur différent. Les méthodes de Monte-Carlo sont dites *« embarrassingly parallel »*.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 150

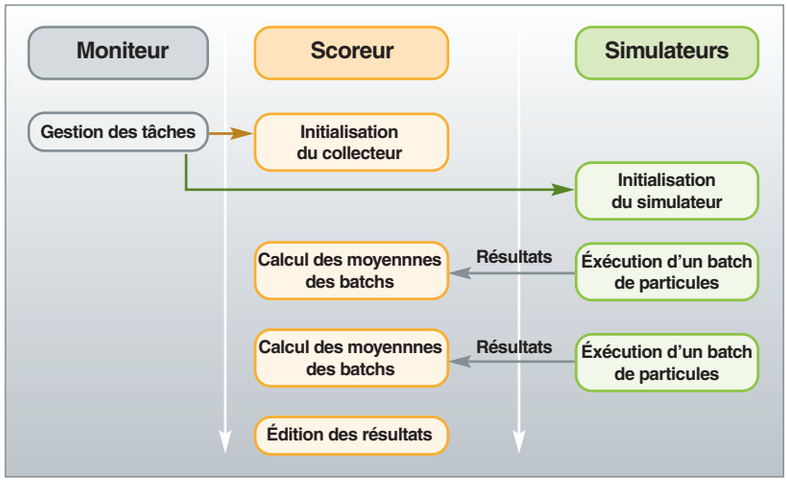


Fig. 80. Principe de mise en œuvre du parallélisme dans une simulation Monte-Carlo de propagation de particules – Cas du code TRIPOLI-4®.

Principes pour une mise en œuvre parallèle

Afin de contrôler le déroulement de la simulation, il faut un processus (moniteur) qui soit en charge de contrôler l'ensemble de la simulation et un autre processus (scoreur) qui soit en charge de recueillir les résultats des simulations. Ces deux processus peuvent être exécutés sur un même processeur ou sur des processeurs différents.

Pour cette partie mise en œuvre, le modèle utilisé est une approche **MPMD** (pour *Multiple Program Multiple Data* : des programmes différents s'exécutent en parallèle utilisant des données différentes) sur la base d'un modèle « maître / esclave » avec l'identification d'un maître en charge du contrôle de la simulation et la séparation des processus de simulation et des processus de récupération [2, 3, 4, 5].

Ce principe, appliqué dans le code TRIPOLI-4® [5, 6, 7, 8] est schématiquement décrit dans la figure 80.

Les principaux avantages de ce modèle sont sa facilité d'implémentation et de portage (échange d'informations entre les processus), son aptitude à la simulation de particules indépendantes, et, enfin, sa tolérance aux pannes. Concernant ce dernier aspect, si l'un des simulateurs devient inopérant, que cela soit dû à un défaut matériel ou à un problème numérique (non convergence), le moniteur permet de relancer les **batchs*** de particules correspondants sur un autre simulateur. Grâce à ces caractéristiques, même si plus de la moitié des simulateurs est perdue, la simulation peut encore se poursuivre.

D'autres dispositifs ont également été mis en place, lors de l'exécution de TRIPOLI-4®, comme des procédures de sauvegarde/reprise : l'état courant de la simulation TRIPOLI-4® est stocké dans des fichiers différents qui permettent la reprise de la simulation à tout moment.

Du point de vue mathématique et algorithmique, le principal problème concerne la version parallèle du **générateur de nombres aléatoires*** [9] (voir *supra*, p. 94 et 95) dont on rappelle que celui-ci doit répondre aux propriétés suivantes :

- Indépendance par rapport au nombre de processeurs ;
- pas de corrélation entre les suites pour différents processeurs ;
- sur chaque processeur, le générateur peut être initialisé de façon indépendante (pas de communication entre processus).

Un exemple de ce générateur aléatoire parallèle est celui fondé sur l'algorithme GFSR *(Generalized Feedback Shift Register)* [10]. Les principaux avantages de ce générateur de nombres aléatoires sont sa rapidité d'exécution et sa très longue période (2^{607}) [voir *supra*, p. 94 et 95].

Performances

La façon d'évaluer les performances parallèles de simulations Monte-Carlo est tout à fait différente de la mesure classique d'efficacité : elle est fondée sur un facteur mesurant la qualité de la simulation appelé *« figure of merit »* (FOM) et défini comme suit :

$$FOM = \frac{1}{\sigma^2 \times \tau}$$

où σ^2 est la variance associée à la grandeur calculée et τ la durée de la simulation (voir *supra*, p. 89-106).

On s'attend à une accélération du calcul (et donc à une augmentation de la FOM) linéaire avec le nombre de processeurs, ce qui est généralement vérifié, comme l'illustre la figure 81.

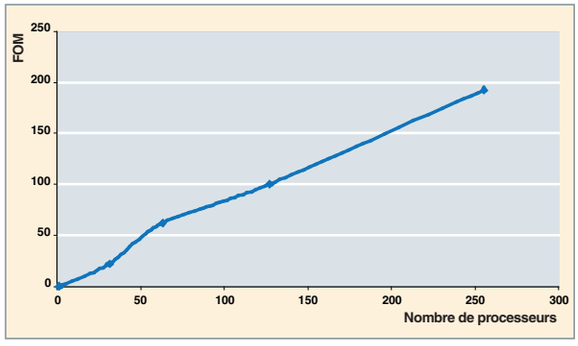


Fig. 81. Comportement typique de la *« Figure of Merit »* d'une simulation Monte-Carlo, à l'aide du code TRIPOLI-4®.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 151

Ce type de comportement est régulièrement vérifié pour des simulations allant jusqu'à 1 000 processeurs où l'efficacité reste de l'ordre de 90 %.

Un des avantages de la mise en œuvre parallèle du code TRIPOLI-4® est que le moniteur permet de contrôler de façon dynamique l'équilibre de la charge de chaque simulateur. Ainsi le nombre et la taille des batchs peuvent être ajustés afin de minimiser l'attente entre processeurs, ce qui maximise l'efficacité globale de la simulation.

Cependant, il existe tout de même des goulots d'étranglement pour obtenir un rendement idéal. Même si la performance peut être ajustée, le collecteur peut constituer un frein à une accélération optimale du calcul pour un très grand nombre de simulateurs (> 1 000). Des solutions sont à étudier, comme la mise en œuvre d'un arbre de collecteurs, afin de partager la charge de la collecte des résultats, ou encore l'accumulation des résultats après la simulation pour éviter leur collecte en ligne. Cependant, il faut porter une attention particulière à la quantité de données à stocker.

Les défis à venir

Toutefois, même si des simulations Monte-Carlo sont naturellement parallèles, comme nous l'avons vu, l'accès à l'échelle du **pétaflop** et au-delà (au-dessus de 10 000 cœurs) reste un défi, comme pour beaucoup d'autres applications. On aura à faire face à une quantité colossale de données, soit sur le réseau, soit sur le système de fichiers, afin de stocker les résultats des simulations.

Si l'on accroît encore la complexité de la géométrie, ainsi que le nombre de grandeurs à calculer (*e.g.* taux de réaction sur un cœur complet de réacteur, à l'échelle du crayon ou de la pastille), le stockage de toutes ces informations en mémoire pose problème. En effet, dans le modèle de parallélisme utilisé, toutes les données d'entrée (géométrie, compositions, données nucléaires...), ainsi que les données de sortie sont dupliquées sur chaque processeur (fig. 82).

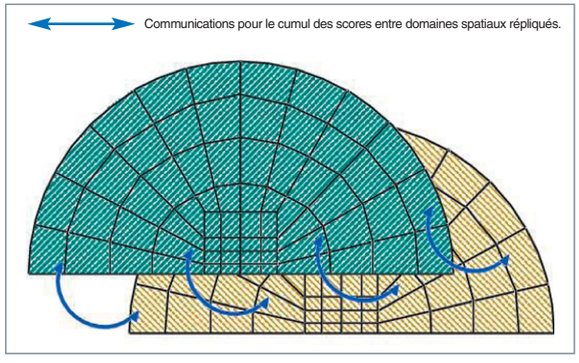


Fig. 82. Réplication de domaines (parallélisme suivant les particules).

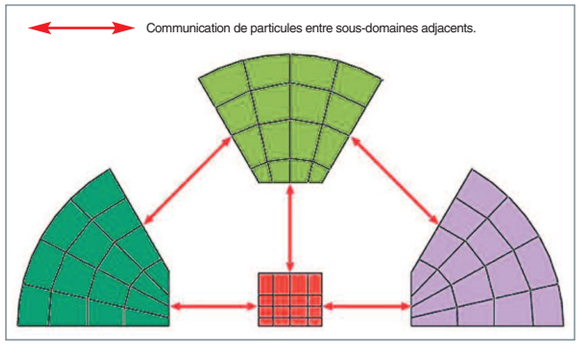


Fig. 83. Décomposition de domaines (parallélisme spatial).

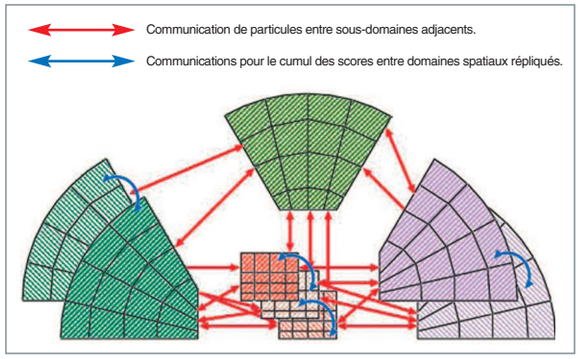


Fig. 84. Décomposition de domaines et réplication de domaines (parallélisme spatial et suivant les particules).

Par conséquent, la limite n'est pas seulement relative au temps de calcul, comme aujourd'hui, mais aussi à la taille mémoire. Une solution serait de mixer le parallélisme de tâches avec un *parallélisme de données*, et de subdiviser le domaine de calcul afin de le répartir entre les différents processeurs (fig. 83).

Mais ce parallélisme est « contre-nature » pour des simulations Monte-Carlo et conduit à des problèmes délicats tels que le déséquilibre de charge ou des pertes d'efficacité, en raison du trafic de communications entre les processeurs.

Dans le code MERCURY, les deux modèles sont mis en œuvre [11], afin de profiter des avantages des deux modèles de parallélisme, spatial et des particules (fig. 84).

Ce type d'approche est également envisagé pour le code MCNP où des paradigmes innovants de transferts de données sont à l'étude pour s'attaquer au problème du mixage du parallélisme de tâches au parallélisme de données pour une simulation Monte-Carlo [12].

Ces approches ne font pas réellement d'hypothèse particulière sur l'architecture des machines. Une autre solution, permettant de résoudre le problème de la duplication des données en mémoire, consiste à tenir compte de l'évolution des architectures où le nombre d'unités de calcul partageant une mémoire

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 152

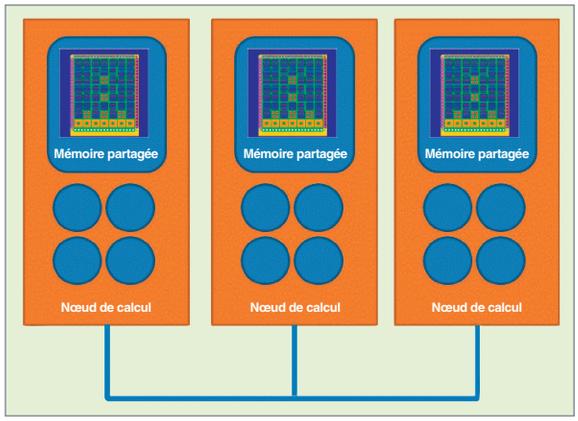


Fig. 85. Principe de partage des données au sein d'un même nœud de calcul et de duplication entre nœuds de calculs.

commune est en constante augmentation. L'idée est ici de n'avoir qu'une seule copie des données au sein d'un nœud de calcul possédant plusieurs unités de calcul qui se partagent ces données, et de ne les dupliquer qu'entre les différents nœuds de calcul. Ce principe est illustré dans la figure 85.

Il existe bien d'autres champs d'exploration du Calcul Haute Performance pour le transport Monte-Carlo, parmi lesquels on peut citer l'utilisation des accélérateurs graphiques tels que GPU ou Intel Xeon Phi.

Le HPC en déterministe

Les différents niveaux de parallélisme

Dans les approches déterministes, nous pouvons considérer trois niveaux principaux de parallélisme :

- Le premier niveau concerne les calculs multi-paramétrés. Il s'agit de réaliser un ensemble de calculs indépendants les uns des autres sur un ensemble de ressources de calcul. Il faut donc, dans ce cas de figure, gérer les flots de calculs et de données (données d'entrées et résultats) sur l'ensemble des ressources de calcul. Un exemple classique est la construction d'une bibliothèque multi-paramétrée pour le calcul d'un cœur de réacteur nucléaire. Les calculs des différents assemblages et conditions de chargement sont tous indépendants les uns des autres et peuvent donc être effectués en même temps ;

- le second niveau correspond aux calculs multi-domaines. Il s'agit ici de gérer en parallèle un ensemble de calculs opérant sur des données qui ne sont pas forcément indépendantes. Par exemple, cela concerne tous les traitements portant sur les sections efficaces, les **calculs d'évolution isotopique***, les contre-réactions thermohydrauliques... Pour ce niveau, en général, on peut considérer que la dépendance spatiale des données est faible, et une approche massivement parallèle est bien adaptée. Dans les cas où la dépendance spatiale des données est forte, des techniques de décomposition de domaines sont généralement utilisées. C'est typiquement le cas lors des résolutions de l'équation du transport ;

- le troisième niveau concerne principalement la parallélisation à grain fin de solveurs en exploitant le parallélisme intrinsèque des méthodes numériques considérées.

La suite illustre ces différents niveaux, par quelques exemples représentatifs [13].

Premier niveau : calculs multi-paramétrés

Le principal intérêt de ce niveau est d'utiliser la « force brute » du HPC pour résoudre, dans un temps à échelle « humaine », des problèmes nécessitant un nombre important de calculs indépendants.

Un exemple en est fourni par l'utilisation du HPC pour réduire les incertitudes numériques des simulations (par exemple, grâce à des discrétisations plus fines, en espace, en énergie…) ou pour gagner des marges à l'aide de techniques d'optimisation.

Les calculs de propagation d'incertitudes peuvent être placés sur ce premier niveau. Outre les techniques déterministes (voir *supra* p. 61-88), l'approche stochastique moins intrusive et plus générale, fondée sur un échantillonnage des données d'entrée, peut pleinement bénéficier du HPC « force brute ». Ainsi, la propagation des incertitudes dans les problèmes couplés thermohydraulique-neutronique ou dans les calculs d'évolution isotopique, est désormais envisageable.

En ce qui concerne les problèmes d'optimisation, un très bon exemple est l'optimisation de plans de chargement de cœurs à l'aide d'algorithmes génétiques [14]. Un outil fondé sur URANIE/VIZIR et le code APOLLO3® [15] a été conçu et appliqué avec succès à l'optimisation du chargement du combustible modèle, dans le cas de cœurs de REP hétérogènes. Cet outil permet l'évaluation de plus de dix millions de configurations différentes en moins de dix heures en utilisant plus de 4 000 processeurs. Une illustration de différents types de solutions est donnée dans la figure 86, page suivante.

Le principal avantage de ce type de méthode est de permettre aux ingénieurs de tester différentes configurations et de relâcher certaines contraintes de conception, ce qui n'aurait pas été possible sans l'utilisation conjointe des algorithmes génétiques et du HPC. Des exemples de différentes solutions sont donnés dans la figure 87.

Ce type de démarche se généralise au CEA et s'applique désormais en support aux études **ASTRID*** avec un outil appelé « TRIAD ». Il est intéressant de noter qu'un exercice de

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 153

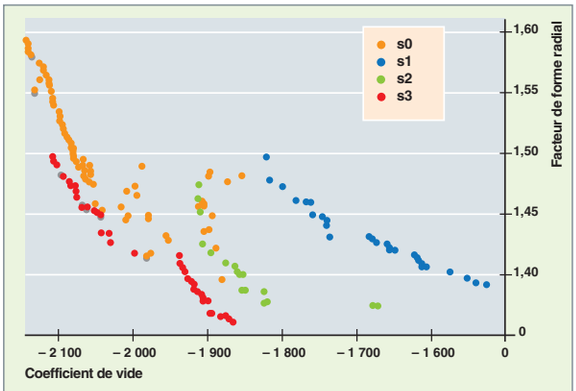


Fig. 86. Fronts de Pareto : ensembles de solutions trouvés par algorithmes génétiques suivant différentes stratégies d'optimisation sur le coefficient de vide et le facteur de forme radial, s0,s1,s2 et s3 étant différentes dispositions des assemblages fertiles dans le cœur.

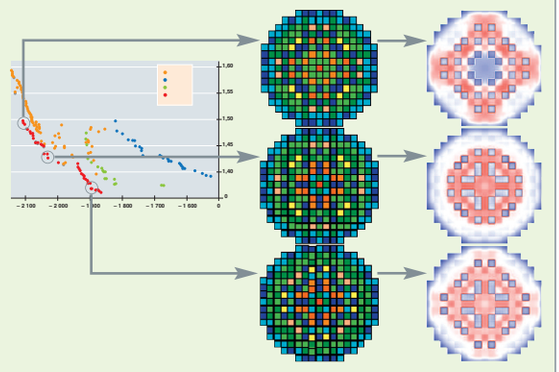


Fig. 87. Illustration de différentes solutions de plan de chargement : fronts de Pareto sur la gauche, plans de chargement au milieu, nappes de puissances correspondantes à droite.

prototypage, à la suite de l'accès à une grande ressource de calcul, a permis de démontrer aux physiciens concepteurs des réacteurs nucléaires les potentialités d'un outil et d'une approche grâce au HPC et comment, deux à trois années plus tard, grâce à l'augmentation de la puissance de calcul accessible, ce qui n'était qu'un exercice devient un outil de concepteur pour l'aide au design d'un réacteur.

Deuxième niveau : calculs multi-domaines

Ce niveau correspond à l'utilisation la plus classique. Dans la plupart des applications scientifiques parallèles, ce niveau est utilisé *via* la technique de **décomposition de domaines***. Dans le cadre de la neutronique, tous les calculs qui sont spatialement indépendants sont concernés. Par exemple, dans un calcul de cœur typique en deux étapes (voir *infra*, p. 193-213), au niveau du calcul de cœur proprement dit, toutes les séquences relatives à la gestion des sections efficaces, les contre-réactions, l'évolution isotopique, etc. sont localement associées à la maille du domaine géométrique et peuvent donc être effectuées en parallèle. Très schématiquement, dans un calcul standard de cœur de réacteur nucléaire en 3D, toutes les étapes sont spatialement indépendantes et peuvent donc être menées naturellement en parallèle, à l'exception de l'une d'entre elles : le calcul du flux neutronique. Même si toutes les étapes précédentes sont conduites en parallèle, le principal problème demeure la gestion du flot de données et la distribution des données entre les processus. Il est donc nécessaire de bien penser la conception de l'architecture du code afin d'avoir des structures de données optimales permettant de faciliter et d'optimiser la gestion des flots de données en parallèle.

S'agissant du calcul du flux lui-même, des techniques classiques de décomposition de domaines peuvent être utilisées [16]. Concernant le solveur de l'équation du transport [17], des degrés supplémentaires de parallélisme peuvent être trouvés, car les autres dimensions de l'équation peuvent être utilisées, par exemple les dimensions angulaires ou énergétiques. Beaucoup de solveurs ont été mis en œuvre en parallèle, en exploitant le parallélisme soit en angle et en énergie [18, 19, 20], soit en espace [21, 22, 23], soit les trois [24].

La figure 88, ci-dessous, illustre les performances obtenues avec le solveur de transport MINARET du code APOLLO3® par parallélisation suivant les directions angulaires. L'exercice, qui s'est déroulé sur les supercalculateurs TITANE du **CCRT*** et **TERA-100*** du CEA/DAM, a permis de valider l'architecture et le comportement numérique du solveur pour une utilisation du parallélisme massif, jusqu'à 33 000 cœurs de calcul, sur une configuration réaliste : calcul de cœur 3D de type **ESFR***.

Un autre degré de parallélisme peut être utilisé lors de l'exploitation des techniques multi-échelles. Par exemple, le couplage d'une solution fine au niveau d'un assemblage de l'équation du transport avec une solution grossière 3D cœur. Des exemples typiques de la mise en œuvre de ces techniques peuvent être trouvés dans le code COBAYA [25] (fig. 89) ou dans le solveur diffusion MINOS, au sein d'une

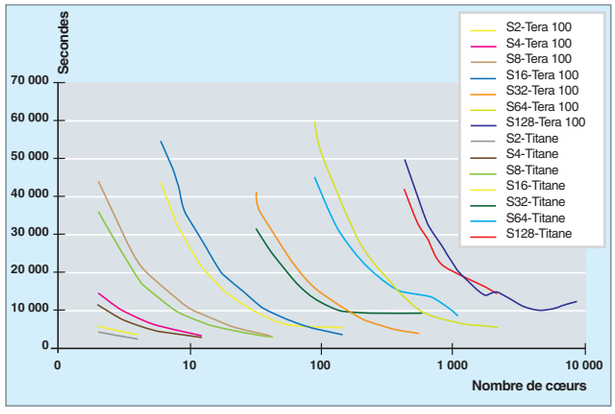


Fig. 88. Temps de calcul d'une simulation 3D avec le solveur transport MINARET du code APOLLO3® sur les supercalculateurs TITANE (CCRT) et TERA-100 (CEA/DAM).

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 154

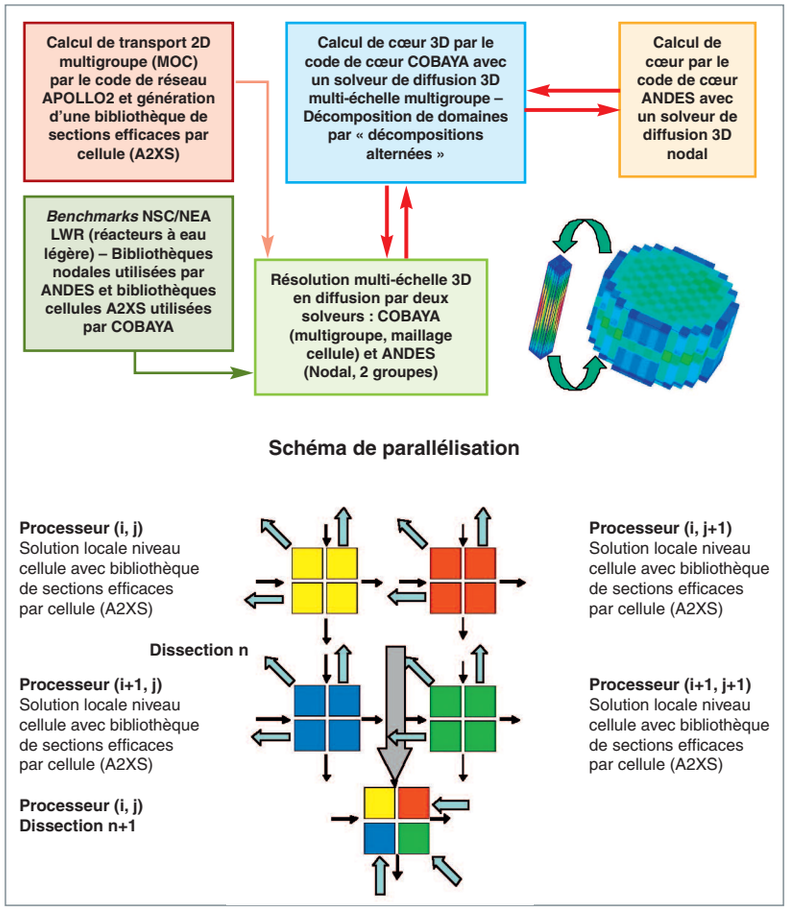


Fig. 89. Principe de parallélisme utilisé dans le code COBAYA (source : d'après le projet européen NURESIM).

approche originale fondée sur une méthode de synthèse modale [26].

Cette approche multi-échelles du parallélisme est également bien adaptée pour les calculs 3D, en particulier lorsque la méthode est intrinsèquement peu parallèle ou très difficile à paralléliser. Un exemple typique est la méthode des caractéristiques (voir *supra*, p. 82-85) utilisée pour trouver la solution de l'équation du transport des neutrons. En effet, il est possible de paralléliser cette méthode, mais il faut employer des techniques de parallélisme très avancées, en vue d'obtenir une efficacité intéressante [27, 28, 29]. Une alternative est d'adopter une approche 2D avec un couplage dans la troisième direction, et de calculer des plans 2D en parallèle (fig. 90). Cette approche est utilisée, par exemple, dans le code DeCART [30] et dans le code UNIC [31].

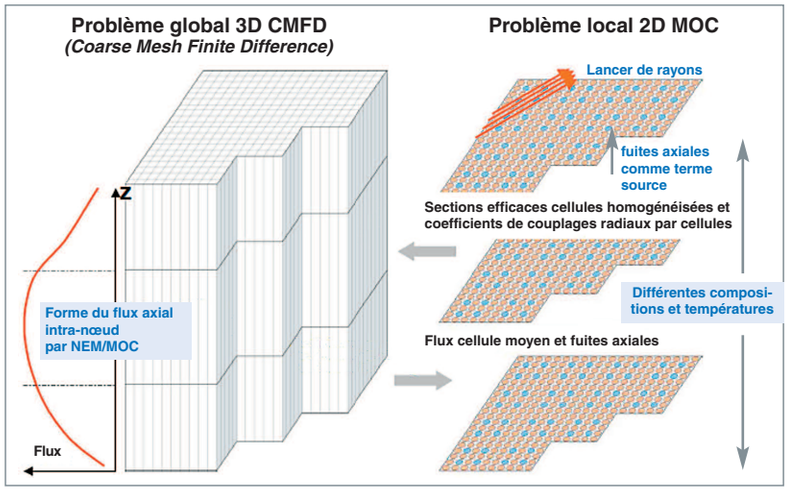


Fig. 90. Méthode MOC 3D à partir de synthèse de calculs 2D MOC plans.

Troisième niveau : parallélisme à grains fins

Ce niveau est généralement utilisé sur des architectures à mémoire partagée et exploite le parallélisme intrinsèque des algorithmes. Ces techniques ont eu beaucoup de succès au début des années 2000 avec le langage HPF, puis OpenMP [21, 22, 32]. Il devient de plus en plus intéressant sur les architectures multi-cœurs actuelles de combiner ce niveau *grain fin* avec le niveau précédent, afin d'améliorer les performances globales des algorithmes.

Parallélisme hybride

La course à la puissance a conduit à utiliser désormais dans les supercalculateurs les plus puissants des accélérateurs comme, par exemple, des cartes graphiques (GPU). Ces architectures de nouvelle génération présentent l'avantage d'offrir un rapport performance de calcul / consommation électrique très intéressant. Cependant, elles entraînent une hétérogénéité supplémentaire dans les codes devant les utiliser.

Des premières expérimentations ont été réalisées dans le cadre du projet APOLLO3® autour du solveur de transport simplifié MINOS. Ainsi, il est possible de mixer une approche décomposition de domaines et une accélération sur carte graphique [18].

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 155

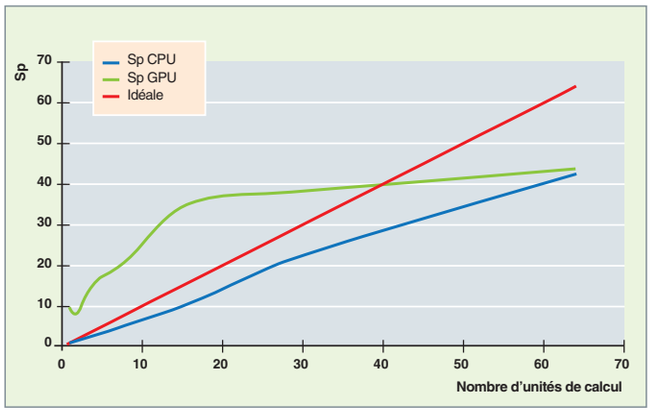


Fig. 91. Accélérations (Sp pour *Speedup*) comparées entre CPU (courbe bleue), GPU (courbe verte) et accélération idéale (courbe rouge). En abscisse, le nombre d'unités de calcul.

La figure 91, page suivante, montre les résultats obtenus sur un calcul 3D, en diffusion à deux groupes, cellule par cellule, d'un cœur de REP. Comme on peut le constater, les accélérations jusqu'à 30 unités de calcul sont très intéressantes par rapport à des CPUs classiques.

Évolution des architectures matérielles pour le calcul scientifique haute performance

Ce paragraphe a pour objectif de fournir des éléments d'information sur l'évolution des architectures de machines et les tendances annoncées sur la prochaine dizaine d'années.

La première partie présente les évolutions des machines de calcul sur les vingt dernières années, ainsi que les principales tendances qui s'en dégagent, permettant ainsi de mieux anticiper les prochaines évolutions.

La deuxième partie fait un bref tour d'horizon des architectures actuelles, avec un focus sur les machines françaises. Enfin, dans la dernière partie on aborde la problématique des architectures de machines à un horizon de dix ans, avec notamment la cible de l'**exascale***.

Évolutions sur les vingt dernières années

Un moyen simple et représentatif de tracer l'évolution des architectures de machines de calcul est de se fonder sur le classement du TOP 500 (http://www.top500.org) qui, depuis 1993, classe deux fois par an les 500 machines les plus puissantes au monde, sur la base d'un *benchmark* d'algèbre linéaire.

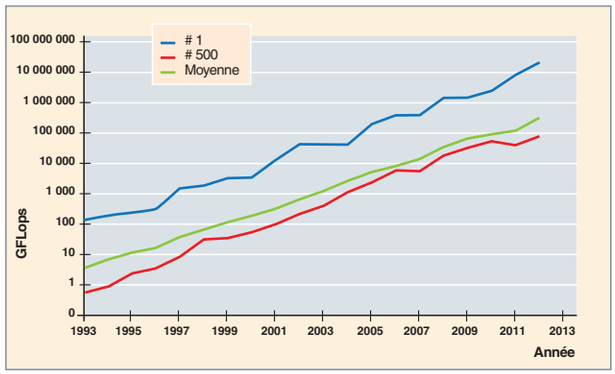


Fig. 92. Évolution de la puissance de calcul dans le TOP 500.

Évolution de la puissance des machines

La figure 92 présente l'évolution de la puissance crête de la première machine du classement, ainsi que de la dernière. Est également indiquée la puissance crête moyenne de l'ensemble des machines du classement.

Comme on peut le constater, la puissance est en constante augmentation. Autre élément intéressant, le délai de passage du premier rang au dernier est de l'ordre de sept à huit ans.

La figure 93, ci-dessous, montre l'évolution du nombre de processeurs ou cœurs de calcul, au fil des ans, pour la machine n° 1 du classement, la dernière du classement ainsi que l'évolution du nombre moyen de processeurs pour l'ensemble des machines présentes dans le classement.

Les courbes sont moins lisses que dans la figure précédente, mais les conclusions sont les mêmes. Cela signifie que l'augmentation de la puissance de calcul passe par l'augmentation du nombre d'unités de calcul. Comme sur la figure 93, le nombre de cœurs de la dernière machine du TOP 500 est le nombre de cœurs de la machine n°1, huit ans plus tôt.

Cela signifie que la tendance d'augmentation massive du parallélisme ne vaut pas seulement pour la machine la plus puissante du monde, mais pour toutes les machines.

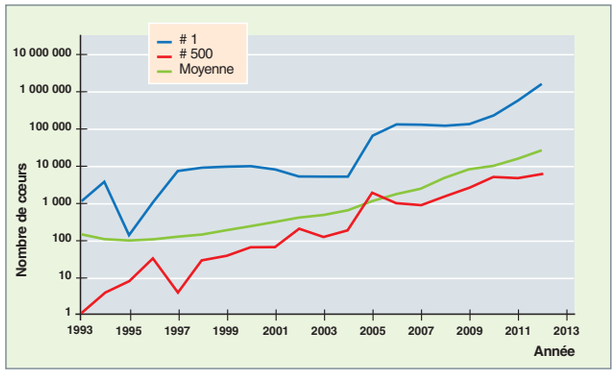


Fig. 93. Évolution du nombre de cœurs dans le TOP 500.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 156

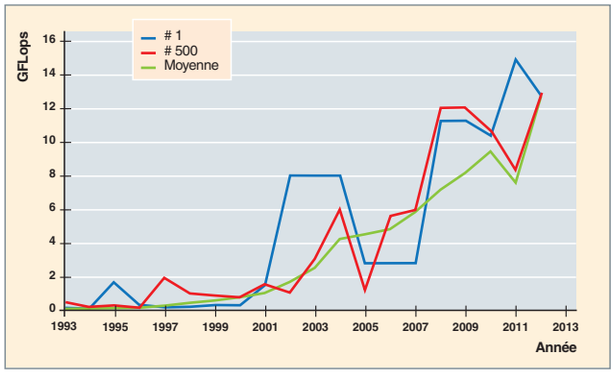


Fig. 94. Évolution de la puissance d'un cœur de calcul.

Cela est confirmé par le graphe suivant (fig. 94) qui représente l'évolution de la puissance d'un cœur de calcul.

Sur cette courbe les écarts entre le numéro 1 et le dernier ne sont pas systématiquement constants, au fil des ans. Le processeur de la machine n°1 n'est pas nécessairement plus puissant que celui de la dernière. On note, en particulier, qu'en 2012 la puissance est identique pour ces deux extrêmes. Cela est essentiellement dû à la standardisation des composants utilisés. Il n'y a plus vraiment de processeur spécialisé pour le HPC.

Autre remarque importante, la puissance unitaire d'un processeur a augmenté d'un facteur 100 entre 1993 et 2012. La *loi de Moore* aurait voulu que ce facteur fût de l'ordre de 8 000… En revanche, la puissance totale des machines a progressé d'un facteur supérieur à 150 000.

Il apparaît donc clairement que l'augmentation de la puissance des machines se fait essentiellement par l'augmentation du degré de parallélisme.

Évolution de la mémoire

La figure 95, ci-dessous, présente l'évolution de la taille mémoire totale des machines, uniquement pour la machine classée n°1 au TOP 500.

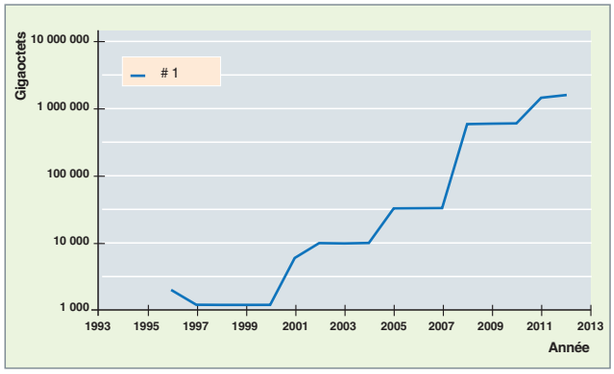


Fig. 95. Évolution de la capacité mémoire du TOP 500.

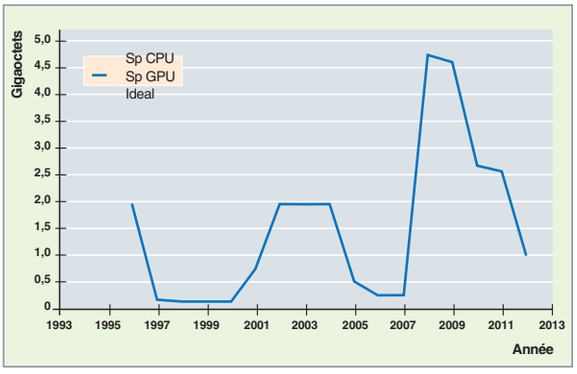


Fig. 96. Évolution de la mémoire par cœur de calcul.

Nous pouvons constater qu'il existe une augmentation régulière et importante de la capacité mémoire totale des machines de calculs.

Mais qu'en est-il de la mémoire par cœur de calcul ? Son évolution est représentée figure 96, ci-dessus.

Un constat manifeste est que, s'il y a eu des variations sensibles au cours des années, depuis 1996, la taille mémoire par cœur n'a pas augmenté, voire a plutôt diminué.

En conclusion, la capacité mémoire globale totale des machines augmente proportionnellement à la puissance (bien que la pente soit plus douce), mais la capacité par cœur de calcul soit reste constante, soit diminue. Cela signifie que cet espace mémoire global est de plus en plus partagé par des unités de calcul (cœurs, processeurs multi-cœurs) au sein d'un nœud de calcul, et de plus en plus distribué entre les nœuds de calcul.

Les architectures et puissances de calculs actuelles

Toutes les machines de calcul sont parallèles. Cela va de la station de travail au supercalculateur classé premier au TOP 500.

Comme mentionné auparavant, les processeurs eux-mêmes sont parallèles, dans le sens où ils sont devenus multi-cœurs. Ils sont eux-mêmes ***« multithreads »***. Ces processeurs multi-cœurs sont eux-mêmes agrégés au sein d'un nœud de calcul à mémoire partagée, les nœuds étant reliés entre eux par un réseau de communication. Si l'on examine leur architecture, ces dernières années, elles ont globalement oscillé entre architectures massivement parallèles *homogènes* (on entend par « homogène » que les processeurs sont tous identiques ou, tout du moins, du même type) ou *hétérogènes* à base d'accélérateurs. Les tableaux 21 et 22 suivants présentent les dix premières machines du TOP 500 en juin 2012 et en novembre 2011.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 157

Tableau 21

Dix premières machines du TOP 500 en juin 2012

Sur fond bleu, les machines avec accélérateurs.

Machine	Technologie du processeur	Cadence du processeur MHz	Accélérateur/ co-processeur	Cœurs par *socket**
BlueGene/Q	PowerPC	1 600	None	16
K computer	Sparc	2 000	None	8
BlueGene/Q	PowerPC	1 600	None	16
iDataPlex	Intel SandyBridge	2 700	None	8
NUDT YH MPP	Intel Nehalem	2 930	NVIDIA 2050	6
Cray XK6	AMD x86_64	2 200	NVIDIA 2090	16
BlueGene/Q	PowerPC	1 600	None	16
BlueGene/Q	PowerPC	1 600	None	16
Bullx B510	Intel SandyBridge	2 700	None	8
Dawning TC3600	Intel Nehalem	2 660	NVIDIA 2050	6

Tableau 22

Dix premières machines du TOP 500 en novembre 2011

Sur fond bleu, les machines avec accélérateurs.

Machine	Technologie du processeur	Cadence du processeur MHz	Accélérateur/ co-processeur	Cœurs par *socket*
K computer	Sparc	2 000	None	8
NUDT YH MPP	Intel Nehalem	2 930	NVIDIA 2050	6
Cray XT5-HE	AMD x86_64	2 600	None	6
Dawning TC3600	Intel Nehalem	2 660	NVIDIA 2050	6
HP ProLiant SL390s	Intel Nehalem	2 930	NVIDIA 2050	6
Cray XE6	AMD x86_64	2 400	None	8
SGI Altix ICE	Intel Core	3 000	None	4
Cray XE6	AMD x86_64	2 100	None	12
Bull bullx super-node S6010/S6030	Intel Nehalem	2 260	None	8
BladeCenter QS22/LS21	Power	3 200	IBM PowerXCell 8i	9

Tableau 23

Liste de différentes machines accessibles en France, avec indication de leur rang mondial, leur nombre de cœurs et leur puissance en TeraFLOPS* (10^{12} opérations flottantes par seconde)

Rang	Site	Système	Nombre de cœurs	Puissance TeraFLOPS
9	CEA/TGCC/GENCI	CURIE TN – BULL Bullx	77 184	1 667,2
17	CEA	TERA-100 – BULL Bullx	138 368	1 254,5
29	EDF	Zumbrota – IBM BlueGene/Q	65 536	838,9
30	CNRS/IDRIS/GENCI	IBM BlueGene/Q	65 536	838,9
75	CINES/GENCI	JADE – SGI Altix	23 040	267,9
97	CEA/CCRT	AIRAIN – BULL Bullx	9 440	203,9
104	EDF	Ivanohe – IBM iDataPlex	16 320	191,3
115	CEA	TERA-100 Hybrid – BULL Bullx	7 020	274,6
149	CNRS/IDRIS/GENCI	IBM BlueGene/P	40 960	139,3
162	CEA/TGCC/GENCI	CURIE Hybrid – BULL Bullx	5 040	198,2
168	CEA/CCRT/GENCI	TITANE – BULL Novascale	11 520	130
201	EDF	Frontier2 – IBM BlueGene/P	32 768	111,4
245	CEA/TGCC/GENCI	CURIE TN – BULL Bullx	11 520	104,4

On constate qu'en novembre 2011, 60 % des machines du TOP 10 étaient à base d'accélérateurs, qu'en juin 2012, il n'y en a plus que 40 %. Une nouvelle inversion des proportions peut être pronostiquée... Il faut noter que l'utilisation d'un nombre croissant de processeurs conduit à une puissance thermique dégagée croissante qui doit être évacuée.

L'une des voies pour continuer à augmenter la puissance de calcul, tout en restant dans une enveloppe thermique raisonnable, est ainsi d'utiliser des accélérateurs (à l'heure actuelle, il s'agit de cartes graphiques – GPU), mais les machines **IBM BlueGene** ou encore la **machine K** de **Fujitsu** (qui a une déclinaison commerciale) sont des solutions avec des processeurs homogènes.

Le lecteur intéressé pourra consulter l'article http://www.hpcwire.com/hpcwire/2012-07-05/green500_turns_blue.html?page=2 sur l'analyse du Green 500. Le classement du Green500 (http://www.green500.org/) est le pendant du TOP 500, mais ici, le critère de classement est la puissance de calcul rapportée à la puissance électrique. Cet article montre que lors du dernier classement, ce sont les machines BlueGene/Q qui occupent les premières places, contrairement aux dernières années, où les premières machines de ce classement étaient à base d'accélérateurs.

Le tableau 23, ci-contre, synthétise les différentes machines accessibles en France (on ne parle pas ici des modalités d'accès, sachant que les machines listées sont utilisables par le CEA/DEN ou par ses clients).

En ne considérant que les machines du CEA civil, cela représente plus de 110 000 cœurs de calcul et pratiquement 2 pétaflops.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 158

Les architectures et puissances de calcul futures

On peut considérer deux périodes distinctes, et donc deux générations différentes d'architectures : les machines multi-pétascales qui reposeront *grosso modo* sur les technologies actuelles et les machines exascales qui présenteront de grosses ruptures technologiques pour atteindre la puissance de l'exaFLOPS pour une consommation électrique acceptable.

Les machines multi-petascales

Ces machines existent d'ores et déjà. Dans les prochaines années, on retrouvera donc des évolutions des architectures actuelles avec la ligne MPP homogène (BlueGene/Q, R…) et des architectures hybrides à base de GPU et du nouveau processeur Intel technologie MIC, le Xeon Phi (http://www.pcinpact.com/news/71737-intel-xeon-phi-mic-knight-corner-coprocesseur.htm).

La prochaine machine du TACC *(Texas Advanced Computing Center)*, Stampede, offrira de l'ordre de 20 petaFLOPS au début 2013, avec 5 petaFLOPS avec des processeurs classiques et 15 petaFLOPS en Xeon Phi.

Un avantage non négligeable de ce nouvel accélérateur est que les modèles et langages de programmation utilisables sont les mêmes que pour les CPU classiques. Ce n'est pas le cas des GPUs. Les langages, modèles et environnements de programmation pour le HPC constituent un sujet vaste, non abordé dans le cadre de cette brève revue.

Les machines exascales

Selon certains spécialistes, les machines exscales devraient voir le jour à l'horizon 2018-2020. Ce qui guide principalement leur conception, hormis le fait qu'elles devront atteindre l'exaFLOPS (10^{18} opérations flottantes par seconde), c'est la consommation électrique. En effet, si l'on restait sur le même type de technologie que celle adoptée pour les machines pétaflopiques actuelles, cela nécessiterait l'équivalent de la production électrique d'une centrale nucléaire pour alimenter une telle machine. Il est délicat de prédire quelles seront les architectures des machines exascales. Il convient ici de se retourner vers les spécialistes du domaine, en citant un extrait du rapport ***Roadmap 1.1*** de l'***International Exascale Software Project*** (IESP, http://www.exascale.org/iesp/Main_Page) [voir ci-contre].

En résumé : un parallélisme encore plus important (au-delà de 100 millions de cœurs), une taille mémoire par cœur réduite et obligatoirement des modèles de programmation adaptés.

Il existe encore énormément d'incertitudes sur ces machines, car même si elles voient le jour, elles seront tellement « uniques » qu'il faudra certainement les considérer comme des grands instruments de recherche construits en quelques

Extrait du rapport *Roadmap 1.1*

«As a result of these and other observations, exascale system architecture characteristics are beginning to emerge, though the details will become clear only as the systems themselves actually develop. Among the critical aspects of future systems, available by the end of the next decade, which we can predict with some confidence are the following:

- *Feature size of 22 to 11 nanometers, CMOS in 2018 ;*
- *Total average of 25 picojoules per floating point operation ;*
- *Approximately 10 billion-way concurrency for simultaneous operation and latency hiding ;*
- *100 million to 1 billion cores ;*
- *Clock rates of 1 to 2 GHz ;*
- *Multithreaded, fine-grained concurrency of 10- to 100-way concurrency per core ;*
- *Hundreds of cores per die (varies dramatically depending on core type and other factors) ;*
- *Global address space without cache coherence; extensions to PGAS (e.g., AGAS) ;*
- *128-petabyte capacity mix of DRAM and nonvolatile memory (most expensive subsystem) Explicitly managed high-speed buffer caches; part of deep memory hierarchy*
- *Optical communications for distances > 10 centimeters, possibly intersocket ;*
- *Optical bandwidth of 1 terabit per second ;*
- *System wide latencies on the order of tens of thousands of cycles ;*
- *Active power management to eliminate wasted energy by momentarily unused cores ;*
- *Fault tolerance by means of graceful degradation and dynamically reconfigurable structures Hardware-supported rapid thread context switching ;*
- *Hardware-supported efficient message-to-thread conversion for message-driven computation ;*
- *Hardware-supported, lightweight synchronization mechanisms ;*
- *3-D packaging of dies for stacks of 4 to 10 dies each including DRAM, cores, and networking.*

Because of the nature of the development of the underlying technology most of the predictions above have an error margin of +/-50% or a factor 2 independent of specific roadblocks that may prevent reaching the predicted value».

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 159

exemplaires dans le monde, selon **Marc Snir**, directeur de la *Mathematics and Computer Science Division* du *Argonne National Laboratory*, aux États-Unis.

Il est difficile de connaître l'impact de ces évolutions d'architectures sur les machines des classes inférieures, sachant qu'il existe une constante observée ces dernières années : ce qui guide le marché de l'informatique, ce n'est pas le calcul scientifique.

Et donc, même si l'on construit quelques machines exceptionnelles à base de technologies de pointe, rien ne dit que ces technologies seront utilisées dans les machines de production, car le volume de cette production sera insuffisant pour rentabiliser les composants de base.

Cette stratégie partagée par tous les continents est résumée sur la figure 97, ci-dessous, qui est la vision stratégique du gouvernement japonais pour le HPC.

Synthèse

On peut synthétiser les différentes tendances des évolutions des architectures de machines de la manière suivante :

- Depuis plus de dix ans, et encore au moins pour dix ans, l'unique voie pour augmenter la performance des machines passe par l'*augmentation constante du degré de parallélisme, et cela à tous les niveaux* : dans un cœur de calcul avec du *multithreading*, au sein d'un processeur avec plusieurs cœurs de calcul et au sein d'un nœud de calcul avec plusieurs processeurs par nœud. En 2012, ce degré de parallélisme est de l'ordre du million de cœurs pour les premières machines du TOP 500, ou 100 000 pour les machines européennes ;

- La puissance des cœurs de calcul n'augmentera que très faiblement, voire baissera pour diminuer la consommation électrique ;

- La taille mémoire par cœur de calcul restera constante, voire, aura tendance à diminuer ;

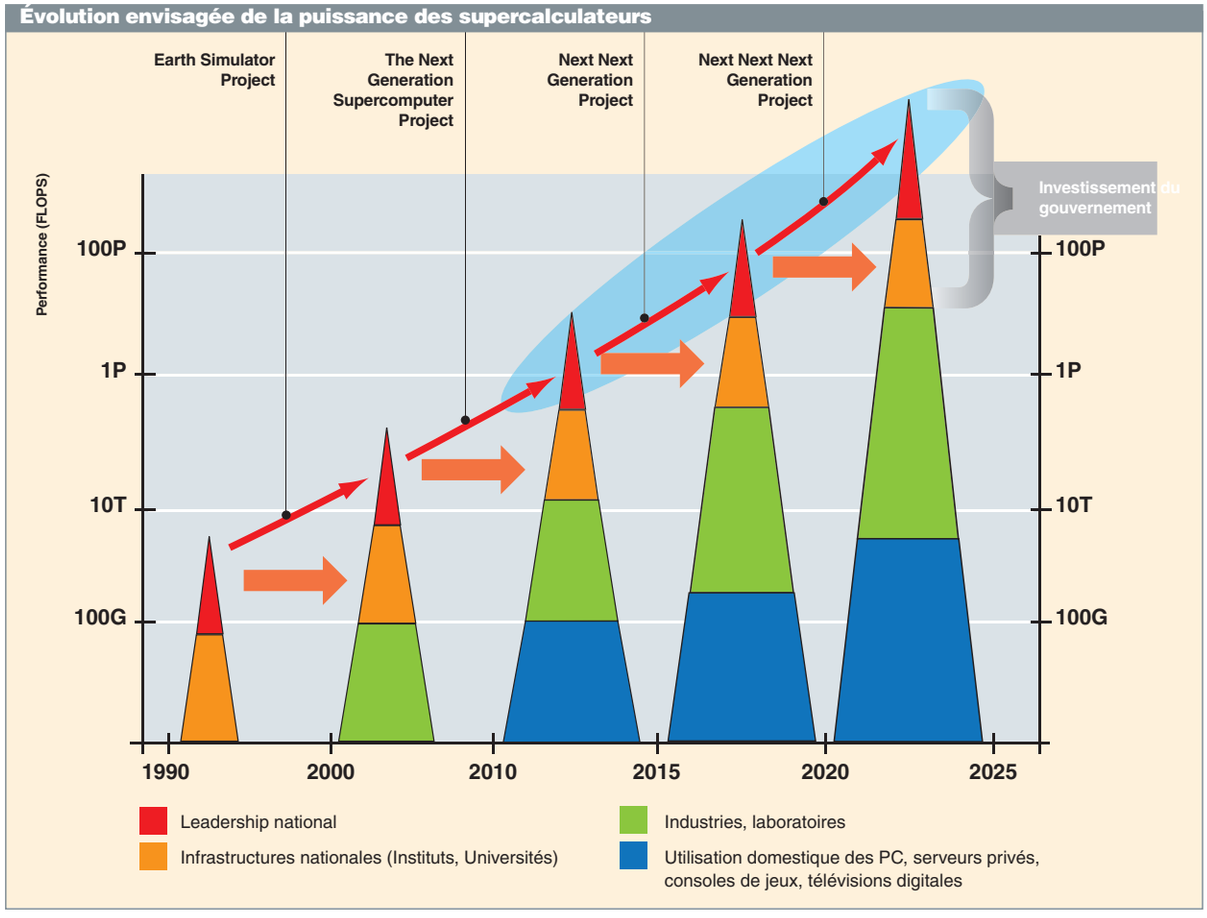


Fig. 97. Vision stratégique du gouvernement japonais pour le HPC.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 160

- Le type de processeur qui sera utilisé n'est pas clairement déterminé, et il existe encore de nombreuses options possibles, processeurs standard Intel ou accélérateurs GPU ou Intel Phi ;

- Les machines exascales devraient voir le jour dans moins d'une dizaine d'années et seront certainement réservées à quelques défis scientifiques. Il y aura donc certainement cohabitation de quelques systèmes exaflopiques et de machines multi-pétaflopiques. Il est cependant difficile de dire s'il y aura une homogénéité des architectures : les choix technologiques pour l'exaflop imposeront-ils les choix pour les machines multi-petaflops ?

- Quelles que soient les futures architectures, la nécessité de prendre en compte l'augmentation massive du degré de parallélisme apparaît clairement.

Références

[1] C. Calvin and D. Nowak, "High Performance Computing in Nuclear Engineering", Chapter *in Handbook of Nuclear Engineering*, Springer, 2010.

[2] F. Brown, J. Goorley and J. Sweezy, "Mcnp5 Parallel Processing Workshop", *Workshop M&C 2003*, Gatlinburg, Tennessee, USA, April 6-11, 2003. http://mcnp-green.lanl.gov/publication/mcnp_publications.html

[3] L. Deng and Z-S Xie, "Parallelization of MCNP Monte Carlo Neutron and Photon Transport Code in Parallel Virtual Machine and Message Passing Interface", *Journal of Nuclear Science and Technology*, vol. 36, nº 7, pp. 626-629, 1999.

[4] T. Goorley, F. Brown, and L. J. Cox, "MCNP5TM Improvements For Windows PCS", *Nuclear Mathematical and Computational Sciences*, Gatlinburg, Tennessee, April 6-11, 2003, on CD-ROM, American Nuclear Society, LaGrange Park, IL, USA, 2003.

[5] J.C. Trama and FX Hugot, "TRIPOLI-4: Parallelism Capability", *ANS Winter meeting*, Washington, DC, USA, November, 11-15, 2007.

[6] J.P. Both, A. Mazzolo, Y. Péneliau, O. Petit, B. Roesslinger, *Notice d'utilisation du code TRIPOLI-4.3 : code de transport de particules par la méthode de Monte-Carlo*, rapport CEA-R-6043, 2003.

[7] J.C. Trama, "Overview of TRIPOLI-4.5", *Proceedings of 11th International Conference on Radiation Shielding*, April 13-18, 2008, Callaway Gardens, Pine Mountain, Georgia, USA, 2008.

[8] F.X. Hugot, Y.K. Lee and F. Malvagi, "Recent R&D around the Monte Carlo code Tripoli4 for criticality calculations", *Proceedings of PHYSOR 2008 Conference*, Interlaken, Switzerland, September 14-19, 2008.

[9] P. Hellekalek, "Don't trust parallel Monte-Carlo!", *ACM SIGSIM Simulation Digest archive*, vol. 28, Issue 1 (July 1998), 1998.

[10] T.G. Lewis and W. H. Payne, "Generalized Feedback Shift Register Pseudorandom Number Algorithm", *Journal of the ACM*, vol. 20 (July 1973), Issue 3, pp. 456-468, 1973.

[11] R. Procassini, M. O'Brien and J. Taylor, "Load Balancing Of Parallel Monte Carlo Transport Calculations", *M&C 2005*, Avignon, France, Septembre 12-15, 2005.

[12] P. Romano, B. Forget, F. Brown, "Towards Scalable Parallelism in Monte Carlo Particle Transport Codes Using Remote Memory Access," *Proc. SNA + MC2010*, Tokyo, Japan, October 17-20, 2010.

[13] C. Calvin, "HPC Challenges for Deterministic Neutronics Simulations Using APOLLO3® Code", *Progress in Nuclear Science and Technology Journal*, 2, pp. 7007-705, 2011.

[14] J.M. Do *et al.*, "Fuel loading pattern for heterogeneous EPR core configuration using a distributed evolutionary algorithm", *Proceedings of M&C 2009*, Saratoga Springs, New York, USA, May, 3-7, 2009.

[15] H. Golfier *et al.*, "APOLLO3: a common project of CEA, AREVA and EDF for the development of a new deterministic multi-purpose code for core physics analysis", *Proceedings of M&C 2009*, Saratoga Springs, New York, USA, May, 3-7, 2009.

[16] B. F. Smith, P. Bjorstad and W. Gropp, *Domain Decomposition – Parallel Multilevel Methods for Elliptic Partial Differential Equations*, Cambridge University Press, 1996.

[17] R. Roy and Z. Stankovski, "Parallelization of neutron transport solvers", *Recent Advances in Parallel Virtual Machine and Message Passing Interface*, LCNS, vol. 1332, pp. 494-501, 1997.

[18] E. Jamelot, J. Dubois, J-J. Lautard, C. Calvin, A-M. Baudron, "High Performance 3d Neutron Transport On Petascale And Hybrid Architectures Within APOLLO3® Code", *M&C 2011*, Rio de Janeiro, Brésil, May 2011.

[19] M. Zeyao and F. Lianxiang, "Parallel Flux Sweep Algorithm for Neutron Transport on Unstructured Grid", *The Journal of Supercomputing*, vol. 30, issue 1, 2004.

[20] Z. Stankovski, A. Puill, L. Dullier, "Advanced plutonium assembly parallel calculations using the APOLLO2 code", *M&C 97*, Saratoga Springs, NY, USA, 1997.

[21] J. Ragusa, "Application of Multithread Computing and Domain Decomposition to the 3-D Neutronics FEM Code CRONOS", *International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications*, Paris, France, Sept. 2003.

[22] J. Ragusa, "Implementation of Multithreaded Computing in the Neutronics FEM Solver Minos", *Proceedings of the ANS Mathematics and Computations International Conference*, Gatlinburg, Tennesse, April 2003.

[23] P. Guérin, A-M Baudron and J-J. Lautard, "Domain decomposition methods for core calculations using the MINOS solver", *M&C + SNA 2007*, Monterey, California, April 15-19, 2007, on CD-ROM, American Nuclear Society, LaGrange Park, IL, 2007.

[24] G. E. Sjoden, *PENTRAN: A parallel 3-D S_N transport code with complete phase space decomposition, adaptive differencing, and iterative solution methods*, Thesis (PhD). The Pennsylvania State University, Source DAI-B 58/05, p. 2652, Nov. 1997.

[25] J.J. Herrero, C. Ahnert, J.M Aragonés, "Spatial Domain Decomposition for LWR Cores at the Pin Scale", *ANS Winter meeting*, Washington, DC, USA, November, 11-15, 2007.

[26] P. Guérin, A-M Baudron and J-J. Lautard, "Component mode synthesis methods applied to 3D heterogeneous core calculations, using the mixed dual finite element solver MINOS", *PHYSOR 2006*, Vancouver, Canada, September 10-14, 2006.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 161

[27] M. Dahmani and R. Roy, "Scalability Modeling For Deterministic Particle Transport Solvers", *International Journal of High Performance Computing Applications*, vol. 20, nº 4, pp. 541-556, 2006.

[28 G. Wu and R. Roy, "Parallelization of Characteristics Solvers for 3D Neutron Transport", *Recent Advances in Parallel Virtual Machine and Message Passing Interface*, LCNS, pp. 344-351, 2001.

[29] M. Dahmani and R. Roy, "Parallel solver based on the three-dimensional characteristics method: Design and performance analysis", *Nuclear Science and Engineering*, 150 (2), pp. 155-169, 2005.

[30] J. Han Gyu *et al.*, "Methods and performance of a three-dimensional whole-core transport code DeCART", *PHYSOR 2004*, Chicago, Illinois, April 25-29, 2004, on CD-ROM, American Nuclear Society, Lagrange Park, IL, 2004.

[31] G. Palmiotti *et al.*, "UNIC: Ultimate Neutronic Investigation Code", *M&C + SNA 2007*, Monterey, California, April 15-19, 2007, on CD-ROM, American Nuclear Society, LaGrange Park, IL, 2007.

[32] F. Coulomb, "Parallelization of the DSN Multigroup Neutron Transport Equation on the CRAY-T3D using CRAFT", *Proceedings of the Eighth SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing*, PPSC, 1997.

Christophe Calvin
Département de modélisation des systèmes et des structures

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 162

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 163

Qualification et neutronique expérimentale

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 164

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 165

S'assurer de la qualité des outils de calcul neutronique

La démarche de vérification, validation et qualification

La démarche de vérification, validation et qualification (VVQ) d'un outil de calcul scientifique est le processus consistant à évaluer sa capacité à prédire les valeurs de grandeurs physiques d'intérêt associées à des phénomènes pour un champ défini d'applications. Elle vise en particulier à aboutir à la quantification des incertitudes et à la maîtrise des biais de calcul associés aux grandeurs utilisées et/ou obtenues dans les études réalisées avec cet outil.

Deux étapes classiques : la vérification et la validation des codes

- **La première étape est celle de la vérification*,** démarche permettant de s'assurer que les équations du modèle physique utilisé dans le code de calcul sont résolues correctement aux plans mathématique, numérique et informatique. La démarche peut concerner un seul, plusieurs ou l'ensemble des phénomènes physiques traités. La vérification peut comprendre la confrontation avec des cas de calcul solubles analytiquement, ou résolus par un code de calcul supposé de référence. Ce dernier est un code dans lequel on a confiance parce qu'il a déjà passé avec succès les différentes étapes de la démarche VVQ. Dans le cas particulier de la neutronique, la mise à disposition de deux grands types d'outils de calcul indépendants (les codes déterministes et les codes de Monte-Carlo, comme explicité *supra*, p. 125-142) facilite la vérification par comparaisons croisées entre les calculs. Dans cette étape de vérification, la précision des données d'entrée du code n'a pas une importance cruciale : il suffit que lesdites données soient identiques dans les calculs comparés.

- **La deuxième étape est celle de la validation***, démarche permettant de s'assurer que les résultats d'une simulation numérique issue du code dûment vérifié au préalable reproduisent l'expérience. Les deux caractéristiques testées dans cette étape sont la qualité des données d'entrée et l'étendue du domaine de validité V du modèle dans l'espace de ses paramètres (fig. 98). Ce domaine de validité est l'intersection du domaine de pertinence P du modèle (celui dans lequel les approximations du modèle sont supposées valides) et du domaine E dans lequel il a été confronté avec succès à l'expérience. Plus le domaine de validité V est large, plus grande est la confiance dans la validation. Contrairement à l'étape de vérification, la qualité des données d'entrée est ici primordiale. Dans le cas particulier des codes de neutronique, la comparaison à des résultats expérimentaux met en lumière l'importance des données nucléaires.

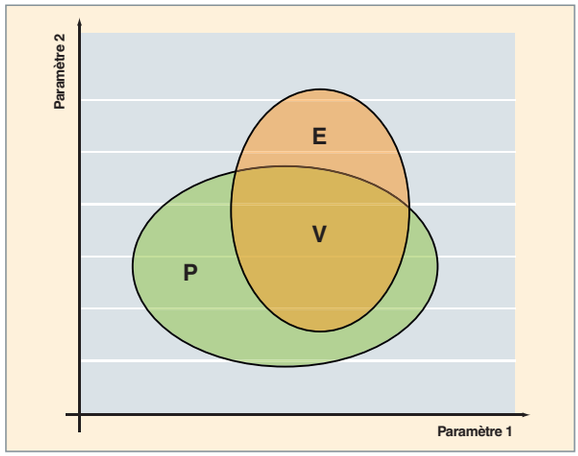


Fig. 98. Un code de calcul est caractérisé par son domaine de pertinence P dans l'espace de ses paramètres d'entrée. Il est confronté à l'expérience dans un domaine E et validé dans le domaine V, intersection des précédents.

Une particularité de la neutronique est la possibilité d'utiliser des codes Monte-Carlo pouvant faire office de codes de référence. C'est pourquoi, lors de la comparaison à ces codes Monte-Carlo, on parle aussi parfois de validation numérique, notamment lors de la mise en place de calculs relativement complexes (enchaînements de solveurs et de modèles physiques déterministes).

Une troisième étape : la qualification des formulaires*

- **La qualification* d'un formulaire (code de calcul, schémas d'utilisation et données d'entrée associées)** est l'ensemble des processus permettant de décréter un code de calcul et ses données de base « bons pour le service », dans les limites d'un domaine de validité défini V et avec des incertitudes maîtrisées (fig. 99). Ces processus incluent des preuves de qualité des données de base ainsi que la vérification et la validation du code établies lors des deux étapes précédentes.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 166

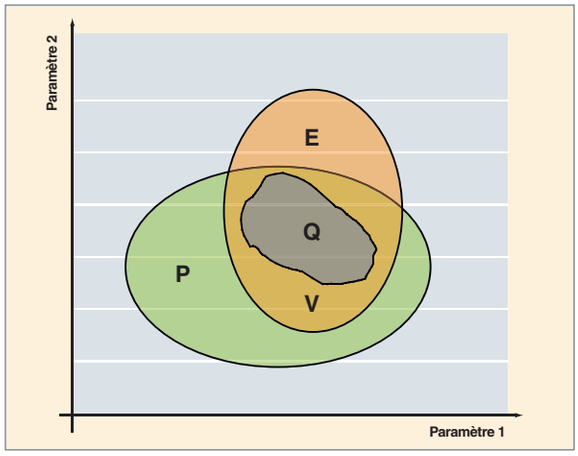


Fig. 99. Un formulaire de calcul est qualifié dans l'espace de ses paramètres d'entrée à l'intérieur de son domaine de qualification Q. Ce domaine, plus restreint que le domaine de validité V du code utilisé, est celui dans lequel les incertitudes du calcul sont jugées acceptables compte tenu de l'utilisation envisagée pour le formulaire.

Ce qui précède est général et pourrait être appliqué à n'importe quel code de calcul. Dans le cas particulier des codes de neutronique, les données d'entrée se présentent sous une forme particulièrement complexe, principalement parce que les sections efficaces neutroniques dépendent très fortement de l'énergie du neutron (voir *supra*, p. 65-72). Les preuves de qualité de ces données revêtent une importance primordiale car les incertitudes sur les données nucléaires de base représentent, dans la plupart des calculs de neutronique actuels, la principale source d'incertitude.

Un point important de la démarche VVQ : les preuves de qualité des données nucléaires

Les preuves de qualité des données nucléaires sont obtenues en interprétant des résultats expérimentaux issus de deux types d'expériences dites intégrales de nature très différente :

- Des expériences dites « **intégrales à effet séparé** » ou expériences dites « analytiques » (par exemple des expériences d'oscillation dans le réacteur MINERVE ou des mesures d'indice de spectre dans MINERVE / ÉOLE / MASURCA). Ces expériences ont vocation à améliorer la connaissance des données nucléaires sur un noyau particulier. Ces mesures permettent d'obtenir, par exemple, des informations sur des sections efficaces moyennées sur un spectre d'énergie du neutron incident. Elles revêtent une grande importance car elles sont complémentaires des mesures microscopiques différentielles (voir le chapitre sur les données nucléaires de cette monographie) ;

- des expériences dites « intégrales portant sur des **effets globaux** » (par exemple dans des réacteurs expérimentaux comme ÉOLE et MASURCA, ou en réacteur de puissance). Il s'agit de mesurer des tailles critiques de réseaux expérimentaux, de poids de barres d'absorbants, de concentration critique d'un absorbant soluble, de coefficients de température (combustible ou modérateur), de distributions de puissance ou encore de paramètres cinétiques. Ces expériences sont caractérisées par un plus grand nombre de degrés de liberté (*i.e.* un plus grand nombre de paramètres et/ou de nucléides) que les expériences analytiques présentées précédemment. Elles fournissent des indications sur la qualité d'une bibliothèque complète de données nucléaires.

Dans la plupart de ces cas, qui correspondent à des situations expérimentales « simples », l'interprétation des résultats est réalisée au moyen de calculs Monte-Carlo pour lesquels les biais de calcul sont supposés connus. L'écart calcul-mesure peut alors être directement imputé à la ou aux données nucléaires impliquées.

Quantifier les incertitudes du calcul neutronique.

Les **formulaires*** de neutronique sont dédiés à une utilisation spécifique pour une **filière*** de réacteurs. Ils sont constitués du code de neutronique, des données d'entrée nécessaires et des schémas de calcul envisagés pour l'utilisation du code. L'objectif de la qualification du formulaire est, pour un concept donné (REP, REB, RNR, réacteurs de recherche, propulsion navale…), de fournir un ensemble « bibliothèque de données nucléaires, code de calcul, choix de modèles dans le code, définition des enchaînements de calcul » ainsi qu'une évaluation des incertitudes sur les résultats du calcul.

Dans ce cadre, on procède à une phase de modélisation, au cours de laquelle on effectue différents choix : maillage en espace (la géométrie), en énergie (les sections efficaces), choix des solveurs, des données nucléaires (bibliothèques), enchaînements des étapes de calcul diverses, en lien avec l'objectif visé (préconception, calcul de référence, calcul de projet…). Ces schémas de calcul sont ensuite vérifiés par des comparaisons à des calculs de référence, ce qui permet d'estimer les biais de calcul liés aux méthodes.

Enfin, on procède à la validation, par l'utilisation d'expériences intégrales en nombre important afin de couvrir au mieux le domaine d'utilisation associé au projet de réacteurs. Il est donc essentiel de bien définir la base expérimentale de validation en se fondant à la fois sur les maquettes critiques (par exemple ÉOLE, MASURCA, MINERVE), les réacteurs expérimentaux (par exemple MÉLUSINE, OSIRIS, RJH, RES) et les réacteurs de puissance (typiquement les réacteurs du parc EdF, PHÉNIX, SPX…), en sélectionnant les expériences représentatives permettant de valider la modélisation de chaque paramètre. Si cette base ne couvre pas le domaine visé, on procède alors à la conception de nouveaux programmes expérimentaux qui, par leur bonne représentativité, permettront une meilleure couverture de ce domaine.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 167

Puis vient la phase indispensable de la quantification des incertitudes, issues

- Du *choix du modèle physique*, celui-ci constituant par définition une représentation simplifiée des phénomènes physiques simulés ; pour évaluer l'incertitude systématique introduite par ces approximations ou simplifications, on peut procéder à une comparaison avec un calcul de référence du type Monte-Carlo ;

- du *calcul numérique*, porteur d'incertitudes systématiques liées à la résolution des équations du modèle physique ; pour évaluer celles-ci, on raffine les maillages et on pousse la convergence ;

- des *données technologiques* concernant le réacteur étudié (par exemple, la géométrie du réacteur n'est connue qu'avec une certaine précision, la composition du combustible également) ;

- des *données nucléaires*, provenant d'expériences ou de modèles théoriques eux-mêmes incertains.

Ces deux dernières sources d'incertitudes sur les données d'entrée du calcul peuvent être de nature systématique ou stochastique. Pour évaluer leur importance, on procède en général à une **analyse de sensibilité***. C'est souvent l'incertitude sur les données nucléaires qui contribue de façon prépondérante à l'incertitude globale sur le calcul neutronique. Pour contribuer à l'évaluation des incertitudes de calcul pour un cœur de réacteur nucléaire industriel, en profitant de la richesse des bases expérimentales et des comparaisons avec des calculs de référence, il est indispensable d'utiliser tout ou partie de l'analyse d'incertitudes consécutive à ces calculs de situations « simples ». Cette étape, appelée « transposition », est plus ou moins complexe à réaliser ; elle est importante pour évaluer l'impact des incertitudes des données nucléaires qualifiées (intégration des informations relatives aux bases expérimentales intégrales) sur les résultats du calcul neutronique.

On comprend donc qu'il y a rétroaction entre les données nucléaires, les codes et les expériences destinées à la validation. Les schémas qui suivent (fig. 100) illustrent cette rétroaction et résument les étapes de la démarche VVQ : établir les données, vérifier les codes de calcul, valider les codes de calcul, qualifier les formulaires pour un emploi dédié et spécifique.

