



Analyse des erreurs induites par une modélisation simplifiée sur l'évolution des combustibles REP Impact des fuites neutroniques dans les calculs cellules

Alice Somaini

► To cite this version:

Alice Somaini. Analyse des erreurs induites par une modélisation simplifiée sur l'évolution des combustibles REP Impact des fuites neutroniques dans les calculs cellules. Physique Nucléaire Théorique [nucl-th]. Université Paris-Saclay, 2017. Français. NNT : 2017SACLS271 . tel-01687837

HAL Id: tel-01687837

<https://theses.hal.science/tel-01687837>

Submitted on 18 Jan 2018

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.

NNT : 2017SACLS271

THÈSE DE DOCTORAT
DE
L'UNIVERSITÉ PARIS-SACLAY
PRÉPARÉE À
L'UNIVERSITÉ PARIS SUD

École doctorale n°576

Particules, Hadrons, Énergie et Noyaux : Instrumentation,
Imagerie, Cosmos et Simulation (PHENIICS)

Spécialité de doctorat : Énergie nucléaire

par

Alice Somaini

Analyse des erreurs induites par une modélisation simplifiée sur
l'évolution des combustibles REP

Impact des fuites neutroniques dans les calculs cellules

Thèse présentée et soutenue à Orsay, le 27 Septembre 2017 :

Composition du Jury :

M. Philippe Dessagne, CNRS-IN2P3/IPHC, Rapporteur

M. Pablo Rubiolo, Grenoble-IPN/LPSC, Rapporteur

Mme Isabelle Brésard, CEA/DAM/STXN, Examineur

Mme Isabelle Duhamel, IRSN Fontenay-aux-Roses, Examineur

M. Fausto Malvagi, CEA/DEN/DANS/DM2S/SERMA/LTSD, Examineur

M. Frédérico Garrido, CNRS-IN2P3/CSNSM, Président du jury

M. Sylvain David, CNRS-IN2P3/IPN Orsay, Directeur de thèse

M. Xavier Doligez, CNRS-IN2P3/IPN Orsay, Encadrant de thèse

Remerciements

Et me voilà, en train d'écrire les remerciements.

Quand j'ai commencé ma thèse, je ne pensais pas que le temps aurait coulé si vite et que je me serais retrouvée avec trois ans de plus et avec un bagage d'expériences personnelles et professionnelles si volumineux aussi rapidement.

Mail, il faut le dire : quand on est bien quelque part, on ne voit pas le temps passer. Et c'était mon cas. Ces trois ans m'ont enrichie d'une manière extrême, mais le mérite n'en revient pas qu'au plaisir que j'ai eu à contribuer à la recherche sur la physique des réacteurs, à lancer des simulations (oui, j'en ai lancé juste quelques unes) et aux échanges scientifiques que j'ai eu l'opportunité d'avoir, mais aussi et surtout aux personnes qui ont fait partie de mon entourage, au jour le jour comme juste pour une durée limitée.

Tout d'abord, je voudrais remercier les membres de mon jury de thèse. Merci à Philippe Dessagne et à Pablo Rubiolo qui ont accepté d'être mes rapporteurs et aux examinateurs Isabelle Brésard, Isabelle Duhamel et Fausto Malvagi : merci pour l'intérêt que vous avez porté et montré envers mon travail. Merci également au président du jury, Frédérico Garrido, pour avoir lu en entier et avec intérêt mon manuscrit et pour ses mots d'appréciation et d'encouragement. Merci à vous tous pour l'enrichissante discussion lors de ma soutenance.

Je remercie aussi le directeur actuel de l'Institut de Physique Nucléaire d'Orsay où j'ai passé mes trois ans de thèse : Michel Guidal, merci pour avoir écouté la voix des doctorants qui constituent, à mon avis, une partie très importante de la vie du laboratoire.

Un très grand merci à mon encadrant de thèse, Xavier Doligez, qui m'a donné l'opportunité de faire cette thèse et qui m'a suivie du tout début à la fin. Une liste complète de toutes les raisons pour lesquelles je dois te remercier serait trop longue pour l'écrire ici.

Du moment où j'ai débarqué à l'IPN jusqu'à présent, t'as toujours été présent pour moi, scientifiquement et humainement. Ton constant soutien et ta confiance en moi m'ont permis d'atteindre tous les résultats que j'ai obtenus, à travers un parcours de maturation progressive au niveau professionnel et personnel. Je n'oublierai jamais ta disponibilité à discuter avec moi à n'importe quel moment et pour n'importe combien de temps, jusqu'à quand on résolvait le problème ou (comme la majorité des fois) nous nous apercevons qu'on avait passé beaucoup de temps à discuter et que c'était déjà l'heure de rentrer. J'ai très apprécié ta sincérité en toutes occasions, ce qui m'a aidée à développer et nourrir la confiance dans mon travail et en moi même.

Je dois avouer que, quand même, les bruits de clavier et les cris provenant de ton bureau quand quelque chose ne marche pas vont me manquer, ainsi que les rebonds de ta petite nouvelle balle anti-stress (qui apparemment ne te détresse pas comme il faudrait).

Je pense pouvoir dire que nous sommes sortis tous les deux comme gagnants de ce pari à l'aveugle qu'on a fait il y a trois ans. Je n'aurais pas pu mieux tomber : t'as toujours respecté mes temps, t'as su me supporter toutes les fois que je venais te déranger dans ton bureau (oui, je le sais, « J'ai toujours le temps pour toi, Alice »). Tu m'as encouragé à faire toujours de mon mieux et, même dans les moments les plus critiques comme celui

de la rédaction, t'as réussi à ne pas me faire sentir seule devant cette montagne à gravir. J'espère t'avoir laissé au moins de bons souvenirs comme ceux que tu as fait avec moi. Merci Xavier, travailler avec toi a été un plaisir immense.

Je voudrais remercier aussi mon directeur de thèse, Sylvain David. Même si tu n'as pas pu suivre au jour le jour ma thèse, tes sages conseils donnés lors des réunions ont été précieux pour l'orientation de mon travail. Je te remercie surtout pour m'avoir accompagnée au cours des dernières étapes de ma thèse, ainsi que d'avoir accepté que je m'installais dans ton bureau pour cette année (en échange de me prendre soin de ta petite plante, bien sûr). Je sais déjà que les discussions au café qui commencent sur les séries télé à voir absolument et qui continuent (on ne sait pas trop comment) sur des arguments de physique nucléaire vont certainement me manquer.

Je tiens à remercier aussi tous les autres membres du groupe PACS qui m'ont accompagnée au cours de ces trois ans et qui ont contribué à rendre ma permanence au labo vraiment agréable. Plutôt que de le faire selon un ordre alphabétique, je vous propose de me suivre dans un petit tour imaginaire du labo.

Je suis en train de travailler dans mon bureau sur des nouveaux résultats, quand je me rends compte que j'aurais besoin d'en parler avec quelqu'un pour m'éclaircir les idées. Alors je sors dans le couloir et je tourne à droite : voilà tout de suite le bureau de Zak. Je frappe à la porte et je rentre. Je sais que je vais avoir une discussion très enrichissante concernant mon travail, la physique, les maths, ou encore sur la vie en général.

Merci Zak pour tous les bons moments de décompression qu'on a passés ensemble, discutant du boulot comme des problèmes de la vie quotidienne : t'as été un repaire solide pour moi en cas de besoin. Les avis très sages que tu m'as donnés et ta capacité à m'écouter m'ont aidée à faire face aux moments les plus compliqués. Ton sourire et ta bonne humeur ont été une constante à laquelle je ne pouvais pas renoncer.

Après avoir parlé avec Zak, je continue mon tour et je frappe à la porte suivante : celle de Sandra. Je sais qu'elle est là, on l'a entendue ce matin à son arrivée. J'ouvre la porte et elle m'accueille avec son « Salut, ma choupinette ! » si adorable et rassurant. Elle a beaucoup de travail à faire, mais elle me dédie un moment pour m'écouter et me conseiller.

Il a fallu un peu de temps avant d'instaurer un vrai lien avec toi Sandra, mais j'en suis très contente et je dois te remercier pour le support psychologique constant que tu m'as apporté. Tu t'es occupée de mon bien-être, surtout quand j'en avais le plus besoin. Je te remercie pour toutes les fois où t'es rentrée dans mon bureau pour savoir comment j'allais ou pour me rappeler que c'était l'heure de rentrer – et que j'aurais pu continuer à écrire le jour suivant, pour ton intérêt envers mon travail et pour le temps que t'as dédié à la relecture et à la compréhension de mon manuscrit (même si pas très proche de ton domaine de travail quotidien). Les moments partagés ensemble vont sûrement me manquer, comme les rentrées en voiture le vendredi soir, les discussions sur les sujets les plus variés, notre petite opération de sauvetage des plantes ou encore les cours de français ;-). Merci pour tout Sandra, ton soutien a été fondamental pour moi.

Sortie du bureau de Sandra, je descends au premier étage. Le bureau de Diego est le premier sur la droite.

T'es chez nous depuis un an et tu parles déjà très bien français, donc tu vas comprendre sans problèmes ce que je vais te dire. Merci pour les bons moments passés ensemble et pour ton soutien et tes conseils surtout le long de ma période de rédaction. Merci aussi pour avoir toujours participé aux activités du groupe en apportant ta bonne humeur et ton enthousiasme, ainsi que pour m'avoir fait découvrir une très bonne bière galicienne.

En continuant notre tour, nous arrivons dans le bureau de Marc. « C'est l'heure d'aller à la piscine ? » il me demande. « Oui », je réponds, « Je vais appeler Yonghao, Zak et Coralie ».

Merci Marc pour ton aide, scientifique et bureaucratique, au cours des premiers mois de mon doctorat, quand je me suis installée dans ce qui était ton bureau à l'époque, comme pendant la dernière année quand t'es revenu chez PACS. T'as toujours été disponible à discuter avec moi et donner ton avis, ainsi qu'à prendre une petite pause café quand j'en avais besoin. Savoir que j'aurais pu compter sur toi a été très important au début comme à la fin de ma thèse.

Le bureau à côté est celui de Laurent. On l'appelle pour aller manger. « Je dois juste écrire un mail. Commencez à y aller, j'arrive ». On sait qu'il va nous rejoindre directement à table.

Merci Laurent pour les discussions quotidiennes au café après mangé, comme au cours des apéros occasionnels qu'on a organisés. Merci aussi parce que, même les tous premiers jours de ma thèse, t'as réussi à me faire sentir comme partie intégrante du groupe en m'impliquant dans les nombreuses discussions.

Le bureau suivant est celui de Claire. Elle est très matinale et la dernière année j'avais pris l'habitude de passer lui dire bonjour quand j'allais remplir mes bouteilles d'eau à la fontaine. « Tu bois beaucoup pendant la journée ». « En effet Claire, ça c'est que ma réserve du matin ! ».

Merci Claire pour ta disponibilité sans limites, pour ton soutien et pour tes encouragements. Merci pour la compagnie au cours des longs retours en train (même si t'as commencé après moi, t'as accumulé déjà plein de points sur la carte fidélité du club des voyageurs malheureux de la ligne B) pendant lesquels t'as toujours été à l'écoute de mes histoires et de mes problèmes. Merci aussi d'avoir pris soin de mes plantes pendant mon absence au cours de cet été très chaud et d'avoir participé avec plaisir à tous les moments associatifs du groupe en fin de journée.

En sortant du bureau de Claire, nous nous retrouvons à côté de celui de Yonghao (même si pour un certain temps au début il répondait au nom de Chloé selon Pascale). Mais après trois ans ici, tu comprends le français et tu sais même t'exprimer très bien Yonghao, tu m'as toujours impressionnée.

Nous avons vécu ensemble, étape par étape, l'année la plus difficile des trois pendant laquelle nous avons partagé plein de pauses café (même en jours fériés) avant de nous replonger dans l'écriture, ainsi que nombreuses coupures sportives à la piscine. Merci pour avoir eu le courage de t'impliquer, encore néophyte de la langue française, dans la vie du groupe, avec ton constant sourire et ton enthousiasme. Je te remercie pour ton support, pour ta disponibilité et pour tous les beaux moments – et les bons souvenirs ;-) qu'ils m'ont

laissés – passés ensemble.

En remontant les escaliers, nous arrivons devant le bureau de Lise qui fera partie du groupe PACS pour quelques mois.

Tu m’as connue au cours des derniers mois de ma thèse Lise, mais pourtant t’as toujours été disponible à assister à mes répètes et à me soutenir. Merci aussi pour avoir animé les moments de fête avec ton esprit joyeux. Je suis vraiment contente de t’avoir connue et je te souhaite le meilleur pour ton avenir, en espérant de ne pas perdre les contacts.

En continuant notre tour, nous arrivons au bureau de Coralie qui a été ma co-bureau pour grande partie de mon doctorat.

Merci Coralie pour tous les bons moments qu’on a partagés, des cours d’italien au tableau, aux balades dominicales sur Paris. T’as été un compagnon de sport formidable (course, gym, piscine) et t’as même réussi à me faire courir – contre mon esprit de sprinter – plus qu’une demi heure! Maintenant, c’est à toi de rentrer dans ta dernière année : courage! Les fatigues seront toutes récompensées à la fin.

En traversant la rue, je voudrais remercier Élisabeth pour sa disponibilité et son aide administratif au cours de ces trois ans.

Mon tour de l’actuel groupe PACS est terminé, mais je n’oublie pas ceux qui en ont fait partie au cours de ces années. Je voudrais remercier Laurent T. pour toutes les enrichissantes discussions qu’on a pu avoir et pour ton intérêt envers mon travail, ainsi que pour être revenu exprès pour ma soutenance, ça m’a fait vraiment plaisir. Merci à Isabelle pour tout ton soutien au cours de ma première année pendant laquelle nous avons instauré un rapport de confiance et d’amitié qu’on a gardé même si t’es partie au soleil dans le Sud de la France. Merci pour être revenue pour ma soutenance ainsi que pour la belle journée parisienne dont on a pu profiter il y a quelques semaines. Merci également à Charles-Olivier pour m’avoir accueillie dans le groupe au début de mon doctorat et pour avoir accepté d’être mon directeur ad intérim avant que Sylvain eût pu prendre le relais. Merci aussi à tous les stagiaires avec lesquels j’ai eu l’occasion de travailler en commençant par Aliz et Kévin, en passant par Anthony et Catalin, jusqu’à Geoffrey et Gui pendant ma dernière année.

Je voudrais aussi remercier Dominique et Marin, pour les bon moments de fête passés ensemble, et Claude, pour m’avoir appris de curieux histoires sur les physiciens nucléaires et pour sa grande disponibilité. Merci également à Pascale pour ta bonne humeur et ton aide, pratique et humaine, et à Céline, pour tes conseils de vie et de jardinage. Merci Kane, pour ton attitude souriante et tes blagues qui m’ont fait rire aussi dans les moments les plus durs. Merci pour ta disponibilité et pour tous les voyages en compagnie dans l’enfer du rer.

Merci aussi à toutes les personnes extérieures à mon laboratoire que j’ai pu rencontrer dans le cadre de collaborations scientifiques : merci en particulier à Nico, Baptiste M., Baptiste L., Funny ^, JB, Léa, Eric, Alexis, Olivier, Adrien et Nicolas.

Un grand merci aussi à tous les doctorants que j’ai connus le long de ce parcours. Merci aux deux filles du bureau d’à côté : Maud, merci pour ton soutien et ton sourire (la prochaine fois que tu reviendras par là on fera le repas japonais qu’on a raté la dernière

fois!), et Yiman (ton orchidée est encore vivante!). Merci à Aurélie : tu m'as accompagnée lors de ma première année et t'es restée de mon côté tout au long des autres années. Tu m'as toujours écoutée et conseillée. Merci aussi pour avoir relu en entier mon manuscrit. Merci à Claire et Louis pour votre soutien lors de l'année la plus compliquée, je suis contente d'avoir partagé ces étapes difficiles avec vous. Je voudrais remercier aussi tous mes copains de bricola : Anastasia, Liss, Clément, Petar, Florent, Daniele, merci pour ces moments de loisir qui me rappelaient mes années passées en Italie. Merci aussi à tous les autres doctorants avec lesquels j'ai partagé les fameux repas des doctorants du jeudi et les jeux de tables : Tijani, Anne, Yana, Li, Olivier, Antoine et Yan. Merci aussi aux membres de Synapse, Marie-Co, Christophe, Pauline, Baptiste et Clément (et of course Anastasia).

Merci aussi à toutes les personnes qui m'ont accompagnée au cours de ces trois ans, mes amis italiens qui fêtaient mes retours en Italie comme un grand événement à chaque fois, ainsi que mes amis ici en France. Merci aussi à Nadia, pour ta disponibilité et tes encouragements qui m'ont aidée pendant cette dernière année.

Mais toutes les pages qui suivent ces remerciements n'auraient pas pu être écrites sans les personnes les plus importantes pour moi. Merci Mattia, tu continuais à me dire que tu ne faisais rien pour moi, mais je t'assure que ton soutien constant et inconditionnel, ta patience infinie (qui t'as permis de me supporter pendant ces années :-p) et ta confiance illimitée en moi ont été essentiels pour moi. Tu m'as toujours écoutée, comprise et rassurée. Je sais que je peux toujours compter sur toi et tu me l'as démontré plusieurs fois. Merci pour tout. Je remercie aussi infiniment ma famille qui m'a toujours supportée dans toutes mes décisions et qui est restée à côté de moi même à distance. Je ne pourrais pas être arrivée jusque là sans vous. Merci.

Table des matières

Introduction	1
1 Introduction : problématique	3
1.1 Contexte énergétique actuel	4
1.1.1 Les scénarios énergétiques	4
1.1.2 Les scénarios nucléaires	5
1.1.3 Le besoin de simulations prédictives	6
1.2 Simulations des réacteurs nucléaires	7
1.2.1 Les réacteurs nucléaires	7
1.2.2 La neutronique d'un REP	11
1.2.3 L'équation du transport	15
1.2.4 Résolution de l'équation du transport via calcul probabiliste	19
1.2.5 Résolution de l'équation du transport via méthode déterministe . .	20
1.2.6 Approximation de la diffusion	22
1.3 Simulation de l'évolution	25
1.3.1 L'équation de Bateman	25
1.3.2 Codes d'évolution	26
1.4 Schéma de calcul cœur	27
1.4.1 Difficultés de simulation d'un cœur complet	27
1.4.2 Schéma classique à deux étapes pour la simulation d'un cœur complet	27
1.5 Plan du travail de thèse	30
2 Outils théoriques et pratiques	33
2.1 Introduction	34
2.2 Couplage probabiliste-déterministe	34
2.2.1 Grandeurs de diffusion pour le calcul de cœur	35
2.2.2 Les modèles de fuites	38
2.3 Approximations du calcul cellule	42
2.3.1 Géométrie simplifiée	42
2.3.2 Moyens de contrôle	42
2.3.3 Plan de chargement	44
2.3.4 Discrétisation axiale	45
2.3.5 Fuites neutroniques	46
2.3.6 Autres approximations	46
2.4 Méthodes de calcul	46
2.4.1 MCNP & Serpent	47

2.4.2	Le code d'évolution SMURE	52
2.5	Conclusion	63
3	Etudes des fuites axiales	65
3.1	Introduction	66
3.2	Méthodologie d'étude des fuites axiales	67
3.2.1	Benchmark	67
3.2.2	Description des trois configurations	68
3.2.3	Étude statistique	69
3.2.4	Paramètres des évolutions	73
3.3	Comparaison des configurations <i>assemblages ouvert et complet</i> avec l' <i>assemblage fermé</i>	74
3.3.1	Écarts des inventaires isotopiques totaux en fin d'irradiation	75
3.3.2	Biais sur l'estimation du Burn-Up maximal atteignable	80
3.3.3	Analyse du profil axial de l'évolution isotopique	82
3.3.4	Analyse en fonction du Burn-Up local	87
3.4	Analyse neutronique en début de cycle	91
3.4.1	Analyse du spectre neutronique	91
3.4.2	Analyse neutronique de l' <i>assemblage ouvert</i> avec MCNP	93
3.4.3	Application de la théorie de la diffusion : réacteur plaque	96
3.4.4	Application aux simulations : prise en compte des fuites axiales dans un schéma de calcul à haute précision	103
3.4.5	Impact en évolution	105
3.5	Effet des paramètres d'étude	108
3.5.1	Effet du binning	108
3.5.2	Effet de la taille de l'assemblage	110
3.5.3	Correction de criticité	112
3.6	Conclusions et bilan	119
4	Cross-talking inter-assemblages	121
4.1	Introduction à la problématique du voisinage	122
4.2	Description de la méthodologie d'étude	124
4.3	Analyse de l'impact de la lame d'eau	126
4.3.1	Impact de la lame d'eau en début de cycle	127
4.3.2	Impact de la lame d'eau en évolution	128
4.3.3	Conclusion sur l'impact de la lame d'eau	131
4.4	Analyse de l'impact du voisinage	131
4.4.1	Analyse en début de cycle	132
4.4.2	Analyse en évolution : configurations avec environnement non évoluant	133

4.4.3	Analyse en évolution : configurations avec environnement évoluant .	145
4.5	Impact du voisinage : prise en compte du rechargement	150
4.6	Analyse de l'interaction UOx-MOx	153
4.6.1	Analyse en début d'irradiation	153
4.6.2	Analyse en évolution	155
4.7	Conclusions et bilan	158
5	Analyse des assemblages en périphérie du cœur	163
5.1	Introduction à la problématique des assemblages aux bords du cœur	163
5.2	Présentation de l'étude	164
5.2.1	Description de la géométrie	164
5.2.2	Paramètres de simulation et statistique	165
5.3	Analyse en début d'irradiation	166
5.3.1	Comparaison avec l'assemblage infini	167
5.3.2	Sections efficaces de l' ^{235}U	168
5.4	Analyse en évolution	170
5.4.1	Évolution d'un assemblage unique	171
5.4.2	Simulation avec 6 assemblages évoluant	173
5.5	Prise en compte du rechargement	175
5.5.1	Déplacement de la périphérie à l'intérieur	176
5.5.2	Déplacement de l'intérieur à la périphérie	178
5.5.3	Conclusions sur la simulation des rechargements	180
5.6	Conclusions et bilan	181
6	Application à une simulation cœur	185
6.1	Introduction	185
6.2	Construction de la géométrie	186
6.2.1	Difficultés de simulation	186
6.2.2	Description de la géométrie	187
6.3	Simulation à 1 batch	187
6.3.1	Étude en début de cycle	188
6.3.2	Analyse en évolution	189
6.3.3	Reconstruction des inventaires	191
6.4	Simulation à 4 batches	193
6.4.1	Description du plan de chargement	193
6.4.2	Évolution des sections efficaces de fission entre deux rechargements	193
6.4.3	Reconstruction des inventaires	194
6.5	Conclusions	195

Conclusion	199
Bibliographie	205
Liste des figures	219
Liste des tableaux	223

Introduction

La simulation des réacteurs nucléaires, déjà déployés ou encore en phase de projet, est un sujet important de la recherche d'aujourd'hui. En effet, les besoins pour les études de sûreté ou les estimations d'inventaires de décharge des réacteurs demandent des simulations de plus en plus précises.

L'estimation correcte des quantités isotopiques du combustible nucléaire en fin d'irradiation permet de réaliser des études de scénarios énergétiques et nucléaires fiables. Les premières sont nécessaires pour l'analyse des « mix » énergétiques mondiaux, incluant probablement la technologie nucléaire, afin de vérifier qu'ils puissent satisfaire les contraintes climatiques ainsi que la demande d'énergie croissante. Les secondes sont réalisées pour étudier les stratégies nucléaires actuelles ou pour simuler des stratégies innovantes et en vérifier la faisabilité.

La simulation de l'évolution de la matière isotopique dans un cœur de réacteur pose de nombreuses difficultés, de nature pratique mais aussi théorique. Deux types de codes sont classiquement utilisés pour la simulation de l'évolution : les codes déterministes et les codes stochastiques. Les codes déterministes résolvent l'équation du transport des neutrons en discrétisant les variables du problème. Cette approche mathématique permet d'avoir un temps de calcul relativement faible, mais elle est limitée à des géométries simples. Pour celle d'un cœur de type REP complet, la demande d'espace mémoire et les difficultés numériques sont trop importantes pour envisager l'utilisation directe de ces méthodes.

Les codes stochastiques sont caractérisés par le traitement continu et de la géométrie simulée et des propriétés neutroniques (comme les sections efficaces). En effet, l'équation du transport n'est pas résolue mathématiquement en tant que telle mais elle est reproduite à travers la simulation d'un nombre très élevé d'histoires de neutrons. Ces neutrons sont suivis de leur production par fission à leur disparition par absorption ou par fuite du système. Le comportement moyen de ces nombreuses histoires représente bien la densité de neutrons dans une configuration réelle. Le problème principal qui empêche d'utiliser ces codes pour la simulation d'un cœur complet est, outre à la puissance de calcul requise, la convergence des sources. Dans une géométrie très grande, comme celle d'un réacteur, la distribution de la densité de neutrons calculée par les codes stochastiques ne représente pas physiquement celle recherchée.

Aujourd'hui, la simulation d'un cœur de réacteur est réalisée via un schéma à deux étapes : un calcul déterministe qui résout l'équation du transport des neutrons sur un assemblage en conditions infinies (réflexion sur toutes les parois) et un autre calcul déterministe, le plus souvent en diffusion, sur le cœur entier. Entre ces deux phases, le calcul de certaines grandeurs neutroniques (section efficaces macroscopiques de fission, absorption, coefficients de diffusion, ...) est nécessaire. Puisque les grandeurs d'entrées des calculs de cœur sont tirées du calcul en transport de la première étape, il est souhaitable que le calcul cellule réalisé en premier soit le plus représentatif possible de la réalité. Or, le calcul cellule se base sur un modèle simplifié, qui comporte plusieurs approximations comme les fuites neutroniques, les moyens de contrôle et le voisinage. Parmi les approximations du calcul

cellule, les fuites jouent un rôle important parce qu'elles modifient le spectre neutronique de l'assemblage. Pour cette raison, des modèles de fuites à appliquer au calcul cellule ont été développés et implémentés dans les codes de simulation.

Des efforts pour déterminer les grandeurs nécessaires au calcul de cœur à partir d'un calcul cellule en transport avec des méthodes probabilistes ont été déployés au cours de ces dernières années. Cependant cette procédure n'est, pour l'instant, pas encore envisageable en tant que procédure de routine comme le schéma de calcul classique déterministe-déterministe. Dans l'attente du développement d'un couplage probabiliste-déterministe, les simulations d'un cœur de réacteur à l'IN2P3 sont encore réalisées via un simple calcul cellule.

Ce travail de thèse porte sur l'étude des approximations du calcul cellule et sur l'estimation des biais engendrés par ces dernières sur les inventaires isotopiques en fin d'irradiation. Les simulations d'assemblages ont été réalisées via le code d'évolution stochastique SMURE, présenté dans le chapitre 2, juste après la problématique du schéma à deux niveaux et les approximations du modèle assemblage.

Parmi les approximations du calcul cellule, nous nous sommes focalisés sur les fuites neutroniques. Une analyse détaillée de l'effet de spectre dû aux fuites axiales est donnée dans le chapitre 3. La comparaison entre un assemblage ouvert aux extrémités axiales et un assemblage infini nous a permis de comprendre et de quantifier les effets de spectre qui modifient l'évolution isotopique de la matière.

Afin d'améliorer la représentativité de l'assemblage isolé vis-à-vis du calcul de cœur, le voisinage doit être pris en compte. Nous avons donc étudié des configurations environnées d'un assemblage donné entouré par des assemblages à Burn-Up différents. Les résultats sont présentés dans le chapitre 4.

Les assemblages à la périphérie sont en contact direct avec l'eau modératrice qui environne le cœur et cette particularité impose un traitement spécifique. L'étude des erreurs qu'une modélisation infinie peut apporter pour représenter ces types d'assemblages est présentée dans le chapitre 5.

Enfin, afin de vérifier toutes les observations faites dans les chapitres précédents, le chapitre 6 présente les résultats d'une simulation représentative d'un cœur de réacteur, où la majorité des aspects étudiés dans ce travail de thèse ont été pris en compte.