Propagation des incertitudes, calculs de sensibilité

Plusieurs méthodes de propagation des incertitudes existent. Un formalisme de calcul souvent utilisé est celui fondé sur un développement de Taylor au premier ordre de la grandeur physique d'intérêt G au voisinage de la valeur moyenne des paramètres X dont elle dépend [1]. Ce formalisme peut être représenté formellement par l'expression mathématique suivante :

$$\text{Cov } G = {}^{t}S_{G/X}.\text{Cov}X.S_{G/X}$$

- $S_{G/X}$: vecteur de sensibilité de la grandeur physique G par rapport aux paramètres X. La sensibilité de G à la variation des paramètres X s'exprime par le vecteur des dérivées partielles $\partial G/\partial X$, qui est encore appelé « **profil de sensibilité** ».
- ${}^{t}S_{G/X}$: transposée de $S_{G/X}$.
- CovX : matrice de variance-covariance des paramètres X ; elle contient donc les données d'incertitudes sur les paramètres X que l'on veut propager sur G.
- CovG : matrice de variance-covariance résultat, relative à la grandeur G : la diagonale de CovG contient les valeurs d'incertitudes cherchées.

Lorsque G s'exprime analytiquement en fonction de X, il est possible d'obtenir directement par dérivation les *profils de sensibilité*. Dans le cas général, les *profils de sensibilité* sont déduits de la résolution de l'**équation adjointe*** de celle satisfaite par la grandeur d'intérêt G.

En neutronique ce type formalisme (parfois poussé à un ordre supérieur) a été introduit dans des codes de transport déterministes et codes d'évolution (voir références [2] à [5]).

La méthode probabiliste de Monte-Carlo permet de faire des calculs de propagation d'erreur à trois dimensions d'espace. C'est la méthode des échantillons corrélés (correlated sampling method en anglais) [6], [7]. On montre que l'effet, sur la grandeur G considérée, de la variation d'un ou plusieurs paramètres X apparaît comme un facteur multiplicatif de l'estimateur de G de sorte que, dans une même simulation, il est possible d'estimer G et l'effet de la perturbation sur cette même grandeur. En plus de son caractère tridimensionnel, l'avantage de la méthode des échantillons corrélés est qu'elle permet des variations, sur les paramètres X, faibles et fortes allant jusqu'à plusieurs dizaines de pour cents.

Dans le cadre de cette approche probabiliste, il reste possible d'introduire le développement en série de Taylor de la grandeur physique recherchée afin de calculer des coefficients de sensibilité par la méthode de Monte-Carlo [7], [8] et de les réutiliser selon le formalisme déterministe au premier ou second ordre.

Une troisième approche consiste à échantillonner directement par une méthode de Monte-Carlo les paramètres X selon la densité de probabilité de l'incertitude qui leur est associée (une gaussienne par exemple) et à calculer la valeur de la grandeur G correspondante. En répétant cette opération un nombre suffisant de fois on aboutit à la distribution en probabilité de la

...

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 168

grandeur G dont on peut déduire la valeur moyenne et la variance associée. Cette approche plus coûteuse en temps de calcul que les deux précédentes est cependant plus riche d'information puisqu'elle donne accès à la distribution statistique de G [9]. La plateforme URANIE [10] développée au CEA est le cadre de mise en œuvre de cette approche stochastique dans le domaine de la physique des réacteurs nucléaires.

Il convient de souligner que la prise en compte des corrélations entre les différents paramètres X ajoute un degré de difficulté supplémentaire dans le calcul de propagation des incertitudes s'inscrivant dans une approche à la fois exhaustive et globale [11].

Le traitement des incertitudes est un domaine crucial de R&D par ses enjeux de sûreté et ses impacts économiques. Il fait l'objet de nombreux travaux, séminaires, écoles d'été, associant des chercheurs de différents horizons et conduisant à tester de nouvelles approches telles que « les modèles par polynômes de chaos » [12].

Références

[1] D. L. Smith, *Probability, Statistics, and Nuclear Uncertainties in Nuclear Science and Technology*, OECD Nuclear Energy Agency, Nuclear Data Commitee Series, Neutron Physics and Nuclear Data in Science and Technology, Vol. 4., 1991.

[2] A. Kodeli, *Études des incertitudes sur la fluence dans les cuves des REP – Ajustement des données de base*, Note CEA-N-2749, janvier 1994.

[3] J. M. Kalfez, G.B. Bruna, G. Palmiotti, M. Salvatores, "Burn-up Calculations with Time-Dependent Generalized Perturbation Theory", *Nuclear Science and Engineering*, 62, 1977, p. 304.

[4] J. Rebah, Y.K. Lee, J.C. Nimal, B. Nimal, B. Duchemin, L. Lunéville, "Sensitivity and Uncertainty Analysis for Fission Product Decay Heat Calculations", *Proceedings of the 8th International Conference on Radiation Shielding*, April 24-28, 1998, Arlington, USA, pp. 84-91, 1994.

[5] A. Gandini, "A Generalized Perturbation Method for Bi-linear Functionals of the Real and Adjoint Neutron Fluxes", *J. Nuclear Energy*, 21, 755-765, 1967.

[6] G. Dejonghe, J. Gonnord, J.C. Nimal, "Perturbation Calculations by the Correlated Samples Method", *Proceedings of the International Meeting on Advances Nuclear Engineering Computational Methods*, Knoxville, Tennessee, April 9-11, 1985, Volume 2, 1985.

[7] H. Rief, "Generalized Monte-Carlo Perturbation Algorithms for Correlated Sampling and Second Order Taylor Series Approach", *Annals of Nuclear Energy*, Vol. 11, n°9, 1984, pp. 455-476.

[8] B. Morillon, *Perturbation dans le transport des neutrons par la méthode de Monte Carlo*, Note CEA-N 2838, octobre 1998.

[9] J.P. Both, "Treatment of Cross Section Uncertainties in the transport Monte Carlo Code TRIPOLI-4", ICRS'9, Tsukuba, Ibaraki, Japan, October 17-22, 1999, *Journal of Nuclear Science and Technology*, Supplement1, pp. 420-426, March 2000.

[10] A. Boulouré, C. Struzik, F. Gaudier. "Uncertainty and sensivity analysis of the nuclear fuel thermal behavior". *Nuclear Engineering and Design*, 253, pp. 200-210, 2012.

[11] O. Leray, *Détermination, maîtrise et réduction des biais et incertitudes de la réactivité du Réacteur Jules Horowitz*, Thèse de Doctorat en Sciences, Université de Grenoble, 25 septembre 2012.

[12] J. M. Martinez, "Analyse d'incertitudes, Modèles simplifiés par polynômes de chaos", Séminaire incertitude de Bruyères le Châtel, 23/04/2006.

Bibliographie

Cacuci (D.), *Uncertainty and sensitivity analysis*, USA, Chapman and Hall/CRC, 2003.
http://www.oecd-nea.org/science/wpec/sg33/methods/SU_References.pdf

Usachev (L.N.), *Proc. Int. Conf. On Peaceful Uses of Nucl. Energy*, Geneva, vol.5, 503, 1955.

Weinberg (A.) et Wigner (E.) *The Physical theory of neutron chain reactor*, The University of Chicago Press, 1958.

Williams (M.L.), "Development of depletion perturbation theory for coupled neutron/nuclide fields", Nuclear Science and Engineering, 70, 20-36,1979.

Takeda (T.) and Umano (T.), "Burnup sensitivity analysis in a fast breeder reactor – Part I : sensitivity calculation method with generalized perturbation theory", *Nuclear Science and Engineering*, 91, 1-10, 1985.

Rimpault (G.) *et al.*, " Methodology for a Large Gas-Cooled Fast Reactor Core Design and Associated Neutronic Uncertainties " *Proc. Int. Conf. PHYSOR'2004*, Chicago, USA, 04/2004.

Archier (P.) *et al.*, "Nuclear data uncertainty propagation for neutronic key parameters of CEA's SFR v2b and CFV sodium fast reactor designs", *Proc. Int. Conf. PHYSOR 2012*, Knoxville, USA, 2012.

La comparaison des résultats calculés par le formulaire aux résultats expérimentaux obtenus sur une série d'expériences choisies afin de représenter au mieux la diversité des configurations rencontrées permet :

- La remise en cause éventuelle du code de calcul, devant alors conduire à une action corrective ;
- un retour vers les données physiques de base : réévaluation des sections efficaces issues des évaluations internationales utilisées ;
- une remise en cause éventuelle de l'expérience.

Comme indiqué plus haut, la possibilité qu'ont les neutroniciens de disposer du Monte-Carlo pour vérifier les calculs

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 169

Fig. 100. Les étapes de la démarche VVQ : établir les données, vérifier puis valider les codes de calcul, qualifier les formulaires pour un emploi dédié et spécifique.

déterministes est un atout largement exploité : depuis quelques années, l'utilisation des moyens de calcul les plus récents (HPC, voir *supra* le chapitre dédié au calcul haute performance, HPC) et celle du Monte-Carlo ont permis des sauts qualitatifs en termes de précision et d'analyse.

L'association Monte-Carlo / HPC / mesures précises permet d'évaluer l'impact des données nucléaires, tandis que la comparaison Monte-Carlo/déterministe permet d'évaluer celui lié aux biais de modélisation, si tant est que les données nucléaires employées soient complètement cohérentes entre les deux systèmes de calcul. Il faut de surcroît que le code Monte-Carlo utilisé comme référence ait lui-même subi le processus complet VVQ évoqué plus haut.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 170

Pour achever la démarche de vérification, validation et qualification, on peut procéder à des exercices d'inter-comparaison (*benchmarks*) pour obtenir une estimation des incertitudes de calcul neutronique (voir les *benchmarks* internationaux récents cités plus loin). Ces exercices font partie intégrante de la démarche de qualification d'un formulaire car ils concourent à accroître le degré de confiance attaché à l'utilisation des logiciels/formulaires de calcul.

Bibliographie

OBERKAMPF (W. L.), TRUCANO (T. G.), HIRSCH (C.), "Verification, validation, and predictive capability, in computational engineering and physics", *Computational Engineering and Physics, Appl. Mech. Rev.*, vol. 57, n° 5, September 2004.

ORLOV (V. V.), VAN'KOV (A. A.), VOROPAEV (A. I.), KAZANSKIJ (Y. A.), MATVEEV (V. I.), MUGOROV (V. M.) et KHODAREV (E. A.), "Problem of fast reactor physics related to breeding", *Atomic Energy Review*, vol. 4, n° 118, pp. 989-1077, 1980.

RIDER (W. J.), KAMM (J. R.) and WEIRS (V. G.), *Verification, Validation and Uncertainty Quantification Workflow in CASL*, SAND2010-234P, December 2010.

Bernard BONIN, Cheikh M. DIOP, Anne NICOLAS
Département de modélisation des systèmes et des structures,
et Cyrille DE SAINT-JEAN
Département d'étude des réacteurs

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 171

La neutronique expérimentale. Expériences en maquettes critiques

Contexte et besoins en neutronique expérimentale

Depuis le début de l'histoire des réacteurs nucléaires, l'expérience a constamment accompagné la modélisation numérique. Bien que la neutronique s'appuie sur des équations parfaitement représentatives des phénomènes mis en jeu, l'amplitude du domaine d'énergie, la multiplicité des matériaux et de leurs caractéristiques, la complexité géométrique des cœurs rendent indispensable l'expérimentation sur des réacteurs afin de qualifier l'ensemble des données physiques et des modèles de calcul. Elle le restera à l'avenir, en particulier pour les modèles de calculs destinés à être appliqués à des configurations neutroniques nouvelles ou peu usitées.

Le CEA assure la qualification des données de base et des formulaires de calcul neutronique grâce à la conception et à la réalisation d'expériences sur trois **maquettes critiques*** installées à Cadarache : ÉOLE, MINERVE et MASURCA décrites de manière détaillée dans la monographie DEN : « Les Réacteurs nucléaires expérimentaux ».

Ces maquettes critiques sont des réacteurs mettant en jeu de très faibles puissances. Elles ont un comportement neutronique extrapolable aux phénomènes physiques élémentaires rencontrés dans les réacteurs de puissance grâce à la linéarité de l'équation de Boltzmann qui régit le transport des neutrons.

Toutefois, ceci n'est vrai que sous certaines conditions : en effet, le couplage de la neutronique avec la thermohydraulique (notamment par le biais de la température) détruit la linéarité des phénomènes. Cet effet limite, bien sûr, l'extrapolabilité des résultats des maquettes critiques mais n'en supprime pas pour autant l'intérêt pour des expériences à effets séparés, en particulier pour la qualification des données nucléaires.

Ces maquettes sont souples, adaptables, faciles d'accès et aisées à instrumenter.

La maquette critique ÉOLE, de très faible puissance (<500 W), est destinée aux études neutroniques de **réseaux*** modérés, en particulier ceux les *Réacteurs à Eau Légère* mais aussi les *Réacteurs à Eau Bouillante* (fig. 101).

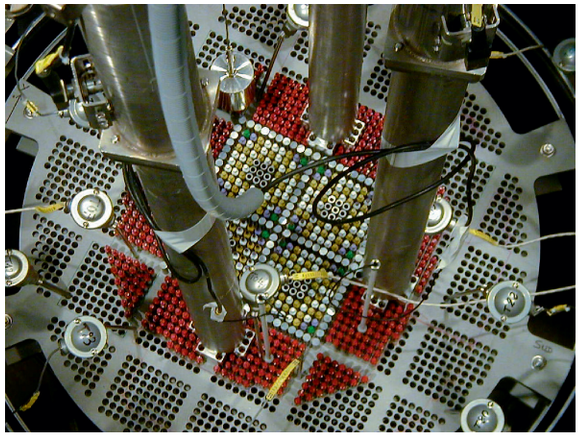


Fig. 101. Vue de la configuration FUBILA dans la maquette critique ÉOLE.

Elle s'articule autour d'une cuve de 2,3 m de diamètre et 3 m de hauteur. Au centre de cette cuve, une autre cuve plus petite (~1m de diamètre et 1 m de hauteur) permet de recevoir, grâce à un jeu de grilles interchangeables, tout type de réseau de réacteur à eau. Quatre barres de sécurité permettent de contrôler la **réactivité*** à tout moment.

La **criticité*** est atteinte par ajustement de la concentration en bore soluble du modérateur (eau légère) ou bien par ajustement du nombre de crayons. Une barre de pilotage permet d'effectuer la divergence et de stabiliser la puissance entre 0 et 100 W (puissance maximale autorisée).

De nombreux types de combustible (MOX, UO_2 de type REP et REB), de matériaux absorbants, de poisons ou de matériaux de structure (B_4C naturel et enrichi, AIC, Hf, UO_2-Gd_2O_3, pyrex, Zy-2, acier, etc.) sont utilisables. Les techniques expérimentales utilisées et sa flexibilité font d'ÉOLE un outil rare et efficace pour la physique des réacteurs à eau légère.

Le réacteur MINERVE est une pile piscine dont le cœur de très faible puissance (inférieure à 100 W), immergé sous 3 mètres d'eau, est constitué de plaquettes en uranium métallique très enrichi (fig. 102). Au centre de ce cœur « nourricier » réside une cavité cylindrique qui reçoit les réseaux expérimentaux. Plusieurs types de réseaux peuvent être ainsi étudiés permettant de créer des spectres neutroniques représentatifs de réacteurs à **neutrons rapides***, **épithermiques***, **thermiques*** et très thermiques. Au centre de la cavité, un appareillage spécial, appelé « oscillateur », permet d'effectuer des

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 172

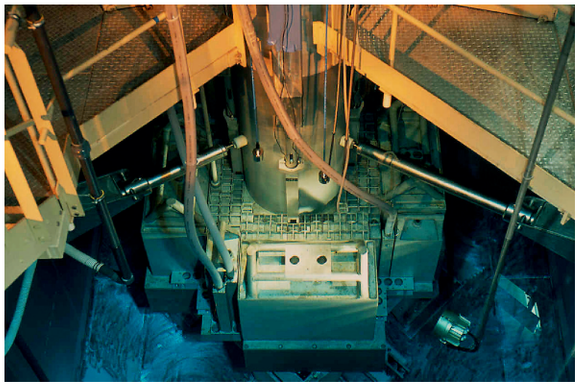


Fig. 102. Vue du cœur Mélodie dans la piscine MINERVE.

mesures de réactivité d'échantillons spécifiques grâce à un pilote rotatif jouant le rôle de compensateur de réactivité (l'angle de rotation des parties absorbantes de ce pilote est proportionnel à la réactivité introduite dans le cœur). Cet outil permet de mesurer des effets en réactivité variant de 0,1 à 10 **pcm***.

Le réacteur MASURCA, de faible puissance (inférieure à 5 kW), est destiné aux études neutroniques de réseaux de Réacteurs à Neutrons Rapides ou épithermiques (fig. 103).

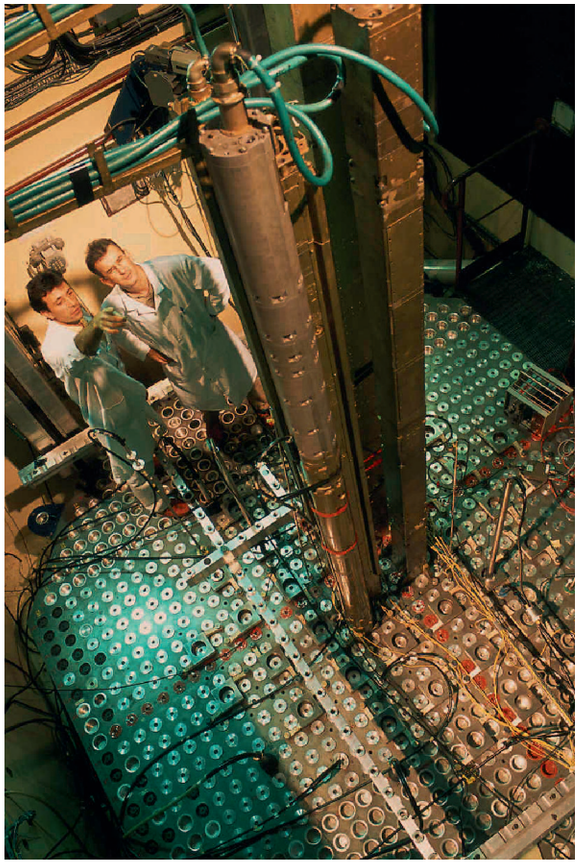


Fig. 103. Deux expérimentateurs sur le plancher du réacteur MASURCA.

Ce réacteur est de type « Meccano® ». Ce « Meccano®» pouvant contenir des cœurs d'un volume allant jusqu'à 6 m^3, est constitué de tubes de section carrée chargés individuellement de réglettes ou de plaquettes de combustible ou de caloporteur représentatifs de réseaux à neutrons rapides ou épithermiques à étudier.

Cette installation permet de tester un nombre quasi illimité de combinaisons et de solutions représentatives des problèmes à traiter (MOX, Pu métallique, UOx appauvri, naturel et enrichi, thorium, graphite, gaz, sodium, plomb, acier, ferrite, CaH_2, ZrH_2…). Cette installation très flexible du point de vue de son chargement et de son exploitation permet de valider les solutions novatrices de cœurs de réacteurs rapides ou épithermiques tels que les **RNR*** gaz, les **RHT***, les **réacteurs hybrides*** sous-critiques.

Maquettes critiques et expériences intégrales

La conception d'une **expérience intégrale*** vise à rendre cette expérience aussi représentative que possible vis-à-vis du besoin en qualification exprimé (outils de calcul et bibliothèques de données nucléaires). Elle fait appel à un enchaînement de *calculs de sensibilité* et de *calculs d'incertitudes*.

On peut distinguer deux types d'expériences intégrales. Celles de type « fondamental » visent à qualifier les données nucléaires de base par la mesure de paramètres fondamentaux tels que **facteurs de multiplication*** k_{eff}, **indices de spectre***, **sections efficaces***, **facteur de conversion*** de l'U 238, **coefficient de température*** ou **fraction effective de neutrons retardés*** β_{eff}. Celles de type « maquette » visent à qualifier les méthodes de calcul à travers des paramètres intégraux tels que distributions de taux de réaction, efficacité en bore soluble, efficacité de grappes d'absorbants ou **coefficients de vidange*** (sodium ou vide).

La réalisation de programmes expérimentaux en neutronique nécessite l'utilisation de nombreuses techniques expérimentales permettant d'acquérir les différents paramètres physiques, qui serviront à la qualification des **formulaires*** de calcul, avec l'incertitude souhaitée. Ces techniques peuvent être classées en trois familles principales :

- Les techniques de mesure pour la détermination de la **réactivité*** absolue (échelle de réactivité) ou relative (différence entre deux réactivités) ;
- les techniques de mesure pour la détermination de distribution de **taux de réaction*** et de **flux*** absolus ou relatifs (niveau de perturbation), « *in core* » ou « post-irradiation » ;
- les techniques de mesure de détermination de **dose*** *gamma* ou neutrons également absolues ou relatives.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 173

Chaque paramètre ou phénomène mesuré fait généralement appel à l'utilisation simultanée de plusieurs techniques expérimentales afin d'obtenir et de maîtriser l'**incertitude cible*** associée.

La détermination de paramètres expérimentaux nécessite la maîtrise des incertitudes expérimentales systématiques et statistiques. L'emploi simultané de plusieurs techniques de mesures autorise une diminution du terme systématique de l'incertitude. La réalisation de plusieurs séries de mesures avec une même technique expérimentale ainsi que l'amélioration intrinsèque de cette technique permettent de diminuer le terme statistique de l'incertitude.

Des chambres à fission pour la mesure du flux neutronique dans les réacteurs expérimentaux

Les techniques de mesures dites *« in core »* sont fondées sur l'emploi de détecteurs à neutrons appelés **« chambres à fission* »** (fig. 104). Ces détecteurs de petite taille présentent l'intérêt d'obtenir des mesures locales de flux neutronique avec un positionnement précis.

Une chambre à fission se présente sous la forme d'une enceinte étanche, remplie de gaz inerte (généralement de l'argon), à l'intérieur de laquelle se trouvent deux électrodes dont une, l'anode, supporte un dépôt de matière fissile qui caractérise la chambre (U 235, Pu 239, Pu 241...). Les caractéristiques générales d'une chambre à fission sont :

- La tension de polarisation ;
- la pression du gaz : 50 à 500V, 5 à 20 bars ;
- l'épaisseur du dépôt < 1mg/cm².

Au cours de la fission, un grand nombre d'électrons orbitaux est éjecté de sorte que les fragments de fission sont fortement ionisés. L'un des produits de fission (le plus lourd) est absorbé par l'électrode support et l'autre ionise le gaz rare de la chambre. Les charges sont collectées sur l'anode et sont véhiculées le long d'un câble coaxial dans le tube d'instrumentation pour donner le signal de mesure. C'est donc une mesure

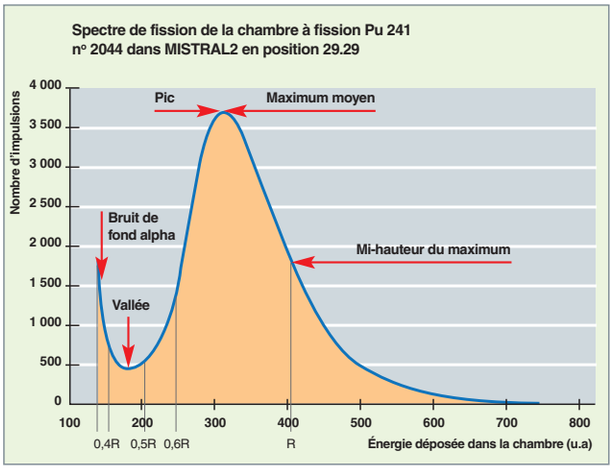


Fig. 105. Exemple de mesure obtenue avec une chambre à fission. Spectre de fission d'une chambre à dépôt Pu 241.

« in core » en direct mais qui impose la présence d'un canal de mesure (tube d'instrumentation pour laisser le passage de la canne de mesure). Cette chambre à fission est reliée à une chaîne électronique comprenant un pré-amplificateur, un amplificateur et un analyseur multicanal de façon à obtenir un spectre d'impulsions traité par la suite (fig. 105).

Il s'agit donc de méthodes de mesure directe qui sont employées :

- Soit pour des mesures de distributions axiales ou radiales de taux de réaction d'un noyau particulier (le noyau dopant de la chambre) (fig. 106, page suivante) ;

- soit pour des mesures d'indice de spectre, par rapport de mesures de deux taux de réactions sur deux chambres différentes. Les différents rapports mesurés permettent ainsi de caractériser le spectre des neutrons, chaque noyau utilisé ayant une réponse propre aux différentes énergies des neutrons. Ce type de mesures nécessite un étalonnage préalable des chambres dans un flux neutronique parfaitement thermique, obtenu à l'aide d'un dispositif appelé « colonne thermique ».

Fig. 104. Chambres à fission miniatures (4 mm et 1.5 mm).

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 174

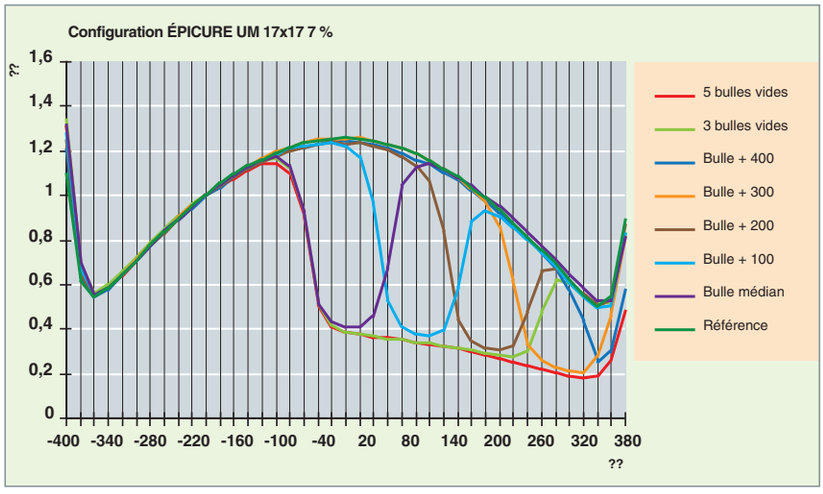


Fig. 106. Mesure par chambre à fission de la distribution de taux de fission par rapport à la cote axiale dans le cœur d'ÉOLE (800 mm de hauteur fissile) avec une « bulle » se déplaçant axialement au centre d'ÉOLE.

Exemples de méthodes de mesure pour la détermination de la réactivité

Les techniques de mesure et les chaînes d'acquisition et de traitement du signal employées pour la détermination de la réactivité sont fondées sur la mesure de la différence de **réactivité*** entre deux états donnés d'une ou plusieurs configurations. Nous en donnons ci-dessous quatre exemples.

- La technique de mesure en « critique » est fondée sur la connaissance de l'ensemble des paramètres critiques d'une configuration (nombre et type de crayons combustibles et absorbants, concentration en poisons consommables, géométrie du cœur, date, vieillissement du plutonium si besoin). On mesure l'évolution temporelle de la population neutronique $N(t)$: le réacteur étant légèrement sur-critique, la population neutronique croît exponentiellement suivant la loi :

$$N(t) = N(0)e^{\frac{k-1}{\ell}t}$$

où k est le facteur de multiplication et ℓ la durée moyenne de la vie des neutrons.

À partir de cette mesure, la détermination du temps de doublement t_d de la population neutronique permet de remonter à l'aide des courbes de Nordheim $\rho = f(t_d)$, fondées sur l'inversion des équations de la cinétique, à la réactivité résiduelle ou réactivité en excès de la configuration étudiée.

- La technique de mesure en « sous critique » utilise la méthode de l'amplification de la source. Cette technique est fondée sur le fait que pour un état sous critique, le produit de la réactivité par la population neutronique est égal à une constante, soit $\rho N = C^{te}$. Les effets en réactivité liés à l'introduction de la source neutronique sont mesurés par des comptages sous critiques sur différents moniteurs de type chambre à fission, placés à différentes positions dans le cœur pour limiter les effets spatiaux. Les comptages sont alors comparés à des comptages réalisés dans le cœur de référence, et étalonnés sur un effet en réactivité bien connu (on utilise généralement la barre de pilotage du cœur pour déterminer la constante). Cette comparaison donne directement la variation de la réactivité.

- La technique de mesure **cinétique*** est fondée sur le suivi de la puissance du réacteur en fonction du temps lors du mouvement d'un absorbant. L'inversion des équations de la cinétique permet alors, connaissant les constantes des neutrons retardés et le temps de vie des neutrons, de déterminer la réactivité associée à cette perturbation.

- La technique de mesure dite par « oscillation », de petits échantillons de matière d'intérêt, spécifiquement utilisés sur le réacteur MINERVE consiste à provoquer des petites perturbations périodiques de certaines propriétés neutroniques. Expérimentalement, on extrait périodiquement le matériau à étudier d'une ou plusieurs cellules de la zone centrale du réacteur et on le remplace par un matériau connu. Ceci provoque une perturbation globale du flux sur l'ensemble du réacteur. Cette perturbation entraîne une variation du niveau de la population neutronique. Elle est sensible à l'importance du flux de neutrons dans la zone perturbée, à la variation des taux de production et d'absorption, et à la **fonction de transfert*** du réacteur considéré. Ainsi, la variation du facteur de multiplication effectif, induite par la perturbation, permet d'obtenir la variation de réactivité $\Delta\rho$ introduite par l'échantillon considéré.

La mesure de la fraction effective de neutrons retardés

La mesure de la fraction de neutrons retardés entre dans la catégorie des mesures dites « de bruit neutronique ». Celles-ci font appel à la mesure des fluctuations neutroniques engendrées dans les réacteurs à faible puissance par des phénomènes aléatoires tels que l'absorption, les fuites ou la production de neutrons. Dans la méthode de la Densité Spectrale de Puissance (DSP)[1], fondée sur l'analyse spectrale des fluctuations neutroniques, on suppose que les causes du bruit neutronique sont des phénomènes aléatoires qui peuvent être décrits comme des processus poissoniens,

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 175

considérés statistiquement comme une source de bruit blanc. La densité spectrale de cette source de bruit est donnée par :

$$\left|\overline{\delta s(\omega)}\right|^2 = 2\frac{N}{\Lambda}\frac{\overline{\nu(\nu-1)}}{\bar{\nu}}$$

où N est la « population » neutronique, Λ le temps de génération des neutrons, et ν le nombre de neutrons émis par fission.

Les équations de la cinétique ponctuelle permettent de lier les fluctuations δN de la population de neutrons N dans le réacteur à la source de bruit $\delta s(\omega)$. Le développement mathématique associé sort du cadre de cette monographie. Retenons que le réacteur se comporte comme un filtre passe-bas vis à vis de la source de bruit : la population de neutrons ne peut subir des fluctuations très rapides (donc à haute fréquence) en raison du temps de génération fini des neutrons et de l'existence des neutrons retardés.

Les fluctuations de la population de neutrons obéissent à l'équation :

$$\frac{|\delta N(\omega)|^2}{N^2} = 2N\Lambda\frac{\overline{\nu(\nu-1)}}{\bar{\nu}}\frac{1}{(\beta_{eff}-\rho)^2+\omega^2\Lambda^2}$$

La mesure de la densité spectrale de la population neutronique, appelée $DSP \equiv \frac{|\delta N(\omega)|^2}{N^2}$, renseigne donc sur la proportion de neutrons retardés, et sur le temps de génération des neutrons.

Pour mesurer cette DSP en fonction de la fréquence, on utilise une technique fondée sur l'étude des corrélations entre deux détections de fissions à des instants t et $t+T$. L'utilisation de deux détecteurs en corrélation permet de s'affranchir du bruit de l'électronique des détecteurs. Pour cette raison, la technique est appelée « DSP corrélée », ou intercomparée ($DSPI$). Elle est réalisée à l'aide de deux chambres à fission spécifiques, fortement chargées, fonctionnant en mode courant, et placées en périphérie du cœur, au plus près du combustible. Elles sont en général placées dans des positions symétriques, afin de réduire autant que possible la détection d'évènements non corrélés.

Le réacteur se comportant comme un filtre, la $DSPI$ présente un plateau à basse fréquence dont la hauteur donne la valeur du β_{eff}. L'expression finale permettant de lier la valeur de la $DSPI$ à basse fréquence et la fraction de neutrons retardés est :

$$DSPI = 2\frac{DV_1V_2}{F}\frac{1}{(\beta_{eff}-\rho)^2}$$

où $\frac{DV_1V_2}{F}$ est une constante qui peut être déterminée indépendamment de la $DPSI$, décrivant la réponse des chambres à fission utilisées pour la mesure du bruit, en fonction de leur tension de fonctionnement V_1 et V_2.

La fréquence de coupure ω_c de la $DPSI$ vaut $\frac{\beta_{eff}-\rho}{\Lambda}$. Cette technique de mesure permet donc d'avoir accès non seulement à la fraction de neutrons retardés, mais également au temps de génération des neutrons Λ.

Les équations précédentes montrent l'intérêt de réaliser les mesures de fraction de neutrons retardés au plus près de la criticité, pour laquelle la valeur de la réactivité est nulle. Cette approche permet d'augmenter considérablement la précision de mesure, tout en réduisant l'incertitude associée.

L'incertitude totale sur la valeur du β_{eff} est de l'ordre de 1,6 %, sans prendre en compte l'incertitude provenant du facteur de Diven D qui contribue à 3 % à 1σ sur le $\beta_{eff}{}^2$.

Comme le montrent les équations ci-dessus, la mesure de la fraction effective de neutrons retardés est intimement liée à la mesure de la réactivité ρ : cette dernière est un nombre sans dimension, le plus souvent exprimée en pcm *i.e.* pour cent mille. Cependant, les neutrons retardés jouant un rôle important dans le contrôle d'un réacteur, il est pertinent d'utiliser une unité plus physique pour la réactivité : suivant une convention venue des États Unis, on exprime la réactivité en « **dollars*** » : 1 dollar = 1 * bêta effectif. Selon cette convention, la réactivité en unités « dollars » vaut alors :

$$\rho_{\$} = \frac{\rho}{\beta_{eff}}$$

Ainsi, un réacteur ne sera pas prompt critique tant que sa réactivité restera inférieure à 1 dollar.

On peut dire que la réactivité ρ exprimée en pcm est une valeur absolue et que la réactivité $\rho_{\$}$ exprimée en dollar est une valeur relative. Toutefois, la comparaison, avec des simulations peut tout à fait être réalisée avec des estimations de la réactivité en dollar dans la mesure où le bêta effectif aura été calculé au préalable.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 176

Les méthodes de mesure pour la détermination de taux de réaction

Les techniques de mesure associées à leurs chaînes d'acquisition et de traitement du signal peuvent se classer en deux types de techniques :

- Les techniques de mesures de détermination de taux de réaction en temps réel dites *« in core »* (dans le cœur du réacteur en fonctionnement), pour lesquelles la mesure est fondée sur la caractérisation directe de la population neutronique par des chambres à fission ;

- les techniques de mesure de détermination de taux de réaction dites « post-irradiation », pour lesquelles la mesure est fondée sur la détermination de la population des *gammas* issus de la désintégration des produits de fission.

Ces dernières méthodes sont donc basées sur les méthodes de *gamma-scanning* intégraux et de pic particulier, pour lesquelles on détermine à l'aide de chaînes de mesure, comprenant des semi-conducteurs (diode), préamplificateur, amplificateur et échelle de comptage, l'activité des *gammas* issus de fission, ou de capture.

Ainsi la mesure de type *gamma-scanning* dite « intégrale » consiste à déterminer l'activité totale des *gammas* des produits de fission, au-dessus d'une énergie de 550 keV, permettant ainsi de ne prendre en compte que les événements proportionnels à la fission (les événements de capture, de **création de paire*** et de **Bremsstrahlung*** ne sont ainsi pas pris en compte). Cette technique nécessite en revanche de considérer la décroissance de l'activité *gamma* en fonction du temps.

La mesure de type *gamma-scanning* dite « de pic particulier » consiste à déterminer l'activité absolue d'une raie *gamma* donnée et ainsi de pouvoir déterminer le taux de fission ou de capture induit par neutron (fig. 107 et 108).

Fig. 107. Mesure de spectrométrie *gamma* sur les maquettes critiques ÉOLE/MINERVE. Insertion de crayons combustibles UO_2 ou MOX sous une diode germanium.

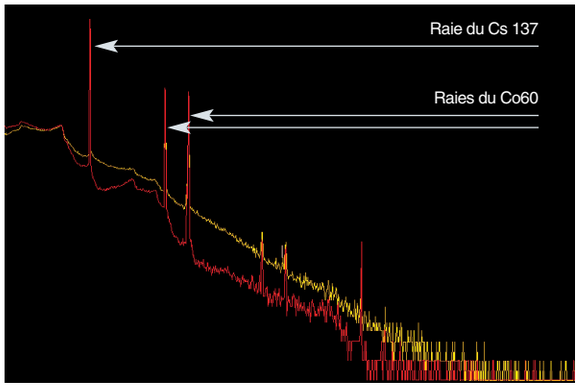


Fig. 108. Mesure de spectrométrie *gamma* sur les maquettes critiques ÉOLE/MINERVE. Exemple de la prise en compte du temps mort sur des spectres de produits de fission : les spectres rouge et jaune ont été obtenus respectivement avec et sans réjection des empilements des signaux dans l'électronique de détection.

Ces différentes techniques de mesure sont principalement employées dans la détermination des paramètres d'intérêt pour la physique des réacteurs comme par exemple les effets en réactivité :

- Efficacité d'absorbant (Hf, AIC, B_4C naturel, B_4C enrichi, $UO_2Gd_2O_3$…) ;
- efficacité de grappe ;
- coefficient différentiel et intégral de réactivité du bore soluble ;
- coefficient de température ;
- coefficient de vidange.

Outre les paramètres liés à la réactivité, les expériences sur maquettes critiques permettent aussi de déterminer d'autres types de paramètres comme les **indices de spectre*** ou la distribution de puissance relative, crayon par crayon. Elles permettent de plus d'étudier les effets de courbure des crayons, de substitution de crayons ou de vide 2D et 3D.

Enfin, les expériences sur maquettes critiques donnent des informations précieuses sur la qualité des sections efficaces neutroniques des noyaux mis en jeu.

Une confrontation de calculs de neutronique avec l'expérience dans le cas difficile des réacteurs à haute température : le *benchmark* HTTR

Parmi les programmes communs de recherche de l'AIEA, le CRP-5 *(Common Research Program)* a proposé en 1998 un *benchmark* en physique du cœur sur les phases de démarrage du réacteur HTTR *(High Temperature Test Reactor)*. Ce réacteur a divergé en novembre 1998, au Japon. Construit par JAERI *(Japan Atomic Energy Research Institute)*, le HTTR est un réacteur modéré au graphite (blocs prismatiques) et refroidi

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 177

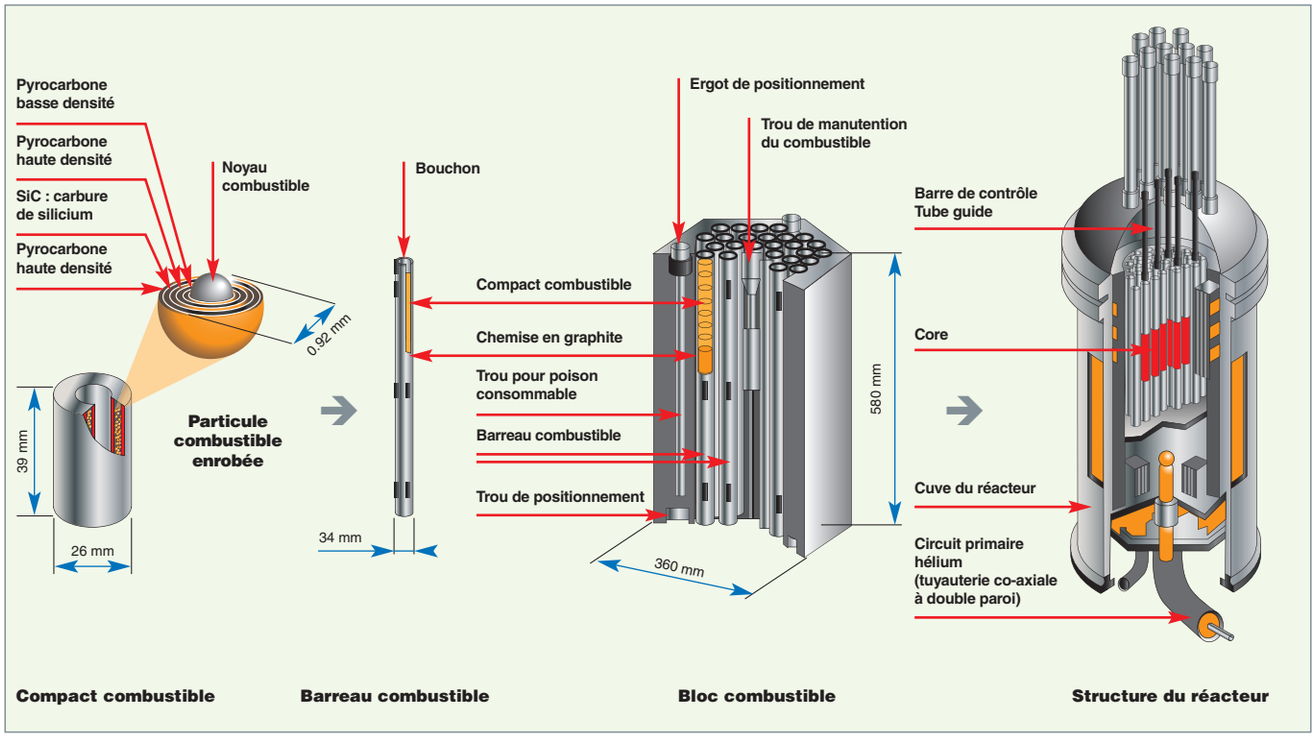


Fig. 109. Vue éclatée du bloc combustible prismatique et du cœur du HTTR.

à l'hélium. La température de sortie du caloporteur est de 950 °C pour une puissance thermique de 30 MW. Les dimensions du cœur du réacteur (environ 230 cm de diamètre effectif pour une hauteur de 290 cm) correspondent approximativement à la moitié de celles des cœurs de réacteurs à gaz de type **RTHT*** proposés dans Génération IV. La figure 109 présente les particularités géométriques de ce type de concept : le combustible, contenu dans des microparticules enrobées de forme sphérique, est aggloméré avec du graphite afin de former des compacts combustibles de forme annulaire. Ces compacts combustibles sont ensuite empilés axialement afin de former des barreaux combustibles qui sont eux-mêmes insérés dans un bloc de graphite d'une hauteur de 60 cm. Le cœur du réacteur est constitué d'un empilement de ces blocs combustibles prismatiques.

Le *benchmark* de calcul proposé par JAERI en 1998 était destiné à évaluer le nombre de colonnes combustibles chargées dans le cœur à la première divergence ainsi que l'excès de réactivité du cœur dans différentes configurations au cours du chargement. S'agissant des calculs du *benchmark* au CEA [2], ceux-ci ont été réalisés avec les codes APOLLO2, CRONOS2 et TRIPOLI-4® (voir *supra*, p. 125-142, consacrée aux outils de calcul dans cette monographie).

Pour le calcul du coefficient de multiplication effectif lors des diverses phases de chargement du cœur, deux schémas ont été retenus. Le premier schéma de calcul (APOLLO2 - CRONOS2) est fondé sur la démarche utilisée pour les cœurs de réacteurs à eau sous pression où les constantes du calcul de diffusion proviennent de l'homogénéisation énergétique et spatiale de l'assemblage combustible calculé en milieu infini en théorie du transport. Le second schéma (APOLLO2 – TRIPOLI-4®) est un schéma mis en place pour le calcul du *benchmark* neutronique de démarrage du HTTR.

S'agissant des difficultés de modélisation, notons que l'association, dans ce type de cœur, de graphite et de combustible très fragmenté maximise l'absorption des neutrons dans les **résonances*** des noyaux lourds. Cela rend délicat le choix des hypothèses faites dans le traitement des sections efficaces résonnantes (calculs d'autoprotection). Les approximations faites dans les modèles d'**autoprotection***, conduisant à des incertitudes bien maîtrisées aujourd'hui dans les calculs de réacteur à eau, peuvent se trouver amplifiées dans le cas des **RHT***.

Par ailleurs, le choix de l'hélium comme caloporteur conduit à de grandes sections de passage du gaz dans le cœur. Ces canaux de gaz représentent des chemins de fuites préférentielles ***(streaming*)*** pour les neutrons ayant une direction proche de celle de l'écoulement du gaz, l'hélium étant transparent pour eux. Le traitement de ces fuites au niveau des calculs de cœur constitue un des problèmes clés de la modélisation des réacteurs de la filière, notamment pour les canaux dans lesquels sont insérées les barres de contrôle.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 178

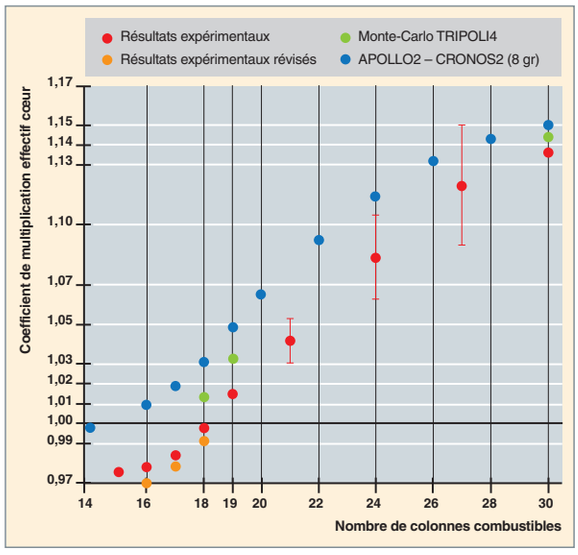


Fig. 110. Évolution du coefficient de multiplication effectif du cœur du réacteur HTTR calculé par divers modèles en fonction du nombre d'éléments combustibles chargés en cœur [2].

Les conclusions générales de ce *benchmark*, issues de l'inter comparaison entre de nombreux résultats de calcul, font apparaître que, pour la configuration du cœur plein (30 colonnes), il existe un bon accord entre les résultats des calculs déterministes, probabilistes et l'expérience (fig. 110), [3].

Par contre, des écarts apparaissent sur les configurations intermédiaires (24 colonnes, par exemple).

Dans la configuration annulaire (18 colonnes) proche de la première criticité, les calculs continuent, mais dans une moindre mesure, à surestimer la réactivité par rapport à l'expérience. Les codes de Monte-Carlo prédisent, au mieux, un cœur critique avec 18 colonnes c'est-à-dire avec environ 600 à 800 **pcm*** d'excès de réactivité.

Les hypothèses avancées pour expliquer ces écarts sont, hormis les incertitudes expérimentales (impuretés, mesures de réactivité...), le traitement de la géométrie aléatoire (particules dans les compacts) et la précision des sections efficaces de manière générale. Les calculs de diffusion neutronique en 3D réalisés sur un cœur de configuration annulaire présentent eux-mêmes un écart de l'ordre de 900 pcm avec les calculs de Monte-Carlo et mettent en évidence les limites d'application d'un schéma de calcul déterministe à deux étapes fondé sur un calcul de transport au niveau de l'élément combustible et sur un calcul de diffusion au niveau du cœur.

Le nouveau code de calcul APOLLO3® permettra de lever ces limitations par une utilisation systématique du transport 3D.

Une illustration des difficultés de modélisations multi-échelles existantes dans un réacteur annulaire à blocs prismatiques et de l'hétérogénéité spectrale résultante est donnée par le biais du calcul de la nappe de flux thermique dans la configuration cœur-plein (fig. 111).

Les forts gradients de flux thermique observés sur la figure de droite sont la conséquence de la présence de nombreux éléments de contrôle dans le cœur (ces éléments de contrôle sont des blocs de graphite prismatiques percés de trois cavités d'insertion pour les barres de contrôle) qui jouent un rôle important sur le ralentissement et la thermalisation des neutrons produits par fission dans les éléments combustibles.

Cependant, les difficultés rencontrées sur cette configuration annulaire du HTTR ne sont pas directement transposables aux autres réacteurs de la filière (GT-MHR, PBMR…). En particulier, le cœur annulaire de démarrage, très hétérogène, peu épais et comportant un réflecteur central avec un grand nombre d'éléments « troués » maximisant l'effet de streaming n'est pas représentatif d'un réacteur de puissance. Le HTTR restera, par là même, une référence en termes de difficultés de modélisation.

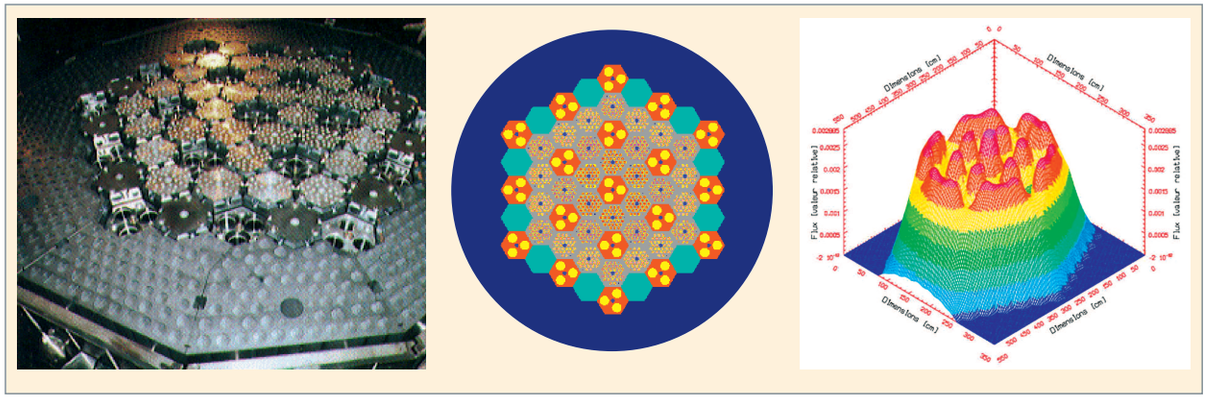


Fig. 111. Variation du flux thermique dans le cœur du réacteur HTTR – Configuration cœur plein, toutes barres extraites.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 179

Les bases de données internationales de *benchmarks*

La **validation*** de l'ensemble code et données nucléaires nécessite de disposer d'expériences de qualité. C'est pourquoi un effort international a été entrepris pour que le patrimoine mondial des expériences neutroniques puisse bénéficier à tous en faisant en sorte que chaque expérience fasse l'objet d'une description aussi précise que possible et soit revue internationalement par les pairs avant d'être intégrée dans la base internationale. Une expérience standardisée, dont les résultats sont interprétés par la communauté internationale avant d'être intégrés dans une base de données internationale, constitue ce que les spécialistes appellent un *« **benchmark*** »*.

La description des *benchmarks* est standardisée avec des guides spécifiques à chaque domaine expérimental. Le *benchmark* commence par une description détaillée de l'expérience et de l'installation avec des photos, des schémas, des tableaux de valeurs numériques et textes expliquant de manière circonstanciée les données de l'expérience. Par exemple, dans le domaine de la criticité, le *benchmark* comprend la description géométrique et matérielle donnant lieu à un état critique. Viennent ensuite les résultats de l'expérience. Une évaluation des données expérimentales est effectuée, discutant les diverses incertitudes notamment technologiques. Ensuite, l'évaluateur préconise en les justifiant des simplifications conduisant à un ou plusieurs modèles : c'est la phase de spécifications du *benchmark*. Enfin, comme tout ce travail d'évaluation ne s'effectue pas sans l'usage de codes de transport, les résultats de calcul correspondants sont fournis. Chaque base est distribuée sous forme électronique au format pdf.

Les expériences du *benchmark* bénéficient d'une évaluation soignée des incertitudes expérimentales provenant notamment de la géométrie et des compositions des matériaux. La connaissance de l'incertitude sur les grandeurs intégrales est cruciale pour la validation des codes de transport et l'amélioration des données nucléaires (voir *supra*, p. 165). Un guide applicable aux différentes bases de données *(ICSBEP Guide to the Expression of Uncertainties)* définit le cadre de l'évaluation des incertitudes expérimentales.

Trois grandes catégories d'expériences donnent lieu à des bases de données informatisées : la criticité, la physique des réacteurs et la protection.

Pour la criticité, la base de données *« International Criticality Safety Benchmark Evaluation Project »* (ICSBEP [4]) rassemble 516 évaluations, soit 4 405 configurations critiques ou presque critiques ou sous-critiques. Les personnes impliquées dans la validation peuvent donc sélectionner les expériences leur convenant dans cette base et transposer sans problème leurs descriptions dans le langage du code à valider. Cette base de données est divisée en différentes catégories d'expériences critiques suivant l'enrichissement et la nature du combustible, et selon le spectre neutronique. Par exemple, le sous-ensemble de la base LEU-COMP-THERM-15 comprend l'évaluation d'une série de 335 expériences critiques dédiées aux VVER, faites dans le réacteur expérimental ZR-6 (fig. 112). L'intitulé LEU-COMP-THERM signifie « combustible d'uranium faiblement enrichi sous la forme de composé solide dans un spectre de neutrons thermiques ». Cette catégorie particulière comprend actuellement 94 évaluations contenant chacune de nombreuses configurations critiques.

Cette base de données dédiée à la criticité, c'est-à-dire à la prédiction du facteur de multiplication effectif, intéresse les physiciens des réacteurs mais bien d'autres grandeurs neutroniques doivent être mesurées pour valider les codes de transport.

C'est l'objet du **projet IRPhE** [5] de répondre aux besoins spécifiques des neutroniciens. La compilation nommée *« International Handbook of Evaluated Reactor Physics Benchmark Experiments »* comprend 53 séries d'expériences,

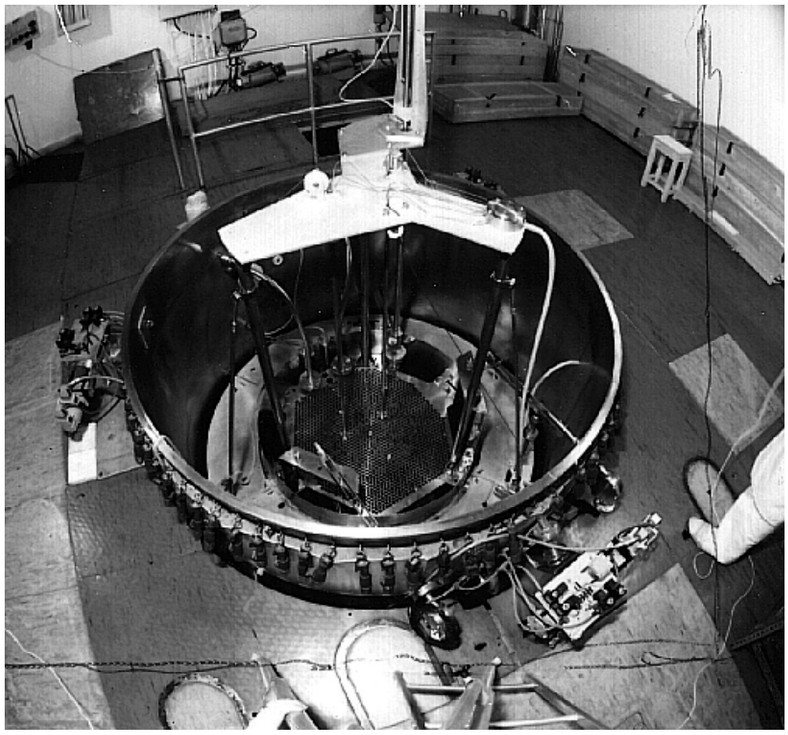


Fig. 112. Vue de dessus du réacteur hongrois ZR-6 utilisé pour les expériences critiques dédiées aux réacteurs VVER dans la base ICSBEP.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 180

proches des problématiques de la physique des réacteurs : il s'agit en particulier d'expériences d'irradiation de combustible en réacteur avec analyse des compositions isotopiques, de mesures de coefficient de réactivité avec étude de sensibilité de la réactivité aux températures des matériaux, à la composition d'un matériau ou à l'insertion d'un matériau dans le réacteur, de mesures cinétiques, de distributions de puissance et de mesures spectrales.

Le **projet SINBAD** [6,7] *(Shielding Integral Benchmark Archive Database)* rassemble quant à lui un vaste ensemble d'expériences intégrales dédiées à la validation des codes et données nucléaires impliqués dans le dimensionnement des protections pour les réacteurs à fission ou à fusion mais aussi des protections pour les accélérateurs. Les grandeurs intégrales dérivent en général de réponses de détecteurs à seuil énergétique. La base comprend 45 expériences de protection pour les réacteurs nucléaires, 23 expériences dédiées à la protection neutronique dans le domaine de la fusion et, enfin, 23 pour la protection dans les accélérateurs. Parmi les 45 expériences de protection des réacteurs, nous en mentionnons deux. L'expérience VENUS-3 [8], [9] , conduite en Belgique en 1988, permet l'accès à une grandeur importante, à savoir, la **fluence cuve*** à travers la mesure de l'activation de détecteurs à seuil, selon les réactions Ni58 (n,p), In115 (n,n'), et Al27 (n,α). Cette expérience effectuée dans des conditions proches de celles d'un réacteur nucléaire en fait une expérience intéressante pour valider les codes de transport en plus des données nucléaires.

Même des expériences très anciennes trouvent encore leur utilité dans ces *benchmarks*, puisque leurs résultats peuvent être réinterprétés avec des outils modernes. L'expérience NAÏADE [10] réalisée entre 1960 et 1964 en périphérie du réacteur à eau lourde ZOÉ implanté à Fontenay-aux-Roses a été réévaluée en 2005 et intégrée dans la base SINBAD [7].

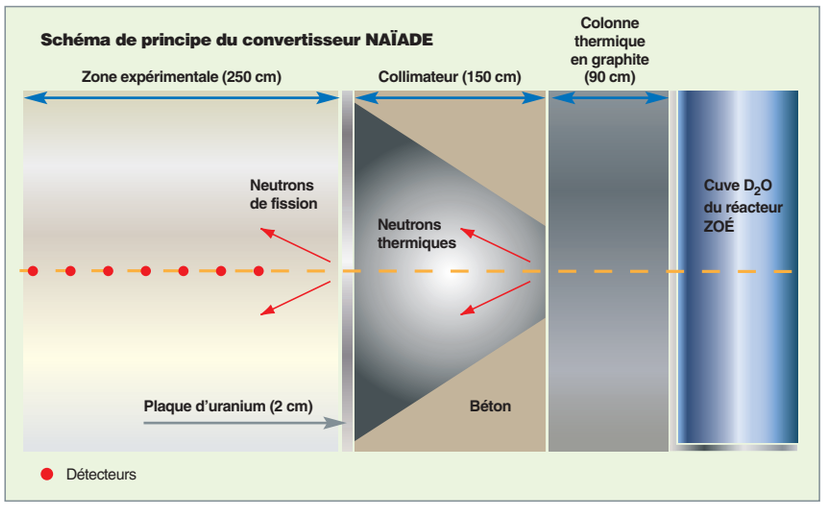


Fig. 113 : Principe d'une expérience intégrale sur colonne thermique (Coupe du convertisseur NAÏADE). [9]

L'installation schématisée sur la figure 113 donne le principe de cette expérience sur colonne thermique : les neutrons thermiques issus du cœur du réacteur sont transformés en neutrons de fission dans une plaque d'uranium. Ces neutrons de fission se propagent ensuite dans des massifs de différents matériaux choisis à tour de rôle parmi le graphite, l'eau légère et l'acier. Ces derniers sont instrumentés avec différents détecteurs placés à différentes profondeurs dans l'épaisseur du massif suivant l'axe central de la colonne thermique (fig. 113). Les réponses de ces détecteurs permettent d'accéder notamment à la fluence dans une situation neutronique relativement simple et donc utile en termes de validation des données nucléaires.

L'*Agence pour l'Énergie Nucléaire* (AEN) de l'OCDE joue le rôle de fédérateur à l'échelle internationale pour préserver l'acquis historique des expériences intégrales réalisées, en particulier dans des installations disparues et par des spécialistes en retraite ou ayant quitté le domaine.

Autres *benchmarks*

Nous avons regroupé dans cette dernière partie deux applications particulières ayant pour but la validation du code TRIPOLI-4® : l'expérience GONDOLE dans le réacteur OSIRIS, dédiée à l'étude du vieillissement des aciers sous irradiation, et l'expérience FLUOLE visant à valider le calcul de propagation dans des lamellages acier-eau représentatifs des REP.

*Étude de la tenue des aciers sous flux neutronique à l'aide d'un dispositif expérimental placé dans le réacteur OSIRIS**

Un calcul de neutronique a été réalisé pour interpréter une expérience d'irradiation d'éprouvettes en acier menée dans le réacteur OSIRIS (fig. 114) [11], [12]. Cette expérience visait à étudier les dommages d'irradiation dans les aciers et à établir une courbe de ténacité de l'acier des cuves des REP. Dans ce cadre, des mesures dosimétriques ont été réalisées sur les détecteurs suivants placés dans un dispositif en périphérie du cœur : Fe54 (n,p) Mn54, Ni58 (n,p) Co58, In115 (n,n') In115m, Cu63 (n,α) Co60. Les comparaisons calculs / mesures relatives à chacune de ces réactions montrent un accord à mieux que 10 %.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 181

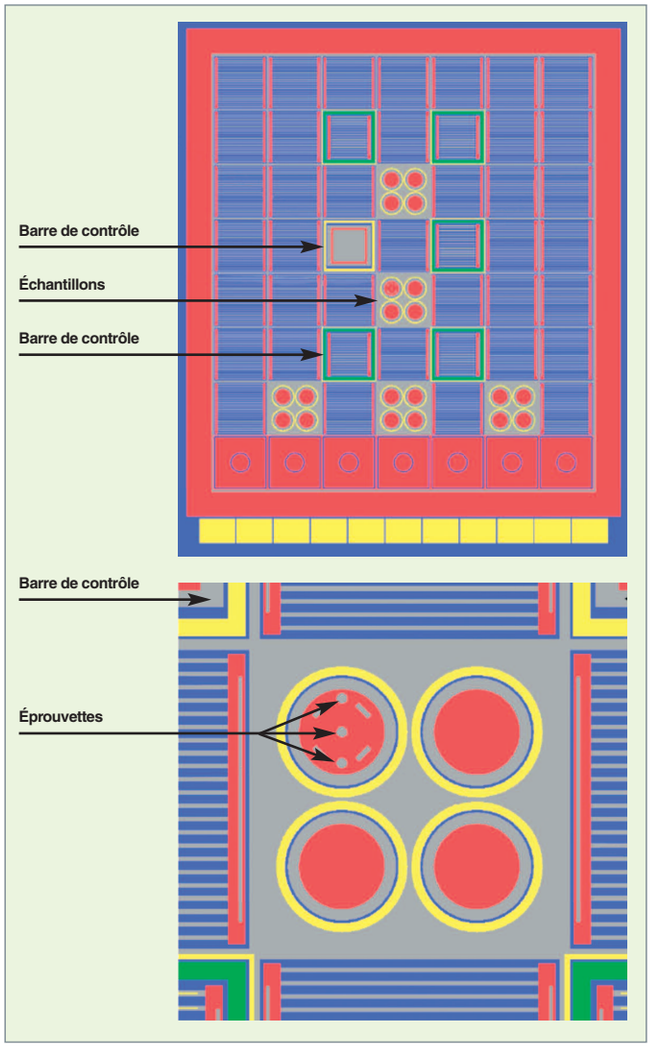


Fig. 114. Modélisation TRIPOLI-4® pour la simulation du réacteur OSIRIS et du dispositif expérimental contenant des éprouvettes d'acier.

Interprétation de l'expérience FLUOLE dans la maquette critique ÉOLE

Le but de l'expérience FLUOLE [13] est de valider le schéma de calcul de la fluence neutronique sur la cuve d'un REP. La propagation des neutrons est effectuée avec le code de transport Monte-Carlo **TRIPOLI-4®*** associé à l'**évaluation*** de données nucléaires JEFF-3.1. L'expérience est représentative d'un REP 1 300 MWe et a été réalisée dans le réacteur ÉOLE du centre CEA de Cadarache (fig. 115).

Les comparaisons calcul-mesure ont concerné notamment les réactions dosimétriques suivantes : Ni58 (n,p) Co58, Co59 (n, *gamma*) Co60, Fe54 (n,p) Mn54, Au197 (n, *gamma*) Au198. En raison en particulier de la taille très réduite des zones d'acquisition des résultats (quelques mm^3) ce sont environ 100 mil-

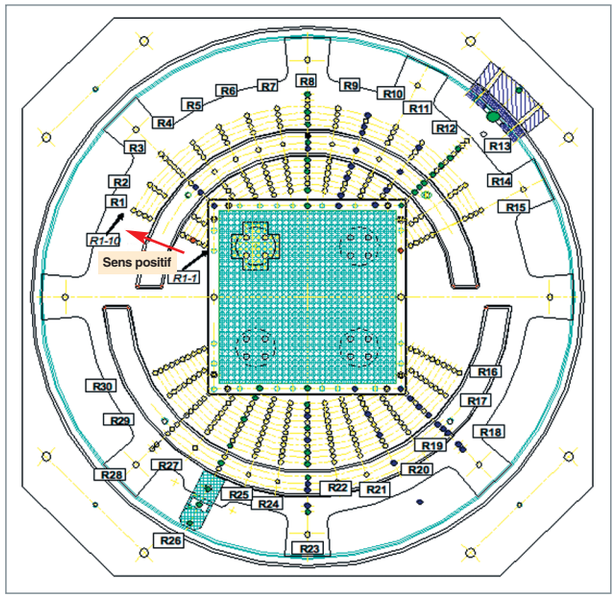


Fig. 115. Le réacteur ÉOLE, dans la configuration de l'expérience FLUOLE [13].

liards d'histoires de neutrons qui ont été simulées, nécessitant la ressource de 100 processeurs pendant une quinzaine de jours.

Références

[1] A. Santamarina, P. Blaise, L. Erradi and P. Fougeras "Calculation of LWR eff kinetics parameters: validation on the MISTRAL experimental program", *Annals of Nuclear Energy*, http://dx.doi.org/10.1016/j_anucene.2012.05.001.

[2] F. Damian, X. Raepsaet, F. Moreau, "Code and Methods Improvement in HTGR Modelling at CEA", *Conférence Internationale PHYSOR 2002,* Seoul, October 2002.

[3] X. Raepsaet, F. Damian, U. A. Ohlig, H.J. Brockmann, J. B. M. De Hass, E. M. Wallerbos, "Analysis of the European results on the HTTR's core physics benchmarks", *Nuclear Engineering & Design*, 222, pp. 173-187, 2003.

[4] *International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments*, http://www.oecd-nea.org/science/wpncs/icsbep/handbook.html

[5] *International Handbook of Evaluated Reactor Physics Benchmark Experiments*, http://www.oecd-nea.org/science/wprs/irphe/irphe-handbook/handbook.html

[6] *Integral Benchmark Archive Database, SINBAD*, http://www.oecd-nea.org/science/shielding/sinbad/sinbadis.htm

[7] I. Kodeli, H. Hunter and E. Sartori, "Radiation Shielding And Dosimetry Experiments Updates In The SINBAD Database", *Radiation Protection Dosimetry*, vol. 116, n° 1-4, pp. 558–561, 2005.

[8] *VENUS-3 LWR-PVS Benchmark Experiment*, NEA-1517/69, 1988.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 182

[9] Y.K. Lee, "Analysis of the VENUS-3 PWR pressure vessel surveillance benchmark using TRIPOLI-4.3 Monte-Carlo Code", *12th International Symposium on Reactor Dosimetry*, Gatlinburg, USA, May 8-13, 2005.

[10] J.C. Nimal, *New Interpretation Of The Naïade 1 Experiments*, NEA/NSC/DOC15, 2005.

[11] H. Carcreff, A. Alberman, L. Barbot, F. Rozenblum, D. Beretz, Y. K. Lee, "Dosimetry Requirements fo Pressure Vessel Steels Toughness Curve in the Ductile to Brittle Range", *Journal of ASTM International*, vol. 3, n° 3, 2006.

[12] Y. K. Lee, F. Malouch, "Analysis of OSIRIS in-core surveillance dosimetry for GONDOLE steel irradiation program by using TRIPOLI-4 Monte Carlo code," *ISRD-13, International Symposium on Reactor Dosimetry*, Alkmaar, Netherlands, May 25-30, 2008 (2008).

[13] D. Beretz, S. Bourganel, P. Blaise, C. Destouches, N. Huot, J.M. Girard, C. Doumergue, H. Philibert, R. Brissot, M. Dumont, "FLUOLE: A new relevant experiment for PWR pressure vessel surveillance", *Reactor Dosimetry State of Art 2008, Proceedings of the 13th International Symposium*, Akersloot, May 25-30, 2008.

Philippe Fougeras, Patrick Blaise,
Département d'étude des réacteurs
Stéphane Bourganel, Yi-Kang Lee, Maurice Chiron,
Frédéric Damian et Claude Mounier
Département de modélisation des systèmes et des structures

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 183

Les applications de la neutronique

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 184

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 185

Classification des domaines d'application de la neutronique

En préambule de cette section, on propose une classification synthétique des grands domaines d'application de la neutronique, dans son acception étendue, mentionnant leurs spécificités ainsi que des besoins d'études associés.

Les principaux domaines d'application

Les *études d'ingénierie* ou *applications* évoquées ici sont relatives à des installations de différents organismes de recherche et de compagnies industrielles : CEA, CNRS, EDF, AREVA, GDF-SUEZ, ANDRA… Le tableau 24 ci-dessous recense les types de configurations physiques rencontrés tout en les mettant en rapport avec les finalités correspondantes et les grandeurs physiques d'intérêt à calculer.

Ce tableau fait apparaître quatre grands domaines d'études relatifs aux réacteurs nucléaires : la **physique du cœur**, la **radioprotection *(Radiation shielding*)***, la **sûreté/criticité** et l'**instrumentation nucléaire**.

L'introduction de la monographie précise les principales grandeurs physiques d'intérêt relatives à ces domaines d'applications.

Tableau 24

Recensement des types de configurations physiques réelles rencontrés dans les applications de la neutronique, en rapport avec les grandeurs physiques d'intérêt à calculer et les finalités concrètes correspondantes

Installations	Types de problèmes / Finalités	Grandeurs physiques d'intérêt (hors flux)
Réacteurs de puissance, réacteurs expérimentaux	Détermination de la puissance du réacteur. Obtention des grandeurs de dimensionnement du cœur, de la distribution fine de puissance, des taux d'irradiation et des paramètres critiques (cote et efficacité des **barres de commande***, concentration…), usure des **poisons consommables***. Contrôle de l'état du cœur, de la criticité en cours de chargement. Réponses des détecteurs in-core et ex-core (chambres à fission…)	**Facteur de multiplication effectif*** k_{eff} **Taux de réaction*** Distribution de puissance (crayons, assemblages) **Réactivité*** Concentrations isotopiques **Échauffements *gamma****
	Étude de situations incidentelles et accidentelles (Cinétique, transitoires)	**Facteur de multiplication effectif** k_{eff}* Pic de puissance
	Durée de vie de la cuve et des structures internes du réacteur.	**Fluence neutronique*** **Dommages***
	Accessibilité dans différentes zones de l'installation, études de situations incidentelles et accidentelles.	**Débits de dose***
	Sûreté de l'installation, dimensionnement des dispositifs pour l'évacuation de la chaleur résiduelle (circuits de refroidissement, piscine…).	**Puissance résiduelle***
	Instrumentation nucléaire : conception de dispositifs expérimentaux, d'expériences. Interprétation d'expériences	Taux de réaction **Activités***
Démantèlement	Activation des structures. Contribution à l'élaboration de scénarios de démantèlement d'une installation nucléaire. Classement des structures irradiées en termes de déchets.	Activités Concentrations isotopiques **Radiotoxicités*** Débits de dose *gamma*

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 186

Installations	Types de problèmes / Finalités	Grandeurs physiques d'intérêt (hors flux)
Installations du cycle du combustible ; enrichissement, fabrication retraitement	Criticité et analyse de sûreté. Dimensionnement des installations vis-à-vis de la maîtrise du risque de criticité, études de situations accidentelles pour la gestion de crise, définition des normes, qualification. Dimensionnement des installations pour la protection des hommes et des matériels	Facteur de multiplication effectif Activités Concentrations isotopiques Débits de dose (*gammas*, neutrons, particules chargées)
Château de transport combustible	Conception/dimensionnement d'un **château de transport***. Sûreté/criticité en situations incidentelles ou accidentelles	Facteur de multiplication effectif Débits de dose (*gammas*, neutrons)
Colis de déchets radioactifs	Dimensionnement de colis de déchets. Détermination de leur contenu (spectrométrie *gamma*, interrogation neutronique…). Étude de la **radiolyse*** dans le conteneur ou la roche d'accueil du site de stockage. Sûreté/criticité d'un entreposage, d'un stockage de déchets	Facteur de multiplication effectif Activités Débits de dose (*gammas*, neutrons) Échauffements *gamma*
Machines à fusion thermonucléaire : tokamak, confinement inertiel (laser)	Dimensionnement de protections. Accessibilité dans les différentes zones de l'installation. Opérations de maintenance. Tenue des matériaux à l'irradiation (première paroi, aimants supraconducteurs). Neutronique des couvertures tritigènes (Calcul de la production de tritium dans la couverture **fertile*** : surgénération du tritium).	Taux de réaction Energie déposée, dommages Débits de dose (*gammas*, neutrons, particules chargées)
Accélérateur de particules **Dispositifs à spallation, systèmes hybrides**	Conception de l'installation. Accessibilité dans les différentes zones de l'installation. Opérations de maintenance. Tenue et durée de vie de la cible de **spallation***. Neutronique et protection des **systèmes hybrides***.	Source de neutrons Facteur de multiplication effectif Taux de réaction Concentrations isotopiques Activités Radiotoxicités Source *gamma* de **bremsstrahlung*** Source de photoneutrons Débits de dose (*gammas*, neutrons, particules chargées)
Irradiateur	Conservation des aliments, stérilisation de matériels médicaux	Débits de dose *gamma*
Médecine : dispositifs d'irradiation, sources	Traitement de cancers (boroneutrothérapie…). Optimisation de la collimation des rayonnements et de leurs spectres en énergie. Diagnostics médicaux (traceurs radioactifs).	Débits de dose (*gammas*, neutrons, particules chargées) Activités
Spatial	Conception des cœurs de propulsion. Protection des astronautes, intégrité des matériels (électronique…).	Grandeurs neutroniques Débits de dose (neutrons, *gammas*, particules chargées) Dommages

Les besoins des études associées aux différentes applications de la neutronique

Les besoins des études peuvent être classés selon les trois niveaux suivants, par ordre croissant d'intégration : celui de la **description de la configuration physique** à étudier, celui des **méthodes, schémas de calcul et algorithmes** utilisés pour la **modélisation**, et, enfin, celui de l'**utilisation industrielle des logiciels de calcul neutronique**.

Les besoins des études au niveau de la « configuration physique »

Ce niveau correspond à la définition du *type de situations et d'objets physiques* que l'on veut pouvoir calculer. On distingue ici cinq domaines d'études :

- Les réacteurs de puissance, les réacteurs nucléaires expérimentaux et embarqués ;
- les dispositifs expérimentaux hors réacteurs de fission ;

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 187

- les installations industrielles non productrices d'énergie ;
- les installations médicales et/ou pour le médical ;
- l'instrumentation nucléaire ;

Les réacteurs nucléaires de puissance, expérimentaux et embarqués

Les « objets » d'application des codes peuvent être déclinés de la manière suivante :

- Réacteurs et combustibles GEN II et GEN III de type **REP*** ou **REB*** : faciliter les phases d'agrément auprès des autorités de sûreté (solutions de référence et qualification).
- Réacteurs **GEN III*** : évolution des conceptions des réacteurs et des installations du cycle induite par les changements à venir dans les contraintes d'exploitation et d'approvisionnement ; optimisation de l'utilisation du combustible, sûreté garantie en conditions hors dimensionnement, **facteur de conversion*** accru, extension de la durée de vie.
- Réacteurs **GEN IV*** : études d'orientation et d'évaluation des filières de réacteurs et de cycle incluant les réacteurs à neutrons rapides. Le projet **ASTRID*** s'inscrit dans cette perspective. S'y ajoutent les concepts de type **systèmes hybrides***.
- Les réacteurs mis à l'arrêt définitif, réacteurs **GEN I***, expérimentaux (TRITON, SILOÉ, RAPSODIE…) et embarqués : stratégie et opérations de démantèlement avec intervention humaine et/ou robotisée.
- Les réacteurs expérimentaux : **OSIRIS***, **ORPHÉE**, **ILL**, **RES***, **RJH***…
- Les réacteurs embarqués : propulsion navale, propulsion spatiale.
- Les usines du cycle amont (fabrication…) et aval (retraitement…) dont les besoins sont principalement relatifs à la criticité et à la radioprotection.
- Les sites de stockage et d'entreposage de déchets : conception des sites, conception des colis qui sont soumis à des phénomènes physico-chimiques déclenchés par la radioactivité de leur contenu (**radiolyse***, par exemple) pouvant impacter leur intégrité. En stockage profond, c'est le comportement de la roche d'accueil qu'il faut étudier.
- Les simulateurs sur site ou dans les centres de formation.
- Les simulateurs de conception.

Dix exemples de thématiques sont présentés ci-après. On précise, pour chacune d'entre elles, les principaux objectifs visés et des problématiques actuelles de modélisation qui s'y rattachent.

Physique du cœur

Nature de l'étude	Problématique de modélisation
Les études de concepts « actuels » :	• Transport 3D crayon par crayon, évolution isotopique détaillée.
• **UNGG / MAGNOX / AGR***, **REP***, **REB***, **RBMK***, **VVER***, **RNR***, **CANDU***, réacteurs expérimentaux et embarqués.	• Prise en compte de l'instrumentation directement dans les calculs.
	• Méthodes d'optimisation utilisant le HPC.
Les études de concepts « nouveaux » :	(algorithmes génétiques, méthodes probabilistes…).
• **RCG***, **RNR-Na***, **GT-MHR***, **RTHT***, **Systèmes hybrides***, réacteurs expérimentaux et embarqués.	• Couplage neutronique – thermohydraulique.
	• Couplage thermo-mécanique, chimie.
Optimisation du parc (études de scénarios).	• Simulateur de conception.
	• Calculateur en ligne : calculs d'extrapolation (évaluations prédictives).
	• Simulateur : représentation du comportement neutronique et thermohydraulique du cœur en temps réel. Remplacement de l'expérience, dans certains cas.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 188

Sûreté : situations accidentelles

Nature de l'étude	Problématique de modélisation
Accident de réactivité :	
• Rupture de tuyauterie vapeur (RTV), • Éjection de barres (RIA), • Dilution intempestive de bore, • Accident d'ouverture de soupape dans le circuit secondaire, …	• Transitoires. • Couplage neutronique – thermohydraulique. • Couplage thermo-mécanique (Interaction pastille-gaine). • Couplage de l'évolution au formalisme de relâchement et aux codes de transport.
Études de cœur dégradé, ***corium****	
• Relâchement de produits radioactifs en situation accidentelle.	• Transport d'électrons issus de la désintégration bêta des produits radioactifs.

Criticité

Nature de l'étude	Problématique de modélisation
Comportement des matières fissiles dans le cycle du combustible, en situations incidentelles et accidentelles :	• Configurations géométriques variées.
• Analyses de sûreté-criticité.	• Spectre neutronique large (rapide à thermique).
• Calculs de sûreté-criticité.	• Variété isotopique des matériaux.
Nouveaux combustibles, nouvelles installations…	• **Crédit *burn-up****.

Sûreté/radioprotection autour des matières fissiles

Nature de l'étude	Problématique de modélisation
Dimensionnement, agrément	
• Débit de dose et puissance résiduelle du **château de transport*** et des conteneurs. • Débit de dose lors d'un accident de criticité.	• Interprétation de mesures (détermination de fonctions de transfert de rayonnements entre point source et point de mesure).

Réponse de l'instrumentation in-core et ex-core

Nature de l'étude	Problématique de modélisation
Contrôle neutronique des tranches REP, calcul des réponses de chambres de mesure du flux neutronique.	
• Établissement des cartes de flux neutroniques, • Fournitures des informations sur l'état du cœur : - cas de vidange partielle ou totale : niveau d'eau par exemple, - **axial offset***… • Calcul de l'irradiation moyenne ou locale des assemblages (**taux de combustion***) • Examen de l'incidence de la suppression des sources de neutrons utilisées pour le démarrage des réacteurs. • Détermination de l'influence du rayonnement *gamma* sur le signal des chambres de mesure du flux neutronique.	• Propagation de particules (neutrons, *gammas*) loin du cœur pour études paramétriques et comparaisons calculs/mesures. • Propagation des incertitudes dans les calculs. • Échauffements nucléaires (mesure, données nucléaires, fonction réponse du détecteur). • Réponses des **collectrons***. • Couplages entre les modélisations déterministe et probabiliste (propagation d'incertitudes).

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 189

Surveillance dosimétrique des cuves

Nature de l'étude	Problématique de modélisation
Vieillissement, tenue des matériaux sous irradiation, durée de vie du réacteur compte tenu des gestions envisagées (campagnes allongées...)	
• Détermination de la **fluence neutronique*** et *gamma* sur la cuve et les structures internes d'un réacteur.	• Prise en compte globale des incertitudes (données nucléaires de base, données technologiques…) • Pertinence des indicateurs de dommages dans la matière : flux neutron > 1 MeV, flux neutron > 0.1 MeV, déplacements par atome (**dpa***), taux de réaction pour l'interprétation physique des mesures : • Couplages entre les modélisations déterministe et probabiliste • Interprétation des mesures.

Retraitement, fabrication du combustible

Nature de l'étude	Problématique de modélisation
Dimensionnement de protection, conditions d'accessibilité et de séjour sur des postes de travail dans les usines	
• Nature et épaisseurs des écrans : optimisation, calcul des débits de dose neutron, *gamma*.	• Méthodes "simplifiées" pour le traitement des géométries fortement hétérogènes et des milieux lacunaires (canalisations, jeux divers, passages de câble...).

Démantèlement

Nature de l'étude	Problématique de modélisation
Calculs de démantèlement de réacteurs et d'installations nucléaires : UNGG, EL4 (Brennilis), réacteurs expérimentaux, REP, accélérateurs...	
• Cartographie du flux neutronique, • Activation des structures, inventaire isotopique, • Sources de rayonnements, • Débit de dose, échauffements.	• Optimisation des schémas de calcul ; recherche compromis coût de calcul/précision (nombreuses configurations géométriques, chaînes de filiations avec recherche des voies de formation). • Maîtrise des approximations et des incertitudes.

Ambiance dosimétrique due aux rayonnements

Nature de l'étude	Problématique de modélisation
Ambiance dosimétrique dans le bâtiment réacteur (BR)	
• Débit de dose dans le puits de cuve et dans le BR. • Recherche de lieux de mesures.	• En transport Monte-Carlo : mise au point de **cartes d'importance*** pour la simulation d'un calcul en une étape (liée à la complexité de la géométrie des structures du bâtiment réacteur), pour les neutrons et *gammas*.
Ambiance dosimétrique hors BR : Effet de ciel...	

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 190

Stockage des déchets

Nature de l'étude	Problématique de modélisation
Études d'entreposage et de stockage des déchets radioactifs. Études en laboratoires souterrains pour le stockage profond.	
• Inventaire / analyse isotopique de tout objet irradié : combustible, gaine, structures... Déchets des réacteurs industriels et expérimentaux. Radiotoxicité. • Cartographie 3D de rayonnements dans la roche d'accueil d'un site de stockage de déchets, limitations des doses reçues en manutention de colis de déchets irradiés. • Échauffement *gamma* pour l'étude de la **radiolyse*** : formation de gaz et risque d'explosion dans les colis et la roche d'accueil. • Débit de dose dans les galeries de manutention et d'entreposage.	• Émission neutronique dans les colis de verre, • Inventaire radioactif exhaustif, • Recherche des voies de formation de nucléides, • Couplage avec les étapes « procédés »... • Interprétation de mesures de dosage des actinides dans les fûts de déchets.

Les dispositifs expérimentaux autres que réacteurs nucléaires de fission

Même si les réacteurs de fission constituent le principal domaine d'application de la neutronique, d'autres dispositifs font appel à cette discipline. Certains sont mentionnés dans le tableau ci-dessous :

Nature de l'étude	Problématique de modélisation
*Les machines à **fusion*** thermonucléaire :* *• **Tokamak*** (confinement magnétique) : **ITER***. *• Machine à confinement inertiel : **LMJ**** *Les accélérateurs de particules :* *• **GANIL*** : (exemple SPIRAL-2)* *• **SOLEIL*** : (exemple : ligne MARS)* *• **ESS***	
• Dimensionnement de protection (débit d'équivalent de dose, activation, échauffements, dommages). • Ambiance dosimétrique. • Inventaire radioactif, sources de rayonnement. • Définition et interprétation d'expériences. • Contribution à la définition des protocoles d'exploitation de la machine.	• Propagation à 3D des particules neutres et chargées aux énergies intermédiaires. • Cascade électromagnétique. • Couplage entre codes énergies intermédiaires et codes basses énergies.

Les installations industrielles non productrices d'énergie

Nature de l'étude	Problématique de modélisation
Irradiateurs (aliments, stérilisation instruments médicaux...)	
• Dimensionnement de protection. • Ambiance dosimétrique (débit d'équivalent de dose…).	• Méthodes "simplifiées" pour le traitement des géométries fortement hétérogènes et des milieux lacunaires (canalisations, jeux divers, passages de câble...).

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 191

Les installations médicales, production de radioéléments en réacteur

Nature de l'étude	Problématique de modélisation
• Accélérateur de protons pour la protonthérapie, *• Irradiateur gamma de tumeurs cancéreuses* *• Réacteurs et systèmes innovants pour la boroneutrothérapie*	
• Dimensionnement de protection, • Optimisation de collimateurs, • Création de sources neutroniques, • Optimisation de spectres neutroniques. • Simulation de l'irradiation (aide au traitement).	• Propagation à 3D des particules neutres et chargées aux énergies intermédiaires. • Cascade électromagnétique. • Couplage codes énergies intermédiaires et codes basses énergies.

L'instrumentation nucléaire

Nature de l'étude	Problématique de modélisation
Conception de détecteurs : *pour la surveillance du cœur (prévention des accidents de dénoyage et de compaction du cœur, …)*	• Étalonnage d'instruments de détection, **chambre à fission***… • Mesure en ligne du flux • Tenue sous irradiation
Conception d'expériences : *Optimisation des conditions d'irradiation et de dépouillement des mesures*	• Réduction des incertitudes expérimentales • Source de neutrinos (physique fondamentale)

Les besoins des études au niveau de la modélisation

Ce niveau se réfère aux méthodes/modèles physico-mathématiques et aux algorithmes développés et mis en œuvre dans des logiciels de calcul pour résoudre les équations de transport des particules et de cinétique (Boltzmann), d'évolution temporelle isotopique (Bateman). La finesse de la représentation géométrique, le degré d'exactitude et les performances en temps de calcul relèvent de ce niveau. Il commande donc le caractère prédictif et l'usage possible des outils de calcul auxquels les utilisateurs demandent de faire toujours plus et mieux dans un temps toujours plus réduit.

Très schématiquement, la capacité prédictive d'un outil de calcul s'apprécie par les écarts calculs-mesures sur des configurations représentatives données et par la fourniture d'incertitudes. C'est à ce niveau que sont définis les ***schémas de calcul***, c'est-à-dire les modes spécifiques d'utilisation d'un ou plusieurs logiciels de calcul pour traiter une situation donnée, en incluant éventuellement les couplages aux autres disciplines (thermo-mécanique, thermohydraulique, physico-chimie…)

Deux types de calcul sont requis :

- ***Le calcul de référence*** qui approche au plus près possible la réalité physique ; par exemple, la distribution fine de puissance crayon par crayon d'un cœur de réacteur nucléaire. Un outil de calcul de référence peut être utilisé à diverses fins :
  - la validation numérique de modèles physico-numériques,
  - la génération de données/grandeurs physiques pour d'autres outils de calcul,
  - l'analyse de phénomènes physiques,
  - la validation des données physiques de base (sections efficaces...),
  - les expériences numériques : complément/alternative à l'expérience,

- Le ***calcul de projet*** ou d'***avant-projet sommaire*** qui donne un ordre de grandeur. Un outil de calcul de projet se doit d'être performant en temps de calcul et simple de mise en œuvre. Il permet des calculs paramétriques et de pré-optimisation.

Les besoins des études au niveau industriel

Celui-ci spécifie les exigences et critères de choix pour effectuer les ***calculs de production*** : choix des bibliothèques de données nucléaires, codes et schémas de calcul, automatisation / fiabilité des enchaînements calculatoires (élaboration de procédures), convivialité, critères de performance, portabilité, qualité (élaboration de procédures, maintenance, assistance, expertise, vérification et validation, reconnaissance interne et externe, en particulier vis-à-vis des autorités de sûreté, etc.).

L'existence de ***Groupes d'utilisateurs des codes*** ou de ***forums*** favorise la remontée « en continu » vers les développeurs des besoins des utilisateurs et de leur retour d'expérience et facilite la résolution de problèmes et le partage de solutions.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 192

Les chapitres qui suivent traitent des calculs de réacteurs nucléaires, avec description de l'état de l'art pour les différents types de réacteurs (voir *infra*, p. 193-213). En toute rigueur, un traitement couplé de la neutronique, de la thermohydraulique, de la thermomécanique et de la mécanique est requis. Si le couplage neutronique-thermohydraulique est indispensable pour le calcul des grands réacteurs de puissance, l'association avec la thermomécanique et parfois la mécanique devient indispensable pour la description des séquences accidentelles en réacteur (voir *infra*, p. 215-225). D'autres applications de la neutronique touchent aux calculs de physique du cycle du combustible (voir *infra*, p. 227-234), et aux calculs de sûreté-criticité (voir *infra*, p. 235-246). Enfin, on a regroupé dans le dernier chapitre de cette section (voir *infra*, p. 247-251) d'autres applications de la neutronique ayant fait l'objet de développements récents au CEA, afin d'en illustrer la diversité.

Cheikh M. Diop et Anne Nicolas
Département de modélisation des systèmes et des structures

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 193

Le calcul neutronique des réacteurs

Ce chapitre, consacré au calcul des réacteurs, commence naturellement par l'énumération des grandeurs à calculer, en précisant en quoi elles servent à démontrer la capacité du réacteur à remplir sa mission (production d'énergie, expériences) de façon sûre et optimale d'un point de vue technique et économique. Les outils et méthodes disponibles, qui ont été présentés dans les chapitres précédents, sont ensuite brièvement rappelés.

La vie d'un neutron dans un réacteur

Du fait de leur neutralité, la seule forme possible d'interaction pour les neutrons lors de leur traversée d'un réacteur est celle de collisions avec les atomes du milieu (noyaux). Entre deux chocs, les neutrons suivent des trajectoires rectilignes et uniformes (on se place le cadre de la mécanique classique et on considère que la gravité est négligeable). Compte tenu des matériaux (combinaison des noyaux lourds du combustible et des noyaux légers des structures, caloporteur, modérateur) et des probabilités mises en jeu (sections efficaces), leur cheminement entre naissance et disparition se compose (en moyenne) :

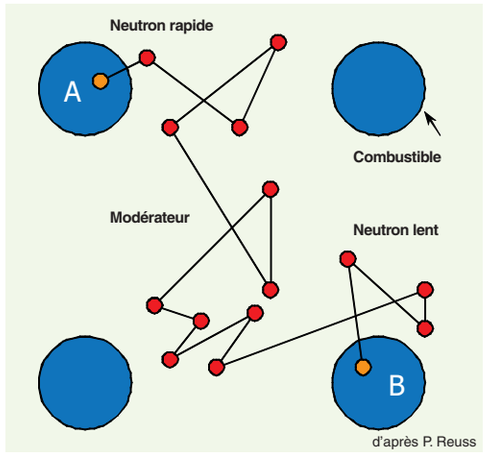
- D'un grand nombre de diffusions les ralentissant peu à peu,
- de fuites vers l'extérieur du système, en nombre limité,
- d'une absorption finale :
  - stérile, se traduisant par la disparition du neutron,
  - fertile, se traduisant par la formation d'un noyau fissile, conduisant par fission à la naissance de nouveaux neutrons.

Les neutrons de fission sont produits à haute énergie (2 MeV, soit une vitesse de 14 000 km/s). Ils subissent ensuite une série de collisions avec les noyaux atomiques du modérateur, qui les ralentissent. Une fois suffisamment ralentis (jusqu'à une vitesse dite « thermique », de l'ordre de 1 km/s au dessous de laquelle ils ne descendront plus car l'agitation thermique du milieu leur donne autant d'énergie qu'ils en perdent par collision), les neutrons peuvent finir par être absorbés par un noyau de combustible, ce qui peut causer la fission de ce dernier… et la production de nouveaux neutrons, qui subissent le même cycle ; ceci pour les réacteurs dits à neutrons thermiques ; pour les réacteurs à neutrons rapides, les neutrons sont absorbés par les noyaux du combustible en vue de provoquer des fissions sans avoir besoin d'être ralentis.

	H	D	C	O	U
A	1	2	12	16	238
σ_a (barns)	0,33	$0,5.10^{-3}$	3.10^{-3}	$0,3.10^{-3}$	2,7
N_c (2 MeV à 1 eV)	15	20	92	121	1 731

Ralentissement très efficace — Nécessité d'enrichir à qq %

Caractéristiques des principaux modérateurs (et comparaison à l'uranium) : nombre de masse, section efficace thermique de capture et nombre de chocs nécessaires pour ralentir un neutron. L'hydrogène de l'eau légère ralentit très efficacement les neutrons, mais les capture également. Le deutérium de l'eau lourde ne présente pas cet inconvénient.



Réacteur à neutrons thermiques (combustible U)

2 MeV (naissance)
↓ Fission à seuil (U 238)
Ralentissement inélastique et élastique
0,8 MeV
↓ Absorption faible
50 keV
Ralentissement élastique
↓ Absorption faible
5 keV
Ralentissement élastique
↓ Absorption résonnante
1 eV
Thermalisation
↓ Absorption forte (loi en 1/v)
1/40 eV
(neutrons thermiques)

Réacteur à neutrons rapides (combustible Pu)

2 MeV (naissance)
↓ Fission à seuil : (U 238, Pu 240)
Ralentissement inélastique dominant
0,8 MeV
100 keV
Ralentissement élastique
↓ Absorption faible
5 keV
↓ Absorption résonnante
1 keV

Le ralentissement d'un neutron dans un réacteur à neutrons thermiques et dans un réacteur à neutrons rapides.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 194

Les applications de la neutronique aux réacteurs sont décrites à partir de deux exemples emblématiques : le calcul des réacteurs à eau sous pression **(REP*)** et le calcul des réacteurs à neutrons rapides au sodium (**RNR***-Na), en s'attachant à montrer pourquoi et comment les schémas de calcul élaborés pour ces deux types de réacteurs ont été adaptés, voire transformés pour calculer les autres types de réacteurs : réacteurs à eau bouillante (REB), réacteurs expérimentaux, réacteurs à eau lourde, réacteurs à haute température (RHT), réacteurs rapide à caloporteur gaz (RCG-R), etc.

Les grandeurs à calculer

Le flux neutronique

La répartition en énergie des neutrons **(spectre*)** et leur distribution spatiale sont de première importance, puisque ces grandeurs déterminent les taux de réaction locaux dans le cœur. À ce titre, le spectre et le flux neutronique participent au premier chef au dimensionnement du cœur et à ses performances.

La réactivité et son évolution

En fonctionnement normal, la **réactivité*** du cœur est nulle à chaque instant, puisque le réacteur est juste **critique*** (k_{eff} = 1). Cette réactivité résulte de l'équilibre entre la réactivité potentielle du combustible qui diminue en même temps que le combustible s'use (par consommation de noyaux fissiles), et l'**anti-réactivité*** amenée par les divers absorbants de neutrons présents dans le cœur (produits de fission générés par les fissions, bore soluble dans le circuit primaire des réacteurs à eau pressurisée, **barres de contrôle***, **poisons consommables***, etc.). Il est donc fondamental de connaître l'évolution temporelle de chaque composante pour maintenir en permanence l'équilibre, et pour déterminer la longueur du cycle, c'est-à-dire le temps de fonctionnement entre deux opérations de renouvellement du combustible.

En situation d'arrêt, les règles de sûreté imposent un niveau de sous-criticité (k_{eff} < 1) qui dépend de la situation considérée (à chaud et à **puissance nominale***, à chaud et à puissance nulle, arrêt à froid, etc.) Enfin, en situation accidentelle, c'est le niveau de sur-criticité (k_{eff} > 1) qui détermine la vitesse d'évolution de la puissance dégagée par le cœur.

La connaissance de la réactivité et de son évolution temporelle sont donc fondamentales quelle que soit la situation du cœur.

Changement de la puissance d'un réacteur par application d'un créneau de réactivité

On extrait une barre de pilotage pendant un temps T donné, puis on la ramène à sa position initiale, ce qui augmente temporairement la réactivité ρ. La résolution des équations de la cinétique permet de déterminer l'évolution de la population de neutrons (fig. 116) :

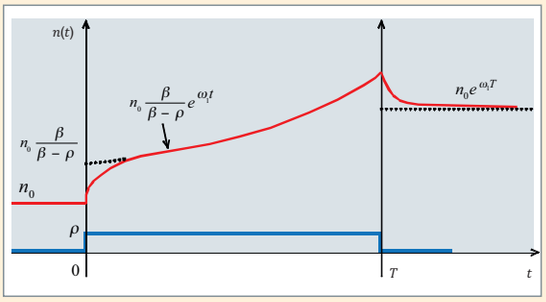


Fig. 116. Évolution de la population de neutrons suite à l'application d'un créneau de réactivité.

On peut montrer que la population de neutrons $n(t)$ atteint une valeur finale différente de la valeur initiale :

$$n_\infty = n_0 e^{\omega_1 T} \text{ où } \omega_1 = \frac{\rho\lambda}{\beta - \rho}$$

λ et β étant les paramètres de neutrons retardés dans le cas d'une famille unique.
Dans ce cas, une montée en puissance ajustable par le biais de la hauteur et de la durée du créneau de réactivité a été réalisée. Le cas mentionné ici est celui d'un réacteur à faible puissance, pour lequel les effets thermiques sont négligeables. Dans la pratique, les effets de température doivent être pris en compte car ils sont prépondérants dans le pilotage des réacteurs de puissance.

Les coefficients de contre-réaction

Ces coefficients traduisent la réponse de la réactivité à des variations des caractéristiques du cœur, qu'elles soient volontaires (changement du point de fonctionnement, par exemple) ou non (situation accidentelles telles que la rupture d'un tube générateur de vapeur [RTGV] ou l'accident de perte de réfrigérant primaire [APRP] dans les réacteurs à eau sous pression).

Les caractéristiques du cœur amenées à varier peuvent être la température du combustible, la température du modérateur ou du fluide caloporteur. Dans ce cas, les variations de la réactivité qui s'en déduisent, sont appelées « *effets de température* ». Elles modifient l'équilibre critique décrit dans le paragraphe précédent, et doivent être exactement compensées par une variation de réactivité de signe opposé.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 195

Une autre caractéristique du cœur amenée à varier est la quantité de caloporteur : ébullition/évaporation, vidange partielle ou totale... Lorsque le poids neutronique du caloporteur n'est pas négligeable, ce qui est le cas pour les RNR et également pour les REP et les REB où il joue le rôle de modérateur neutronique, les variations de réactivité induites peuvent être importantes. De manière générale, on recherchera toujours, par conception, à conserver des **coefficients de température*** ou des **coefficients de vidange*** stabilisants vis-à-vis de l'état critique du cœur : les augmentations de température ou la vidange du réacteur doivent avoir pour conséquence une diminution de la réactivité.

Une contre-réaction primordiale pour la stabilité des réacteurs : l'effet Doppler

Les noyaux constituants de la matière où se déplacent les neutrons ne sont pas immobiles, et il est important de prendre en compte leur mouvement dans l'expression des sections efficaces, notamment au niveau des résonances. Quand la température du milieu croît, la section efficace « s'aplatit », le pic des résonances s'élargit, et l'intégrale de la section efficace se conserve (voir *supra*, fig. 14, p. 34). Suivant le noyau-cible considéré, l'effet Doppler a des effets différents. Pour l'U 238, noyau avant tout capturant et généralement majoritaire dans le combustible nucléaire, l'effet Doppler augmente la probabilité de capture des neutrons, et a donc un effet négatif sur la réactivité du cœur. Quand la puissance du réacteur augmente, la température augmente, les résonances de capture de l'U 238 s'élargissent, le taux de capture augmente, ce qui fait baisser la réactivité, de l'ordre de -3 pcm/ °C. Cette contre-réaction contribue à la stabilité intrinsèque des réacteurs à eau. Elle est fondamentale pour leur sûreté.

La répartition de puissance

La répartition de la puissance entre les différentes régions du cœur, appelée aussi « distribution de puissance », est une grandeur fondamentale aussi bien vis-à-vis de la sûreté que de l'optimisation technico-économique du cœur.

Vis-à-vis de la sûreté, c'est en effet sur le rapport de la puissance maximale à la puissance moyenne qu'on impose une limite supérieure à ne pas dépasser en fonctionnement normal, afin de garantir la sûreté du réacteur en cas d'accident. En termes d'optimisation, à puissance maximum fixée, on a tout intérêt à ce que la puissance dégagée dans toutes les régions du cœur soit aussi proche que possible de ce maximum ; en effet, la puissance dégagée détermine la vitesse d'usure du combustible. Une distribution de puissance uniforme conduit à une usure du combustible uniforme, donc optimale vis-à-vis de son utilisation ; *a contrario*, une usure non uniforme conduit souvent à écourter la durée de cycle et à rejeter du combustible peu usé.

L'efficacité des différents moyens de contrôle de la réactivité

Le calcul de l'efficacité des différents moyens de contrôle de la réactivité est évidemment un élément essentiel de la démonstration de sûreté du réacteur. Ces moyens de contrôle (bore dissous dans le circuit primaire et grappes absorbantes de contrôle des REP, croix de contrôle des REB, poisons consommables, etc.) sont en effet utilisés soit pour maintenir le cœur dans un état critique (réactivité nulle) en fonctionnement normal, soit pour ramener le cœur à un état sous-critique en cas d'arrêt ou en situation accidentelle.

La composition isotopique des différents matériaux constitutifs du cœur

Au niveau des réacteurs, le calcul de la composition isotopique concerne essentiellement le combustible, donc les noyaux lourds et les produits de fission, et les absorbants, notamment les poisons consommables. Encore ne prend-on en compte que les éléments qui ont un « poids » neutronique – c'est-à-dire un effet sur la réactivité du cœur – significatif. Les études de physique du cycle du combustible nécessitent une connaissance beaucoup plus détaillée du **bilan matière*** afin de déterminer la **puissance résiduelle*** du combustible, l'activité, la radio-toxicité, etc. Les outils utilisés pour ces études sont présentés *supra*, p. 127-142.

Le niveau de puissance pour les transitoires accidentels

La grandeur qui doit être calculée pour évaluer les conséquences d'un accident sur le cœur et plus généralement sur l'ensemble du système est l'évolution temporelle du niveau absolu de puissance et de sa répartition dans le cœur. C'est une différence notable par rapport au fonctionnement normal ; en effet, dans ce cas, la puissance du cœur est une donnée d'entrée qui est nécessaire pour normaliser le niveau de **flux neutronique***, puisque la théorie nous apprend que dans un cœur critique, le flux est calculé à une constante multiplicative près.

La distribution de taux de combustion

Le **taux de combustion*** d'un élément combustible, outre le fait qu'il détermine sa composition isotopique, doit être connu, donc calculé, pour permettre la gestion du combustible dans les réacteurs dont le combustible est renouvelé par fraction de cœur (c'est le cas de tous les réacteurs électrogènes, et de nombreux réacteurs expérimentaux). C'est en effet la distribution de taux de combustion qui détermine la fin de cycle lorsqu'un ou plusieurs éléments combustibles ont atteint leur limite technologique d'usure. C'est également à partir de la distribution de taux de combustion dans le cœur en fin de cycle qu'est élaboré le plan de chargement du combustible pour le cycle à venir, c'est-à-dire l'emplacement de chaque élément combustible (neuf ou usé) dans le cœur.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 196

Autres grandeurs

Puissance résiduelle

La puissance résiduelle est la puissance thermique délivrée par un réacteur nucléaire à l'arrêt, provenant essentiellement de l'**activité** des **produits de fission**. Quelques secondes après l'arrêt du réacteur, cette puissance résiduelle représente environ 7 % de la puissance du réacteur avant son arrêt. Comme on l'a vu avec l'accident de **Fukushima***, l'évacuation de cette puissance est un enjeu de sûreté fondamental.

Échauffement nucléaire

L'échauffement nucléaire causé par les neutrons mais aussi par les photons ***gamma**** est une grandeur importante en particulier pour les réacteurs expérimentaux. Dans ces réacteurs, l'échauffement nucléaire sur les dispositifs d'irradiation expérimentaux dimensionne leur système de refroidissement et/ou les écrans à interposer entre le cœur et ces dispositifs pour limiter le flux *gamma* qu'ils reçoivent.

Dommages aux matériaux

La tenue dans le temps des matériaux constitutifs du cœur d'un réacteur nucléaire dépend de la dose reçue par lesdits matériaux, qui peuvent s'altérer, se déformer ou se trouver fragilisés par l'irradiation. Pour cette raison, il importe de savoir évaluer cette dose, en particulier pour certains composants critiques ou non remplaçables comme la cuve du réacteur. Les grandeurs d'intérêt sont principalement la **fluence*** (dose ou flux intégrés en temps) et le nombre de **déplacements par atomes* (dpa*)** sur les cuves et les structures internes des réacteurs.

Les outils disponibles

Quels sont les outils dont dispose le physicien des réacteurs pour calculer ces grandeurs ?

Les données nucléaires

Tout d'abord, il dispose, pour tous les nucléides d'intérêt, de données nucléaires qualifiées, sous une forme adaptée aux codes de calcul : généralement **multigroupe*** en énergie pour les codes déterministes, ponctuelle (énergie continue) pour les codes mettant en œuvre la méthode de Monte-Carlo. Ces données sont regroupées après leur mise en forme dans des « bibliothèques » qui contiennent, pour chaque nucléide, les **sections efficaces*** d'interaction pour les différentes réactions induites par les neutrons et les photons, ainsi que d'autres paramètres nucléaires d'intérêt : **période*** de décroissance, **multiplicité neutronique***, énergie de fission, etc.

Les « bibliothèques » qui contiennent ces données diffèrent essentiellement par l'évaluation dont elles sont issues, et, dans le cas des bibliothèques multigroupes, par le maillage en énergie adopté.

Ces bibliothèques de données nucléaires ont été qualifiées par le calcul, en comparant, sur des expériences très simples, les résultats de calculs très précis aux mesures. En effet, l'utilisation de calculs très précis – dits « de référence » – assure que l'essentiel de l'écart observé provient des données nucléaires et non de la méthode de calcul.

Les chapitres de la partie « Les données nucléaires » (voir *supra*, p. 19-38) fournissent des informations détaillées sur les données nucléaires, leur évaluation et leur traitement.

Les codes et méthodes

Les méthodes de résolution des équations gouvernant l'évolution de la population neutronique ainsi que la démarche du neutronicien sont exposées *supra*, p. 51-54. L196es principaux codes de calcul utilisés pour calculer les réacteurs nucléaires sont présentés *supra* p. 127-142.

En résumé, il existe deux types de méthode de calcul complémentaires : la méthode de Monte-Carlo et les méthodes déterministes. La première est retenue pour faire des calculs de référence et valider les calculs usuels. C'est à partir des secondes que l'on développe les modèles de calcul destinés au calcul usuel des réacteurs nucléaires.

La neutronique expérimentale

Les mesures de réactivité, de taux de réactions, de compositions isotopiques de combustibles irradiés réalisées selon le cas dans les réacteurs expérimentaux ou les réacteurs de puissance, sont confrontées aux résultats des calculs pour établir la qualification d'ensemble des schémas de calcul. Cette **qualification*** est complétée par des comparaisons à des calculs réputés plus précis (par exemple des calculs fondés sur la méthode de Monte-Carlo).

L'application de la neutronique aux réacteurs à eau sous pression (REP)

La mise en œuvre du schéma de calcul usuel en deux étapes pour le calcul d'un REP en fonctionnement normal se déroule comme suit : pour chaque type d'assemblage présent dans le cœur (fig. 117), on réalise avec un code de réseau tel que le code **APOLLO2*** un ensemble de calculs afin de constituer une bibliothèque multiparamétrée de caractéristiques neutroniques utilisable dans le calcul de cœur réalisé par un code de cœur tel que le code **CRONOS2*** (voir aussi *supra* la démarche du neutronicien, p. 51-54). Les caractéristiques neutroniques du réflecteur entourant le cœur sont déterminées comme indiqué ci-après, p. 198. Les types d'assemblages présents dans le cœur peuvent différer par leur fournisseur, le combustible (MOX, UOX), les poisons consommables (gadolinium dans le combustible, grappes de crayons absorbants).

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 197

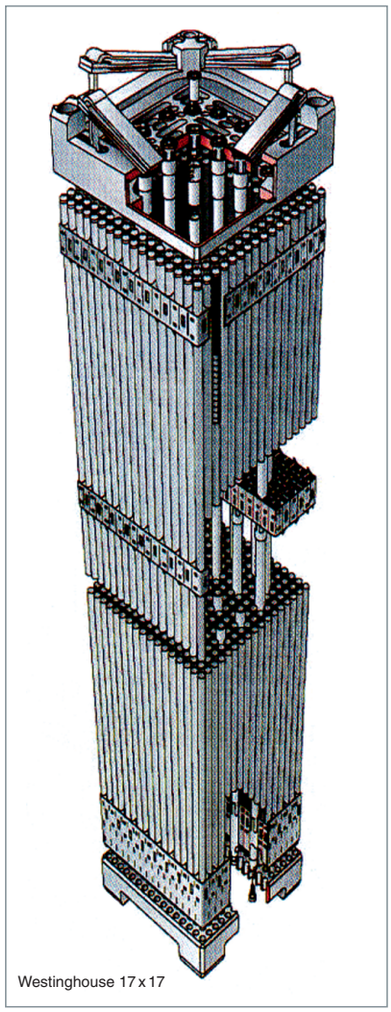


Fig. 118. Un assemblage combustible de réacteur à eau sous pression.

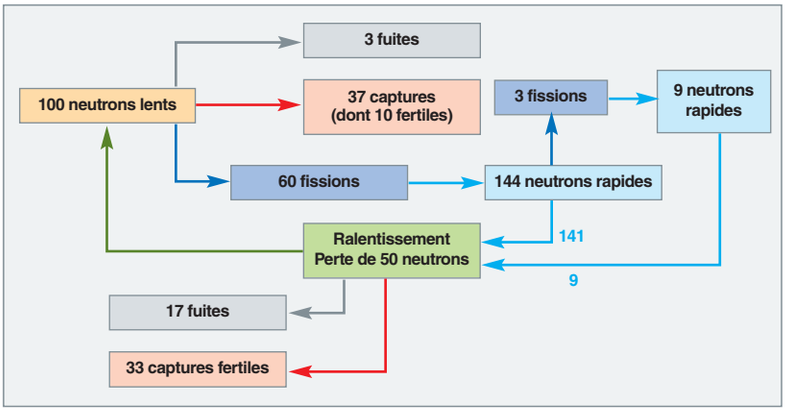


Fig. 119. Le bilan neutronique d'un réacteur à eau.

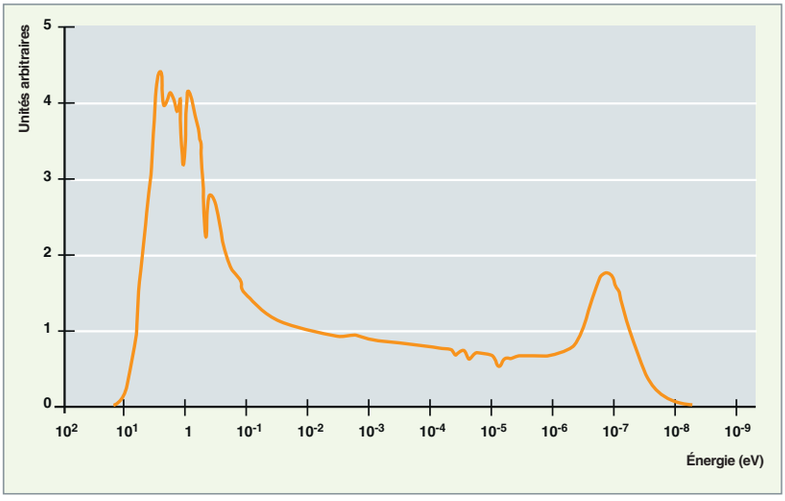


Fig. 120. Le spectre neutronique d'un réacteur à eau sous pression.

Les deux figures ci-dessus illustrent pour un réacteur de puissance à eau sous pression le bilan neutronique et le spectre des neutrons présents dans le cœur.

Calcul d'évolution de l'assemblage en conditions nominales

Pour ce calcul, les paramètres de fonctionnement T_m, ρ_m (température et densité du modérateur), T_c (température du combustible) sont fixés à leur valeur nominale. La concentration de bore (Cb) prend une valeur moyenne arbitraire, généralement 600 **ppm***.

Une section horizontale de l'**assemblage*** est décrite en détail : chaque **crayon*** est représenté avec son combustible (découpé en couronnes concentriques pour prendre en compte la variation spatiale de l'absorption résonnante des neutrons), sa **gaine***, et la partie de **modérateur*** associée ; les grilles de maintien des crayons sont diluées dans le modérateur pour tenir compte de leur absorption.

Selon le degré de précisons souhaité, le flux est calculé sur ce modèle géométrique dans la plupart des cas par la **méthode des caractéristiques*** ou parfois encore par la **méthode des probabilités de collisions*** (méthode des P_{ij}, le plus souvent utilisée dans l'approximation « multicellule » pour le couplage des cellules entre elles). Le calcul est réalisé avec le plus souvent 281 groupes d'énergie selon le triple compromis temps de calcul/encombrement des bibliothèques/précision recherchée.

L'**autoprotection*** des résonances est calculée en distinguant quatre ou six couronnes concentriques dans les crayons combustibles non **gadoliniés***, et onze dans les crayons gadoliniés.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 198

Le calcul d'évolution est effectué en résolvant les équations de **Bateman*** à puissance massique constante, sur autant de milieux qu'il y a de couronnes dans les crayons combustibles. Dans un schéma simple, les différents crayons ne sont donc pas distingués vis-à-vis de l'évolution ; toutes les couronnes externes évoluent donc de la même façon, et il en est de même pour les autres couronnes. Si l'on souhaite une meilleure précision, on distingue les crayons les uns des autres pour aboutir à une évolution différenciée de chaque couronne de chaque crayon de l'assemblage. Une soixantaine de pas de calcul est nécessaire pour atteindre un taux de combustion moyen de rejet de 60 GWj/t.

L'autoprotection est recalculée une dizaine de fois au cours de l'évolution pour tenir compte de la variation des concentrations isotopiques.

Calcul d'assemblage dit « de reprise »

Pour un sous-ensemble des pas d'évolution, un calcul d'assemblage à taux d'irradiation fixé est réalisé à partir des concentrations stockées à l'issue du calcul précédent pour un certain nombre de triplets de valeurs des paramètres densité du modérateur (ρ_m), température combustible (T_c), concentration en bore soluble (Cb). Ces calculs sont destinés à prendre en compte d'une part l'insertion occasionnelle des grappes de contrôle dans l'assemblage, et, d'autre part, les contre-réactions thermohydrauliques. Si l'étude porte sur une situation accidentelle avec apparition de vapeur dans le cœur, on ajoute comme paramètre la température du modérateur T_m, qui est découplée du paramètre densité ρ_m dans la zone en vapeur.

Comme pour les calculs en conditions nominales, l'autoprotection des résonances est calculée sur une cellule moyenne avec quatre ou six couronnes dans les crayons combustibles non gadoliniés, et onze dans les crayons gadoliniés.

Ces calculs de reprise sont effectués (n+1) fois, avec n égal au nombre de types de grappes susceptibles d'être insérées dans l'assemblage. Pour un REP 900 MWe, par exemple, n vaut 2, car un assemblage peut recevoir une grappe noire (24 crayons absorbants) ou une grappe grise (huit crayons absorbants et seize crayons en acier). Pour la première série de calculs, l'assemblage est dépourvu de grappe de contrôle, comme dans le cas du calcul d'évolution en conditions nominales.

Le flux est calculé sur le même modèle que dans le calcul d'évolution, et par la même méthode ; il est ensuite utilisé pour homogénéiser l'assemblage, soit dans sa totalité, soit « par morceaux », en pratique cellule par cellule. L'homogénéisation totale consiste à substituer à l'assemblage une « pâte » homogène neutroniquement équivalente. L'homogénéisation par cellule consiste à substituer à l'assemblage une série de « pâtes » homogènes, chacune équivalente à une cellule ou à un groupe de cellules de l'assemblage. C'est le niveau de raffinement du calcul de cœur qu'on souhaite effectuer (calcul assemblage par assemblage, dit **« calcul homogène* »** ou calcul crayon par crayon, dit **« calcul hétérogène* »**) qui détermine le degré d'homogénéisation de l'assemblage.

La ou les « pâtes » homogènes sont caractérisées par des sections efficaces à peu de groupes d'énergie (usuellement deux) qui sont déterminées à l'aide de ce même flux par « condensation » des sections efficaces à 281 groupes. Selon le type de méthode et le modèle géométrique utilisés dans le calcul de cœur, une équivalence est éventuellement réalisée pour corriger ces sections afin de tenir compte du changement de modélisation de l'équation du transport entre la phase 1 (transport fin à l'échelle assemblage) et la phase 2 (diffusion ou transport simplifié à l'échelle du cœur).

Les sections macroscopiques à deux groupes d'énergie de la « pâte » homogène équivalente à l'assemblage sont alors stockées dans une bibliothèque multiparamétrée, dont les paramètres sont : le taux de combustion, la température du combustible T_c, la densité du modérateur ρ_m, éventuellement la température du modérateur T_m, la concentration en bore Cb, et le type de grappe insérée.

Quelques nucléides peuvent être particularisés (opération qui consiste à isoler dans la bibliothèque multiparamétrée leur concentration et leurs sections microscopiques tout au long de l'évolution) afin de traiter explicitement, dans le calcul de cœur, leur évolution au cours du cycle ; pour le REP ce sont *a minima* le xénon 135 et le samarium 149, produits de fission dont l'évolution temporelle est particulièrement suivie à l'échelle du cœur. Ce sont, en effet, les principaux contributeurs à l'empoisonnement neutronique du cœur, du fait de leur très grande section efficace de capture de neutrons thermiques. Dans le cas des cœurs REP il est possible dans certains cas de réaliser des calculs d'évolution dits « macroscopiques » où seules les concentrations du Xe 135 et du Sm 149 sont suivies.

Si tous les nucléides de la bibliothèque multiparamétrée sont particularisés, on parle d'évolution « microscopique » à l'échelle du cœur.

Calcul des caractéristiques neutroniques des réflecteurs

Le réflecteur est généralement représenté par une couche de matériau homogène de 20 cm d'épaisseur entourant la partie active du cœur sur toutes ses faces. Les caractéristiques neutroniques de ce matériau fictif sont déterminées de façon à reproduire les propriétés réflectrices des matériaux réels entourant le cœur : cloisonnement, eau, enveloppe, têtes et pieds d'assemblages, etc.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 199

Calcul de cœur

Pour le calcul d'un cycle, l'évolution du cœur est calculée en enchaînant les calculs de flux en supposant la puissance constante entre deux pas de calcul. Les accroissements de taux de combustion calculés pour chaque maille du cœur permettent de déterminer, par interpolation dans la bibliothèque multiparamétrée, les sections efficaces à utiliser au pas suivant. À chaque pas, le code détermine la concentration de bore Cb qui rend le cœur critique, et les calculs s'enchaînent jusqu'à une concentration de bore minimale fixée à l'avance correspondant à la fin de cycle.

Un calcul homogène de cycle se déroule comme suit :

- Le cœur est modélisé en 3D, avec 20 à 30 mailles axiales sur la partie active, quatre mailles radiales par assemblage (pour prendre en compte les gradients de puissance vus par l'assemblage combustible au cours de son séjour dans le cœur). Le flux est généralement calculé en résolvant l'équation de la diffusion à deux groupes par une méthode aux **éléments finis mixtes*** ou une méthode nodale ;

- les contre-réactions thermohydrauliques sont prises en compte grâce à un modèle de thermohydraulique. Chaque maille spatiale du cœur est donc différenciée des autres par ses paramètres propres (T_c, ρ_m, T_m, Cb) ; les sections efficaces utilisées sont déduites par interpolation en fonction des paramètres des sections présents dans la bibliothèque multiparamétrée ;

- le code fournit la concentration critique de bore, la distribution de puissance par maille spatiale, la distribution de taux de combustion, et ce à chaque pas d'évolution du cycle calculé ;

- si besoin, le pic de puissance (puissance dégagée dans la maille la plus « chaude » du cœur ramenée à la puissance moyenne) est calculé par factorisation : on recherche tout d'abord, dans les résultats du calcul de cœur, la maille de calcul la plus « chaude » (c'est donc une tranche de quart d'assemblage) pour noter sa puissance $P^{\max}_{x,y,z}$; on récupère ensuite dans la bibliothèque multiparamétrée de l'assemblage correspondant la distribution de puissance cellule par cellule (appelée « structure fine ») $P_{x,y,z}$, puis on calcule la valeur du « pic crayon » comme le produit $P_{x,y,z}.P^{\max}_{x,y,z}$.

Dans le cas de cœurs très hétérogènes ou de situations très dissymétriques, ou encore lorsqu'une connaissance plus précise de la distribution de puissance est nécessaire, un calcul hétérogène du cœur peut être effectué : dans ce cas, chaque cellule est représentée par une pâte homogène. Dans ce type de calcul hétérogène, le modèle de cœur pour le calcul thermohydraulique est plus grossier que le modèle neutronique (par assemblage ou par quart d'assemblage, et non par cellule). Les grandeurs neutroniques calculées cellule par cellule sont donc moyennées sur un quart d'assemblage ou sur un assemblage avant d'être transmises au calcul de thermohydraulique.

L'application de la neutronique aux réacteurs à neutrons rapides RNR-Na

La motivation originelle d'étude de cette filière est la possibilité de rendre ces réacteurs capables de produire autant voire plus de matière fissile qu'ils n'en consomment, c'est-à-dire d'atteindre un taux de conversion supérieur à l'unité dans un cycle U-Pu. Cela n'est possible qu'avec des neutrons rapides, car c'est dans ce domaine que le rapport des captures fertiles sur les fissions est suffisamment grand. Il faut donc éviter autant que possible de ralentir les neutrons après leur émission par fission, ce qui proscrit la présence de matériaux légers dans le cœur du réacteur.

Comparée à celle des réacteurs à neutrons thermiques, la neutronique des réacteurs à neutrons rapides **(RNR*)** présente de nombreuses spécificités. Elles sont brièvement évoquées ci-dessous.

Spécificités neutroniques des RNR

Dans ces réacteurs, la quantité de noyaux très légers étant beaucoup plus faible que dans un réacteur à eau, le ralentissement des neutrons est moins efficace et la perte d'énergie par collision est en moyenne plus faible. Cela rend nécessaire des calculs multigroupes avec maillage énergétique plus fin que dans un réacteur thermique, que ce soit au niveau du calcul d'assemblage ou du calcul de cœur. De plus, un tel maillage permet une meilleure prise en compte des seuils de réaction (diffusion inélastique…).

En dehors de dispositifs spécifiques (assemblages modérés pour la transmutation de déchets à vie longue par exemple), il n'y a quasiment pas de neutrons thermiques dans le spectre neutronique. En conséquence, de nombreux « poisons » (absorbants neutroniques) en spectre thermique ne le sont plus en spectre rapide : il n'y a pas par exemple d'empoisonnement xénon, et la perte de réactivité due à l'accumulation des produits de fission est notablement moindre. Les effets d'autoprotection sont aussi plus faibles, tout en restant significatifs.

Le libre parcours moyen des neutrons est nettement plus élevé, typiquement de l'ordre de quelques centimètres. Cela signifie qu'un cœur de RNR est plus « couplé » qu'un cœur thermique de même encombrement, que les instabilités zonales y sont moins importantes, que la dépression du flux dans les barreaux combustibles est en général insignifiante et que les effets d'hétérogénéité sont globalement plus faibles. Enfin, les fuites neutroniques hors du cœur sont très impor-

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 200

tantes : par exemple, environ 30 % des neutrons produits dans le cœur de PHÉNIX fuient hors de celui-ci (et sont dans ce cas précis presque tous récupérés par les **couvertures fertiles***).

Contraintes de conception des réacteurs à neutrons rapides

Plusieurs images de cœurs rapides dits de quatrième génération ont émergé récemment, de caractère évolutif ou plus innovant vis-à-vis de l'existant. Elles sont la conséquence, comme tout résultat de conception, de compromis et d'optimisations entre contraintes de conception plus ou moins antagonistes, dont voici quelques-unes.

Les **sections efficaces*** de réaction étant nettement plus faibles en spectre rapide qu'en spectre thermique, il est nécessaire d'avoir un flux neutronique très élevé (typiquement quelques 10^{15} n/cm^2/s, soit 10 à 15 fois plus que dans un REP). La première conséquence de cette faiblesse des sections efficaces est l'importante quantité de matière **fissile*** nécessaire pour rendre le réacteur **critique***. Pour minimiser cette matière fissile, qui constitue un investissement initial lourd en U 235 ou en Pu 239, il convient de concevoir un cœur dense, très enrichi en matière fissile (U 235 ou Pu 239) et avec une forte puissance volumique. Cette puissance volumique élevée dans le combustible se traduit par des températures nominales élevées, pouvant dépasser 2 000 °C à cœur dans les pastilles combustibles et 600 °C dans les gaines, et donc des marges en température faibles en cas d'accident. Cette contrainte peut être relâchée en cas d'abondance de plutonium.

Par ailleurs, les flux neutroniques élevés de neutrons rapides entraînent un fort endommagement des matériaux constitutifs du cœur : les forts gonflements et fluages des structures, en concurrence avec les **interactions pastille-gaine***, obligent à des recherches sur l'**optimisation des matériaux de structure** permettant de reculer la limite neutronique de l'irradiation ; celle-ci est aujourd'hui d'environ 150 GWj/t pour le combustible et 180 dpa **NRT*** pour les gaines ; cette optimisation devra être poursuivie pour les classes de matériaux envisagées dans les réacteurs de quatrième génération.

Les réacteurs rapides sont caractérisés par une grande **flexibilité dans le taux de conversion*** : ils peuvent être conçus sous-générateurs, isogénérateurs ou **surgénérateurs*** ; les deux paramètres essentiels gouvernant ce caractère sont la teneur en Pu/(U+Pu) du combustible et la plus ou moins grande abondance de zones fertiles récupérant les neutrons de fuite du cœur, particulièrement nombreux en spectre rapide.

Un fort taux de conversion dans le combustible signifie aussi une diminution de la perte de réactivité en évolution, donc de l'efficacité nécessaire pour les absorbants, et mitige par conséquent les effets d'une remontée accidentelle de ceux-ci.

Il faut noter également qu'une partie du taux de conversion peut être sacrifiée pour transmuter des noyaux indésirables (transmutation de déchets à vie longue). Sur le long terme, l'introduction de réacteurs rapides dans le parc électronucléaire permettrait de moduler dans certaines limites les quantités de déchets à vie longue produits. Mais la transmutation d'actinides mineurs en réacteur rapide se heurte à des contraintes adverses : le prix à payer est en général une augmentation du **coefficient de vidange***, accompagnée d'une diminution du **coefficient de contre-réaction*** Doppler et de la fraction de **neutrons retardés***, ce qui oblige à limiter les teneurs et donc les quantités d'actinides mineurs détruites à chaque passage.

Il existe dans un réacteur rapide des **effets en réactivité positifs**, car le cœur nominal n'est pas dans sa configuration la plus critique ; en particulier, une compaction du cœur augmente sa réactivité. De plus, le durcissement local du spectre neutronique dû à une **vidange de caloporteur** dans la zone combustible accroît également la réactivité dans le cas d'un combustible U-Pu. Cet effet peut être compensé à divers degrés par l'accroissement des fuites provoqué par la disparition du caloporteur, en jouant sur la géométrie et les compositions du cœur et de son environnement proche : cœur « plat », présence d'hétérogénéités absorbantes dans le cœur, telles que plaques ou couronnes fertiles, accroissement important de la fraction volumique de sodium juste au-dessus du cœur (plenum de sodium), etc. On peut également diminuer la composante spectrale en réduisant la quantité de sodium dans les zones combustibles, au prix d'une réduction des capacités de transfert de chaleur et donc de la puissance volumique. Une combinaison judicieuse de ces options permet d'aboutir à une réduction très significative de l'effet en réactivité d'une vidange du caloporteur, qui se traduira par exemple par une diminution des dégagements d'énergie en cas d'accident de fusion du cœur, et par un comportement plus favorable dans les accidents de perte de débit de caloporteur.

L'amplitude de certaines contre-réactions (**effet Doppler***, effets de dilatation) peut être modulée dans certaines limites. En particulier, les principaux facteurs agissant sur la contre-réaction Doppler sont la teneur Pu/(U+Pu) du combustible et la dureté du spectre. L'optimisation est ici plus délicate, car selon les accidents ou la phase du déroulement accidentel, c'est une amplitude importante de la contre-réaction Doppler qui est favorable, ou au contraire une amplitude réduite.

Afin d'illustrer par un exemple simple les antagonismes entre objectifs de conception, on peut examiner les tendances résultant de l'augmentation de la teneur Pu/(U+Pu) du combustible :

- Le taux de conversion du combustible diminue, alors que les fuites neutroniques hors du combustible, pouvant être récupérées par des matériaux fertiles, augmentent ; mais géné-

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 201

ralement la compensation est incomplète et le taux de conversion global (cœur + couvertures) diminue ;

- la réactivité de vidange diminue (effet de spectre plus faible et fuites accrues), ainsi que l'amplitude de la contre-réaction Doppler.

On voit là qu'un objectif d'augmentation du taux de conversion s'oppose le plus souvent à un objectif de diminution du coefficient de vidange, ainsi qu'à un objectif de diminution de la réserve de réactivité nécessaire pour le fonctionnement du réacteur, mais s'accorde avec un objectif d'augmentation des contre-réactions en température. Ainsi, pour concevoir des réacteurs rapides refroidis au sodium qui soient régénérateurs tout en ayant une faible réactivité de vidange du caloporteur, il faut nécessairement rechercher un compromis.

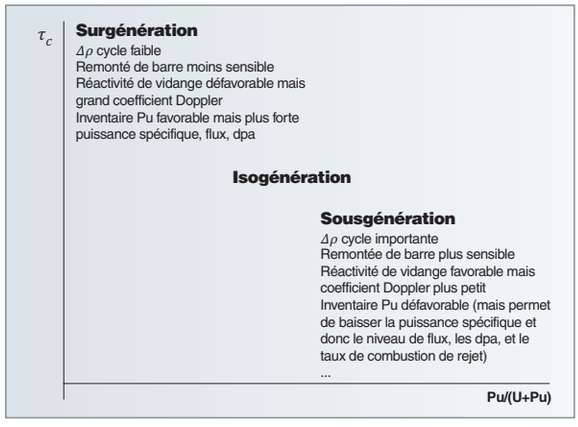


Fig. 119. Taux de conversion (τ_c) en fonction de la teneur en plutonium du combustible Pu/(U+Pu) : Représentation des termes du compromis de conception d'un réacteur à neutrons rapides.

La conception du cœur du prototype de quatrième génération ASTRID illustre particulièrement bien cette recherche de compromis : le cœur ASTRID « CFV » (fig. 120) résout le problème de la vidange, puisqu'il possède un coefficient de vidange global nul. Cette conception représente un progrès en sûreté très significatif par rapport aux précédents concepts de RNR-Na.

Calcul d'assemblage

La modélisation des cœurs de réacteurs à neutrons rapides (fig. 121) se fait elle aussi de manière classique par une approche en deux étapes : les calculs d'assemblage et les calculs de cœur. Ces étapes de calcul sont réalisées au CEA avec le système de code **ERANOS***.

Le calcul d'assemblage est réalisé dans un découpage énergétique fin (1 968 groupes d'énergie), la largeur des groupes étant de l'ordre de la perte logarithmique moyenne d'énergie par choc sur un noyau d'actinide. Cela permet de prendre correctement en compte le ralentissement des neutrons, dont une composante non négligeable est due aux noyaux lourds.

Une section droite de l'assemblage est décrite en détail : par exemple, dans le cas d'un assemblage hexagonal à aiguilles et fils espaceurs, on représente chaque aiguille : combustible (non zoné, compte tenu du libre parcours moyen élevé des neutrons), gaine à laquelle est incorporé le fil espaceur, caloporteur ; le faisceau d'aiguilles est entouré d'un tube de struc-

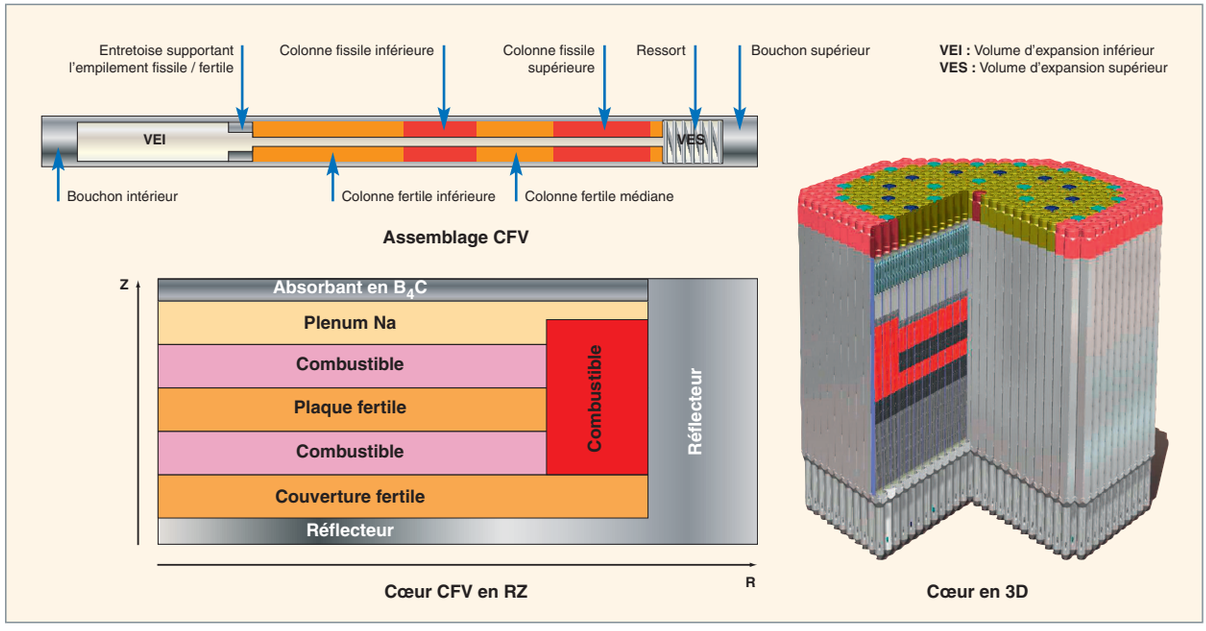


Fig. 120. Une image du cœur à faible coefficient de vidange (CFV) du prototype ASTRID.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 202

ture hexagonal, représenté lui aussi. Des modélisations plus simples (homogène ou cylindrique à deux zones) de la cellule combustible sont possibles pour des calculs prospectifs rapides ; les effets d'hétérogénéité sur le facteur de multiplication sont alors de l'ordre de quelques pour-mille.

Le flux dans l'élément combustible est calculé en réseau infini sur ce modèle géométrique en utilisant une **méthode de probabilités de collision***, exacte sur des modèles simples, approchée sur des assemblages complets. L'autoprotection des résonances est effectuée pour tous les nucléides résonnants à l'aide d'une méthode de sous-groupes, dans une description géométrique complète. Une condensation énergétique en groupes larges et une homogénéisation sont possibles afin d'alimenter les calculs de cœur en jeux de sections efficaces homogènes en groupes larges. Ces opérations sont conduites de manière à préserver le bilan neutronique de la cellule.

Compte tenu du poids neutronique plus faible des produits de fission et du fait que le phénomène d'autoprotection change peu au cours du cycle, il est le plus souvent inutile de prendre en compte l'évolution du combustible au niveau du calcul d'assemblage. Le calcul d'évolution est généralement réalisé en même temps que le calcul de cœur.

Les assemblages sous-critiques (couvertures, réflecteurs) sont traités de manière similaire mais souvent simplifiée, en imposant à leur périphérie une source simulant les fuites provenant des zones combustibles.

Calcul de cœur

Un découpage énergétique souvent utilisé comporte 33 groupes d'énergie, dont les bornes sont choisies parmi celles du maillage fin à 1968 groupes. Ce découpage est beaucoup plus fin que celui généralement utilisé dans les calculs de cœur de réacteurs à eau sous pression (deux ou quatre groupes).

La théorie de la diffusion donne des résultats corrects lorsque le flux neutronique est voisin de l'isotropie, ce qui est le cas sauf en présence de fortes absorptions non compensées ou à proximité (de l'ordre du libre parcours moyen) des interfaces, telles que cœur/couverture ou cœur/réflecteur. Des solveurs de flux en théorie de la diffusion sont disponibles en **différences finies*** à une, deux ou trois dimensions. En géométrie hexagonale, le maillage radial peut être raffiné par pas discrets (7, 19, 37… points par assemblage) si l'on souhaite tenir compte des gradients de flux importants, surtout en périphérie du cœur et dans les couvertures.

La théorie de la diffusion tend cependant à surestimer les fuites. Dans un RNR, cela se traduit par une sous-estimation du facteur de multiplication du cœur de quelques pour-mille. Cela a également un impact notable sur certains effets en réactivité dépendant largement des fuites, comme la réacti-

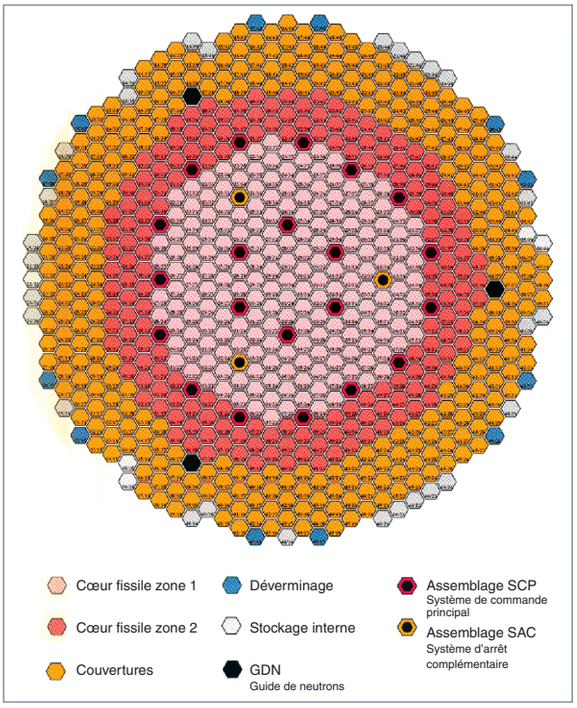


Fig. 121. Schéma général du cœur de Superphénix.

vité de vidange, ou sur la distribution neutronique au voisinage des frontières du cœur. Aussi essaie-t-on d'employer la théorie du transport autant que possible. En l'état actuel cela peut être fait en géométrie bidimensionnelle (XY ou RZ) à l'aide d'une **méthode S_N***, ou en géométrie tridimensionnelle (XYZ ou HEX,Z) à l'aide d'une **méthode variationnelle nodale***. Une reconstruction fine du flux à l'intérieur des mailles est possible dans ce dernier cas

L'évolution du cœur est traitée en enchaînant calculs de flux et calculs d'évolution à puissance constante.

Des outils de traitement permettent d'accéder aux grandeurs d'intérêt pour le projet : bilan neutronique, bilan matière et gain de régénération, distribution et pics de puissance.

Une mention spéciale doit être faite de l'utilisation d'outils de perturbation, basés sur la définition d'un **« flux adjoint* »** ou « importance neutronique ». Compte tenu du fait que les réactions d'intérêt se produisent sur une large gamme en énergie, ces outils contribuent puissamment à une analyse physique détaillée, précieuse pour le neutronicien et le concepteur. Ils permettent en particulier de calculer simplement les sensibilités d'une grande variété de paramètres (facteur de multiplication, ratios de taux de réaction, etc.) aux données nucléaires.

Enfin, à l'instar des réacteurs à eau, des enchaînements facilement paramétrables de calculs permettent de déterminer des cycles à l'équilibre ou d'assurer le suivi fin d'un cœur de puissance.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 203

Retour sur les données nucléaires

Pour des neutrons incidents rapides et d'énergie intermédiaire, les sections efficaces de réaction sont connues avec une précision moindre que dans le domaine thermique. L'impact de cette moins bonne connaissance se traduit le plus souvent sur les paramètres de projet par une incertitude allant bien au-delà de l'incertitude cible requise par les concepteurs ; c'est un autre problème typique de la neutronique des réacteurs rapides. Les études de sensibilité évoquées ci-dessus permettent alors de définir des tendances pour le réexamen de données nucléaires spécifiques par les évaluateurs, afin aboutir à une prédiction des valeurs expérimentales mieux centrée et associée à des incertitudes notablement réduites.

Du réacteur à eau sous pression au réacteur à eau bouillante

Même s'ils ne sont pas présents dans le parc français, les réacteurs à eau bouillante constituent un élément important du parc électronucléaire mondial. L'absence de circuit secondaire sur les REB rend ces derniers moins coûteux à l'achat. En revanche, à cause du caractère diphasique du fluide caloporteur, leur conception neutronique est plus complexe que celle des réacteurs à eau sous pression.