Introduction : problématique

Sommaire

1.1	Contexte énergétique actuel	4
1.1.1	Les scénarios énergétiques	4
1.1.2	Les scénarios nucléaires	5
1.1.3	Le besoin de simulations prédictives	6
1.2	Simulations des réacteurs nucléaires	7
1.2.1	Les réacteurs nucléaires	7
1.2.1.1	Les générations des réacteurs	7
1.2.1.2	Principe de fonctionnement d'un REP	8
1.2.1.3	Le cycle du combustible	10
1.2.2	La neutronique d'un REP	11
1.2.2.1	Les sections efficaces	12
1.2.2.2	Le spectre neutronique	13
1.2.3	L'équation du transport	15
1.2.3.1	Définition de grandeurs de base	15
1.2.3.2	Équation de Boltzmann	16
1.2.4	Résolution de l'équation du transport via calcul probabiliste	19
1.2.5	Résolution de l'équation du transport via méthode déterministe	20
1.2.5.1	La discrétisation en énergie	20
1.2.5.2	La discrétisation angulaire	21
1.2.5.3	La discrétisation en espace	22
1.2.6	Approximation de la diffusion	22
1.2.6.1	Conditions aux limites et distance d'extrapolation	23
1.3	Simulation de l'évolution	25
1.3.1	L'équation de Bateman	25
1.3.2	Codes d'évolution	26
1.4	Schéma de calcul cœur	27
1.4.1	Difficultés de simulation d'un cœur complet	27
1.4.2	Schéma classique à deux étapes pour la simulation d'un cœur complet	27
1.4.2.1	Calcul cellule en transport	27
1.4.2.2	Calcul de cœur en diffusion	28
1.4.2.3	Exemples d'applications	28
1.5	Plan du travail de thèse	30

1.1 Contexte énergétique actuel

L'énergie est un enjeu majeur du XXI^{ème} siècle : le contexte actuel force à remettre en cause les différentes stratégies énergétiques adoptées aujourd'hui pour faire face au problème mondial du changement climatique.

En effet, la température mondiale a augmenté drastiquement au cours du dernier siècle, de sorte que « les trois dernières décennies ont été successivement les plus chaudes à la surface de la terre qu'aucune autre décennie passée depuis 1850 » [Symon, 2013]. L'activité humaine, en particulier les émissions de dioxyde de carbone, sont responsables de cette augmentation soutenue. Les modèles climatiques prévoient que la température moyenne mondiale augmentera de 2.6 à 4.8 degrés Celsius avant la fin du siècle si les émissions des gaz à effet de serre continuent d'augmenter à la vitesse actuelle.

Afin d'éviter les impacts les plus extrêmes du changement climatique, en 2010 une décision de limiter la hausse maximale de la température de 2°C au-dessus de celle de l'ère préindustrielle a été prise par la Convention-Cadre des Nations Unies sur les Changements Climatiques. Suite à la COP21 195 États ont signé l'accord de Paris de 2016, s'engageant à réduire les émissions de gaz à effet de serre pour stabiliser le réchauffement climatique à la limite des 2°C d'ici à 2100.

Afin de respecter cette contrainte de température et de réduire les émissions de CO_2 , une transition énergétique vers des énergies de plus en plus décarbonées semble inévitable. Des nouvelles stratégies doivent ainsi être déployées pour substituer les énergies fossiles dans le mix énergétique mondial pour satisfaire une demande énergétique croissante (de 10 $G\text{Tep}/an$ ¹ des années 2000 à 15 – 30 $G\text{Tep}/an$ estimés en 2050).

1.1.1 Les scénarios énergétiques

Plusieurs scénarios énergétiques ont été étudiés afin de définir les mix énergétiques mondiaux qui permettent de respecter les contraintes établies.

Le scénario à 2°C proposé par l'Agence Internationale de l'Énergie (AIE) [IEA, 2017] prévoit un remplacement progressif du charbon par le gaz naturel et un développement consistant des énergies renouvelables qui occuperaient jusqu'à 23% du mix mondial en 2035 (contre 9% aujourd'hui (2016)). Dans ce mix, représenté en figure 1.1, le nucléaire double sa proportion passant de 5% aujourd'hui à 10%.

La perspective future envisagée par les grandes industries pétrolières [TOTAL, 2017] est conforme avec celle de l'AIE, avec un fort développement des énergies renouvelables mais un incrément plus faible de la production d'énergie par le nucléaire.

En France, en 2015 la loi de « transition énergétique pour la croissance verte » a été adoptée [JORF, 2015]. Les grands objectifs de cette loi incluent la réduction par 2 de la consommation d'énergie finale en 2050 (par rapport à 2012), une proportion de 32% des énergies renouvelables dans le mix énergétique en 2030 et une réduction de la part du nucléaire de 77% en 2014 à 50% en 2025.

1. 1 $G\text{Tep}$ = 1 milliard de tonnes équivalent pétrole ; 1 Tep = 42 GJ

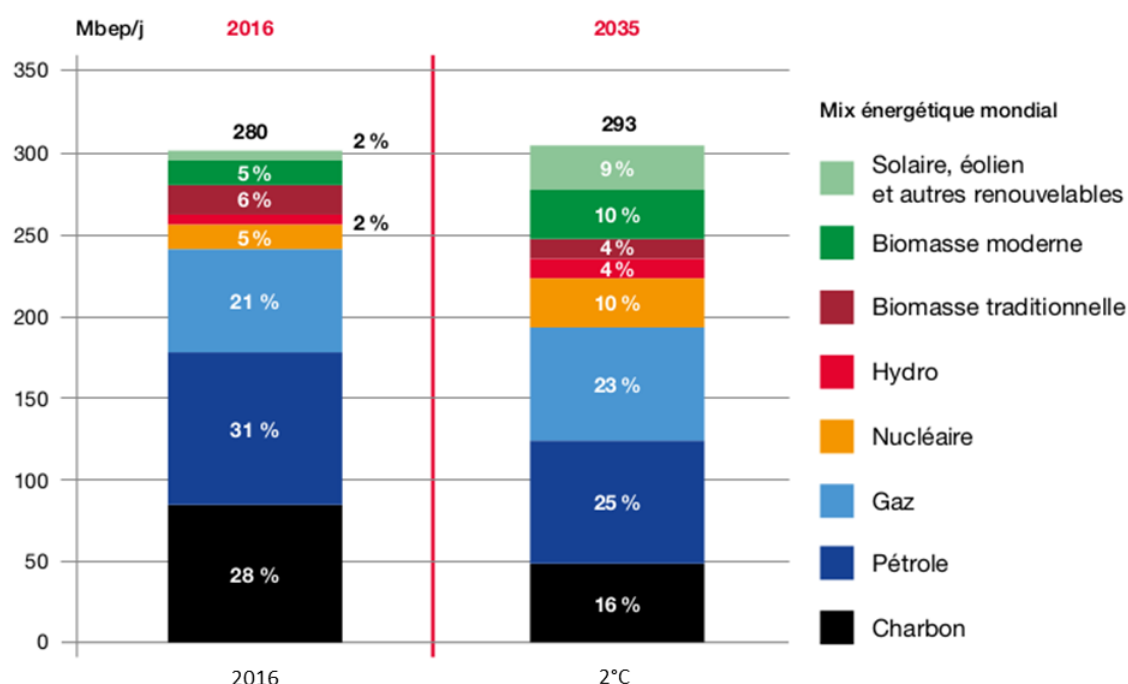


FIGURE 1.1 – Mix énergétique mondial en 2016 (à gauche) et en 2035 (à droite) proposé par l'AIE dans le scénario des 2°C. Source image [TOTAL, 2017]

Dans la lignée de la réduction de la proportion de production énergétique par le nucléaire, l'association Négawatt propose un scénario français 100% renouvelable avec sortie du nucléaire d'ici 2050 [négaWatt, 2017]. Plus précisément, dans ce scénario qui envisage une France neutre en carbone en 2050, la production des réacteurs actuels s'interrompt en 2035, le charbon, le pétrole et le gaz fossile sont progressivement ramenés à des niveaux marginaux (limités à des usages très spécifiques).

D'autres études tenant compte aussi de considérations socio-économiques ont été réalisées pour trouver une description du futur énergétique mondial. Dans [Bouneau et al., 2013], un bouquet énergétique mondial en 2050 est construit sous 3 contraintes : la consommation mondiale est limitée à 20 *Gtep/an*, les émissions de gaz à effet de serre sont réduites d'un facteur 2 pour la stabilisation de la température et les inégalités de consommations entre populations sont fixées. Dans ce scénario, le nucléaire est la variable d'ajustement qui permet de satisfaire ces trois contraintes et les résultats montrent une augmentation d'un facteur 9 de la production nucléaire représentant 25% de l'énergie mondiale en 2050.

La place occupée par le nucléaire dans le mix énergétique du futur, mondial comme français, est donc encore une question largement ouverte. Pour cette raison, les scénarios nucléaires sont aujourd'hui d'importance primaire.

1.1.2 Les scénarios nucléaires

Dans le contexte actuel, où le futur du nucléaire n'a pas encore été établi de manière certaine, l'étude de scénarios nucléaires reste nécessaire pour explorer toutes les stratégies

envisageables. Plusieurs codes de scénarios ont été développés dans le monde récemment pour étudier les options pour le nucléaire du futur (COSI, ANNICA ou encore CyCLUS [Coquelet-Pascal et al., 2015], [Rodriguez et al., 2016], [Wilson et al.]).

Le code de scénario CLASS [Mouginot et al., 2014], développé grâce à une collaboration entre plusieurs équipes du CNRS-IN2P3, permet d'étudier différentes stratégies possibles, incluant aussi des technologies pas encore industrialisées. Dans ce code, le parc électronucléaire entier est simulé et les flux de matières sont suivis pendant toute la durée de vie du parc. Plusieurs hypothèses définissant le scénario sont établies, certaines via des contraintes socio-économiques (les ressources en fissile par exemple), d'autres par l'utilisateur (comme le type et le nombre de réacteurs, la stratégie de retraitement, les temps de fabrication et de refroidissement du combustible...). Ces scénarios permettent d'évaluer les différents choix possibles dans des stratégies innovantes ou non, comme l'introduction du thorium [Guillemin, 2009] dans les réacteurs existants, la faisabilité du multi-recyclage du plutonium dans les réacteurs à eau pressurisée (REP) [Ernault, 2014] ou la production d' ^{233}U à partir d'assemblages de type MOx avec thorium et plutonium [Michel-Sendis, 2006].

Le code CLASS permet de simuler rapidement l'évolution des combustibles, à travers des méta-modèles [Leniau et al., 2015], permettant l'évaluation de la faisabilité de certaines stratégies proposées, telles que l'introduction des réacteurs à neutrons rapides (RNR) par exemple. Le modèle qui prédit la composition du combustible utilisé (et donc de son évolution dans le temps depuis l'entrée en réacteur) est basé sur des simulations numériques du réacteur nucléaire, telles que celles étudiées dans ce travail.

En effet, la composition isotopique du combustible à l'entrée du réacteur n'est pas connue a priori et elle doit être calculée rapidement lors de l'exécution du scénario. Pour cette raison, un méta-modèle basé sur des méthodes de régression non-linéaire multiparamétrique a été conçu : grâce à la réalisation de milliers de simulations d'évolution du combustible explorant tout l'espace des phases des vecteurs isotopiques, des réseaux de neurones sont entraînés pour attribuer à une certaine composition isotopique d'entrée et à un Burn-Up donné la composition isotopique de sortie. Le modèle utilisé pour réaliser toutes les simulations d'évolution du combustible est un modèle simplifié appelé modèle assemblage et qui fait le sujet de ce travail.

1.1.3 Le besoin de simulations prédictives

Ces simulations d'évolution du combustible sous irradiation doivent être le plus représentatives possible de la réalité. Les projets des réacteurs de nouvelle génération doivent être basés sur des études précises et entachées d'erreurs les plus faibles possibles pour limiter les marges opérationnelles qui augmentent les coûts des projets.

En effet, dans les études de scénarios, des erreurs sont engendrées sur l'estimation des Burn-Up et sur la production des isotopes du plutonium et propagées durant toute la simulation de la vie du parc. Par exemple, une mauvaise estimation du vecteur isotopique en fin d'une irradiation dans un scénario de transition REP-RNR pourrait induire des

erreurs sur l'estimation du temps de déploiement des réacteurs à neutrons rapides.

La maîtrise des biais de calculs est très importante afin d'estimer le degré de fiabilité des simulations numériques. Ce travail de thèse s'inscrit dans ce cadre : il traite des approximations à la base des modélisations des réacteurs à eau sous pression utilisées dans les simulations d'évolution à l'IN2P3 et il en quantifie les erreurs sur les inventaires isotopiques en fin d'irradiation. Dans la suite, il pourra être utilisé pour la propagation des biais de calculs dans les scénarios réalisés avec CLASS.

1.2 Simulations des réacteurs nucléaires

1.2.1 Les réacteurs nucléaires

Actuellement en France 78% de l'électricité produite est d'origine nucléaire. Il y a 19 centrales sur le sol français qui comportent 58 tranches (ou réacteurs). Ce sont tous des réacteurs à neutrons thermiques et à eau pressurisée (REP). Un EPR (European Pressurized Reactor) est actuellement en construction à Flamanville.

1.2.1.1 Les générations des réacteurs

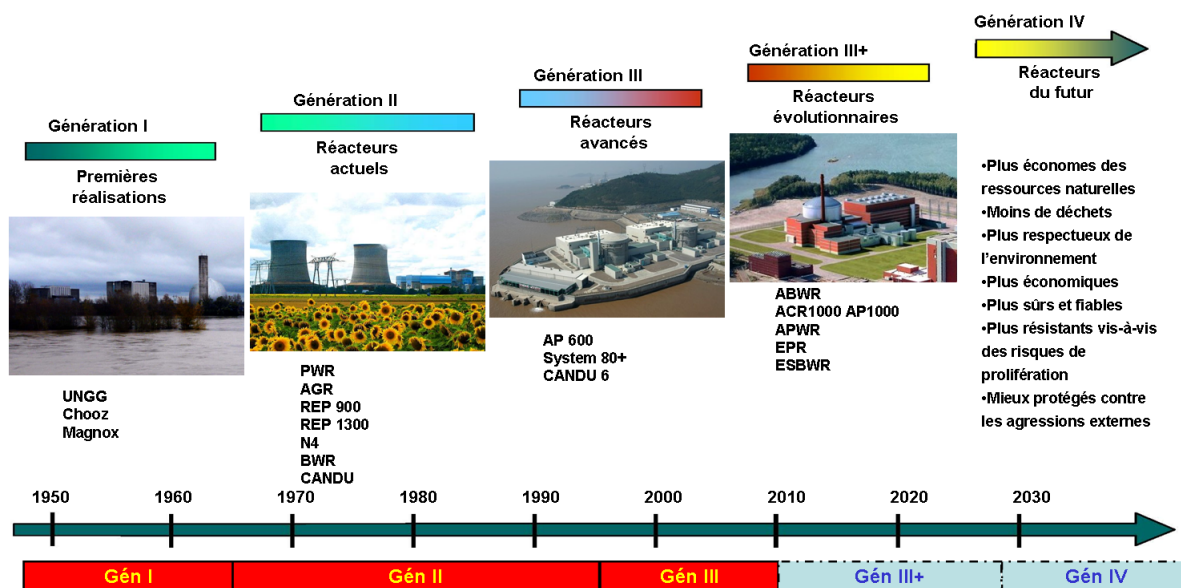


FIGURE 1.2 – Illustration des générations de réacteurs nucléaires selon le temps de fabrication (réelle ou prévue)

Les réacteurs sont classés par générations selon l'époque de construction, comme illustré dans la figure 1.2. La I^{ère} génération est constituée des premiers réacteurs électrogènes construits dans les années 50 et 60, comme les réacteurs graphite-gaz, HTGR au Royaume-Uni, AGR aux États-Unis, MAGNOX en Italie et UNGG en France. Dans la II^{ème} génération nous trouvons les réacteurs à neutrons thermiques REP et REB (à eau pressurisée et

bouillante) et les réacteurs à eau lourde PHWR, comme le CANDU.

La III^{ème} génération n'est pas caractérisée par de nouveaux concepts mais représente plutôt une rupture avec la deuxième génération de part les améliorations de la sûreté.

Les réacteurs de IV^{ème} génération incarnent l'idée des réacteurs du futur. Certains réacteurs de cette génération permettraient de s'affranchir de la problématique d'approvisionnement de la matière naturelle via le principe de la régénération. De plus, ces concepts pourraient permettre l'incinération des actinides mineurs via le processus de transmutation. Enfin, tous les réacteurs de IV^{ème} génération sont conçus pour avoir une sûreté, une fiabilité, une résistance à la prolifération et des protections physiques d'attaques extérieurs améliorées par rapport aux réacteurs précédents.

Dans ce travail de thèse, nous traitons seulement la modélisation des réacteurs à neutrons thermiques à eau pressurisée que nous présentons dans la suite.

1.2.1.2 Principe de fonctionnement d'un REP

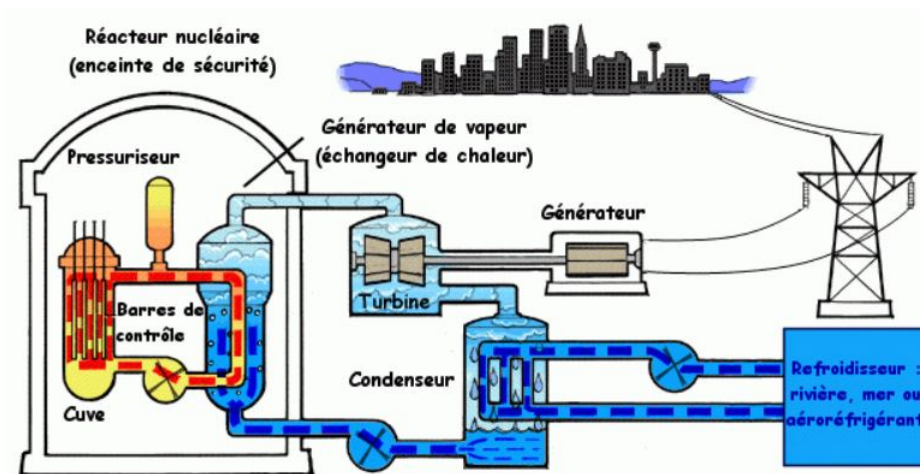


FIGURE 1.3 – Représentation d'un réacteur à eau pressurisée (REP). Source image [Energythic]

Les REP doivent leur nom à la condition de pressurisation du fluide caloporteur (l'eau) dans le circuit primaire, en rouge dans la figure 1.3. Dans cette figure, nous pouvons observer comment l'énergie électrique est produite dans un réacteur nucléaire REP : l'eau du circuit dit secondaire, chauffée dans les générateurs de vapeurs (GV) par le circuit primaire, est amenée à l'état vapeur et ensuite convoyée dans une turbine qui transforme l'énergie thermique en énergie mécanique puis en énergie électrique à travers un générateur. L'eau est finalement refroidie en contact avec un troisième circuit via un échange thermique eau-eau.

Dans les simulations traitées dans ce manuscrit, seulement une partie du circuit primaire (le cœur du réacteur), où l'énergie thermique est produite, est considérée.

L'eau primaire est chauffée par les réactions de fission nucléaire dans le combustible, constitué d'oxyde d'uranium (UOx dans la suite). Sa température en sortie de cœur est

de 330°C environ, alors qu'à l'entrée elle est de 290°C. La pression de l'eau est maintenue constante (à 155 bar) à travers le pressuriseur, placé entre la cuve et le GV. Dans un REP, chaque circuit est indépendant des autres.

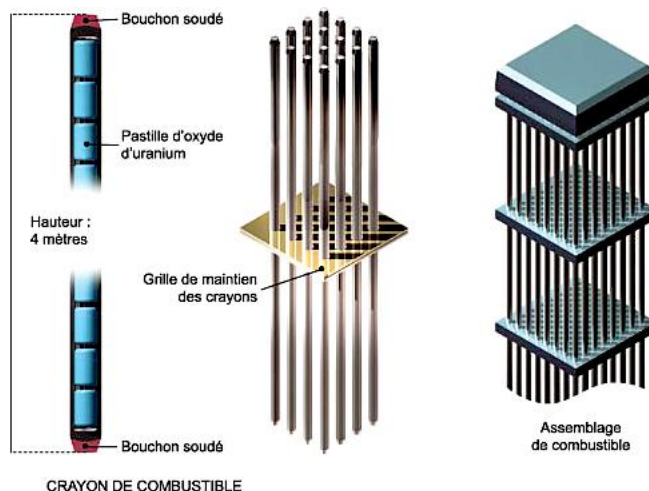


FIGURE 1.4 – Représentation d'un crayon de combustible et d'un assemblage d'un REP

Le combustible nucléaire est constitué par des pastilles cylindriques de dioxyde d'uranium de 13 mm de hauteur et 8 mm de diamètre environ, enveloppées par une gaine en Zircaloy. Ces pastilles empilées les unes sur les autres forment le crayon de combustible, représenté dans la figure 1.4, qui a une hauteur de 4 m environ. Ces crayons sont regroupés pour former un assemblage, constitué de 264 crayons disposés dans un pavage de 17x17. 24 des 25 places libres sont occupées par les tubes guides qui accueillent les grappes de contrôle ou de sûreté, alors que la position centrale est réservée au tube d'instrumentation. Dans nos simulations, les tubes guides et le tube d'instrumentation sont simulés de la même manière : un tube rempli d'eau de rayon plus grand que celui du crayon du combustible. Tout le long des assemblages, des grilles de support assurent le maintien mécanique des crayons, comme on peut le voir dans la figure 1.4. Dans un REP de 900 MW_{el} il y a 157 assemblages.

Une vue du plan radial d'un cœur du réacteur est donnée dans la figure 1.5, où nous avons aussi représenté un assemblage et un « pin » (unité de base composée par un crayon de combustible et de l'eau modératrice autour). Le cœur est entièrement entouré radialement par de l'eau (en bleu dans la figure à gauche) et par un réflecteur radial en acier.

Le combustible des REP français peut être de deux types selon la composition isotopique : UOx ou MOx. Le premier est le classique dioxyde d'uranium, UO_2 , dans lequel les isotopes principaux d'uranium présents sont l' ^{238}U et l' ^{235}U . L' ^{235}U est l'isotope fissile. L' ^{238}U , au contraire, ne fissionne pas avec les neutrons thermiques, mais principalement il capture des neutrons et génère des isotopes à leur tour fissiles. Les isotopes de ce type sont définis fertiles.

Le combustible de type MOx est constitué d'uranium et de plutonium (Mixed Oxide). Le plutonium présent dans ce combustible est issu du retraitement des UOx usés, c'est-à-dire des combustibles qui ont terminé leur période d'irradiation en cœur. Une description

plus détaillée du cycle du combustible est donnée dans le paragraphe suivant.

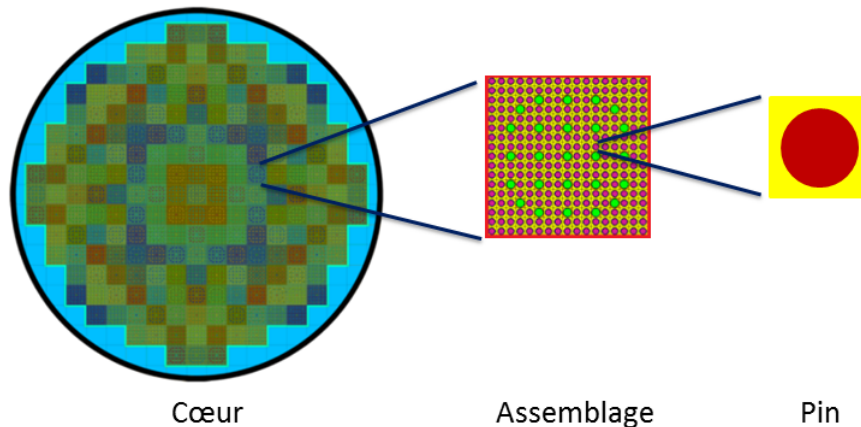


FIGURE 1.5 – Vue sur le plan (x,y) d'un cœur du réacteur, d'un assemblage et d'un pin de combustible

1.2.1.3 Le cycle du combustible

Le cycle du combustible s'articule en plusieurs étapes, qui peuvent être classées en deux catégories : l'amont et l'aval du cycle. La figure 1.6 donne une vision générale du cycle du combustible en France.

L'amont du cycle

La première étape est l'extraction de la matière fissile à partir des mines d'uranium. Après traitement du minerai, un processus de concentration est effectué. Le résultat est un produit appelé « yellow cake » qui subit ensuite une étape de conversion d'uranates et d'oxydes vers l'hexafluorure d'uranium, lui même enrichi en ^{235}U . La teneur d'enrichissement augmente dans cette étape de 0.7% à 3.5 – 4%. La dernière étape est la fabrication des assemblages de combustible décrits précédemment.

Le combustible est donc positionné dans le cœur du réacteur, où il reste pour une certaine période pendant laquelle il subit l'irradiation du flux neutronique. Les matières originellement présentes dans le combustible évoluent et la composition isotopique du combustible utilisé est ainsi différente par rapport à celle initiale. Cette étape d'évolution isotopique est reproduite par les simulations des réacteurs nucléaires, comme celles que nous avons effectuées pendant ce travail de thèse et que nous détaillons dans la suite.

L'aval du cycle

L'aval du cycle concerne tout ce qui se passe après l'étape d'irradiation : retraitement du combustible utilisé, entreposage et stockage des déchets.

La loi française du 2006 définit « un déchet radioactif comme une matière radioactive pour lequel aucune utilisation n'est prévue ni envisagée » [JORF, 2006]. Donc, si aucune utilisation pour le plutonium n'est prévue suite à l'irradiation en réacteur, il doit être

Schéma de principe des étapes du cycle du combustible nucléaire

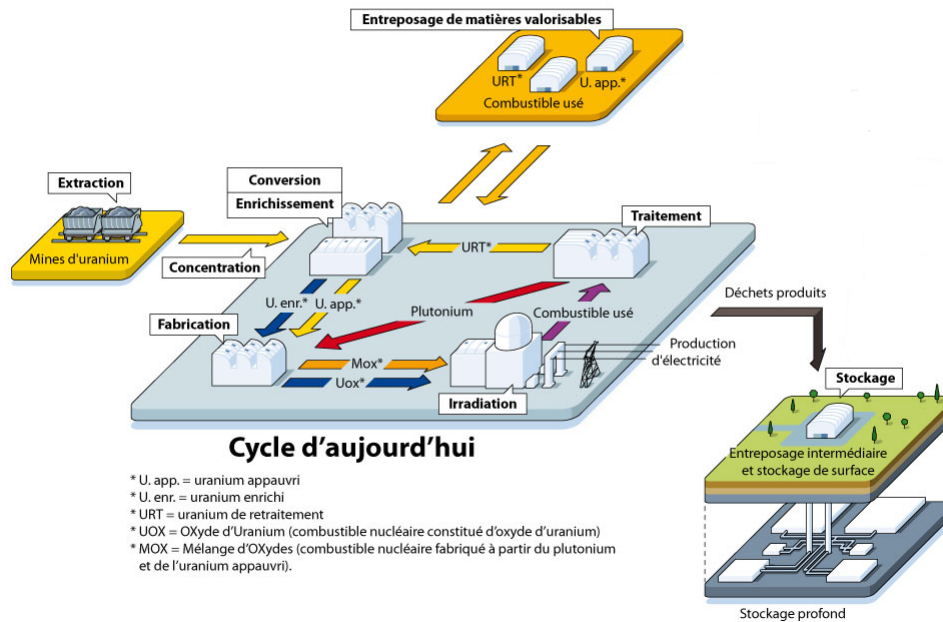


FIGURE 1.6 – Schéma du cycle du combustible français. Source image [Ministère de la Transition écologique et solidaire]

considéré comme un déchet. Actuellement, la France recycle le plutonium produit dans ses réacteurs pour la fabrication des combustibles MOx qui sont introduits lors du rechargement des cœurs de certains réacteurs du parc. Depuis les années 2000, 20 REP de 900 MW_{el} fonctionnent avec un chargement à 30% MOx [Patarin, 2002]. Ces réacteurs sont qualifiés de « moxés ». Les combustibles MOx usés sont aujourd'hui entreposés dans l'attente de retraitement pour le combustible d'éventuels futurs RNR.