Calcul d'assemblage

La conception d'un assemblage de REB est très différente de celle d'un assemblage de REP (fig. 122) :

- Les crayons combustibles sont enfermés dans un boîtier qui comporte en son centre un « trou d'eau » de grande dimension ; ce trou d'eau, dans lequel l'eau reste liquide, apporte un surcroît de modération, qui évite l'apparition dans la partie haute du cœur (où le taux de vide dans le boîtier est important) de pics de puissance en périphérie de l'assemblage ;

- une lame d'eau liquide de bas en haut du cœur sépare les assemblages, apportant aux crayons périphériques des assemblages un surcroît de modération en partie haute du cœur ;

- les croix de contrôle s'insèrent entre les assemblages, et non dans les assemblages comme c'est le cas pour les REP.

Cette conception hétérogène qui découple les assemblages les uns des autres permet une grande souplesse sur le contenu de l'assemblage (enrichissement et empoisonnement du combustible par des poisons consommables, etc.) ; elle conduit par contre à des variations de spectre (répartition des neutrons en énergie) très importantes d'un crayon à l'autre qui s'ajoutent à la variation de spectre axiale due à l'apparition progressive de vapeur.

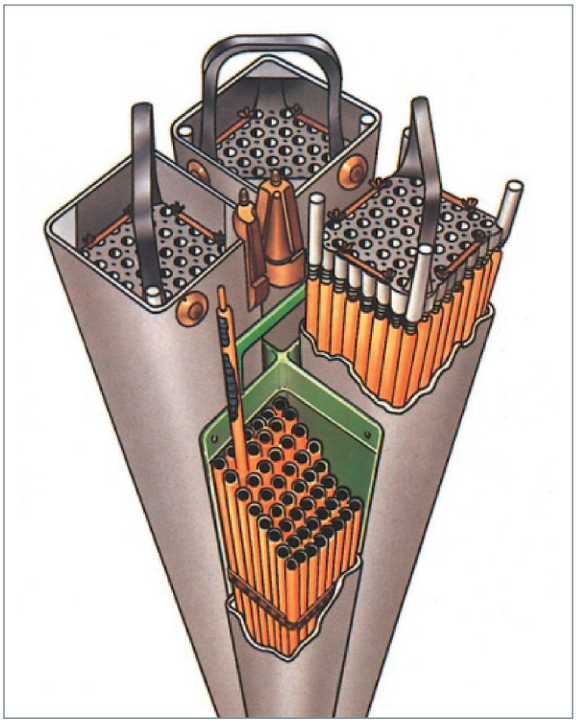


Fig. 122. Un assemblage combustible de réacteur à eau bouillante.

Le traitement correct de ces variations de spectre nécessite un maillage en espace de l'assemblage beaucoup plus raffiné que pour les assemblages de REP. De plus, la présence de vapeur en haut du cœur augmente la portée des couplages entre crayons du fait de l'augmentation de l'**aire de migration*** des neutrons, ce qui impose le recours à une méthode de résolution précises, telle la **méthode des caractéristiques***.

En haut du cœur, le déplacement du spectre neutronique vers la région **épithermique***, dû à la sous-modération, impose de tenir compte du recouvrement des **résonances*** de certains nucléides lourds lors du calcul de l'autoprotection des résonances.

Pour maintenir le temps de calcul à un niveau acceptable, malgré l'utilisation de méthodes précises donc consommatrices de temps, on est conduit à découpler au maximum le traitement de l'**autoprotection*** et le calcul de flux dans l'assemblage, qui sont les deux postes importants du temps de calcul global ; ils sont explicités ici dans le cadre de la réalisation qui a été faite avec le code APOLLO2 :

- L'autoprotection est traitée localement pour un certain nombre de nucléides, avec un modèle géométrique simple (par exemple un seul crayon combustible) ; elle n'est traitée sur l'assemblage entier que pour un petit nombre de nucléides pour lesquels la prise en compte du couplage entre cellules est importante ;

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 204

• Le flux est calculé avec un schéma multiniveau, qui met en œuvre plusieurs méthodes et plusieurs maillages aussi bien en espace qu'en énergie ; on peut ainsi adapter à chaque niveau le modèle et la méthode au problème physique à traiter.

Le calcul d'évolution est répété – et cela constitue une autre différence par rapport au schéma de calcul des REP – pour plusieurs valeurs de taux de vide entre 0 % et 80 %.

Les calculs effectués pour créer la bibliothèque de sections efficaces multiparamétrée comportent donc un paramètre supplémentaire, le taux de vide. Les calculs sont répétés pour chaque valeur de taux de vide correspondant à un calcul d'évolution. En revanche, la bibliothèque ne contient pas le paramètre concentration en bore, puisque le bore n'est pas utilisé dans les REB pour contrôler la réactivité.

La bibliothèque multiparamétrée est créée à l'issue de ces calculs de la même façon que pour les REP, à la différence près que tous les nucléides dont la concentration varie en cours d'évolution sont particularisés afin de permettre un calcul d'évolution détaillé dans le calcul de cœur.

Calcul de cœur

Le modèle de cœur utilisé et les méthodes de calcul ne sont pas fondamentalement différents de ceux utilisés pour les REP. Le cœur est décrit sous forme d'assemblages homogènes, en supposant qu'une croix de contrôle insérée est intégrée dans les quatre assemblages voisins.

Le modèle de thermohydraulique doit être apte à traiter les situations diphasiques.

Enfin, contrairement au REP, l'évolution des concentrations des différents nucléides du combustible est toujours suivie à l'échelle du cœur. On traite explicitement l'évolution des noyaux en résolvant les équations de Bateman à l'aide des sections efficaces microscopiques contenues dans la bibliothèque multiparamétrée. Une évolution « macroscopique », comme elle peut être effectuée dans le cas des REP, est, en effet, inadaptée compte tenu de la variation spatiale du spectre neutronique.

Cas des réacteurs à eau innovants

Les réacteurs à eau légère actuels (REP ou REB) sont optimisés pour une utilisation d'uranium faiblement enrichi en U 235 : il en résulte une utilisation limitée du potentiel énergétique des noyaux lourds du combustible, de l'ordre de quelques pourcent. Les études relatives aux réacteurs à eau innovants ont pour objectif d'améliorer l'utilisation de la matière en cœur en modifiant la conception neutronique du cœur (fig. 123). En augmentant l'énergie moyenne des neutrons (durcissement du **spectre***), on favorise la conversion de l'U 238 qui, par capture de neutron et radioactivité, se transforme en plutonium, ressource **fissile***. Cet objectif est atteint en réduisant le **rapport de modération*** (rapport du volume modérateur au volume du combustible) tout en augmentant la teneur en plutonium dans les crayons combustibles chargés en cœur et en introduisant des cibles **fertiles*** chargées en uranium appauvri (cœur hétérogène).

De telles modifications au niveau de la géométrie du cœur et du chargement combustible impliquent d'adapter le calcul neutronique :

• L'effet de durcissement du spectre ainsi que l'augmentation de la teneur en plutonium nécessitent une adaptation des modèles d'**autoprotection*** des sections efficaces multigroupes dans les codes de transport réseau : la prise en considération des recouvrements des **résonances*** des différents noyaux lourds du combustible devient indispensable ;

• l'évaluation fine de l'**effet de vidange*** du caloporteur, qui est un paramètre fondamental de la sûreté du réacteur, nécessite la maîtrise des incertitudes sur les données nucléaires dans le domaine des hautes énergies ;

• compte tenu des chargements hétérogènes envisagés en cœur (mélange d'assemblages fissiles chargés en plutonium et d'assemblages fertiles chargés en uranium appauvri), l'hypothèse du calcul de l'assemblage en milieu infini habituellement retenue dans les codes de réseau est moins licite. Ainsi, une meilleure prise en considération des effets d'inter-

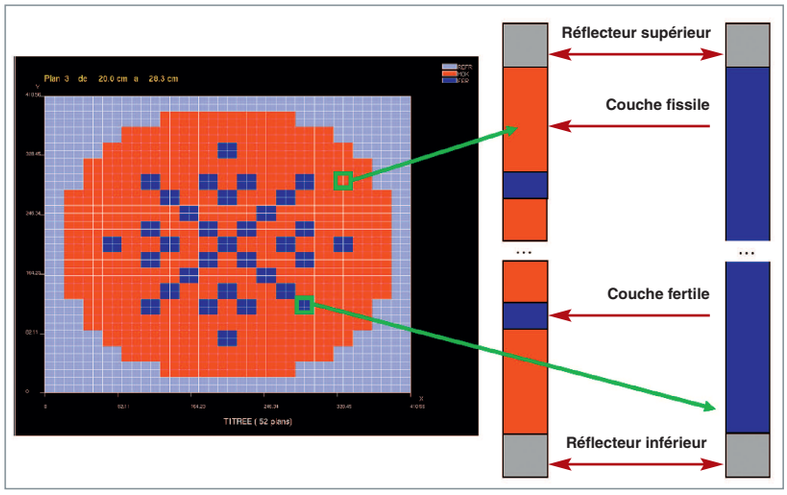


Fig. 123. Double hétérogénéité des cœurs de réacteur à eau légère sous-modérés.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 205

face entre les différents assemblages combustibles nécessite des calculs sur des motifs d'assemblages (motif 3 x 3 par exemple) ;

- un ajustement est également nécessaire pour le calcul à l'échelle du cœur du réacteur : augmentation / adaptation du nombre de **groupes*** en énergie, modèle de calcul en **évolution*** permettant de prendre en considération tout ou partie des noyaux lourds (modèle d'évolution « fine »)…

Du REP aux réacteurs expérimentaux : OSIRIS et RJH

À côté des réacteurs électrogènes, des réacteurs de recherche sont nécessaires, entre autres pour l'étude de la structure de la matière, pour l'étude de matériaux sous irradiation et pour la production de radio-isotopes médicaux. Ces réacteurs de faible puissance par comparaison avec les réacteurs électrogènes sont conçus pour produire un flux neutronique élevé.

Dans les petits cœurs des réacteurs de recherche comme **OSIRIS*** ou le **réacteur Jules Horowitz***, l'hypothèse du réseau infini pour le calcul des constantes d'assemblages est plus critiquable que dans les grands cœurs, et les fuites sont nettement plus élevées. Des transitoires de spectre importants se développent, qui conduisent à utiliser, au niveau du calcul de cœur, des maillages en espace et en énergie sensiblement plus fins.

Les cœurs des réacteurs de recherche se distinguent également des grands cœurs électrogènes par la structure de leurs assemblages combustibles ; il s'agit, en effet, le plus souvent, de faisceaux de plaques – planes dans le cas d'OSIRIS, cintrées dans le cas du RJH – qui imposent, pour le calcul d'assemblage, l'utilisation systématique de méthodes de calcul de flux à deux dimensions. De même, les réflecteurs sont généralement d'une structure plus complexe.

Une difficulté supplémentaire, qui se retrouve également dans le cas des réacteurs à eau lourde, est l'hétérogénéité très marquée du cœur : les éléments de contrôle de la réactivité sont dans OSIRIS complètement séparés des éléments combustibles, et sont de dimensions comparables à celles de ces derniers ; de plus, des dispositifs expérimentaux remplacent des assemblages combustibles dans le cœur ; cette configuration conduit, pour modéliser ces réacteurs, à un schéma de calcul particulier.

Les dispositifs expérimentaux présents dans le cœur ont un effet sur la réactivité et la distribution de puissance du cœur, qu'il est important de prendre en compte pour l'exploitation du réacteur.

Néanmoins, à cette hétérogénéité très prononcée du cœur sont associées de faibles **contre-réactions*** (les températures des différents milieux sont spatialement uniformes). Cela conduit à une simplification puisque les bibliothèques destinées au calcul du cœur ne sont plus multiparamétrées et peuvent être créées directement à l'issue du calcul d'évolution.

Le cas du réacteur OSIRIS

ANUBIS, le schéma de calcul développé par le CEA pour l'exploitation du réacteur OSIRIS, est un schéma dérivé du schéma classique en deux étapes mis en œuvre pour les REP.

Calcul d'assemblage

Ils sont réalisés, pour les différents types d'assemblages présents dans le cœur, selon un schéma à deux niveaux qui réalise un bon compromis précision/temps de calcul :

- Le calcul d'autoprotection des résonances est effectué à 172 groupes d'énergie sur un modèle géométrique très simple représentant une traverse à une dimension de l'assemblage considéré ; il s'agit donc d'une succession de plaques infinies représentant les différents milieux rencontrés sur cette traverse. À l'issue de ce calcul, réalisé par la méthode des probabilités de collision (P_{ij}), les sections efficaces des différents milieux (combustible, gaine, structures) sont condensées à vingt groupes d'énergie.

- le calcul en évolution du flux dans l'assemblage est fait par la **méthode S_N*** sur un modèle géométrique détaillé à deux dimensions, à vingt groupes d'énergie, avec reprise des calculs d'autoprotection. Pour le calcul de l'assemblage de contrôle et de l'assemblage portant les dispositifs expérimentaux, qui ne contiennent pas de combustible, le modèle géométrique est constitué de l'assemblage à calculer entouré de huit assemblages combustibles constituant une source de neutrons.

À l'issue de ces calculs, une bibliothèque paramétrée uniquement par le taux de combustion est créée pour un petit nombre de milieux (de un à quatre selon le type d'assemblage) dans un maillage en énergie à six groupes.

Calcul de cœur

Le modèle géométrique 3D du cœur est un « conteneur » constitué du caisson et des structures externes associées (réflecteur radial et axial, « mur » de béryllium, etc.). Ce conteneur est rempli avec 49 assemblages de différents types, conformément au plan de chargement du réacteur. Les modèles géométriques de ces assemblages comportent chacun quelques dizaines de mailles homogènes dans le plan x-y (combustible homogénéisé avec sa gaine et le modérateur associé, structures latérales). Axialement, le cœur est découpé en un peu moins de 100 mailles.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 206

Le calcul du flux est effectué en résolvant l'équation de la diffusion ou l'équation du transport simplifié à six groupes d'énergie par une méthode aux éléments finis mixtes.

L'évolution du combustible est traitée comme dans le cas des REP ; les seuls noyaux traités individuellement sont le xénon, le samarium et le bore.

Une des difficultés de ce calcul est liée à la structure particulière des éléments de contrôle : ils sont, en effet, prolongés par un élément combustible, dont l'évolution sous flux s'interrompt lorsque l'introduction de l'élément de contrôle dans le cœur provoque sa sortie du cœur ; l'évolution reprend lorsque la barre est extraite, ramenant l'élément combustible « suiveur » dans le cœur.

Ce calcul donne directement les grandeurs d'intérêt, à l'exception de la distribution fine de puissance (4 zones par plaque combustible) qui est « reconstruite » à partir de deux éléments :

- La distribution fine (plaque par plaque) de la puissance dans un assemblage en réseau infini, obtenue lors du calcul d'assemblage ;

- la distribution de puissance dans l'assemblage homogène, elle-même issue du calcul de cœur, qui fournit l'information de gradient de puissance dans l'assemblage en cœur.

Le cas du réacteur Jules Horowitz (RJH)

OSIRIS et le RJH se distinguent essentiellement par la forme de l'élément combustible, la structure des éléments de contrôle de la réactivité, et la disposition des éléments combustibles dans le cœur.

Les éléments combustibles du RJH sont constitués de vingt-quatre plaques cintrées formant huit cylindres concentriques, avec au centre un canal pouvant accueillir une barre de contrôle, un dispositif expérimental ou un barreau inerte d'aluminium (fig. 124). Cette configuration confère au cœur du RJH un caractère moins hétérogène que celui d'OSIRIS. Ensuite, le réseau constitué par les trente-sept emplacements disponibles dans le cœur (dont trente-quatre sont occupés par des assemblages combustibles) n'est pas régulier, caractéristique qui a nécessité l'emploi dans le code CRONOS2 d'un solveur adapté aux géométries à trois dimensions non régulières.
Le schéma de calcul HORUS 3D développé pour le calcul à trois dimensions du RJH est un schéma classique en deux étapes. Il faut noter l'existence d'un schéma de calcul à deux dimensions en une étape consistant en un calcul par APOLLO2 d'une coupe horizontale de l'ensemble du réacteur, utilisant la méthode des caractéristiques ; ce même schéma est également utilisé pour la détermination des constantes neutroniques du réflecteur radial.

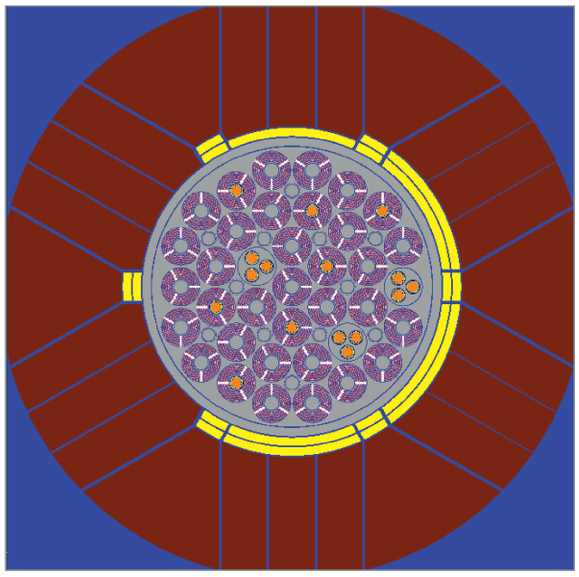


Fig. 124. Schéma du cœur du réacteur Jules Horowitz.

Calcul d'assemblage

Le calcul du flux en évolution dans les différents types d'assemblages (avec barre de contrôle, avec mandrin aluminium, avec dispositif expérimental) est effectué dans la géométrie réelle, en réseau infini, par la méthode des probabilités de collision, à 172 groupes d'énergie.

Les éléments sans combustible, constitués d'un groupement de trois dispositifs expérimentaux, subissent un traitement particulier : ils sont modélisés avec un environnement homogène représentatif des assemblages combustibles qui les entourent.

À l'issue de ces calculs, les assemblages sont entièrement homogénéisés et une bibliothèque de sections efficaces à six groupes d'énergie, paramétrée en fonction du taux de combustion, est constituée pour chaque type d'assemblage. La bibliothèque relative à l'assemblage avec barre de contrôle est ajustée par une procédure d'équivalence transport-diffusion.

Calcul de cœur du réacteur Jules Horowitz

Comme c'est le cas pour OSIRIS, le calcul du flux est effectué en résolvant l'équation de la diffusion ou l'équation du transport simplifié à six groupes d'énergie ; la seule particularité de ce calcul réside dans l'utilisation, avec le code CRONOS2, d'éléments finis particuliers, créés spécifiquement pour permettre le calcul de ce type de cœur irrégulier. Ces éléments finis ont également été mis en œuvre pour le calcul des réacteurs à haute température (voir section suivante). Avec ces éléments finis, le cœur, le caisson et le réflecteur sont décrits par des macro-hexagones contenant, selon leur position, un nombre variable d'assemblages et de dispositifs expérimentaux ; chaque élément combustible est décrit par un dodécagone. L'ensemble est maillé en triangles (fig 125). La gestion

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 207

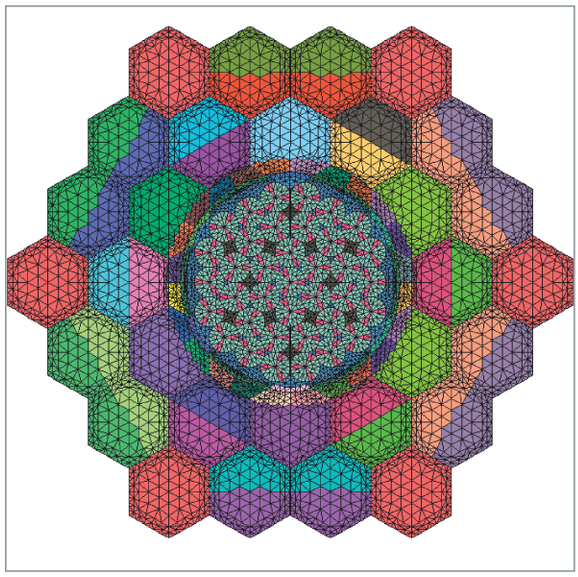


Fig. 125. Maillage du cœur du réacteur Jules Horowitz, avec son caisson entouré de son réflecteur.

complexe de ces objets est rendue transparente à l'utilisateur final par une interface spécifique. Axialement, le cœur est découpé en un peu moins de quarante mailles.

Du REP aux réacteurs à haute température (RHT)

Les réacteurs à haute température (RHT) sont des réacteurs refroidis au gaz, qui sont actuellement étudiés dans le cadre du forum Génération IV. Leur intérêt réside principalement dans leur haut rendement de conversion d'électricité et dans leur sûreté intrinsèque (voir la monographie M1 « Les réacteurs à caloporteur gaz).

La spécificité la plus marquante des RHT est la double hétérogénéité de leur élément combustible (fig. 126). En effet, dans un RHT (concept à blocs prismatiques), l'élément combustible (le compact) contient de l'oxyde d'uranium sous forme de micro-particules enrobées qui sont agglomérées dans une matrice de graphite. Les proportions volumiques sont variables d'un concept à l'autre, mais un compact contient généralement beaucoup moins de 40 % en volume de particules.

D'autres spécificités méritent d'être citées :

- L'utilisation de graphite comme matériau modérateur, qui est moins efficace que l'hydrogène pour ralentir les neutrons, et la faible densité de puissance des cœurs conduisent à des cœurs de grande taille ;

- la présence dans les assemblages de canaux de grandes dimensions pour l'insertion des barres de contrôle qui constituent des couloirs de fuite privilégiés pour les neutrons.

Par ailleurs, l'émergence du concept de sûreté passive appliquée aux RHT a conduit à une conception annulaire du cœur destinée à favoriser l'évacuation de la puissance résiduelle en cas de perte totale de réfrigérant (LOFC, *Loss Of Forced Convection*). Ces cœurs de géométrie annulaire sont caractérisés par une zone combustible de faible épaisseur (environ 1m) dont le comportement neutronique est fortement influencé par les réflecteurs interne et externe en graphite : on observe de très grandes variations du spectre neutronique entre la « face » interne et la « face » externe du cœur. Le RHT présente également la particularité de comporter des éléments de contrôle dans les réflecteurs.

La conjugaison de la double hétérogénéité, des gradients de spectre importants dans le cœur et de la disposition des éléments de contrôle (dans les réflecteurs), rend complexe le traitement de ces cœurs avec un schéma traditionnel à deux étapes appliqué couramment aux autres filières de réacteurs. Toutefois, cette structure a pu être conservée au prix de travaux de développement dans les codes et d'adaptations du schéma de calcul.

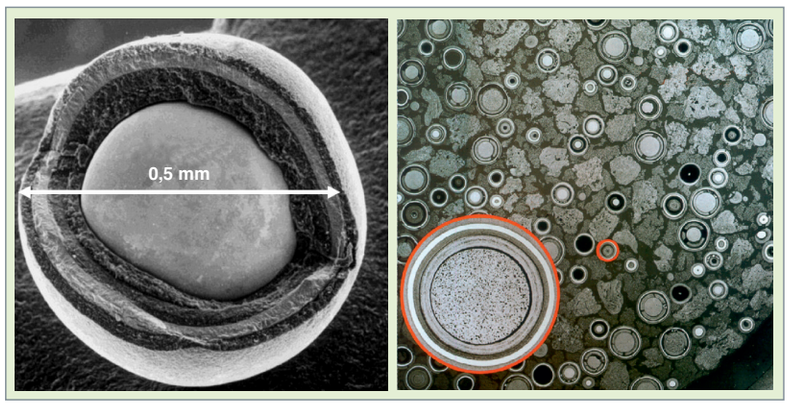


Fig. 126. Une particule « TRISO » de combustible pour réacteur à haute température et la coupe d'un élément combustible de RHT.

Calcul d'assemblage

Le calcul du flux en évolution dans les différents types d'assemblages (assemblage standard et assemblage de contrôle) est effectué par la méthode des probabilités de collision (en formalisme multicellule) ou par la méthode des caractéristiques et avec un découpage à 172 groupes d'énergie. L'effet de la double hétérogénéité est pris en compte explicitement par un formalisme *ad hoc*. Ce calcul est fait dans les conditions nominales de fonctionnement.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:27 Page 208

Comme dans le cas des REP ou des REB, les bibliothèques multiparamétrées destinées au calcul du cœur sont issues de plusieurs séries de calculs « de reprise » correspondant aux variations des différents paramètres : pour le RHT le taux de combustion, la température combustible, la température du graphite modérateur et la présence de la barre de contrôle sont pris en considération.

Ces calculs de reprise sont réalisés selon un schéma à double niveau : un premier niveau permet d'homogénéiser les compacts (matrice de graphite et particules enrobées) et d'en calculer les sections efficaces à huit groupes d'énergie, afin de limiter le temps de calcul du deuxième niveau ; dans le second niveau, à l'exception du compact homogénéisé, l'assemblage est décrit dans sa géométrie réelle, le cas échéant avec la barre de contrôle. Le flux est calculé par la méthode des caractéristiques, à huit groupes d'énergie ; il est utilisé pour homogénéiser l'assemblage en une ou plusieurs zones selon le modèle de cœur adopté, et pour créer les bibliothèques multiparamétrées. Les bibliothèques sont ajustées par une procédure d'équivalence transport-diffusion, et l'effet de *streaming* (fuites de neutrons) dans les canaux d'insertion des barres de contrôle est pris en compte par une correction du coefficient de diffusion.

Calcul de cœur

Comme dans le cas du RJH, le flux dans le cœur est calculé en théorie de la diffusion à huit groupes d'énergie. Une fonctionnalité du code CRONOS2 (méthode des moments) a été mise à profit pour ajouter un niveau d'hétérogénéité spatiale au sein de l'assemblage, et raffiner sa description géométrique, notamment pour prendre en compte l'excentrement de la barre de contrôle et la présence de **poisons consommables***. Chaque assemblage est découpé radialement en 50 à 100 mailles, et axialement en 70 à 100 mailles. CRONOS2 permet de « mélanger » des mailles triangulaires et quadrangulaires, réduisant le nombre de mailles nécessaire à la description géométrique du cœur (fig 127).

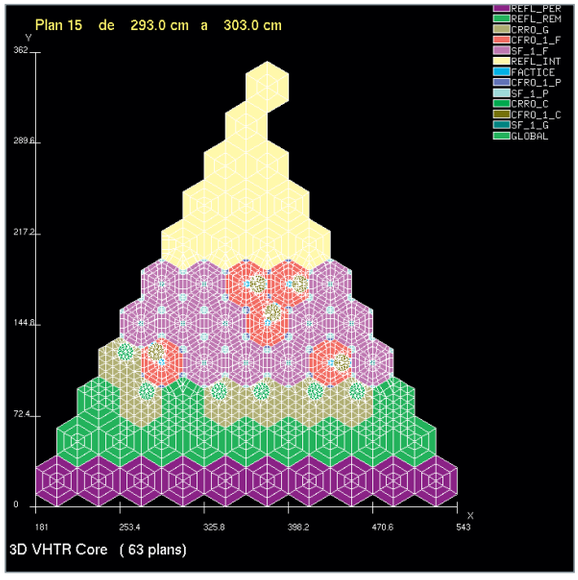


Fig. 127. Maillage à trois dimensions d'un cœur de réacteur à très haute température (RTHT).

L'évolution du cœur est traitée explicitement en résolvant les **équations de Bateman***, pour les même raisons que dans le cas des REB. Les **contre-réactions*** thermiques sont traitées par un couplage avec le code **CAST3M***, en différenciant six zones par assemblage.

Ce calcul fournit la cote d'insertion critique des barres de contrôle, et la distribution de puissance par maille.

Du RNR-Na au RNR-Gaz

Les réacteurs à neutrons rapides et à caloporteur gazeux (RNR-G), actuellement à l'étude dans le cadre du forum Génération IV, présentent des spécificités qui les distinguent de leurs cousins refroidis au sodium.

En premier lieu, ils permettent un cycle thermodynamique à plus haute température grâce à l'utilisation de matériaux réfractaires. Ces matériaux sont le plus souvent des céramiques contenant de grandes quantités de noyaux « légers » comme le carbone (par exemple : le carbure de silicium SiC) et sont utilisés à la fois comme matrices pour le combustible et comme constituants des matériaux de structure, en remplacement de l'acier. La maximisation souhaitée du taux de conversion interne conduit par ailleurs à adopter un combustible plus dense que l'oxyde (par exemple, du carbure), et à optimiser les réflecteurs autour du cœur (avec des matériaux tels que Zr_3Si_2 ou ZrC). Dans l'ensemble, cela conduit à un spectre neutronique plus dégradé que dans les réacteurs à caloporteur sodium, c'est-à-dire légèrement décalé vers les basses énergies (il n'y a cependant jamais assez d'éléments « légers » pour aboutir à une composante thermique significative). De plus, la distribution des neutrons en énergie est affectée par la présence de nouveaux éléments (C, Si, Zr, He…) et l'absence d'autres (O, Na, Fe, Cr, Ni…). La prise en compte d'un découpage multigroupe fin (1 968 groupes) permet de bien prendre en compte ces effets spectraux dans le calcul d'assemblage.

En second lieu, et c'est ce qui impacte le plus la chaîne de calcul au niveau du calcul d'assemblage, le dessin de l'assemblage combustible peut différer significativement de celui utilisé pour les réacteurs à caloporteur sodium, avec par exemple des assemblages à plaques comme illustré dans la figure 128. Cette géométrie particulière a nécessité l'adaptation de la méthode des **probabilités de collision*** usuelle pour le calcul neutronique de l'assemblage. Par ailleurs, le gaz étant un caloporteur peu efficace, sa fraction volumique est plus éle-

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 209

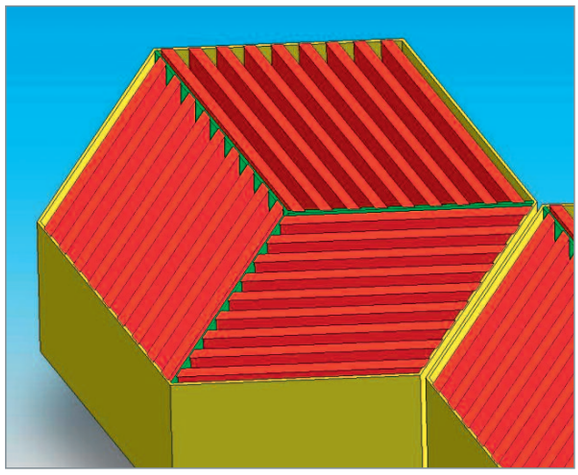


Fig. 128. L'élément combustible d'un réacteur rapide à caloporteur gaz.

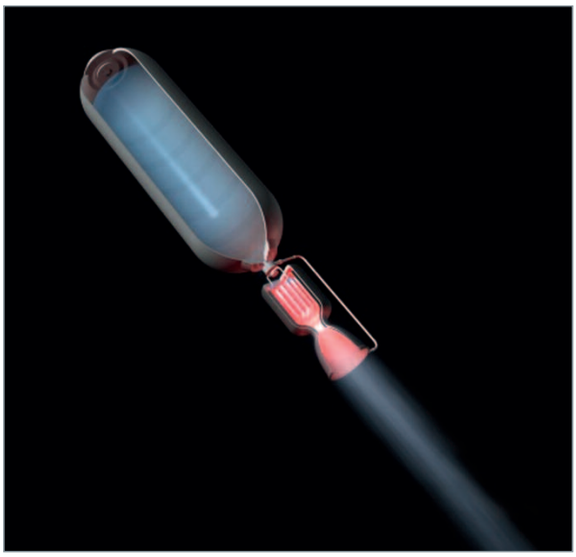


Fig. 129. Propulsion spatiale thermique.

vée que ne serait celle du sodium (40 à 65 % au lieu de 35 % environ), ce qui peut induire des effets d'hétérogénéité et des directions de fuite préférentielles pour les neutrons *(streaming)*. Il est donc nécessaire de prendre en compte ces effets directionnels au niveau du calcul d'assemblage. Le modèle de calcul de cœur et d'évolution des compositions isotopiques reste inchangé.

Le réacteur nucléaire spatial

Par leur polyvalence (puissance importante sous des poids faibles, durée de fonctionnement potentiellement longue), les réacteurs nucléaires constituent une source d'énergie intéressante pour les missions spatiales.

Utilisations possibles d'un réacteur nucléaire spatial

Deux types principaux d'utilisation des réacteurs nucléaires sont envisageables dans l'espace : la production d'électricité et la propulsion. L'une et l'autre imposent des contraintes particulières en termes de neutronique.

La production d'électricité

La première application est la production d'électricité. Le réacteur nucléaire est alors utilisé de manière classique comme un générateur électrique, que ce soit pour alimenter une base planétaire ou bien subvenir aux besoins en électricité d'une sonde ou d'un vaisseau d'exploration. Il peut également être couplé à des propulseurs ioniques, gros consommateurs de puissance électrique : il s'agit alors de *propulsion nucléaire électrique, utilisable pendant de longues durées (des années) avec des poussées modérées (des centaines de millinewton) pour propulser une sonde qui s'est déjà libérée de l'attraction terrestre*. Cette application ne nécessite pas des réacteurs nucléaires fonctionnant à très haute température (typiquement 1 300 K).

La propulsion nucléaire thermique

La deuxième application est la propulsion nucléaire thermique (ou nucléothermique), qui produit des poussées importantes (des tonnes) pendant des temps courts (de l'ordre de la minute), pour se libérer de l'attraction terrestre. Elle utilise la voie classique thermodynamique du chauffage de la matière à éjecter. La figure 129 illustre ce principe. La chaleur créée au sein du réacteur nucléaire constitue la source primaire d'énergie. Un courant d'hydrogène pur y est réchauffé à une température élevée (2 500 K à 3 000 K) avant d'être détendu au travers d'une tuyère appropriée. Cette technique, au demeurant simple et proche de la propulsion chimique classique, permet d'atteindre des vitesses d'éjection deux fois plus importantes.

Dimensionnement neutronique

Les règles et les contraintes de dimensionnement de ces réacteurs, nécessairement petits puisqu'ils doivent être embarqués, sont très particulières. En effet, l'optimisation d'un réacteur nucléaire terrestre s'appuie sur la recherche d'un réacteur **critique*** ayant une durée de **cycle d'irradiation*** suffisante tout en minimisant l'investissement en matière **fissile***. Dans le contexte spatial, ces objectifs changent. L'investissement en matière fissile et la bonne utilisation de celle-ci ne sont plus des critères prioritaires, puisque la quantité totale mise en œuvre est faible, et que ces réacteurs ne concernent que quelques projets spatiaux. Les points clés du dimensionnement d'un réacteur nucléaire destiné à des applications spatiales sont, par ordre de priorité, les suivants :

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 210

- La minimisation de la **masse** ;

- une **durée de fonctionnement importante**, comprise habituellement entre 7 et 10 ans pour la production d'électricité ;

- la recherche d'une **température importante de fonctionnement en sortie du cœur** que ce soit pour la propulsion *nucléothermique* ou bien pour la production d'électricité. L'objectif est d'obtenir un rendement de conversion raisonnable mais aussi et surtout de réduire la surface du radiateur rayonnant, seule source froide possible dans l'espace. Dans le cas de la propulsion nucléothermique, les très hautes températures et la forte densité de puissance ne sont nécessaires que pendant une durée de fonctionnement relativement courte.

De plus, l'utilisation d'un **combustible uranium** est imposée par les objectifs de sûreté liés à l'emploi de source nucléaire dans l'espace.

Conception

La contrainte de la minimisation de la masse

L'utilisation d'un réacteur nucléaire dans l'espace conduit à un argumentaire très différent de celui du réacteur terrestre. Le choix du spectre de neutrons a une grande influence sur la masse du réacteur embarqué. D'un côté, on peut utiliser un cœur de réacteur à **neutrons thermiques***, qui favorise la fission de l'U 235 (probabilité d'interaction neutron-noyau plus grande à faible énergie incidente du neutron) mais nécessite l'ajout de matériaux **modérateurs***. D'un autre côté, on peut utiliser un réacteur à **neutrons rapides*** ne comprenant que la matière fissile et les matériaux de structure mais la faible **section efficace*** de fission dans le spectre rapide tendra alors à augmenter la taille critique du cœur.

Avec l'utilisation de bons modérateurs tels que des matériaux hydrogénés comme le Zr_xH_y ou Li_xH_y, la taille critique d'un cœur à uranium très enrichi et bien **thermalisé*** est plus petite que celle d'un cœur fonctionnant dans le domaine des neutrons rapides, ce qui conduit à un réacteur plus léger.

Ceci est illustré sur les figures suivantes qui prennent pour exemple le cas d'études paramétriques menées sur un combustible oxyde, modéré avec du ZrH et utilisant le NaK comme **caloporteur***. À chaque **rapport de modération*** correspond un **spectre de neutrons*** différent, comme indiqué sur la figure 130. Sur la figure 131, les masses critiques de cœurs nus, ou munis d'un **réflecteur*** de béryllium, font clairement apparaître un minimum pour des rapports de modération situés autour de 7.

Le choix d'un spectre de neutrons thermiques représente la meilleure solution du point de vue de la minimisation de la masse du réacteur. Cependant, d'autres contraintes doivent être prises en compte :

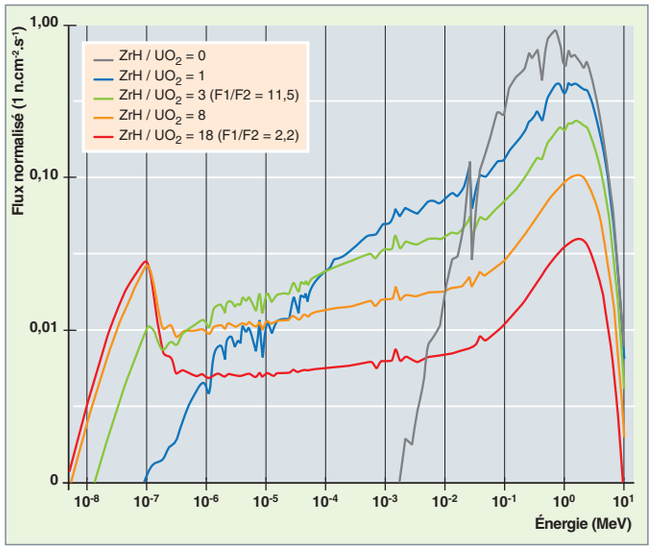


Fig. 130. Flux neutronique pour différents rapports de modération du cœur par l'hydrure de zirconium.

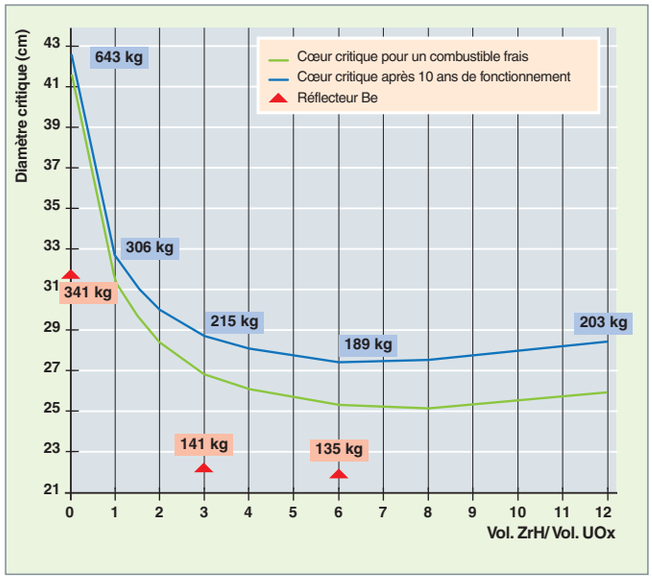


Fig. 131. Exemple d'évolution de la masse d'un réacteur nucléaire spatial en fonction du choix de son rapport de modération et de son spectre neutronique. Les courbes verte et bleue correspondent à un cœur nu ; les triangles pleins correspondent à un cœur avec réflecteur en béryllium.

La contrainte de la température

Pour les réacteurs de propulsion nucléothermique, dont le cœur doit fonctionner à haute température, les conclusions quant au spectre de neutrons à choisir peuvent s'avérer différentes. En effet, la gamme d'utilisation en température des modérateurs performants (bons ralentisseurs comme les matériaux hydrogénés) est souvent peu étendue et rend plus complexe la conception d'un cœur à haute température et à forte densité de puissance. Le dimensionnement conduit alors

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 211

à des choix technologiques différents s'appuyant sur l'utilisation de matériaux réfractaires – base graphite ou autre – souvent assez mauvais modérateurs. La tendance précédente est alors inversée. Dans ce cas, le choix d'un spectre rapide est privilégié afin de minimiser la masse du réacteur. Le recours à des neutrons thermiques avec ce type de modérateur conduirait, en effet, à des tailles de cœur rédhibitoires.

La contrainte de la durée d'utilisation

Une des spécificités du réacteur spatial producteur d'électricité est sa durée d'utilisation. La configuration critique du réacteur doit être maintenue sur une durée de fonctionnement longue : en général, de l'ordre de 7 à 10 ans, avec une demande en puissance variant entre 20 et 100 % selon les phases de la mission.

Dans ces conditions, le cœur rapide permettra une meilleure maîtrise de l'évolution de la **réactivité*** du fait de son important inventaire initial en matière fissile, souvent bien supérieur à 100 kg d'U 235 contre une quinzaine de kilos dans un réacteur à neutrons thermiques. La perte en réactivité due à l'usure du combustible est moins problématique. Les **taux de combustion*** atteints (énergie spécifique en MWj/t ou en % d'atomes fissionnés) sont également faibles. Par contre, les dommages subis par les matériaux, proportionnels au flux de neutrons de forte énergie (En > 1 MeV) accumulés dans le temps ***(fluence*)***, sont plus importants dans le cas du réacteur à neutrons rapides.

Synthèse

Les avantages et inconvénients des deux spectres de neutrons possibles dans les petits réacteurs spatiaux sont résumés dans le tableau 25 suivant.

Tableau 25

Problématique du choix du spectre de neutrons (thermiques ou rapides) en termes de contraintes technologiques

+ pour favorable – pour défavorable

Type de cœur	rapide	thermalisé
Taille critique et masse du système	– –	+ +
Taux de combustion du combustible	+ +	– –
Contrôle de la réactivité	+ +	– –
Distribution de puissance	+ +	– –
Tenue des matériaux sous irradiation (dpa, gonflement…)	– –	+ +
Gestion des hautes températures	+ +	– –

Jusqu'à 100 kWe, la compétition entre les spectres de neutrons rapides et thermiques résulte d'une optimisation intégrant l'ensemble des paramètres du système. La petite taille du réacteur thermique sera limitée par le taux de combustion maximum acceptable pour le combustible, par un contrôle plus délicat de la réactivité dans le cœur en début de vie mais aussi par des pics de puissance plus prononcés. En revanche, la masse plus importante du cœur rapide pourra être compensée par des températures de fonctionnement plus élevées (taille du radiateur réduite) et un bouclier de protection moins épais favorisé par un niveau de flux plus faible dans ce réacteur de taille critique plus importante.

Si le choix du spectre de neutrons n'est pas trivial pour des réacteurs de petite puissance, les contraintes d'exploitation dans l'espace conduisent à des réacteurs à neutrons rapides lorsque l'on souhaite atteindre des puissances de l'ordre du MWe. Pour cette gamme de puissance le concepteur est donc amené à **dimensionner*** un réacteur à neutrons rapides associé à un combustible uranium. Ceci en fait une particularité du nucléaire spatial puisque, dans les applications terrestres, le réacteur rapide est plutôt envisagé avec un combustible au plutonium ouvrant ainsi la voie à la surgénération.

Simulation neutronique

Le contrôle du réacteur

De petite taille, les réacteurs nucléaires spatiaux sont bien souvent contrôlés par les **fuites*** de neutrons. En effet, le bilan neutronique fait apparaître un taux de fuites de neutrons supérieur à 50 % des neutrons produits dans le cœur. L'approche classique consiste donc à utiliser des volets ou des cylindres avec des secteurs **absorbants***, placés dans le réflecteur (voir fig. 132, page suivante) en guise de moyens de contrôle de la réactivité.

Cependant, une des difficultés de conception des réacteurs nucléaires spatiaux réside également dans le fait que souvent leur cœur n'est pas dans sa configuration la plus réactive. En cas d'échec au lancement, certaines précautions doivent être prises afin d'éviter tout risque de **divergence*** incontrôlée par entrée d'eau dans le cœur du réacteur. L'analyse de la situation « noyée » conduit souvent à envisager l'utilisation d'absorbants additionnels disposés soit dans le cœur sous forme de **poison consommable*** ou de petites **barres de contrôle*** qui ne servent qu'une fois, soit, par exemple, en tapissant la cuve du réacteur par un dépôt de carbure de bore B_4C.

La modélisation du réacteur nucléaire spatial

Le réacteur nucléaire spatial, de petite taille et très hétérogène, se prête assez mal à une simulation simplifiée de l'équation de transport sous l'approximation de la diffusion. Par conséquent, les dimensionnements neutroniques doivent au moins être issus de calculs de transport 2D fins sur une description radiale du cœur (fig. 133, page suivante). L'estimation des fuites axiales de neutrons est, quant à elle, déduite de calculs de transport sur une représentation axisymétrique RZ du cœur. Cette première approche donne accès à l'estimation de la réactivité (le k_{eff} du cœur) ainsi qu'à d'autres paramètres neutroniques tels que les **coefficients de température***, les pics de puissance, le poids du système de contrôle… Elle permet également de prédire l'évolution de la réactivité et donc la durée de vie potentielle du réacteur.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 212

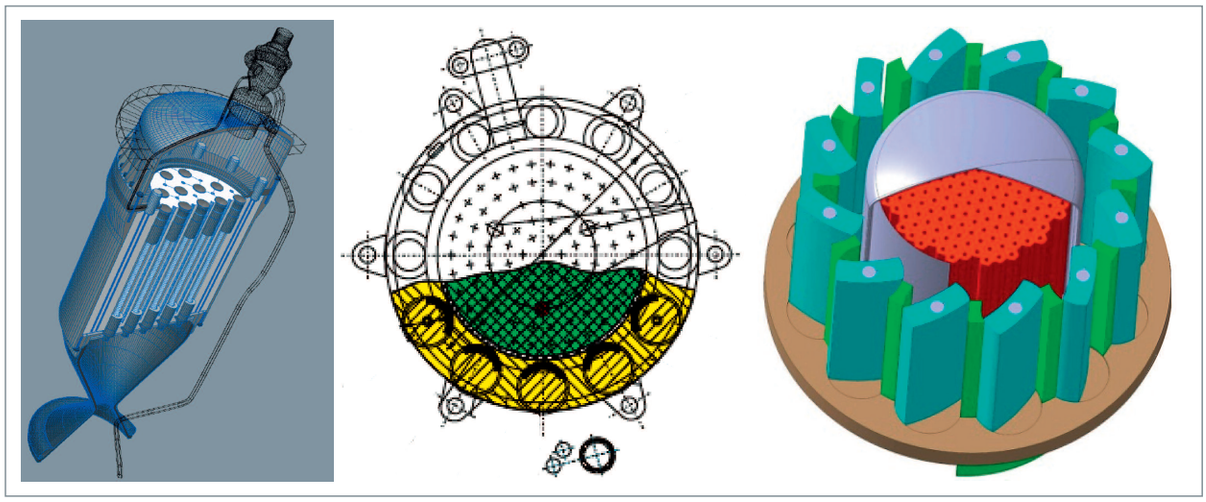


Fig. 132. Exemple de systèmes de contrôle par les fuites dans les réacteurs nucléaires spatiaux : études de propulsion nucléothermique MAPS (CEA/CNES), réacteur TOPAZ (ex-URSS) et réacteurs OPUS (CEA).

Une approche alternative mais aussi complémentaire consiste à faire appel directement à des simulations 3D utilisant les méthodes de Monte-Carlo. La petite taille des géométries et les **aires de migration*** observées dans ces cœurs se prêtent, en effet, assez bien à ce genre de modélisation sans atteindre des temps de calculs rédhibitoires. Il est important de noter que ces calculs considérés comme des références peuvent servir à valider les approches déterministes. En effet, la base de qualification expérimentale est assez restreinte et peu documentée. Elle date soit des expériences américaines NERVA (59-72) soit des expérimentations réalisées en ex-URSS, parmi lesquelles certaines restent accessibles aujourd'hui à travers des collaborations entre le CEA et l'Institut Kurchatov par exemple. La figure 134 montre l'expérience russe NARCISSE qui permettra de valider les outils et les méthodes utilisés pour prédire le comportement neutronique des réacteurs nucléaires spatiaux.

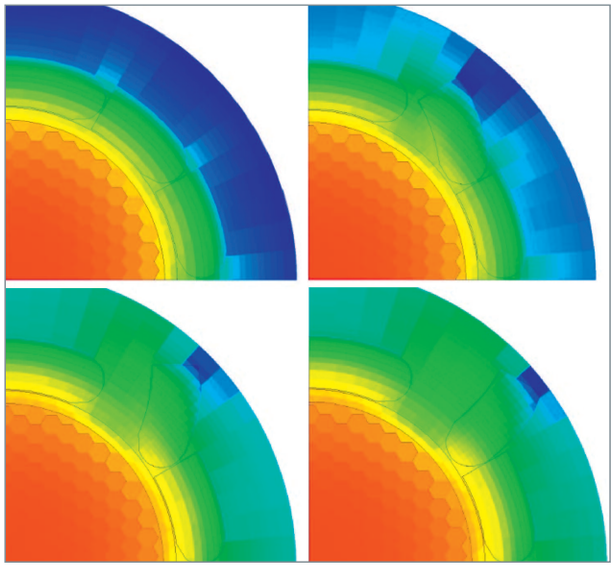


Fig. 133. Distribution du flux neutronique dans le réacteur rapide OPUS calculée avec le code neutronique APOLLO2 pour une ouverture progressive d'une commande (0, 30, 60, 90 °).

Exemple de caractéristiques réacteurs d'un générateur électrique de la gamme 100-500 kWe

Les études OPUS menées au CEA dans le cadre d'activité de veille viennent compléter le programme d'études ERATO réa-

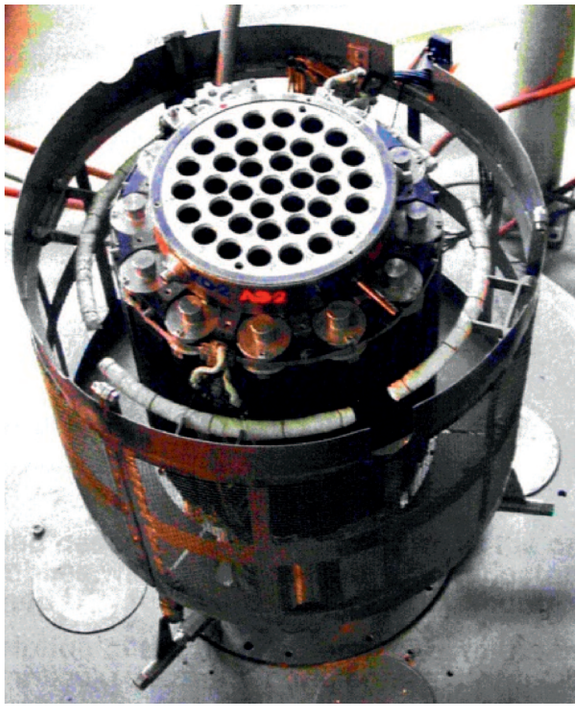


Fig. 134. Vue de l'expérience critique NARCISSE réalisée au Kurchatov Institute.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 213

lisés dans les années 80 sur les générateurs électriques. Alors que le réacteur ERATO a permis d'explorer les potentialités d'un réacteur rapide refroidi au métal liquide (Na, puis Li pour une solution plus innovante), le réacteur OPUS s'appuie sur la filière du réacteur rapide à gaz et rend possible des synergies avec les efforts de R&D des réacteurs terrestres de IVe génération.

La démarche adoptée pour dimensionner le réacteur d'OPUS tient compte d'une gamme de puissance et d'une durée d'utilisation variables. L'idée est de conserver un seul dessin de réacteur pour l'ensemble des cas envisageables. Le réacteur ainsi défini est évolutif et peut répondre à la fois aux missions de petites puissances et courtes durées et à celles de plus grande envergure nécessitant des puissances de l'ordre de 500 kWe sur des périodes de 7 à 10 ans. On aboutit aux paramètres du cœur rassemblés dans le tableau 26 où seules les dernières valeurs dépendent du niveau de puissance et de la durée de vie requis.

Tableau 26

Paramètres du cœur du réacteur nucléaire spatial OPUS conçu au CEA.	
Rayon/hauteur du cœur	24 cm / 48 cm
Masse/volume du cœur	300 kg / 87 l
Masse du réacteur	690 kg
Réactivité du cœur k_{eff} (début de vie)	1,073
Section de passage du fluide	10 % (180 cm^2)
Aire de migration neutronique (M2)	130 cm^2
Effet Doppler*	- 0,02 pcm/K
Effet de dilatation	- 0,6 pcm/K
Efficacité des volets de contrôle	11 300 pcm
Efficacité maximum de 3 volets	4 500 pcm
Flux moyen dans le combustible	$1{,}8.10^{13}$ $n.cm^{-2}.s^{-1}$
Fluence rapide maximum sur la particule combustible	$7{,}7\ 10^{20}$ $n.cm^{-2}$ (E_n > 1MeV)
Puissance spécifique moyenne	4,6 W/cm^3
Taux de combustion moyen	~ 0,5 % at.

Il est intéressant de noter que l'excès de réactivité indique qu'un gain peut être obtenu sur la masse du cœur par réduction de son rayon critique et optimisation de la réactivité nécessaire aux missions de petites puissances. Cependant la masse du réacteur ne représente qu'environ un tiers de la masse globale du système de production d'électricité et le remontage d'ensemble montre que ce gain est en partie compensé par l'augmentation de la masse de la protection radiologique.

Les réacteurs nucléaires de fission n'ont pas encore eu d'application spatiale, seules des sources radioactives ayant jusqu'ici été embarquées. Cependant, leur polyvalence leur donne une chance pour le futur, en particulier pour les prochaines missions de longue durée vers Mars.

Michel Soldevila, Xavier Raepsaet
Département de modélisation des systèmes et des structures
et Jean Tommasi
Département d'étude des réacteurs

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 214

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 215

La neutronique couplée aux autres disciplines

La nécessité d'un couplage

Dans les réacteurs à eau sous pression, le bilan neutronique dépend de la température du combustible et de la densité du caloporteur ; l'ensemble de ces données implique de résoudre par couplage les équations de **Boltzmann*** et de **Navier-Stokes*** ainsi que celles qui régissent le comportement du combustible.

Les études de neutronique couplées aux autres disciplines sont essentiellement utilisées pour la conception et la sûreté des systèmes nucléaires. La démonstration de sûreté impose de déterminer des marges vis-à-vis des conséquences induites par les séquences accidentelles les plus graves. Pour cela, il faut mettre en place des simulations neutroniques, thermiques et thermohydrauliques qui permettent de prendre en compte divers transitoires de fonctionnement normal et accidentel. En principe il faudrait mener de front l'analyse pour les trois disciplines car :

- Les **sections efficaces*** dépendent a minima de la température du combustible et de la densité du modérateur ;
- la thermique du combustible dépend de l'irradiation du combustible, de la puissance neutronique et de l'échange thermique avec le fluide **caloporteur*** (qui est également utilisé comme **modérateur*** dans les réacteurs à eau) ;
- la thermohydraulique du fluide dépend du terme source de puissance dégagée par convection (paroi des combustibles) et par rayonnement *gamma*.

Pour le fonctionnement normal du réacteur, le couplage neutronique/thermohydraulique est effectué via les sections efficaces qui sont réévaluées pour chaque maille spatiale et en fonction du changement des propriétés du combustible et du modérateur ; celles-ci sont en général évaluées via un modèle optimisé intégré dans le code de cœur.

Encore récemment, dans l'approche utilisée pour décrire les situations accidentelles dans les dossiers de sûreté, les trois disciplines étaient relativement découplées, c'est-à-dire que dans les calculs thermohydrauliques, on imposait des distributions de puissance dans les crayons calculées à chaque pas de temps. Les contre réactions de neutronique y étaient déterminées pas des calculs neutroniques 3D dans des situations stationnaires représentatives. Pour le calcul du transitoire, ces **contre-réactions*** de réactivité du cœur (combustible et modérateur) étaient prises en compte par des calculs neutroniques **cinétiques***, soit en considérant le cœur comme un point (modèle de cinétique ponctuelle) soit en considérant au mieux une approche 1D (modèle de cinétique 1D). L'inconvénient de cette approche réside dans le fait que pour être **conservatif*** on doit appliquer dans les études de sûreté des facteurs correctifs phénoménologiques pénalisants sur plusieurs grandeurs comme la distribution de puissance, les coefficients de réactivité…

Le développement des codes neutroniques permet aujourd'hui d'effectuer des simulations de transitoires de réactivité permettant d'obtenir des réponses cinétiques en 3D. Ces transitoires de réactivité ont pour origine des mouvements intempestifs de barres de contrôle, un refroidissement du circuit primaire ou des changements de conditions thermohydrauliques du modérateur et de concentration en bore. Les variations de puissance associées peuvent être globales ou locales et restreintes à quelques assemblages, voire quelques crayons. De plus, le niveau de puissance du cœur avant l'accident et son historique d'épuisement peuvent avoir de l'influence sur les résultats en transitoire. Classiquement, les codes neutroniques utilisent des tables de sections efficaces permettant de décrire les propriétés neutroniques des différents milieux constituant le cœur et ceci pour différents états : celles-ci sont calculées puis paramétrées en fonction des paramètres, tels que : le taux de combustion, la concentration en bore soluble (pour les REPs), la température combustible, la densité modérateur, le taux de vide pour les REBs… mais également des paramètres d'histoire (temps passé à différents taux de vide pour les REBs). En fonctionnement normal, la simulation neutronique fait en général appel à des modèles simplifiés de thermique combustible et thermohydraulique.

Actuellement, avec les récentes possibilités des ordinateurs, il est envisageable d'interconnecter les disciplines, donc de diminuer le conservatisme utilisé dans les approches découplées et d'obtenir les informations sur tous les points du réacteur. Dans les années 80 le CEA effectuait les premières études d'accident d'éjection de grappe à 3D avec couplage neutronique thermohydraulique. Aujourd'hui les industriels utilisent en routine de telles simulations, les progrès recherchés par les travaux en cours étant motivés par une amélioration de la modélisation du combustible. Pour les transitoires impliquant une modélisation de l'ensemble du réacteur (cœur et circuit comme la rupture d'un tuyauterie vapeur) le CEA a développé une modélisation fondée sur un système intégrant les codes **CRONOS**, **FLICA** et **CATHARE**.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 216

Couplages

Dans les réacteurs nucléaires, les phénomènes neutroniques (N), thermiques (T), hydrauliques (H) et mécaniques (M) sont intimement couplés.

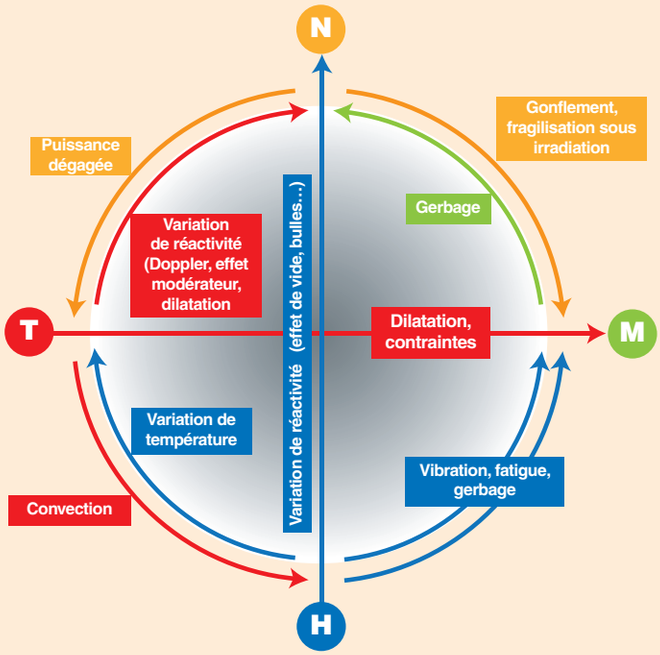


Fig. 135. Couplages entre phénomènes dans un cœur de réacteur nucléaire.

La neutronique est, bien sûr, couplée à la thermique, puisque ce sont les réactions nucléaires qui dégagent l'énergie dissipée sous forme de chaleur dans le cœur du réacteur. En retour, toute variation de la température du coeur change sa réactivité *via* l'effet Doppler, qui modifie les sections efficaces d'interaction neutron-noyau, et *via* la dilatation, qui modifie la densité des noyaux dans le cœur.

La thermique et l'hydraulique sont couplées si intimement qu'elles en sont indissociables (on parle de thermohydraulique). En effet, tout changement du régime de circulation du fluide caloporteur modifie le champ de température du cœur; réciproquement, si la température change, la circulation du fluide caloporteur en est affectée par le biais de la convection, et, le cas échéant, par les phénomènes de vaporisation du caloporteur en paroi.

L'hydraulique et la neutronique sont couplées elles aussi : le fluide caloporteur absorbe un peu les neutrons, et les ralentit (un peu dans le cas d'un réacteur rapide, beaucoup dans le cas d'un réacteur à eau). Si le caloporteur se vaporise ou fuit hors du réacteur (par exemple à cause d'une fuite accidentelle du circuit primaire), absorption et ralentissement des neutrons s'en trouvent modifiés, d'où une variation de la réactivité du cœur.

La structure mécanique du cœur est conçue pour maintenir de façon stable la répartition des éléments combustibles, absorbants et modérateurs du cœur, car cette répartition détermine la réactivité de ce dernier. Cependant, cette structure se déforme un peu : elle se dilate (couplage thermique-mécanique); elle gonfle sous irradiation (couplage neutronique-mécanique), et elle vibre car la circulation du caloporteur est turbulente (couplage hydro-mécanique). Tout cela peut induire une variation de réactivité. Par exemple, le « gerbage » des éléments combustibles sous l'effet d'une variation des contraintes qui maintiennent ensemble les faisceaux de combustible influe beaucoup sur le comportement neutronique du cœur.

Les calculs de grands cœurs de réacteurs thermiques associent systématiquement neutronique et thermohydraulique. Un défi très actuel de la R&D nucléaire consiste à traiter ensemble toutes les disciplines, et à prendre en compte les couplages au sein d'une même plate-forme de simulation.

Les principes du couplage neutronique / thermohydraulique

Il existe plusieurs solutions possibles pour le développement d'un modèle couplé. On peut en citer deux :

- Le couplage implicite, qui revient à traiter le système complet d'équations couplées ;
- le couplage explicite, qui résout séparément les systèmes d'équations de la neutronique et de la thermohydraulique, et qui gère le couplage par des échanges de données et un algorithme itératif de type point fixe en régime permanent.

L'avantage de la première solution est qu'elle est directe, donc ne nécessite pas d'échanges de données entre codes ni de traitements de données pour réaliser la correspondance entre deux systèmes d'équations résolus séparément. Par contre, l'inconvénient majeur de ce modèle est qu'il nécessite le développement d'un code de calcul à part entière en garantissant que l'on sait résoudre tout le système d'équations en même temps.

La deuxième solution, que l'on a adoptée, est plus simple à mettre en œuvre puisqu'elle ne nécessite pas de refonte fondamentale des codes de calculs existants. Il est alors nécessaire de mettre en place un ensemble de procédures et/ou de fonctions permettant le traitement des données et la gestion

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 217

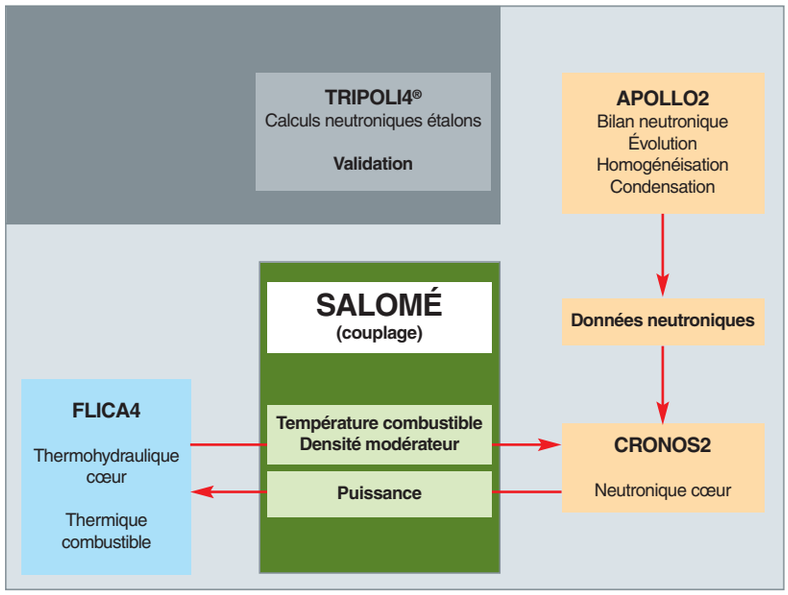


Fig. 136. Schématisation du couplage neutronique thermohydraulique.

des maillages de calcul. Cette solution nécessite des itérations externes entre les codes et impose de disposer d'un outil pour piloter les codes et gérer les échanges d'informations.

La figure 136 schématise un calcul de cœur mettant en œuvre, dans la **plate-forme SALOMÉ***, l'ensemble des codes de calcul neutronique APOLLO2 et CRONOS2 et le code de thermohydraulique FLICA-4 développés essentiellement pour les **REP*** et **REB***. Des détails sur les codes de neutronique sont donnés au *supra*, p. 125-142.

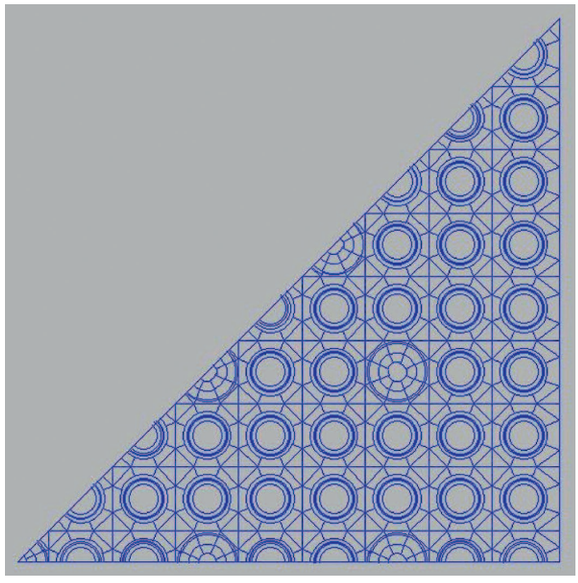


Fig. 137. Géométrie typique pour un calcul d'assemblage combustible avec APOLLO2.

Le calcul de cœur est réalisé en deux étapes principales.

La **première étape** consiste à calculer de façon aussi précise que possible un assemblage (en explicitant toutes ses caractéristiques géométriques et les matériaux qui le composent) à deux dimensions en résolvant l'équation du transport des neutrons et les équations traitant l'évolution du combustible par le code **APOLLO2***. La figure 137 présente une géométrie typique traitée avec le solveur utilisant la méthode des caractéristiques. Cette étape ne fait pas intervenir le couplage avec la thermohydraulique et les conditions aux limites imposées sont la réflexion sur toutes les faces de l'assemblage (assemblage représenté en « milieu infini »).

Dans un premier temps, par des calculs d'évolution, on obtient les **bilans matière*** sur l'assemblage. Dans un deuxième temps, les sections efficaces de l'assemblage et des crayons sont calculées en fonction des paramètres de l'état du cœur (burnup, historique de vide pour les REB, densité modérateur, température combustible, concentration en bore soluble…). Celles-ci sont obtenues à l'aide d'un ensemble de calculs dits de « reprises » dans lesquels on fait varier un par un les paramètres d'état du cœur. Un ensemble de plusieurs dizaines de milliers de calculs est effectué pour paramétrer les données nucléaires de l'assemblage.

Cette étape est validée par des calculs étalon réalisés à l'aide du code de Monte-Carlo **TRIPOLI4®***.

Dans la **seconde étape**, le calcul de cœur est effectué à trois dimensions au moyen des codes **CRONOS2*** et **FLICA4*** couplés via la plate-forme **SALOMÉ***.

Le code CRONOS2 résout l'équation de la diffusion ou du transport des neutrons à peu de groupes d'énergie sur une géométrie du cœur simplifiée en utilisant les sections efficaces déterminées lors de l'étape précédente (un jeu de sections efficaces par assemblage), avec les conditions aux limites réelles du cœur. Le code FLICA4 résout l'équation de la thermique combustible à une dimension et de l'écoulement du fluide diphasique par un modèle à quatre équations (conservation de la masse, bilan de quantité de mouvement et d'énergie du mélange eau-vapeur et bilan de masse pour la vapeur) en trois dimensions, pour le calcul des débits transverses inter-assemblages. Il reçoit la distribution de puissance calculée par CRONOS2 et détermine les variables thermohydrauliques qui vont être prises en compte dans le calcul des données neutroniques. Au terme d'au maximum une dizaine d'itérations, ce

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 218

processus permet d'obtenir, à un instant donné et pour des conditions de fonctionnement stationnaire, la distribution de puissance, le champ thermohydraulique et la réactivité du cœur. La plate-forme SALOMÉ est l'outil de couplage qui permet d'échanger les données et de piloter les codes CRONOS2 et FLICA4.

Des exemples de couplage

Couplages dans les Réacteurs à Eau Bouillante

Dans le REP, sur demande de puissance du réseau électrique, le système répond en ouvrant la vanne d'admission de la vapeur à la turbine : la vapeur afflue et la pression et la température de saturation baissent dans le secondaire du générateur de vapeur ; l'eau primaire retourne, un peu plus froide, vers l'entrée du cœur, ce qui augmente la réactivité, et l'on atteint naturellement le niveau de puissance demandé.

Sur une même demande faite au REB, la pression et la température de saturation baissent dans le réacteur ; le volume des bulles s'accroît, la réactivité baisse et, au lieu de répondre à la demande d'accroissement de puissance, le réacteur s'étouffe. Pour éviter l'étouffement, la demande de puissance supplémentaire par le réseau commande une accélération des pompes de circulation et/ou l'extraction des barres de commande. La soupape modératrice de la turbine est asservie pour maintenir la pression amont constante. Lorsque, suite à l'extraction des barres, la pression dans le réacteur monte, la soupape modératrice s'ouvre pour laisser passer plus de vapeur et ainsi tendre à maintenir la pression amont.

Pour contrôler la puissance du réacteur, la régulation peut agir sur :

• La position des **barres de commande*** ;

• le débit Q_e de l'eau entrant dans le cœur :

La régulation préférentielle est celle du débit d'eau Q_e qui ne provoque pas de perturbation locale de la puissance neutronique. L'action sur les barres de commande est, en général, subordonnée à l'action sur le débit de recirculation au moins dans les réacteurs modernes dont les pompes intégrées dans le fond de la cuve ont une inertie réduite.

La neutronique du REB (réacteur à eau ordinaire bouillante) est voisine de celle du REP, mais du fait du taux élevé d'ébullition dans le REB, pour un **rapport de modération*** comparable (rapport donnant la sous-modération nécessaire pour que les coefficients de température et de vide soient toujours négatifs, afin d'assurer la stabilité et la sûreté), le ratio des volumes V_{H20}/V_{UO2} du REB est plus important (2,50 à 2,70 au lieu de 2,05).

L'eau entre dans le cœur à une température un peu inférieure à la température de saturation et l'ébullition se développe ensuite le long des gaines du combustible. Le régime d'**ébullition nucléée*** assure de bonnes conditions d'échange thermique. En fonctionnement normal, la température de surface de la gaine n'est que de quelques dizaines de degrés Celsius supérieure à celle du réfrigérant. La crise d'ébullition, au-delà de laquelle il y aurait **ébullition en couche mince*** avec chute brutale du flux de chaleur à la paroi, est évitée en limitant le rapport du flux de chaleur au flux de chaleur critique *(Minimum Critical Heat Flux Ratio : MCHFR)* à 1,9.

Le **taux de vide*** (fraction du canal occupée par la vapeur) varie en fonction des conditions de service. Des variations de densité du modérateur correspondantes, résulte un fort couplage entre neutronique et thermohydraulique.

La colonne d'eau montant dans les canaux du cœur reste liquide dans les 40 à 70 premiers centimètres avant d'entrer en ébullition et de former des bulles de vapeur sur le reste de la hauteur active du cœur. Les bulles de vapeur constituent, dans le cœur, des lacunes qui diminuent fortement la réactivité : la baisse de réactivité va de – 160 p.c.m./ % de vide **(parties pour cent mille par pour-cent de vide)** en début de cycle du premier cœur, à –100 p.c.m./ % de vide vers la fin d'un cycle à l'équilibre. Vers la fin d'un cycle, on peut, en poussant le débit de recirculation (ce qui abaisse la fraction volumétrique de vapeur) limiter l'effet de vide.

Un accroissement du débit d'eau dans le cœur déplace vers le haut la zone d'ébullition et entraîne une montée en réactivité et en puissance du réacteur, ce qui induit une augmentation de la production de vapeur. La coexistence permanente de deux phases de l'eau (liquide et vapeur) et l'évolution au cours d'un cycle des transitoires globaux et locaux rendent absolument nécessaires de modéliser le cœur **en couplant neutronique et thermohydraulique, sur la base d'un modèle thermohydraulique diphasique**. Par exemple, lors d'un dysfonctionnement de l'admission turbine, la pression augmente excessivement dans le cœur, ce qui se traduit par une condensation de la vapeur, et donc une insertion de réactivité et une variation importante de spectre.

Pour simuler le comportement du cœur, on utilise un « schéma de calcul » couplé dont le principe a été décrit précédemment dans ce chapitre.

La forte hétérogénéité des assemblages REB nécessite un calcul de flux neutronique faisant appel à des méthodes sophistiquées de résolution de l'équation de Boltzmann (méthode des caractéristiques), approche validée par des calculs de référence Monte-Carlo TRIPOLI-4®. Les données destinées au calcul de cœur ainsi produites dépendent, comme pour les REP, du taux d'irradiation, de la température du combustible, de la densité du modérateur ; un paramètre supplémentaire appelé « historique de vide » a été ajouté afin de dif-

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 219

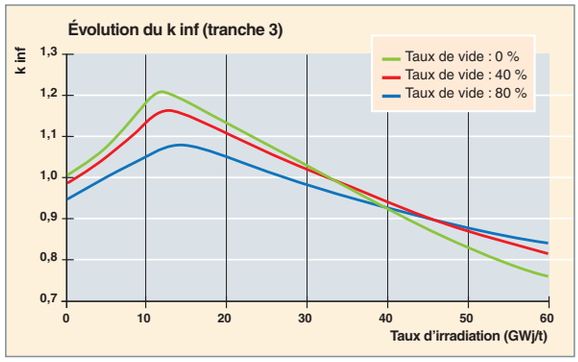


Fig. 138. Comportement de la réactivité en fonction du taux d'irradiation, pour 3 valeurs de taux de vide : 0 %, 40 % et 80 %.

férencier les assemblages ayant évolué dans une zone à faible ou fort taux de vide ; ce paramètre est directement corrélé à la quantité de plutonium produite dans l'assemblage : plus le taux de vide est élevé et donc plus le spectre est dur, plus la quantité de plutonium produite est grande.

La figure 138 illustre le comportement de la réactivité d'un assemblage supposé en milieu infini, en fonction du taux d'irradiation, pour plusieurs valeurs de taux de vide représentatifs respectivement des conditions de vide à l'entrée du cœur, à la mi-hauteur du cœur et à la sortie du cœur. Ce résultat a été obtenu par le code APOLLO2.

Au CEA, les travaux les plus récents sont orientés vers :

- La mise au point d'un schéma de calcul industriel et de référence pour les divers types d'assemblages REB existants ;
- la définition d'un schéma de calcul global neutronique/thermohydraulique cœur CRONOS2/FLICA4 ;
- l'analyse physique des capacités des REB à recycler du plutonium ;
- l'analyse de nouveaux concepts japonais de REB à réseaux serrés dont l'objectif est d'augmenter les facteurs de conversion (par exemple, projets japonais BARS et HCBWR).

Couplages dans les Réacteurs à caloporteur gaz à Haute Température (RHT)

Les réacteurs à gaz à haute température ont un comportement neutronique spécifique : celui-ci est dû au combustible à particules, et au modérateur graphite (voir la monographie n°1 « Les réacteurs à caloporteur gaz »). À la différence des réacteurs à eau, dans lesquels les deux fonctions de **caloporteur*** et de **modérateur*** sont assurées par l'eau, le caloporteur hélium ne joue ici pratiquement aucun rôle de modération des neutrons, en raison de sa faible densité. Ce découplage donne au concepteur une grande liberté dans le choix des caractéristiques neutroniques des RHT.

La masse atomique relativement importante du carbone fait du graphite un modérateur médiocre : il faut faire subir aux neutrons de fission un grand nombre de diffusions élastiques avant qu'ils n'atteignent la plage des énergies thermiques. Il en résulte un grand nombre de neutrons dans le domaine épithermique (quelques eV à quelques dizaines de keV), comparativement aux autres filières de réacteurs, avec une forte probabilité d'absorption dans les résonances des noyaux lourds pendant la phase de ralentissement. Les particules combustibles dépourvues de leur matrice graphite environnante et baignées directement par le gaz font apparaître un spectre de neutrons décalé vers les hautes énergies.

Le recours à un combustible très fragmenté favorise aussi l'absorption des neutrons dans les résonances des noyaux lourds. Dans un combustible classique, plaque ou crayon, une partie des noyaux lourds absorbants, en particulier l'U 238, est cachée aux neutrons qui sont capturés préférentiellement en périphérie du combustible. Dans le RHT, le combustible sous forme de micro-grains augmente cette probabilité de capture. En tenant compte du fait que l'hélium est transparent aux neutrons, l'utilisation d'une matrice graphite contenant des microparticules combustibles conduit aux caractéristiques suivantes :

- Le RHT est conçu avec un **rapport de modération*** variant de 500 à 1 000 atomes de carbone pour un noyau lourd. Il en résulte un volume de modérateur important et donc des cœurs de grandes tailles ;
- les RHT ont recours à un enrichissement en U 235 élevé dû à la forte absorption neutronique de l'U 238. Cet enrichissement élevé est aussi nécessaire si l'on souhaite tirer parti des bonnes performances sur les taux de combustion des particules combustibles, pour compenser la disparition par fission de la matière fissile ;
- enfin, le RHT est caractérisé par une importante **aire de migration*** des neutrons, somme du carré des longueurs parcourues réellement par le neutron avant d'être absorbé, d'une part pendant son ralentissement, et d'autre part pendant son déplacement par diffusion à l'état thermique. Dans le RHT, la longueur de ralentissement sur le graphite est très grande. L'importante aire de migration qui en résulte (450 cm^2 par rapport à 50 cm^2 dans un REP) conduit à des niveaux de **fuites neutroniques*** élevés. Par exemple 10 % des neutrons sortent du cœur annulaire du **GT-MHR*** sans être absorbés. Ces fuites confèrent aux **réflecteurs*** un certain poids dans le comportement neutronique du cœur. En particulier, ils possèdent un **coefficient de température*** positif non négligeable, ce qui impose de tenir compte des effets de **contre-réaction*** thermique des réflecteurs en plus de ceux du cœur.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 220

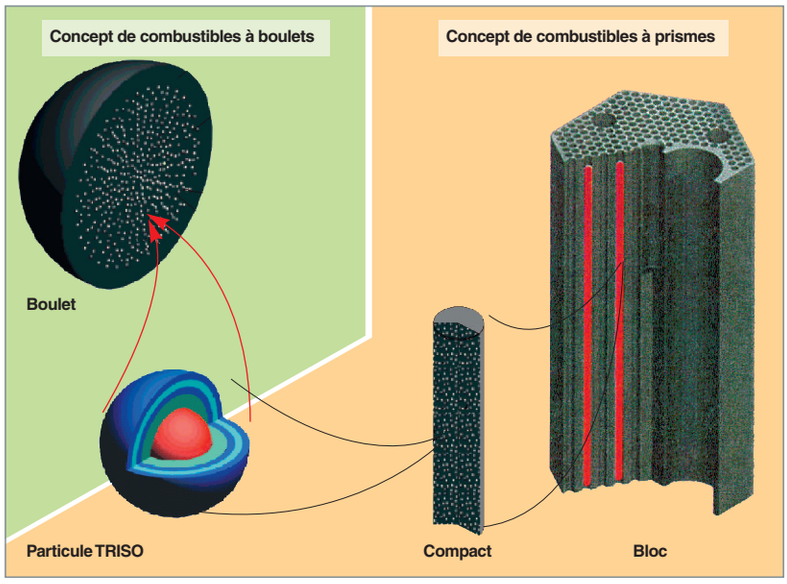


Fig. 139. Structure du combustible utilisé dans les réacteurs à gaz à haute température.

Pour tirer parti de la flexibilité des RHT, on peut être amené à concevoir des configurations de cœur complexes et fortement hétérogènes. De plus, certains concepts de RHT doivent assurer une évacuation passive de la **puissance résiduelle*** en cas d'accident de dépressurisation, ce qui conduit à des cœurs de forme annulaire, bien adaptés pour transporter la chaleur vers les réflecteurs. La configuration annulaire engendre des variations spatiales de spectre neutronique importantes et donc des interfaces cœur-réflecteur difficiles à modéliser. À ces configurations de cœurs annulaires fortement hétérogènes (3D), s'ajoute la présence de **barres de contrôle*** dans le réflecteur et un effet de contre-réaction thermique du réflecteur qui doivent être pris en compte. La figure 139 illustre l'aspect multi-échelles existant dans le cœur de ces réacteurs RHT.

Un schéma de calcul a été développé au CEA entre 2005 et 2008 sur la base des codes **APOLLO2*** et **CRONOS2***, couplés au logiciel **CAST3M*** pour le calcul des contre-réactions thermiques.

Le couplage entre les codes de neutronique et les codes de thermo-hydraulique est effectué par une méthode explicite, via un lien externe. Cette méthode consiste à résoudre indépendamment les deux problèmes physiques et à échanger les informations de couplage à la fin de chaque résolution. Cette procédure est répétée autant de fois que nécessaire jusqu'à l'obtention d'un état stationnaire au cours duquel les paramètres physiques varient en dessous d'une certaine limite définie.

Le modèle neutronique de base retenu pour le couplage est celui d'un schéma de calcul appelé « **NEPHTIS*** », développé par le CEA pour AREVA-NP et EDF. La modélisation neutronique des cœurs RHT traite le calcul de cœur en deux étapes distinctes : la première concerne le calcul d'assemblage pour la génération des bibliothèques de section efficaces, par le code APOLLO2. La deuxième est consacrée au calcul de l'ensemble du cœur en théorie de la diffusion, par CRONOS2. Le modèle thermo-hydraulique pour ces cœurs se fonde sur les équations de conservation standard à la fois pour le fluide caloporteur et pour le massif solide qui constitue le cœur. Il rend compte des différents phénomènes de transfert thermique existant dans les cœurs RHT : la conduction, le rayonnement, ainsi que la convection due à la circulation du gaz caloporteur.

Le principe du couplage retenu est présenté figure 140, le code neutronique CRONOS2 et celui de la thermohydraulique CAST3M s'échangent les données de température et de puissance à travers des fichiers de type PIPE.

L'application du système de couplage a été mise en place sur le cœur du GT-MHR, base des études actuelles sur le RTHT.

Un résultat d'application est illustré sur la figure 141 : sont présentés l'impact de la prise en compte du couplage sur la valeur propre du cœur, sur l'**Axial-Offset*** (déséquilibre axial de puissance) et sur les profils de puissance axiale. L'impact du couplage est important, en particulier sur l'axial offset, qui passe de -2 % à + 5 %, et sur la distribution de puissance.

Ce système couplé permet de mener à bien des études en statique (recherche de cycle à l'équilibre avec barres de pilotage insérées) mais aussi en cinétique pour la modélisation de **transitoires dimensionnants*** pour ce type de réacteur.

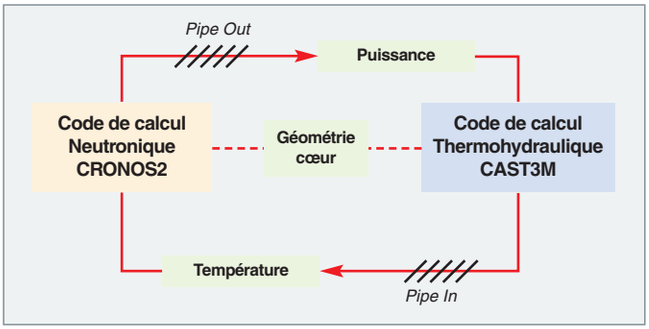


Fig. 140. Principe du couplage thermohydraulique/neutronique (CAST3M-CRONOS) pour un cœur de réacteur à haute température.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 221

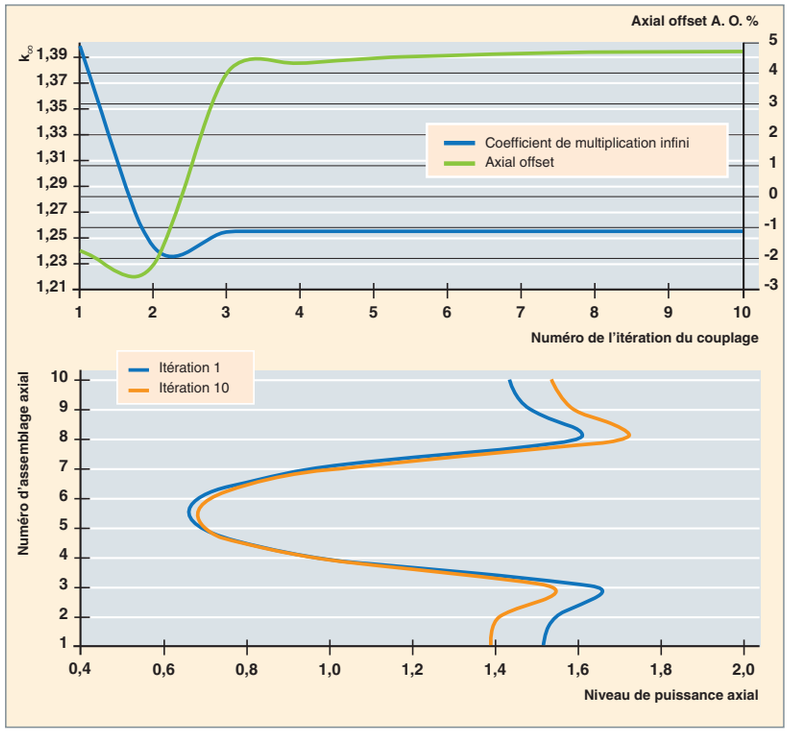


Fig. 141. Illustration de la prise en compte du couplage neutronique/thermohydraulique sur la réactivité, l'axial offset et la distribution axiale de puissance du cœur.

Différentes approches existent pour classifier les transitoires accidentels pour les RHT. La plus répandue utilise les événements initiateurs comme critère de classification.

L'**ATWS*** *(anticipated transient without scram)* est un transitoire de puissance pénalisé par le fait qu'on suppose le non déclenchement de l'arrêt automatique du réacteur (AAR). Il appartient à la classe des « Transitoires associés au contrôle de la réactivité ». Ce type de transitoire est relativement lent (plusieurs minutes) mais on peut néanmoins le considérer comme rapide vis-à-vis des phénomènes neutroniques observés. De ce fait, une modélisation fine à la fois de la neutronique, de la thermique du graphite et de la thermohydraulique du cœur tout au long du transitoire et en tout point du réacteur est requise. L'ATWS constitue une application privilégiée pour le système de couplage développé au CEA.

Dans un réacteur à haute température il y a normalement deux ensembles de systèmes d'arrêt automatique du réacteur :

1. le système d'arrêt normal constitué par les barres de pilotage et les barres de sécurité (pour l'arrêt automatique du réacteur),
2. le système d'arrêt de réserve constitué par des boules absorbantes de B_4C injectées dans le cœur. Si le système d'arrêt normal échoue, le second système est actionné manuellement ou automatiquement.

Dans un transitoire ATWS, on suppose que le système d'arrêt normal ne se déclenche pas ou ne détecte pas la variation de la réactivité dans le cœur. On suppose également que le système d'injection des boules absorbantes n'intervient pas.

Le scénario du transitoire (fig. 142) se décompose en deux parties pouvant être traitées indépendamment l'une de l'autre :

1. Initialement, le cœur est dans un état d'équilibre. Le xénon est supposé en équilibre partout dans le cœur. Une des barres de pilotage déjà insérée dans le cœur jusqu'à une profondeur de 170 cm est insérée en 20 secondes de 7 cm supplémentaires et reste à cette cote pendant dix minutes. L'insertion de la barre correspond à un écart de réactivité de 50 pcm.
2. Dix minutes plus tard, la barre de pilotage est ramenée en 20 secondes à sa position initiale.

Au début du transitoire, la puissance de réacteur est réduite à 79 % de la **puissance nominale***. En raison des effets dyna-

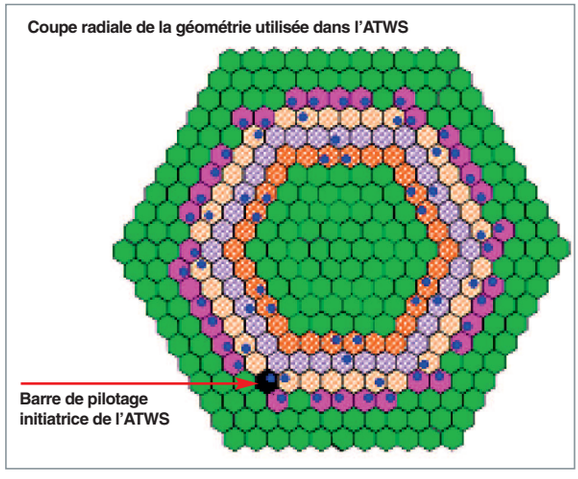


Fig. 142. Coupe radiale de la géométrie de l'ATWS et localisation de la barre initiatrice de l'ATWS.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 222

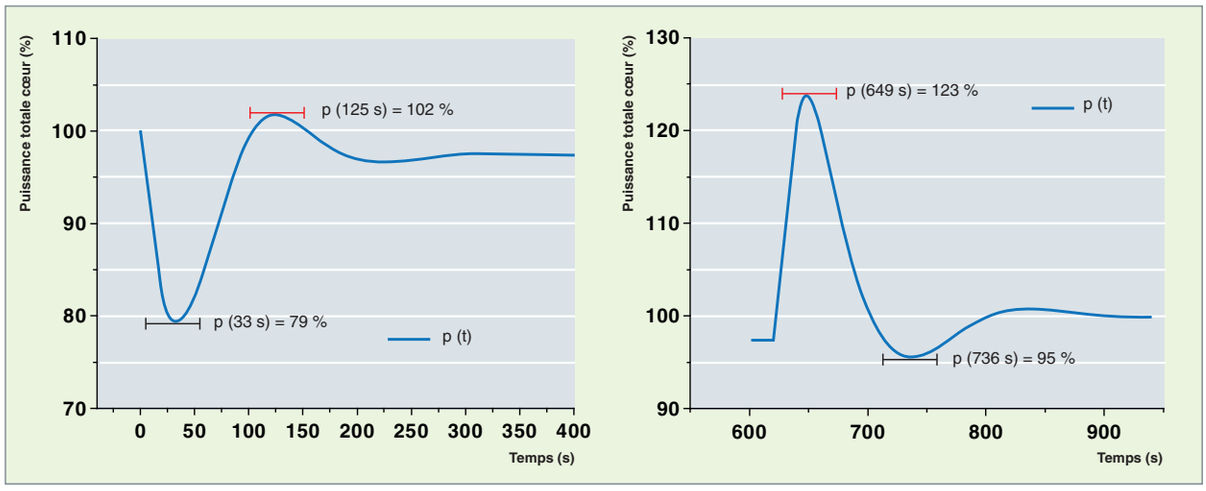


Fig. 143. Évolution de la puissance totale du cœur au cours des deux phases de l'ATWS : phase de l'insertion de la barre (figure de gauche) et phase de retour à la position d'équilibre (figure de droite).

miques, la puissance augmente ensuite pendant environ 2 minutes et, après 4 minutes, elle se stabilise à 97 % de la puissance initiale (fig. 143).

La deuxième phase de l'ATWS a lieu 10 minutes après le déclenchement du transitoire. La barre initiatrice de l'ATWS est ramenée à sa position initiale d'équilibre (170 cm) à la même vitesse que lors de la première phase du transitoire. Suite à ce mouvement, la puissance de réacteur augmente jusqu'à environ 125 % de la puissance nominale du réacteur sans déclenchement de l'AAR. Au-delà de 4 minutes, le réacteur retrouve sa puissance initiale et demeure stable (figure 143).

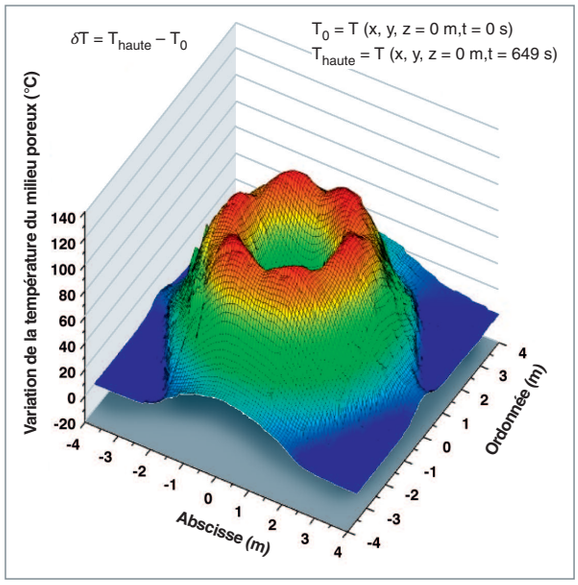


Fig. 144. Variations des températures au cours d'un transitoire de puissance : variation de la température de sortie de l'hélium entre l'état initial critique (p_0 = 600 MWth) et l'état à la puissance maximale (p_{max} = 732 MWth).

Au cours de la deuxième phase de l'ATWS, la puissance du cœur atteint 732 MWth. Cette augmentation de la puissance s'accompagne d'une élévation de température qui atteint localement 1 410 °C. Cette montée en température va ensuite faire baisser le niveau de puissance du cœur suite aux effets des contre-réactions thermiques pris en compte dans le couplage. Sans couplage, la puissance atteinte dans la deuxième phase du transitoire serait très importante (plusieurs ordres de grandeur par rapport au résultat avec couplage), en raison du fort coefficient **Doppler*** de ce type de cœur - 6 pcm/ °C environ). En conséquence, les températures dépasseraient les seuils admissibles de sûreté (1 600 °C environ pour ce type de combustible).

La température de sortie de l'hélium au cours de l'ATWS fluctue également. La figure 144 illustre la variation de la température de sortie de l'hélium au niveau du **plénum*** inférieur du cœur (dans un RHT, l'hélium circule du haut vers le bas du cœur). Cette variation de température n'excède pas 140 °C.

Le système de couplage à travers l'ATWS et d'autres transitoires accidentels ou de fonctionnent permet d'initier des études de dimensionnement et de sûreté pour le futur concept du **RTHT***. Il permettra également d'optimiser certaines caractéristiques du réacteur comme l'augmentation de la température de sortie d'hélium tout en conservant les critères de sûreté.

L'accident de réactivité (RIA : Reactivity Initiated Accident)

La phénoménologie

Dans une centrale nucléaire, la sûreté est garantie par le confinement du combustible, qui ne doit en aucun cas, être remis en cause. Ce confinement est assuré par trois barrières successives :

• La gaine séparant le combustible du reste du cœur ;

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 223

• la cuve contenant l'ensemble du cœur ;
• l'enceinte enfermant l'ensemble du circuit primaire.

Un RIA est un accident induit par une insertion accidentelle de réactivité dans le cœur ; dans ce cas, c'est la tenue de la première barrière (la gaine) qui peut être mise en défaut. Dans un REP, l'initiateur conventionnel d'un tel accident est l'éjection d'une grappe de contrôle. Cet accident peut être qualifié d'important par les conséquences qu'il pourrait avoir, mais d'hypothétique par la probabilité d'occurrence qui lui est associée (10^{-6} à 10^{-4} par tranche et par an).

L'accident de RIA conduit à une libération soudaine et importante d'énergie dans une zone localisée du cœur (la région environnant l'assemblage où a lieu l'éjection de la grappe de contrôle). Deux types de transitoire peuvent avoir lieu suivant la réactivité apportée par la grappe éjectée ρ_{grappe} et la fraction de neutrons retardés β présente dans le cœur :

• Des transitoires de type sur-critique prompt correspondant à $\rho_{grappe} > \beta$ (cinétique pilotée par les neutrons prompts). Ce type de transitoire peut être rencontré quand la puissance initiale du cœur est faible, la grappe étant en grande partie insérée dans le cœur et donc très fortement anti-réactive ;

• des transitoires de type sur-critique correspondant à $\rho_{grappe} < \beta$ (cinétique pilotée par les neutrons retardés). Cette situation correspond à une configuration de cœur avec puissance initiale proche du niveau nominal, la grappe initiatrice de l'accident est moins insérée que dans le cas précédent, son retrait apportera une réactivité moins importante.

Ces deux transitoires correspondent à deux cinétiques neutroniques bien distinctes.

Le calcul d'une situation RIA

Le but d'un calcul de RIA est de vérifier le respect des critères de sûreté associés à cet accident ; ces critères sont empiriques et résultent d'expérimentations menées dans les réacteurs SPERT-CDC et PBF aux États-Unis (dans les années 70) sur du combustible UOX neuf à irradié (33 GWj/tU), puis au Japon (dans les années 80) dans le réacteur NSRR pour des combustibles UOX et MOX atteignant une irradiation de 70 GWj/tU et, enfin, plus récemment en France dans le réacteur CABRI (CEA/Cadarache) sur des combustibles UOX et MOX pour une gamme de taux de combustion équivalente à celle utilisée pour les tests NSRR. Pour l'essentiel, les critères sont de nature thermique et portent sur les températures dans le combustible et la gaine, ainsi que sur l'énergie déposée dans le combustible.

Dans le cas des combustibles faiblement irradiés (soumis de ce fait aux critères issus des essais SPERT-CDC et PBF), l'analyse d'un transitoire RIA se focalise sur le suivi du comportement thermique du point chaud (ou pastille chaude) du cœur suite à l'éjection de la grappe la plus anti-réactive du cœur, le cœur étant dans un état pénalisant au regard des paramètres pilotant le transitoire. Ainsi, dans le cas d'un REP chargé en combustible UOX, l'analyse est menée dans un cœur en fin de cycle pour lequel est minimal (configuration aggravante).

Le comportement thermique au point chaud est directement corrélé à l'évolution de la puissance locale pendant le transitoire que l'on factorise sous la forme $P_{cœur}(t) \times F_Q(t)$ où :

• $P_{cœur}(t)$ est la puissance du cœur ;

• $F_Q(t)$ est le facteur au point chaud.

On suppose, en situation initiale que la puissance dans le cœur, $P_{cœur}(t \leq 0)$, est constante, donc que la population neutronique est stable. Quand la grappe est éjectée l'équilibre du cœur est rompu. L'exemple présenté ci-dessous correspond à une situation où le cœur est critique à très faible niveau de puissance (niveau de puissance égal à la puissance résiduelle ($10^{-4} * P_{nominale}$) ; le scénario est un transitoire de type sur-critique prompt correspondant à $\rho_{grappe} > \beta$.

L'évolution de la puissance du cœur se fait en cinq étapes représentées par les zones 0 à 4 sur la figure 145.

Suite à l'éjection de la grappe de contrôle (zone 0), $P_{cœur}(t)$ augmente violemment (évolution exponentielle) sans pour autant induire une augmentation significative de température dans le cœur compte tenu du faible niveau de puissance initiale (zone 1).

La puissance du cœur ayant atteint le niveau d'activation thermique du combustible, les températures dans le combustible augmentent à mesure de l'évolution de la puissance et de manière quasi-adiabatique. La contre-réaction par effet

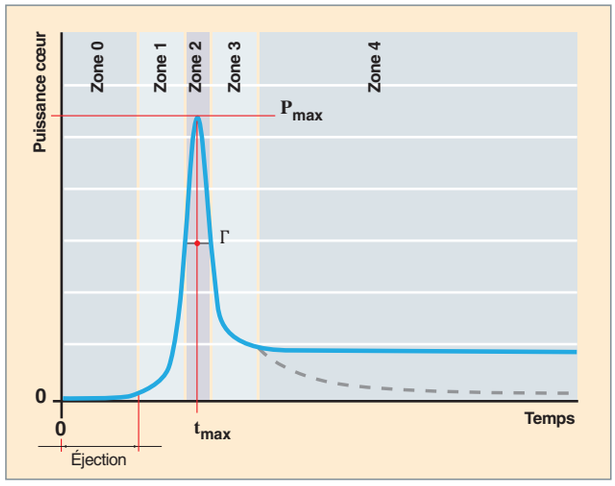


Figure 145. Évolution typique de puissance lors d'un accident de réactivité.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 224

Doppler intervient alors en contrebalançant l'insertion de réactivité initiale. L'évolution de puissance ralentit pour finalement s'infléchir (forme en pic dans la zone 2).

Avec une diminution de la dynamique de dépôt d'énergie, apparait le transfert thermique entre le combustible et le caloporteur. La contre-réaction par effet modérateur vient alors s'ajouter à l'effet Doppler. Un nouvel état d'équilibre est atteint (zone 3). À l'issue du **pic de puissance***, la réactivité du cœur atteint la fraction de neutron retardés (β).

Dans les faits, cet état n'a pas le temps de s'établir (courbe en trait plein dans la zone 4) car le scénario RIA comprend le déclenchement d'un arrêt d'urgence (chute de l'ensemble des grappes du cœur, excepté la seconde grappe la plus anti-réactive du cœur ce qui constitue un aggravant du scénario). Cet événement étouffe définitivement la réaction en chaîne (courbe en pointillés dans la zone 4).

Le facteur de point chaud est défini comme suit :

$$F_Q(t) = max_{x,y,z}\,[F(x,y,z,t)]$$

où $F(x,y,z,t)$ est la distribution 3D normalisée de puissance dans le cœur.

Au cours des cinq étapes précédemment décrites, l'évolution du point chaud est la suivante.

Avec l'éjection de la grappe de contrôle, la nappe de puissance se déforme au voisinage de la grappe éjectée, entrainant une augmentation du facteur de point chaud (zone 0).

Une fois la grappe éjectée, le niveau de déformation se stabilise au voisinage de l'état dit « statique éjecté » ($F_Q^{Stat\ Eject}$). Tant que la puissance cœur n'a pas atteint le seuil d'activation de la thermique combustible, la déformation reste constante (phase plateau dans l'évolution du facteur de point chaud dans la zone 1).

Les contre-réactions agissent (Doppler en zone 2 et effet modérateur en zone 3). Il y a alors écrasement de la nappe de puissance et, par conséquent, diminution du facteur de point chaud.

En dehors de tout mécanisme d'arrêt d'urgence, le cœur atteint un nouvel état d'équilibre caractérisé par une nouvelle déformation de la nappe de puissance et le facteur de point chaud atteint un état stable (F_Q^{Asympt}).

Les résultats sont obtenus à partir d'une modélisation 3D cinétique cœur neutronique/thermohydraulique. Cette modélisation permet d'accéder aux puissances dans l'ensemble des crayons du cœur.

À partir d'une analyse en cinétique ponctuelle, on peut montrer que :

- Le maximum de puissance atteint dans le cœur $Pmax$ est proportionnel à $(\rho - \beta)^2$ et inversement proportionnelle au coefficient de température Doppler ;
- la largeur à mi-hauteur du pic de la puissance Γ est inversement proportionnelle à $(\rho - \beta)$;
- l'énergie déposée est proportionnelle à $(\rho - \beta)$ et inversement proportionnelle au coefficient Doppler.

On peut montrer que l'effet Doppler, intrinsèque au combustible, maîtrise le transitoire en neutrons prompts. Le dimensionnement du réacteur ou la définition du plan de chargement des assemblages dans le cœur consiste à s'assurer que l'efficacité de la grappe éjectée est telle que l'énergie déposée soit inférieure à la valeur limite retenue.

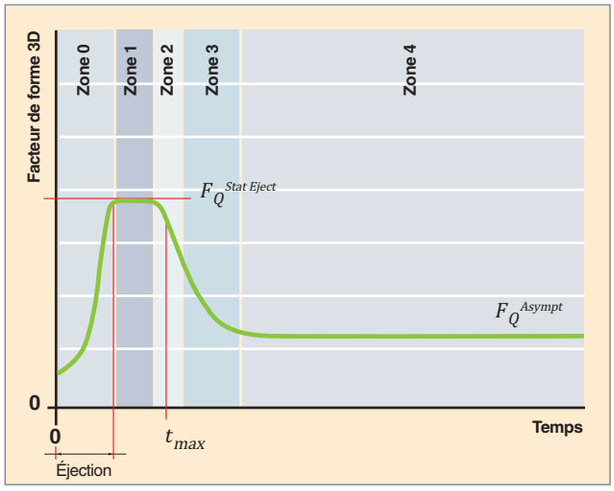


Fig. 146. Évolution typique de facteur de point chaud lors d'un accident d'insertion de réactivité.

Tableau 27

Quelques ordres de grandeur caractéristiques de l'accident d'insertion de réactivité	
Temps d'éjection	0,1 s
Largeur Γ du pic de puissance	60 ms
Arrêt d'urgence	1 s
Durée du transitoire	2 s
Puissance maximale P_{max}	10 $P_{nominale}$
Valeur maximum du facteur de point chaud $F_Q^{Stat\ Eject}$	20

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 225

L'accident de Rupture de Tuyauterie Vapeur : un exemple de transitoire accidentel

Phénoménologie

La Rupture de Tuyauterie Vapeur (RTV) est un accident de dimensionnement des réacteurs à eau sous pression, qui met en jeu des phénomènes physiques couplés : thermohydraulique du circuit secondaire (lieu de la brèche initiant l'accident), échange thermique primaire-secondaire à travers les générateurs de vapeur (GV), thermohydraulique du circuit primaire, neutronique et thermohydraulique du cœur.

Le scénario prévisible d'une RTV est le suivant : la brèche secondaire qui initie l'accident provoque une fuite importante de vapeur, ce qui extrait une quantité d'énergie accrue des GV, et par conséquent refroidit brutalement le circuit primaire. Ce refroidissement entraîne d'une part une augmentation de la puissance (accroissement de la réactivité par effet modérateur), d'autre part une chute de la pression par effet de contraction du fluide primaire. Ces deux effets conjugués peuvent conduire à la crise d'ébullition, donc à l'endommagement de la gaine du combustible. Les systèmes de sauvegarde de la centrale sont activés au cours du transitoire : les vannes d'isolement vapeur permettent de ralentir ou de stopper la fuite de vapeur (au plus, un seul GV se vide), l'arrêt automatique du réacteur (AAR) (chute des barres de contrôle) limite l'emballement de la réaction neutronique, et l'injection de sécurité permet de limiter la chute de pression mais également la réactivité par insertion de bore concentré, mais plus tard (typiquement vers 70-80 s).

La RTV est un accident dissymétrique, car la boucle correspondant à la brèche vapeur se comporte différemment des autres boucles. Le refroidissement du cœur n'est pas uniforme, ce qui se traduit par une distorsion de la distribution de puissance. Cette déformation peut être aggravée, lors de l'AAR, par la non-insertion d'une grappe de contrôle dans la zone la plus refroidie (hypothèse d'étude pénalisante vis-à-vis de l'accident).

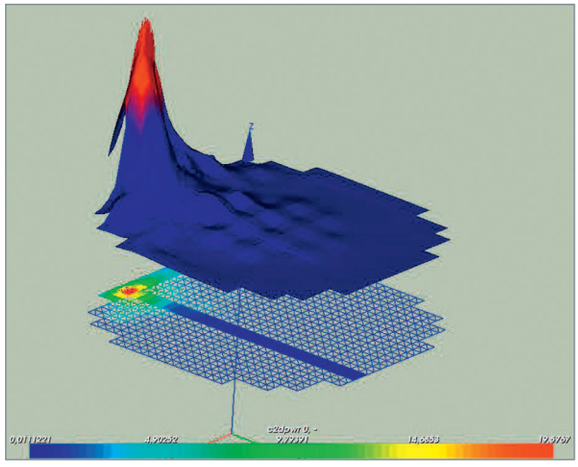


Fig. 147. Enveloppe de la distribution 2D de puissance normalisée à 1, obtenue toutes barres enfoncées hormis la plus anti-réactive, lors d'un accident de rupture de tuyauterie vapeur (RTV).

Pour les réacteurs REP de la filière française, les conditions initiales de l'accident de dimensionnement correspondent à l'arrêt à chaud (énergie des GV maximales et énergie primaire minimale) avec un cœur en fin de cycle (effet modérateur maximal).

Vis-à-vis de la sûreté, le paramètre discriminant est le Rapport d'Échauffement Critique (REC) minimal qu'il faut calculer au cours du transitoire pour s'assurer que l'on n'atteint pas la crise d'ébullition.

Simulation

La complexité de simulation d'une RTV provient de la nécessité de décrire des phénomènes de nature et d'échelle de temps différentes : neutronique, thermohydraulique 3D cœur et chaudière.

Deux types de simulations sont possibles ; dans la simulation « découplée », on enchaîne plusieurs étapes :

- Tout d'abord, les coefficients neutroniques (sections efficaces et coefficients de contre-réaction) sont calculés en fonction des caractéristiques du combustible et de sa gestion ;

- ensuite les caractéristiques thermohydrauliques de la chaudière (géométrie, pertes de pression, point de fonctionnement, mélange dans la cuve, etc.) servent de données d'entrée au code de thermohydraulique, qui permet une modélisation détaillée du cœur ;

- enfin, le calcul transitoire d'ensemble est réalisé en prenant en compte la chaudière complète et ses systèmes de sauvegarde, avec une modélisation du cœur simplifiée (cinétique ponctuelle + TH 1D, elle-même basée sur de multiples calculs 3D statiques) ou fine (cinétique 3D + TH 3D). L'évolution de la nappe de puissance 3D et des conditions thermohydrauliques locales au cours du transitoire permet de quantifier les risques de crise d'ébullition (fig. 147).

La simulation 3D couplée permet quant à elle d'accéder aux valeurs maximales atteintes dans le réacteur pour les paramètres suivants : pic de puissance, température de la gaine, etc. De plus, l'évolution de l'écoulement et du flux neutronique au cours du transitoire ont un impact sur le comportement du cœur qui ne peut évidemment pas être décrit par la cinétique ponctuelle. La simulation 3D du cœur permet, en revanche, de prendre en compte le rééquilibrage de la température primaire entre l'entrée et la sortie du cœur, donc de mieux évaluer les effets de contre-réaction.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 225

Bibliographie

LAUTARD (J.J.) *et al.*, « CRONOS, un logiciel de simulation neutronique des cœurs de réacteurs », Rapport scientifique DRN, 1999.

TOUMI (I.) *et al.*, « FLICA4 : a three dimensional two-phase flow computer code with advanced numerical methods for nuclear applications », *Nuclear Engineering and Design*, 200, pp. 139-155, 2000.

TOUMI (I.) *et al.*, "Specifications of the General Software Architecture for code Integration in ISAS", *Euratom Fusion Technology*, ITER Task S81TT-01, 1995.

LENAIN (R.) *et al.*, "Physical analysis of plutonium recycling in BWRs", GLOBAL'99, August 29-September 3, Jackson Hole, USA, 1999.

DAMIAN (F.) *et al.*, "VHTR Neutronic Calculation Scheme: Validation Elements using MCNP and TRIPOLI4 Monte-Carlo Codes", M&C 2005, September 12-15, Avignon, France, 2005.

LIMAIEM (I.), DAMIAN (F.), RAEPSAET (X.), "VHTR Core Modeling: Coupling between neutronic and thermal-hydraulics" M&C 2005, September 12-15, Avignon, France, 2005.

ROYER (E.), RAIMOND (E.), CARUGE (D.), "CEA-IRSN participation in the MSLB benchmark", *Nuclear Technology*, vol. 142, pp. 154-165, May 2003.

MIGNOT (G.), ROYER (E.), RAMEAU (B.), TODOROVA (N.), "Computation of a BWR Turbine Trip with CATHARE-CRONOS2-FLICA4 Coupled Codes", *Nuclear Science and Engineering*, vol. 148, October 2004, pp. 235-246.

BRUNA (G.B.), LE PALLEC (J.C.), *and al.*, « HEMERA: a 3D computational chain for PWR safety analysis », PHYSOR 2008, September 14-19, Interlaken, Suisse, 2009.

LE PALLEC (J.C.), POINOT (C.), CROUZET (N.), ZIMMER (S.), "HEMERA V2: An evolutionary tool for PWR multiphysics analysis in SALOME platform", ICAPP 2011-2011 May, Nice, France.

Nuclear Fuel Behaviour Under Reactivity-initiated Accident (RIA) Conditions, State-of-the-art Report, OCDE 2012 NEA No. 6847, 2010.

S. SANTANDREA *et al.*, "Improvements and validation of the linear-surface characteristics scheme", *Annals of Nuclear Energy*, 36, pp. 46-59, 2009.

Éric ROYER, Christine POINOT-SALANON,
Frédéric DAMIAN, Jean-Charles LE PALLEC
Département de modélisation des structures et des systèmes
et Edwige RICHEBOIS
Département des projets d'installations et d'emballages

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 227

La physique du cycle du combustible

Le cycle du combustible nucléaire (ou chaîne du combustible nucléaire) [fig. 148] est l'ensemble des opérations de fourniture de combustible aux réacteurs nucléaires, puis de gestion du combustible irradié, depuis l'extraction du minerai à la gestion des déchets radioactifs.

La gestion des matières nucléaires dans le cycle du combustible nécessite la maîtrise à chaque étape du cycle de plusieurs paramètres liés aux propriétés du combustible nucléaire : contrôle des quantités de matières en jeu, prévention du risque de criticité, évacuation de la puissance résiduelle produite par ces matières, protection des rayonnements ionisants, maîtrise du niveau de contamination des colis de déchets...

La connaissance de ces paramètres relève du domaine de la neutronique : l'utilisation du combustible nucléaire est donc simulée en chaque point du cycle afin de déterminer les grandeurs physiques que sont la composition isotopique (appelée « bilan matière »), la puissance résiduelle, l'activité, les sources et spectres de rayonnements (alpha, bêta, *gamma*, neutrons), la radio-toxicité. Ces grandeurs, dont le calcul fait appel à la résolution des équations d'évolution rencontrées en neutronique, permettent de caractériser les combustibles et les structures irradiés en réacteur.

Les équations de la neutronique donnent la possibilité de calculer les quantités des différents noyaux qui se forment à tout instant dans et hors du réacteur par le jeu combiné des réac-

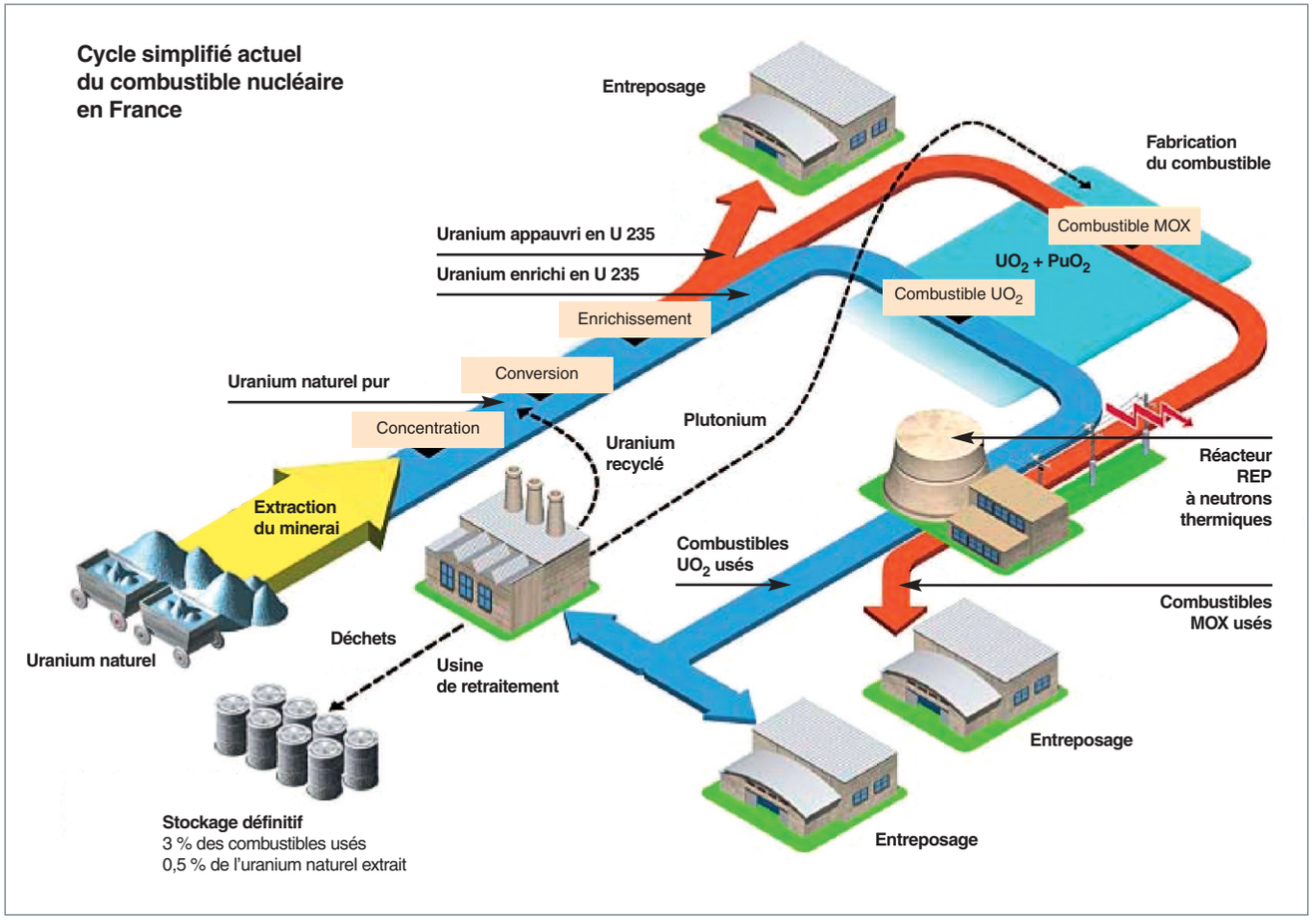


Fig. 148. Le cycle du combustible en France.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 228

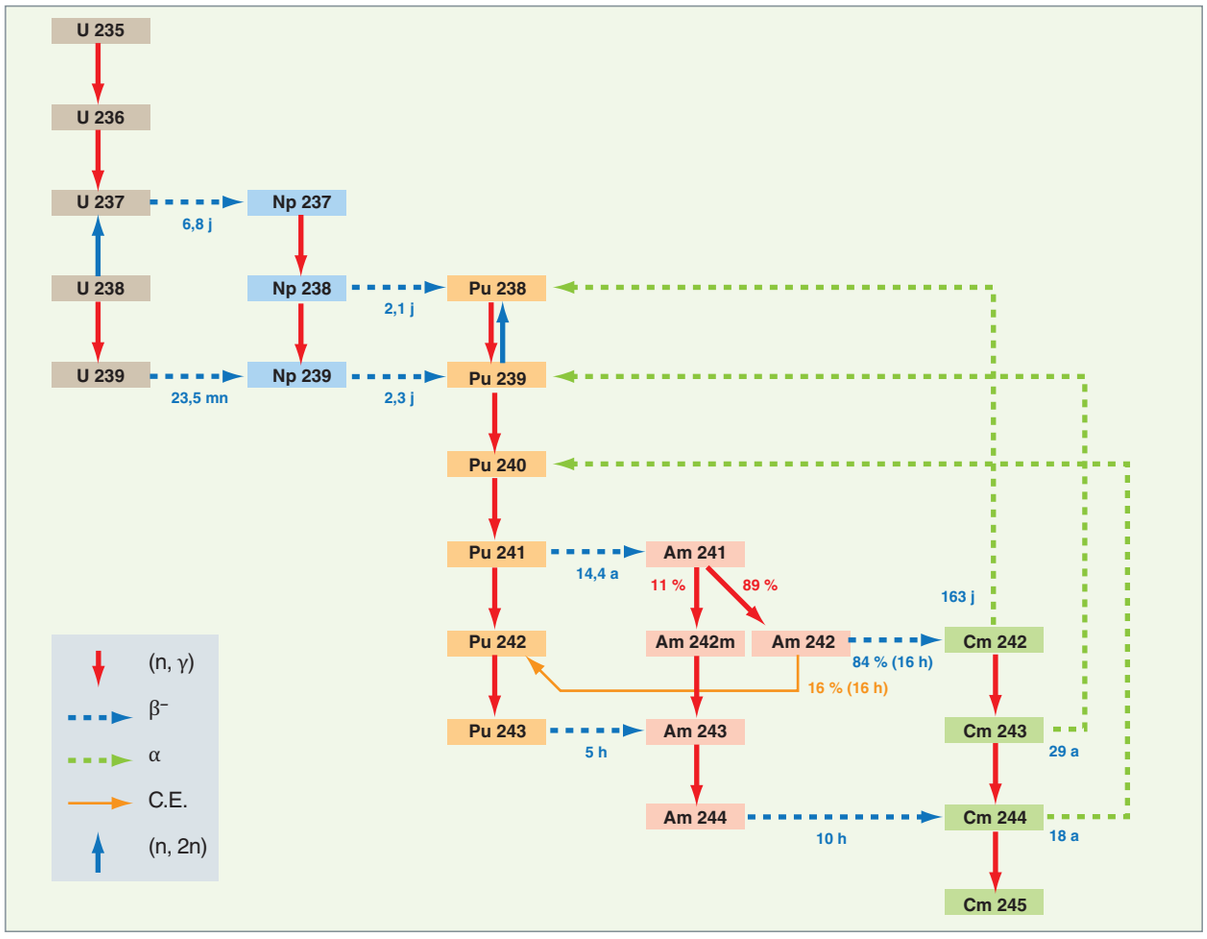


Fig. 149. Extrait d'une chaîne de filiation des principaux noyaux lourds présents dans un cœur de réacteur. Ce schéma montre comment se forment les actinides, et en particulier le plutonium.

tions nucléaires et des désintégrations radioactives (fig. 149), permettant ainsi d'établir un « bilan matière ».

Dans les études du cycle du combustible on peut citer trois outils développés à la DEN en support à ces activités :

- Le formulaire **DARWIN*** (Développement Appliqué au Recyclage Vérifié et Validé pour les Installations Nucléaires), développé à la DEN en collaboration avec EDF et AREVA, a vocation à calculer les grandeurs physiques citées ci-dessus, en chaque point du cycle et à chaque instant, depuis la fin de l'irradiation, jusqu'aux temps de refroidissement correspondant à des situations de stockages géologiques. Il est dédié aux études portant sur l'ensemble du cycle des combustibles actuels (UOx, MOx) ou innovants (GEN IV), pour toutes filières considérées (REP, RNR, REB, réacteurs avancés). DARWIN est fondé sur l'enchaînement des outils de calcul de la neutronique (APOLLO2, ERANOS, PEPIN2) et utilise des données nucléaires (sections efficaces, rendements de fission, constantes de décroissance…) issues essentiellement des évaluations JEFF3 pour les actinides, les produits de fission et les produits d'activation.

- le code simplifié **CÉSAR*** (Code d'Évolution Simplifié Appliqué au Retraitement) qui a été co-développé à partir des années 90 par le CEA et AREVA. Il permet de réaliser une évolution simplifiée et rapide d'un assemblage combustible tout au long de son historique (fabrication, irradiation, refroidissement, stockage). Il a été développé dans un objectif de précision et de rapidité des calculs, de souplesse et de sécurité d'emploi afin de devenir le code en exploitation à l'usine de retraitement de La Hague. Cet outil est validé par rapport à DARWIN qui est l'outil de référence pour l'évolution du combustible ; CÉSAR bénéficie donc de l'ensemble de sa qualification.

- la prévention du risque de criticité est traitée par le formulaire **CRISTAL***.
  La présence de matières nucléaires fissiles dans les installations du cycle du combustible (laboratoires et usines) et dans les emballages de transport induit un risque spécifique, appelé risque de criticité. C'est le risque de réunir les conditions d'amorçage et d'entretien d'une réaction en chaîne de fission.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 229

L'état critique dépend de nombreux facteurs, en particulier :
- de la masse de matière fissile mise en œuvre dans chaque appareillage et de la forme géométrique de ces derniers,
- de la concentration des solutions d'uranium ou de plutonium,
- de la présence, au sein du milieu fissile, de noyaux ralentissant les neutrons (les noyaux modérateurs) ou les absorbant (les poisons neutroniques...).

Un accident de criticité, même si toutes les conséquences mécaniques sont rarement préjudiciables, aurait, dans la plupart des cas, des conséquences radiologiques graves pour le personnel et pourrait entraîner des rejets de matières radioactives à l'extérieur de l'installation.

La prévention du risque de criticité repose d'abord sur l'évaluation, par le calcul, des conditions de criticité de tous les appareillages renfermant ou pouvant renfermer des matières fissiles. Elle repose également sur l'analyse, par l'exploitant, des conditions de fonctionnement de ces appareils.

Le **formulaire* de criticité** de nouvelle génération appelé « **CRISTAL*** » et destiné aux études de sûreté a été développé à cet effet à partir de 1995.

On peut citer également une autre application industrielle majeure de ces outils : le ***« crédit burn-up* »***. L'anti-réactivité induite par l'irradiation des combustibles dans le cœur d'un réacteur nucléaire est nommée « crédit *burn-up* ». Elle provient de la diminution de la masse d'isotopes fissiles et de la formation d'actinides et de produits de fission absorbant les neutrons. Dans une optique de sûreté, les études de criticité ont négligé jusque dans les années 80 la perte de réactivité dûe au passage des assemblages combustibles dans le cœur d'un réacteur. Les caractéristiques retenues pour les assemblages combustibles étaient donc celles des assemblages avant irradiation. La méthodologie de calcul du « crédit *burn-up* » a été élaborée par le CEA dès le début des années 80 pour tenir compte partiellement de l'usure des combustibles des réacteurs à eau légère à base d'oxyde d'uranium dans les études de criticité.

Quatre actions typiques dans le cadre de la neutronique appliquée au cycle du combustible sont détaillées dans ce chapitre.

La qualification du calcul du bilan matière

Les grandeurs calculées pour les besoins du cycle sont dérivées pour la plupart du calcul des concentrations isotopiques ; un important travail de qualification associé à cette grandeur pour les isotopes d'intérêt dans le cadre de la physique du cycle (voir tableau 28, page suivante) est donc effectué à la DEN qui a en charge l'élaboration des dossiers de qualification du formulaire DARWIN.

Ces dossiers doivent couvrir les besoins du parc français actuels (REP UOx et MOx, RNR) ainsi que les aspects retraitement des combustibles étrangers avec en particulier ceux liés aux Réacteurs à Eau Bouillante (REB). De nouveaux besoins liés au retraitement des combustibles des réacteurs expérimentaux apparaissent d'autre part aujourd'hui.

Cette qualification est menée par comparaison entre les résultats du calcul DARWIN et des résultats expérimentaux. Ces derniers sont de deux types : analyses isotopiques d'échantillons de combustible irradiés en réacteur EDF (pour les REP-UOx et MOx) ou dans PHÉNIX (pour les RNR) et analyses issues de dissolutions d'assemblages complets dans les usines de retraitement (La Hague, Atelier Pilote de Marcoule).

Les dossiers de qualification actuels portent sur les actinides U, Pu, Np, Am et Cm ainsi que sur les produits de fission importants dans le cadre des études de criticité, de crédit *burn-up* ou des calculs de puissance résiduelle (voir tableau 28, p. 230). Le domaine couvert concerne les REP UOx avec des enrichissements compris entre 3,1 % et 4,5 % jusqu'à des taux de combustion de 85 GWj/t, les REP MOx avec une teneur moyenne en Pu de 5,6 % atteignant des taux de combustion de 60 GWj/t. Des études de qualification sont actuellement en cours pour étendre les teneurs moyennes en Pu sur les MOx ; elles s'inscrivent dans le cadre du programme PARITÉ-MOx d'EDF (9,77 % Pu) puis PARITÉ-MOx Nouvelle Teneur (10,78 %).

Une première qualification du calcul du bilan matière pour les combustibles REB en collaboration avec AREVA a été menée en 2004 puis revue en 2009 avec les données nucléaires les plus récentes (issues de la base de données européenne JEFF-3). Pour ce type de combustible, il est nécessaire de prendre en compte dans les calculs neutroniques un paramètre supplémentaire qui est le taux de vide.

Dans le cadre du comportement à long terme des colis de combustibles usés, des programmes récents ont permis d'obtenir de premiers résultats de qualification pour des radionucléides à vie longue : Se 79, Sr 90, Zr 93, Pd 107, Sn 126, I 129 et C 14. Cette qualification a par ailleurs nécessité des programmes de R&D relatifs à des processus d'analyses chimiques qui n'avaient jamais été mis en œuvre pour la mesure des isotopes précités.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 230

Tableau 28

Les nucléides importants en physique du cycle au regard de la grandeur calculée

(à T > 1 an pour la puissance résiduelle)

Bilan-matière	Puissance résiduelle	Source de neutrons	Activité	Radio-toxicité	Crédit *burn-up* (Prod. Fis.)
U 232	U 239	Pu 238	Ac 227	Np 237	Mo 95
U 234	Np 236	Pu 240	Ra 226	Pu 238	Tc 99
U 235	Np 239	Am 241	Ra 228	Pu 239	Ru 101
U 236	Pu 238	Cm 242	Th 232	Pu 240	Rh 103
U 238	Am 241	Cm 244	U 233	Pu 242	Ag 109
Np 236	Cm 242	Cm 246	H3	Am 241	Cs 133
Np 237	Cm 244	Cm 248	Be 10	Am 243	Nd 143
Pu 236	Sr 90+Y 90	Cf 252	C 14	Cm 243	Nd 145
Pu 238	Ru 106+Rh 106		Ca 41	Cm 244	Sm 147
Pu 239	Ag 110m		Cl 36	Cm 245	Sm 149
Pu 240	Cs 134		Nb 94	Se 79	Sm 150
Pu 241	Cs 137+Ba 137m		Mo 93	Kr 85	Sm 151
Pu 242	Ce 144+Pr 144		Fe 55	Zr 93 + Nb 93	Sm 152
Pu 243	Pm 147		Fe 60	Tc 99	Eu 153
Pu 244	Eu 154		Ni 59	Pd 107	Eu 155
Am 241	Zr 95+Nb 95		Ni 63	Sn 126	Gd 155
Am 242m	Sb 125+Te 125m		Ag 108m	I 129	
Am 243	Y 91		Ho 166m	Cs 135	
Cm 243	Ru 103			Sm 151	
Cm 244	Sr 89				
Cm 245	Eu 155				
Cm 246	Co 60				
Cs 133	Cr 51				
Cs 134	Mn 54				
Cs 137					
Nd 145					
Nd 146					
Nd 148					

Ceci est illustré par le travail mené sur l'Eu 154, nucléide pouvant être utilisé comme indicateur de taux de combustion dans les installations du cycle, important également pour le calcul de la puissance résiduelle et celui du **crédit *burn-up**. La comparaison des résultats calcul/expérience menée dans le cadre de la qualification de DARWIN montrait une surestimation très importante, de l'ordre de 100 %, du calcul du bilan matière de ce nucléide. Une étude des données nucléaires associées a permis de détecter que le modèle théorique qui avait été utilisé dans l'évaluation JEF2.2 pour générer la section efficace de capture de l'Eu 154 n'était pas adapté. La comparaison avec, d'une part, les données expérimentales connues concernant la mesure de cette section, d'autre part avec des évaluations internationales, a permis de proposer une nouvelle section efficace de capture dans JEFF3.1.1 (fig. 150). Cette nouvelle évaluation a conduit à une amélioration des données de ce produit de fission qui est à présent calculé à moins de 5 % (UOX à 45 GWj/t).

La sortie de l'évaluation de données nucléaires JEFF-3.1.1 en 2008 a conduit à une nette amélioration du bilan matière calculé par DARWIN en particulier pour les nucléides suivants :

Dans le futur, la qualification devra être étendue à des corps plus exotiques et assez mal connus tels que les produits d'activation suivants : Co 60, Be 10, Cl 36, Ca 41. Pour cela des programmes expérimentaux sont en cours de définition avec les industriels.

Le retour de la qualification vers les données nucléaires

Les études de qualification du formulaire DARWIN permettent de dégager des tendances concernant le degré de validité de certaines données nucléaires. À partir du résultat de la comparaison entre le calcul et l'expérience et en maîtrisant les incertitudes sur les modèles de calcul et les conditions de fonctionnement du réacteur, il est possible d'imputer à certaines données nucléaires l'essentiel de l'écart obtenu.

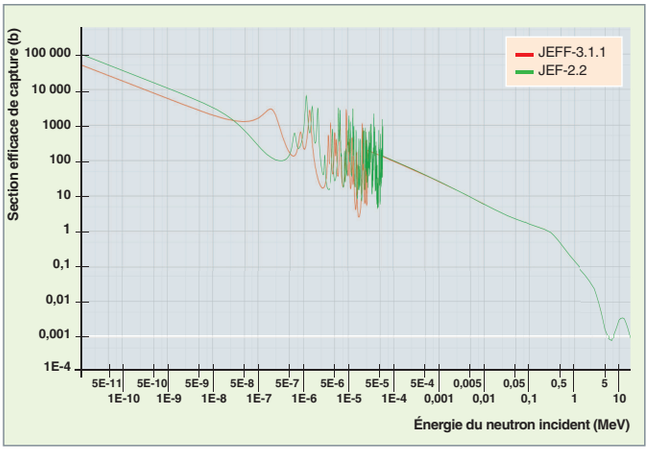


Fig. 150. Comparaisons des sections efficaces de capture de l'Europium 154 (en barns) dans les bibliothèques de données nucléaires JEFF-3.1.1 (rouge) et JEF-2.2 (vert).

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 227

U 236, Pu 242m, Am 242, Am 243, Cm 244, Cm 245, Nd 143, Sm 147, Sm 150, Sm 152, Gd 155, Eu 153, Eu 154, Eu 155.

Le calcul de la puissance résiduelle

Après l'arrêt d'un réacteur nucléaire, la décroissance radioactive des éléments formés au cours de l'irradiation du combustible engendre l'émission de rayonnements, sources de chaleur. Cette quantité de chaleur non négligeable est appelée « **puissance résiduelle*** ». L'évacuation de cette puissance thermique doit être assurée au niveau du réacteur mais aussi de l'ensemble des installations du cycle du combustible afin d'éviter la dégradation des structures de protection mises en place entre le combustible et son environnement.

Ces problèmes revêtent une grande importance dans les postes du cycle suivants :

- Au niveau du réacteur, immédiatement après un arrêt intempestif (comme par exemple après le séisme à Fukushima) ;
- pour l'ensemble des machines de transfert, d'emballage ou de transport des assemblages usés ;
- aux usines de traitement où la puissance thermique résiduelle pourrait provoquer une surchauffe des solutions de combustible avec évaporation et bouchage de l'installation ;
- à tous les postes de stockage d'assemblages irradiés ou de déchets radioactifs où il faut éviter une dégradation de l'objet stocké ou du conteneur.

Il est donc important de connaître le degré de fiabilité que l'on peut accorder à un calcul de la quantité « puissance résiduelle ».

Les figures 151 et 152 ci-après illustrent respectivement la contribution des actinides et des produits de fission à la puissance résiduelle exprimée en Watt par tonne de métal lourd initial (W/tMLi) d'un combustible UOx (enrichi à 4,5 % en U 235) pour un taux de combustion de 60 GWj/t en fonction du temps de refroidissement du combustible (calculs réalisés avec le formulaire DARWIN pour des temps de refroidissement supérieurs à 1 an).

Des travaux de qualification du calcul de la puissance résiduelle avec DARWIN ont été réalisés pour les temps de refroidissements longs, temps pour lesquels les postes du cycle concernés, vis-à-vis de la problématique chaleur résiduelle, sont le transport, le traitement, l'entreposage et le stockage. Ils consistent en l'interprétation de mesures calorimétriques d'assemblages combustible usés effectuées par la société SKB dans les locaux du centre de stockage centralisé de Suède. Un calorimètre a été spécialement conçu dans le but de réaliser des mesures de puissance résiduelle allant de 50 W à

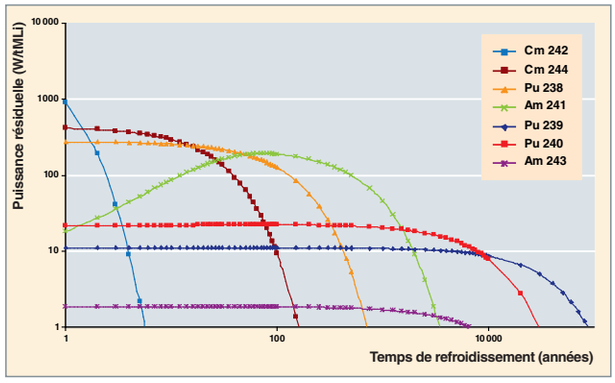


Fig. 151. Contribution des actinides à la puissance résiduelle dans un combustible UOx (enrichi à 4,5 %) pour un taux de combustion de 60 GWj/t.

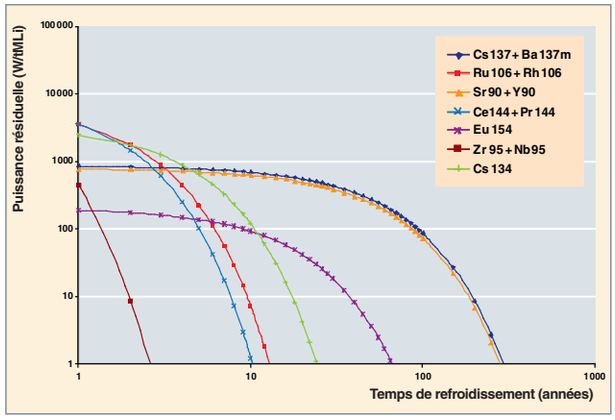


Fig. 152. Contribution des produits de fission à la puissance résiduelle dans un combustible UOx (enrichi à 4,5 %) pour un taux de combustion de 60 GWj/t.

1 000 W sur des assemblages de combustibles usés de type PWR et BWR avec une incertitude inférieure à 2 %.

Sur la base d'une trentaine de mesures, pour des assemblages PWR 17x17 et 15x15, DARWIN a été qualifié pour le calcul de la puissance résiduelle aux temps longs (entre 10 et 30 ans). Les écarts calcul/mesure montrent une légère sous-estimation du calcul de la puissance résiduelle (-2,2 % en moyenne) couverte néanmoins par l'incertitude associée (± 3,4 %)

Des études récentes ont également permis de montrer que pour les temps de refroidissement supérieurs à un an environ, les incertitudes sur les énergies et constantes de décroissance sont généralement faibles vis-à-vis des incertitudes sur la grandeur bilan matière. De plus, au-delà de 100 ans, la puissance résiduelle est essentiellement liée aux désintégrations α des actinides. Par conséquent la détermination de l'incertitude sur la puissance résiduelle au-delà de 100 ans est entièrement dépendante de la qualification du calcul du bilan matière des actinides concernés, notamment Pu 238, Pu 239, Pu 240, Am 241, Cm 242 (pour les MOx) et Cm 244.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 232

Des études sont menées depuis quelques années à la DEN afin de déterminer, voire de réduire les incertitudes sur le calcul de la puissance résiduelle en particulier aux temps courts. Elles sont plus particulièrement dédiées aux aspects sûreté liés à l'évacuation de cette puissance immédiatement après l'arrêt du réacteur. Selon les conséquences pour la sûreté, les ingénieurs sont amenés à ajouter 1, 2 voire 3 à la puissance résiduelle calculée, la marge étant d'autant plus grande que la gravité de l'accident est importante. Cette incertitude dépend des incertitudes élémentaires sur les données nucléaires (sections efficaces, rendements de fission, chaleur de désexcitation, période de chaque nucléide), des incertitudes sur les modèles de calcul et des incertitudes sur les conditions de fonctionnement du réacteur.

Dans cette perspective, on peut citer les deux actions suivantes :

- La première concerne le développement d'outils de propagation des incertitudes associées aux données nucléaires, via des méthodes probabilistes (plate-forme **URANIE*** de la DEN couplée au solveur d'évolution) ou déterministes. En parallèle des actions d'**amélioration de la connaissance** des données de décroissance et des rendements de fission de l'ensemble des nucléides intervenant dans le calcul de la puissance résiduelle sont en cours dans le cadre du développement de l'évaluation de données nucléaires JEFF3 ;

- La seconde action repose sur la réalisation d'une mesure intégrale fine de la puissance résiduelle. L'expérience MERCI a consisté à irradier un crayon combustible, de type REP, dans le réacteur expérimental OSIRIS (fig. 153) puis à mesurer par calorimétrie la puissance dégagée. La spécificité de cette expérience réside dans le fait qu'elle tient compte de l'ensemble des noyaux, actinides et produits de fission, contribuant à la puissance résiduelle contrairement aux expériences existantes anciennes (1970) et fondées uniquement sur des fissions élémentaires. De surcroît, les mesures ont débuté à un temps de refroidissement assez court, de l'ordre d'une vingtaine de minutes. Le paragraphe qui suit détaille cette expérience.