Tous les choix concernant le cycle du combustible peuvent être traités via les études de scénarios avec CLASS. En effet, l'utilisateur peut fixer par exemple le temps de fabrication, le temps de refroidissement du combustible usé, le nombre de réacteurs à déployer et la stratégie de retraitement. Grâce à ces études, il est possible d'évaluer la faisabilité de certains scénarios envisagés dans le futur, selon la disposition et la qualité des matières fissiles et les caractéristiques des réacteurs du parc.

Pour que ces études soient pertinentes, il faut que les simulations, et donc les modèles de réacteurs introduits dans le code, soient le plus représentatifs possibles. Ce travail de thèse cherche à quantifier la précision d'un calcul d'irradiation, nécessaire à l'élaboration des modèles de CLASS.

1.2.2 La neutronique d'un REP

Dans ce paragraphe, nous rappelons les bases de neutronique et les grandeurs qui sont utilisées dans la suite de ce manuscrit.

1.2.2.1 Les sections efficaces

La probabilité qu'un neutron interagisse avec un noyau est exprimée par la section efficace microscopique de réaction, indiquée par σ . Cependant, cette grandeur n'est pas une probabilité au sens propre, elle est homogène à une surface et se mesure en barns ; 1 b vaut 10^{-24} cm^2 .

Les réactions possibles sont de plusieurs types, elles peuvent être séparées en deux catégories : les réactions absorbantes et les réactions de diffusion. Dans les réactions de diffusion, le neutron est réémis suite à l'interaction avec le noyau, l'opération est donc neutre du point de vue de la production des neutrons. Nous distinguons donc une section efficace de diffusion (ou de *scattering*), σ_s , et une réaction d'absorption, σ_a , qui inclut la fission, la capture et potentiellement d'autres réactions ((n, γ) , (n, α) , $(n, 2n)$, ...).

L'allure des sections efficaces en fonction de l'énergie du neutron incident dépend du type de réaction. Les sections efficaces d'absorption ont un profil non constant qui varie fortement en fonction de l'énergie cinétique du neutron, comme illustré dans la figure 1.7 qui représente les sections efficaces de fission et de capture des isotopes ^{235}U et ^{238}U .

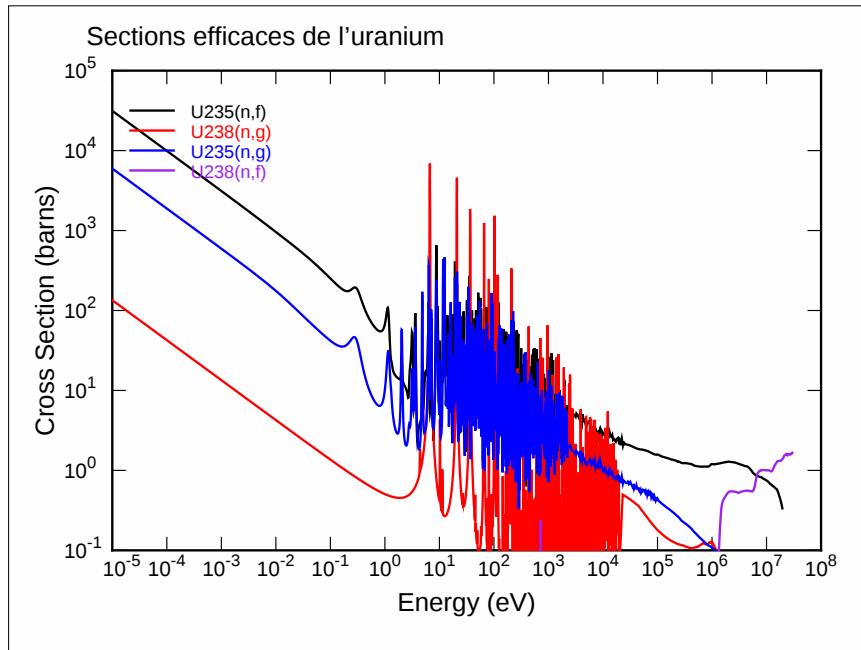


FIGURE 1.7 – Sections efficaces de capture et de fission de l' ^{235}U et de l' ^{238}U

Nous pouvons diviser les profils des sections efficaces de l' ^{235}U et celle de capture de l' ^{238}U en trois zones : une zone à faibles énergies cinétiques des neutrons où l'allure de σ est du type « $1/v$ » (où v indique la vitesse du neutron) ; une zone intermédiaire, appelée zone des résonances, caractérisée par des brusques remontées en correspondance de l'énergie du neutron qui donne au noyau composé une énergie proche de celle de l'un de

ses niveaux d'excitation ; et une troisième zone, dite des résonances non résolues. Selon la même division, les neutrons sont classés en énergie comme : neutrons thermiques, neutrons épi-thermiques et neutrons rapides.

Notons que la section efficace de fission de l' ^{238}U n'a pas la même allure que les autres montrées dans la figure 1.7. Cette section efficace a des valeurs non nulles seulement à partir d'une certaine énergie des neutrons. En effet, il faut que les neutrons aient une énergie cinétique de l'ordre de quelques MeV pour que la réaction soit possible. Elle est qualifiée de section efficace à seuil.

Les données nucléaires

La détermination des données nucléaires, élément de base pour la neutronique qui cherche à prédire le parcours des neutrons dans la matière, est faite à l'aide d'expériences et de modèles théoriques de physique nucléaire. Ces données sont compilées dans les bases de données internationales, comme JEFF (Joint Evaluated Fission and Fusion File) [OECD, 2014] pour les données européennes. Ce sont des bibliothèques de fichiers d'évaluation qui contiennent toutes les informations nécessaires à la reconstruction des sections efficaces pour la modélisation neutronique du système considéré.

Pour la résolution de l'équation du transport présentée dans la suite, les sections efficaces peuvent être représentées de manière ponctuelle ou multigroupe. Une représentation ponctuelle signifie que pour chaque valeur en énergie du neutron incident, une section efficace microscopique $\sigma(E)$ est calculée. À partir des $\sigma(E)$ il est possible de calculer des sections efficaces pour un groupe énergétique g donné, σ_g , grâce à l'équation 1.1. Cette valeur moyenne est le résultat d'une pondération sur le groupe g de la section efficace ponctuelle par un flux de pondération, indiqué $\Phi_w(E)$ dans l'équation 1.1.

Les biais associés aux librairies de données nucléaires peuvent se propager dans les simulations. Une étude approfondie de ces incertitudes représente donc un enjeu important pour les simulations des réacteurs [Rochman et al., 2017].

$$\sigma_g = \frac{\int_g \sigma(E) \Phi_w(E) dE}{\int_g \Phi_w(E) dE} \quad (1.1)$$

Le flux de pondération doit être représentatif du spectre neutronique du système nucléaire modélisé. Cette description est utilisée par les codes de transport multigroupes de particules que nous décrivons dans la suite.

1.2.2.2 Le spectre neutronique

Le spectre neutronique est la distribution en énergie du flux de neutrons Φ , représentant la densité de neutrons d'une énergie, exprimée en $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$. Deux exemples de spectres sont reportés dans la figure 1.8, qui montre des spectres neutroniques en REP pour deux types de combustible, UOx en rouge et MOx en noir. Sur ce plot, nous pouvons encore une fois distinguer les trois zones précédemment identifiées : selon une énergie décroissante, la

zone rapide, la zone épi-thermique et la zone thermique.

La zone rapide est caractérisée par une augmentation significative de la densité neutronique, génériquement appelée bosse rapide. Cette bosse est causée par les neutrons rapides produits par fission, qui ont une énergie moyenne de 2 MeV . Pour les deux types d'assemblages cette partie est presque identique.

Dans la zone épi-thermique nous pouvons voir les résonances de capture de l'uranium et notamment de l' ^{238}U montrées précédemment (figure 1.7) qui perturbent le spectre à des endroits précis correspondant aux énergies de résonance. Comme dans la zone rapide, les spectres de l'UOx et du MOx sont pratiquement superposés l'un sur l'autre.

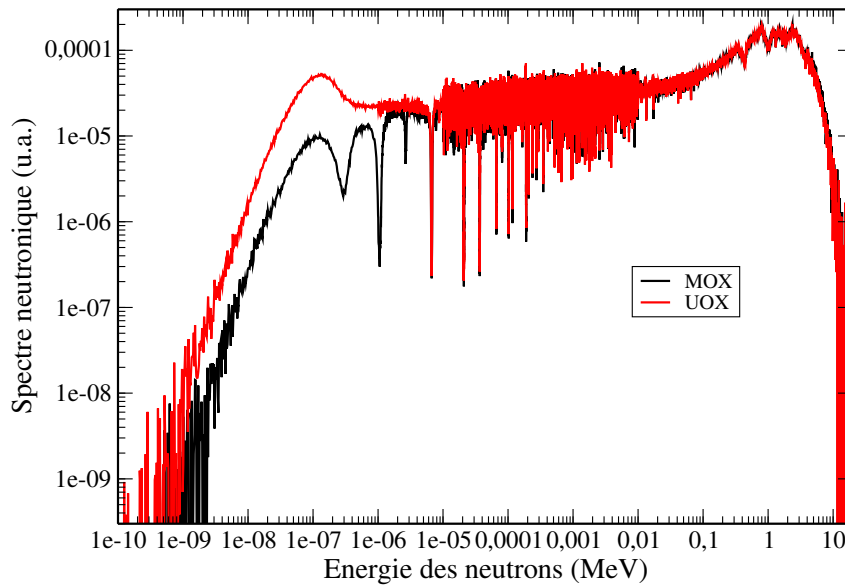


FIGURE 1.8 – Spectres de neutrons pour un combustible UOx et un combustible MOx

Dans la zone thermique, au contraire, les deux spectres diffèrent de manière significative. La courbe rouge montre la bosse thermique en UOx, qui représente les neutrons à l'équilibre thermique avec le modérateur (à 300°C , cette énergie est de 0.025 eV). Dans l'assemblage moxé, qui contient du plutonium, la bosse thermique est fortement réduite. En effet, les isotopes du plutonium ont des résonances assez prononcées à faible énergie, juste au-dessus de l'énergie thermique. Les neutrons sont donc capturés pendant le ralentissement.

À cause de cette différence de densité de neutrons thermiques, le spectre dans un assemblage MOx est dit plus rapide, ou autrement plus dur, que celui d'un assemblage UOx, au contraire défini thermique ou doux. C'est la présence du plutonium qui durcit le spectre et nous pouvons prédire un durcissement du spectre d'un combustible UOx pendant l'évolution à cause de la production de cet isotope. Cette différence de spectre induit des sections efficaces moyennées en énergie (autrement appelées sections efficaces à 1 groupe) beaucoup plus petites pour les réacteurs MOx que pour les réacteurs UOx.

1.2.3 L'équation du transport

Après avoir donné une description rapide du fonctionnement d'un REP et des concepts de base de la neutronique des réacteurs à neutrons thermiques, nous présentons dans ce paragraphe l'équation du transport qui prédit la densité de neutrons dans l'espace des phases.

1.2.3.1 Définition de grandeurs de base

Densité neutronique n

La densité neutronique est la densité de neutrons à une énergie donnée par unité de volume. Elle s'exprime comme dans l'équation 1.2 et son unité de mesure est $[n/cm^3]$.

$$n = \frac{\text{nombre de neutrons}}{\text{volume}} \quad (1.2)$$

Flux neutronique Φ et courant de neutrons J

Considérons les neutrons qui traversent une surface A perpendiculairement à leur trajectoire, comme dans la figure 1.9. Cette grandeur représente le courant de neutrons.

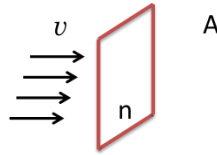


FIGURE 1.9 – Neutrons traversant perpendiculairement une surface A

En faisant l'hypothèse que les neutrons ont tous la même vitesse v et que la densité dans le milieu soit uniforme et égale à n , nous cherchons à exprimer le nombre de neutrons qui traversent l'aire A dans un intervalle de temps Δt (soit le courant). Les neutrons en question sont ceux qui se trouvent dans le volume du parallélépipède $v \Delta t A$, comme montré dans la figure 1.10.

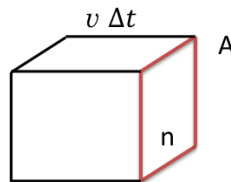


FIGURE 1.10 – Neutrons traversant perpendiculairement une surface A dans un intervalle de temps Δt

Le flux neutronique est défini comme le nombre volumique de neutrons ayant la vi-

tesse v . Il peut être calculé comme :

$$\Phi = \frac{\text{neutrons traversant l'aire } A \text{ à vitesse } v}{\text{unité d'aire et de temps}} = \frac{n v \Delta t A}{\Delta t A} = n v \quad (1.3)$$

Le flux neutronique est donc le produit entre la densité neutronique et la vitesse des neutrons, comme dans l'expression 1.3. L'unité de mesure est $[n/(cm^2 \cdot s)]$ mais c'est une grandeur volumique par définition.

Taux de réaction R

Le taux de réaction est défini comme le nombre de réactions neutroniques par seconde et il est donné par l'expression 1.4.

$$R = \int \Phi \sigma N V dE \quad (1.4)$$

où σ est la section efficace microscopique (*barns*), N est la densité atomique du milieu considéré (at/cm^3) et V est le volume (cm^3). Le taux de réaction se mesure donc en $[réaction/s]$.

Section efficace macroscopique Σ

La section efficace macroscopique d'une réaction donnée et d'un isotope donné est définie dans l'équation suivante comme le produit entre la section efficace microscopique de réaction et la densité atomique du milieu considéré.

$$\Sigma = \sigma N \quad (1.5)$$

En accord avec l'équation 1.5, l'unité de mesure de Σ est $[1/cm]$, soit l'inverse d'une longueur. La section efficace macroscopique représente la probabilité d'interaction d'un neutron par unité de parcours. L'inverse de la section efficace macroscopique totale représente le libre parcours moyen des neutrons dans la matière.

1.2.3.2 Équation de Boltzmann

L'équation du transport de neutrons est une équation bilan qui donne comme résultat la distribution des neutrons en fonction de l'espace, du temps, de l'énergie et de la direction indiquée comme $\Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t)$, où $\vec{r}$ représente la position, $\vec{\Omega}$ représente la direction, E l'énergie et t le temps.

L'équation du transport est complexe et la solution ne peut pas être obtenue de manière analytique sans approximation. Pour la résoudre, deux approches sont utilisées : une approche numérique-déterministe et une approche Monte Carlo. Les deux méthodes sont décrites dans § 1.2.4 et 1.2.5.

Pour l'établir, réalisons un bilan de neutrons dans un volume dV quelconque donné.

L'équation de bilan peut s'exprimer de manière simplifiée comme une équivalence entre taux de réaction :

$$N - D - F = A \quad (1.6)$$

où N est le taux de production des neutrons, D le taux de disparition par absorption, F le taux de fuites et A le taux d'accumulation.

Avant d'exprimer les taux de réactions de l'équation 1.6, nous définissons la fonction de transfert f pour la réaction i , indiquée comme $f_i(\vec{r}, \vec{\Omega}', E' \rightarrow \vec{\Omega}, E)$. Cette fonction exprime la probabilité que, suite à une interaction de type i en $\vec{r}$ avec un neutron d'énergie E' et de direction $\vec{\Omega}'$, le neutron en sortie ait l'énergie E et la direction $\vec{\Omega}$.

En considérant donc les réactions de diffusion élastique (n, n) , de diffusion inélastique (n, n') , de fission (n, f) et de capture radiative (n, γ) , nous pouvons écrire la fonction de transfert globale qui donne la probabilité totale d'avoir un neutron en sortie à une énergie E en direction de $\vec{\Omega}$ suite à une interaction quelconque en $\vec{r}$.

$$\sigma(\vec{r}, E') f(\vec{r}, \vec{\Omega}', E' \rightarrow \vec{\Omega}, E) = \sigma_f f_f + \sigma_{s,el} f_{s,el} + \sigma_{s,inel} f_{s,inel} + \sigma_{s,in} f_{s,in} + \sigma_\gamma f_\gamma \quad (1.7)$$

Dans l'équation 1.7, le dernier terme est égal à zéro, parce que aucun neutron est produit suite à une réaction de capture radiative.

Terme de production N

Le taux de naissance des neutrons est donné par :

$$N = \int_V S(\vec{r}) dV + N_{transfert} \quad (1.8)$$

où $S(\vec{r})$ est une source volumique de neutrons, exprimée en $[n/(cm^3 \cdot s)]$. Ce terme regroupe soit les sources extérieures soit les neutrons issus de fission. Le dernier terme $N_{transfert}$ se réfère aux neutrons produits dans l'élément de volume par collision. Le terme de fission peut s'écrire grâce à l'équation 1.9.

$$S_{fiss} = \int_{\vec{\Omega}', E'} \Phi \Sigma_f f_f d\vec{\Omega}' dE \quad (1.9)$$

où la fonction de transfert par fission f_f est le produit entre deux termes : un premier qui représente l'isotropie angulaire de fission supposée par hypothèse et un second qui représente le spectre énergétique.

$$f_f(\vec{r}, \vec{\Omega}', E' \rightarrow \vec{\Omega}, E) = \frac{1}{4\pi} \chi(E) \bar{\nu}(\vec{r}, E') \quad (1.10)$$

Le terme $\chi(v)$ représente le spectre énergétique d'émission de neutrons (probabilité d'émission d'un neutron de vitesse v suite à fission) et ν est le nombre moyen de neutrons émis par fission.

La contribution des neutrons de diffusion produits par réaction de transfert d'un neutron

avec énergie E' et direction $\vec{\Omega}'$ est exprimée grâce à l'équation 1.11.

$$N_{transfert} = \int_{\vec{\Omega}', E'} \Phi' \Sigma' f d\vec{\Omega}' dE' \quad (1.11)$$

Terme de disparition D

Le taux de disparition total est exprimé par :

$$D = \int_V \Sigma_{tot}(\vec{r}) \Phi(\vec{r}) dV \quad (1.12)$$

où $\Sigma_{tot}(\vec{r})$ est la section efficace macroscopique totale.

Terme d'accumulation A

Le terme d'accumulation est la variation de la densité neutronique dans le temps. Si nous exprimons la densité neutronique n selon l'équation 1.3, nous obtenons l'équation 1.13.

$$A = \int_V \frac{\partial n}{\partial t} dV = \frac{1}{v} \int_V \frac{\partial \Phi}{\partial t} dV \quad (1.13)$$

Terme de fuites F

Le terme de fuites F est donné par les fuites de neutrons par seconde du volume élémentaire considéré dV . Nous utilisons la grandeur densité de courant $\vec{J}$, exprimée comme dans l'équation 1.14.

$$\vec{J}(\vec{r}, E, t) = \int_{4\pi} \vec{\Omega} \Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) d\vec{\Omega} \quad (1.14)$$

Pour avoir les neutrons qui traversent la surface S du volume dV , nous multiplions la densité de courant par le vecteur normal à la surface, $\vec{e}_n$. Donc le terme F peut s'exprimer comme dans l'équation 1.15, où nous avons utilisé le théorème de la divergence pour transformer l'intégrale surfacique en intégrale volumique.

$$F = \int_S \vec{J} \cdot \vec{e}_n dS = \int_V \text{div} \vec{J} dV = \int_V \text{div} \vec{\Omega} \Phi dV \quad (1.15)$$

Équation de bilan

En regroupant les termes exprimés précédemment et en intégrant sur le volume dV , nous obtenons l'équation du transport de neutrons :

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \Phi}{\partial t} = -\Sigma_{tot} \Phi - \text{div}(\vec{\Omega} \Phi) + \int_{\vec{\Omega}', E'} \Phi' \Sigma' f d\vec{\Omega}' dE' + S \quad (1.16)$$

Dans l'expression 1.16 nous observons deux termes négatifs, la disparition de neutrons

par collision et par fuites, et deux termes positifs, la production de neutrons par sources extérieures et fission et celle par transfert. L'équation peut être simplifiée de la manière suivante, en faisant apparaître deux opérateurs :

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \Phi}{\partial t} = (B + F) \Phi \quad (1.17)$$

où B est l'opérateur de transport et F l'opérateur de fission.

Dans le cas de stationnarité, c'est-à-dire $\frac{1}{v} \frac{\partial \Phi}{\partial t} = 0$, le réacteur est défini critique et le flux de neutrons est constant dans le temps.

Une résolution analytique de cette équation sans approximation n'est pas possible. Dans les paragraphes suivants, nous présentons les deux méthodes de résolution de l'équation du transport, suivies par la description de l'approximation de la diffusion qui permet une résolution simplifiée en exprimant une liaison entre flux et courant neutroniques.

1.2.4 Résolution de l'équation du transport via calcul probabiliste

Les codes probabilistes résolvent de manière stochastique l'équation du transport de neutrons 1.16. Ils sont nommés codes Monte Carlo parqu'ils simulent l'histoire des neutrons selon des méthodes statistiques.

Un des codes Monte Carlo mondialement diffusé est MCNP (Monte Carlo N-Particles) [Briesmeister, 1997], développé à Los Alamos National Laboratory, qui permet de simuler la propagation de neutrons, photons et électrons dans la matière. Ses applications vont de l'étude des réacteurs à la radioprotection, et à l'imagerie médicale. Dans ce travail, nous avons principalement utilisé MCNP mais aussi, en complément, le code Serpent [Leppänen et al., 2014] qui est développé exclusivement pour les applications « réacteurs ».

La méthode Monte Carlo suit l'histoire d'un grand nombre de neutrons pour en déduire, en moyennant toutes les histoires simulées, le comportement global des neutrons et leur distribution dans le milieu considéré. L'histoire d'un neutron est constituée de plusieurs segments de parcours et pour chaque étape les grandeurs d'intérêt, comme la distance parcourue ou la réaction qui a lieu, sont issues de distributions physiques connues à travers un tirage aléatoire. La représentativité des histoires simulées est satisfaisante si et seulement si le nombre d'histoires est suffisant.

Un des avantages des codes Monte Carlo est la représentation exacte de la géométrie simulée et l'utilisation de sections efficaces continues en énergie. Grâce à la précision des calculs Monte Carlo, les méthodes stochastiques sont utilisées pour obtenir des calculs de référence afin de valider des calculs déterministes.

1.2.5 Résolution de l'équation du transport via méthode déterministe

Les méthodes déterministes utilisent une approche mathématique pour la résolution de l'équation du transport des neutrons stationnaire ($\partial\Phi/\partial t = 0$). L'approche déterministe repose sur une discrétisation de l'espace des phases, c'est-à-dire une discrétisation de l'espace $\vec{r}$, de l'énergie E et de la direction $\vec{\Omega}$.

Le domaine en énergie des neutrons (variant de 0 à 20 *MeV*) est découpé en intervalles appelés groupes d'énergie, chacun noté g . Le nombre des groupes g varie selon le besoin. Par exemple, le code APOLLO2 [Sanchez et al., 2010] peut résoudre l'équation du transport à 172, à 281 ou à 12 000 groupes selon la configuration et la variation des sections efficaces des isotopes du milieu simulé. La discrétisation angulaire est caractérisée entre 100 et 1 000 directions, alors que la variable en espace est typiquement découpée en 10^3 mailles par dimension.

1.2.5.1 La discrétisation en énergie

Pour chaque groupe g d'énergie, un flux multigroupe est défini, selon l'expression 1.18.

$$\Phi^g(\vec{r}) = \int_g \Phi(\vec{r}, E) dE \quad (1.18)$$

L'équation 1.16 est donc intégrée sur chacun des groupes d'énergie et le résultat est un système de g équations avec $\Phi^g(\vec{r})$ comme variables. Les sections efficaces multigroupes doivent être définies de manière à conserver les taux de réactions comme dans l'équation 1.19.

$$\sigma^g(\vec{r})\Phi^g(\vec{r}) = \int_g \sigma(E)\Phi(\vec{r}, E) dE \quad (1.19)$$

Elles sont calculées grâce à l'équation 1.20.

$$\sigma^g(\vec{r}) = \frac{\int_g \sigma(E) \Phi(\vec{r}, E) dE}{\int_g \Phi(\vec{r}, E) dE} \quad (1.20)$$

La difficulté consiste dans l'estimation du flux utilisé pour la pondération parce qu'il est un résultat de l'équation du transport. Souvent, la dépendance à la direction est négligée, ou encore, le flux est remplacé par un flux de pondération.

Le phénomène de l'autoprotection doit être modélisé par les codes de simulation dans des cas spécifiques. La précision de l'approximation liée au flux de pondération peut en effet être insuffisante si l'on traite des sections efficaces avec des résonances importantes, comme pour l' ^{238}U . En correspondance des énergies de résonance, le flux neutronique est fortement creusé et la section efficace augmente. Pourtant, le taux de réaction change peu, comme illustré dans la figure 1.11 qui représente le phénomène d'autoprotection de l'isotope ^{238}U .

Cette opération qui permet d'obtenir des sections efficaces calculées sur un certain groupe en énergie est dite de condensation et elle est traitée dans le chapitre suivant § 2.2.1.1.

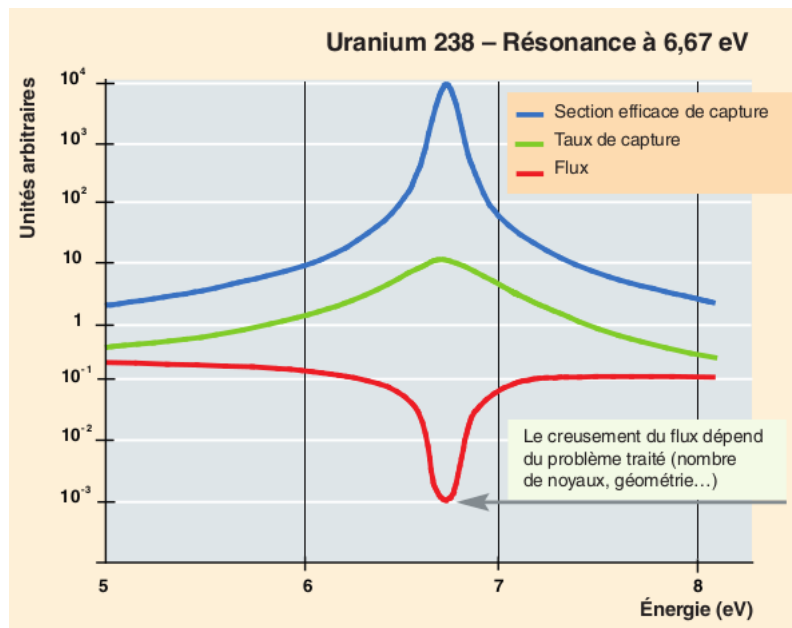


FIGURE 1.11 – Représentation du phénomène d'autoprotection pour l'isotope ^{238}U . Source image [Coste-Delclaux et al., 2013]

1.2.5.2 La discrétisation angulaire

Les deux méthodes principalement utilisées pour le traitement de la variable angulaire sont : la méthode S_N et la méthode P_N .

La méthode S_N

La base de cette méthode appelée méthode des ordonnées discrètes est la discrétisation de la distribution angulaire du flux neutronique selon un nombre fini de directions. L'équation du transport devient donc un système de N équations où N est le nombre de directions choisies.

Cette méthode est largement utilisée, même si elle présente un inconvénient connu : l'« effet de raies ». Si la source de neutrons est fortement localisée, certaines directions choisies peuvent ne pas voir la source, conduisant donc à un flux neutronique presque nul et non physique.

La méthode P_N

Cette méthode utilise un développement du flux angulaire en harmoniques sphériques, qui deviennent les polynômes de Legendre à une dimension. Le résultat de cette application à l'équation du transport est un système infini d'équations, chacune contenant deux variables inconnues. Il faut donc tronquer le système à un ordre défini puis calculer les moments de l'équation du transport pour obtenir toutes les variables inconnues.

1.2.5.3 La discrétisation en espace

L'espace est discrétisé selon un maillage de taille arbitraire et variable selon les caractéristiques du domaine à simuler. Les trois méthodes principales de la discrétisation en espace sont : les méthodes de différences finies, les méthodes nodales et les méthodes des éléments finis.

La première méthode consiste à évaluer l'équation du transport aux points du maillage en remplaçant les dérivées partielles par des différences finies. Les méthodes nodales résolvent les équations différentielles selon les directions x et y , de façon analytique ou en supposant une approximation polynomiale des inconnues. Dans la dernière méthode il est possible d'introduire la variable courant et de rajouter des contraintes physiques de discontinuité de flux aux interfaces, comme c'est le cas à l'interface d'assemblages UOx et MOx.

Une autre méthode utilisée pendant de nombreuses années pour la simulation d'assemblages afin d'estimer les sections efficaces multigroupes protégées est la méthode des probabilités de première collision. Cette méthode, à la base du code DRAGON [Marleau et al., 2016] par exemple, a souvent été remplacée par la méthode des caractéristiques.

1.2.6 Approximation de la diffusion

Reprenons l'équation du transport des neutrons 1.16 décrite précédemment. Si le milieu est faiblement absorbant, l'équation peut se réécrire de la façon suivante :

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \Phi}{\partial t} = S - \Sigma_a \Phi - \text{div} \vec{J} \quad (1.21)$$

où le terme de disparition ($\Sigma_{tot} \Phi$) a été remplacé par la seule absorption et le terme de collision ($\int_{\vec{\Omega}, E'} \Phi' \Sigma' f d\vec{\Omega}' dE'$) a été englobé dans la source S . Cette équation présente deux variables inconnues, le flux neutronique Φ et le courant $\vec{J}$. Les solutions possibles sont d'exprimer le courant en fonction du flux (diffusion) ou de résoudre l'équation tout en gardant la dépendance angulaire de la densité neutronique du terme $\text{div}(\vec{\Omega} \Phi)$ (transport).

L'approximation de la diffusion est souvent utilisée et consiste à exprimer le courant neutronique à partir du gradient du flux. Les hypothèses à la base de cette approximation sont nombreuses :

1. La diffusion est isotrope
2. Le flux est indépendant du temps : $\partial \Phi / \partial t = 0$
3. Le milieu est faiblement absorbant : $\Sigma_a \ll \Sigma_s$
4. Absence de sources de neutrons
5. Milieu homogène
6. Milieu infini
7. Le flux neutronique varie lentement dans l'espace

Dans ces cas, la loi de Fick, exprimée par l'équation 1.22, permet de calculer la disparition des neutrons par fuites pour chaque élément de volume.

$$\vec{J} = -D \overrightarrow{\text{grad}}\Phi \quad (1.22)$$

Le coefficient D est appelé coefficient de diffusion et sa valeur peut être calculée par l'expression 1.23.

$$D = \frac{\Sigma_s}{3\Sigma_t^2} \quad (1.23)$$

où Σ_s et Σ_{tot} sont respectivement les sections efficaces macroscopiques de diffusion (scattering) et totale. En substituant la définition de $\vec{J}$ dans l'équation 1.21, nous obtenons l'expression 1.24.

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \Phi}{\partial t} = S - \Sigma_a \Phi + D \nabla^2 \Phi \quad (1.24)$$

De toutes les hypothèses faites auparavant, seules certaines sont vraiment restrictives pour la validité de l'approximation de la diffusion : le milieu doit être faiblement absorbant et il faut être suffisamment loin des sources de perturbations, telles que les points de discontinuité de matériaux et les interfaces, les sources neutroniques concentrées et les bords du domaine.

L'hypothèse de la diffusion isotrope représente une source d'erreur importante. Pour cette raison, une correction, dite correction du transport, est effectuée sur le coefficient D de l'expression 1.23.

La section efficace totale est remplacée par la section efficace de transport Σ_{tr} :

$$\Sigma_{tr} = \Sigma - \bar{\mu} \Sigma_s \quad (1.25)$$

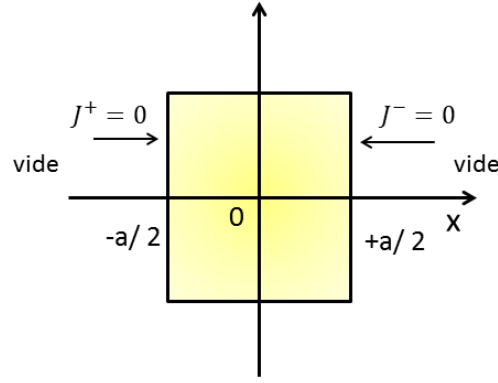
où $\bar{\mu}$ est le cosinus moyen de l'angle de déviation du neutron au cours d'une collision dont une expression analytique existe pour un noyau plus lourd que le neutron : $\bar{\mu} = 2/(3A)$ [Lamarsh, 1966, p.56]. Le coefficient de diffusion devient donc :

$$D = \frac{1}{3\Sigma_t(1 - \bar{\mu})} = \frac{1}{3\Sigma_{tr}} \quad (1.26)$$

1.2.6.1 Conditions aux limites et distance d'extrapolation

Une des conditions aux limites souvent présente dans les problèmes de neutronique est celle d'une interface entre un matériau assez dense et un autre pratiquement vide. Dans ce cas la condition est une condition « de non retour », exprimée comme l'annulation du courant neutronique entrant les surfaces du domaine.

En considérant une plaque en x comme celle représentée dans la figure 1.12, les condi-

FIGURE 1.12 – Plaque de demi-épaisseur $a/2$ avec des conditions de vide à l'extérieur

tions aux limites sont données par :

$$J^-(a/2) = 0 \quad (1.27)$$

$$J^+(-a/2) = 0 \quad (1.28)$$

D'après l'expression du courant (équation 1.29), nous pouvons trouver une expression pour le flux calculé à la surface $\Phi|_S$ (équation 1.30) :

$$J^- = \frac{\Sigma_s}{4\Sigma_t^2} \Phi|_S + \frac{\Sigma_s}{6\Sigma_t^2} \frac{\partial \Phi}{\partial x} \Big|_S = 0 \quad (1.29)$$

$$\Phi|_S + \frac{2}{3} l_t \frac{\partial \Phi}{\partial x} \Big|_S = 0 \quad (1.30)$$

L'équation 1.29 utilise la définition du courant et l'approximation de diffusion (équation 1.22). Le flux neutronique de diffusion est donc approximé à la surface par sa tangente, comme montré dans la figure 1.13. Il ne s'annule pas exactement à la limite physique $a/2$, mais au-delà d'une distance appelée distance d'extrapolation : d_{extr} . La condition aux limites sur le courant est donc transformée en une condition aux limites sur le flux neutronique.

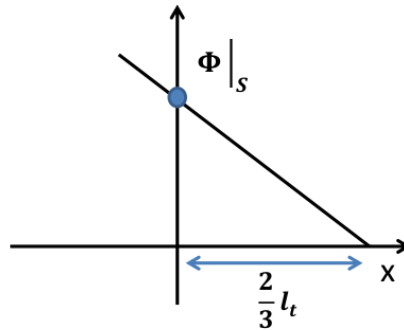


FIGURE 1.13 – Représentation de la condition d'annulation du flux

L'utilisation de la distance d'extrapolation permet de rendre cohérente la solution de l'équation de la diffusion avec la solution rigoureuse dans la plaque donnée par le transport.

La valeur de d est : $d = 0.71 \lambda_{tr}$, où λ_{tr} est l'inverse de la section efficace macroscopique du transport donnée par l'équation 1.25.

En reprenant la définition du coefficient de diffusion 1.26, nous pouvons exprimer la liaison entre D et la distance d'extrapolation de la manière suivante :

$$d_{extr} = 0.71 \lambda_{tr} = 0.71 \cdot 3 D \simeq 2 D \quad (1.31)$$

1.3 Simulation de l'évolution

Les codes stochastiques et déterministes dont nous avons parlé précédemment résolvent l'équation du transport de manière stationnaire. Les propriétés neutroniques du domaine considéré sont calculées seulement pour un instant précis. Afin d'estimer l'évolution de la matière isotopique dans le temps, les codes de simulation réalisent un couplage entre le calcul statique de transport des neutrons qui permet d'évaluer les taux de réactions pour chacun des noyaux et la résolution des équations de l'évolution, présentées dans le paragraphe suivant.

1.3.1 L'équation de Bateman

L'évolution de la composition isotopique sous irradiation est décrite à travers une série d'équations différentielles du premier ordre couplées entre elles appelées équations de Bateman.

Pour chaque isotope i présent dans chacune des cellules qui évoluent, nous pouvons exprimer l'évolution dans le temps de la quantité isotopique N de l'isotope i comme :

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} = \sum_j \lambda_j^{j \rightarrow i} N_j(t) - \lambda_i N_i(t) + \sum_{j'} N_{j'}(t) \langle \sigma_{j'}^{j' \rightarrow i} \rangle \Phi - \sum_r N_i(t) \langle \sigma_i^r \rangle \Phi \quad (1.32)$$

Dans l'équation 1.32 nous avons deux termes de production et deux termes de disparition, séparables en deux catégories : variation de la quantité isotopique par décroissance (premier et deuxième termes) et par réaction avec le flux neutronique (troisième et dernier termes).

Analysant terme par terme nous avons :

1. Production du noyau i par décroissance d'un autre noyau j caractérisé par une constante de décroissance indiquée comme $\lambda_j^{j \rightarrow i}$. Cette constante de décroissance est donnée par le produit de la constante de décroissance du noyau j , λ_j , et du rapport de branchement $\eta^{j \rightarrow i}$
2. Disparition du noyau i par sa propre décroissance avec une constante λ_i
3. Production du noyau i par réaction sous flux neutronique Φ d'un autre noyau j caractérisé par la section efficace un groupe $\langle \sigma_j^{j \rightarrow i} \rangle$
4. Disparition du noyau i par réaction de cet isotope sous flux neutronique selon une réaction r de section efficace $\langle \sigma_i^r \rangle$

Pendant l'évolution du combustible, la quantité des différents noyaux change. Comme nous avons vu pour les assemblages UOx et MOx, la composition isotopique du combustible impacte fortement le spectre neutronique § 1.2.2.2. Si le spectre neutronique change, les sections efficaces microscopiques moyennées à 1 groupe énergétique varient aussi au cours du temps. Le système d'équations 1.32 est donc non linéaire parce que le flux et les sections efficaces sont des fonctions du temps.

Chaque noyau produit, par décroissances radioactives successives et par réactions nucléaires, un ensemble de noyaux fils. Afin de réaliser l'évolution d'un matériau donné, il faut connaître à l'avance l'arbre des filiations (appelé *NucleiTree* dans le code SMURE) qui reporte les liens de filiation entre les noyaux. Cet arbre est réalisé de manière progressive, en s'appuyant sur les bases de données qui liste l'ensemble des réactions possibles pour chaque noyau et donc les noyaux fils produits.

1.3.2 Codes d'évolution

Afin de réaliser des évolutions de la matière isotopique, des codes dits d'évolution ont été développés pour estimer les quantités isotopiques suite à l'irradiation.

Pour résoudre le problème de la dépendance du temps des sections efficaces introduit précédemment, les codes d'évolution utilisent des algorithmes itératifs pour couper la simulation en un certain nombre de pas de temps dt pendant lesquels les sections efficaces sont supposées rester constantes. Les deux étapes consécutives des calculs d'évolution sont : la résolution de l'équation du transport, grâce à laquelle les sections efficaces et le flux moyens à insérer dans les équations de Bateman sont calculés ; la résolution de l'équation de l'évolution, à partir de laquelle les densités isotopiques pour le calcul en transport au pas de temps suivant sont déterminées. Ces passages sont répétés jusqu'au temps final de l'irradiation. Selon la méthode utilisée pour la première étape, le code est appelé stochastique ou déterministe. Pour la résolution des équations de Bateman, plusieurs approches mathématiques sont disponibles.

Le code que nous avons utilisé pour nos simulations est le code SMURE [Méplan et al., 2017] et il est décrit dans le chapitre suivant.

Parmi les codes déterministes, nous pouvons citer en exemple APOLLO2 [Sanchez et al., 2010], doté de plusieurs modules de résolution de l'équation du transport (méthode des ordonnées discrètes, des caractéristiques, P_N , ..), et le code DRAGON [Marleau et al., 2016], qui utilise la méthode des probabilités de collisions et celle des caractéristiques.

Tous ces codes sont utilisés pour résoudre l'équation du transport et simuler l'évolution des quantités isotopiques pour un assemblage ou une portion d'assemblages. La réalisation d'un calcul cœur est beaucoup plus complexe et, pour des raisons explicitées dans la suite, ces codes d'évolution ne simulent pas le cœur entier d'un réacteur ; ils réalisent ce qui est appelé un « calcul cellule ». Ce calcul d'une seule unité de base (un assemblage par exemple) constitue la première étape de la simulation d'un cœur complet.

1.4 Schéma de calcul cœur

1.4.1 Difficultés de simulation d'un cœur complet

La résolution numérique de l'équation du transport pour un cœur complet n'est pratiquement jamais réalisée, ni par des méthodes probabilistes ni déterministes. La raison principale est le temps de calcul trop élevé requis par une simulation de ce type. Par exemple, envisager une simulation complète du cœur d'un REP900 avec un code déterministe signifie résoudre un système matriciel de 100 millions d'inconnues [Lautard et al.], ce qui est définitivement trop complexe et trop demandeur de place mémoire pour être adopté comme système de simulation de routine.

La simulation d'un cœur complet avec des codes stochastiques présente la même problématique d'un temps de calcul excessif. Cependant, comme nous le présentons dans le chapitre 2, ce n'est pas la seule difficulté à laquelle il faut faire face pour réaliser une simulation de cœur complet en utilisant ces méthodes [Martin, 2012]. De plus, comme pour les codes déterministes, un grand espace mémoire est nécessaire pour stocker toutes les grandeurs issues du calcul (tallies, données géométriques, sections efficaces, ..). Cependant, pour des géométries de taille contenue comme les réacteurs de recherche, des simulations cœur Monte Carlo ont été réalisées [Ferraro et Villairno, 2016], [Martin et al., 2012].

Le schéma adopté pour la simulation d'un cœur de réacteur s'effectue à travers une méthode différente, détaillée dans la suite.

1.4.2 Schéma classique à deux étapes pour la simulation d'un cœur complet

Les calculs de cœur s'articulent en deux étapes : un calcul cellule en transport et un calcul de cœur en diffusion. À partir du premier, des bibliothèques de sections efficaces sont créées pour déterminer les grandeurs utilisées dans le calcul de cœur en diffusion. Nous détaillons dans la suite les deux étapes.

1.4.2.1 Calcul cellule en transport

L'étape du calcul cellule peut être réalisée soit avec des codes probabilistes, soit avec des méthodes déterministes. Il s'agit d'un calcul en transport d'un assemblage (ou d'une portion d'assemblages) dans des conditions appelées « infinies » : la géométrie est complètement réfléchie, les neutrons ne peuvent pas sortir du domaine simulé. Généralement, la discrétisation adoptée pour ce calcul est fine en énergie et en espace.

À partir de ces calculs, les sections efficaces multigroupes sont estimées suite aux processus de condensation en énergie et de homogénéisation en espace, décrits dans § 2.2.1. Le nombre de groupes en énergie dans lequel les sections efficaces sont condensées est choisi de manière arbitraire. Historiquement, deux groupes sont considérés : le groupe rapide et le groupe thermique (avec coupure en énergie à 0.625 eV). L'homogénéisation est réalisée

par crayon ou par assemblage, selon qu'on privilégie une précision élevée ou un temps de calcul moins important.

Les simulations d'évolution de l'assemblage dans ce réseau infini sont nombreuses et tabulées en Burn-Up, en température, en concentration de bore et de ^{135}Xe ². Elle sont ensuite stockées dans des fichiers formatés appelés librairies de sections efficaces, qui sont utilisées pour l'étape suivante du calcul de cœur.

Le nombre total des calculs en transport à effectuer dépend donc de la quantité des paramètres choisis et de leur discrétisation.

1.4.2.2 Calcul de cœur en diffusion

Cette étape consiste dans un calcul en diffusion (résolution de l'équation 1.24 stationnaire) sur le cœur entier, en $3D$ et en évolution.

À chaque pas de temps de l'évolution, les Burn-Up moyens des assemblages (ou des crayons, selon la discrétisation à l'étape précédente) sont calculés, ainsi que les valeurs des paramètres de simulation (température, bore, xénon). Les sections efficaces sont donc recalculées par interpolation à partir des bibliothèques créées précédemment.

Le calcul de la distribution de puissance et de celle de la température du combustible ainsi que du modérateur est aussi réalisable si un module de thermohydraulique et de thermique est présent : les sections efficaces peuvent alors être mises à jour selon la valeur de ces paramètres de contre-réaction. Ce processus est itératif puisque les sections efficaces interpolées ont un impact sur la distribution de température.

Un des résultats obtenus avec la simulation d'un cœur est l'estimation du temps total du cycle du combustible. Avec cette information, les inventaires isotopiques d'un combustible donné peuvent être calculés en fin d'irradiation, comme dans l'exemple présenté ci-dessous.

Les codes de calcul de cœur existant présentent différentes méthodes mathématiques de la résolution de l'équation de la diffusion. Certains sont des modules qui peuvent être couplés directement avec des codes de résolution de l'équation du transport via méthode déterministe, comme CRONOS [Lautard et al.]. D'autres sont spécialisés pour des types de réacteur particuliers, comme POLCA [Westinghouse Electric Company, 2013] pour les REB américains, ou spécialisés pour des analyses de situations accidentelles, comme SIMULATE [Grandi, 2008]. Citons d'autres exemples : DONJON [Varin et al., 2005], CASMO [Rhodes et al., 2006] et NESTLE [Turinsky, 1994].

1.4.2.3 Exemples d'applications

Considérons maintenant deux exemples d'application de ce schéma de calcul à deux niveaux présenté dans le paragraphe précédent.

Dans [Guillemin, 2009], le couplage entre les codes DRAGON et DONJON a été utilisé

2. Pour cet isotope, comme pour le ^{149}Sm , les sections efficaces microscopiques sont stockées dans les bibliothèques. Au cours de la phase suivante du calcul de cœur, des modèles simplifiés donnent leur concentration à saturation, à partir de laquelle les sections efficaces macroscopiques sont reconstruites et ajoutées aux sections des assemblages

pour déterminer le Burn-Up final des assemblages, et donc les inventaires isotopiques, en fin d'irradiation, pour un REP et un CANDU avec combustible thorium-uranium. Le schéma de couplage pour un réacteur à eau pressurisée est montré dans la figure 1.14.

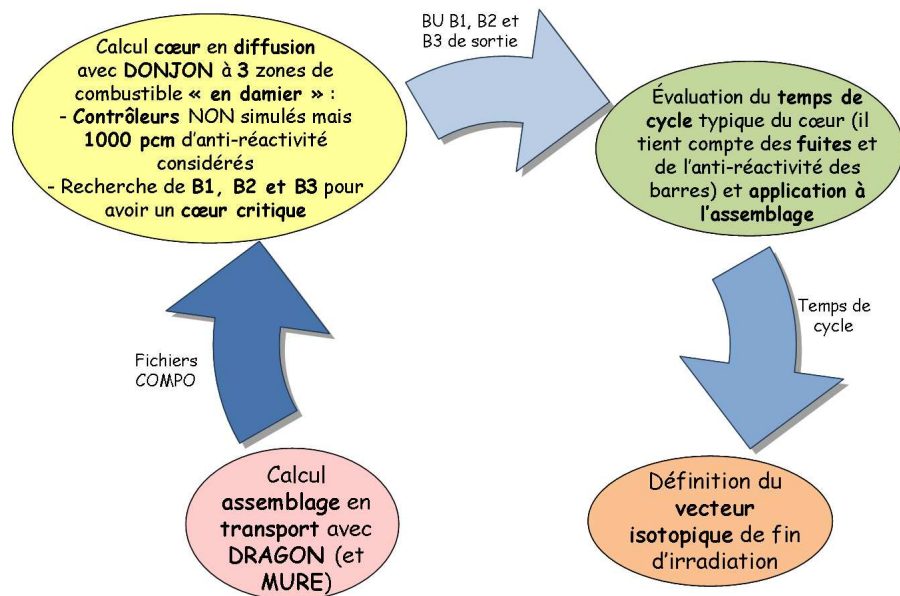


FIGURE 1.14 – Schéma de principe de l'équivalence cœur-cellule pour un REP avec couplage DRAGON-DONJON. Source image [Guillemin, 2009]

Après un calcul assemblage en transport réalisé avec le code DRAGON, un calcul de cœur en diffusion a été effectué, en considérant trois zones de combustible en damier. Grâce à ce dernier calcul, les Burn-Up finaux avant de chaque rechargement ($B1$, $B2$ et $B3$) sont estimés. Une évaluation du Burn-Up final du combustible peut ainsi être faite en tenant compte du niveau de fuites du cœur et de l'interaction entre les assemblages à différents niveaux d'irradiation. Une fois le temps total d'irradiation connu, le vecteur isotopique en fin de cycle est issu du calcul assemblage effectué pendant la première étape du schéma.

Dans la méthode classique du calcul cellule-cœur à deux niveaux, l'interaction entre les assemblages du cœur est totalement négligée. Dans [Bodin, 2010], des efforts ont été réalisés afin de créer des bibliothèques de sections efficaces tenant compte de l'environnement, nommées bibliothèques « environnées ». Pour ce faire, le couplage DRAGON-DONJON a été choisi. Contrairement au schéma classique, l'unité de base simulée dans la phase du calcul assemblage est constituée d'un ensemble d'assemblages de types UOx et MOx.

Des différences sont observées entre les bibliothèques classiques et celles environnées, comme une durée d'irradiation plus petite dans le cas environné. L'évolution de l'inventaire isotopique du MOx environné diffère à cause de l'entourage constitué d'UOx qui en modifie le spectre neutronique.

1.5 Plan du travail de thèse

La capacité à simuler correctement l'évolution du combustible dans un réacteur nucléaire est primordiale dans l'étude de scénarios nucléaires et énergétiques, nécessaires à l'évaluation de possibles mix énergétiques mondiaux.

Dans l'état actuel, la simulation d'un cœur entier du réacteur nucléaire est réalisée à travers un schéma à deux étapes : un calcul cellule en transport et un de calcul cœur en diffusion § 1.4.2. La simulation de type cellule est généralement effectuée à l'aide d'un code d'évolution déterministe, à partir duquel les sections efficaces homogénéisées et condensées, ainsi que certaines grandeurs dites de diffusion (coefficients de diffusion, section efficace du transport) sont calculées.

En considérant la grande précision des méthodes probabilistes de résolution de l'équation du transport (traitement de géométries complexes, sections efficaces continues en énergie), la possibilité de couplage entre un calcul cellule Monte Carlo et un calcul de cœur en diffusion peut être envisagée. Cependant, l'estimation des grandeurs de diffusion nécessaires au calcul de cœur nous a semblée délicate à partir des données du calcul probabiliste.

Nous présentons cette problématique dans le chapitre 2 et nous concluons que pour le moment un couplage probabiliste-déterministe n'est pas souhaitable. Nous nous sommes donc intéressés dans ce travail de thèse au modèle assemblage utilisé à l'IN2P3. Ce modèle assemblage, qui peut être assimilé au calcul cellule caractéristique de la première étape du calcul de cœur, est à la base des simulations de réacteurs pour les études de scénarios CLASS. Ce modèle, censé représenter les assemblages dans le cœur du réacteur, montre plusieurs approximations qui sont listées dans la première partie du chapitre suivant. Ces approximations peuvent induire des biais plus ou moins importants sur l'évolution de la matière isotopique du combustible. Dans la deuxième partie du chapitre 2, nous présentons la méthode de simulation que nous avons utilisée pour le calcul cellule : les codes Monte Carlo MCNP et Serpent, le code d'évolution SMURE et les options de simulation. Parmi toutes les approximations du calcul cellule, nous avons choisi d'étudier l'impact de la prise en compte des fuites neutroniques et d'estimer les biais induits sur les inventaires isotopiques en fin d'irradiation.

Dans le chapitre 3, nous montrons l'effet des fuites de neutrons selon la direction verticale de l'assemblage, grâce à la comparaison entre un assemblage entièrement réfléchi et un assemblage ouvert en direction axiale § 3.2.2. Afin de considérer une configuration d'assemblage plus réaliste, des simulations d'un assemblage avec modérateur et réflecteur aux extrémités axiales est aussi réalisée. L'impact de la prise en compte des fuites axiales est assez significatif : nous observons des écarts importants sur les inventaires totaux en fin d'irradiation pour l'assemblage ouvert comparé à la simulation infinie § 3.3.1.2. Une analyse des quantités isotopiques en fonction des zones axiales de l'assemblage ouvert nous montre des distributions non uniformes en fonction de la hauteur de la géométrie simulée § 3.3.3. L'effet de spectre induit par les fuites de neutrons est significatif. Une étude détaillée en début d'irradiation nous montre un durcissement du spectre neutronique dans les derniers centimètres de l'assemblage ouvert en direction axiale § 3.4. L'application de théorie de la diffusion nous permet de reconstruire le spectre neutronique observé § 3.4.3.2.

Dans la dernière partie du chapitre 3, nous analysons les effets de différents paramètres de simulation, comme la taille de l'assemblage ou la discrétisation spatiale utilisée § 3.5.1 et 3.5.2. Enfin, nous réalisons des comparaisons avec des modèles existants et implémentés dans le code Serpent qui modélisent les fuites de neutrons § 3.5.3.

Le chapitre 4 est dédié à l'analyse de l'impact du voisinage. Dans le calcul cellule, l'assemblage est simulé en conditions infinies, négligeant l'interaction avec des assemblages de composition différente. Nous avons donc choisi d'étudier la communication inter-assemblages en réalisant des simulations de configurations environnées de 3x3 assemblages § 4.2. Après une étude de l'impact de la simulation de l'épaisseur d'eau inter-assemblages § 4.3, nous avons estimé les écarts des inventaires isotopiques comparés à une simulation infinie, soit dans des configurations avec les assemblages voisins qui n'évoluent pas § 4.4.2, soit dans des configurations avec tous les assemblages évoluant § 4.4.3. Une comparaison entre un environnement hétérogène et un environnement homogène équivalent est aussi réalisée § 4.4.2.3. Afin de prendre en compte le rechargement partiel des assemblages pendant l'irradiation en cœur, nous avons réalisé des simulations avec changement de l'environnement en cours d'irradiation pour représenter une évolution réelle § 4.5.

Dans le chapitre 5, nous prenons en considération les assemblages qui se situent à la périphérie du cœur, en contact avec l'eau modératrice qui entoure le cœur. Les évolutions des inventaires isotopiques de ces assemblages périphériques pourraient être très différentes comparées à celles d'un assemblage au centre du cœur. Afin d'estimer ces écarts sur les quantités isotopiques, nous avons réalisé des simulations d'une configuration nommée « corner » qui reproduit les conditions d'irradiation des assemblages à la périphérie du cœur § 5.2. Une analyse neutronique en début d'irradiation nous permet de quantifier l'impact de la modération de l'eau qui entoure les assemblages périphériques § 5.3. Comme pour le chapitre précédent, les options d'évolution sont doubles : une évolution assemblage par assemblage et une évolution commune de tous les assemblages § 5.4. Les écarts des inventaires isotopiques estimés pour les assemblages périphériques sont importants. Afin de voir si le rechargement peut réduire ces effets, nous avons réalisé des simulations avec rechargement : déplacement de l'assemblage de l'intérieur à une position périphérique et vice-versa § 5.5.

Après avoir estimé et quantifié les biais associés aux approximations du modèle assemblage de la non prise en compte des fuites neutroniques, axiales et radiales, et du voisinage, nous avons réalisé dans le chapitre 6 une simulation d'une configuration plus réaliste, mais toujours très simplifiée : un quart de cœur d'un REP. Nous avons identifié un certain nombre de types d'assemblages, classés selon leur position dans la géométrie, pour lesquels nous avons estimé les écarts des inventaires isotopiques par rapport à une simulation infinie. L'idée est de voir si les comportements discernés dans les chapitres précédents sont toujours visibles dans une configuration de ce type ou si les écarts observés précédemment sont compensés de quelques manières dans une configuration cœur. La comparaison du modèle assemblage et de cette simulation plus réaliste nous permet d'estimer les biais d'un calcul cellule utilisé comme évolution représentative d'un cœur entier.