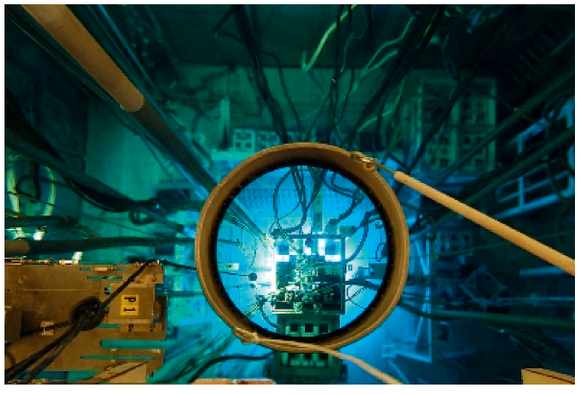


Fig. 153. Cœur d'OSIRIS dans lequel a été réalisée l'expérience MERCI.

La mesure de la puissance résiduelle : l'expérience MERCI

L'objectif de l'expérience MERCI est de mesurer la puissance résiduelle dégagée aux temps courts par un échantillon de combustible UO_2 de REP après arrêt du réacteur pour valider, voire réduire les incertitudes associées à cette grandeur.

Principe et difficultés de l'expérience

L'expérience MERCI (Mesure de l'Énergie Résiduelle d'un Combustible Irradié) consiste à irradier un crayon combustible dans le réacteur piscine OSIRIS (CEA/Saclay), et à mesurer par calorimétrie la puissance résiduelle dégagée. Ce principe présente un caractère innovant dans la mesure où il s'agit de la première mesure intégrale réalisée avec un combustible de type industriel (pastilles UOx employées pour les réacteurs électrogènes de type REP) dans des conditions de laboratoire. Cette expérience permet la connaissance de la puissance résiduelle dès 26 minutes de refroidissement après l'arrêt du réacteur, incluant toutes les évolutions subies par les différents nucléides présents dans le combustible (captures et transmutations).

La première difficulté de réalisation de l'expérience MERCI réside dans la phase de transfert entre le poste d'irradiation et le calorimètre, qui doit être réalisée le plus rapidement possible pour accéder à la mesure aux temps courts de refroidissement. La conception du calorimètre représente une autre difficulté importante en raison de la précision demandée sur la puissance thermique mesurée (1 %). Pour prendre en compte la composante de la puissance résiduelle transportée par le rayonnement *gamma*, il a été nécessaire d'inclure dans le calorimètre une enceinte en tungstène massif dans laquelle est placé le crayon combustible. Dans ces conditions, pour obtenir la valeur de la puissance résiduelle, il est nécessaire de corriger la mesure brute des fuites *gamma* résiduelles hors du calorimètre (de l'ordre de 4 %) et de prendre en compte les phénomènes d'inertie thermique. Afin que ces phénomènes soient du second ordre, passés les premiers instants de la mesure, une régulation extrêmement précise de la température (à +0,01 K) s'impose. Ces difficultés sont accrues par la situation du calorimètre, placé en cellule blindée. Ce calorimètre dénommé MOSAÏC a fait l'objet d'un dépôt de brevet.

Déroulement du projet

L'expérience MERCI a été retenue par EdF en 1998, en réponse à une recommandation de l'Autorité de Sûreté, demandant de conforter les valeurs de puissance résiduelle prises pour ses nouveaux projets de gestion combustible. Le projet s'est déroulé de 1999 à 2009. Les années 1999 à 2004

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 233

ont été consacrées à l'étude de faisabilité et au dimensionnement de l'expérience et du calorimètre. Le développement des appareils a été effectué de 2005 à 2007 et la phase expérimentale elle-même s'est déroulée en 2008.

De par son caractère à la fois très innovant et très technique, l'expérience MERCI a nécessité la mobilisation sur plusieurs années des compétences majeures de la Direction de l'Énergie Nucléaire (DEN) du CEA dans différents domaines (neutronique, thermique, thermohydraulique, mécanique, instrumentation, chimie…), portées par les outils de simulation (DARWIN2/PEPIN2, FAKIR, TRIPOLI-4®, APOLLO2), et reposant sur l'exploitation des principales installations de la DEN (OSIRIS, ATALANTE, LECI, Labos d'analyses). Le pilotage opérationnel de cet ensemble de compétences et de moyens, allant de la conception de l'expérimentation à sa réalisation en réacteur puis jusqu'à son interprétation fine, a permis de fédérer des équipes réparties dans huit unités et trois centres du CEA.

Caractéristiques techniques

- Le dispositif d'irradiation du crayon MERCI a été installé en périphérie du cœur dans la piscine du réacteur expérimental OSIRIS, à 10 cm du caisson du réacteur. Cette position a permis d'atteindre le taux de combustion spécifié (3 à 4 GWj/t) avec une durée d'irradiation acceptable (moins de deux mois). L'expérience ayant pour but la validation des codes de calcul et des données nucléaires, une attention toute particulière a été apportée à l'acquisition des paramètres physiques d'intérêt et à l'instrumentation (deux perches d'intégrateurs de doses pour la restitution du profil intégré, des collectrons donnant le flux neutronique en continu axialement et azimutalement, une chambre à fission pour des mesures de flux périodiques).

- Le calorimètre MOSAÏC (fig. 154) permet la mesure de la cinétique de décroissance de la puissance résiduelle d'un crayon combustible irradié placé dans un écran de tungstène massif absorbant le rayonnement γ dans une gamme de puissance très large allant de 300 W à 4 W. Ce calorimètre (voir figure 154) comporte une enceinte diphasique eau-vapeur à basse pression (0,026 bar absolu) permettant de maintenir constante (20 °C) la température de l'écran tungstène par évaporation. Cette enceinte diphasique est isolée de l'extérieur par une enceinte à vide poussé (10^{-3} Pa absolu) elle-même entourée d'un calorifuge en polyuréthane. Un condenseur situé dans l'enceinte à vide évacue la puissance. Le bilan enthalpique aux bornes de ce condenseur est l'image de la puissance résiduelle instantanée. Des termes du second ordre sont ajoutés à ce bilan pour prendre en compte les pertes thermiques et les stockages inertiels. Les pertes thermiques sont extrêmement limitées grâce à l'isolation thermique du calorimètre et à l'absence de gradient thermique entre l'appareil et l'ambiance de la cellule blindée.

Afin de minimiser les termes correctifs qui sont maximaux juste après introduction du crayon dans le calorimètre, ce dernier a été muni d'un dispositif d'introduction permettant d'optimiser la température du crayon au moment de son introduction. Ce calorimètre a fait l'objet d'un brevet en 2008.

Déroulement de l'expérience

- **Phase n°1 :** décembre 2007-mars 2008, irradiation du crayon en périphérie d'OSIRIS réalisée pendant 55 jours équivalents à pleine puissance (JEPP) à une puissance linéique moyenne par cycle évoluant entre 260 et 312 W/cm.

- **Phase n°2 :** le 17 mars 2008, transfert du crayon depuis son emplacement d'irradiation jusqu'au calorimètre placé en cellule chaude. Cette phase a mobilisé une équipe de 20 personnes du CEA et elle a duré 26 minutes tout en respectant l'ensemble des dispositions de sûreté et sécurité inhérentes à la manutention de combustible nucléaire irradié (fig. 155).

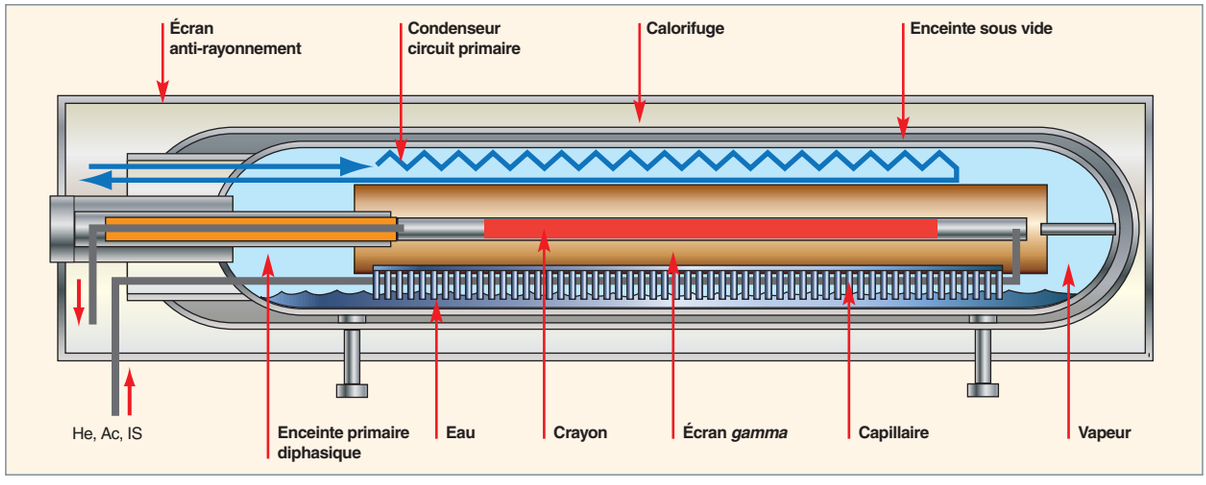


Fig. 154. Le calorimètre MOSAÏC.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 234

Fig. 155. L'expérience MERCI : un vrai travail d'équipe !

• **Phase n°3 :** mars-mai 2008, mesure de la puissance résiduelle avec le calorimètre MOSAÏC installé en cellule blindée pendant 49 jours. Ensuite, des examens post-irradiatoires de spectrométrie γ, neutronographie et des analyses chimiques ont été réalisés sur le crayon dans le but de caractériser son irradiation (détermination du taux de combustion).

Résultats obtenus

Le projet est aujourd'hui terminé au plan expérimental. L'analyse a mis en avant les résultats suivants :

• L'irradiation du crayon MERCI en périphérie d'OSIRIS a été effectuée dans le respect des conditions d'irradiation requises (durée et plage de puissance) et avec un fonctionnement correct de l'instrumentation (intégrateurs, collectrons et chambres à fission) ;

• la mesure calorimétrique (voir figure 156), qui présente une cinétique de décroissance de type exponentielle qualitativement conforme aux prévisions, a été obtenue avec la précision requise dans la gamme de 45 minutes à 60 jours après la chute des barres : ± 1% (les mesures acquises avant 45 minutes de refroidissement n'ont pu être exploitées en raison du comportement inertiel important du calorimètre) ;

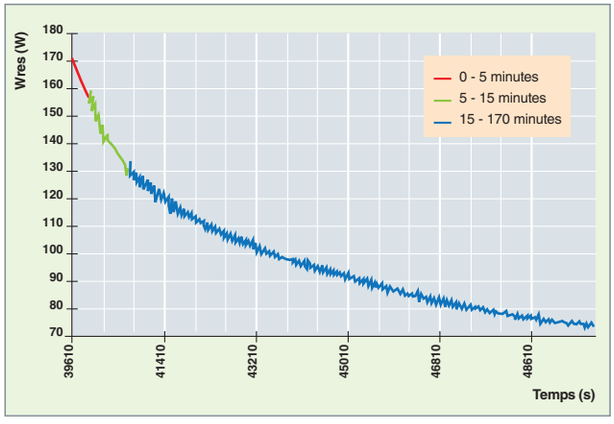


Fig. 156. Mesure de la puissance résiduelle en fonction du temps.

• les spectrométries *gamma* qualitatives et quantitatives et les analyses isotopiques nécessaires (U, Pu et indicateurs du taux de combustion Nd, Cs) ont été réalisées sur le crayon MERCI ;

• toutes les données expérimentales recueillies au cours de l'expérience, à l'aide de l'instrumentation et de l'expérience MERCI ont pu être exploitées.

Le bilan scientifique du programme apparaît particulièrement satisfaisant avec une validation des principes de base et des solutions techniques originales retenues et surtout l'atteinte des objectifs en termes de durée du transfert et de précision de la mesure pour le calorimètre diphasique.

L'interprétation à l'aide des codes de calcul de la puissance résiduelle a montré des écarts calcul/mesure de +0.5 % à +6 % inclus dans l'intervalle à 2 écarts-types, pour les temps de refroidissement de 45 minutes à 2 jours, et des écarts autour de +1 % pour les temps de refroidissement de 45 minutes à 42 jours.

D'ores et déjà des exploitants ont exprimé un fort intérêt pour le projet : d'abord EDF qui a cofinancé le programme dès l'origine, mais aussi plus récemment GDF-SUEZ.

Enfin, une deuxième expérience est envisagée, portant sur un crayon MOx, justifiée par une contribution plus importante des noyaux lourds à la puissance résiduelle. En outre, une poursuite du programme MERCI est envisagée sur des tronçons de crayon irradiés en REP (UOx, MOx).

Bénédicte Roque,
Département d'étude des réacteurs
Danièle Gallo et Stéphane Bourganel
Département de modélisation des systèmes et des structures

Bibliographie

San-Felice (L.), Eschbach (R.), Bourdot (P.), Tsilanizara (A.), Huynh (T.D.), Ourly (H.), "Experimental Validation Of The Darwin2.3 Package For Fuel Cycle Applications", *PHYSOR 2012 – Advances in Reactor Physics – Linking Research, Industry, and Education*, Knoxville, Tennessee, USA, April 15-20, 2012, on CD-ROM, American Nuclear Society, LaGrange Park, IL, 2010.

Tsilanizara (A.), Diop (C.M.), Nimal (B.), Detoc (M.), Lunéville (L.), Chiron (M.), Huynh (T.D.), Brésard (I.), Eid (M.), Klein (J.C.), Roque (B.), Marimbeau (P.), Garzenne (C.), Parize (J.M.), Vergne (C.), "DARWIN : An Evolution Code System for a Large Range Application", *Journal of Nuclear Science and Technology*, Supplement 1, pp 845-849, March 2000.

Jaboulay (J. C.) and Bourganel (S.), "Analysis Of Merci Decay Heat Measurement For PWR UO2 Fuel Rod", *Nuclear Technology*, vol. 177, pp. 73-82, Janv. 2012.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 235

La criticité

La manipulation de matières fissiles dans les installations autres que les réacteurs nucléaires (en amont et en aval du **cycle du combustible***), en quantité supérieure à une certaine valeur (**masse critique***), peut conduire au déclenchement d'une **réaction de fission en chaîne*** incontrôlée, en l'absence de tout signe précurseur : l'**accident de criticité***. Celui-ci se traduit par une émission intense de rayonnements neutroniques et *gamma*, ainsi qu'un échauffement important de la matière **fissile***, et un relâchement de **produits de fission*** radioactifs gazeux et d'aérosols (risque d'irradiation et de contamination).

Le retour d'expérience sur les accidents de criticité survenus dans les laboratoires et les usines [1] montre que les masses de matières fissiles mises en jeu peuvent être faibles (à peine plus d'1 kg de plutonium pour certains d'entre eux). Quant à la durée d'un accident de criticité, elle peut se réduire à un « flash » de l'ordre de la milliseconde, comme durer des dizaines d'heures lorsque les conditions de dispersion rapide de la matière lors du premier pic de puissance ne sont pas réunies.

Les installations du cycle sont en général peu propices au maintien de conditions sur-critiques pendant des temps longs : dès que la criticité est atteinte se produit un pic de puissance qui soit tend à disperser la matière, ce qui entraîne un retour définitif à des conditions sous-critiques, soit conduit à des arrêts et redémarrages successifs de la réaction divergente, à intervalles de temps plus ou moins longs, en fonction des caractéristiques du milieu environnant (échanges thermiques, écoulements…). Pour ces raisons, les énergies mises en œuvre lors d'un accident de criticité ne sont pas suffisantes pour entraîner des dommages matériels importants (l'énergie produite lors d'un accident de criticité est entre cent et un million de fois inférieure à celle estimée lors de l'accident de Tchernobyl) et les conséquences pour l'environnement sont faibles. Malgré cela, les conséquences de tels accidents sont généralement désastreuses pour les installations (peu de redémarrage des installations après l'accident) et l'exposition à l'irradiation des opérateurs travaillant à proximité du siège de l'accident peut être importante, voire mortelle.

Depuis 1945, vingt-deux accidents de criticité ont été recensés dans le monde dans des installations du cycle du combustible [1]. Ils ont entraîné le décès de neuf personnes et une irradiation significative de trente-sept autres personnes. Le dernier accident de criticité a eu lieu au Japon, en 1999 (accident de Tokaï Mura. Il est décrit dans la suite de ce chapitre). Il a duré 20 heures.

La prévention du risque de criticité fait appel à des principes de base simples, mais qui nécessitent des études rigoureuses menées par des spécialistes de cette discipline, une vigilance constante de tous les acteurs de l'installation et une implication forte des experts en criticité dans les installations nucléaires.

La criticité : une question de bilan neutronique*

Le facteur de multiplication effectif

Les conditions de criticité d'un milieu fissile (l'U 235 par exemple) dans lequel se déroulent des réactions de fission résultent du bilan de production de neutrons par réaction de fission et de leur perte par capture sans fission ou par fuite (fig. 157).

Ainsi, l'état de ce milieu se caractérise par le **facteur de multiplication effectif***, k_{eff}, qui reflète la capacité de multiplication des **neutrons*** dans le milieu fissile. Il est défini

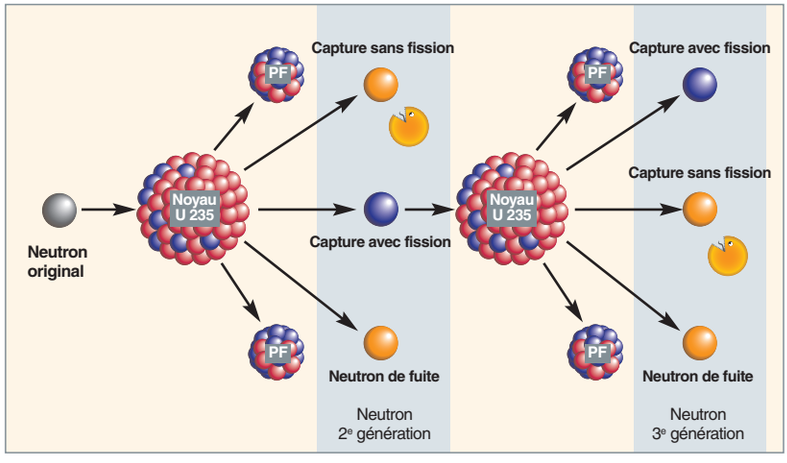


Fig. 157. Bilan neutronique consécutif à une réaction de fission entre un neutron et un noyau d' U 235.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 236

comme suit :

$$k_{eff} = \frac{Production}{Absorption + Fuites}$$

Si $k_{eff} < 1$, la réaction en chaîne est inhibée. Il s'agit de l'état **sous-critique*** qui caractérise l'état sûr recherché dans le fonctionnement des installations nucléaires, autres que les réacteurs.

Si $k_{eff} = 1$, la réaction en chaîne est maîtrisée. C'est l'état juste critique pour lequel la population des neutrons reste constante, état visé dans les réacteurs nucléaires en fonctionnement et qu'il convient de ne jamais atteindre dans les autres installations nucléaires ou dans les transports de matières fissiles.

Si $k_{eff} > 1$, une réaction en chaîne de fission incontrôlée démarre, entraînant une production importante de neutrons non compensée par l'absorption des neutrons par le milieu ou leur fuite de ce dernier. Il s'agit de l'état sur-critique conduisant à l'accident de criticité.

Dans la démarche de prévention pour éviter un accident de criticité, les évaluations sont effectuées de telle manière, qu'à chaque instant, le facteur multiplicatif, k_{eff} d'une unité ou d'un poste de travail soit inférieur à 1, avec une marge de sécurité suffisante.

Outre les différentes **sections efficaces*** (fission, capture sans fission, diffusion…), plusieurs paramètres (masse, formes géométriques, matériaux…) influent directement sur les différents termes du bilan neutronique. Pour illustrer les différents phénomènes mis en œuvre, un cas d'application basé sur l'accident de criticité de Tokaï Mura est également proposé dans la suite. La démarche du criticien consiste à « jongler » avec ces paramètres, afin que la somme des neutrons absorbés dans la matière fissile et des neutrons de fuite soit largement supérieure au nombre de neutrons produits dits « utiles » : ce sont ceux qui produisent des réactions de fission, contribuant ainsi à augmenter le facteur multiplicatif k_{eff} du système, en :

- Limitant, autant que possible, les réactions de fission, sources de neutrons « utiles » ;
- favorisant, autant que possible, la disparition des neutrons par fuite hors du milieu fissile ou leur absorption par capture stérile.

Il est à noter également que l'évaluation du k_{eff} d'un système, rarement isolé de son environnement, doit prendre en compte :

- Le fait qu'un neutron qui a fui hors du système peut être diffusé par l'environnement et revenir dans le système avec une probabilité non nulle (réflexion des neutrons) ;
- le fait que le système peut avoir dans son environnement d'autres systèmes contenant de la matière fissile dans lesquels les neutrons de fuite peuvent pénétrer et ainsi contribuer à un apport de neutrons susceptibles d'y provoquer des réactions de fission (interaction neutronique).

Ces différents phénomènes sont présentés ci-après.

La production de neutrons « utiles »

La masse de matière fissile

La production de neutrons croît avec le nombre de noyaux fissiles du milieu et donc la masse de matière fissile (augmentation de la quantité totale d'uranium ou de l'**enrichissement*** de l'uranium en **isotope*** fissile U 235). En effet, la probabilité de rencontrer un noyau fissile et de provoquer une réaction de fission devient alors plus importante (fig. 158).

Limiter la masse de matière fissile ou l'enrichissement de l'uranium contribue à abaisser le facteur multiplicatif k_{eff} du système ; limiter l'enrichissement en uranium permet d'augmenter les masses critiques.

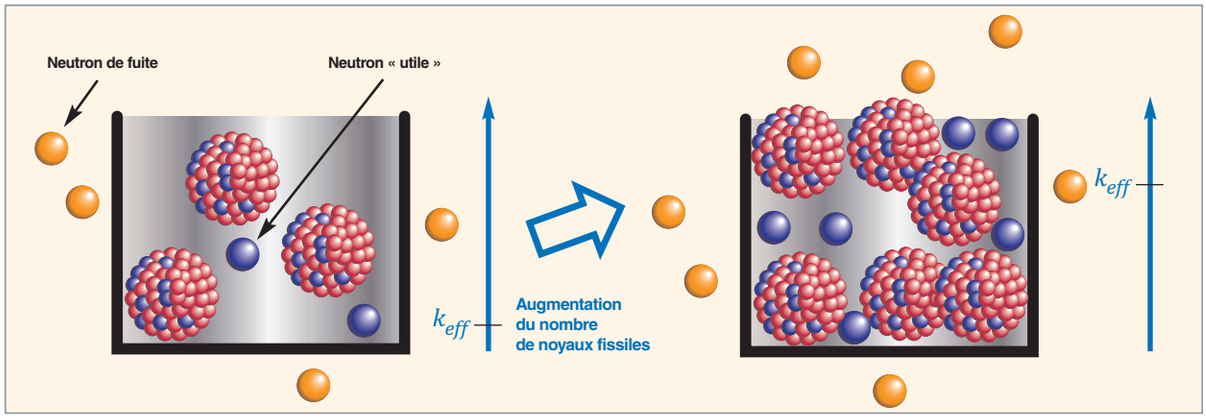


Fig. 158. Augmentation de la production de neutrons utiles par augmentation du nombre de noyaux d'U 235.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 237

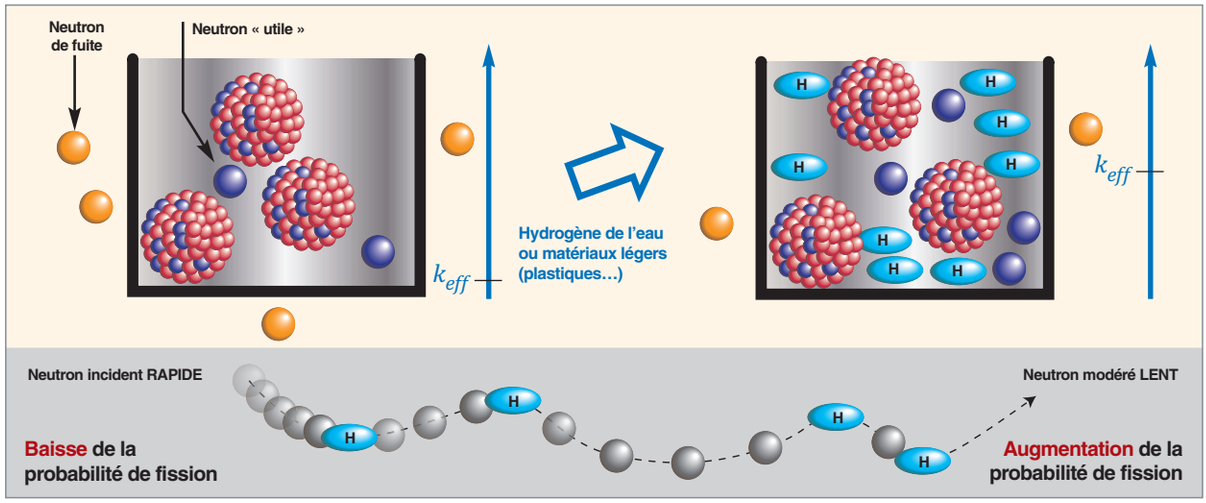


Fig. 159. Augmentation de la production de neutrons utiles par modération des neutrons par l'hydrogène de l'eau ou des matières plastiques.

Masses d'uranium à sec de densité 18,93 (sphère nue) conduisant à un k_{eff} de 1 :
- **4 045 kg** d'U enrichi à **10 % en isotope 235** ;
- **53 kg** d'U enrichi à **93,5 % en isotope 235**.

La modération des neutrons

La probabilité pour un neutron d'être absorbé par un noyau fissile et de provoquer une réaction de fission est d'autant plus importante que l'énergie du neutron incident est faible, c'est-à-dire pour des **neutrons lents***, **modérés*** ou **thermiques***. La **modération*** est le phénomène de ralentissement des neutrons par collisions successives sur des noyaux **modérateurs***. Plus les noyaux sont légers (hydrogène de l'eau ou de matières plastiques, carbone…), plus la modération des neutrons est efficace (fig. 159). En effet, pour obtenir un neutron lent, il faut 18 chocs dans l'eau, 110 chocs dans le graphite, 2 000 chocs dans le plomb ; c'est pourquoi pratiquement tous les accidents de criticité dans les installations du cycle du combustible ont eu lieu avec des solutions de matières fissiles.

Ainsi, les réactions de fission sont souvent favorisées par tout processus pouvant ralentir les neutrons.

Limiter la quantité de matériaux modérateurs dans la matière fissile peut contribuer à abaisser le facteur multiplicatif k_{eff} du système. Dans les études, l'eau est généralement prise en considération comme élément modérateur.

Masses d'uranium de densité 18,93 enrichi à 93,5 % en isotope 235 (sphère nue) conduisant à un k_{eff} de 1 :
- **53 kg** d'U en l'**absence de modération** (à sec) ;
- **1,5 kg** d'U total à l'**optimum de modération** (défini comme la quantité d'eau qui conduit à la masse critique la plus faible).

La perte des neutrons par absorption sans fission (capture stérile)

Les noyaux ont une probabilité plus ou moins importante d'absorber les neutrons (capture sans fission). Les neutrons absorbés sont ainsi définitivement perdus pour la production de neutrons par réaction de fission (fig. 160, page suivante). On parle d'empoisonnement, de **poisons*** neutroniques ou de neutrophages. Les poisons usuellement rencontrés sont :

- L'hydrogène qui, bien qu'il favorise les réactions de fission à faible dilution de par son effet modérateur, devient un poison lorsqu'il est présent en quantités importantes dans la matière fissile du fait de la capture stérile ;

- l'isotope 238 de l'uranium et l'isotope 240 du plutonium qui ont des probabilités de capture des neutrons sans fission importantes pour certaines valeurs d'énergie des neutrons ;

- le bore, le cadmium, le gadolinium et le hafnium qui ont également des probabilités de capture des neutrons sans fission importantes et qui sont utilisés comme poisons dans les solutions de matières fissiles et dans les structures de certains équipements ;

- certains produits de fission stables présents dans les combustibles irradiés dans les réacteurs…

L'ajout ou la prise en compte de poisons neutroniques dans la matière fissile ou dans son environnement contribue à abaisser le facteur multiplicatif du système.

Masses d'uranium de densité 18,93 enrichi à 93,5 % en isotope 235 (sphère nue) conduisant à un k_{eff} de 1 :
- **1,5 kg** d'U à l'optimum de modération ;
- **4 kg** d'U à l'optimum de modération en présence de 1 g/l de bore.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 238

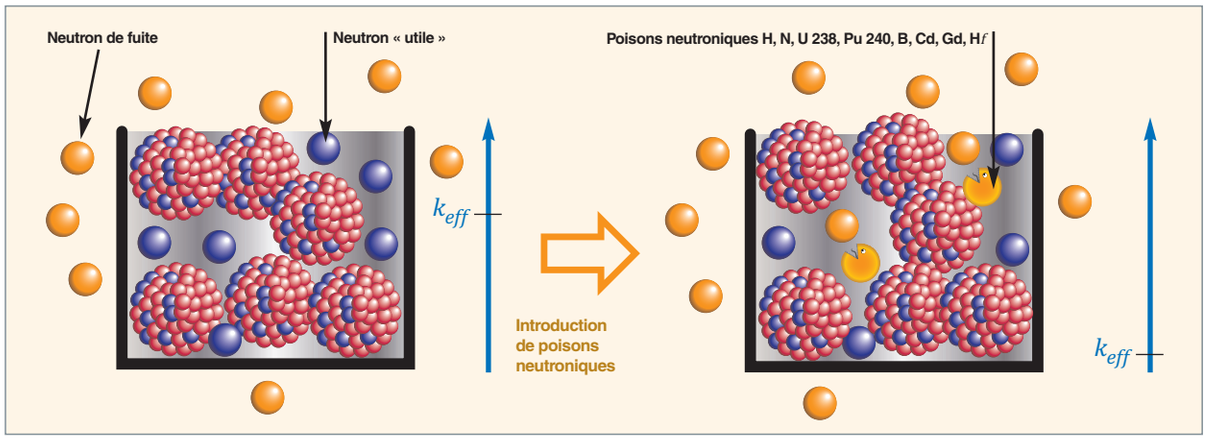


Fig. 160. Augmentation de l'absorption des neutrons par capture sans fission suite à l'introduction d'un poison neutonique dans la solution d'U 235.

La perte des neutrons par fuite du milieu fissile

Diminution de la densité de la matière fissile

Dans un milieu sec ou faiblement modéré, plus la densité du milieu fissile est forte, plus la probabilité pour un neutron d'avoir une interaction avec un noyau fissile, et donc de provoquer une réaction de fission, est élevée (fig. 161).

Limiter la densité de la matière fissile permet d'augmenter les masses critiques.

Masses d'uranium enrichi à 93,5 % en isotope 235 à sec (sphère nue) conduisant à un k_{eff} de 1 :

53 kg d'U	**105 kg** d'U	**3 093 kg** d'U
(métal)	(pastille frittée)	(poudre)
densité 18,93	**densité 10,96**	**densité 2**

La géométrie

Plus la surface extérieure du milieu fissile est importante, plus la proportion de neutrons traversant cette surface (fuyant) sera importante. Ainsi, les formes et les dimensions géométriques favorisent plus ou moins la fuite des neutrons du milieu fissile.

D'une manière générale, la diminution des dimensions géométriques, à masse constante, augmente la probabilité de fuite du neutron du milieu fissile sans que celui-ci n'ait pu provoquer de réactions de fission.

Dans certains cas, ces fuites peuvent être suffisamment importantes pour assurer l'absence de risque de criticité d'un équipement (caractérisé par une valeur de k_{eff} inférieure à 1), quelles que soient la modération et la quantité de matière fissile. On parle d'équipements de géométrie sûre (fig. 162).

Jouer sur la géométrie (formes et dimensions) du système peut contribuer à abaisser le facteur multiplicatif du système (fig. 163). La sphère, présentant la surface la plus faible, favorise le moins, la fuite des neutrons, avantageant ainsi la production de neutrons par réaction de fission.

Masses d'uranium de densité 18,93 enrichi à 93,5 % en isotope 235 à sec conduisant à un k_{eff} de 1 :

61 kg d'U	**58 kg** d'U	**53 kg** d'U
forme	forme	forme
cubique	**orthocylindrique**	**sphérique**

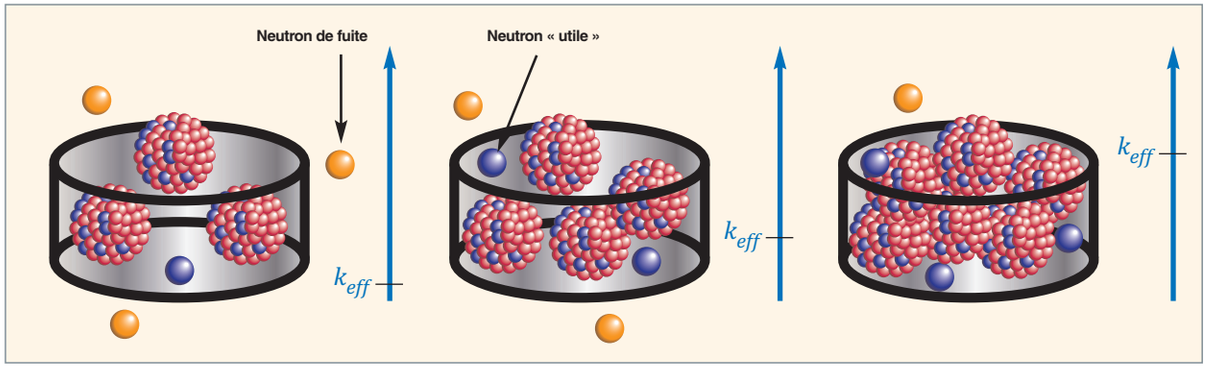


Fig. 161. Limiter la densité de matière fissile permet d'augmenter les masses critiques.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 239

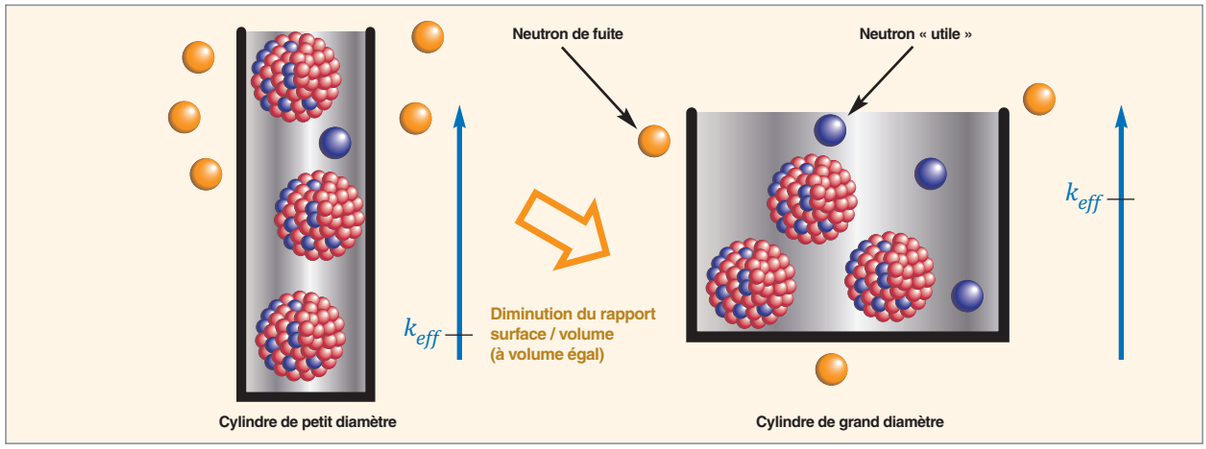


Fig. 162. Diminution des neutrons de fuite en diminuant le rapport surface / volume des équipements contenant de l'U 235.

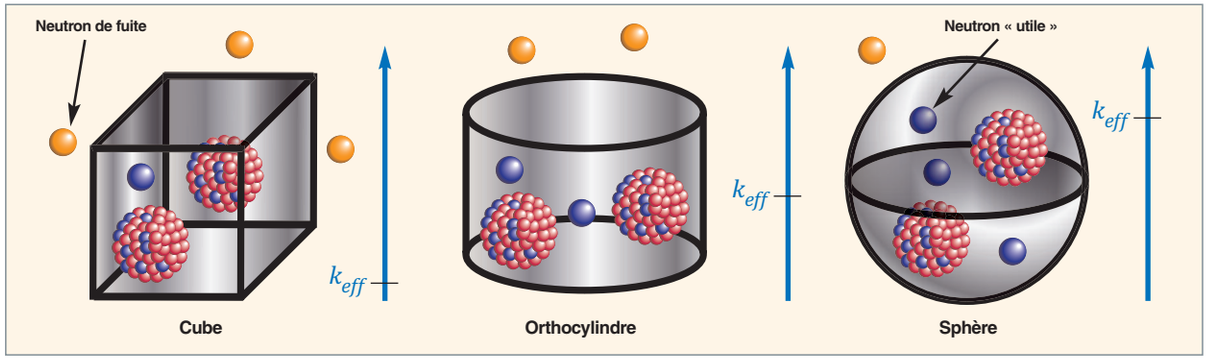


Fig. 163. Augmentation du k_{eff} d'un équipement en fonction de sa géométrie à masse et volume constants.

L'apport de neutrons par réflexion ou interaction

La réflexion

La fuite des neutrons hors du système est rarement totale : une partie des neutrons qui s'échappent du milieu fissile peut revenir vers celui-ci (et donc participer à la production de neutrons utiles), après diffusion dans les matériaux environnants : matériaux de structure, circuit de caloporteurs, cloisons, murs, plafond, machines, personnels… On parle de réflexion des neutrons de fuite vers le milieu fissile (fig. 164). Certains matériaux ont des propriétés plus ou moins réflectrices, qui varient suivant leur composition chimique, leur quantité et leur proximité par rapport à la matière fissile.

Dans les études, l'eau est généralement prise en considération comme élément réflecteur ; toutefois, certains matériaux sont plus réflecteurs que l'eau, comme le béton ou le plomb par exemple.

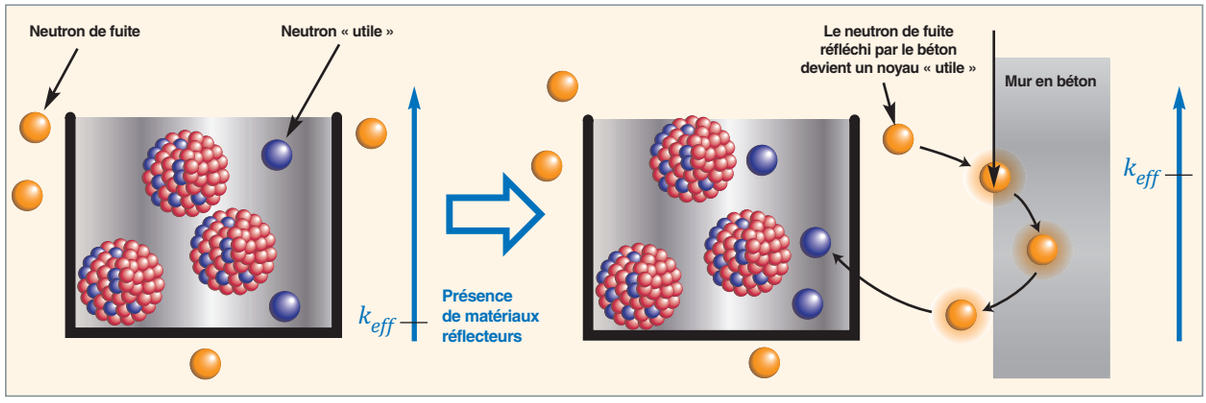


Fig. 164. Réflexion des neutrons de fuite dans les matériaux environnant les équipements contenus de l'U 235.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 240

Masses d'uranium de densité 18,93 enrichi à 93,5 % en isotope 235 à sec, conduisant à un k_{eff} de 1 :

53 kg d'U sphère nue	**24 kg** d'U entourée de 20 cm d'**eau**	**21 kg** d'U entourée de 60 cm de **béton**	**22 kg** d'U entourée de 25 cm de **plomb** et 20 cm d'**eau**

Placer des matériaux peu réflecteurs à proximité de la matière fissile ou éloigner les matériaux réflecteurs de la matière fissile peut contribuer à abaisser le facteur multiplicatif k_{eff} du système.

L'interaction neutronique

Lorsque, dans une installation, plusieurs équipements contenant de la matière fissile sont en vis-à-vis, une partie des neutrons quittant un équipement peut pénétrer et interagir avec la matière fissile de l'autre équipement situé à proximité (fig. 165). On parle d'interactions neutroniques entre les équipements. Elles augmentent le facteur multiplicatif k_{eff} de l'ensemble de deux équipements, en augmentant la production de neutrons utiles dans chacun des équipements.

L'interaction entre les deux équipements peut être atténuée par l'interposition d'un écran neutrophage (fig. 166) ou l'éloignement l'un de l'autre (si cet éloignement est suffisamment important, les deux équipements peuvent être considérés comme isolés neutroniquement, c'est-à-dire que le k_{eff} de l'ensemble des équipements correspond au k_{eff} le plus élevé des deux équipements).

Influence des différents phénomènes physiques sur la valeur de la masse critique

Le tableau 29 montre l'influence des différents phénomènes physiques sur la masse critique de l'uranium (k_{eff} = 1).

Dans les études de prévention du risque de criticité, lorsque les conditions d'exploitation le permettent, les valeurs de masses critiques considérées sont celles obtenues sous forme de sphère, à l'optimum de modération, en réflexion par de l'eau (éventuellement par du béton ou du plomb si nécessaire).

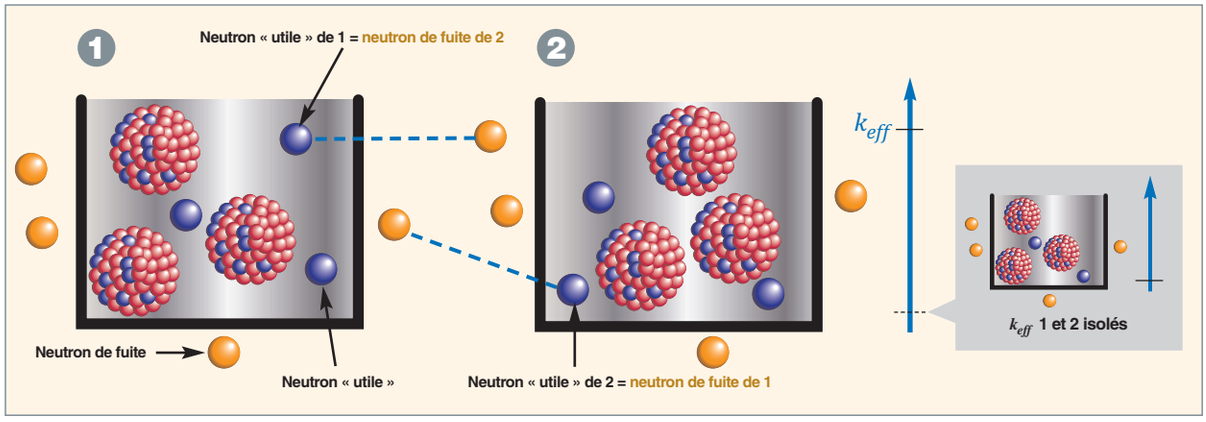


Fig. 165. Interactions neutroniques favorisant la production de neutrons utiles dans les équipements 1 et 2 contenant de l'U 235.

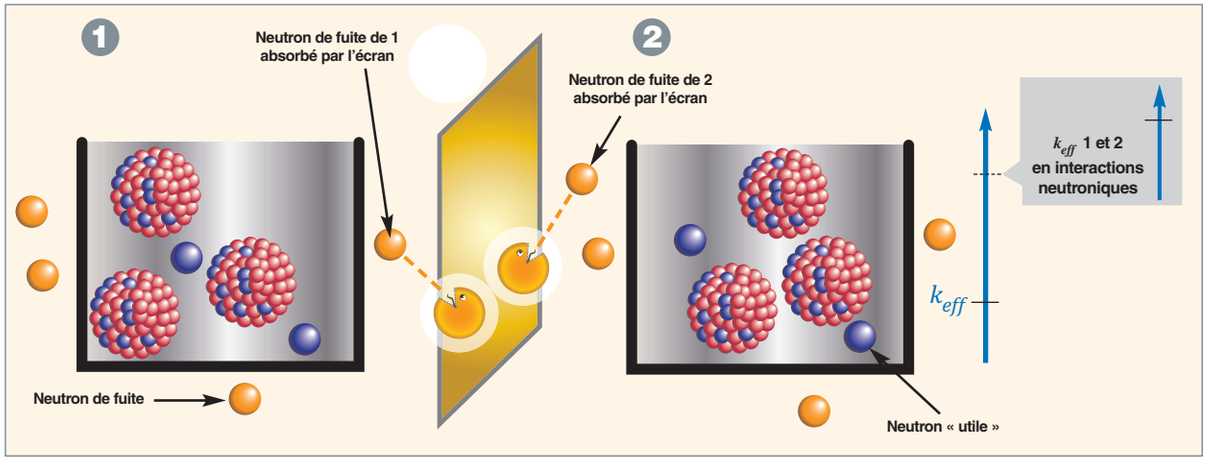


Fig. 166. Diminution des interactions neutroniques par interposition d'un écran neutrophage entre les équipements 1 et 2 contenant de l'U 235.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 241

Tableau 29

Masses d'uranium enrichi à 93,5 %* en isotope 235 conduisant à un k_{eff} de 1, sous forme de sphère

		Métal	Fritté	Poudre
Nue	**Sec**	53 kg / 4 045 kg* Orthocylindre : 58 kg Cube : 61 kg	105 kg	3 093 kg
	Optimum de modération**	1,5 kg Empoisonné par 1 g/l de bore : 4 kg		
Entourée de 20 cm d'eau	**Sec**	24 kg	45 kg	619 kg
	Optimum de modération**		843 g	
Entourée de 60 cm de béton	**Sec**	21 kg	36 kg	235 kg
	Optimum de modération**		749 g	
Entourée de 25 cm de plomb et 20 cm d'eau	**Sec**	22 kg	40 kg	296 kg
	Optimum de modération**		614 g	

* sauf mention contraire pour laquelle l'uranium est enrichi à 10 % en isotope 235
** l'optimum de modération ne dépend pas de la densité de la matière fissile

Lorsque ces valeurs sont trop pénalisantes, des calculs de k_{eff} pour des configurations en 3 D (modélisation d'un équipement particulier et de son implantation, études de l'influence des interactions neutroniques entre différents équipements d'une cellule…) sont réalisés.

Les études de sûreté-criticité

Les modes de contrôle de la criticité

Le paragraphe intitulé « La criticité : une question de bilan neutronique » montre qu'il existe une très grande variété de paramètres ayant un impact sur l'état de criticité d'un système contenant des matières fissiles, et donc en pratique, une grande variété de méthodes pour maintenir ce système dans un état sous-critique. Dans le langage des criticiens, on parle de « modes de contrôle de la criticité ». Il s'agit d'imposer une limite à un paramètre de criticité (ou à plusieurs d'entre eux) : la masse de matière fissile, la géométrie de la matière fissile, la concentration en matière fissile des solutions, la modération ou l'empoisonnement.

Des codes de neutronique (voir le *supra*, p. 125-142) permettent de calculer la valeur de k_{eff} d'un système en fonction de ces paramètres. Souvent, les résultats de ces calculs sont transcrits en « normes » donnant la masse et le volume sous forme sphérique, le diamètre de cylindre de hauteur infinie ou l'épaisseur de plaque de section infinie pour un système critique ou sous-critique avec une marge de sécurité déterminée.

La Règle Fondamentale de Sûreté N°I.3.c

La démarche de **sûreté nucléaire*** (d'une façon générale) s'appuie, en France, sur les principes de la **défense en profondeur*** : tout mettre en œuvre pour éviter l'incident (prévention), disposer de moyens permettant de détecter toute anomalie pouvant conduire à un incident (surveillance), prévoir la mise en œuvre de moyens permettant de limiter les conséquences d'un éventuel accident et circonscrire et arrêter l'accident (limitation des conséquences). Tous les risques d'origine nucléaire ou pouvant avoir des conséquences « nucléaires » sont appréhendés de cette façon. Toutefois, en cas d'accident de criticité, celui-ci n'ayant aucun signe précurseur, il est pratiquement impossible de le détecter tant que le k_{eff} du système est strictement inférieur à 1 et donc de l'anticiper… En effet, tant que le k_{eff} est inférieur 1, la population de neutrons est négligeable et il est pratiquement impossible de détecter l'accident de criticité avant le passage en situation critique. C'est pourqu la sûreté-criticité s'appuie essentiellement sur la prévention.

La Règle Fondamentale de Sûreté (RFS N° I.3.c [2]), émise par l'**autorité de sûreté***, constitue une référence méthodologique pour la prévention du risque de criticité, aussi bien pour les concepteurs que pour les exploitants nucléaires et les experts en criticité. Elle définit le domaine d'application des différents modes de contrôle de la criticité et explicite également les contraintes de conception, d'exploitation ou administratives qui leur sont associées. Elle précise aussi comment déterminer la limite du mode de contrôle de la criticité, compte tenu de la détermination du milieu fissile de référence. Celui-ci est le milieu qui, parmi tous ceux qui peuvent être rencontrés dans une unité, dans les conditions normales et anormales de fonctionnement, conduit aux limites les plus faibles en raison de sa teneur en matière fissile, de sa composition et de sa loi de dilution (nature physico-chimique de la matière fissile, composition isotopique, densité, modération).

Les études de prévention du risque de criticité sont alors menées sur la base de cette méthodologie, dans l'esprit du concept de défense en profondeur, mais aussi du principe de

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 242

double défaillance [2] qui stipule que l'installation doit être conçue et exploitée de telle sorte que :

- « Un accident de criticité » ne doit en aucun cas découler d'une seule anomalie : défaillance d'un composant, d'une fonction, erreur humaine (non-respect d'une consigne, par exemple), situation accidentelle (incendie, par exemple)… ;

- si un accident de criticité peut découler de l'apparition simultanée de deux anomalies, il sera alors démontré que :
  - les deux anomalies sont rigoureusement indépendantes ;
  - la probabilité d'occurrence de chacune des deux anomalies est suffisamment faible ;
  - chaque anomalie est mise en évidence à l'aide de moyens de surveillance appropriés et fiables, dans un délai acceptable permettant l'intervention.

Les codes de calcul de neutronique utilisés pour les études de criticité

L'évaluation des conditions de criticité des installations du cycle du combustible nucléaire et des emballages de transport de matières fissiles passent, avant tout, par l'étude du comportement de la population neutronique et le traitement des équations de la neutronique, en particulier celle du **transport*** des neutrons dans la matière afin :

- D'évaluer la valeur du k_{eff} pour des configurations déterminées par calcul 3 D ;

- définir les valeurs des paramètres de criticité déterminées par calcul 1 D.

Pour cela, les analyses de prévention du risque de criticité s'appuient sur les conclusions des notes de calcul de criticité présentant les valeurs calculées à l'aide de codes de neutronique.

En France, les calculs sont usuellement réalisés avec le formulaire **CRISTAL*** [3]. Il s'agit d'un ensemble intégré de logiciels de calcul de sûreté-criticité développés et qualifiés dans le cadre d'une collaboration entre l'IRSN, AREVA et le CEA, en tenant compte des besoins relatifs à l'ensemble des applications envisageables. Les dernières évolutions ont eu pour objectif de modéliser l'usure du combustible (disparition des noyaux d'uranium et de plutonium et apparition de nouveaux actinides et de produits de fission qui ont une influence très favorable à la sous-criticité grâce à leurs propriétés neutrophages) pour prendre en compte le ***« crédit burn-up* »*** qui est la marge de réactivité due à la disparition de la matière fissile et la formation de ces corps. Cette modélisation est réalisée à l'aide du couplage avec les codes **DARWIN*** ou **CÉSAR***.

Le formulaire CRISTAL (fig. 167) comprend :

- Des bibliothèques de données nucléaires (essentiellement basées sur l'évaluation européenne **JEFF***), contenant des informations de base communes à tous les calculs (**sections efficaces***, paramètres de **résonance***, **rendement de fission***, **période de décroissance radioactive***…) ;

- des procédures validées et qualifiées (pour la voie standard) ;

- des codes de calcul spécifiques ;

- des outils d'interface (pour la voie standard).

L'architecture générale du formulaire CRISTAL est organisée en deux voies de calcul qui exploitent les données nucléaires communes :

- La « voie standard » qui met en œuvre une formulation à plusieurs groupes d'énergie des sections efficaces (sections efficaces multigroupes) et qui permet :
  - des calculs probabilistes multigroupes avec le logiciel de calcul **MORET5*** utilisant des bibliothèques de sections efficaces provenant du code déterministe **APOLLO2*** pour la détermination du k_{eff} pour des configurations en 3D,
  - des calculs déterministes avec le logiciel de calcul **APOLLO2*** (calculs par la méthode dite intégro-différentielle ou S_N) pour la détermination du ou de dimensions géométriques pour un k_{eff} donné (configurations 1D) ;

- la « voie de référence ou ponctuelle» fondée sur le code Monte-Carlo ponctuel **TRIPOLI-4®***.

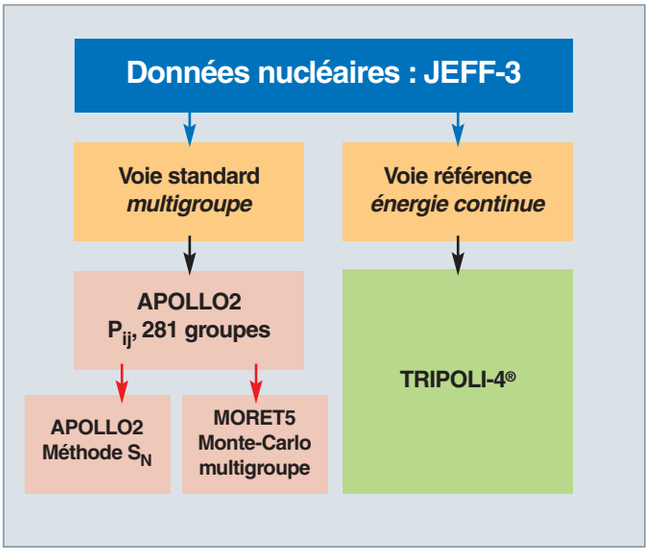


Fig. 167. Synoptique simplifié du formulaire CRISTAL dans sa version 2.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 243

La criticité dans les boîtes à gants

Il s'agit de déterminer pour ce type d'opérations :
- Le milieu fissile de référence ;
- le ou les modes de contrôle de la criticité ;
- la ou les limites qui leur sont associées ;
- les dispositions mises en œuvre dans l'installation pour garantir ces limites.

Considérons, par exemple, une installation nucléaire pour laquelle un opérateur doit manipuler, dans une boîte à gants, des tronçons de combustible (pastilles frittées) d'oxyde mixte d'uranium et de plutonium de différentes isotopies, c'est-à-dire, que l'enrichissement en U 235 est variable par rapport à l'U 238, que la teneur en isotope Pu 239 est variable par rapport aux autres isotopes du plutonium (Pu 240, Pu 241 et Pu 242) et que le rapport U/(U + Pu) est variable.

Détermination du milieu fissile de référence et du mode de contrôle de la criticité

La RFS I.3.c [2] indique que pour les unités mettant en œuvre de faibles quantités de matières fissiles, ce qui est souvent le cas pour les boîtes à gants, le mode de contrôle de la criticité le plus approprié est la limitation de la masse de matière fissile à l'ensemble de la boîte à gants (BàG) [fig. 168].

Le milieu fissile de référence est le plutonium, sous forme métallique, pur en isotope 239 (100 % en Pu 239), de densité maximale théorique 19,86. En effet, ce milieu est « enveloppe » de l'ensemble des milieux fissiles mis en œuvre dans l'installation (combustibles d'oxyde d'uranium et combustible d'oxyde mixte d'uranium et de plutonium) puisqu'il conduit aux valeurs de masse critiques les plus faibles.

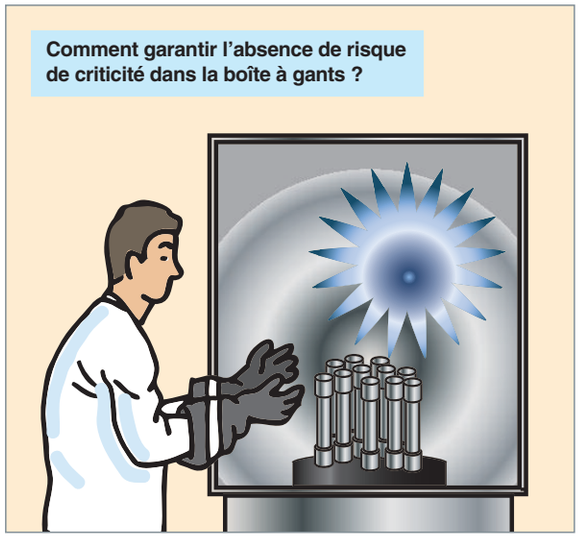


Fig. 168. Opérateur manipulant des tronçons de combustibles d'uranium et de plutonium dans une boîte à gants (BàG).

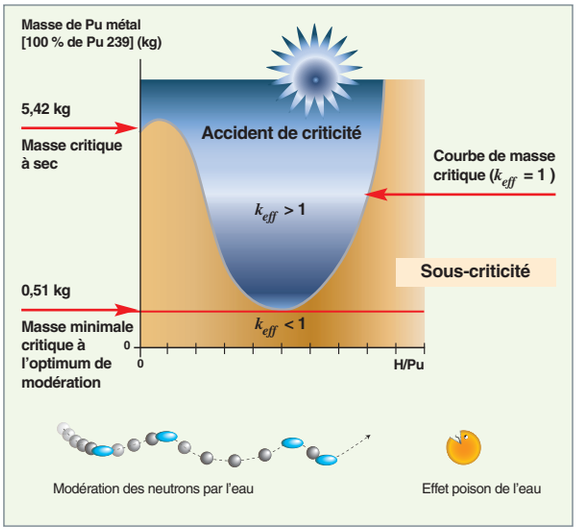


Fig. 169. Masse critique (k_{eff} = 1) du plutonium, sous forme métallique, pur en isotope Pu 239, de densité 19,86 en fonction du rapport de modération H/Pu (réflexion par 20 cm d'eau).

Les conditions de réflexion retenues sont la présence d'eau, si l'on tient compte de l'éloignement des murs en béton et de l'absence de plomb dans l'unité. Les conditions de modération sont également l'eau, compte tenu de l'absence de matériaux plus modérateurs que l'eau.

Détermination des limites associées au milieu fissile de référence et au mode de contrôle de la criticité

Les normes de criticité établies par les codes de neutronique ont pour objectif de déterminer la variation d'une masse critique de plutonium, sous forme métallique, pur en isotope 239, en fonction de la modération (définie comme le **rapport de modération*** H/Pu, rapport du nombre d'atomes d'hydrogène sur le nombre d'atomes de plutonium). Cette courbe est présentée en figure 169. À partir de celle-ci, on obtient des valeurs correspondant à un k_{eff} de 1 :

- 510 g de plutonium qui correspondent à la valeur minimale de la courbe de la figure 169 (elle représente la quantité la plus faible de plutonium qui conduit à la criticité, quelles que soient les conditions de modération et de géométrie) ; on parle de **masse minimale critique** ;

- mais aussi, si pour des besoins d'exploitation les masses à manipuler sont plus élevées, 5,42 kg de plutonium à condition de garantir l'absence de modération (sec) en conditions normales et incidentelles.

Des marges de sécurité sont appliquées à ces limites critiques, afin de garantir l'absence de risque de criticité dans toutes les situations normales et incidentelles considérées comme plausibles. Pour cela, on applique un coefficient de

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 244

sécurité de 0,7. Ce coefficient de 0,7 est utilisé pour le mode de contrôle par la limitation de la masse, à condition que l'analyse démontre que le risque d'introduire une quantité de matière fissile égale à 2 fois la limite de masse (double chargement) est exclu ; dans le cas contraire, le coefficient à appliquer est 0,43. Ainsi, les limites de masse obtenues sont, respectivement, de 350 g de plutonium sans limite de modération et de 3,7 kg de plutonium à sec ; ce dernier cas permet d'augmenter, de manière conséquente, la limite de masse dans la boîte à gants.

Garantie des limites

Pour garantir les limites de 350 g et de 3,7 kg de plutonium, l'installation devra, dans les deux cas, mettre en place des règles de gestion de la matière fissile et d'absence d'accumulation de matières fissiles dans la boîte à gants, en l'absence de tout matériau plus modérateur que l'eau. Dans le second cas, il faudra, en plus, garantir l'absence de modération en interdisant l'introduction dans la boîte à gants de tous matériaux modérateurs et en interdisant l'utilisation d'eau en cas d'incendie ; par ailleurs, des études de sûreté complémentaires devront démontrer l'absence de risque d'introduction d'eau par inondation interne (aspersion par une tuyauterie, fuite d'huile d'un vérin ou d'un moteur…) et externe à l'installation (crue, pluie…).

Par conséquent, plus on utilise de modes de contrôle de la criticité, plus on impose de contraintes de conception, administratives ou d'exploitation (fig. 170). C'est pourquoi le dialogue entre les experts en criticité et l'exploitant est primordial pour trouver la solution la plus adaptée pour garantir une exploitation de l'installation efficace et en toute sécurité vis-à-vis du risque de criticité.

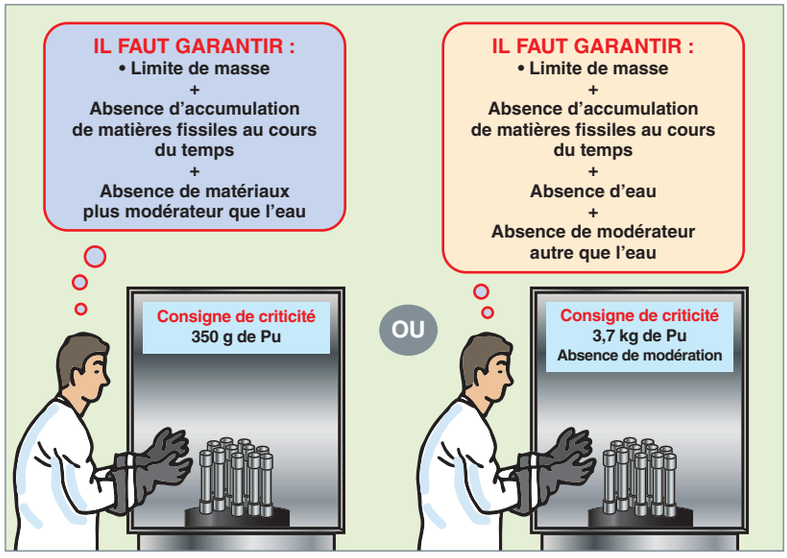


Fig. 170. Limite imposée dans la boîte à gants en fonction de la présence ou l'absence de modération.

Par ailleurs, des formations au risque de criticité sont dispensées aux opérateurs.

L'accident de criticité de Tokaï Mura (Japon)

Le dernier accident de criticité s'est produit le 30 septembre 1999, au Japon, dans un atelier de l'usine de fabrication de combustibles nucléaires de la Japan Nuclear Fuels Conversion Company (JCO) implantée à 15 km du site de Tokaï Mura (150 km au nord-est de Tokyo). Il a été classé au niveau 4 de l'échelle de gravité des événements nucléaires **INES***, qui en comporte huit. Cet accident a duré 20 heures et a conduit à environ 2,5 10^{18} fissions [1].

Pour la bonne compréhension de ce qui suit, il est nécessaire d'avoir lu les paragraphes précédents de ce chapitre sur la criticité.

Circonstances de l'accident

L'accident s'est produit au cours d'opérations de dissolution de poudre d'uranium enrichi à 18,8 % en isotope 235 dans de l'acide nitrique pour obtenir du nitrate d'uranyle. Le procédé autorisé par les autorités de sûreté japonaises consistait à dissoudre la poudre d'uranium dans un équipement de géométrie sûre. Le volume de cet équipement, trop faible, ne permettait pas l'obtention d'une quantité suffisamment importante de nitrate d'uranyle. Plusieurs dissolutions consécutives étaient alors nécessaires, entraînant des lots de concentration en uranium inhomogènes. Les responsables, sans avis d'un expert en criticité, ont alors décidé de remplacer le dissolveur de géométrie sûre, initialement prévu, par une cuve de précipitation de diamètre plus grand, munie d'un agitateur mécanique pour faciliter l'opération d'homogénéisation des différents lots de dissolution. Cette dernière cuve n'étant pas de géométrie sûre, l'absence de risque de criticité était garantie, dans l'ensemble de l'équipement, par une limite de masse d'uranium de 2,4 kg.

Les deux opérateurs ont rempli la cuve à l'aide de 7 seaux, chacun d'entre eux contenant 2,4 kg de poudre d'uranium dissous dans de l'acide nitrique (fig. 171). Au cours de la vidange du dernier seau, un opérateur a observé un flash bleu caractéristique d'un accident de criticité **(effet Čerenkov*)** : 16,6 kg d'uranium étaient présents dans la cuve.

L'accident de criticité a découlé de plusieurs anomalies et de non respect de règles.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 245

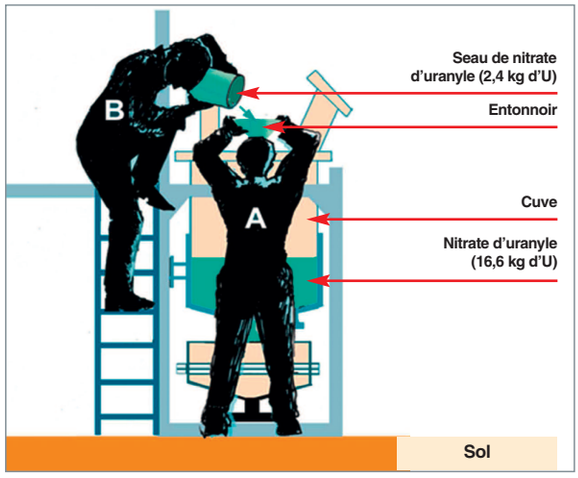


Fig. 171. Position des deux opérateurs lors de l'accident de criticité survenu à Tokaï Mura, au Japon, le 30 septembre 1999.

Facteurs ayant conduit à l'accident

Le premier facteur a été le remplacement de l'équipement de géométrie sûre par un équipement de grandes dimensions, entraînant dans la solution une diminution importante du nombre de neutrons pouvant s'en échapper et, ainsi, une augmentation de la valeur du k_{eff}.

En deuxième lieu, la limite de masse de 2,4 kg, garantissant une opération sans risque de criticité avec des marges de sécurité importantes n'a pas été respectée dans l'équipement de grandes dimensions. La production de neutrons croissant avec le nombre de noyaux fissiles du milieu, la présence de 16,6 kg d'uranium a augmenté de manière importante la valeur du k_{eff}.

Enfin, la présence d'un circuit de refroidissement à l'eau (réflecteur) a ramené vers le milieu fissile des neutrons qui s'en seraient échappés en l'absence d'eau. La présence d'eau autour de la cuve a augmenté la valeur du k_{eff} à une valeur supérieure à 1. Ici, encore, le respect de la limite de masse de 2,4 kg aurait permis de faire l'opération sans risque de criticité. Par ailleurs, sans la présence d'eau autour de la cuve, l'accident n'aurait pas eu lieu pour la masse de 16,6 kg d'uranium, mais pour une quantité plus importante.

Interventions pour arrêter l'accident

Pour arrêter l'accident, l'exploitant a dû vidanger le circuit de refroidissement en cassant la tuyauterie. Ensuite, du bore, poison neutronique, a été introduit dans la cuve, pour diminuer de manière significative et définitive le k_{eff}.

Conséquences

Au cours de cet accident, 136 personnes sur le site ont été irradiées à des doses très variables, dont trois gravement. Les deux employés impliqués dans l'accident (voir figure 171), ayant reçu des **doses*** largement supérieures à la dose létale, sont décédés au bout respectivement de trois et sept mois de soins intenses. Le contremaître, situé dans une pièce attenante à environ 5 m de la cuve, a reçu une dose qui pourrait le conduire à développer à long terme un cancer. Une centaine d'autres personnes (133 pompiers et opérateurs intervenus pour arrêter l'accident) ont été irradiés de manière beaucoup moins sévère et certainement, pour la plupart d'entre elles, sans effet directement observable sur leur santé.

Plusieurs centaines d'autres personnes du site auraient potentiellement reçu des doses très faibles. Aux alentours du site, les 160 habitants se trouvant dans un rayon de 350 m du bâtiment contenant la cuve ont été évacués, tandis que 320 000 autres, dans un rayon de 10 km, ont reçu, par précaution, la consigne de rester confinés à leur domicile jusqu'à la fin de l'accident. Les mesures réalisées dans l'air, l'eau ou les produits végétaux n'ont révélé la présence d'iode (produit de fission volatil) que de manière très ponctuelle et à l'état de traces.

Enseignements

L'organisation mise en place par JCO et approuvée par l'Autorité de Sûreté n'était pas satisfaisante. En particulier, en cas de modification du procédé, l'avis des responsables Sûreté et Assurance Qualité n'était que facultatif. Il n'y avait pas d'expert en criticité sur le centre, ni d'inspections régulières des autorités de sûreté. Par ailleurs, les consignes à respecter permettant d'éviter tout accident de criticité n'étaient pas affichées (limites de masse en fonction de l'enrichissement en isotope 235 de l'uranium).

Les opérateurs n'étaient pas sensibilisés au risque de criticité. Le contremaître et les opérateurs avaient un grand nombre d'années d'expérience des opérations mettant en œuvre de l'uranium enrichi à 5 % en isotope 235. Les opérateurs ont transposé leur expérience pour de l'uranium à 5 % à de l'uranium enrichi à 18,8 % en isotope 235, sans connaître les risques encourus.

La gravité de cet accident a conduit l'ensemble des autorités de sûreté et des exploitants de chaque pays mettant en œuvre des installations nucléaires à engager une revue de procédures et des pratiques en vigueur concernant la prévention du risque de criticité.

Aspects de responsabilité et de réparation

Deux ans plus tard, le chef de l'usine de l'époque et cinq autres prévenus (dont le contremaître) ont été inculpés pour violation des règles de sûreté nucléaire et négligence professionnelle.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 245

JCO a versé un montant de réparation de l'ordre de 100 millions d'Euros aux travailleurs exposés à une dose de plus de 0,25 Sievert, aux résidents situés à 350 m du siège de l'accident, aux activités industrielles et agricoles eu égard aux pertes résultant de l'accident dans les domaines de l'agriculture, de la pêche et de l'industrie et aux coûts supportés par le village dans sa gestion des conséquences de l'accident.

Enfin, l'accident a provoqué un vaste débat sur l'industrie nucléaire, qui fournissait à l'époque environ un tiers des besoins en électricité du Japon.

Conclusions

Si aucun accident de criticité n'a été déploré en France jusqu'à présent, cela doit certainement beaucoup à la pertinence des concepts de défense en profondeur et de multiples barrières mis en œuvre dans les démonstrations de sûreté, à l'exploitation rigoureuse des installations et à l'organisation spécifique au risque de criticité du CEA (fondée sur la compétence d'ingénieurs dans les installations, au niveau des centres et au niveau national), mais aussi aux outils logiciels développés, performants et opérationnels.