Outils théoriques et pratiques

Sommaire

2.1	Introduction	34
2.2	Couplage probabiliste-déterministe	34
2.2.1	Grandeurs de diffusion pour le calcul de cœur	35
2.2.1.1	Sections efficaces condensées en énergie	35
2.2.1.2	Sections efficaces homogénéisées en espace	35
2.2.1.3	Facteurs de discontinuité	37
2.2.1.4	Coefficients de diffusion	37
2.2.2	Les modèles de fuites	38
2.2.2.1	Le modèle de fuites <i>B1</i>	39
2.2.2.2	Implémentation et variantes de la méthode <i>B1</i>	40
2.2.2.3	Le modèle de fuites albédo différentiel	40
2.2.2.4	Application des modèles de fuites	41
2.3	Approximations du calcul cellule	42
2.3.1	Géométrie simplifiée	42
2.3.2	Moyens de contrôle	42
2.3.2.1	Grappes de contrôle	43
2.3.2.2	Acide borique dissout dans le modérateur	43
2.3.3	Plan de chargement	44
2.3.4	Discrétisation axiale	45
2.3.5	Fuites neutroniques	46
2.3.6	Autres approximations	46
2.4	Méthodes de calcul	46
2.4.1	MCNP & Serpent	47
2.4.1.1	Principe de fonctionnement de MCNP	47
2.4.1.2	Convergence des sources	49
2.4.1.3	L'entropie de Shannon	50
2.4.1.4	La convergence des sources vers une distribution non-physique	51
2.4.2	Le code d'évolution SMURE	52
2.4.2.1	Principe de fonctionnement	52
2.4.2.2	Option multigroupe	53
2.4.2.3	Discrétisation temporelle de l'évolution	54
2.4.2.4	Traitement du poison neutronique Xénon	56
2.4.2.5	Définition du Burn-Up d'un assemblage	60

2.4.2.6	Estimation du Burn-Up maximal atteignable	61
2.5	Conclusion	63

2.1 Introduction

Comme nous l'avons évoqué en conclusion du chapitre précédent, le couplage entre un calcul cellule en transport via la méthode Monte Carlo et un calcul de cœur en diffusion grâce à des codes déterministes pourrait être envisagé. La capacité des codes Monte Carlo à modéliser une géométrie, même complexe, ainsi que les interactions physiques sans approximations majeures pourrait devenir essentielle pour la simulation des nouveaux concepts de réacteurs. Le code Serpent, choix alternatif à MCNP pour le calcul en transport réalisé par SMURE, a été conçu pour la mise en œuvre de ce couplage.

Les bases théoriques de la simulation transport-diffusion avec méthode stochastique-déterministe sont présentées dans § 2.2. Nous abordons notamment les approximations à la base du calcul cellule et les méthodes pour déterminer les grandeurs caractéristiques nécessaires au calcul de cœur. En particulier, nous présentons les modèles de fuites de neutrons qui ont été implémentés dans Serpent et qui pourraient rendre effectif ce couplage probabiliste-déterministe.

Cependant, le calcul de ces grandeurs est délicat et certaines approximations du calcul cellule restent trop importantes pour envisager ce couplage § 2.3. Ce manuscrit se focalise sur une de ces approximations : les fuites neutroniques, dont nous cherchons à caractériser les biais sur l'évolution du combustible. Le dernier paragraphe du chapitre est dédié à la présentation des outils numériques utilisés pour nos simulations et des problématiques associées.

2.2 Couplage probabiliste-déterministe

Actuellement, les paramètres d'entrée des codes de cœur sont générés par des codes déterministes. À partir d'un calcul cellule en transport, plusieurs grandeurs sont calculées (sections efficaces macroscopiques de fission, de capture, de diffusion, ...) sur un nombre limité de groupes en énergie. Nous qualifions ces grandeurs *constantes de groupe*. La possibilité de substituer les codes déterministes par des codes Monte Carlo a été étudiée en détail par Leppänen dans [Leppänen, 2007], créateur d'un nouveau code stochastique expressément finalisé au calcul des paramètres d'entrée des codes de simulation de cœur afin de pouvoir réaliser le couplage : le code Serpent [Leppänen et al., 2014].

Dans la littérature, les études concernant la génération des constantes de groupe avec des méthodes Monte Carlo ne sont pourtant pas si nombreuses comme nous aurions pu le supposer [Gast, 1981], [Redmond, 1997], [Blomquist, 2000], [Tohjoh et al., 2005], [Gomin et al., 2008]. Des comparaisons entre les constantes de groupe calculées avec des méthodes Monte Carlo et les grandeurs issues de calculs cellules déterministes ont été réalisées par

[Leppänen, 2005], pouvant montrer un bon accord entre les deux méthodes.

Au cours des dernières années, des efforts ont été déployés pour coupler le code Serpent au code déterministe DYN3D, pour la modélisation du cœur d'un REP [Fridman et Leppänen, 2011] ou d'un SFR [Fridman et Schwageraus, 2013]. Cependant, la génération des grandeurs d'entrée des codes de cœur via l'approche stochastique est encore loin d'être une procédure de routine et fiable. La difficulté principale est le calcul du coefficient de diffusion des neutrons, qui n'a pas de grandeur équivalente dans le calcul Monte Carlo [Leppänen, 2007].

Dans la suite, nous présentons brièvement les constantes de groupes ainsi que les méthodes associées à leur calcul.

2.2.1 Grandeurs de diffusion pour le calcul de cœur

Afin de résoudre l'équation de la diffusion pour un cœur entier, des sections efficaces condensées en énergie et homogénéisées en espace sont nécessaires. La condensation représente une moyenne énergétique pondérée par le spectre neutronique, alors que l'homogénéisation représente, quant à elle, une moyenne spatiale pondérée par les probabilités de réaction des neutrons.

2.2.1.1 Sections efficaces condensées en énergie

L'opération de condensation en énergie des sections efficaces est celle décrite dans § 1.2.5.1. Le choix du nombre de groupes d'énergie est arbitraire, généralement les équations de la diffusion pour le cœur entier sont résolues à deux ou trois groupes en énergie ; ce nombre est limité par la taille mémoire nécessaire pour résoudre numériquement l'équation de la diffusion.

Si le calcul est de type déterministe, la condensation est réalisée à travers deux étapes :

1. un calcul cellule : simulation d'un crayon du combustible, entouré de sa gaine et de l'eau modératrice, en utilisant une librairie de sections efficaces finement discrétisées ; les sections efficaces sont ensuite condensées sur un certain nombre de groupes énergétiques ;
2. un calcul assemblage au sens propre (un assemblage comme introduit dans § 1.2.1.2) en utilisant les sections efficaces calculées à l'étape précédente ; cette fois-ci, la condensation des sections efficaces est réalisée sur un nombre limité de groupes en énergie afin d'estimer les grandeurs nécessaires au calcul de cœur ;

2.2.1.2 Sections efficaces homogénéisées en espace

L'homogénéisation des sections efficaces dans l'espace est une opération plus délicate que la condensation en énergie. À partir des sections efficaces calculées sur un maillage fin en espace, des grandeurs moyennes sur la géométrie simulée doivent être estimées : le maillage du calcul en diffusion est plus lâche que celui du calcul en transport (de l'ordre de quelques centimètres). Typiquement, dans un calcul de cœur chaque assemblage est vu

comme un matériau homogène, caractérisé par des constantes neutroniques homogénéisées lors de l'étape précédente [Marguet, 2011].

Pour assurer l'équivalence transport-diffusion, il faut conserver les taux de réaction dans le passage du calcul en transport au calcul en diffusion. Les sections efficaces homogénéisées $\Sigma_{\alpha g}^{hom}$ vérifient l'expression 2.1 pour chaque assemblage de volume V_t [Cho, 2005].

$$\int_{V_t} \Sigma_{\alpha g}^{hom} \Phi_g^{hom}(\vec{r}) d\vec{r} = \sum_i \int_{V_i} \Sigma_{\alpha g}^{hét} \Phi_g^{hét}(\vec{r}) d\vec{r} \quad (2.1)$$

où α indique le type de réaction et g le groupe en énergie. V_t représente le volume total de la configuration simulée (dans notre cas, un assemblage) et V_i est le volume pour chacun des matériaux qui constituent l'assemblage (combustible, gaine, caloporteur,...). La section efficace d'une réaction α donnée pour le groupe énergétique g est donc définie par l'expression 2.2.

$$\Sigma_{\alpha g}^{hom} = \frac{\sum_i \int_{V_i} \Sigma_{\alpha g}^{hét} \Phi_g^{hét}(\vec{r}) d\vec{r}}{\int_{V_t} \Phi_g^{hom}(\vec{r}) d\vec{r}} \quad (2.2)$$

Les expressions 2.1 et 2.2 ne peuvent pas être utilisées dans cette forme, en effet, deux problèmes se posent. Premièrement, dans ces équations, $\Phi_g^{hét}(\vec{r})$ représente le flux issu d'un calcul hétérogène dans des conditions réelles, c'est-à-dire le résultat d'une simulation de cœur en transport. Puisque cette grandeur n'est pas disponible, elle est généralement approximée par $\Phi_{Ag}(\vec{r})$: le flux neutronique issu d'un calcul assemblage dans des conditions de réflexion. Deuxièmement, le flux $\Phi_g^{hom}(\vec{r})$ est la solution que nous recherchons. Pour cette raison, le flux de diffusion est aussi approximé par le flux du calcul cellule.

La méthode généralisée par [Smith, 1985] est donc utilisée : à partir de l'équivalence 2.3, les sections efficaces homogénéisées sont calculées grâce à l'expression 2.4.

$$\int_{V_i} \Phi_g^{hom}(\vec{r}) d\vec{r} = \int_{V_i} \Phi_g^{hét}(\vec{r}) d\vec{r} = \int_{V_i} \Phi_{Ag}(\vec{r}) d\vec{r} \quad (2.3)$$

$$\Sigma_{\alpha g}^{hom} = \frac{\sum_i \int_{V_i} \Sigma_{\alpha g}^{hét} \Phi_{Ag}(\vec{r}) d\vec{r}}{\int_{V_t} \Phi_{Ag}(\vec{r}) d\vec{r}} \quad (2.4)$$

En pratique, nous calculons les flux multigroupes en transport (Φ_{Ag}^i) sur l'ensemble des volumes représentant un matériau donné. L'intégrale $\int_{V_i} \Phi_g^{hét}(\vec{r}) d\vec{r}$ est estimée comme le produit du flux Φ_{Ag}^i par le volume V_i . Les sections efficaces homogènes sont donc calculées grâce à l'équation 2.5.

$$\Sigma_{\alpha g}^{hom} = \frac{\sum_i V_i \Phi_{Ag}^i \Sigma_{\alpha g}^{hét}}{\sum_i \Phi_{Ag}^i V_i} \quad (2.5)$$

Les sections efficaces homogénéisées ainsi calculées sont issues d'une simulation d'un assemblage isolé, ce qui ne représente pas les conditions réalistes d'irradiation d'un assemblage dans le cœur. Les fuites neutroniques, comme la présence d'autres assemblages voisins non identiques ne sont pas prises en compte. Des efforts sont toujours réalisés afin

d'améliorer le processus d'homogénéisation [Koebke et Hetzeltz, 1985], [Hébert et Benoist, 1991], [Ma et al., 2015], [Calic et Trkov, 2016] qui reste un sujet de recherche important aujourd'hui.

2.2.1.3 Facteurs de discontinuité

Le flux issu d'une homogénéisation qui conserve les taux de réaction par maille n'est pas forcément continu aux interfaces entre les mailles, ce qui illustre une mauvaise modélisation puisque le flux neutronique est évidemment une grandeur continue. Afin d'améliorer la qualité des calculs en diffusion, des facteurs de discontinuité sont introduits [Koebke, 1981] et permettent d'inclure dans la résolution de la diffusion des informations qui proviennent du calcul hétérogène en transport.

Le facteur de discontinuité à la surface u pour le groupe énergétique g est défini comme le rapport entre le flux hétérogène en transport et le flux homogène de diffusion intégrés à la surface u .

$$f_g^u = \frac{\Phi_g^{u,hét}}{\Phi_g^{u,hom}} \quad (2.6)$$

Dans l'expression 2.6, le flux hétérogène est substitué par le flux du calcul cellule, Φ_{Ag} . Les facteurs de discontinuité sont utilisés par les solveurs de l'équation de la diffusion pour prendre en compte l'effet du voisinage (*leakage assembly environmental effect*) : les taux de réactions sont modifiés ainsi que les fuites de neutrons inter-assemblages. Dans le code Serpent, le calcul des facteurs de discontinuité dépendant de la direction a été récemment implémenté [Dorval, 2016a].

2.2.1.4 Coefficients de diffusion

En reprenant l'expression 1.22, nous pouvons définir le coefficient de diffusion homogénéisé pour la surface S^k du volume V_t de l'assemblage du combustible pour le groupe énergétique g comme :

$$D_g^{hom} = \frac{- \int_{S^k} \vec{J}_g^{hét}(\vec{r}) \cdot d\vec{S}}{\int_{S^k} \nabla \Phi_g^{hom}(\vec{r}) \cdot d\vec{S}} \quad (2.7)$$

où $\vec{J}_g^{hét}$ est le courant hétérogène traversant la surface S^k . Puisque l'intégrale de ce dernier au numérateur de l'expression 2.7 n'est pas connue, le coefficient de diffusion est calculé selon l'équation 2.8, obtenue grâce à la transformation des intégrales surfaciques en intégrales volumiques et avec l'application de la loi de Fick.

$$D_g^{hom} = \frac{\int_{V_t} D_g^{hét}(\vec{r}) \Phi_{Ag}(\vec{r}) d\vec{r}}{\int_{V_t} \Phi_{Ag}(\vec{r}) d\vec{r}} \quad (2.8)$$

Mais l'utilisation du flux issu du calcul cellule, où l'assemblage présente des conditions de réflexion sur toutes les parois, ne permet pas de prendre en compte les fuites neutro-

niques. Afin de modéliser l'effet de spectre dû aux fuites de neutrons, des modèles ont été conçus et implémentés dans les codes de simulation.

Nous avons testé l'ensemble des calculs de ces constantes de groupes avec le code MCNP et le code Serpent. Les résultats sont présentés dans § 2.5 et montrent que les calculs de sections homogènes de diffusion multigroupe (ainsi que les calculs de coefficients de diffusions associés) peuvent être parfois délicats.

2.2.2 Les modèles de fuites

Comme nous avons vu dans le chapitre précédent, le calcul cellule est réalisé sur une géométrie constituée d'un assemblage avec des conditions de réflexion sur toutes les parois : les neutrons ne fuient pas du domaine simulé. Ces conditions sont définies comme infinies et dans ce manuscrit nous faisons référence à cette géométrie simulée comme au modèle assemblage ou modèle infini.

Cette simulation du modèle assemblage est supposée stationnaire, mais en général elle n'est pas critique. Pour trouver la solution qui donne un bilan exact entre la source de fission et les neutrons perdus par absorption et fuites, le coefficient k_{eff} est introduit dans l'équation du transport stationnaire pour ajuster cet équilibre, comme montré dans l'équation 2.9, où f est la fonction de transfert déjà introduite en § 1.2.3.2. Cette équation modélise un réacteur nommé « réacteur critique associé » qui devrait représenter le système réel. Elle permet d'équilibrer la production des neutrons par fission pour que l'équation du transport soit stationnaire.

$$div(\vec{\Omega}\Phi) + \Sigma_{tot}\Phi = \int_{\vec{\Omega}', E'} \Phi' \Sigma' f d\vec{\Omega}' dE' + \frac{1}{k_{eff}} \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty \chi(E) \nu \Sigma_f \Phi dE \quad (2.9)$$

Il s'agit d'une équation aux valeurs propres, où k_{eff} est la plus petite valeur propre qui satisfait la condition de criticité (soit l'état stationnaire de la population des neutrons). La solution de ce problème aux valeurs propres et celle du problème physique réel ne sont pas équivalentes, sauf dans des cas particuliers dans lesquels le système est critique et la valeur du k_{eff} est exactement 1.

Puisque le flux neutronique utilisé dans l'homogénéisation des sections efficaces est le flux solution de l'équation 2.9, un biais est automatiquement engendré sur les valeurs des constantes de groupe à l'entrée des codes de cœur. La modélisation d'une géométrie sous ou sur-critique comme un système stationnaire introduit des distorsions dans la dépendance spatiale et énergétique du flux [Leppänen, 2007]. Pour cette raison, des modèles sont utilisés pour ajouter des fuites artificielles au système cellule (appelés modèles de fuites). L'astuce adoptée par plusieurs codes consiste dans l'interprétation des fuites comme une production ou une absorption homogène de neutrons. Modéliser les fuites signifie donc reporter le système simulé à une condition de criticité, afin de prendre en compte les modifications du spectre associées aux fuites neutroniques. C'est pour cette raisons que les modèles de fuites sont aussi appelés trop souvent *correction de criticité*.

Nous présentons dans ce paragraphe les grands principes de deux modèles qui concentrent aujourd'hui la majorité des efforts de recherche. Ce travail de thèse n'est pas dédié à l'étude de ses modèles ; par conséquent, nous nous limitons à n'évoquer que les grandes étapes qui définissent les algorithmes à la base de ces modèles afin de comprendre leurs limites d'utilisation.

2.2.2.1 Le modèle de fuites $B1$

Le modèle de fuites le plus simple est appelé modèle $B1$ homogène [Duderstadt et Hamilton, 1976], dans lequel les fuites neutroniques sont ajustées pour reproduire un réacteur dans des conditions stationnaires (valeur de $k_{eff} = 1$). Le coefficient de buckling B^2 est introduit pour ajuster la courbure du flux neutronique dans le réacteur, afin d'atteindre la criticité. Ce modèle est appelé $B1$ parce qu'on ne cherche qu'à corriger la solution fondamentale de l'équation 2.9 (correction du premier ordre).

Dans une géométrie infinie périodique (calcul cellule), la solution de l'équation du transport peut se décomposer en une composante spatiale (caractéristique du coeur) multipliée par une composante intégrant les autres variables (caractéristique de l'assemblage) :

$$\Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \psi(\vec{r}) \phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \quad (2.10)$$

où $\psi(\vec{r})$ est la solution d'un problème aux valeurs propres en diffusion dans le domaine homogénéisé et $\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$ est le vecteur propre de l'équation du transport dans le modèle assemblage, aussi appelé flux fondamental. L'équation 2.10 représente donc le produit entre une grandeur macroscopique (issue du calcul de diffusion) et un flux périodique (issu du calcul en transport sur le réseau infini).

Un système critique satisfait l'équation 2.11 :

$$\nabla^2 \psi(\vec{r}) + B^2 \psi(\vec{r}) = 0 \quad (2.11)$$

où B est appelé *buckling* et représente la valeur propre du système. $B1$ est la première valeur propre de l'équation de diffusion. Le flux macroscopique peut donc être écrit de façon exponentielle, selon l'expression 2.12, ce qui amène à une réécriture de l'équation 2.10 comme 2.13.

$$\psi(\vec{r}) = \psi_0 e^{i\vec{B} \cdot \vec{r}} \quad (2.12)$$

$$\Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) e^{i\vec{B} \cdot \vec{r}} \quad (2.13)$$

En faisant l'hypothèse que les effets hétérogènes sur le taux de fuites soient négligeables pour les réacteurs à neutrons thermiques, nous pouvons remplacer le flux fondamental par sa grandeur homogénéisée sur l'assemblage [Petrovic et Benoist, 1996]: la dépendance de ϕ de l'espace est donc oubliée (équation 2.14).

$$\Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \phi(E, \vec{\Omega}) e^{i\vec{B} \cdot \vec{r}} \quad (2.14)$$

En substituant cette nouvelle expression du flux dans l'équation du transport 2.9, deux équations appelées équations $B1$ peuvent être écrites. Elles relient le courant neutronique de fuite au flux de neutrons. Suite à une discrétisation multigroupe, le taux de fuite pour le groupe énergétique g est noté L_g et calculé grâce à l'expression 2.15 :

$$L_g = d_g B^2 \phi_g \quad (2.15)$$

où d_g est le coefficient de diffusion pour le groupe g , ϕ_g est le flux en transport pour le groupe g et B^2 est la valeur propre à itérer jusqu'à ce que la condition de criticité soit atteinte (c'est-à-dire $k_{eff} = 1$). Le flux fondamental résultant de cette itération est utilisé pour l'homogénéisation des sections efficaces.

Le spectre critique est donc obtenu par la recherche du buckling $B1$ basé sur un spectre multigroupe, asymptotique et homogénéisé dans le milieu (avec l'assomption de la séparabilité des variables énergie-espace).

2.2.2.2 Implémentation et variantes de la méthode $B1$

La méthode $B1$ a été implémentée dans des codes stochastiques pour la génération des constantes neutroniques § 2.2.1 comme McCARD [Shim et al., 2012] et Serpent [Leppänen, 2007], dans lequel une section efficace additionnelle est introduite pour prendre en compte les fuites neutroniques.

Une adaptation spécifique pour le code Monte Carlo a été développée par [Martin et Hébert, 2011]. Dans cette approche, les équations $B1$ sont résolues à chaque cycle et le B^2 critique ainsi que les taux de fuites sont introduits dans le parcours aléatoire de MCNP [Martin, 2011] : une réaction additionnelle, de fuite fictive ou de source selon le signe de B^2 , est ajoutée dans chaque groupe g . La section efficace totale Σ_g est donc modifiée par un terme de production ou d'absorption ($\Sigma_g^* = \Sigma_g + d_g B^2$).

À cause de l'approximation exponentielle du flux de l'équation 2.14, des termes imaginaires apparaissent dans l'équation du transport. Si la fission et la diffusion sont isotropes, ces termes peuvent être négligés dans le calcul des poids Monte Carlo du neutron [Yamamoto, 2012a]. Mais quand l'approximation de la diffusion perd sa validité à cause de l'anisotropie du flux neutronique, des coefficients de diffusion « anisotropes » doivent être calculés [Yamamoto, 2012b], [Doval et Leppänen, 2015].

Parmi les autres modèles de fuites développés [Gelbard et Lell, 1977], [Maierov, 1985], on trouve aussi celui de l'albédo différentiel, présenté dans le paragraphe suivant.

2.2.2.3 Le modèle de fuites albédo différentiel

Cette méthode de modélisation des fuites neutroniques est basée sur le traitement du terme de fuites dans l'équation du transport comme une valeur propre et sur la transformation de cette équation dans un problème aux conditions aux limites d'albédo [Yun et

Cho, 2010].

À partir de l'équation 2.9, l'albédo est défini selon l'expression 2.16.

$$\alpha = \frac{\psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E)}{\psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)}, \quad \vec{n} \cdot \vec{\Omega}' = -\vec{n} \cdot \vec{\Omega} < 0, \vec{r} \in \Gamma \quad (2.16)$$

où Γ est la surface aux limites considérée et J^+ est le courant neutronique la traversant. Le terme de fuites de l'équation du transport peut être exprimé en fonction de α , comme dans l'équation 2.17.

$$\int_V \int_{4\pi} \text{div}(\vec{\Omega}\Phi) d\vec{\Omega} dV = (1 - \alpha) \int_{\Gamma} J^+(\vec{r}, E) d\Gamma \quad (2.17)$$

Le problème qui était initialement exprimé en fonction du k_{eff} est transformé dans un problème à la valeur propre $(1 - \alpha)$. La valeur de α est liée à la direction des fuites : si $0 \leq \alpha < 1$, les neutrons fuient vers l'extérieur de la géométrie, si $\alpha > 1$, la contribution est au contraire positive. Dans le cas $\alpha = 1$, l'assemblage infini simulé est déjà critique et le terme de correction à appliquer pour prendre en compte les fuites est donc nul.

Comme pour le coefficient B^2 dans la méthode présentée précédemment, le coefficient α est itéré selon l'expression 2.18 jusqu'à rejoindre une condition critique.

$$\alpha_{i+1} = \alpha_i - \frac{k_{eff,i} (\alpha_{i-1} - \alpha_i)}{k_{eff,i-1} - k_{eff,i}} \quad (2.18)$$

2.2.2.4 Application des modèles de fuites

Les modèles de fuites sont utilisés pour prendre en compte l'effet de spectre dû aux fuites neutroniques, au niveau de la simulation assemblage infini. Ils se basent sur une recherche d'une condition de criticité afin d'estimer le flux critique le plus proche au flux réel dans les assemblages du cœur.

Les méthodes principalement adoptées présentent une recherche itérative d'un coefficient ($B1$ ou α) qui permet d'avoir une valeur de k_{eff} unitaire exactement.

Une fois le flux critique calculé, ce dernier est utilisé pour la construction des constantes de groupe nécessaires au calcul de cœur. Parmi ces grandeurs, les coefficients de diffusion, dont la dépendance selon la direction doit être considérée.

Des études finalisées à une amélioration de ces modèles, ainsi que de la recherche de nouveaux modèles de fuites sont un sujet d'actualité. Par exemple, [Dorval, 2016b] propose une nouvelle méthode pour simuler les fuites neutroniques et l'interaction avec les assemblages voisins, basée sur ce qu'il nomme les *colorsets*. Cette approche consiste à simuler un assemblage environné par un certain nombre de « couches » d'assemblages de types différents qui constituent un système presque critique. Les sections efficaces sont calculées seulement dans l'assemblage central, mais elles tiennent compte de l'histoire du neutron qui peut sortir de l'assemblage d'étude et interagir avec les assemblages avoisinants.

Puisque l'implémentation de ces modèles dans les codes Monte Carlo est récente et encore en cours de développement et validation, et puisque le couplage probabiliste-déterministe n'a pas encore abouti à une méthode fiable, nous avons choisi de travailler sur le modèle à la base du schéma à deux étapes § 1.4.2 : le calcul cellule, et sur ses approximations. Dans le paragraphe suivant, nous décrivons le modèle assemblage, avec les approximations qui rendent toujours complexe l'équivalence cellule-cœur. Enfin dans le paragraphe 2.4, nous présentons la méthode de simulation utilisée pour ce travail.

2.3 Approximations du calcul cellule

Rappelons la distinction entre le calcul cellule et le modèle assemblage. Le calcul cellule est la première étape du schéma à deux niveaux du calcul de cœur et il est caractérisé par plusieurs simulations d'évolution tabulées selon certains paramètres (concentration en bore, Burn-Up,...) d'une unité de base. Quand cette unité de base est constituée d'un seul assemblage en conditions infinies, elle est appelée modèle assemblage. Puisque à l'IN2P3 le calcul cellule pour modéliser les réacteurs nucléaires correspond à une seule évolution d'un assemblage en conditions infinies, dans ce manuscrit la notion de modèle assemblage est utilisée de manière équivalente au terme calcul assemblage.

Le modèle assemblage, censé représenter un assemblage dans des conditions d'irradiation réelles comme celles d'un cœur du réacteur, présente plusieurs approximations et certains aspects, géométriques comme neutroniques, sont négligés. Dans ce paragraphe, nous passons en revues les approximations principales de ce modèle, en mettant en évidence celles sur lesquelles nous avons réalisé notre étude.

2.3.1 Géométrie simplifiée

Toute la complexité structurale du cœur n'est pas prise en compte dans la modélisation d'un assemblage isolé. Les grilles qui permettent la tenue mécanique des assemblages, comme les supports à la base même des assemblages et les matériaux dits « structuraux » qui s'activent sous irradiation ne sont pas simulés dans le modèle assemblage infini.

Généralement, cette approximation n'est pas prise en considération et nous n'avons pas trouvé dans la littérature des études précises sur ce sujet. Nous sommes dans l'incapacité de quantifier correctement l'impact neutronique de ces matériaux et nous le négligeons donc dans la suite.

2.3.2 Moyens de contrôle

Dans le calcul cellule réalisé à l'IN2P3, les moyens de contrôle présents dans un cœur sont représentés de manière grossière quand ils ne sont pas simplement oubliés. Focalisons nous sur les barres de contrôle et le bore solubilisé dans le modérateur pour le pilotage du réacteur ainsi que le contrôle de la réactivité.

2.3.2.1 Grappes de contrôle

Dans le réseau de 17x17 crayons, 25 places sont utilisées pour l'insertion des grappes de contrôle¹. Dans le modèle assemblage, elle sont représentées par des tubes guides remplis d'eau (en vert dans la figure 2.1), dont le rayon est légèrement plus grand que celui du crayon de combustible.

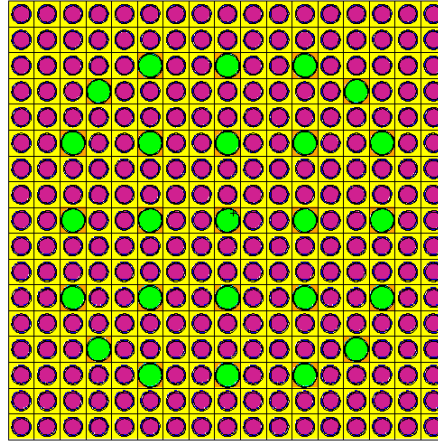


FIGURE 2.1 – Représentation d'un assemblage isolé

Des études concernant l'impact de barres de contrôle pendant une partie de l'irradiation par rapport à une simulation sans barres montrent une différence de quelques centaines de *pcm* sur la valeur du k_{eff} à la décharge du combustible [Sanders et Wagner, 2002].

2.3.2.2 Acide borique dissout dans le modérateur

Dans notre calcul cellule, la concentration de l'acide borique dissout dans le modérateur est gardée constante pendant toute l'évolution du combustible. En réalité, afin de maintenir la réactivité du cœur toujours au même niveau, la concentration de bore varie d'une quantité maximale en début de cycle (entre 1400 et 1200 *ppm*) à zéro pendant chaque cycle d'irradiation du combustible. Nous définissons le cycle d'irradiation comme la période que le combustible passe dans le cœur, à une certaine position avant le rechargement partiel et son déplacement. Des études de comparaison entre une quantité de bore constante ou variable ont été réalisées, comme [Wagner, 2013].

Le bore a un impact important sur le spectre neutronique : il absorbe fortement les neutrons thermiques, modifiant ainsi le spectre. Comme nous le montrons dans ce travail, les effets de spectre modifient l'évolution isotopique du combustible. Ainsi, nous pouvons supposer que la quantité de bore prise en compte lors de la simulation de l'évolution impacte fortement les quantités en fin de cycle. Par exemple, l'évolution du ^{239}Pu en fonction du temps dans un assemblage infini avec une concentration en bore de 100 *ppm* diffère de celle réalisée avec une concentration de 1200 *ppm*. La figure 2.2 présente l'évolution de

1. 24 places sont occupées par les barres de contrôle et la position centrale est réservée au tube d'instrumentation. Puisque leur modélisation est identique, dans la suite nous ne discernons plus le tube d'instrumentation des tubes guides

cet isotope pour 6 concentrations de bore différentes. Même entre deux concentrations qui s'écartent de 100 *ppm* uniquement, comme les courbes noire et rouge, la différence de la quantité de ^{239}Pu en fin d'irradiation est importante.

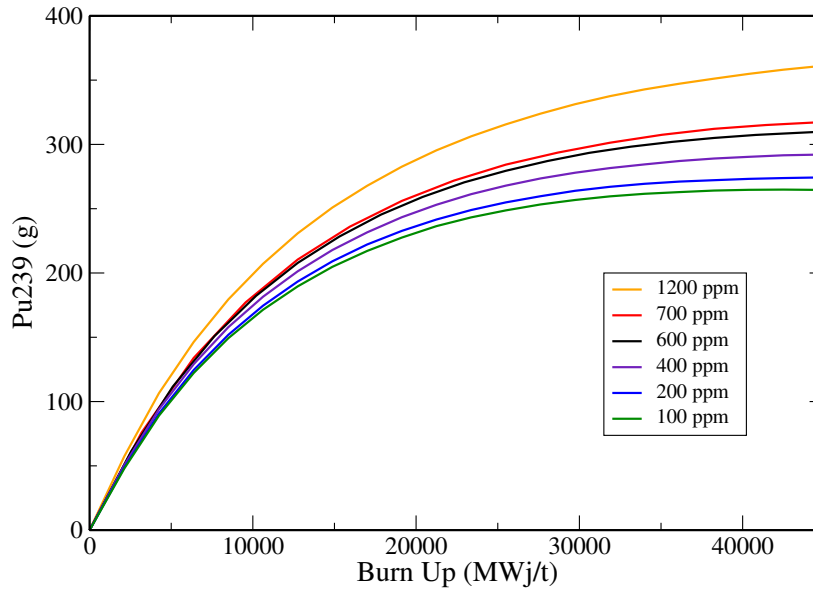


FIGURE 2.2 – Évolution du ^{239}Pu en fonction du Burn-Up pour six valeurs de concentration de bore : 100, 200, 400, 600, 700 et 1200 *ppm*

Dans l'étude réalisée par [Kepitsy et al., 2016], l'estimation de l'erreur sur la quantité d' ^{235}U en fin d'irradiation est supérieure à 10% si aucun contrôle de réactivité n'est modélisé dans le calcul cellule.

Le choix des valeurs de concentration de bore à fixer pour réaliser les calculs cellules de base afin d'obtenir les grandeurs d'entrée des codes de cœur est donc une question non triviale. Au niveau des seuls calculs infinis comme ceux réalisés à l'IN2P3, plusieurs études ont été effectuées pour comprendre l'impact du bore sur l'évolution des inventaires isotopiques et pour définir des nouvelles stratégies de simulation de ce paramètre dans les calculs cellules [Michel-Sendis, 2006], [Nithesh, 2016]. Pour l'instant, la question est encore ouverte et les simulations d'un assemblage infini sont faites à concentration de bore constante.

2.3.3 Plan de chargement

La gestion d'un cœur du réacteur est réalisée par rechargements partiels : le temps total d'irradiation du combustible est divisé en plusieurs cycles (généralement 3 ou 4). Pendant la durée de chaque cycle, le combustible se trouve dans une position préétablie et il est déplacé dans une autre position au cycle suivant, comme illustré dans la figure 2.3. Ce procédé permet de prolonger le temps maximum de résidence de l'assemblage en cœur.

Ce changement de position et d'environnement n'est pas simulé dans le calcul cellule : l'assemblage est isolé et le spectre neutronique est toujours celui d'une configuration infinie. Cependant, la présence d'assemblages plus ou moins irradiés à côté d'un assemblage donné

affecte le spectre de neutrons de ce dernier et en conséquence son évolution isotopique.

Des nouvelles méthodes ont été récemment développées pour prendre en considération l'environnement d'un assemblage d'étude pour la génération des grandeurs neutroniques pour le calcul de cœur [Dorval, 2016b]. Cependant, le traitement de l'environnement n'est pas une tâche simple.

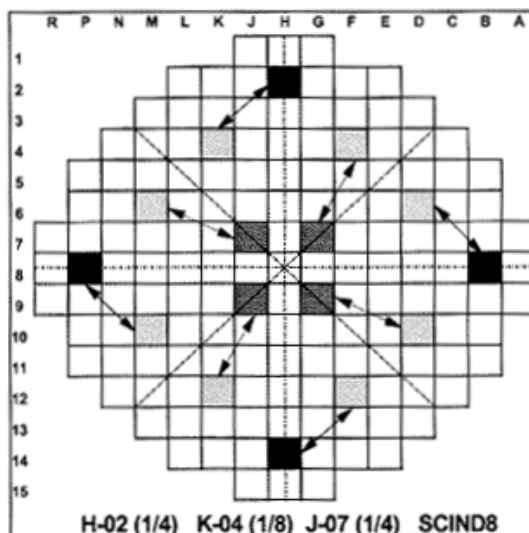


FIGURE 2.3 – Illustration du déplacement des assemblages dans le cœur selon les 3 cycles d'irradiation pour un REP900. Source image [Kerkar et Paulin, 2008]

Dans ce travail, nous étudions l'effet de l'environnement au cours des chapitres 4 et 5. Le premier est dédié à l'analyse d'un assemblage entouré par d'autres à différents niveaux d'irradiation, alors que le deuxième étudie un assemblage qui se trouve à la périphérie du cœur. Parmi les évolutions que nous avons réalisées, certaines simulent le déplacement d'un assemblage au cours de l'irradiation.

2.3.4 Discrétisation axiale

La discrétisation axiale de la géométrie simulée est un des paramètres les plus importants pour un calcul d'évolution correct, comme montré par Kepisty [Kepitsy et al., 2016]. À la suite de cette thèse, nous concluons qu'une division axiale en minimum 20 zones est souhaitée pour un assemblage complet de type REP. Des études précédentes proposent une discrétisation pour ce même type d'assemblage en 18 ou 24 zones uniformes [Wagner et DeHart, 2000] ou en 7 zones, de tailles différentes [DeHart, 1996].

D'après [Somaini, 2016], les erreurs estimées entre une simulation d'assemblage ouvert aux extrémités axiales à une seule zone et une simulation de la même configuration à 18 zones atteignent, en fin d'irradiation, une valeur de 8% pour l'isotope ^{235}U . Cet écart est confirmé par d'autres études, telles que [Kepitsy et al., 2016] où un écart de 7.5% pour l'isotope ^{235}U entre une et 20 zones est estimé.

En effet, la discrétisation axiale permet de prendre en compte la différence des taux

de combustion dans chacune des zones de l'assemblage. La non uniformité des taux de combustion de chaque zone, appelés Burn-Up locaux § 3.3.4, est due à un profil axial du flux neutronique qui varie fortement selon z . Une analyse détaillée de tous ces aspects est donnée dans le chapitre 3.

2.3.5 Fuites neutroniques

Comme déjà présenté dans § 2.2.2, négliger les fuites de neutrons est une approximation du modèle assemblage utilisée pour le calcul cellule. La prise en compte des fuites neutroniques est donc fondamentale pour une estimation correcte des inventaires isotopiques en fin d'irradiation.

Nous traitons cette problématique dans le chapitre 3, où nous comparons une évolution infinie à une évolution avec des fuites neutroniques axiales. Nous n'utilisons aucun modèle de fuites neutroniques, mais nous réalisons en fin de ce chapitre une comparaison avec nos simulations et l'application des deux modèles principaux $B1$ et albédo, décrits respectivement dans § 2.2.2.1 et § 2.2.2.3.

2.3.6 Autres approximations

D'autres paramètres à considérer dans la modélisation du calcul cellule en Monte Carlo peuvent apporter des biais de simulation comme, par exemple, la discrétisation temporelle de l'évolution, la discrétisation radiale du combustible, la précision du calcul Monte Carlo ou la modélisation d'un espace gazeux entre la gaine et le combustible.

Ces trois derniers paramètres ne sont pas très significatifs car apportant des biais inférieurs à 1% sur les inventaires d' ^{235}U et du ^{239}Pu en fin d'irradiation selon [Kepitsy et al., 2016]. La discrétisation temporelle, au contraire, peut apporter des biais significatifs. Une analyse plus approfondie de cette problématique est donnée dans § 2.4.2.3.

De plus, la précision du code Monte Carlo est un facteur très important pour une estimation correcte des quantités isotopiques en fin de cycle. Pour cette raison, la recherche des paramètres optimaux pour avoir une bonne précision a toujours été réalisée avant d'effectuer nos simulations.

2.4 Méthodes de calcul

Dans la première partie de ce chapitre, nous avons traité la possibilité d'un couplage probabiliste-déterministe, avec la définition des grandeurs nécessaires au calcul de cœur et les difficultés associées pour les déterminer avec un calcul stochastique. En particulier, nous nous sommes intéressés à la modélisation des fuites neutroniques, qui constitue un des aspects principaux de ce travail de thèse. Dans la deuxième partie, nous avons présenté les approximations du calcul cellule utilisé pour simuler les assemblages du cœur à l'IN2P3.

Cette dernière partie du chapitre est dédiée à la présentation et la caractérisation des méthodes de calcul que nous avons utilisées dans ce travail.

2.4.1 MCNP & Serpent

Nous avons fait le choix d'utiliser deux codes Monte Carlo : MCNP et Serpent. L'utilisation de MCNP est justifiée en tant que code de référence pour lequel le groupe PACS possède une certaine expertise. Serpent quant à lui a été utilisé parce que c'est un code nouveau, dédié aux calculs de criticité, et qui a été développé dans l'optique d'un couplage avec des codes de cœur déterministes. Nous avons principalement utilisé MCNP pour nos analyses et Serpent a été utilisé comme complément, notamment pour l'utilisation des méthodes de fuites qui y sont implémentées. Les principes de fonctionnement sont similaires entre les deux codes. Nous avons donc choisi de décrire uniquement le code MCNP.

2.4.1.1 Principe de fonctionnement de MCNP

MCNP simule, une à une, les histoires de tous les neutrons sources, dont le nombre est établi par l'utilisateur, de leur naissance à leur disparition, qui peut être par absorption neutronique ou par fuite du domaine simulé. Pour chaque neutron, MCNP calcul en succession la distance d'interaction, le noyau avec lequel il interagit et le type de réaction, de façon répétée jusqu'au moment où le neutron disparaît. Une représentation du principe de fonctionnement du code est donnée dans la figure 2.4.

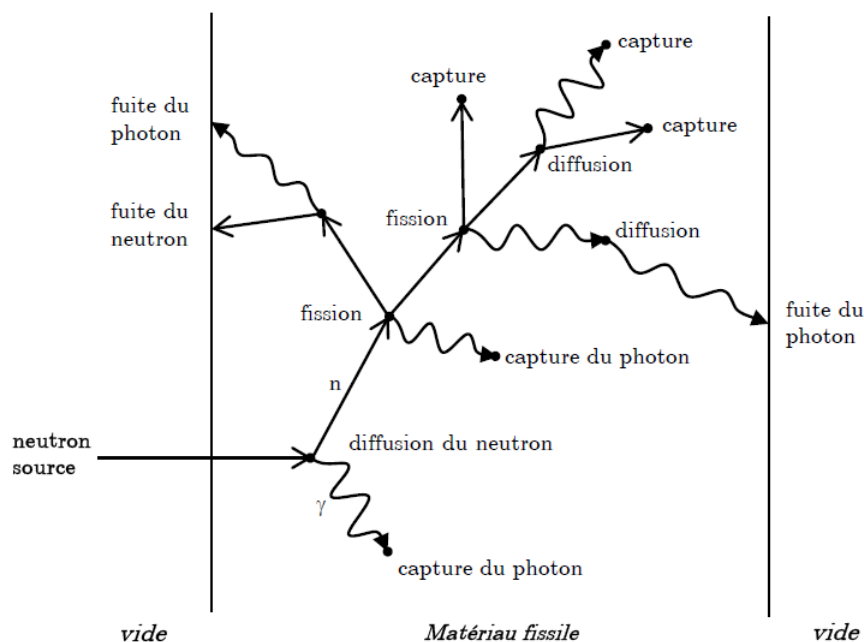


FIGURE 2.4 – Représentation schématique du fonctionnement de MCNP. Source image [Nifenecker et al., 2003]

Dans un système critique, l'histoire d'un neutron est infinie (par définition de la criticité). Pour contourner cette difficulté, MCNP stoppe l'histoire des neutrons à chaque fission et enregistre la position de la fission. Une fois que toutes les histoires sont simulées, MCNP relance une autre série d'histoires à partir des positions enregistrées au processus

précédent. Ces paquets d'histoires sont appelés cycles. La simulation des neutrons est donc composée d'un certain nombre de cycles de neutrons qui est fixé par l'utilisateur, indiqué comme N_{cycles} . Pour chaque cycle, l'histoire de N_{source} neutrons est simulée.

Dans un premier temps, le libre parcours moyen λ du neutron est calculé comme l'inverse de la section efficace macroscopique totale selon l'expression 2.19.

$$\lambda = \frac{1}{\Sigma_{tot}} \quad (2.19)$$

La probabilité d'interaction d'un neutron entre l et $l+dl$ est donnée par l'équation 2.20.

$$p(l)dl = e^{-\Sigma_{tot}(E)l} \Sigma_{tot}(E) dl \quad (2.20)$$

Pour déterminer la distance l parcourue avant l'interaction du neutron, MCNP effectue un tirage aléatoire d'un nombre R uniformément distribué dans l'intervalle $[0, 1[$, tel que :

$$R = \int_0^l p(l)dl = 1 - e^{-\Sigma_{tot}(R)l} \quad (2.21)$$

La distance l parcourue par le neutron est donc de :

$$l = -\lambda \ln(1 - R) \quad (2.22)$$

Successivement, MCNP détermine avec quel noyau k le neutron interagit. Ce noyau, qui a une section efficace macroscopique totale indiquée comme $\Sigma_{tot,k}$, vérifie la condition 2.23 à partir d'un autre tirage aléatoire R' .

$$\sum_{k=0}^{i-1} \Sigma_{tot,k} < R' \sum_{k=0}^N \Sigma_{tot,k} < \sum_{k=0}^i \Sigma_{tot,k} \quad (2.23)$$

où N est le nombre total de noyaux présents dans le matériau. Avec la même procédure, le type de réaction est choisi. Cette fois, la relation à satisfaire est donnée par la relation 2.24.

$$\sum_{p=0}^{r-1} \sigma_p < R'' \sum_{p=0}^M \sigma_p < \sum_{p=0}^r \sigma_p \quad (2.24)$$

où M est le nombre de réactions possibles pour le noyau sélectionné, R'' est le nombre choisi par le troisième tirage aléatoire et σ_p est la section efficace microscopique de la réaction p .

Si la réaction p qui satisfait cette condition est une réaction d'absorption, l'histoire du neutron s'arrête et MCNP passe alors à l'histoire d'un nouveau neutron. Dans le cas contraire, l'énergie du neutron suite à la réaction r est tirée au hasard selon des lois physiques associées à cette réaction.

Les tallies de MCNP

Les grandeurs d'intérêt qui peuvent être calculées par MCNP sont représentées par ce que l'on nomme des tallies. Un tally est une grandeur définie par MCNP qui permet d'obtenir le comportement moyen de neutrons à travers des surfaces ou dans des cellules de la géométrie. Pour les neutrons, il existe 7 sortes de tallies. Nous présentons ici seulement le calcul des flux de neutrons et des sections efficaces moyennes.

Le flux de neutrons dans une cellule est calculé grace à l'expression 2.25 :

$$\langle \Phi \rangle = \frac{\int \Phi(E) dE}{\int dE} = \frac{1}{N_{source} \cdot N_{cycles}} \frac{\sum_{k=0}^n T_{l_k}}{V} \quad (2.25)$$

où N_{source} et N_{cycles} sont respectivement le nombre de neutrons sources et le nombre de cycles précédemment définis, n est le nombre total de neutrons entrant dans la cellule et T_{l_k} est la distance parcourue par le neutron k dans la cellule de volume V . Le flux de neutrons calculé par MCNP est donc mesuré en $[neutrons/cm^2 \ n_{source}]$, c'est-à-dire normalisé au nombre de neutrons sources.

Les sections efficaces moyennes à 1 groupe pour la réaction r sur le noyau k sont calculées comme dans l'expression 2.26 :

$$\langle \sigma_k^r \rangle = \frac{\int \sigma_k^r(E) \Phi(E) dE}{\int \Phi(E) dE} \quad (2.26)$$

À cause de sa nature probabiliste, le calcul MCNP a besoin d'un grand nombre de particules simulées afin d'avoir une bonne confiance dans les résultats. Étant N le nombre total d'histoires simulées, l'écart-type normalisé estimé pour un tally est proportionnel à $1/\sqrt{N}$.

2.4.1.2 Convergence des sources

Comme anticipé dans § 2.3.6, pour toute simulation MCNP le choix des paramètres optimaux pour atteindre la précision du résultat souhaitée doit être fait soigneusement. Nous faisons référence au choix du nombre de cycles, actifs et inactifs, et au nombre de particules par cycle.

Une des problématiques à laquelle il faut porter attention est la convergence de la source des neutrons. La localisation des sites de fissions de chaque cycle doit être représentative de la distribution spatiale des fissions dans la géométrie simulée. Initialement, il faut donc propager la source de neutrons pour enregistrer les positions des fissions. Concrètement, un certain nombre de cycles de neutrons sources est utilisé uniquement dans ce but : les histoires de neutrons sont simulées sans calculer les observables afin de propager la source vers la distribution spatiale physique des fissions. Ces cycles sont appelés cycles inactifs et ils sont suivis par un certain nombre de cycles actifs pendant lesquels les tallies sont enregistrés.

Si la source de neutrons n'est pas convergée sur la distribution physique des sites de fission, des biais importants peuvent se produire sur les résultats calculés. Puisque ces biais

ne sont pas pris en compte par MCNP, l'utilisateur doit s'assurer de cette convergence. Dans les cas où la distribution de la source des neutrons n'est pas connue à priori, afin d'avoir un résultat précis et correct qui ne dépend pas de la distribution initiale de la source de fission, la procédure itérative de la convergence des sources est essentielle. Cette procédure permet aux neutrons d'explorer tout le domaine géométrique et d'obtenir la distribution de la source souhaitée à partir d'une distribution initiale établie par l'utilisateur.

La stabilité de la distribution de la source doit donc être vérifiée avant de commencer les cycles actifs. Le choix du nombre de cycles inactifs ainsi que du nombre de particules par cycle est important [Onillon, 2014]. Dans le cas contraire, si la source de neutrons possède encore une trace de la distribution spatiale initiale, les résultats de la simulation (k_{eff} et tallies) peuvent être fortement biaisés.

2.4.1.3 L'entropie de Shannon

MCNP permet de s'assurer de la convergence de la source via un calcul de l'entropie de Shannon H_{src}^i à chaque cycle i [Brown, 2006], [Farkas et al., 2008]. Cette grandeur exprime mathématiquement la distribution spatiale de la source dans la géométrie et elle converge vers une valeur au fur et à mesure que la distribution devient stationnaire. Pour calculer l'entropie de Shannon, MCNP applique un réseau maillé 3D sur la géométrie et à chaque cycle il compte le nombre de sites de fission qui tombent dans chacun des éléments du réseau. Grâce à ces tallies, il crée une estimation discrète de la distribution de la source.

L'entropie de Shannon est définie par l'équation 2.27 :

$$H_{src}^i = - \sum_{j=1}^N P_j * \ln_2(P_j) \quad (2.27)$$

où N est le nombre total d'éléments du réseau et P_j est la fraction de la source générée dans l'élément j . Suite au dernier cycle actif, MCNP calcul également l'entropie moyenne de la source sur la seconde moitié des cycles, H_{src}^{mean} , ainsi que sa déviation standard, $\sigma_{H_{src}^{mean}}$. Cette entropie moyenne est utilisée pour estimer k , le nombre minimum de cycles inactifs nécessaires qui correspond à la simulation montrant H_{src}^{mean} à 1 écart-type. Le nombre k vérifie l'équation 2.28 :

$$H_{src}^{mean} - \sigma_{H_{src}^{mean}} \leq H_{src}^k \leq H_{src}^{mean} + \sigma_{H_{src}^{mean}} \quad (2.28)$$

L'extension spatiale et la finesse du réseau de mailles défini par MCNP dépendent du nombre des neutrons par cycle et de la distribution initiale de la source. Plus le nombre de neutrons par cycle est élevé, plus le maillage est fin et plus l'extension spatiale initiale de la source est importante, plus le sera l'extension spatiale du maillage. Le nombre minimum de cycles inactifs k estimé dépend aussi de manière proportionnelle du nombre de neutrons sources par cycle.

Prenons un exemple : une sphère de 200 cm de diamètre d'oxyde d'uranium enrichi à 4% en ^{235}U (en bleu dans la figure 2.5) et entourée par 20 cm d'eau légère (en rouge) comme dans [Onillon, 2014]. La source initiale des neutrons est centrée au milieu de la

géométrie et le nombre total de cycles est 300. La figure 2.5 montre l'évolution spatiale de la source dans cette géométrie au cours des cycles. Nous observons la propagation des neutrons (en jaune) dans la géométrie suivant l'acheminement des cycles inactifs.

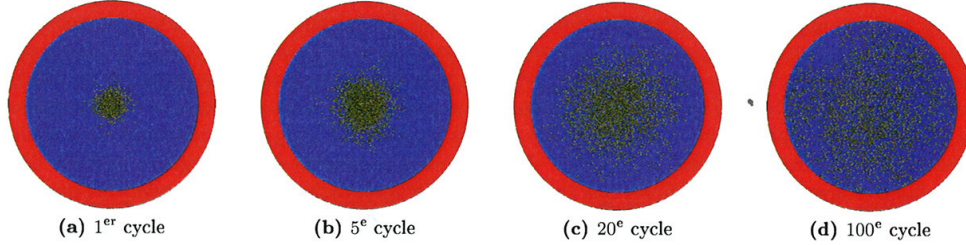


FIGURE 2.5 – Évolution de la distribution d'une source de neutrons initialement placée au centre d'une sphère homogène. Source image [Onillon, 2014]

Pour vérifier que le nombre k dépend du nombre de particules par cycles, nous prenons en considération trois valeurs du nombre de neutrons source : $4 \cdot 10^3$, $4 \cdot 10^4$ et $4 \cdot 10^5$. La figure 2.6 représente l'entropie de Shannon en fonction des cycles pour ces trois valeurs. Le nombre de cycles inactifs minimaux k conseillé par MCNP est respectivement 64, 113 et 156. Nous observons également une augmentation de l'entropie de Shannon en fonction des cycles et sa convergence lorsque la stabilité spatiale de la source est atteinte.

Cependant, pour s'assurer que la source soit convergée, il faut vérifier la stabilisation de l'entropie de Shannon, mais aussi la convergence du k_{eff} . En effet, pour des systèmes homogènes la convergence du k_{eff} peut avoir lieu avant celle de la source de neutrons, alors que pour les systèmes fortement hétérogènes la seule convergence de l'entropie n'implique pas forcément que la convergence du k_{eff} soit atteinte. Si par exemple un matériau fissile est situé loin du point d'origine de la source, les neutrons peuvent arriver dans cette région seulement après un certain nombre de cycles. À ce moment, l'interaction avec des noyaux fissiles conduit à une augmentation des réactions de fission qui modifie la valeur du k_{eff} calculée. Les convergences de l'entropie et du k_{eff} sont donc à vérifier pour une estimation correcte du nombre de cycles inactifs et de neutrons par cycle.

En considérant ces observations, nous avons déterminé le nombre optimal de cycles, actifs et inactifs, et le nombre de neutrons sources à utiliser pour les configurations simulées dans ce travail. Comme déjà précisé, une fois le nombre de cycles inactifs pour avoir une source convergée établi, le nombre de cycles actifs et de particules par cycle déterminent l'incertitude statistique associée aux résultats obtenus.

2.4.1.4 La convergence des sources vers une distribution non-physique

Il peut arriver que la distribution des sites de fission calculée converge vers une distribution clairement non physique. Ce phénomène est d'autant plus probable dans les géométries où la dimension caractéristique est très grande devant le libre parcours moyen des neutrons.

Pour illustrer ce problème, considérons un assemblage à une seule dimension (x) et une source initiale placée à l'origine. Supposons que, par jeu statistique, les neutrons du

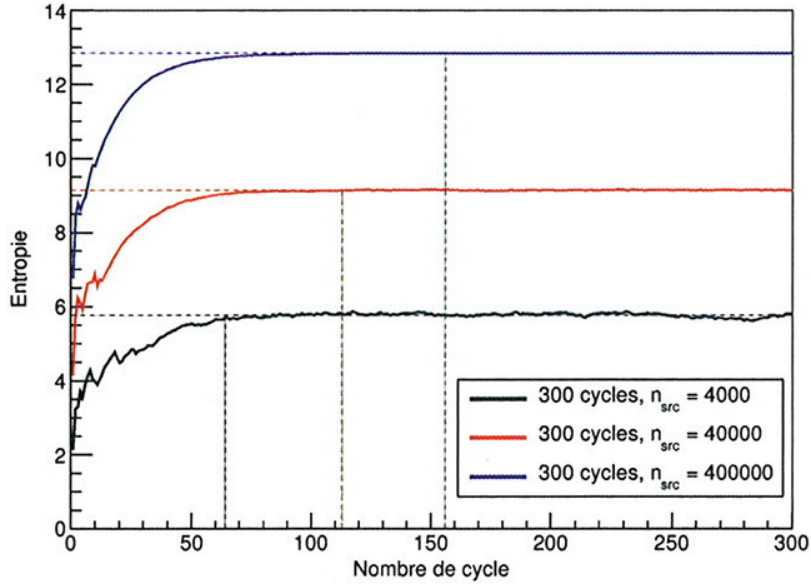


FIGURE 2.6 – Évolution de l'entropie de Shannon pour trois valeurs de nombre de neutrons source. Source image [Onillon, 2014]

premier cycle soient préférentiellement envoyés vers la direction $x > 0$. Les sites de fissions du cycle suivant seront donc tous dans le demi-espace $x > 0$. L'exploration des régions $x < 0$ sera donc moins probable comme la source s'est décalée par fluctuation statistique, et non physique.