Cependant, malgré toutes les mesures prises pour éviter l'accident de criticité et l'organisation mise en place, une telle éventualité ne peut être totalement exclue. C'est pour cela que depuis les années 60 jusqu'à nos jours, le CEA renforce sa démarche de sûreté-criticité dans le cadre du troisième niveau de défense en profondeur (limitation des conséquences de l'accident) :

- Par le biais d'expériences et d'études importantes et approfondies afin de connaître la phénoménologie et les conséquences potentielles d'un accident de criticité ;
- par sa capacité à détecter un tel accident ;
- par la mise en place d'une structure d'intervention rapide et efficace ;
- par l'acquisition des connaissances nécessaires pour maîtriser l'accident (étude de la mise en place éventuelle de système de sauvegarde à la conception) et en limiter les conséquences sur les travailleurs, le public et l'environnement.

Références

[1] *Les Accidents de criticité dans les usines et les laboratoires*, DSNQ/MSN/FT/2001/007.

[2] Règle Fondamentale de Sûreté n°I.3.c du 18 octobre 1984 : Règles applicables à la prévention des risques dus aux rayonnements ionisants – Risque de criticité.

[3] J.M. Gomit, J. Miss, A. Aggery, C. Magnaud, J.C. Trama, C. Riffard, "CRISTAL Criticality Package Twelve Years Later and New Features", International Conference on Nuclear Criticality 2011, 19-22 September 2011, Edinburgh.

Bibliographie

Clef CEA n°45, *Physique nucléaire et sûreté*, octobre 2001.

Dominique Mijuin et Emmanuel Gagnier
Département de modélisation des systèmes et des structures

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 247

Autres exemples d'application de la neutronique

Quelques exemples supplémentaires d'études menées avec les codes de transport développés au CEA, complètent le panorama des applications de la neutronique.

Durée de vie d'un réacteur nucléaire : la fluence neutronique sur la cuve

La **fluence*** neutronique est l'un des paramètres physiques qui intervient dans l'estimation de la durée de vie ou durée de fonctionnement d'un réacteur nucléaire. En effet, le décalage, induit par l'irradiation sur la température de référence de la transition ductile/fragile de l'acier de cuve, dépend de la fluence des neutrons d'énergie supérieure à 1 MeV. Un ordre de grandeur de cette fluence neutronique sur quarante années de fonctionnement est de quelque 6 10^{19} neutrons.cm^{-2}.

Environ une centaine de millions d'histoires de neutrons sont simulées pour obtenir avec une statistique satisfaisante (écart-type de moins de 1 %) le flux de neutrons arrivant sur la cuve après 3 à 4 décades d'atténuation (fig. 172). La mise en œuvre d'une technique d'accélération de la simulation est par conséquent nécessaire pour atteindre la convergence statistique dans de telles configurations physiques (voir *supra*, p. 89-106).

Le calcul de la réponse de chambres ex-core relève d'une démarche similaire [3] [4].

Ambiance dosimétrique dans le bâtiment d'un réacteur nucléaire

Les neutrons s'échappant du cœur d'un réacteur nucléaire empruntent des « couloirs» (phénomènes de ***streaming****) et se propagent dans l'installation, provoquant l'activation des différentes structures rencontrées. Ils induisent ainsi des débits de dose neutron et *gamma* dans les différentes zones du bâtiment réacteur. Dans un but de radioprotection, on prédit par le calcul le niveau de ces débits de dose. La taille de l'installation (fig. 173) et sa complexité technologique conduisent à mettre en œuvre des calculs de transport tridimensionnel Monte-Carlo.

Démantèlement d'un réacteur nucléaire : activation neutronique des structures

Les études menées en vue du **démantèlement*** d'un réacteur nucléaire concernent, entre autres, la radioactivité induite par les neutrons dans l'ensemble de ses structures tout au

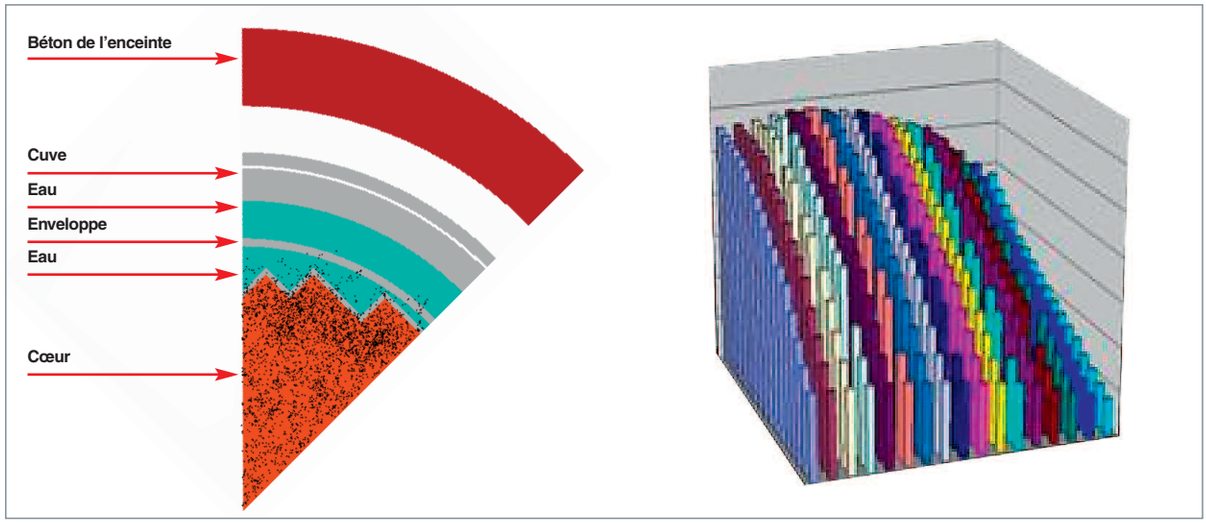


Fig. 172. Illustration de la simulation, à l'aide du code de transport Monte Carlo TRIPOLI-4®, de la propagation des neutrons dans le but de déterminer la fluence neutronique sur la cuve d'un réacteur à eau sous pression (représentation d'1/8e du réacteur). À droite, exemple de source neutronique décrite crayon par crayon dans un assemblage périphérique, modélisée dans TRIPOLI-4® [1] [2].

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 248

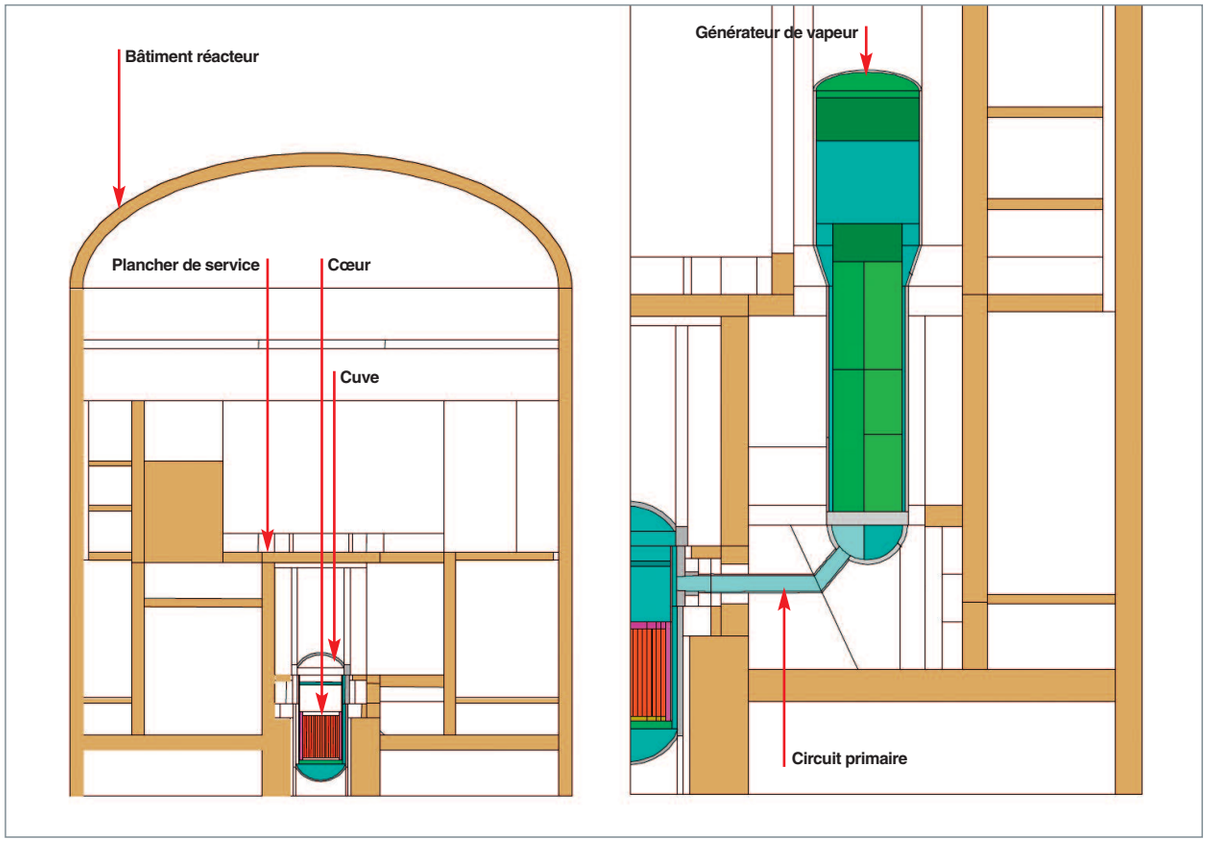


Fig. 173. Modélisation par le code de transport Monte-Carlo TRIPOLI-4®, de l'enceinte du bâtiment d'un réacteur à eau sous pression (cuve, plancher de service, zone des générateurs de vapeur, etc.) pour la détermination des débits de dose neutron et *gamma*.

long de son fonctionnement. L'activation neutronique des structures est étudiée en simulant à l'aide d'un code de transport (Monte-Carlo ou S_N) la propagation des neutrons dans l'installation. Le flux de neutrons ainsi calculé est ensuite transmis à un code d'évolution temporelle isotopique qui détermine l'activité compte tenu de l'historique de fonctionnement du réacteur et de la durée considérée après son arrêt définitif (fig. 174). Ces calculs permettent donc d'obtenir un inventaire exhaustif des radionucléides présents dans les différentes structures du réacteur à tout instant. On en déduit une cartographie tridimensionnelle d'activité et de radiotoxicité, utilisée pour gérer l'ensemble des déchets résultant du démantèlement du réacteur (fig. 174).

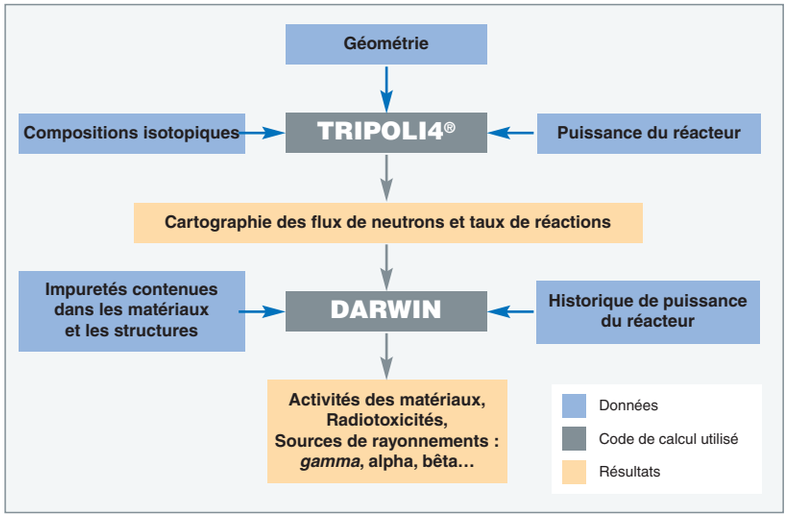


Fig. 174. Un exemple de schéma de calcul dédié aux études de démantèlement des réacteurs nucléaires [5] mettant en œuvre le code de transport Monte-Carlo 3D TRIPOLI-4® et le code d'évolution temporelle isotopique DARWIN. Ce schéma de calcul a été appliqué aux configurations représentées sur les figures 175 et 176.

En outre, ces calculs fournissent les termes sources de *gamma* de désintégration radioactives permettant de déterminer les niveaux de débits d'équivalents de dose associés, information indispensable pour les opérations de déconstruction.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 249

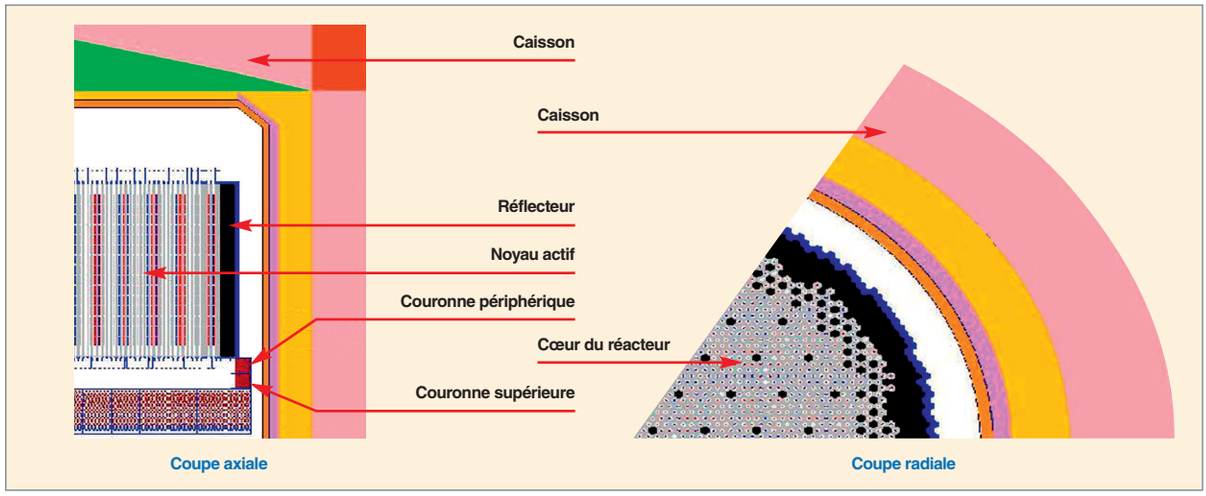


Fig. 175. Modélisation d'un réacteur de la filière UNGG pour les études de démantèlement réalisées avec le code de transport Monte-Carlo **TRIPOLI-4®*** pour la propagation des neutrons et le code **DARWIN*** pour les calculs de radioactivité : inventaire radiologique, activité, radiotoxicité et termes sources *gamma* et bêta notamment.

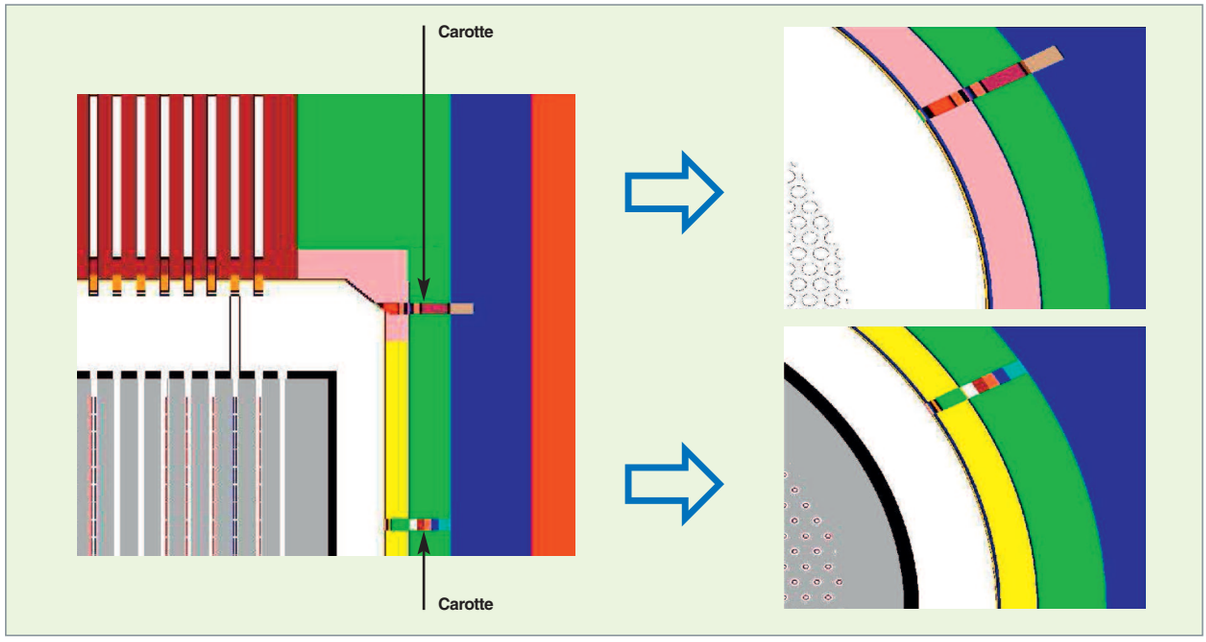


Fig. 176. Modélisation fine d'un réacteur de la filière UNGG en vue d'une comparaison entre les résultats de calcul et les mesures d'activités effectuées sur des carottes prélevées en différents endroits du caisson [6].

Fusion thermonucléaire : échauffement et activation neutronique des structures

Les études de l'échauffement et de l'activation neutronique des différentes structures d'une machine à fusion (par confinement magnétique ou par confinement inertiel) sont réalisées avec des logiciels de calcul similaires à ceux utilisés pour les études de déconstruction des réacteurs nucléaires. L'exemple ci-dessous illustre la modélisation TRIPOLI-4® d'un module du **tokamak* ITER***. Les résultats de calcul figurant sur la figure 178 concernent l'échauffement de la première paroi de la chambre à plasma. Ils ont été respectivement obtenus par les codes de transport Monte-Carlo américain MCNP* et TRIPOLI-4® [7]. Un autre exemple d'étude est fourni par la référence [8] relative à la conception du module test de la couverture lithium-plomb d'ITER *("Fast Neutron Generator Helium Cooled Lithium–Lead [FNG HCLL] Test Blanket Module* [TBM]*")*.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 250

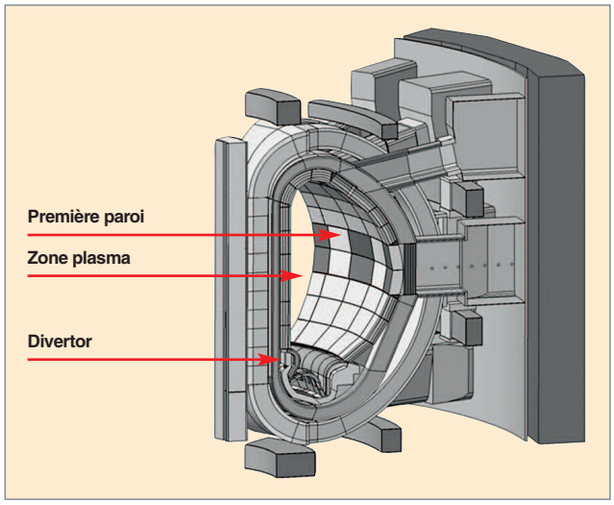


Fig. 177. Modèle de *benchmark* du tokamak ITER [7].

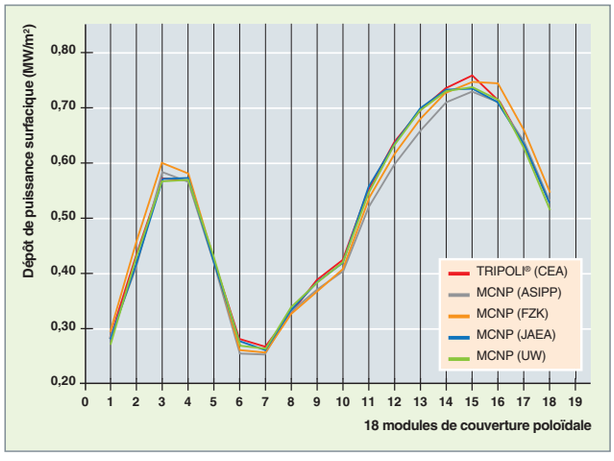


Fig. 178. Calcul de l'échauffement de la première paroi d'ITER à l'aide des codes de neutronique Monte-Carlo TRIPOLI-4® et MCNP. Les résultats sont reportés pour chacun des 18 modules composant le dispositif.

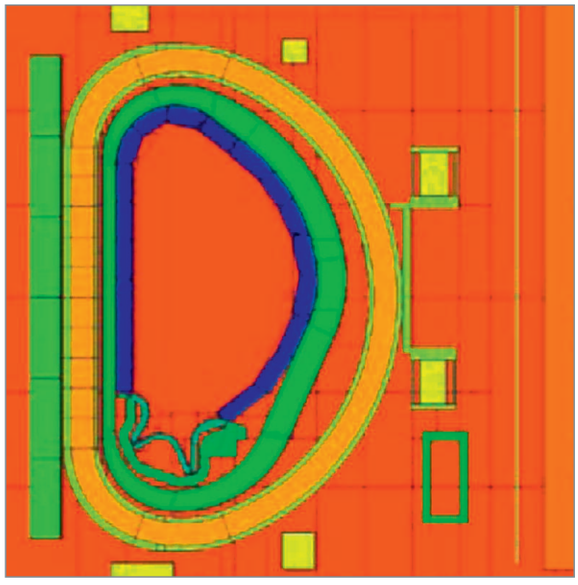


Fig 179. Visualisation d'une coupe du tokamak ITER à l'aide de l'utilitaire T4G du code TRIPOLI-4® [9].

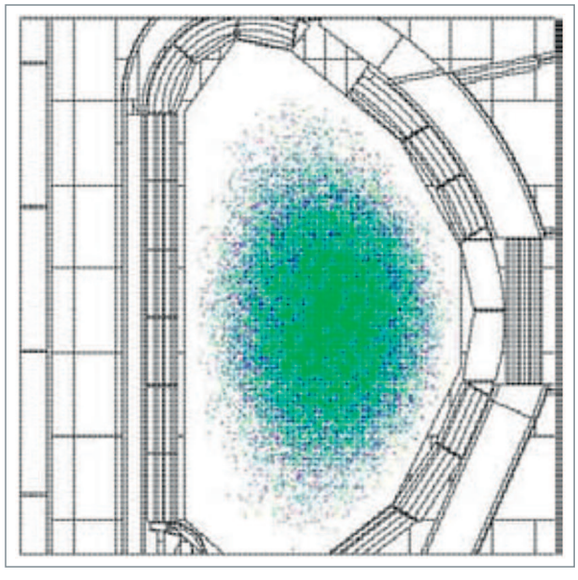


Fig. 180. Visualisation d'une coupe du tokamak ITER montrant l'échantillonnage des neutrons source issus de réactions de fusion Deutérium-Tritium [9], [10].

Références

[1] S. Bourganel, O. Petit, M. Chiron, C. Diop, "Pseudo-Adjoint Monte Carlo Method 3D Particle Transport for Nuclear Application Parametric Studies", 14th Biennial Topical Meeting of the Radiation Protection and Shielding Division, Carlsbad New Mexico, USA, April 3-6, 2006.

[2] S. Rollet, C. Diop, M. Chiron, S. Bourganel, "Core contribution calculations with TRIPOLI-4 Green's functions and MCNP4C adjoint in PWR neutron transport studies", ICRS-11 – RPSD-2008, Callaway Gardens, Pine Mountain, Georgia, USA, April 13-18, 2008.

[3] C. Trakas, O. Petit, "TRIPOLI-4 Green's Functions & MCNP5 Importance to Estimate ex-core Detector Response on a N4 PWR", Proceedings of the *Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications and Monte-Carlo 2010* (SNA + MC2010), Hitotsubashi Memorial Hall, Tokyo, Japan, October 17-20, 2010.

[4] S. Bourganel, O. Petit, C. M. Diop, "3D Particle Transport using Green's functions in TRIPOLI-4® Monte-Carlo Code. Application to PWR neutron fluence and ex-core response studies", *Nuclear Technology*, October 2013.

[5] I. Brésard, F. Marcel, M. Messaoudi, G. Imbard, G. Betsch, J .M. Parize, J .C. Nimal, "Radiological Characterization of Nuclear Reactors Structures, Calculations and Measurements Comparisons", Proceedings of the *1998 ANS Radiation Protection and Shielding Division Topical Conference, Technologies for the New Century*, April 19-23, 1998 Knoxville, Tennessee, USA, 1998.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 251

[6] F. Laye , M.-C. Perrin, “Comparison of Activation Calculations with Measurements For The Biological Shield of The Bugey 1 Graphite-Gas Reactor”, *5th EPRI International Decommissioning and Radioactive Waste Workshop*, October 31 – November 2, 2006.

[7] L. Lu, Y. K. Lee *et al.*, “Development of Monte-Carlo auto-matic modelling functions of MCAM for TRIPOLI-ITER application,” *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res.*, A605, 384, 2009.

[8] C. Fausser, Y. K. Lee, R. Villari, Q. Zeng, J. Zhang, A. Serikov, J.-C. Trama, F. Gabriel, “Numerical benchmarks TRIPOLI - MCNP with use of MCAM on FNG ITER Bulk Shield and FNG HCLL TBM mock-up experiments”, *Fusion Engineering and Design*, 86, pp. 2135–2138, 2011.

[9] F.-X. Hugot and Y. K. Lee , “A New Prototype Display Tool for the Monte Carlo Particle Transport Code TRIPOLI-4”, *Progress in Nuclear Science and Technology*, vol. 2, pp.851-854, 2011.

[10] Y. K. Lee, O. Petit, “Display of Collision Sites with TRIPOLI-4 Monte-Carlo Code,” *ANS - RPSD topical meeting,* Las Vegas, NV. USA, Apr. 18-23, 2010.

Stéphane Bourganel, Maurice Chiron, Cheikh M. Diop, François-Xavier Hugot, Frédéric Laye, Yi-Kang Lee, Jean-Christophe Trama
Département de modélisation des systèmes et des structures
et Clément Fausser
Département d’études de réacteurs

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 252

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 253

La neutronique, ses succès et les défis qui l'attendent

À la fin de cette monographie, il paraît approprié de prendre du recul pour analyser l'état de la discipline neutronique, revenir sur ses succès et regarder les défis qu'elle aura à relever.

À l'origine simple rameau de la physique nucléaire, la neutronique est très vite devenue une branche autonome de la physique. Comme on l'a vu plus haut, ses applications sont nombreuses et variées, touchant les différents aspects de la physique des réacteurs et du cycle du combustible, de l'instrumentation nucléaire, de la sûreté-criticité et de la radioprotection. La neutronique est indispensable à l'industrie nucléaire, pour la conception, le pilotage et la démonstration de sûreté de ses installations. Elle est devenue une science suffisamment mûre pour participer non seulement à une modélisation, mais à une véritable simulation desdites installations. Cette maturité, concrétisée par le développement de codes de calcul neutroniques développés au CEA et utilisés par les industriels, ne signe pas la fin des travaux : de nombreux défis attendent encore les neutroniciens, avec à la clé des progrès importants.

La simulation neutronique : nécessairement multi-échelle

Le phénomène élémentaire de la neutronique est la réaction nucléaire. Le libre parcours moyen des neutrons dans la matière dépend énormément de leur énergie, celle-ci pouvant varier sur plus de dix ordres de grandeur dans le cœur d'un réacteur nucléaire. Ceci rend nécessaire de décrire les phénomènes neutroniques sur une très large gamme d'échelles d'espace. Un des grands défis de la neutronique réside dans la gestion de ces différentes échelles d'espace et d'énergie. Les méthodes développées sont remarquablement ingénieuses et efficaces. En décrivant les phénomènes par emboîtement d'échelles, *via* une approche « multi-échelle » en énergie et en espace, où la description microscopique du système fournit les données pour une description plus macroscopique, la neutronique a donné l'exemple pour une approche « multi-échelle » appliquée à d'autres disciplines.

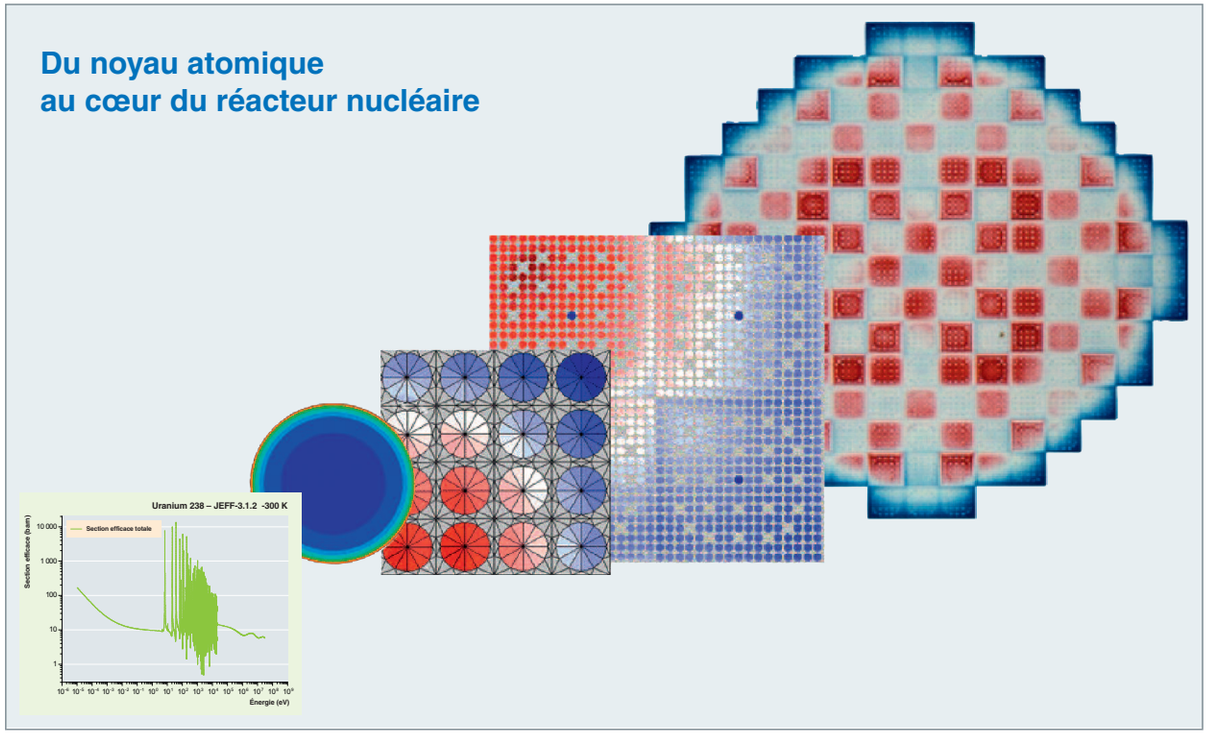


Fig. 179. Description multi-échelle du comportement neutronique d'un réacteur nucléaire.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 254

Coupler la neutronique aux autres disciplines

Les systèmes nucléaires sont des systèmes complexes, mettant en jeu de nombreux phénomènes physiques couplés, ce qui rend nécessaire de les décrire ensemble, *via* une approche « multiphysique », à laquelle de nombreuses disciplines de la physique viennent concourir. Un des défis de la neutronique pour le futur est de systématiser son couplage avec les autres disciplines, en particulier la thermohydraulique et la thermomécanique.

Vers la simulation directe à 3+1 dimensions

Aujourd'hui, les calculs neutroniques déterministes de cœurs de réacteurs sont encore faits en deux étapes combinant des calculs à deux et trois dimensions, pour des raisons de temps de calcul. L'augmentation des capacités de calcul rend désormais possible des calculs directs à trois dimensions (sans étape d'homogénéisation), sur des maillages à plus de dix millions de mailles. Le CEA accompagne cette évolution en développant le code APOLLO3®. De nombreux concepts de réacteurs à gros cœurs ou à cœurs très hétérogènes bénéficieront pleinement de ces avancées. En outre, la prise en compte simultanée de l'aspect spatial et temporel dans une approche à 3+1 dimensions de l'évolution neutronique d'un cœur reste un défi important, ouvrant la voie à la simulation détaillée des phénomènes transitoires.

Quel statut pour la simulation Monte-Carlo ?

Une des spécificités de la neutronique est le développement et le succès des codes Monte-Carlo. Grâce à la finesse de la simulation qu'ils permettent (à condition d'y mettre le prix en temps de calcul !), ces codes servent de codes de référence, et leurs résultats ont un statut hybride entre un résultat de calcul et un résultat expérimental. Il sera intéressant de voir comment évolueront les codes stochastiques et les codes déterministes. L'accroissement exponentiel de la puissance de calcul étend l'utilisation des codes Monte-Carlo. À cet effet, le CEA développe le code TRIPOLI-4®. Pour autant, ces codes ne remplaceront peut-être pas de sitôt les codes déterministes, beaucoup plus légers et plus facilement utilisables pour des études paramétriques.

Plutôt que de les percevoir comme des outils concurrents, il est intéressant de mettre en relief les synergies possibles entre les deux familles de codes. À titre d'illustration, un code déterministe peut fournir un moyen d'accélérer significativement une simulation Monte-Carlo. Inversement, une simulation Monte-Carlo peut servir d'outil d'élaboration de données d'entrée homogénéisées et/ou condensées requises pour les codes déterministes.

La synergie entre simulation et expérience

Avec le développement de la simulation, le statut de l'expérience change : elle devient expérience de validation ou de détermination de données de base, et il peut alors s'agir d'expériences conçues pour isoler un effet particulier. Les expériences globales sur systèmes complets, beaucoup plus lourdes et chères, peuvent alors être réduites, mais probablement pas complètement supprimées. Les maquettes critiques ÉOLE, MINERVE et MASURCA dont dispose encore le CEA restent des outils précieux.

Maîtriser les incertitudes

Un des grands défis de la simulation du comportement de systèmes complexes consiste à savoir évaluer les incertitudes, celles-ci pouvant provenir d'incertitudes sur les données initiales, sur le modèle lui-même, ou sur la résolution de ses équations constitutives. La neutronique n'échappe pas à la règle : gagner de la précision, c'est gagner des marges à la conception et à l'exploitation des réacteurs. C'est aussi progresser dans le domaine de la sûreté et de la radioprotection. Le couplage entre disciplines (neutronique, thermohydraulique, thermomécanique) ajoute un degré de complexité à la problématique de la propagation des incertitudes.

Améliorer les données nucléaires

Les gains en exactitude et précision pour les futurs calculs neutroniques « de référence » viendront en grande partie de l'amélioration des données nucléaires. En effet, même si les codes Monte-Carlo sont de bons candidats pour acquérir le statut de code de référence en neutronique, leurs résultats ne seront bons que si les données nucléaires de base qui les alimentent sont précises.

Il y a un défi spécial dans l'assimilation des données nucléaires, qui tient au caractère très divers des expériences qui donnent accès à ces données : il s'agit d'intégrer sous forme de données validées des informations issues d'expériences aussi différentes que des mesures de sections efficaces différentielles sur des spectromètres et des mesures de bruit neutronique ou des résultats d'expériences d'oscillations sur des maquettes critiques. Les premières ont un statut de données brutes, et sont assimilables pratiquement telles quelles ; les secondes demandent un modèle pour être assimilées. D'autre part, la théorie microscopique des réactions nucléaires fournit un guide de plus en plus précis pour l'évaluation des données nucléaires. Comment utiliser toutes ces données en perdant un minimum d'information ? Il y a là une vraie difficulté méthodologique qui n'est pas encore totalement résolue.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 255

Nonobstant, la communauté des neutroniciens a su se doter des structures adéquates pour construire quelques bases de données standardisées, fédératives et dont la qualité est garantie par un processus robuste d'évaluation par des experts. En particulier, le CEA est un acteur essentiel de la construction de la base européenne JEFF3, qui peut servir d'exemple pour la construction de bases de données similaires dans d'autres domaines scientifiques et techniques.

Des plates-formes pour la simulation

Le recours aux simulations numériques a toujours été une composante incontournable de la conception et de la démonstration de sûreté des installations nucléaires. C'est une nécessité issue du constat que certaines expériences, notamment celles portant sur la sûreté des réacteurs, ne peuvent être réalisées en vraie grandeur. Le CEA s'est fait une spécialité de ces simulations numériques, en tout premier lieu dans le domaine de la neutronique. Les codes de calcul et les bases de données associées capitalisent, en effet, la connaissance accumulée au fil du temps sur la modélisation des systèmes. La conception des grands logiciels de calcul est longue et complexe. Elle fait appel à un très grand nombre de compétences : physiciens, expérimentateurs, numériciens, informaticiens, mathématiciens… La simulation a longtemps consisté à développer des codes de calcul globaux dédiés à la description d'un phénomène physique ou d'un processus particulier. Depuis une dizaine d'années, il est apparu fructueux de subdiviser le calcul en modules génériques, et de grouper ces modules et les bases de données qui les nourrissent dans des plates-formes, qui permettent de les mettre en communication, les sorties des uns pouvant servir d'entrées à d'autres. Ce nouveau paradigme de la simulation *via* des plates-formes logicielles a ouvert la voie à la simulation multiphysique et multi-échelle, et a élargi son domaine d'utilisation. La neutronique, qui a été une discipline pionnière dans la construction des plates-formes de simulation, rentre pleinement dans ce cadre, concrétisé au CEA par la construction de la plate-forme SALOMÉ.

Les codes de calcul ont une durée de vie bien supérieure à celle des ordinateurs sur lesquels ils tournent : étant donné le temps de développement des codes, et leur durée d'utilisation qui peut s'échelonner sur vingt à trente ans, il est impératif de bien anticiper les besoins qu'ils devront couvrir, et l'évolution des machines informatiques sur lesquelles ils seront utilisés. C'est pourquoi les codes majeurs de neutronique développés au CEA-DEN doivent être considérés comme des investissements à long terme, au même titre que ceux pour des installations expérimentales.

Simulation numérique et calcul haute performance

Comme on l'a vu tout au long de cette monographie, le calcul haute performance (**HPC***) a permis un bond en avant de la discipline neutronique. Il a fallu pour cela relever un défi : celui de l'adaptation des codes de calcul. Cette adaptation de l'architecture logicielle est indispensable pour utiliser pleinement la puissance des supercalculateurs.

Pour développer et mettre en œuvre les plates-formes de simulation, les équipes du CEA-DEN ont à leur disposition des supercalculateurs ou des réseaux de calculateurs parmi les plus puissants d'Europe. En effet, pour effectuer leurs simulations les plus voraces en puissance de calcul, elles ont accès à l'ensemble des moyens informatiques du **TGCC** (Très Grand Centre de Calcul) exploité par le CEA-DAM : le **CCRT*** du CEA et Curie, machine pétaflopique financée par GENCI (Grand Équipement National de Calcul Intensif).

L'utilisation de ces outils est structurée dans le cadre de réseaux ou centres d'excellence dans lesquels le CEA joue un rôle majeur. On peut citer par exemple la Maison de la simulation, laboratoire commun CEA-CNRS-INRIA-Université de Paris-Sud-Université de Versailles Saint-Quentin, centre d'excellence multidisciplinaire à même de relever les défis du calcul intensif.

Ces calculateurs et les structures associées sont en passe de permettre le développement d'outils de type « réacteur numérique » ou « usine numérique » pour une évaluation extrêmement rapide de l'impact sur une installation d'une modification d'un choix de conception ou d'une donnée d'entrée. Les neutroniciens ont un rôle crucial dans ce programme certes de longue haleine, mais extrêmement exaltant pour les chercheurs du CEA.

Bernard Bonin
Direction scientifique

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 254

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 257

Glossaire – index

Les mots signalés par le signe + ont fait l'objet d'une définition parue au *Journal officiel*, consultable sur le site http://franceterme.culture.fr/FranceTerme/.

Absorbant (neutronique) **:** se dit d'une matière susceptible d'absorber des neutrons par réaction de **capture neutronique***. 15, 52, 61, 71, 110, 128, 129, 143, 146, 171, 172, 174-176, 195, 198, 199, 211, 216, 219.

Accident de criticité+ : déclenchement d'une **réaction de fission en chaîne*** incontrôlée correspondant à un **facteur de multiplication effectif*** k_{eff} supérieur ou égal à 1. 9, 188, 229, 235, 236, 241-246.

Accident de réactivité+ : accident provoqué par une augmentation incontrôlée de la **réactivité*** dans un **cœur*** de **réacteur nucléaire*** à l'état **critique*** (voir **RIA***). 188, 222, 223.

Accident de dimensionnement : accident de référence dont l'étude sert pour **dimensionner** le réacteur vis-à-vis de la sûreté. 225.

Actinides : éléments terres rares de numéro atomique compris entre 89 et 103. Ce groupe correspond au remplissage de la sous-couche électronique 5f et 6d. Les actinides sont dotés de propriétés chimiques très voisines entre elles. 9, 22, 28, 29, 108, 190, 200, 228, 229, 231, 242.

Actinides mineurs : noyaux lourds formés dans un réacteur par capture successive de **neutrons*** à partir des noyaux du combustible. Ces **isotopes*** sont principalement le neptunium (237), l'américium (241, 243) et le curium (243, 244, 245). Les noyaux d'**uranium** et de **plutonium** présents ou formés dans le combustible nucléaire sont qualifiés d'**actinides majeurs**. 22, 200.

Activation (radioactivation) **:** processus par lequel un nucléide stable est transformé en un nucléide radioactif. Il rend **radioactifs** certains **nucléides**, en particulier au sein des matériaux de structure des réacteurs, par bombardement par des **neutrons** ou d'autres particules. 9, 29, 32, 107, 131, 141, 180, 185, 189, 190, 228,230, 247-249.

Activité+ : pour une substance radioactive : nombre de transitions nucléaires spontanées par unité de temps au sein d'une population de **radionucléides*** ou d'un mélange de radionucléides. Elle est exprimée en **Becquerel** (Bq). Un becquerel correspond à une désintégration par seconde. 10, 12, 13, 41, 57, 131, 176, 185, 186, 195, 196, 230, 248, 249.

ADS : acronyme de *Accelerator Driven System*. Voir **Système hybride***. 39-41.

AGR *(Advanced Gas cooled Reactor)* **:** type de réacteur britannique de deuxième génération, utilisant de l'uranium légèrement enrichi, modéré au graphite et refroidi au dioxyde de carbone. 187.

Aire de migration : carré moyen de la distance parcourue par les neutrons dans le cœur du réacteur, depuis leur émission jusqu'à leur absorption. Elle est exprimée habituellement en cm^2. 213, 219.

Alpha : voir **radioactivité**. 10, 22, 32, 40, 47, 107, 112, 173, 227, 248.

ANDRA : Agence Nationale pour la gestion des Déchets RAdioactifs. 185.

Anti-réactivité+ : baisse de réactivité que peut produire un **absorbant neutronique*** (barre de commande par exemple) quand il est introduit dans le **cœur*** d'un réacteur. 110, 111, 194, 229.

APOLLO, APOLLO2, APOLLO3® : codes de calcul neutronique déterministes de transport. 16, 18, 54, 62, 65, 67, 69, 71, 73, 82, 85, 87, 122, 123, 126-135, 138, 140, 141, 143-147, 152-154, 160, 177, 178, 196, 203, 206, 212, 217, 219, 220, 228, 233, 242, 254.

Assemblage combustible : dans le cœur d'un réacteur à eau, les **crayons** combustibles sont groupés en faisceaux dotés d'une bonne rigidité et positionnés avec précision dans le cœur du réacteur. C'est l'ensemble de cette structure, regroupant une à quelques centaines de crayons et chargée d'un seul tenant dans le réacteur, qui est appelé « assemblage ». 51, 52, 54, 63, 64, 70, 71, 76-81, 84, 89, 97, 127- 129, 134, 143, 144, 146, 147, 152, 153, 177, 185, 188, 196-199, 201- 209, 217- 221, 223, 224, 228, 229, 231, 247.

ASTRID *(Advanced Sodium Technological Reactor for Industrial Demonstration)***:** démonstrateur d'intégration technologique permettant la démonstration de sûreté et de fonctionnement à l'échelle industrielle de réacteurs rapides refroidis au sodium de 4e génération, à l'étude au Commissariat à l'Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives. 21, 29, 152, 187, 201.

ATWS *(Anticipated Transient Without SCRAM [SCRAM : Safety Control Rod Axe Man])* **:** transitoire de puissance pénalisé par le fait qu'on suppose le non déclenchement de l'arrêt automatique du réacteur (AAR). Il appartient à la classe des « Transitoires associés au contrôle de la réactivité ». 221, 222.

Autoprotection+ : creusement du flux de neutrons au droit d'une résonance ayant pour conséquence la diminution des taux de réaction. 14, 18, 34, 37, 53, 54, 65-72, 77, 85, 127, 130, 131, 138, 139, 146, 177, 197-199, 202-205.

Autoprotégée : qualifie une section efficace lorsqu'elle est réduite par l'application d'un facteur destiné à prendre en considération le phénomène d'autoprotection*. 53, 65, 66, 67, 69, 71, 77, 138, 139, 140.

Autorité de sûreté : autorité administrative qui assure, au nom de l'État, le contrôle de la **sûreté nucléaire*** et de la **radioprotection*** en France pour protéger les travailleurs, les patients, le public et l'environnement des risques liés à l'utilisation du nucléaire. 232, 241, 245.

Axial offset : voir **Déséquilibre axial de puissance**. 188, 220, 221.

Barn : unité utilisée pour mesurer une **section efficace***. 1 barn $=10^{-24}$ cm^2. 11.

Barre de commande+ (ou **grappe de commande**) **:** barre ou ensemble de tiges solidaires mobiles contenant une matière absorbant les neutrons (bore, cadmium…) et qui, suivant sa position dans le cœur d'un réacteur nucléaire, influe sur sa **réactivité***. 28, 120, 185, 218.

Barre grise+ : barre de commande absorbant moins les neutrons qu'une **barre noire***+, et qui permet le réglage fin de la puissance du réacteur nucléaire. 198.

Barre noire+ : barre de commande constituée de matériaux absorbant les neutrons, et qui contribue au contrôle de la criticité du réacteur nucléaire. 198.

Barrière de confinement+ : dispositif capable d'empêcher ou de limiter la dispersion des matières radioactives. Dans un réacteur

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 258

nucléaire, ensemble des éléments physiques qui isolent les **radionucléides** du combustible de l'environnement. Dans un **réacteur à eau sous pression***, il s'agit successivement de la gaine de l'élément combustible, de l'enveloppe du circuit primaire (qui comprend la cuve) et de l'enceinte du réacteur. 222, 223, 246.

Becquerel (**Bq**) **:** unité de désintégration radioactive égale à une désintégration par seconde. 37 milliards de becquerels égalent 1 curie (Ci); 30 000 désintégrations par seconde se produisent dans un détecteur de fumée domestique. Le becquerel étant une unité très petite, on utilise fréquemment ses multiples : Méga, Giga, Téra Becquerel (MBq, GBq, TBq correspondant respectivement à 10^6, 10^9, 10^{12} Bq). 13.

Benchmark **:** voir **Exercice d'intercomparaison***. 41, 70, 96, 100, 104, 126, 128, 136, 154, 155, 170, 176, 177, 178, 179, 180, 181, 182, 226, 250, 251.

Bêta : fraction de **neutrons retardés***, exprimée généralement en pcm (pour cent mille). Certains produits de fission produits dans le cœur du réacteur émettent des neutrons, parfois avec un retard allant jusqu'à quelques dizaines de secondes après la fission. Ces neutrons contribuent de façon marginale au bilan neutronique, mais c'est grâce à eux que la réaction en chaîne peut être pilotée et stabilisée. Le « bêta effectif » est le produit de bêta par un coefficient supérieur à l'unité, qui rend compte de la plus grande efficacité neutronique des neutrons retardés dans le cœur, du fait de leur énergie plus faible que celle des neutrons prompts. Voir **Cinétique ponctuelle*** et aussi p. 115-124. 175.

Bilan matière : quantités des différents nucléides présents dans le cœur d'un réacteur à un instant donné, résultant des productions et des disparitions de chaque nucléide dues aux réactions nucléaires. 49, 59, 97, 131, 137, 195, 202, 217, 227-231.

Bilan neutronique⁺ : bilan, détaillé par type de réaction et par isotope, des productions et des disparitions de neutrons dans un milieu fissile. Les neutrons peuvent disparaître par absorption ou par fuite. 11, 12, 45, 51, 68, 78, 84, 115, 118, 197, 202, 211, 215, 217, 235, 236, 241

Boroneutrothérapie : thérapie par capture de neutrons par le bore, utilisée en particulier pour traiter les tumeurs du cerveau. La capture induit l'émission de particules alpha susceptibles de détruire très localement les cellules de la tumeur. 186, 191.

Bq : voir **Becquerel**. 13.

Bremsstrahlung : voir **Rayonnement de freinage**. 21, 32, 176, 186.

Burnup : voir **Combustion massique** et **Taux de combustion**. 13, 104, 111, 136, 137, 168, 177, 188, 217, 229, 230, 242.

Calcul d'assemblage : voir **Calcul spectral**. 52, 70, 198, 199, 201-203, 205-209, 217, 220.

Calcul de cœur : seconde étape du schéma de calcul d'un réacteur nucléaire, en deux étapes, la première étant appelée « **calcul spectral*** ». Le code **CRONOS2*** est utilisé pour réaliser cette étape. 52-54, 63, 121, 126, 127, 130, 136, 153, 154, 196, 198, 199, 202, 204-205, 206, 208, 209, 217, 218, 220.

Calcul de référence : calcul « exact » (qui approche au plus près la réalité physique) auquel se comparent et se valident d'autres calculs réalisés avec des approximations. Par exemple, les calculs neutroniques de transport **déterministes*** sont validés par des calculs de transport **probabilistes*** **Monte-Carlo***. Voir aussi **Exercice d'intercomparaison***. 71, 98, 125, 126, 166, 167, 169, 191.

Calcul de réseau : voir **Calcul spectral**. 87, 127.

Calcul spectral (ou **calcul réseau**) **:** première étape du schéma de calcul d'un réacteur nucléaire, en deux étapes, la seconde étant le **calcul de cœur***. Le calcul spectral met en œuvre un code de réseau qui permet de déterminer des constantes (sections efficaces…), homogénéisées en espace et condensées en énergie, requises pour le calcul de cœur proprement dit. Il prend aussi le nom particulier de **calcul d'assemblage***. Le code **APOLLO2*** est utilisé pour réaliser cette étape. 127.

Caléfaction⁺ (ou **film boiling**) **:** phénomène se traduisant par la présence d'un film de vapeur entre une paroi chaude et un fluide qui est soit un liquide, soit un mélange diphasique de liquide et de vapeur. Dans un réacteur nucléaire à fluide caloporteur liquide, la caléfaction apparaît sous la forme d'une vaporisation locale du fluide au contact de la gaine d'un élément combustible, correspondant au passage de l'ébullition nucléée saturée à l'**ébullition en film** ou **en couche mince**. Ce film provoque une dégradation importante du transfert de chaleur pouvant entraîner à cet endroit un échauffement excessif endommageant la gaine de l'élément combustible. Voir aussi **Crise d'ébullition**.

Caloporteur⁺ (ou **réfrigérant**) **:** fluide (gaz ou liquide) utilisé pour extraire du **cœur*** d'un **réacteur nucléaire*** la chaleur produite par les **fissions***. Dans un **réacteur à eau sous pression***, l'eau joue à la fois le rôle de caloporteur et celui de **modérateur***. 52, 172, 177, 193, 194, 195, 200, 201, 203, 204, 207, 208-210, 215, 216, 219, 220, 224, 239.

CANDU *(CANada Deutérium Uranium)* **:** famille d'origine canadienne de réacteurs de puissance nucléaires à uranium naturel, refroidis et modérés à l'eau lourde. Une des caractéristiques distinctives du réacteur CANDU, de conception unique, réside dans sa capacité de rechargement, réacteur à pleine puissance. 187.

Capture neutronique : capture d'un neutron par un noyau. La capture est dite radiative si elle est suivie par l'émission immédiate d'un rayonnement gamma. Elle est dite **fertile*** si elle donne naissance à un noyau **fissile***. 10, 11, 22, 23, 25, 28, 31, 40, 64, 66, 89, 91, 93, 95, 110, 111, 176, 193, 195, 197-199, 204, 219, 230, 232, 235-238.

CAST3M : code de simulation numérique dédié à la mécanique et à la thermique (matériau, structure, fluides). 208, 220.

CCRT : « Centre de Calcul Recherche et Technologie » du CEA, dont les ordinateurs sont utilisés principalement par les branches industrielles du CEA et des partenaires industriels. 98, 153, 157, 255.

Cellule : voir **Réseau***. 18, 52, 54, 63, 66, 70, 84, 97, 127, 130, 138, 139, 143, 154, 155, 174, 197, 198, 199, 202, 207, 232-234, 241.

CÉSAR : code de cycle simplifié. 137, 142, 228, 242.

Chaîne de filiations : chaîne de nucléides* provenant, d'une suite de **désintégrations radioactives*** ou de **réactions nucléaires** à partir d'un nucléide initial. Voir aussi **Filiation radioactive***. 107, 108, 131, 189, 228.

Chambre à fission : chambre d'ionisation destinée à la détection de **neutrons***, l'ionisation étant due aux **produits de fission*** induits par réaction nucléaire des neutrons sur un dépôt de matière **fissile***. 173, 174, 191, 233.

Château de transport⁺ : conteneur blindé utilisé pour le transport et éventuellement l'entreposage de matières radioactives. 97, 186, 188.

Cible de spallation⁺ : dispositif mettant en œuvre un matériau lourd destiné à produire, par **spallation**, des **neutrons*** constituant la source externe d'un **système hybride***. 41, 186.

Cinétique⁺ (d'un réacteur) : étude de la variation temporelle du flux de neutrons dans le cœur d'un réacteur qui résulte de celle de la **réactivité*** ; par extension, cette variation elle-même, c'est à dire la vitesse à laquelle se produisent les changements de puissance. 8, 58, 59, 60, 75, 104, 115-124, 130, 144, 166, 174, 175, 180, 185, 191, 194, 215, 220, 223-225.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 259

Cinétique⁺ ponctuelle : étude du comportement neutronique des **réacteurs nucléaires*** en fonction du temps, en supposant que ce comportement est le même en tout point du réacteur. **115-124, 175, 215, 224, 225.**

Circuit de refroidissement primaire⁺ : système en boucle fermée ou ensemble de boucles fermées qui permet d'extraire la chaleur des **éléments combustibles*** présents dans le **cœur*** d'un réacteur par circulation d'un fluide **caloporteur*** en contact direct avec ces éléments combustibles. **194, 195, 215, 216, 223, 225, 248.**

Circuit de refroidissement secondaire⁺ : système assurant la circulation du fluide caloporteur qui extrait la chaleur du circuit de refroidissement primaire. **188, 203, 225.**

Code de calcul : voir **Logiciel (code) de calcul***.

Coefficient de puissance⁺ : rapport, dans un réacteur nucléaire ou tout autre milieu multiplicateur, de la variation de la **réactivité*** à la variation de puissance qui la provoque.

Coefficient de réactivité⁺ : variation du **facteur de multiplication*** résultant du fonctionnement d'un réacteur, c'est-à-dire des changements de température et de composition dus au dégagement d'énergie et à l'irradiation **neutronique**. **180, 176, 180, 215.**

Coefficient de température⁺ : coefficient qui traduit la variation du **facteur de multiplication*** des neutrons dans un réacteur lorsque sa température change. Un coefficient de température négatif est un critère important de stabilité du **cœur***. **166, 172, 176, 195, 211, 218, 219, 224.**

Coefficient de vide : coefficient qui traduit la variation du **facteur de multiplication*** dans un réacteur lorsque le **caloporteur** forme plus de vides (zones de moindre densité, par exemple des bulles) que la normale. Si ce coefficient est positif, une augmentation des vides se traduira par une augmentation de la **réactivité*** et, par conséquent, une augmentation de la puissance. S'il est négatif, l'augmentation des vides tendra au contraire à arrêter le réacteur. **153, 172, 176, 195, 200, 201, 218.**

Cœur : zone centrale d'un **réacteur nucléaire***, contenant les **assemblages combustibles***, le **caloporteur*** et le **modérateur***, où se produit la **réaction en chaîne***. **9, 17, 45, 51-54,59, 62, 63, 89, 97, 101, 104, 108, 115, 117, 120, 121, 126-148, 152-155, 171-229, 232, 247, 253.**

Collectron : détecteur de neutrons ou de rayons gamma sans source d'énergie externe, qui produit un signal résultant de l'émission d'électrons par une électrode à partir de la capture neutronique ou de l'absorption des photons gamma. **188, 233, 234.**

Combustible irradié : voir **Combustible usé***. **51, 107, 231.**

Combustible nucléaire⁺ : substance constitutive du **cœur*** d'un réacteur nucléaire, contenant les éléments **fissiles*** qui entretiennent la **réaction en chaîne*** en son sein. Le terme **combustible nucléaire** peut également désigner les éléments façonnés composant le cœur d'un réacteur. **8-10, 13, 22, 28, 32, 51, 52, 59, 63, 69, 71, 72, 97, 108, 110, 111, 125, 127, 128, 131, 132, 134, 135-137, 143-146, 147, 152, 166, 167, 171, 172, 175-180, 186-190, 193-211, 213, 215-220, 222-225, 227-233, 235, 242-244.**

Combustible usé⁺ : combustible nucléaire irradié, déchargé d'un réacteur et dont la matière fissile ne peut être réutilisée sans avoir subi un traitement approprié. Le terme **combustible irradié** est parfois utilisé comme synonyme de **combustible usé**. **51, 107, 231.**

Combustion massique⁺ (ou **burn-up** ou **taux de combustion**) **:** énergie totale libérée par unité de masse dans un combustible nucléaire. Généralement exprimé en mégawatts x jours par tonne (MW.j/t).Voir aussi **Taux de combustion**. **13, 97, 107, 109, 110, 136, 143, 144, 188, 195, 198, 199, 201, 205, 206, 208, 211, 213, 215, 219, 223, 229-231, 233, 234.**

Condensation : à partir d'un maillage **multigroupe*** donné, opération consistant à définir un maillage multigroupe plus grossier sur lequel les grandeurs physiques d'intérêt sont calculées par une méthode d'équivalence. **52, 53, 122, 123, 129, 139, 143, 198, 202, 217.**

CONRAD *(COde for Nuclear Reaction Analysis and Data assimilation)* **:** système de codes dédié à l'évaluation des données nucléaires. **21, 23-26, 28, 35, 36.**

Conservatisme⁺ : qualité d'une démarche ou d'un procédé de calcul prenant en compte des hypothèses qui majorent les effets des phénomènes susceptibles d'altérer les performances d'un matériau, d'un équipement ou d'une installation et d'affecter la sûreté nucléaire ou la radioprotection. **215.**

Contre-réaction (de réactivité) **:** effet des variations de certains paramètres d'un réacteur nucléaire, tels que la puissance, la température, ou le taux de vide, sur sa réactivité. Voir **coefficient de puissance**, **coefficient de température**, **coefficient de vide**. **194, 200, 225.**

Corium⁺ : mélange de matériaux fondus résultant de la fusion accidentelle du **cœur*** d'un **réacteur nucléaire***. **188.**

Couverture⁺ (fertile) : zone située en périphérie du **cœur*** d'un réacteur, contenant de la matière **fertile***. **9, 186, 200-202, 249, 250.**

Crayon⁺ : tube de faible diamètre, fermé à ses deux extrémités, constituant du **cœur*** d'un réacteur nucléaire, quand il contient une matière fissile, fertile ou absorbante. Lorsqu'il contient de la matière, 203 fissile, le crayon est un **élément combustible***. **52, 64, 66, 97, 98, 128, 135, 136, 174, 176, 178, 195, 198, 202, 206, 207, 209, 232, 233.**

Crédit de combustion⁺ (ou **crédit *burn-up*) :** différence entre la réactivité, dans un milieu donné, d'un combustible non irradié et celle, de niveau inférieur, de ce même combustible après irradiation (épuisement de la matière fissile et anti-réactivité apportée par les produits de fission). Le crédit de combustion peut être pris en compte dans les études de criticité. **111, 188, 229, 230, 242.**

Crise d'ébullition (ou **ébullition critique**) **:** pour un fluide **caloporteur** en contact avec une surface chauffante, passage de l'ébullition nucléée à l'**ébullition en couche mince*** conduisant à une dégradation brutale du coefficient d'échange thermique. Ce phénomène thermohydraulique local complexe englobe la **caléfaction*** et l'assèchement. Dans un réacteur nucléaire, la crise d'ébullition fait l'objet d'une surveillance particulière, car ce phénomène peut entraîner un endommagement grave de la **gaine** du combustible et donc affecter l'intégrité de la première **barrière de confinement**. **195, 218, 225**

CRISTAL : formulaire de calcul de criticité, basé sur les codes **APOLLO2***, **MORET-4**, **MORET-5***, **TRIPOLI-4®*** et les évaluations **JEF-2** et **JEFF-3*** de données nucléaires. **129, 228, 229, 242, 246.**

Criticité⁺ : configuration caractéristique d'une masse de matière qui contient des éléments **fissiles*** et éventuellement d'autres éléments, dans une composition, des proportions et une géométrie telles qu'une **réaction de fission en chaîne*** peut y être autoentretenue. **9, 39, 47, 51, 73, 91, 96, 98, 101, 104, 110, 111, 115, 129, 133, 171, 175, 178-188, 192, 194, 227, 228, 229, 235-246, 253.**

Critique⁺ : qualifie un milieu où s'entretient une **réaction de fission en chaîne*** au cours de laquelle apparaissent autant de **neutrons*** qu'il en disparaît. Le **facteur de multiplication*** est alors strictement égal à 1 et la réaction est exactement entretenue : le nombre de fissions observé pendant des intervalles de temps successifs reste constant. La **criticité*** est l'expression d'un équilibre exact entre les productions de neutrons par fission, réactions (n, 2n)… et les disparitions par absorption et par fuite. Lorsque les productions de neutrons par fission sont supérieures aux disparitions par absorption ou fuite, le système est dit « **sur-critique*** », dans le

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 260

cas contraire il est qualifié de **sous-critique***. 7, 13, 15, 16, 38, 51, 54, 55, 56, 58, 61, 97, 99-101, 103, 115, 117-119, 128, 130, 133, 143, 166, 171, 172, 174-176, 178, 179-182, 185, 194-196, 199, 200, 202, 209-213, 218, 222, 223, 225, 229, 235-241, 243, 254.

CRONOS, **CRONOS2 :** codes de calcul neutronique déterministes utilisés pour le calcul de cœurs* de réacteurs. 121, 122, 124, 126, 127, 129, 130, 131, 138, 141, 143-145, 160, 177, 178, 196, 206, 208, 215, 217, 218, 220, 226.

Cuve : récipient contenant le **cœur*** d'un réacteur et son fluide **caloporteur***. 9, 97, 103, 120, 135, 168, 171, 180, 181, 185, 189, 196, 211, 218, 223, 225, 247, 248.

Cycle du combustible : ensemble des étapes suivies par le **combustible nucléaire***. Le cycle comprend notamment l'extraction du minerai, la concentration de la matière fissile, la conversion, **l'enrichissement***, la fabrication des éléments combustibles, leur utilisation dans le réacteur, le **traitement du combustible usé***, l'éventuel **recyclage*** des matières fissiles ainsi récupérées, ainsi que le **conditionnement*** et le **stockage des déchets radioactifs***. 29, 47, 96, 130, 134, 192, 193, 227-230, 235, 242, 253.

Cycle d'irradiation : période de fonctionnement d'un réacteur entre deux rechargements successifs de combustible. En France, les cycles d'irradiation des réacteurs électrogènes sont de 12 à 18 mois. 135, 209.

DARWIN, DARWIN2 : codes de calcul de neutronique utilisés pour modéliser l'évolution du **combustible*** sous irradiation (concentrations des radionucléides, puissance résiduelle, sources de rayonnements…). 126, 127, 129-132, 137, 141, 228, 230, 231, 233, 234, 242, 248, 249

Débit de dose : quotient de l'accroissement de **dose*** par l'intervalle de temps (énergie absorbée par la matière par unité de masse et de temps). L'unité légale est le **gray*** par seconde (Gy/s). 28, 137, 188, 189, 190.

Déchet radioactif+ **:** résidu provenant de l'utilisation de matières radioactives, dont aucun usage n'est prévu dans l'état actuel des connaissances et dont le niveau d'activité ne permet pas, sans contrôle, l'évacuation dans l'environnement. Les déchets radioactifs ultimes sont des déchets radioactifs qui ne peuvent plus être traités dans les conditions techniques et économiques du moment, notamment par extraction de leur part valorisable ou par réduction de leur caractère polluant ou dangereux. 9, 28, 39, 141, 185-187, 190, 199, 200, 227, 231, 248.

Décomposition de domaines : technique numérique et algorithmique mise en œuvre pour paralléliser des logiciels de calcul. Le solveur MINARET du code **APOLLO-3®*** utilise des techniques de décomposition de domaines pour tourner sur des processeurs fonctionnant en parallèle. 151-154.

Décroissance radioactive : transformation d'un radionucléide en un nucléide différent par l'émission spontanée de rayonnements alpha, bêta ou gamma ou par capture électronique. Le produit final est un noyau d'énergie moindre et plus stable. Chaque processus de décroissance radioactive a une **période** bien définie. 8, 12, 19, 28, 31, 32, 35, 36, 45-47, 49, 59, 107, 112, 231, 242.

Défense en profondeur+ **:** concept consistant à mettre en place dans une installation nucléaire plusieurs lignes de défense successives aptes à prévenir l'apparition, ou, le cas échéant, à limiter les conséquences de situations accidentelles dues à des défaillances techniques, humaines ou organisationnelles. 241, 246.

Demi-vie : voir **Période radioactive**. 32, 35.

Démantèlement+ **:** ensemble des opérations techniques pour démonter et éventuellement mettre au rebut un équipement ou une partie d'une installation nucléaire. 9, 29, 134, 185, 187, 189, 247-249.

Déséquilibre axial (**de puissance**) (ou **axial offset**) **:** dans un réacteur nucléaire, déformation axiale de la distribution de puissance par rapport à une distribution symétrique. 188, 220, 221.

Désintégration (**radioactive**) **:** transformation d'un noyau instable en un noyau stable ou instable au cours de laquelle le nombre et la nature des nucléons du noyau sont modifiés. 8, 49, 248.

Déterministe : voir **Méthode (calcul) déterministe***.

Diffusion élastique : processus de diffusion dans lequel l'énergie de la particule diffusée ne change pas dans le système du centre de masse. 10, 11, 25, 31, 45, 46, 52, 53, 55, 56, 57, 66, 68, 70, 76, 89, 90, 91, 92, 93, 95, 101, 120, 122, 193, 199, 219, 236, 239.

Diffusion inélastique : processus de diffusion dans lequel l'énergie de la particule diffusée change dans le système du centre de masse. 10, 11, 25, 28, 31, 45, 46, 52, 53, 55, 56, 57, 66, 68, 70, 76, 89, 90, 91, 92, 93, 95, 101, 120, 122, 193, 199, 236, 239.

Dimensionnement+ **:** détermination des caractéristiques d'une installation lors de sa conception pour satisfaire à des critères préétablis et à la pratique règlementaire. 33, 97, 120, 144, 180, 185-191, 194, 209-211, 222, 224, 225, 233.

Dimensionner : voir **Dimensionnement***. 211, 213.

Divergence+ **:** état d'un réacteur à l'instant où la criticité du cœur est atteinte ; par extension, séquence de démarrage d'un réacteur nucléaire qui précède l'atteinte de la criticité du cœur. 15, 171, 177, 211.

Dollar : unité de **réactivité***. Le dollar est défini par le rapport réactivité/proportion de **neutrons retardés*** = 1, le sous-multiple étant le cent. 175.

Doppler (effet) **:** en neutronique, élargissement des résonances de sections efficaces neutroniques sous l'effet de l'agitation thermique des noyauxcibles. Cet effet contribue à assurer la stabilité d'un réacteur nucléaire, en diminuant la réactivité de son cœur lors d'une élévation de sa température. 201, 222, 224.

Dose+ **:** quantité d'énergie communiquée à un milieu par un rayonnement ionisant. En radioprotection, le terme général **dose** prend un sens particulier lorsqu'il est employé en association avec un ou plusieurs adjectifs qualificatifs tels que « absorbée », « collective », « efficace », « équivalente », « individuelle ». L'énergie absorbée peut être pondérée ou non selon le type ou la qualité du rayonnement. 28, 104, 133, 137, 172, 185, 186, 188, 189, 190, 196, 233, 245, 246, 247, 248, 257.

Dosimétrie : mesure de la **dose**. Elle a pour but d'évaluer par une mesure ou au moyen d'un calcul approprié la quantité d'énergie absorbée dans une masse donnée de matière. 32.

dpa+ **:** déplacements par atome. Unité de dommage d'irradiation des matériaux. Le nombre de **dpa** est le nombre de fois que chaque atome d'un échantillon donné de matière solide a été éjecté de son site sous l'action d'un rayonnement. Cette unité est bien adaptée pour quantifier les irradiations dans les métaux. 28, 133, 189, 196, 200, 201, 211.

Eau légère : eau ordinaire par opposition à **eau lourde***. 27, 154, 171, 180, 193, 204, 229.

Eau lourde ou **oxyde de deutérium** (D_2O) **:** forme naturelle d'eau dans laquelle les atomes d'hydrogène sont des atomes d'hydrogène lourd ou deutérium. Elle est environ 10 % plus lourde que l'eau ordinaire et se trouve en quantités infimes dans la nature (environ une partie d'eau lourde pour 7 000 parties d'eau). L'eau lourde absorbe moins les neutrons que l'**eau légère***, ce qui la rend intéressante comme **modérateur*** dans certains **réacteurs nucléaires***. 7, 15, 16, 27, 180, 193, 194, 205, 258.

Ébullition critique : voir **Crise d'ébullition***.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 261

Ébullition nucléée⁺ : ébullition caractérisée par la production localisée de bulles de vapeur. 218.

ECCO : Code de calcul neutronique déterministe de transport. Il fait partie du **formulaire de calcul* ERANOS*** dédié aux réacteurs à **neutrons rapides***. 37, 67, 130, 138, 139.

ECIS (Équations Couplées en Itérations Séquentielles) **:** code de calcul dédié aux modèles de réactions nucléaires. 23, 24.

Échelle INES⁺ : voir **Échelle internationale des évènements nucléaires**. 244.

Échelle internationale des événements nucléaires (ou échelle INES) **:** classement des événements nucléaires, par ordre croissant de gravité, depuis le simple écart sans incidence du point de vue de la sûreté (niveau 0) jusqu'à l'accident majeur, avec effets étendus sur la santé et l'environnement (niveau 7). Le niveau 7 correspondant à un accident comparable à celui de Tchernobyl. 244.