Dans une géométrie entièrement réfléchie, aucune direction préférentielle de voyage des neutrons est présente : l'accumulation peut donc avoir lieu dans le demi-espace $x > 0$ comme dans celui $x < 0$. Ce phénomène peut s'amplifier au cours de l'évolution avec les consommations de noyaux fissiles. Nous présentons dans le chapitre suivant comment contourner cette difficulté numérique afin d'obtenir des résultats fiables.

2.4.2 Le code d'évolution SMURE

2.4.2.1 Principe de fonctionnement

Le code SMURE (Serpent-MCNP Utility for Reactor Evolution) a été développé au sein d'une collaboration entre plusieurs équipes de l'IN2P3 [Leniau, 2013], [Michel-Sendis, 2006] et il est disponible à la NEA [Méplan et al., 2017]. En plus de l'évolution des matières sous irradiation, il permet de coupler les calculs neutroniques avec la thermo-dynamique, grâce à un code intégré (BATH) ou au couplage d'un code 3D (COBRA-EN) [Cappelletti, 2009].

Le code SMURE utilise MCNP (ou Serpent) pour résoudre l'équation du transport à chaque pas de temps et une méthode Runge-Kutta d'ordre 4 pour résoudre les équations de Bateman, comme illustré dans la figure 2.7.

La première étape d'une simulation SMURE est la définition de la géométrie et de la composition isotopique des matériaux présents, ainsi que des sources de neutrons. Avec ces informations, MCNP peut calculer le flux neutronique et les sections efficaces moyennes

nécessaires $\langle \sigma \Phi \rangle(t_0)$ et l'arbre de décroissance peut être créé. La résolution de l'équation de l'évolution pour le premier intervalle de temps $t_0 + dt$ est effectuée avec la méthode Runge-Kutta4 et les compositions isotopiques au pas de temps t_1 sont ainsi calculées. Ce processus est répété de manière itérative jusqu'au dernier pas de temps t_N où N est le nombre total de pas de temps de l'évolution.

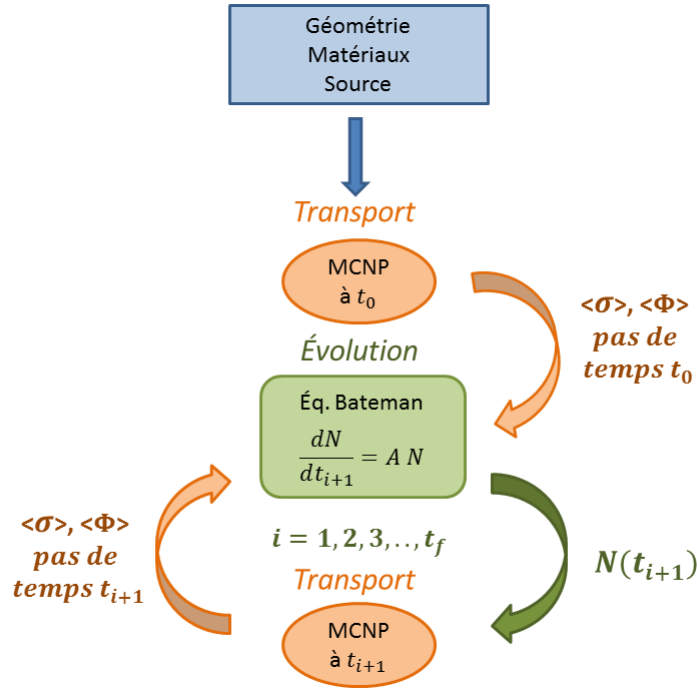


FIGURE 2.7 – Principe de fonctionnement du code d'évolution SMURE avec utilisation de MCNP pour l'étape en transport

La méthode RK-4 nécessite d'introduire un niveau de discrétisation temporelle en plus entre chaque pas MCNP. SMURE divise chaque intervalle de temps dt en N_{RK} calculs Runge-Kutta espacés par intervalles de temps δt identiques. Par défaut, N_{RK} vaut 10. À chaque pas de calcul RK-4, une méthode de contrôle de l'évolution est appliquée, comme par exemple, la normalisation du flux afin de maintenir la puissance constante.

Dans la suite, lorsque nous écrivons « pas de temps » nous faisons référence au pas de temps dt entre chaque calcul MCNP.

2.4.2.2 Option multigroupe

Comme nous avons vu dans la description du principe de fonctionnement de SMURE, plusieurs tallies MCNP doivent être calculés afin de résoudre l'équation de Bateman. En effet, il faut connaître les taux de réaction de chaque noyau présent dans la géométrie simulée.

Puisque le temps de calcul pourrait devenir significatif, une option de simplification appelée *MultiGroupeTally* a été implémentée dans le code SMURE. Un tally MCNP de flux discrétisé en énergie est calculé par MCNP sur chacune des cellules évoluant. Les

taux de réactions sont ensuite calculés grâce à l'expression 2.29.

$$\sum_i \Phi(E) \sigma_i^r(E) dE \quad (2.29)$$

où r indique la réaction du noyau i . Les valeurs des sections efficaces microscopiques sont lues à partir de la base de données utilisée par SMURE.

La discrétisation énergétique du flux est de 17 900 groupes par défaut, dont le découpage est optimisé pour un spectre de réacteurs thermiques. La modalité du découpage est présentée dans le tableau 2.1.

ΔE	$10^{-4}eV-1eV$	$1eV-10eV$	$10eV-10keV$	$10keV-0.1MeV$	$0.1MeV-20MeV$
$N_{bin}/\text{décade}$	100	500	5000	1000	500

TABLE 2.1 – Découpage énergétique dans l'option multigroupe

La discrétisation en énergie peut être augmentée d'un facteur k_{MG} (le nombre de bin de décades défini par défaut est multiplié par k_{MG}). Nous avons choisi d'adopter un coefficient 2 pour la réalisation de toutes les simulations d'étude.

Pour certains isotopes, comme l' ^{238}U , un traitement *MultiGroupeTally*, même avec un binning très fin en énergie, n'est pas suffisant pour modéliser les résonances à cause du phénomène de l'autoprotection § 1.2.5.1. Dans SMURE, il est possible d'utiliser la méthode multigroupe pour tous les noyaux sauf l' ^{238}U , pour lequel la méthode ponctuelle est utilisée.

2.4.2.3 Discrétisation temporelle de l'évolution

Considérons une évolution infinie d'un assemblage d'un REP enrichi à 3.5% en ^{235}U . Dans toute la suite du manuscrit, cette simulation est choisie comme celle de référence et représente le modèle assemblage infini auquel nous allons comparer les différents résultats obtenus.

L'évolution du combustible est simulée sur une durée d'irradiation de 4 ans environ. L'évolution est coupée en 16 pas de temps de moins de 100 jours et de longueur constante. Pour vérifier que l'intervalle de temps entre deux calculs MCNP consécutifs de l'évolution est suffisamment court pour que les sections efficaces moyennes puissent être considérées constantes, nous avons réalisé deux simulations de la configuration assemblage infini avec deux découpages temporels différents : une première simulation avec des pas de temps constants et une seconde avec des pas de temps plus petits et de longueurs variables. Les deux options de simulations sont les suivantes :

1. temps total d'irradiation : 1441 jours; 16 pas de temps
2. temps total d'irradiation : 4.5 années; 28 pas de temps : 7 pas tous les 30 jours et ensuite 21 pas tous les 70 jours

Pour comparer les deux options, nous avons calculé les écarts de quelques grandeurs. Nous avons sélectionné les inventaires des isotopes fissiles ^{235}U et ^{239}Pu , dont la figure 2.8

en représente les évolutions, et le facteur de multiplication k_∞ , montré dans la figure 2.9, à 40 GWj/t . Ce choix est justifié parce que les quantités d' ^{235}U et du ^{239}Pu sont des observables d'intérêt dans toute notre étude, tandis que le k_∞ est directement impacté par le choix des pas de temps de l'évolution (surtout dans les premiers instants de l'irradiation).

<i>observable</i>	$\Delta(variable - fixe)[\%]$
^{235}U	0.78
^{239}Pu	0.43
k_∞	0.11

TABLE 2.2 – Écarts relatifs entre la simulation à pas de temps fixes et la simulation à pas de temps variables des inventaires des isotopes ^{235}U , ^{239}Pu et du facteur de multiplication

Les écarts entre la simulation à pas de temps fixes et la simulation à pas de temps variables sont très faibles, inférieurs à 1% pour les trois observables analysées, comme le reporte le tableau 2.2 ou comme l'illustre la figure 2.8.

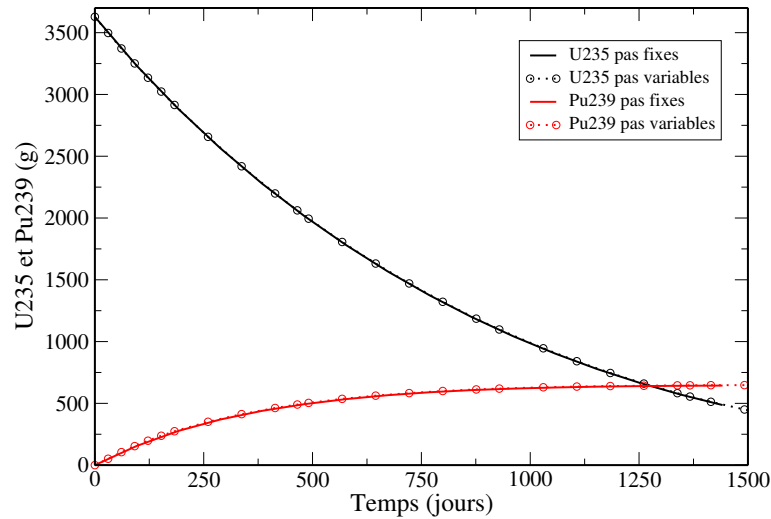


FIGURE 2.8 – Évolution en fonction du temps des inventaires de l' ^{235}U et du ^{239}Pu pour deux simulations avec pas de temps fixes et variables

La figure 2.9 montre l'évolution du k_∞ pour les deux configurations. Une fois encore, les deux simulations semblent cohérentes. La valeur du facteur de multiplication de la simulation à pas de temps variables descend au premier pas de temps, en correspondance de 30 jours, pour ensuite prendre une tendance d'évolution caractéristique du k_∞ . À cause des pas de temps plus longs, la simulation à pas de temps fixes présente l'abaissement du k_∞ après 100 jours.

Cette descente rapide est due au ^{135}Xe , qui est produit dans les premiers instants de l'irradiation et qui empoisonne le combustible à cause de sa section efficace de capture très élevée, de l'ordre de 10^6 barns. Comme son temps de demi-vie est de 9.17 h, il arrive à l'équilibre en 2 jours (une description détaillée de ce phénomène est donnée dans le

paragraphe suivant) et les simulations à pas de temps fixes ne devraient donc pas être impactées par cet isotope particulier parce qu'il est correctement modélisé, même avec des pas de temps de l'ordre de 100 jours.

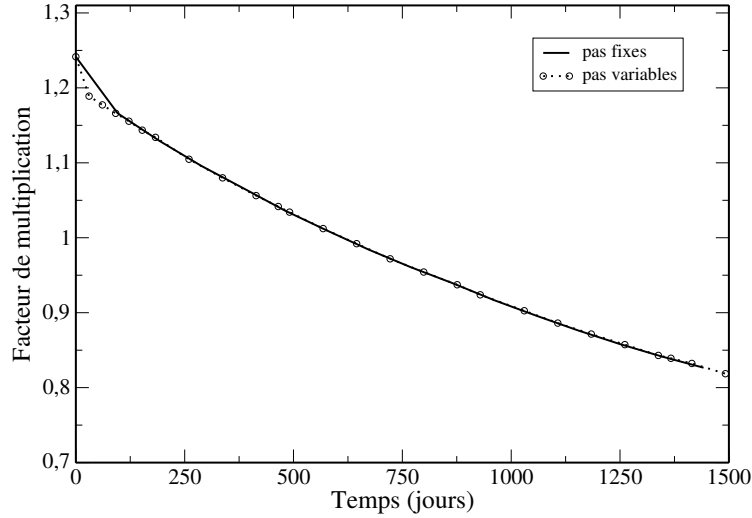


FIGURE 2.9 – Évolution en fonction du temps du facteur de multiplication pour deux simulations avec pas de temps fixes et variables

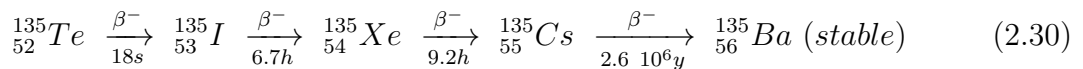
Notre choix d'adopter des pas de temps de longueur inférieure à 100 jours est comparable à la solution proposée par [Kepitsy et al., 2016] et intermédiaire entre l'utilisation de pas de temps très serrés, utilisés pour la validation [Chang et al., 2009], et l'utilisation de pas de temps plus longs comme nous pouvons trouver dans la littérature [Yu et al., 2015].

La longueur des premiers pas de temps doit être calibrée aussi en considérant le ^{135}Xe , comme nous décrivons dans le paragraphe suivant. L'option `SetXe135Equilibrium()`, qui réduit les instabilités numériques dues au ^{135}Xe et que nous développons dans la suite, est une bonne alternative qui permet d'utiliser des pas de temps constants.

2.4.2.4 Traitement du poison neutronique Xénon

Production du xénon

Parmi les produits de fission, le ^{135}Xe est particulièrement important d'un point de vue neutronique avec sa section efficace de capture de neutrons très élevée, égale à $2 \cdot 10^5 b$ dans les réacteurs REP. Il est produit selon la chaîne de décroissance représentée dans l'équation 2.30. Puisque le temps de demi-vie du ^{135}Te est très petit (chaque noyau de ^{135}Te décroît presque instantanément pour devenir ^{135}I), nous pouvons considérer que la chaîne de production commence avec l' ^{135}I .



Le ^{135}I a un rendement de fission assez élevé, de 6.1% (noté y_{135I}). La variation de sa quantité isotopique dans le temps est exprimée dans l'équation 2.31, dans laquelle on néglige son taux de capture neutronique puisque sa section efficace n'est pas suffisante pour

entrer en compétition avec une disparition par décroissance.

$$\frac{dN_{135I}}{dt} = \Sigma_{fiss} \Phi y_{135I} - \lambda_{135I} N_{135I} \quad (2.31)$$

où Σ_{fiss} est la section efficace macroscopique de fission et λ_{135I} est la constante de décroissance de l' ^{135}I . Cette équation a comme solution une fonction exponentielle, comme dans 2.32.

$$N_{135I} = N_{135I}^{\infty} (1 - e^{-\lambda_{135I} t}) \quad (2.32)$$

où N_{135I}^{∞} est la valeur de la quantité d' ^{135}I asymptotique, c'est-à-dire quand l'équilibre entre production et disparition de cet isotope est atteint. Cette quantité asymptotique est exprimée dans l'équation 2.33.

$$N_{135I}^{\infty} = \frac{\Sigma_{fiss} \Phi y_{135I}}{\lambda_{135I}} \quad (2.33)$$

L'expression de la variation de la quantité isotopique de ^{135}Xe est reportée dans l'équation 2.34. Le terme de production est composé par la somme de la décroissance de l' ^{135}I et de la production de cet isotope par fission, avec un rendement y_{135Xe} de 0.3%. Le terme de disparition est la somme de la capture radiative, (section efficace $\sigma_{(n,\gamma)}^{135Xe}$) et de la décroissance du ^{135}Xe lui même, de constante radioactive λ_{135Xe} .

$$\frac{dN_{135Xe}}{dt} = \Sigma_{fiss} \Phi y_{135Xe} + \lambda_{135I} N_{135I} - \lambda_{135Xe} N_{135Xe} - \sigma_{(n,\gamma)}^{135Xe} \Phi N_{135Xe} \quad (2.34)$$

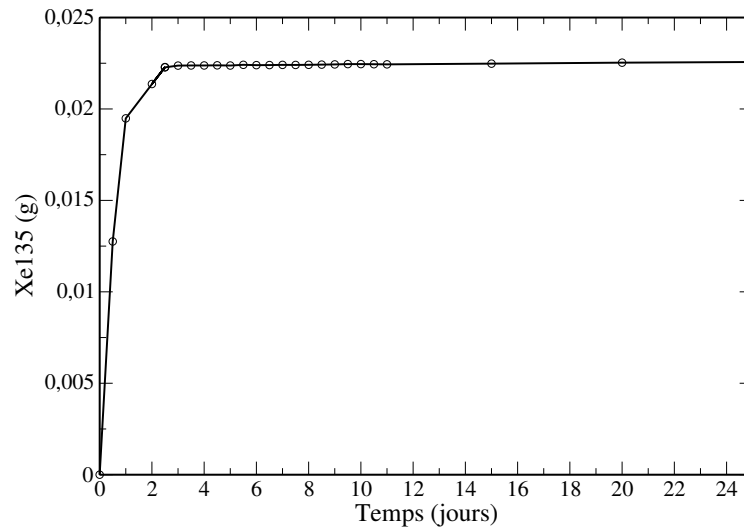


FIGURE 2.10 – Évolution en fonction du temps du ^{135}Xe dans un combustible REP pour une simulation avec des pas de temps variables : 23 pas de 0.5 jours et 2 pas de 5 jours

L'évolution du ^{135}Xe , représentée en figure 2.10, arrive à saturation après un temps de 2 jours environ. Puisque cet isotope arrive à l'équilibre dans un temps cohérent avec l'échelle

temporelle de l'évolution du combustible, il est dit poison saturable. L'expression de la quantité de ^{135}Xe à l'équilibre, indiquée comme $N_{^{135}\text{Xe}}^\infty$, est obtenue en posant la condition de dérivée nulle dans l'équation de Bateman (équation 2.35) et en substituant le terme de décroissance de l' ^{135}I dans l'équation 2.34 avec son équivalent à l'équilibre (équation 2.33). Nous obtenons ainsi l'expression 2.36.

$$\frac{dN_{^{135}\text{Xe}}}{dt} = 0 \quad (2.35)$$

$$N_{^{135}\text{Xe}} = \frac{y_{^{135}\text{Xe}} \Sigma_{fiss} \Phi + \lambda_{^{135}\text{I}} N_{^{135}\text{I}}}{\lambda_{^{135}\text{Xe}} + \sigma_{n,\gamma}^{^{135}\text{Xe}} \Phi} = \frac{\Sigma_{fiss} \Phi (y_{^{135}\text{Xe}} + y_{^{135}\text{I}})}{\lambda_{^{135}\text{Xe}} + \sigma_{n,\gamma}^{^{135}\text{Xe}} \Phi} \quad (2.36)$$

Antiréactivité introduite par les poisons neutroniques

Dans la figure 2.10, nous pouvons clairement voir la montée de la quantité du ^{135}Xe vers l'équilibre, atteint aux alentours des 2 jours d'irradiation. Dans cette phase, de durée comparable à un temps de démarrage d'un REP, la variation de l'inventaire du ^{135}Xe a un fort impact sur le facteur de multiplication k .

En particulier, à cause de sa section efficace de capture très élevée, l'influence du ^{135}Xe est visible sur la valeur du facteur d'utilisation thermique f , défini comme la probabilité qu'un neutron soit absorbé dans le combustible plutôt que dans les autres matériaux présents (modérateur et matériaux de structure), ainsi que sur la valeur du facteur de reproduction η , défini comme la probabilité de création d'un neutron par absorption dans le combustible.

L'antiréactivité introduite par le ^{135}Xe peut être calculée par l'équation 2.37.

$$\rho_{Xe,\infty} = -f \frac{y_{tot} \Phi \sigma_a^{^{135}\text{Xe}}}{\lambda_{^{135}\text{Xe}} + \sigma_{(n,\gamma)}^{^{135}\text{Xe}} \Phi} \frac{\Sigma_{fiss}}{\Sigma_a^F} \quad (2.37)$$

où y_{tot} est la somme des rendements de fission des deux isotopes, $(y_{^{135}\text{Xe}} + y_{^{135}\text{I}})$, Φ le flux dans le combustible, et Σ_a^F la section efficace d'absorption du combustible [Lamarsh, 1966]. Considérons maintenant l'expression du facteur de multiplication k sans les fuites neutroniques (formule à 4 facteurs), donnée dans l'équation 2.38, où ε est le facteur de fission rapide et p le facteur antitrappe en ralentissement..

$$k \approx \varepsilon p f \eta = \varepsilon p f \nu \frac{\Sigma_{fiss}}{\Sigma_a^F} = 1 \quad (2.38)$$

Nous pouvons donc écrire l'antiréactivité introduite par le ^{135}Xe comme dans l'équation 2.39.

$$\rho_{Xe,\infty} = -\frac{y_{tot} \Phi \sigma_{(n,\gamma)}^{^{135}\text{Xe}}}{\lambda_{^{135}\text{Xe}} + \sigma_{(n,\gamma)}^{^{135}\text{Xe}} \Phi} \frac{1}{\varepsilon p \nu} \quad (2.39)$$

Avec l'hypothèse d'un flux neutronique élevé, qui rend le terme de disparition du ^{135}Xe par capture neutronique plus important du terme de disparition par décroissance ($\sigma_{(n,\gamma)}^{135}\text{Xe} \Phi \gg \lambda_{135}\text{Xe}$), l'expression 2.39 se simplifie en 2.40.

$$\rho_{Xe,\infty} = -\frac{y_{tot}}{\varepsilon p \nu} \quad (2.40)$$

Nous pouvons résoudre l'équation 2.40 numériquement, avec y_{tot} égal à 6.4%, εp à 0.9 et ν à 2.42 (valeurs typiques pour un REP). Le résultat est une antiréactivité de -2.93% , soit presque $-3000 pcm$ induits par le ^{135}Xe . La valeur obtenue est compatible avec la valeur observée dans la figure 2.9.

Traitement du Xénon dans le code d'évolution SMURE

Vu que sa section efficace de capture neutronique est très grande, un traitement spécial est réservé au ^{135}Xe . La variation de la quantité isotopique du ^{135}Xe est liée à un phénomène d'instabilités spatiales, appelées « oscillations xénon », conséquences directe des oscillations du flux neutronique (qu'elles soient physiques, comme expliqué dans la suite, ou numériques, induite par une mauvaise convergence des sources dans les codes Monte Carlo).

Analysons un cas de variation locale du flux neutronique : au moment de l'insertion des barres de contrôle, par exemple, le flux neutronique est réduit dans la partie haute du cœur. Pour maintenir la puissance thermique constante, le flux neutronique augmente donc dans la partie inférieure. La diminution du flux dans la partie supérieure du domaine engendre une accumulation du ^{135}Xe , à cause du déséquilibre entre la décroissance de l' ^{135}I (supposé à l'équilibre avant de la perturbation du profil du flux) et la capture du xénon.

Mais cette augmentation de la quantité du poison neutronique a pour conséquence une amplification de l'effet de l'insertion des barres de contrôle : l'antiréactivité induite par le ^{135}Xe augmente et le flux neutronique diminue encore plus, pouvant conduire à un phénomène d'oscillations bien connu en physique des réacteurs.

Pour cette raison, dans le code SMURE il y a une nouvelle possibilité d'utiliser une option, appelée *SetXe135Equilibrium()*, qui permet de forcer l'équilibre ^{135}Xe et ainsi empêcher les oscillations du flux. Cette option est activée que pour des temps supérieurs à un temps fixé appelé « temps d'équilibre », t_{eq} , par défaut égal à 27 h (le triple du temps de demi-vie du ^{135}Xe).

Dans ce cas, la quantité de ^{135}Xe est calculée grâce à l'équation 2.41 où $\tilde{\Phi}$ représente une moyenne des flux entre deux pas de temps considérés.

$$N_{135Xe} = \frac{y_{135Xe} \Sigma_{fiss} \tilde{\Phi} + \lambda_{135I} N_{135I}}{\lambda_{135Xe} + \sigma_{(n,\gamma)}^{135Xe} \tilde{\Phi}} \quad (2.41)$$

Avec cette option, les oscillations du flux neutroniques qui peuvent être causées par le xénon sont ainsi réduites.

2.4.2.5 Définition du Burn-Up d'un assemblage

Reprenons le calcul cellule de référence introduit précédemment. Un exemple d'évolution d'un isotope en fonction du temps, l' ^{235}U , est reportée sur la figure 2.11. Chaque rond correspond à l'inventaire de cet isotope calculé par SMURE (à travers la résolution des équations de Bateman 1.32) à chaque pas de temps de l'évolution.

Dans nos analyses, les comparaisons des inventaires entre les différentes configurations simulées sont effectuées à des temps donnés d'irradiation du combustible, qui ne correspondent pas forcément au temps final de la simulation d'évolution. La première flèche sur la figure 2.11 représente en effet le temps de comparaison des inventaires, appelé temps de fin de cycle (End Of Cycle - EOF), alors que la deuxième correspond au temps d'arrêt de la simulation SMURE.

Les valeurs des temps sont données en Burn-Up. Cette grandeur est définie comme le produit de la puissance thermique dégagée par l'assemblage, P_{th} , et le temps d'irradiation, T_{irr} , divisé par la masse de noyaux lourds initialement chargée, M_{NL} (équation 2.42).

$$BU = \frac{P_{th} T_{irr}}{M_{NL}} \quad (2.42)$$

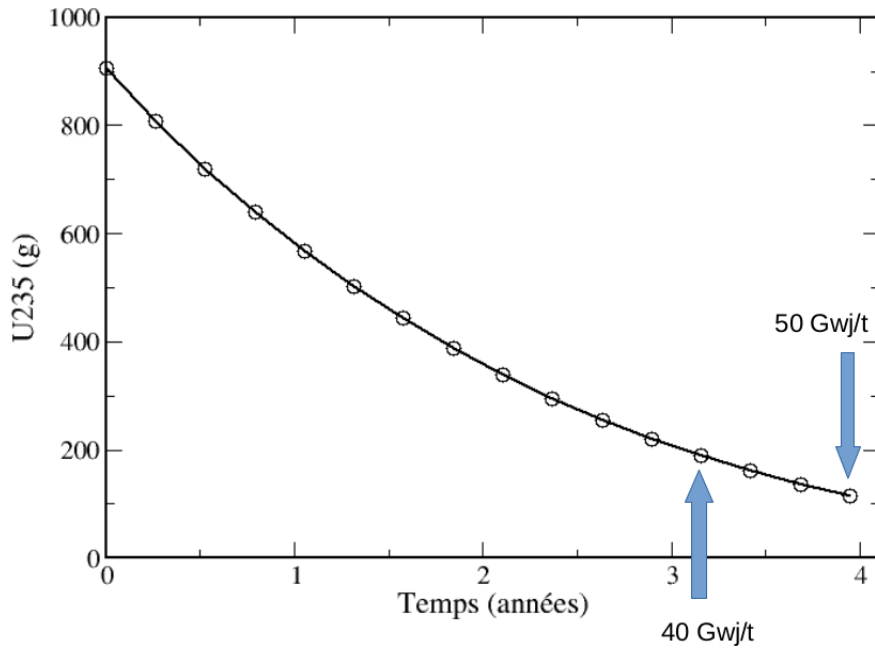


FIGURE 2.11 – Évolution d' ^{235}U de l'assemblage infini en fonction du temps

Si nous considérons une simulation à puissance constante d'une configuration constituée d'un seul assemblage évoluant, la correspondance entre temps et Burn-Up est directe. Nous pouvons parler de temps de fin d'irradiation ainsi que de Burn-Up final du combustible. L'unité de mesure du Burn-Up est MWj/t .

Le combustible UOx de nos simulations est composé par ^{238}U et ^{235}U enrichi à 3.5% § 3.2.1. Pour un combustible de ce type, le Burn-Up final d'irradiation est estimé à 40 GWj/t .

2.4.2.6 Estimation du Burn-Up maximal atteignable

Comme nous l'avons introduit dans § 2.3.3, le cœur est géré par rechargements partiels, ce qui permet de prolonger le temps total d'irradiation du combustible. Pendant le temps de fonctionnement, le cœur doit être toujours critique.