Effet Čerenkov : émission de lumière visible qui apparaît lorsqu'une particule chargée se déplace dans un milieu donné à une vitesse supérieure à celle de la lumière dans ce milieu. Le rayonnement est émis comme une onde de choc qui accompagne la particule. Ainsi la décroissance de noyaux **radioactifs** libère des électrons à des vitesses supérieures à celle de la lumière dans l'eau, avec laquelle ils interagissent en cédant leur énergie sous forme d'émission d'un cône de lumière bleue. Le même phénomène peut se produire dans la matière lors d'un accident de **criticité**. 244.

Effet de canalisation (ou **streaming**) **:** fuite de neutrons dans certaines directions préférentielles dues à des hétérogénéités du cœur d'un réacteur (par exemple des canaux de gaz). 209.

Effet xénon : voir **Xénon***.

Électron : particule élémentaire chargée négativement, et constituant de l'atome. Dans un atome de numéro atomique Z, Z électrons orbitent autour du noyau atomique. 10, 21, 22, 32, 47, 105, 112, 133, 140, 173, 188.

Empoisonnement : phénomène de capture de **neutrons** par certains **produits de fission** qui s'accumulent au cours de l'irradiation (xénon 135, samarium 149, etc.), dégradant ainsi le **bilan neutronique**. 51, 108, 110, 111, 198, 199, 203, 237, 241.

Enrichissement⁺ : processus qui, dans le cas de l'uranium, permet d'augmenter par divers procédés (diffusion gazeuse, ultracentrifugation, excitation sélective par laser) la concentration de l'**isotope** 235 (**fissile**) par rapport à l'isotope 238 prédominant dans l'uranium naturel. Voir **Cycle du combustible***. 71, 179, 186, 203, 219, 227, 229, 236, 243, 245.

Entreposage⁺ (de déchets radioactifs) : dépôt temporaire de déchets radioactifs dans une installation spécifique. Ce terme peut également désigner l'installation d'entreposage (voir aussi **stockage de déchets radioactifs**). 186, 187, 190, 227, 231.

Épithermiques (neutrons) **:** neutrons situés dans la gamme d'énergie de 1 eV à 20 keV environ et ayant ainsi une vitesse supérieure à celle des **neutrons thermiques***. Dans cette région d'énergie, les interactions neutron-noyau présentent des résonances et leurs **sections efficaces*** peuvent varier de ce fait de plusieurs ordres de grandeur. 22, 128, 171, 172, 203, 219.

EPR : *European Pressurized Reactor*. 21, 29, 52, 60, 251.

Équations de Bateman (**généralisées** ou **équations d'évolution**) **:** ensemble d'équations couplées régissant l'évolution temporelle des concentrations des noyaux au sein d'un milieu irradié (cœur d'un réacteur nucléaire par exemple), en tenant compte à la fois des interactions neutron-noyau et des phénomènes de décroissance radioactive. 11, 12, 13, 14, 49, 51, 52, 54, 59, 107, 108, 109, 113, 125, 136, 198, 204, 208.

Équation de Boltzmann : équation cinétique dans laquelle les forces internes n'interviennent que par l'effet des collisions binaires entre particules. Elle est applicable dans le cas où les forces inter particulaires sont à courte portée (gaz ordinaires). Dans la physique des réacteurs, cette équation décrit le transport des neutrons dans la matière. 11-14, 16, 43, 44, 45, 47, 49, 51, 52, 55, 58, 61-65, 75, 76, 89, 125, 127, 171, 218.

Équation de la diffusion : équation dérivée de l'**équation de Boltzmann***, dans l'approximation dite de la diffusion *(loi de Fick)*. 44, 52, 62, 75, 76, 77, 78, 81, 129, 130, 143, 199, 206, 217.

Équation de Nordheim : équation régissant l'évolution temporelle d'une population de neutrons, dans l'approximation de la cinétique ponctuelle. 119.

Équation de Schrödinger : équation dont la solution fournit la fonction d'onde d'un **système quantique non relativiste, régi par un hamiltonien, dans lequel les interactions entre** les objets supposés élémentaires sont décrites en termes de potentiels. 24.

ERANOS : code européen de neutronique principalement dédié au calcul de cœurs de réacteurs à neutrons rapides. 54, 127, 130, 131, 139, 141, 201, 228.

ESFR : *European Sodium cooled Fast Reactor*. Projet collaboratif européen. 153.

Espace des phases : espace à six dimensions, trois d'espace, une d'énergie, deux d'angle (définissant une direction). 12, 44, 45, 46, 51, 53, 55, 59, 62, 76, 89, 90, 92, 96, 101, 102, 117, 133.

Évaluation (**de données nucléaires**) **:** travail consistant à produire une bibliothèque de données nucléaires à partir de mesures expérimentales et de modèles théoriques de physique nucléaire. 11, 21-29, 31, 32, 33, 34, 35, 37, 58, 89, 107, 128, 131, 133, 143, 168, 181, 228, 230, 232, 242, 254.

Exercice d'intercomparaison (ou **exercice de comparaison** ou ***benchmark***) **:** exercice d'intercomparaison de modèles sur un jeu de données expérimentales. Le terme anglais *« benchmark »* désigne, dans son sens premier, une valeur (ou expérience) de référence, dont les résultats sont interprétés par la communauté internationale avant d'être intégrés dans une base de données internationale. 40, 170.

Expérience intégrale : expérience représentative d'un système complexe, donnant une information sur l'effet global de plusieurs paramètres ou processus, plutôt que sur leurs effets individuels. 172, 180.

Excursion de criticité (ou **excursion critique**) **:** dans un milieu où se produisent des **réactions nucléaires***, augmentation, contrôlée ou accidentelle, du flux neutronique jusqu'au dépassement de la **criticité***. 51.

Excursion de puissance⁺ : augmentation très rapide et momentanée de la puissance d'un réacteur au-delà de la puissance de fonctionnement. Ce phénomène transitoire peut être provoqué dans des réacteurs expérimentaux. 123.

Facteur de conversion⁺ (ou **rapport de conversion**, **taux de conversion**) **:** rapport, pour un intervalle de temps donné, du nombre de **nucléides* fissiles*** produits au nombre de nucléides fissiles détruits. Un réacteur est **isogénérateur** quand son facteur de conversion vaut 1. S'il est supérieur à un, il est **surgénérateur**. 172, 187, 199, 200, 201, 208, 219.

Facteur de discontinuité (**ADF :** *Assembly Discontinuity Factor*) **:** facteur introduit dans les méthodes déterministes de résolution de l'équation du transport pour traiter les interfaces entre assemblages. 54, 80.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 262

Facteur de multiplication+ (**infini** k_∞ et **effectif** k_{eff}) **:** dans un milieu multiplicateur de neutrons, valeur moyenne du nombre de nouvelles fissions induites par les **neutrons** issus d'une fission initiale. Si les fuites des neutrons vers les assemblages de combustible voisins ou hors du réacteur ne sont pas prises en compte, le facteur de multiplication est qualifié d'infini et noté k_∞ ; dans le cas contraire, il est qualifié d'effectif et noté k_{eff}. 7, 13, 15, 56, 59, 70, 89, 91, 99, 100, 115, 118, 119, 125, 174, 179, 185, 186, 202, 235.

Fertile+ **:** se dit d'un **nucléide*** susceptible d'être transformé, directement ou indirectement, en un nucléide **fissile*** par **capture*** de neutrons. C'est le cas de l'uranium 238 qui conduit au plutonium 239. Une matière est dite **stérile*** dans le cas contraire. 25, 110, 153, 186, 193, 197, 199, 200, 201, 204.

Filiation radioactive (ou **filiation**) **:** lien unissant entre eux des **nucléides*** provenant, après une suite de **désintégrations radioactives***, d'un nucléide initial appelé « père ». Ces noyaux sont appelés « descendants radioactifs ou produits de filiation ». 113.

Filière de réacteurs+ (ou **filière**) **:** catégorie de réacteurs présentant des caractéristiques communes relatives à la nature et à l'agencement du combustible, du modérateur éventuel et du fluide de refroidissement. C'est une voie possible de réalisation de réacteurs nucléaires capables de produire de l'énergie dans des conditions rentables. 16, 17, 45, 51, 127, 129, 130, 131, 132, 143, 166, 177, 178, 187, 199, 207, 213, 219, 225, 228, 249.

Fissile+ **:** se dit d'un **nucléide*** dont les **noyaux*** sont susceptibles de subir une **fission*** sous l'effet de **neutrons*** de toutes énergies, aussi faibles soient-elles. Exemples : l'uranium 233, l'uranium 235, le plutonium 239. En toute rigueur, ce n'est pas le noyau qualifié de fissile qui subit la fission, mais le noyau composé formé à la suite de la **capture*** d'un neutron. L'adjectif « fissile » n'est pas applicable aux nucléides dits « fissibles », qui sont susceptibles de subir une fission sous l'effet de neutrons d'énergie supérieure à une valeur seuil propre à ces nucléides, appelée « seuil de fission » (exemples : l'uranium 238, le thorium 232, le curium 244, l'américium 241, l'américium 243 et le californium 252). **Fissile** apparaît dans diverses expressions telles que : **noyau fissile**, **cœur fissile**, **matière fissile**, **unité fissile**, **système fissile**, **hauteur fissile**. 8, 9, 13, 15, 31, 47, 59, 81, 96, 99, 100, 101, 107, 110, 115, 116, 118, 119, 173, 174, 188, 193, 194, 199-202, 204, 209, 210, 211, 219, 228, 229, 235, 236, 237, 238, 239, 240-245.

Fission+ **:** division d'un noyau lourd en deux fragments, appelés « **produits de fission*** », dont les masses sont du même ordre de grandeur. Cette transformation, qui est un cas particulier de désintégration radioactive (« **fission spontanée** ») de certains noyaux lourds, dégage une quantité importante d'énergie et est accompagnée par l'émission de neutrons et de rayonnement *gamma*. La fission des noyaux lourds dits « **fissiles*** » peut être induite par une collision avec un neutron. 7-14, 19, 21-23, 25-32, 39-41, 45-47, 55, 56, 59, 63, 64, 89, 92, 93, 96-100, 104, 108, 111, 115, 116, 118, 120, 173, 175, 176, 180, 190, 193, 194, 197, 199, 210, 213, 219, 228, 235-238, 244.

FLICA : code de simulation thermohydraulique développé au CEA. 215, 217-219, 226.

FLOPS *(FLoating point Operations Per Second)* **:** nombre d'opérations à virgule flottante par seconde. 1 pétaflops = 10^{15} opérations par seconde ; 1 exaflops = 10^{18} opérations par seconde. 155-160.

Fluence+ **:** intégrale d'une densité de flux de particules sur un intervalle de temps donné. La fluence est une unité de dose utilisée pour quantifier l'irradiation des matériaux. C'est le nombre de particules (par exemple des neutrons) arrivant par unité de surface durant l'irradiation. 9, 13, 32, 103, 106, 110, 135, 136, 168, 180, 181, 185, 189, 196, 211, 213, 247, 250.

Flux adjoint : solution de l'équation adjointe de transport. 58, 121, 202.

Flux de neutrons : nombre de neutrons qui traversent une unité de surface par unité de temps. 12, 22, 23, 28, 46, 54, 56, 77, 97, 99, 101, 102, 107, 110, 113, 115, 116, 136, 174, 211, 247, 248.

Flux total intégré sur le temps : voir **Fluence**. 13.

Fonction de transfert (d'un réacteur nucléaire) **:** fonction qui relie la réponse fréquentielle de la population de neutrons dans un réacteur au spectre fréquentiel d'une source neutronique située en son sein. 174.

Formulaire de calcul (ou Formulaire) **:** outil composé de bibliothèques de données nucléaires, de **codes de calcul** et de procédures de calcul validées et qualifiées qui a pour vocation le calcul des grandeurs neutroniques d'intérêt (par exemple, le **facteur de multiplication effectif**). 21, 126, 127, 129, 130, 143, 144, 145, 147, 165-172, 228, 229-231, 242.

Fukushima : accident nucléaire de perte de réfrigérant survenu à Fukushima (Japon) dû à un séisme suivi d'un tsunami d'une ampleur exceptionnelle (mars 2011). 51.

Fuites (de neutrons) **:** neutrons s'échappant du **cœur*** d'un réacteur nucléaire. 41, 51, 54, 78, 115, 143, 154, 174, 177, 193, 197, 199-201, 205, 208, 211, 212, 219, 232, 236, 238.

Fusion du cœur : accident nucléaire au cours duquel le **combustible nucléaire*** est porté à assez haute température pour que le combustible nucléaire fonde et se rassemble sous forme d'un magma corrosif (le **corium***) au fond de la cuve du réacteur. 200.

Fusion nucléaire+ **:** réaction nucléaire au cours de laquelle deux **noyaux*** légers s'unissent pour former un noyau plus lourd. 21, 29, 39, 141, 180, 186, 190, 226, 249-251.

Gaine de combustible+ (ou **gaine**) **:** enveloppe scellée contenant du **combustible nucléaire***, qui assure le confinement des matières radioactives et la protection du combustible contre les agressions du **caloporteur***. 62, 63, 188, 190, 197, 200, 201, 205, 218, 221, 223, 225.

Gamma* : photons de haute énergie, émis en particulier lors de réactions nucléaires ou lors de la désexcitation des noyaux atomiques. 8-10, 22, 27, 28-30, 32, 35, 105, 107, 137, 146, 172, 176, 181, 185, 186, 188-191, 196, 215, 227, 232-235, 247-249.

GEN I : réacteurs de première génération utilisant de l'uranium naturel (UNGG, MAGNOX…). 28, 187.

GEN II : réacteurs de deuxième génération (décennies 1970, 1980) : REP, REB, RNR-Na, RBMK, CANDU, HTR, Réacteur à sels fondus. 28, 187.

GEN III : réacteurs de troisième génération (à partir de 2005) : REP avancés : EPR, AP 600, AP 1000… REB avancés : ABWR II, ESBWR, HCBWR, SWR1000, Réacteurs à eau lourde avancés : ACR700, Réacteurs intégrés (petites puissances). 28, 187.

GEN IV : réacteurs de quatrième génération (à partir de 2040) : **RNR-G***, **RNR-Na***, **RTHT***, prototype **ASTRID***… 28, 187, 228.

Générateur de vapeur (**GV**) **:** dans un réacteur nucléaire, échangeur permettant le transfert de la chaleur d'un fluide caloporteur primaire à l'eau du circuit secondaire de refroidissement, et la transformant en vapeur qui entraîne le groupe turboalternateur. 123, 194, 218.

Grappe de commande+ **:** voir **Barre de commande***. 120, 172, 176, 199, 197, 198, 215, 223-225.

Gray : unité de **dose** radioactve absorbée, correspondant à l'absorption d'une énergie d'un joule par kilo de matière.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 263

Groupe (**d'énergie**) **:** intervalle en énergie dans lequel des valeurs moyennes sont attribuées aux diverses grandeurs caractéristiques de l'interaction des neutrons avec leur environnement. 33-35, 40, 53, 62, 64-72, 75-77, 80, 81, 83, 84, 99, 136.

GT-MHR : réacteur à caloporteur gaz développé par General Atomics *(GasTurbine Modular High Temperature Reactor)*. 178, 187, 219, 220.

Homogénéisation : opération consistant à remplacer une configuration hétérogène (un assemblage par exemple) par un milieu homogène équivalent vis-à-vis d'un ou plusieurs critères pré-définis (conservation des taux de réaction par exemple). 16, 50, 52-54, 127, 129, 138, 143, 177, 198, 202, 217, 254.

HPC *(High Performance Calculation)* **:** calcul haute performance rendu possible grâce aux **superordinateurs***. 17, 98, 125, 126, 143, 149, 152, 153, 156, 158, 169, 255.

Importance (**fonction d'importance**, **carte d'importance**) **:** cette notion renvoie directement au **flux adjoint*** utilisé à diverses fins en neutronique : calcul de perturbation, calcul de grandeurs effectives, accélération d'une simulation Monte-Carlo grâce à l'établissement d'une carte d'importance. 58, 102, 104, 106, 140, 189, 202, 250.

Incertitude (**propagation d'incertitudes**) **:** 21, 23, 25-28, 31, 33, 52, 58, 104, 126, 130, 132, 136, 143, 144, 147, 149, 152, 158, 165-170, 172, 173, 175, 177- 179, 188, 189, 191, 203, 230-232, 254.

Incertitude cible : incertitude visée dans un calcul à but utilitaire. 173, 203.

Indice de spectre : voir **Spectrométrie des neutrons**. 166, 173.

Isogénérateur : qualifie un réacteur nucléaire fonctionnant en mode d'**isogénération**. 200.

Isogénération : mode de fonctionnement d'un réacteur nucléaire dans lequel le réacteur produit autant de combustible **fissile*** qu'il en consomme (voir **Facteur de conversion** et **Surgénérateur**). 201.

Isotope : tout nucléide d'un élément donné. Les isotopes sont les formes d'un même élément dont les noyaux possèdent un nombre de protons identique et un nombre de neutrons différent. 22, 35, 41, 70, 85, 110-112, 205, 229, 236-238, 240, 241, 243-245.

ITER : prototype de réacteur pour l'étude de la fusion thermonucléaire contrôlée, qui fait l'objet d'une collaboration internationale. 190, 226, 249, 250, 251.

JEF (**JEF-2**), **JEFF** (**JEFF-3**) **:** base de données nucléaires, centralisée par l'AEN/OCDE. 11, 21, 23, 27-29, 31, 36, 64, 107, 111, 128, 130, 133, 143, 144, 181, 229, 230, 242, 253.

k_{∞} **:** voir **Facteur de multiplication***.

k_{eff} **:** voir **Facteur de multiplication***.

Léthargie : variable sans dimension utilisée en neutronique pour caractériser la perte d'énergie d'un neutron selon la relation : $u = \ln(E_0/E)$, où E_0 est une énergie de référence. 12, 65, 66, 67, 68.

Logiciel (ou **code**) **de calcul :** programme de calcul numérique sur ordinateur, constitué d'expressions mathématiques codées relatives à la représentation simplifiée (modélisation) d'un système ou d'un processus afin de le simuler. 16, 18, 21, 23, 27, 28, 35, 37, 52, 54, 62, 65, 67, 69, 71, 73, 80, 85, 87, 89, 94, 97, 103, 104, 121-123, 127-146,150-154, 160, 165, 166, 168, 169, 178, 180, 181, 196, 199, 203, 206, 208, 212, 215, 217, 220, 225, 226,228, 234, 242, 247, 249, 250, 254.

Magnox : alliage d'aluminium et de magnésium employé comme matériau de gainage, en particulier dans certains réacteurs britanniques à caloporteur CO_2, appelés également « Magnox ». 187.

Maillage multigroupe : partition d'un domaine en énergie par des intervalles appelés « groupes », à l'intérieur desquels toute grandeur dépendant de l'énergie est représentée par une valeur constante. 33, 66-68, 70.

Maquette critique : réacteur mettant en jeu de très faibles puissances, dédié à des études expérimentales de neutronique. Son comportement neutronique est directement extrapolable aux phénomènes physiques rencontrés dans les réacteurs de puissance, à un *facteur de représentativité* près, grâce à la linéarité des équations de la neutronique. 16, 130, 143, 166, 171, 172, 176, 181, 254.

Masse critique^{+} **:** masse minimale de noyaux de matière **fissile*** nécessaire pour que, lors d'une **réaction en chaîne***, le nombre de **neutrons*** produits soit égal au nombre de neutrons absorbés. Voir aussi **critique***. 15, 235, 237, 240, 243.

MCNP : code américain de calcul Monte-Carlo pour le transport de neutrons et de particules chargées. 105, 137, 140, 151, 160, 226, 250, 251.

MENDEL *(ModElisatioN code for DEpletion in nucLear systems)* **:** code d'évolution de nouvelle génération partagé par les codes de transport **APOLLO-3®*** et **TRIPOLI-4®***. **MENDEL** calcule les grandeurs physiques du **cycle du combustible*** (voir **DARWIN***). 127, 131, 132, 134-136.

Méthode des caractéristiques : voir surtout p 82. Voir aussi p 62, 77, 80-85, 87, 126, 127, 130, 143, 145, 146, 154, 197, 203, 205-207, 217, 218.

Méthode des probabilités de collision P_{ij} : voir surtout p 84. Voir aussi p. 69, 84, 127, 130, 205-208.

Méthode (calcul) **de Monte-Carlo :** méthode statistique d'approximation de la valeur d'une intégrale en utilisant un ensemble de points aléatoirement distribués selon une certaine probabilité. Elle consiste à répéter l'attribution d'une valeur numérique dépendant du déroulement d'un processus où le hasard intervient puis à calculer une moyenne et sa dispersion statistique (traduisant sa précision) sur l'ensemble des valeurs obtenues. En théorie du transport des particules dans la matière, cette méthode consiste à simuler le cheminement d'un très grand nombre de particules en tenant compte exactement de la géométrie et des interactions nucléaires, puis à comptabiliser les résultats auxquels on s'intéresse. 11, 16, 34, 52, 55, 62, 89-91, 97, 98, 100, 102, 104-106, 125, 131, 133, 134, 137, 140, 142, 160, 167, 196.

Méthode (calcul) **déterministe :** méthode de calcul du comportement de systèmes complexes faisant appel à la résolution analytique ou numérique des équations décrivant tout ou partie de ces systèmes. En neutronique, les méthodes déterministes sont utilisées pour la résolution numérique de l'équation du transport, dans le but de déterminer le flux de neutrons. Elles nécessitent en général la discrétisation des variables d'espace, d'énergie et de temps. Elles sont très employées pour la conception des réacteurs nucléaires. 51, 52, 53, 126, 127, 136, 143, 152, 178.

Méthode S_N : voir p. 72.

Méthode variationnelle nodale : voir p. 78.

MeV : méga électronvolt. Cette unité d'énergie est généralement utilisée pour exprimer l'énergie dégagée par les réactions nucléaires. 1 MeV correspond à 1.6 10^{-13} joule.

Modérateur^{+} **:** matériau formé de noyaux légers qui ralentissent les neutrons issus de la fission par collisions élastiques. Les modérateurs sont utilisés pour réduire l'énergie des neutrons émis par les atomes d'uranium lors de la fission, afin d'augmenter leur probabilité de provoquer d'autres fissions. Le matériau modérateur doit être peu capturant afin de ne pas « gaspiller » les neutrons et être suffisamment dense pour assurer une modération efficace. 22,

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 264

45, 52, 166, 171, 193-195, 197, 198, 203-205, 207, 208, 211, 215, 216, 218, 219, 224, 225, 237, 244.

Modération : processus qui favorise le ralentissement des neutrons afin de les mettre progressivement en équilibre thermique avec la matière dans laquelle ils diffusent. Voir aussi **modérateur***. 203, 204, 210, 218, 219, 237, 238, 240, 241, 243, 244.

MORET est un code **multigroupe** et ponctuel de simulation neutronique à 3 D basé sur la méthode de MonteCarlo pour le calcul du transport des neutrons en criticité ; il est développé par l'Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN). 137, 140.

Mox+ (ou **MOX**, **mox**) **:** combustible nucléaire à base d'un mélange d'oxydes d'uranium (naturel ou appauvri) et de plutonium. L'utilisation de combustible MOX permet le **recyclage*** du plutonium. 69-71, 79, 80, 110, 128, 171, 172, 176, 197, 223, 227-229, 231, 234.

Monte-Carlo : voir **Méthode de** (calcul) **Monte-Carlo***.

Multigroupe : qualifie une grandeur mise en groupe, c'est-à-dire moyennée sur un intervalle d'énergie ou **groupe*** d'énergie.

Multiphysique : qualifie une approche calculatoire ou une plateforme logicielle dans lesquelles plusieurs codes de calculs relevant de différentes disciplines sont impliqués, par exemple la neutronique, la thermohydraulique et la thermomécanique. Voir aussi **SALOMÉ***. 149, 254.

NEPHTIS : schéma de calcul* destiné à l'étude des réacteurs à haute température, développé sur la base des codes **APOLLO2*** et **CRONOS2***. 130, 220.

Neutrino : particule élémentaire de charge électrique nulle, de masse très faible, capable de traverser de grandes épaisseurs de matière tout en véhiculant une énergie importante, produite par interaction faible dans différentes réactions nucléaires (désintégrations bêta). 8, 10.

Neutron : particule élémentaire électriquement neutre, de masse 1,675 10^{27} kg. La nature de ce **nucléon*** a été découverte en 1932 par le physicien britannique James Chadwick. Les neutrons constituent, avec les protons, les noyaux des atomes et provoquent les **réactions de fission*** des noyaux **fissiles*** dont l'énergie est utilisée dans les réacteurs nucléaires. Voir surtout p. 7.

Neutronique : étude du cheminement des **neutrons*** dans les milieux **fissiles*** et non fissiles et des réactions qu'ils induisent dans la matière, en particulier dans les réacteurs nucléaires sous l'angle de leur multiplication, de l'établissement et du contrôle de la **réaction en chaîne***. Voir surtout p. 7.

Neutrons épithermiques : voir **Épithermique***.

Neutrons prompts+ **: neutrons*** émis directement au moment même de la fission. 8, 26, 27, 29, 30, 46, 55, 115, 116, 118, 119, 120, 223, 224.

Neutrons rapides+ **:** neutrons d'un réacteur nucléaire dont l'énergie cinétique est très supérieure à celle des neutrons thermiques. Ces neutrons*, libérés lors de la fission, se déplacent à très grande vitesse (20 000 km/s). Leur énergie est de l'ordre du million d'**électronvolt***. 15-17, 23, 37, 66, 67, 127, 130, 133, 142, 171, 172, 187, 193, 194, 197, 199-201, 208, 211.

Neutrons retardés+ **: neutrons*** émis par les fragments de fission* avec un retard de quelques secondes en moyenne après la fission. Bien que représentant moins de 1 % des neutrons émis, ce sont eux qui, par ce décalage dans le temps, permettent in fine le pilotage des réacteurs. Voir aussi « **bêta effectif** ». 8-10, 27, 46, 47, 52, 55, 59, 60, 115-119, 172, 174, 175, 194, 200, 223.

Neutrons thermiques+ (ou **neutrons lents**) **:** neutrons en équilibre thermique avec la matière dans laquelle ils se déplacent. Dans les réacteurs nucléaires à eau, les neutrons thermiques vont à une vitesse de l'ordre de 2 à 3 km/s et leur énergie est de l'ordre d'une fraction d'**électronvolt***. 15, 18, 27, 31, 34, 66, 67, 110, 111, 115, 117, 179, 180, 193, 198, 199, 210, 211, 227.

Noyau : cœur de l'atome dans lequel sont concentrées la majeure partie de sa masse et toute sa charge positive. Mis à part l'hydrogène, il est constitué de protons et de neutrons. Voir l'introduction p. 8.

Noyaux lourds : isotopes des éléments dont le nombre de protons (numéro atomique) est égal ou supérieur à 80. Tous les actinides et leurs produits de filiation figurent dans ce groupe. 8, 40, 66, 107, 108, 110, 129, 131, 141, 177, 193, 195, 200, 204, 205, 219, 228, 234.

Nucléide+ **:** espèce nucléaire caractérisée par son nombre de masse, son numéro atomique et son état d'énergie nucléaire. Voir l'introduction p. 12.

Nucléons : particules constitutives du **noyau*** atomique, c'est à dire les protons et les **neutrons***, liées entre elles par la force nucléaire qui assure la cohésion du noyau. 24, 40.

OSIRIS : réacteur de recherche implanté à Saclay, dédié à l'étude des matériaux et des combustibles sous irradiation. 130, 166, 180-182, 187, 205, 206, 232, 234.

Paire (création de) **:** processus par lequel l'énergie d'un rayonnement gamma, si elle est suffisamment grande, est convertie en matière sous forme d'une paire particule-antiparticule. 32, 176.

pcm : unité de **réactivité*** : pour cent mille, c'est-à-dire 10^{-5}.

Probabiliste : voir **Méthode de** (calcul) **Monte-Carlo***

Période d'un nucléide radioactif+ (ou **période radioactive**) **:** temps nécessaire pour la désintégration de la moitié des atomes d'un échantillon d'un nucléide radioactif. La période constitue une propriété caractéristique de chaque **isotope*** radioactif. 10, 32, 35.

Photon : particule élémentaire de masse nulle, représentant un quantum de lumière. 9, 11, 12, 28, 31, 32, 33, 38, 40, 43, 45, 104, 133, 140, 144, 160, 196.

Physique des cœurs : étude des cœurs de réacteurs nucléaires, domaine majeur d'application de la neutronique. 127.

Pion (ou **méson pi**) **:** particule formée d'un quark et d'un antiquark u et d, médiatrice de la force nucléaire entre deux nucléons. 40.

Plenum (ou **chambre d'expansion**) **:** volume libre à l'intérieur du **crayon***, non occupé par la matière combustible. Ce volume sert à confiner les gaz de fission relâchés par le combustible, et à éviter que ce relâchement ne conduise à augmenter par trop la pression dans le crayon. Dans le **réacteur***, le plenum est l'espace libre dans la cuve au delà de l'espace occupé par les **assemblages combustibles***. 200, 201, 222.

Plutonium : élément formé par capture de neutrons par l'uranium dans le cœur des réacteurs nucléaires. Les **isotopes** impairs du plutonium sont **fissiles**, ce qui fait du plutonium une matière nucléaire valorisable, par exemple sous forme de combustible **Mox***. 9, 31, 69, 70-72, 108, 110, 111, 160, 174, 200, 201, 204, 211, 219, 226-229, 235, 237, 242-244.

Poison (**neutronique**)+ **:** éléments dotés d'un pouvoir élevé de capture des neutrons utilisés pour compenser, du moins en partie, l'excédent de réactivité des milieux fissiles. Quatre éléments naturels sont particulièrement neutrophages : le bore (grâce à son **isotope*** B 10), le cadmium, le hafnium et le gadolinium (grâce à ses isotopes Gd 155 et Gd 157). Certains sont dits « consommables » car ils disparaissent progressivement au cours de la combustion

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 265

en réacteur. Plusieurs **produits de fission*** sont des poisons neutroniques. Voir aussi **Empoisonnement***. 7, 110, 111, 128, 143, 144, 171, 174, 185, 194, 195, 197, 199, 203, 208, 229, 237, 238, 243, 245.

Poison consommable : poison neutronique introduit à dessein dans un réacteur pour contribuer au contrôle des variations à long terme de la réactivité grâce à sa disparition progressive. 211.

ppm : unité de concentration, partie par million, c'est-à-dire 10^6.

Produits d'activation (**PA**) **: nucléides** produits par capture neutronique. On réserve généralement ce terme aux nucléides produits dans le combustible et les structures du **cœur** et du reste du réacteur, à l'exclusion des transformations des noyaux lourds. Les produits d'activation les plus importants sont le tritium, le carbone 14, le chlore 36, le manganèse 54, le fer 55, le cobalt 60 le molybdène 93 et le niobium 94. 131, 141, 230.

Produits de fission+ (**PF**) **: nucléides** produits soit directement par la **fission*** nucléaire, soit indirectement par la **désintégration*** des fragments de la fission. Pour la fission binaire induite par un neutron thermique sur l'uranium 235, leurs numéros atomiques sont compris entre Z = 28 (nickel) et Z = 66 (dysprosium) et leurs nombres de masse entre A = 72 et A = 193. 8, 9, 26, 27, 29-31, 39, 41, 46, 107, 108, 110, 129, 131, 141, 173, 176, 194, 195, 196, 198, 199, 202, 228, 229, 231, 232, 235, 237, 242.

Proton : une des particules fondamentales qui constituent un atome. Le proton se trouve dans le noyau et possède une charge électrique positive équivalente à la charge négative d'un électron et une masse semblable à celle d'un neutron. Voir introduction p. 7.

Puissance nominale : pour un réacteur nucléaire, puissance maximale de fonctionnement autorisée en exploitation. 194, 221, 222.

Puissance résiduelle+ **:** puissance thermique développée par un réacteur nucléaire à l'arrêt, provenant essentiellement de l'**activité** des **produits de fission**. 27, 130, 132, 137, 185, 188, 195, 196, 207, 220, 223, 227, 229, 230-234.

Quadrature de Gauss : formule de quadrature présentant des propriétés mathématiques utilisées dans les méthodes numériques de résolution de l'**équation du transport***. 34, 73, 74.

Qualification (**d'un formulaire**) : ensemble des processus permettant de décréter un code de calcul et ses données de base bons pour le service, dans les limites d'un domaine de validité défini et avec des incertitudes maîtrisées. Ces processus incluent des preuves de qualité des données de base, ainsi que la **vérification** et la **validation** du code. Voir aussi **Formulaire de calcul***. 17, 21, 126, 143, 144, 147, 163, 165, 166, 169, 170, 171, 172, 186, 187, 196, 212, 228, 229, 230, 231.

Radioisotope : les atomes des éléments chimiques peuvent avoir de nombreux isotopes (différentes formes) ayant des numéros atomiques et des masses atomiques différents. Si un isotope est radioactif, on l'appelle parfois **radioisotope** ou **radionucléide**. Voir **radionucléide**. 205.

Radioactivité : propriété que possèdent certains éléments naturels ou artificiels dont le noyau est instable d'émettre spontanément des particules, ou un rayonnement. Est plus généralement désignée sous ce terme l'émission de rayonnements accompagnant la **désintégration** d'un élément instable ou la **fission**. 14, 41, 109, 112, 130, 187, 247, 249.

Radiolyse : dissociation de molécules par des rayonnements ionisants. 186, 187, 190.

Radionucléide : nucléide* instable d'un élément qui décroît ou se désintègre spontanément en émettant un rayonnement. 19, 32, 57, 107, 141, 229, 248.

Radioprotection+ **:** ensemble des règles, des procédures et des moyens de prévention et de surveillance visant à empêcher ou à réduire les effets nocifs des rayonnements ionisants sur les personnes. Le terme « radioprotection » concerne les effets nocifs produits sur les personnes, directement ou indirectement, ainsi que les atteintes portées à l'environnement. 8, 9, 12, 14, 15, 29, 35, 37, 39, 41, 47, 73, 104, 133, 137, 141, 185, 187, 188, 247, 253, 254.

Radiotoxicité potentielle (ou **inventaire radiotoxique**) **:** pour une matière contenant une certaine quantité de radionucléides, valeur de la dose efficace engagée qui résulterait de l'incorporation de la totalité des radionucléides présents. Produit de l'inventaire en radionucléides par le facteur de dose « ingestion » desdits radionucléides, la radiotoxicité potentielle d'une certaine quantité de radionucléides, par exemple dans des déchets, est un indicateur du pouvoir de nocivité de cette quantité de radionucléides en situation accidentelle. 12, 131, 185, 186, 190, 248, 249.

Rapport de modération : dans la matière **fissile**, rapport entre le volume ou le nombre d'atomes du **modérateur** et celui de la matière fissile. Ce rapport règle l'énergie moyenne des neutrons. 204, 210, 218, 219, 243.

Rayonnement de freinage (ou **bremsstrahlung**) : rayonnement électromagnétique apparaissant lorsqu'une particule chargée est freinée (ou accélérée) par un champ électromagnétique. Il est émis par exemple par un électron de haute énergie lors de son passage dans le champ coulombien d'un noyau. 21, 32, 176, 186.

RBMK : réacteur à modérateur graphite refroidi par de l'eau circulant dans des tubes de force. C'est ce type de réacteur qui était en cause dans la catastrophe de Tchernobyl. 187.

RCG, **RCG-R :** réacteur à caloporteur gaz. 187, 194.

Réacteur à eau bouillante+ (**REB**) **:** réacteur nucléaire modéré et refroidi par de l'eau ordinaire, portée à ébullition dans le cœur dans les conditions normales de fonctionnement. 129, 135, 166, 171, 187, 194, 195, 203, 204, 208, 217, 218, 219, 228, 229.

Réacteur à eau légère (**REL**) (ou **réacteur à eau ordinaire**) **:** réacteur nucléaire dont le caloporteur et le modérateur sont de l'eau légère. Cette famille de réacteurs regroupe les **réacteurs à eau sous pression** et les **réacteurs à eau bouillante**. 204, 218.

Réacteur à eau lourde : réacteur nucléaire dont le **modérateur*** et, habituellement, le **caloporteur**, sont de l'eau lourde. 16, 180.

Réacteur à eau ordinaire : voir **Réacteur à eau légère**.

Réacteur à eau sous pression+ (**REP**) **:** réacteur nucléaire modéré et refroidi par de l'eau ordinaire, dans lequel la chaleur est transférée du cœur à l'échangeur de chaleur par de l'eau maintenue sous une pression élevée dans le circuit primaire afin d'éviter son ébullition. 23, 37, 63, 77, 89, 97, 98, 101, 110, 111, 129, 135, 152, 155, 166, 168, 171, 180, 181, 187-189, 194-198, 200, 203-208, 217-219, 223, 225, 227-229, 232, 234, 247, 248.

Réacteur à haute température+ (**RHT**) **: réacteur à neutrons thermiques*** refroidi au gaz, dans lequel la température du **caloporteur*** à la sortie du **cœur*** est comprise entre 600 °C et 900 °C. Le caloporteur est généralement de l'hélium. 129, 172, 194, 207, 208, 219-222.

Réacteur à neutrons rapides+ (**RNR**) **: réacteur nucléaire*** dans lequel on limite la présence de matières pouvant ralentir les **neutrons*** afin que les **fissions*** soient produites principalement par des **neutrons rapides***. 23, 29, 37, 77, 130, 133, 142, 166, 172, 187, 193, 194, 195, 199, 201, 202, 208, 210, 211, 228, 229.

Réacteur Jules Horowitz (**RJH**) **:** réacteur de recherche destiné à l'étude des matériaux et des combustibles sous irradiation, à l'étude de certaines situations accidentelles et à la production de radio-isotopes, actuellement en construction sur le site CEA de Cadarache. 15, 28, 29, 126, 128-132, 144, 145-147, 168, 205-208.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 266

Réacteur nucléaire (ou **réacteur nucléaire à fission**) **:** appareil permettant de produire et de contrôler une **réaction de fission** nucléaire en **chaîne*** autoentretenue ; par extension, ensemble constitué par cet appareil et les installations associées. Ses composants essentiels sont le **combustible* fissile***, le **modérateur***, le blindage, les **barres de commande*** et le **caloporteur***. Il existe une grande variété de réacteurs nucléaires qui se distinguent essentiellement par leur destination : les réacteurs de recherche, les réacteurs d'irradiation, les réacteurs expérimentaux, les réacteurs prototypes, les réacteurs de puissance. 7, 9, 15, 16, 18, 28, 45, 51, 62, 63, 97, 103, 107, 113, 115, 116, 125, 153, 167, 180, 191, 196, 209, 210, 211, 213, 216, 229, 231, 247, 253.

Réacteur surgénérateur : voir **Surgénérateur***.

Réaction de fission en chaîne+ (ou **réaction de fission** ou **réaction en chaîne**) **:** suite de **fissions*** nucléaires au cours desquelles les neutrons libérés provoquent de nouvelles fissions, à leur tour génératrices de nouveaux neutrons provoquant de nouvelles fissions et ainsi de suite. 7-9, 11, 27, 58, 66, 120, 224, 228, 235-238.

Réactivité+ : quantité sans dimension permettant d'évaluer les petites variations du **facteur de multiplication*** ***k*** autour de la valeur critique et définie par la formule ρ = (k-1)/k. Sa valeur étant très petite, elle est généralement exprimée en cent millièmes, en prenant pour unité le **pcm** (pour cent mille). Dans un réacteur, la réactivité est nulle lorsqu'il est **critique***, positive s'il est **sur-critique*** et négative s'il est **sous-critique***. 13, 52, 58, 59. 110, 115, 117-120, 129, 143, 146, 147, 168, 171, 172, 174-176, 178, 180, 185, 188, 194, 195, 196, 199, 200-206, 211, 213, 215, 216, 218, 219, 221-225, 229, 242.

Recyclage : réutilisation en réacteur de matières nucléaires issues du **traitement*** du **combustible usé***. 130, 228.

Réflecteur : partie du réacteur placée en bordure du **cœur***, en vue de lui renvoyer les **neutrons*** qui s'en échappent. 28, 54, 66, 79, 129, 144-146, 178, 196, 198, 201, 202, 204, 205, 206-208, 210, 211, 219, 220, 239, 240, 245.

Rendement de fission (d'un nucléide) **:** probabilité d'obtention de **nucléides*** par **fission***.

Rendement de fission cumulé (ou **rendement cumulatif**) (d'un produit de fission) **: rendement de fission primaire** auquel on ajoute toutes les contributions issues de la **décroissance radioactive*** des noyaux pères qui viennent alimenter ce produit de fission (définition adoptée dans les bibliothèques de données nucléaires). 27, 111.

Rendement de fission primaire (ou **rendement indépendant**) (d'un produit de fission) **:** taux de production d'un **produit de fission*** lors d'une fission évalué après l'émission des neutrons prompts et avant toutes les autres décroissances radioactives par transitions β. La somme de ces rendements de fission primaire est normalisée à 2 (en négligeant la **fission ternaire**). 13, 27, 111, 242.

REP+ **:** voir **Réacteur à Eau sous Pression***.

RES : Réacteur d'ESsais pour la propulsion navale, installé sur le site CEA de Cadarache.

Réseau : dans le **cœur*** d'un réacteur nucléaire, disposition selon un motif régulier des **assemblages combustibles***, du **caloporteur***, du **modérateur***, des **absorbants*** neutroniques et des matériaux de structure. Chaque unité de ce motif est appelé « **cellule*** ». 16, 52, 54, 73, 80, 81, 87, 127, 129, 130, 138, 139, 145, 154, 166, 171, 172, 204, 205, 206, 219.

Réseau de neurones : modèle de calcul inspiré de la biologie du cerveau. 104, 149.

Résonance : terme utilisé en physique nucléaire pour désigner un état excité du noyau composé formé par l'addition d'un noyau cible et d'un neutron incident. Dans certains domaines d'énergie incidente, les sections. 11, 14, 18, 21-25, 31, 34, 37, 53, 54, 61, 62, 64, 66, 67, 68, 69, 71, 72, 85, 130, 177, 195, 197, 198, 202-205, 219, 242.

Résonance résolue : résonance* de l'interaction neutron-noyau pour laquelle les paramètres spécifiques (énergie, largeurs) peuvent être mesurés, par opposition aux résonances non résolues, pour lesquelles seules une connaissance statistique est possible. 21, 23, 24, 34, 85.

Retraitement+ **:** traitement des **combustibles usés*** pour en extraire les matières **fissiles*** et **fertiles*** de façon à permettre leur réutilisation, et pour conditionner les différents **déchets*** sous une forme apte au **stockage***. Voir aussi traitement du combustible usé*. 186, 187, 189, 227, 228, 229.

RHT : voir **Réacteur à haute température***.

RIA *(Reactivity Insertion Accident)* **:** accident d'insertion de réactivité. 188, 222-224, 226.

RJH : voir **Réacteur Jules Horowitz***.

RNR+ **:** voir **Réacteur à neutrons rapides***.

RNR-G+ **:** voir **Réacteur rapide refroidi au gaz***.

Réacteur rapide refroidi au gaz (**RNR-G**) **:** réacteur à **neutrons rapides*** dont le **caloporteur*** est du gaz, généralement de l'hélium. 208.

RNR-Na+ **:** voir **Réacteur rapide refroidi au sodium***.

Réacteur rapide refroidi au sodium (**RNR-Na**) **: réacteur à neutrons rapides*** dont le **caloporteur*** est du sodium liquide. 130, 187, 199.

RTHT+ **: Réacteur à Très Haute Température*** (VHTR, *Very High Temperature Reactor* en anglais). 177, 187, 208, 220, 222, 226.

Réacteur à très haute température (**RTHT**) : **réacteur à neutrons thermiques*** où le **caloporteur*** est de l'hélium dont la température à la sortie du cœur est supérieure à 900 °C. 187, 208, 220, 222

SALOMÉ : plateforme développée au CEA, utilisée comme outil de couplage permettant d'échanger les données et de piloter les différents codes à coupler pour la simulation des systèmes nucléaires. 217, 218, 226.

Samarium : le **samarium 149** est un produit de fission fortement absorbant de neutrons. Sa présence dans le cœur d'un réacteur à neutrons thermiques a un impact important sur la population neutronique : voir **empoisonnement***. 51, 108, 110, 111, 198, 206.

Schéma de calcul : voir p. 125-126 et voir aussi **formulaire de calcul***. 51, 126, 146, 177, 178, 181, 196, 204-207, 218-220, 248.

Score (ou **encaissement**) **:** valeur attribuée à l'estimateur (variable aléatoire) d'une grandeur physique lors d'un événement au cours d'une simulation **Monte Carlo***. 91, 96, 133.

Section efficace microscopique : aire équivalente d'interaction qui caractérise la probabilité que se produise une interaction d'un type déterminé entre une particule incidente, ou un rayonnement incident, et une particule cible, et qui permet d'évaluer le nombre d'interactions entre un flux de particules (par exemple des neutrons) ou de rayonnement et un système de particules cibles (par exemple des noyaux d'uranium). Les sections efficaces sont généralement exprimées en barns (1 barn = 10^{24} cm^2). En neutronique, on distingue principalement les réactions induites par les neutrons : **fission***, **capture***, et **diffusion élastique***. À chacune de ces réactions correspond une section efficace microscopique. 11, 12, 23-26, 33, 34, 45-47, 49, 57, 58, 64-66, 68, 69, 76, 89, 90, 92, 93, 95, 96, 103, 111, 193, 195, 198, 210, 220, 230, 253.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 267

Section efficace macroscopique⁺ : produit de la **section efficace microscopique*** par la concentration du nucléide considéré. En neutronique, on exprime la section efficace macroscopique couramment en cm^{-1}. Elle s'interprète aussi comme une densité de probabilité : probabilité d'interaction (de la particule considérée se déplaçant dans un milieu donné) par unité de longueur. **46, 57, 58, 64, 66, 68, 76, 90, 92, 93, 96.**

Section efficace de transfert (**matrice**, **loi**, **section efficace multigroupe**) : **section efficace*** caractérisant le passage d'un neutron d'un **groupe* d'énergie** à un autre groupe d'énergie lors d'une réaction de diffusion (élastique, inélastique…). **35, 46, 53, 63, 65, 67, 69, 89, 116, 117.**

Sievert (Sv) **:** unité de dose biologique. **246.**

Simulation : ensemble de méthodes consistant à reproduire ou prévoir par le calcul sur ordinateur le fonctionnement de systèmes complexes, en particulier dans les différents secteurs de la recherche et du développement nucléaires. Après validation, ces méthodes peuvent être utilisées pour la conception de nouveaux systèmes. **11, 26, 27, 29, 30, 39, 40, 41, 44, 51, 57, 58, 85, 89, 91-104, 106, 120, 123, 125, 133, 134, 136, 141, 142, 144, 149-153, 160, 165, 167, 175, 181, 191, 211, 212, 215, 216, 225, 226, 233, 247, 253-255.**

Socket : terme informatique désignant une interface logicielle permettant la communication entre processus. **157, 158.**

Source⁺ : matière radioactive qui produit des rayonnements à des fins expérimentales ou industrielles. **12, 107, 189, 190, 248.**

Sous-critique⁺ : en neutronique, se dit d'un milieu multiplicateur dans lequel le nombre de **neutrons*** émis par **fission*** est plus faible que le nombre de neutrons disparaissant par absorption et par fuite. Dans ce cas, le nombre de fissions observé pendant des intervalles de temps successifs décroît et la **réaction en chaîne*** ne peut s'entretenir dans le milieu qu'avec un apport de neutrons venant de l'extérieur. Il existe par exemple des projets de réacteurs sous critiques dans lesquels les neutrons supplémentaires sont apportés dans le cœur du réacteur par un faisceau de particules accélérées. L'intérêt de ces réacteurs tient dans leur forte capacité à **transmuter*** les actinides. **7, 13, 55, 56, 58, 172, 179, 195, 202, 235, 236, 241.**

Spallation⁺ : éclatement d'un **noyau*** lourd sous l'effet du choc d'une particule incidente d'énergie très élevée s'accompagnant d'une émission importante de **neutrons***. Cette réaction nucléaire met en jeu un noyau lourd-cible et une particule, le plus souvent un proton, accélérée jusqu'à une énergie de quelques centaines de millions d'**électronvolts**. Par collisions successives sur les nucléons du noyau cible, la particule incidente éjecte entre autres un grand nombre de neutrons. Un proton de 1 milliard d'électronvolts projeté sur une cible de plomb peut ainsi générer de 25 à 30 neutrons. **39-41, 102, 131, 141, 142, 186.**

Spectre neutronique : distribution en énergie de la population des **neutrons*** présents dans le cœur d'un réacteur. **34, 179, 188, 197, 199, 200, 203, 204, 207, 208, 210, 220.**

Spectrométrie des neutrons : méthode expérimentale donnant la distribution en énergie des **neutrons** émis par une source. Le spectre de neutrons ainsi déterminé peut être intégré sur des bandes en énergie plus ou moins larges. On en déduit alors le poids de chaque bande, ou **indice de spectre**.

Spin : moment angulaire intrinsèque d'un objet quantique. On restreint parfois l'attribution du mot « spin » aux particules considérées comme élémentaires. **24, 32.**

Stockage (**de déchets radioactifs**)⁺ **:** mise en dépôt de déchets radioactifs dans une installation conçue pour assurer durablement leur confinement. Ce terme peut également désigner l'installation dans laquelle les déchets sont placés, sans projet de reprise ultérieure (forme abrégée de « centre de stockage de déchets radioactifs »). La reprise serait néanmoins possible dans le cas d'un stockage réversible (voir aussi **entreposage de déchets radioactifs**). Le stockage en couche géologique profonde de déchets radioactifs est le stockage de ces matières dans une installation souterraine spécialement aménagée à cet effet.

Stockage direct : action de stocker directement le combustible usé sans passer par les étapes de traitement et de recyclage. **130, 186, 187, 190, 202, 227, 228, 231, 233.**

Streaming : voir **Effet de canalisation**.

Sur-critique⁺ : qualifie un milieu dont le **facteur de multiplication** effectif est supérieur à 1. Un système est qualifié de sur-critique lorsque le nombre de **neutrons*** émis par **fission*** est plus grand que le nombre de neutrons disparaissant par absorption et par fuite. Dans ce cas, le nombre de fissions observé pendant des intervalles de temps successifs croît. **7, 13, 55, 56, 58, 223, 235, 236.**

Sûreté nucléaire⁺ : ensemble des dispositions techniques et des mesures d'organisation appliquées aux installations ou aux activités nucléaires, en vue de prévenir les accidents ou d'en limiter les effets ; par extension, état résultant de ces dispositions. La sûreté nucléaire concerne notamment la conception, la construction, le fonctionnement, l'arrêt définitif et le démantèlement des installations nucléaires de base, ainsi que le transport des matières radioactives. **241, 245.**

Surgénérateur⁺ : réacteur nucléaire pouvant produire plus de matière **fissile*** qu'il n'en consomme. Les nouveaux noyaux fissiles sont créés par la capture de **neutrons*** de **fission*** par des noyaux fertiles (non fissiles sous l'action de **neutrons thermiques***) après un certain nombre de **désintégrations radioactives***. Le terme « surgénérateur » s'emploie également comme adjectif. **200.**

Surgénération⁺ : mode de fonctionnement d'un réacteur nucléaire dans lequel le **facteur de conversion*** est supérieur à 1. **186, 201, 211.**

Système hybride⁺ (ou **ADS**) **:** réacteur hybride couplant un cœur de réacteur **sous-critique** avec un accélérateur de protons de haute énergie. Ce dernier fournit grâce à des réactions de **spallation*** le complément de **neutrons*** nécessaire à l'entretien de la **réaction de fission en chaîne***. **39, 40, 41, 107, 172, 186, 187.**

TALYS : Code de calcul dédié aux modèles de réactions nucléaires. **23, 25.**

Taux de combustion⁺ : au sens propre, il correspond au pourcentage d'atomes lourds (uranium et plutonium) ayant subi la **fission*** pendant une période donnée (« taux de combustion de fission »). Couramment utilisé pour évaluer la quantité d'énergie thermique par unité de masse de matière **fissile*** obtenue en réacteur entre le chargement et le déchargement du combustible (« taux de combustion massique »), il s'exprime en mégawatts·jour par tonne (MW·j/t).Voir aussi **Combustion massique***. Le **taux de combustion* de rejet** est le taux auquel l'assemblage combustible, après plusieurs cycles d'irradiation, doit être définitivement déchargé. **13, 97, 107, 109, 110, 136, 143, 144, 188, 195, 198, 199, 201, 205, 206, 208, 211, 213, 215, 219, 223, 229-231, 233, 234.**

Taux de conversion : voir **Facteur de conversion***.

Taux de fission : voir **Taux de réaction**.

Taux de production : voir **Taux de réaction**.

Taux de réaction⁺ : nombre d'interactions d'un type donné entre les **neutrons** et la matière (capture, fission, diffusion, production, etc.) par unité de temps et de volume, pour une réaction donnée. **11-14, 46, 49, 52, 53, 65-70, 89, 97, 101, 107, 109, 125, 133, 136, 151, 172, 173, 176, 185, 186, 189, 194, 196, 202, 248.**

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 268

Temps de génération : durée moyenne séparant une **fission*** de la suivante. 175.

TERA-100 : un des superordinateurs du CEA. 132, 153, 157.

Thermalisation : ralentissement des **neutrons*** afin de les mettre progressivement en équilibre thermique avec la matière du réacteur dans laquelle ils diffusent. 16, 31, 37, 178, 193.

Tokamak+ : machine toroïdale axisymétrique permettant de confiner un plasma thermonucléaire au moyen de la combinaison de deux champs magnétiques. Le plus grand tokamak au monde sera **ITER**, construit sur le site de Cadarache. 186, 190, 249, 250.

Transitoire+ : évolution lente ou rapide, programmée ou fortuite, de l'état de fonctionnement d'une installation. Dans le cas d'un **réacteur nucléaire*** sont distingués les transitoires normaux, lors desquels les valeurs des paramètres physiques restent à l'intérieur des spécifications techniques d'exploitation et les transitoires accidentels qui entraînent l'action de systèmes de protection puis de sauvegarde. Certains transitoires accidentels servent de référence pour les démonstrations de sûreté et sont utilisés pour **dimensionner*** le réacteur. 9, 52, 121, 123, 135, 144, 185, 188, 195, 215, 218, 220, 221, 222, 223, 224, 254.

Transmutation+ : transformation d'un **nucléide*** en un autre par une réaction nucléaire. 141, 199, 200, 232.

Transport (**des neutrons**, **équation du**, **calcul de**) **:** migration des neutrons dans le réacteur, depuis leur émission jusqu'à leur disparition par absorption ou fuite. 10-13, 16, 18, 33-35, 3-41, 44-46, 52-64, 66, 67, 70-77, 80-87, 89, 91, 97, 101, 102, 106, 107, 110, 115, 120-124, 127, 129-143, 146, 149, 152-154, 160, 161, 168, 171, 177, 178, 187, 191, 198, 202, 206, 208, 211, 217, 247, 250.

Transuraniens : tous les éléments dont le numéro atomique est supérieur à celui de l'uranium. Ces noyaux lourds sont produits dans les réacteurs nucléaires par **capture neutronique***. Ils se répartissent en sept familles de nucléides : uranium, neptunium, plutonium, américium, curium, berkélium et californium.

TRIPOLI, **TRIPOLI-3**, **TRIPOLI-4® :** codes de calcul neutronique de type Monte-Carlo utilisés pour simuler le transport des neutrons et des *gammas*. 16, 37, 71, 94, 95, 97, 103-106, 126-128, 131-137, 142-146, 150, 151, 160, 168, 177, 178, 180-182, 217, 218, 226, 233, 242, 247-251, 254.

UNGG : filière de réacteurs à uranium naturel, modérés au graphite et refroidis au gaz (CO_2). 187, 189, 249.

UOX+ : combustible standard des **réacteurs à eau légère*** constitué d'oxyde d'uranium **enrichi*** en uranium 235. 71, 79, 80, 108, 110, 128, 172, 197, 210, 223, 228, 229, 230- 232, 234.

Validation (**d'un code de calcul**) **:** démarche permettant de s'assurer que les résultats d'une simulation numérique issus du code reproduisent l'expérience. 40, 54, 70, 85, 95, 111, 126, 128, 136, 141, 143, 147, 165-170, 179-181, 191, 217, 226, 233, 234, 254.

Vérification (**d'un code de calcul**) **:** démarche permettant de s'assurer que les équations du modèle physique utilisé dans le code sont résolues correctement du point de vue mathématique, numérique et informatique. La vérification peut comprendre la confrontation avec des cas de calcul solubles analytiquement, ou résolus par un code supposé de référence. 95, 126, 165, 170, 191.

VVER : réacteur de puissance à eau sous pression de conception russe. 104, 129, 179, 187.

WKB (**approximation**) **:** approximation de Wentzel-Kramers-Brillouin pour la résolution d'un certain type d'équations différentielles (par exemple, l'**équation de Schrödinger*** décrivant le franchissement d'une barrière de potentiel par une particule). 25.

Xénon : le xénon 135 puissant absorbant neutronique dont la formation dans le cœur d'un réacteur comme produit de désintégration d'un autre produit de fission (l'iode) perturbe avec retard le comportement neutronique du cœur lors d'un transitoire de puissance. 9, 51, 108, 110, 111, 198, 199, 206, 221.

ZOÉ (1948-1976) **:** première pile atomique française construite à Fontenayaux-Roses, destinée à expérimenter l'entretien d'une réaction nucléaire en chaîne. 15, 180.

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 269

Table des matières

Introduction 7
Qu'est-ce que la neutronique ? 7
La neutronique : du phénomène microscopique à la grandeur macroscopique 9
Les objectifs et enjeux de la neutronique 9
Les équations de la neutronique 10
L'équation de Boltzmann 11
Les équations de Bateman 12
Couplage des équations 14
Le développement de la neutronique en France : recherche, industrie et enseignement 14
Présentation de la monographie 17

Les données nucléaires 19

De la mesure à l'évaluation des données nucléaires 21
Les sections efficaces dans le domaine des résonances résolues, non résolues et le continuum 21
Les expériences microscopiques par temps de vol 21
Les mesures intégrales analytiques de sections efficaces 22
Les modèles de réactions nucléaires 23
Les observables post-fission 26
Spectre et multiplicité des neutrons prompts de fission 26
Rendements de fission 27
L'amélioration de l'évaluation des échauffements nucléaires 28
Conclusion 28
Le traitement des données nucléaires 31
Les données présentes dans les évaluations 31
Les réactions nucléaires induites par les neutrons 31
Les réactions induites par les photons 32
Les données de décroissance radioactive 32
Les données relatives au transport des particules chargées 32
Les incertitudes sur les données nucléaires 33
Le traitement des données nucléaires 33
La représentation des données nucléaires 33
Les différentes étapes du traitement des données nucléaires 34
Les systèmes de traitement des données nucléaires 35
Les données nucléaires de haute énergie : la spallation 39
La modélisation de la spallation 40
Les mesures élémentaires 40
Les mesures intégrales 41

Les méthodes de la neutronique 43

Sur les fondements de l'équation du transport 43
Les équations fondamentales de la neutronique 45
L'équation intégro-différentielle de Boltzmann : le transport des neutrons 45
Les équations de Bateman généralisées : évolution des nucléides 49
La démarche du neutronicien 51
Les formes dérivées des équations fondamentales 55
Les calculs de transport stationnaires 55
Forme intégro-différentielle de l'équation de Boltzmann stationnaire 55

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 270

Forme intégrale de l'équation de Boltzmann stationnaire 55
Équation critique – Introduction du coefficient de multiplication effectif 56
Les équations de la cinétique spatiale 59
Méthodes déterministes de résolution de l'équation de Boltzmann en situation stationnaire 61
La discrétisation de l'espace des phases 62
La discrétisation en énergie 64
Le formalisme d'autoprotection 65
La discrétisation en angle pour un groupe d'énergie donné 72
La méthode S_N 72
La méthode P_N 74
La méthode du transport simplifié SP_N 74
L'approximation de la diffusion 75
La discrétisation en espace pour un groupe d'énergie donné 76
Les méthodes des différences finies 77
Les méthodes nodales 78
Les méthodes des éléments finis 79
La discrétisation en angle et en espace pour un groupe d'énergie donné 80
La méthode des éléments finis 81
La méthode des caractéristiques 82
Méthode Monte-Carlo de résolution de l'équation de Boltzmann 89
Les principes généraux 89
La décomposition en série de Neumann 90
La résolution de l'équation du transport par la méthode de Monte-Carlo 91
Les lois de tirage des événements – construction du processus statistique 92
Le « poids » d'un neutron 95
Convergence statistique d'un calcul de transport par la méthode de Monte-Carlo 97
Stratégies de simulation Monte-Carlo 97
Quelques spécificités de la convergence d'un calcul critique 99
Accélération d'une simulation Monte-Carlo 101
Cas des calculs critiques 101
Les techniques de biaisage en propagation 101
Perspectives 104
Méthodes de résolution des équations de Bateman généralisées 107
Les principes généraux 107
La solution analytique des équations de Bateman 108
La résolution numérique des équations de Bateman 109
Exemples de calculs d'évolution typiques en physique des réacteurs : l'évolution des noyaux lourds et des produits de fission 110
Évolution des noyaux lourds 110
Empoisonnement par les produits de fission 110
Méthodes de résolution en temps des équations couplées de la cinétique spatiale 115
Les principes généraux 116
Les équations de la cinétique ponctuelle 118
La cinétique tridimensionnelle 120
Modèles de simplification 120
La méthode quasi statique (QS) 121
La méthode quasi statique améliorée (IQS) 121
La méthode quasi statique locale 121
L'approche multi-échelle (ME) 122
La méthode de synthèse modale 122
La méthode de cinétique tridimensionnelle 122

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 27

Les codes de calcul de la neutronique et le calcul haute performance 125

Les principaux codes de calcul 127
APOLLO2 127
CRONOS2 129
ERANOS 130
DARWIN 130
La nouvelle plate-forme : APOLLO3® et MENDEL 131
Le code Monte-Carlo TRIPOLI-4® 133
Les codes « simplifiés » 137
Principaux codes de physique des réacteurs 137
Codes de transport déterministes 138
Codes de transport Monte-Carlo 140
Codes d'évolution 141
Les formulaires de calcul : deux exemples 143
NARVAL : formulaire neutronique appliqué aux réacteurs de propulsion navale 143
HORUS3D : un nouvel outil de simulation neutronique pour le réacteur Jules Horowitz 144
Le calcul haute performance 149
Introduction 149
Le HPC pour les simulations en Monte-Carlo 149
Principes pour une mise en œuvre parallèle 150
Performances 150
Les défis à venir 151
Le HPC en déterministe 152
Les différents niveaux de parallélisme 152
Premier niveau : calculs multi-paramétrés 152
Deuxième niveau : calculs multi-domaines 153
Troisième niveau : parallélisme à grains fins 154
Parallélisme hybride 154
Évolution des architectures matérielles pour le calcul scientifique haute performance 155
Évolutions sur les vingt dernières années 155
Évolution de la puissance des machines 155
Évolution de la mémoire 156
Les architectures et puissances de calculs actuelles 156
Les architectures et puissances de calcul futures 158
Synthèse 159

Qualification et neutronique expérimentale 163

S'assurer de la qualité des outils de calcul neutronique 165
Deux étapes classiques : la vérification et la validation des codes 165
Une troisième étape : la qualification des formulaires 165
Un point important de la démarche VVQ : les preuves de qualité des données nucléaires 166
Quantifier les incertitudes du calcul neutronique 166
La neutronique expérimentale. Expériences en maquettes critiques 171
Contexte et besoins en neutronique expérimentale 171
Maquettes critiques et expériences intégrales 172
Des chambres à fission pour la mesure du flux neutronique dans les réacteurs expérimentaux 173
Exemples de méthodes de mesure pour la détermination de la réactivité 174
La mesure de la fraction effective de neutrons retardés 174
Les méthodes de mesure pour la détermination de taux de réaction 176
Une confrontation de calculs de neutronique avec l'expérience dans le cas des réacteurs à haute température : Le *benchmark* HTTR 176
Les bases de données internationales de *benchmarks* 179
Autres *benchmarks* 180

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 272

Étude de la tenue des aciers sous flux neutronique à l'aide d'un dispositif expérimental placé dans le réacteur OSIRIS 180
Interprétation de l'expérience FLUOLE dans la maquette critique ÉOLE 181

Les applications de la neutronique 183

Classification des domaines d'application de la neutronique 185
Les grands domaines d'application 185
Les besoins des études associées aux différentes applications de la neutronique 186
Les besoins des études au niveau de la "configuration physique" 186
Les besoins des études au niveau de la modélisation 191
Les besoins des études au niveau industriel 191
Le calcul neutronique des réacteurs 193
Les grandeurs à calculer 194
Le flux neutronique 194
La réactivité et son évolution 194
Les coefficients de contre-réaction 194
La répartition de puissance 195
L'efficacité des différents moyens de contrôle de la réactivité 195
La composition isotopique des différents matériaux constitutifs du cœur 195
Le niveau de puissance pour les transitoires accidentels 195
La distribution de taux de combustion 195
Autres grandeurs 196
Les outils disponibles 196
Les données nucléaires 196
Les codes et méthodes 196
La neutronique expérimentale 196
L'application de la neutronique aux réacteurs à eau sous pression (REP) 196
Calcul d'évolution de l'assemblage en conditions nominales 197
Calcul d'assemblage dit « de reprise » 198
Calcul des caractéristiques neutroniques des réflecteurs 198
Calcul de cœur 199
L'application de la neutronique aux réacteurs à neutrons rapides RNR-Na 199
Spécificités neutroniques des RNR 199
Contraintes de conception des réacteurs à neutrons rapides 200
Calcul d'assemblage 201
Calcul de cœur 202
Retour sur les données nucléaires 203
Du réacteur à eau sous pression au réacteur à eau bouillante 203
Calcul d'assemblage 203
Calcul de cœur 204
Cas des réacteurs à eau innovants 204
Du REP aux réacteurs expérimentaux : OSIRIS et RJH. 205
Le cas du réacteur OSIRIS 205
Le cas du réacteur Jules Horowitz (RJH) 206
Du REP aux réacteurs à haute température (RHT) 207
Calcul d'assemblage 207
Calcul de cœur 208
Du RNR-Na au RNR-Gaz 208
Le réacteur nucléaire spatial 209
Utilisations possibles d'un réacteur nucléaire spatial 209
Dimensionnement neutronique 209
Conception 210
Simulation neutronique 211
La neutronique couplée aux autres disciplines 215
La nécessité d'un couplage 215
Les principes du couplage neutronique/thermohydraulique 216
Des exemples de couplage 218

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 273

Couplages dans les Réacteurs à Eau Bouillante 218
Couplages dans les Réacteurs à caloporteur gaz à Haute Température (RHT) 219
L'accident de réactivité (RIA : Reactivity Initiated Accident) 222
L'accident de Rupture de Tuyauterie Vapeur : un exemple de transitoire accidentel 225
La physique du cycle du combustible 227
La qualification du calcul du bilan matière 229
Le retour de la qualification vers les données nucléaires 230
Le calcul de la puissance résiduelle 231
La mesure de la puissance résiduelle : l'expérience MERCI 232
Principe et difficultés de l'expérience 232
Déroulement du projet 232
Caractéristiques techniques 233
Déroulement de l'expérience 233
Résultats obtenus 234
La criticité 235
La criticité : une question de bilan neutronique 235
Le facteur de multiplication effectif 235
La production de neutrons « utiles » 236
La perte des neutrons par absorption sans fission (capture stérile) 237
La perte des neutrons par fuite du milieu fissile 238
L'apport de neutrons par réflexion ou interaction 239
Influence des différents phénomènes physiques sur la valeur de la masse critique 240
Les études de sûreté-criticité 241
Les modes de contrôle de la criticité 241
La Règle Fondamentale de Sûreté N°I.3.c 241
Les codes de calcul de neutronique utilisés pour les études de criticité 242
La criticité dans les boîtes à gants 243
Détermination du milieu fissile de référence et du mode de contrôle de la criticité 243
Détermination des limites associées au milieu fissile de référence et au mode de contrôle de la criticité 243
Garantie des limites 244
L'accident de criticité de Tokaï-Mura (Japon) 244
Circonstances de l'accident 244
Facteurs ayant conduit à l'accident 245
Interventions pour arrêter l'accident 245
Conséquences 245
Enseignements 245
Aspects de responsabilité et de réparation 245
Conclusions 246
Autres exemples d'application de la neutronique 247
Durée de vie d'un réacteur nucléaire : la fluence neutronique sur la cuve 247
Ambiance dosimétrique dans le bâtiment d'un réacteur nucléaire 247
Démantèlement d'un réacteur nucléaire : activation neutronique des structures 247
Fusion thermonucléaire : échauffement et activation neutronique des structures 249

Conclusion 253

La neutronique, ses succès et les défis qui l'attendent 253
La simulation neutronique : nécessairement multi-échelle 253
Coupler la neutronique aux autres disciplines 254
Vers la simulation directe à 3 + 1 dimensions 254
Quel statut pour la simulation Monte-Carlo ? 254
La synergie entre simulation et expérience 254
Maîtriser les incertitudes 254
Améliorer les données nucléaires 254
Des plates-formes pour la simulation 255
Simulation numérique et calcul haute performance 255
Glossaire-index 257

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 27

Ont collaboré à cet ouvrage :

Catherine Andrieux,
Pascal Archier,
Anne-Marie Baudron,
David Bernard,
Patrick Blaise,
Patrick Blanc-Tranchant,
Bernard Bonin,
Olivier Bouland,
Stéphane Bourganel,
Christophe Calvin,
Maurice Chiron,
Mireille Coste-Delclaux, (Responsable de thème)
Frédéric Damian,
Cheikh Diop, (Responsable de thème)
Éric Dumonteil,
Clément Fausser,
Philippe Fougeras,
Franck Gabriel,
Emmanuel Gagnier,
Danièle Gallo,
Jean-Pascal Hudelot,
François-Xavier Hugot,
Tan Dat Huynh,
Cédric Jouanne,
Jean-Jacques Lautard,
Frédéric Laye,
Yi-Kang Lee,
Richard Lenain,
Sylvie Leray,
Olivier Litaize,
Christine Magnaud,
Fausto Malvagi,
Dominique Mijuin,
Claude Mounier,
Sylvie Naury,
Anne Nicolas, (Responsable de thème)
Gilles Noguère,
Jean-Marc Palau,
Jean-Charles le Pallec,
Yannick Pénéliau,
Odile Petit,
Christine Poinot-Salanon,
Xavier Raepsaet,
Paul Reuss,
Edwige Richebois,
Bénédicte Roque,
Éric Royer,
Cyrille de Saint Jean,
Richard Sanchez,
Alain Santamarina,
Simone Santandrea,
Olivier Sérot,
Michel Soldevila,
Jean Tommasi,
Jean-Christophe Trama,
Aimé Tsilanizara..

… et, bien sûr, l'ensemble des membres du Comité éditorial des monographies DEN :

Bernard Bonin (Rédacteur en chef), Georges Berthoud, Gérard Ducros, Damien Féron, Yannick Guérin, Christian Latgé, Yves Limoge, Gérard Santarini, Jean-Marie Seiler, Étienne Vernaz (Directeurs de Recherche).

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 27

Mono4CEA_FR7.qxd:Mono4CEA_FR3.qxd 2/09/13 16:28 Page 274

Achevé d'imprimer