L'évolution d'un assemblage isolé peut être utilisée pour estimer la valeur du Burn-Up maximal du combustible. Dans le cœur du réacteur, les assemblages neufs sont placés à côté d'assemblages plus irradiés, dont la sous-criticité compense la sur-criticité des premiers. Dans le cas de la simulation d'un seul assemblage (calcul cellule), nous supposons que les assemblages à différents niveaux d'irradiation puissent être représentés en prenant l'évolution de cet assemblage à des temps d'irradiation différents.

À partir de la valeur du facteur de multiplication infini k_∞ issu du calcul assemblage infini, nous pouvons estimer le $\langle k_\infty \rangle$ du cœur selon l'expression 2.43.

$$\langle k_\infty(t) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N k(t + i t_R) \quad (2.43)$$

où t_R est le temps de chaque cycle et N est le nombre de rechargement [Michel-Sendis, 2006]. La figure 2.12 représente en noir l'évolution du k_∞ de l'assemblage simulé et en rouge l'évolution périodique du $\langle k_\infty \rangle$ du cœur. À la fin de chaque cycle d'irradiation t_R , un rechargement partiel du combustible est effectué.

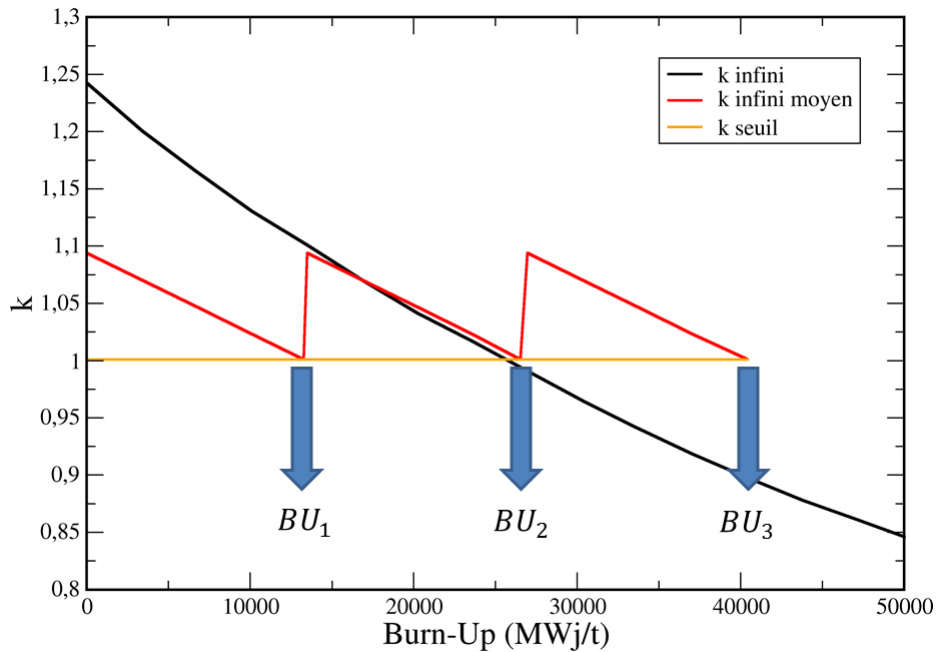


FIGURE 2.12 – Représentation du k_∞ , $\langle k_\infty \rangle$ et k_{seuil} en fonction du Burn-Up et de l'estimation des Burn-Up de fin de chaque cycle d'irradiation pour un rechargement par tiers

La grandeur k_{seuil} correspond à la valeur limite que le $\langle k_\infty \rangle$ peut avoir pour que le

cœur soit encore assez critique pour assurer la puissance nominale. Il est nécessairement supérieur à 1 pour modéliser les fuites neutroniques et les captures stériles qui ne sont pas prises en compte dans les calculs cellules.

Le temps total d'irradiation du combustible T_{tot} est ainsi estimé, comme la valeur du Burn-Up maximum atteignable par les assemblages (indiquées comme BU_1 , BU_2 et BU_3 dans l'image 2.12).

La valeur du k_{seuil} doit être adaptée à la quantité de bore présente dans l'assemblage et au type de combustible (UOx ou MOx). Le couple $\langle k_{seuil} \rangle$ / concentration en bore classiquement utilisé dans la littérature est (1.039/600 ppm) [Nuttin, 2012]. Or, la concentration en bore dans les assemblages que nous avons simulés (présentés dans § 3.2.1) est de 450 ppm. Puisque notre configuration montre un niveau de bore moins élevé, la valeur du k_{seuil} devrait être supérieure à 1.039. Notons que la valeur du k_{seuil} est fonction aussi du Burn-Up et du plan de chargement considéré. Puisque son estimation est une opération complexe, nous avons fait le choix d'utiliser la valeur couramment adoptée dans la littérature. En effet, la finalité de ce travail n'est pas une estimation précise du Burn-Up maximal atteignable, mais plutôt une comparaison entre différents modèles de simulation.

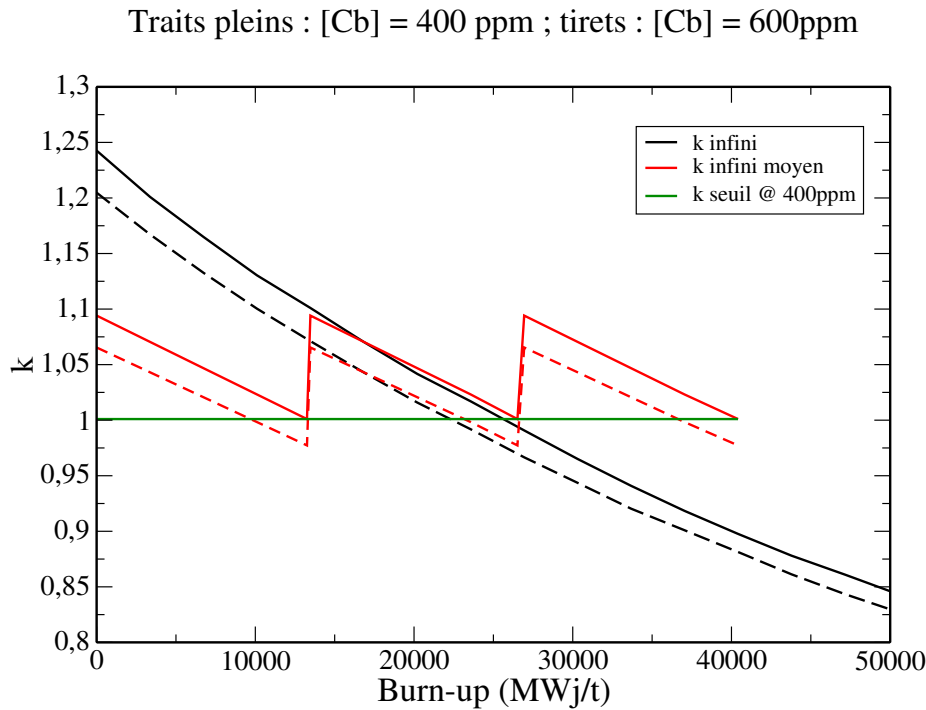


FIGURE 2.13 – Représentation du k_{∞} , $\langle k_{\infty} \rangle$ et k_{seuil} pour deux concentrations de bore : 400 et 600 ppm

Lors d'une vraie évolution de combustible, la concentration de bore varie entre sa valeur maximale et 0 ppm au cours de chaque cycle d'irradiation. Pourtant, dans les évolutions d'assemblage réalisées à l'IN2P3 la quantité de bore est normalement gardée constante § 2.3.2, en supposant que le seul impact sur le k_{∞} soit une modification de sa valeur initiale.

La figure 2.13 représente l'évolution du k_{∞} en fonction du temps pour deux assemblages

infinis pour deux valeurs de concentration en bore différentes (400 et 600 *ppm*). Puisque ces deux simulations représentent le même système, la valeur du BU_{max} atteignable doit être la même et est supposée de 40 *GWj/t*. La différence entre les deux configurations est seulement un choix de simulation. En conséquence, comme nous observons dans la figure 2.13, le k_{seuil} est plus élevé dans le cas de concentration de bore plus faible.

Puisque la valeur du k_{seuil} est dépendante de plusieurs facteurs comme la concentration en bore et le nombre de rechargements, nous avons opté pour garder la valeur 1.039 *ppm*, même si celle-ci ne correspond pas exactement à celle prévue pour la concentration de bore de nos assemblages. Ce choix pourrait paraître arbitraire, mais une modification du k_{seuil} , le serait tout autant. De toutes façons, la finalité principale de ce travail est de quantifier les écarts entre les configurations analysées plutôt que de calculer des valeurs absolues précises des Burn-Up max atteignables. Notre référence pour calculer les BU_{max} est donc un k_{seuil} de 1.039.

2.5 Conclusion

Ce chapitre est divisé en trois parties principales.

Dans la première, nous explorons le couplage calcul cellule-cœur qui permet de réaliser la simulation d'un réacteur nucléaire grâce à un schéma à deux étapes § 2.2. La première étape est représentée par l'évolution d'un assemblage isolé en conditions infinies (le modèle assemblage) réalisée habituellement par un code déterministe. La deuxième étape est celle du calcul de cœur pendant laquelle un code déterministe résout l'équation de la diffusion sur le cœur entier.

Pour passer d'une étape à l'autre, le calcul de certaines grandeurs neutroniques de diffusion est nécessaire § 2.2.1. L'utilisation des codes déterministes pour le calcul de ces grandeurs ne pose aucun problème, alors que le couplage avec un code stochastique pour la simulation de cœur suivante est encore un sujet de recherche.

Les difficultés dans la détermination de grandeurs, telles que les sections efficaces du transport condensées et homogénéisées et les coefficients de diffusion, empêche pour le moment un couplage probabiliste-déterministe efficient. Le code Serpent a été construit pour le couplage probabiliste-déterministe et, pour cette raison, il lui est possible de calculer les grandeurs de diffusion.

Puisque nous utilisons principalement MCNP, nous avons calculé ces grandeurs pour un assemblage et nous les avons comparées aux résultats d'une simulation Serpent de la même géométrie. Les résultats sont reportés dans le tableau 2.3. En particulier, nous avons déterminé les sections efficaces homogénéisées et condensées de diffusion et d'absorption (capture plus fission), en utilisant les expressions données dans § 2.2.1.

Les sections efficaces de capture et de fission homogénéisées et condensées que nous avons calculées sont comparables avec celles données par Serpent. Par contre, une différence significative est observée entre les sections efficaces de scattering calculées par les deux codes. Cette erreur se propage donc dans les autres grandeurs comme le coefficient de diffusion et la section efficace du transport. Nous ne maîtrisons pas les modèles qui se

cachent derrière le calcul Serpent des grandeurs de diffusion, ni comment l'anisotropie du scattering est traitée (notamment pour l'estimation de l'angle moyen μ). L'écart pourrait être lié à cette problématique et non à l'opération de condensation et homogénéisation que nous avons réalisée et qui semble correcte puisque les valeurs de Σ_{capt} et de Σ_{fiss} sont pratiquement identiques à celles données par Serpent.

Réaction	Σ_{MCNP}	$\Sigma_{Serpent}$	$\Delta\%$
capture	0.006939	0.006965	0.375
absorption	0.009427	0.009477	0.221
scattering	0.40630	0.42520	4.650

TABLE 2.3 – Valeurs des sections efficaces homogénéisées et condensées de diffusion et d'absorption pour un assemblage calculées via MCNP et Serpent et écarts relatifs entre les deux

Comme le couplage entre un calcul cellule stochastique et un calcul cœur en diffusion ne semble pas réalisable, les simulations réacteurs à l'IN2P3 continueront vraisemblablement à être basées sur le modèle assemblage. En conséquence, nous nous sommes dédiés à l'étude des approximations à la base du modèle assemblage et à l'estimation des biais associés afin de les propager pour les études de scénarios.

La deuxième partie du chapitre liste les approximations du modèle assemblage utilisé à l'IN2P3 et met en évidence celles que nous avons analysées § 2.3.

Dans la dernière partie, nous présentons les méthodes de simulation adoptées § 2.4.

Etudes des fuites axiales

Sommaire

3.1	Introduction	66
3.2	Méthodologie d'étude des fuites axiales	67
3.2.1	Benchmark	67
3.2.2	Description des trois configurations	68
3.2.3	Étude statistique	69
3.2.4	Paramètres des évolutions	73
3.3	Comparaison des configurations <i>assemblages ouvert et complet</i> avec l'<i>assemblage fermé</i>	74
3.3.1	Écarts des inventaires isotopiques totaux en fin d'irradiation	75
3.3.1.1	Choix de la configuration fermée comme référence	75
3.3.1.2	Présentation des écarts en fin de cycle	76
3.3.1.3	Analyse de l'irradiation	78
3.3.2	Biais sur l'estimation du Burn-Up maximal atteignable	80
3.3.3	Analyse du profil axial de l'évolution isotopique	82
3.3.3.1	<i>Assemblage fermé</i>	82
3.3.3.2	<i>Assemblage ouvert</i>	84
3.3.3.3	<i>Assemblage complet</i>	84
3.3.3.4	Évolution du plutonium	85
3.3.4	Analyse en fonction du Burn-Up local	87
3.3.4.1	Comparaison des inventaires en fonction du Burn-Up local	88
3.3.4.2	Illustration des effets de spectres	89
3.4	Analyse neutronique en début de cycle	91
3.4.1	Analyse du spectre neutronique	91
3.4.2	Analyse neutronique de l' <i>assemblage ouvert</i> avec MCNP	93
3.4.2.1	Calcul des courants rapides et thermiques	93
3.4.2.2	Expression des flux et durcissement du spectre au voisinage des extrémités	95
3.4.3	Application de la théorie de la diffusion : réacteur plaque	96
3.4.3.1	Rappel théorique	97
3.4.3.2	Correction de la condition de criticité	100
3.4.3.3	Application numérique	101
3.4.4	Application aux simulations : prise en compte des fuites axiales dans un schéma de calcul à haute précision	103
3.4.5	Impact en évolution	105

3.5	Effet des paramètres d'étude	108
3.5.1	Effet du binning	108
3.5.2	Effet de la taille de l'assemblage	110
3.5.3	Correction de criticité	112
3.5.3.1	Modèles de fuites existants	112
3.5.3.2	Configuration critique par modification de l'enrichissement	114
3.5.3.3	Configuration critique par ajustement de la concentration en bore	116
3.5.3.4	Configuration critique via changement de ν	117
3.5.3.5	Validité des modèles de fuites au voisinage de la criticité	118
3.6	Conclusions et bilan	119

3.1 Introduction

Comme détaillé dans le chapitre précédent, le modèle assemblage utilisé pour le calcul cellule à l'IN2P3 ne prend pas en compte les fuites neutroniques. Or, les fuites de neutrons modifient la valeur du facteur de multiplication et une estimation de leur contribution est donc fondamentale pour une correcte évaluation du Burn-Up utilisé pour les études de scénarios.

Dans ce chapitre, nous étudions l'effet des fuites de neutrons axiales, à l'aide de trois configurations décrites dans § 3.2, où nous présentons aussi la méthodologie de simulation adoptée. Les configurations choisies représentent des assemblages de taille réelle, discrétisés en 18 zones axiales.

La comparaison des inventaires isotopiques, totaux et pour chacune des zones axiales, en fin d'irradiation nous permet d'estimer l'impact des fuites axiales sur l'évolution du combustible § 3.3. Non seulement les écarts des inventaires par rapport à une simulation infinie sont importants, mais aussi l'estimation du Burn-Up maximum atteignable est biaisée par la prise en compte des fuites neutroniques.

Afin de comprendre la raison d'écarts si significatifs, nous procédons à une analyse en début d'irradiation du spectre des configurations étudiées § 3.4.

Dans la dernière partie de ce chapitre, nous analysons l'influence de la modification de certains paramètres de simulation § 3.5 et nous réalisons une comparaison avec les méthodes de fuites disponibles dans le code Serpent : les méthodes *B1* et albédo différentiel décrites précédemment dans le chapitre 2.

3.2 Méthodologie d'étude des fuites axiales

3.2.1 Benchmark

Pour notre étude, nous nous sommes basés sur le benchmark de la NEA [Rearde et al., 2013]. Ce benchmark, en faisant référence au réacteur de recherche à eau pressurisée Sequoya Unit 2, décrit un modèle de réacteur dont les caractéristiques sont reportées dans la première partie du tableau 3.1 (tous les paramètres sauf ceux de la dernière ligne). Ce modèle simplifié est constitué d'un assemblage composé de 17x17 crayons de combustible UO_2 et de 25 tubes guides pouvant accueillir des grappes de contrôle ou de sûreté¹. La figure 3.1 montre une vue sur le plan radial de l'assemblage considéré, qui présente une condition de réflexion sur toutes les parois externes. Dans le benchmark, l'assemblage est modéré et réfléchi axialement, en haut et en bas, grâce à la présence d'eau modératrice et d'acier, dont les épaisseurs sont listées dans le tableau 3.1.

Paramètre	Unité	Valeur	Paramètre	Unité	Valeur
rayon du combustible	cm	0.409	nombre de tube guides	-	25
rayon externe de la gaine	cm	0.475	nombre de crayons	-	264
épaisseur de la gaine	cm	0.057	hauteur assemblage	cm	365.76
distance entre crayons	cm	1.26	température modérateur	K	570
rayon interne tube guide	cm	0.561	densité modérateur	g/cm ³	0.736
rayon externe tube guide	cm	0.602	côté d'un assemblage	cm	21.504
modérateur supérieur	cm	13.904	réflecteur supérieur	cm	16.096
modérateur inférieur	cm	3.673	réflecteur inférieur	cm	26.327
température combustible	K	900	température gaine	K	633
enrichissement initial	% wt	3.5	isotopes Uranium (BOC)	-	²³⁵ U, ²³⁸ U

TABLE 3.1 – Valeurs caractéristiques du réacteur utilisées pour notre étude. Les caractéristiques listées sauf celles de la dernière ligne sont directement issues du benchmark

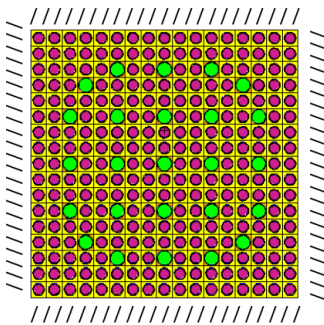


FIGURE 3.1 – Vue sur le plan (x,y) de l'assemblage d'étude

1. Voir note en bas de page § 2.3.2.2

Dans ce benchmark les crayons de combustible sont divisés selon l'axe principal en 18 zones, chacune de 20.32 cm, numérotées de manière croissante du bas vers le haut de l'assemblage. Chacune de ces zones présente des compositions isotopiques dérivées d'une irradiation à 20 GWj/t. La discrétisation géométrique est accompagnée d'une discrétisation de la température et de la densité des matériaux dans chaque zone.

Afin d'étudier et de quantifier l'impact des fuites axiales, nous avons étudié l'évolution du combustible en fonction de différentes options envisagées pour les surfaces délimitant les extrémités hautes et basses de la géométrie. Les évolutions ont été conduites jusqu'à la fin du cycle estimée à partir des caractéristiques du benchmark, selon la méthode expliquée dans le chapitre 2.

Puisque ce benchmark fournit seulement les compositions à 20 GWj/t, nous avons tout d'abord déterminé la composition initiale du combustible frais. Pour ce faire, nous avons réalisé plusieurs simulations d'évolution d'un assemblage en conditions infinies avec différentes compositions initiales (comprenant différents enrichissements). Nous avons ensuite comparé les compositions isotopiques issues des évolutions à 20 GWj/t aux compositions du benchmark. Cette comparaison nous a conduit à choisir un enrichissement de 3.5% mas-sique pour la composition initiale du combustible, que nous avons gardé pour l'ensemble des études de ce chapitre et des chapitres 4 et 5.

La proportion d'acide borique solubilisé dans le modérateur, estimée à partir de sa composition donnée par le benchmark, vaut 450 ppm.

3.2.2 Description des trois configurations

Ce chapitre est dédié à l'étude des fuites axiales. Pour faciliter l'analyse des résultats des calculs, nous avons souhaité simplifier au maximum les options de calcul. Par conséquent, nous avons volontairement oublié les effets de température qui impactent l'évolution. Les densités et températures des matériaux sont donc supposées constantes selon l'axe z . Dans notre étude, les effets des fuites sont quantifiés grâce à une modification des conditions limites de l'assemblage, dont nous avons considéré quatre variantes, correspondantes à quatre géométries d'assemblages différentes.

La configuration de référence : le modèle assemblage

La configuration de référence, à laquelle nous comparons les résultats obtenus, est une configuration qui représente un assemblage de combustible, tronqué en z et avec toutes les surfaces supposées réfléchissantes de neutrons. Puisque cette condition est définie infinie, cette configuration est appelée parfois génériquement assemblage infini ou configuration infinie. Dans ce chapitre, cette configuration est nommée *cube*. Elle est la configuration classiquement utilisée pour les études d'évolutions réalisées à l'IN2P3 et dans la création des modèles de réacteurs pour les études de scénarios. Les caractéristiques de la configuration *cube* que nous avons simulée ont été tirées du benchmark décrit dans § 3.2.1 et sa hauteur a été établie égale à celle d'une des 18 zones axiales.

Les configurations d'étude

Pour l'analyse des fuites axiales, nous avons choisi d'étudier trois autres configurations d'assemblages de taille réelle (hauteur de 4 m environ). Elles sont appelées : *assemblage fermé*, *assemblage ouvert* et *assemblage complet*.

La configuration *assemblage fermé* est constituée d'un assemblage de combustible sans modérateur ni réflecteur aux extrémités axiales de la géométrie. Cette configuration, comme la *cube*, représente elle aussi une configuration de référence assemblage infini, mais, pour des raisons explicitées dans le paragraphe suivant, nous pensons néanmoins qu'il est important de la considérer.

La configuration *assemblage ouvert* est similaire à la précédente, mais l'ensemble de ses surfaces ne sont plus réfléchissantes de neutrons : l'assemblage est ouvert dans la direction verticale. Les neutrons peuvent donc sortir des zones 1 et 18, respectivement en bas et en haut de la géométrie. Grâce à cette configuration, nous pouvons étudier l'impact théorique des fuites axiales.

La dernière configuration est strictement l'assemblage décrit dans le benchmark, sans discrétisation en température. À cause de la présence du modérateur et du réflecteur aux extrémités axiales, absents dans les deux autres configurations de taille réelle, cette configuration est appelée *assemblage complet*.

Une représentation des configurations décrites est donnée dans la figure 3.2.

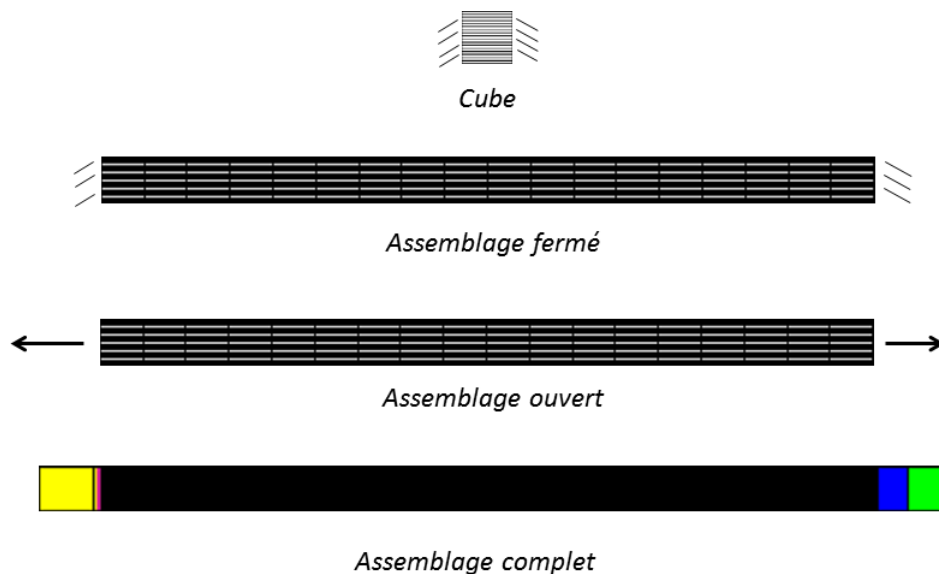


FIGURE 3.2 – Représentation de la configuration cube de référence et des trois configurations de taille réelle assemblages fermé, ouvert et complet

3.2.3 Étude statistique

Comme expliqué dans le chapitre précédent, les géométries de grandes tailles peuvent provoquer des difficultés pour la modélisation du transport des neutrons via des méthodes Monte Carlo. Le calcul du profil du flux neutronique peut s'avérer imprécis, dû à un

phénomène d'accumulation des sites de fission dans une partie de la géométrie. Lors de l'évolution, ces instabilités du flux s'amplifient à cause de la répartition de la consommation des noyaux fissiles qui n'est plus du tout physique.

Une illustration de cette problématique est présentée dans la figure 3.3. Celle-ci montre la distribution du flux neutronique en début d'irradiation en fonction des zones axiales pour la géométrie *assemblage fermé* pour 10 simulations indépendantes. À cause des conditions de réflexion sur toutes les parois de l'assemblage, le flux devrait être uniforme le long de l'axe z . Or, les 10 courbes représentant le flux neutronique ne sont ni plates ni symétriques. Rappelons l'explication donnée précédemment (voir § 2.4.1.4), selon laquelle une des raisons des oscillations du flux dans la configuration réfléchie est bien liée aux conditions de réflexion. Cependant, même la configuration *assemblage ouvert* montre des oscillations du

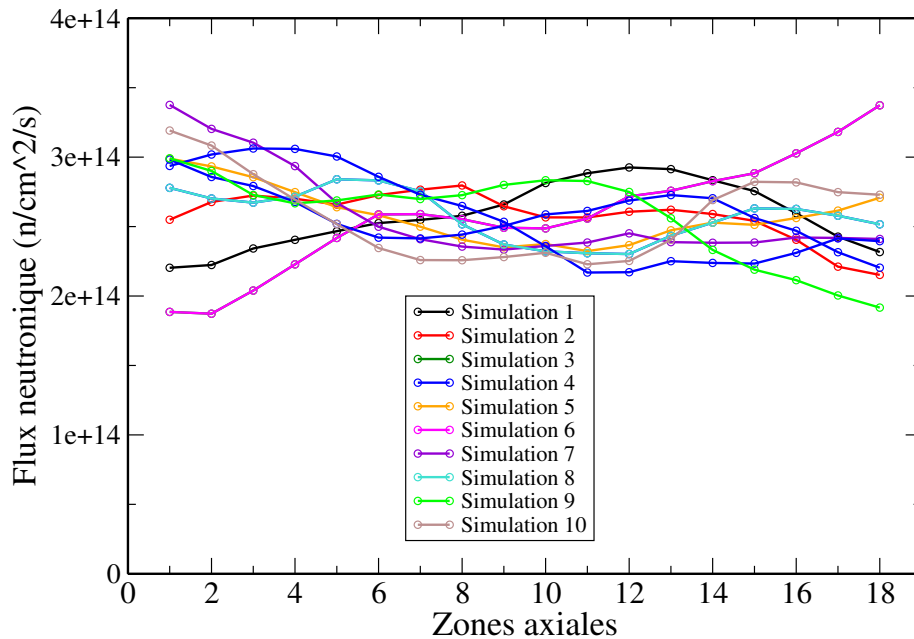


FIGURE 3.3 – Distribution axiale du flux neutronique pour 10 simulations indépendantes de l'assemblage fermé en début d'irradiation

flux neutronique : pour les 10 simulations différentes représentées sur la figure 3.4, la forme du flux n'est pas exactement symétrique comme attendue.

Afin de pallier ce problème et parce que nous souhaitons aussi estimer les incertitudes statistiques des inventaires isotopiques en fin d'irradiation, nous avons opté pour la réalisation d'un certain nombre de simulations indépendantes. Le choix du nombre de cycles actifs et inactifs et de particules par cycle, détaillé dans § 3.2.4, permet d'avoir un écart-type du k_{eff} de moins de 100 pcm. À partir de ces simulations indépendantes réalisées pour chaque configuration décrite dans § 3.2.2, nous avons estimé les valeurs moyennes des inventaires et les incertitudes associées des isotopes principaux à chaque pas de temps de l'évolution. Cette opération a été effectuée soit pour les inventaires totaux, soit pour les inventaires de chaque zone axiale. Au total, nous avons réalisé 80 simulations indépendantes pour chacune des 4 configurations d'étude, ce qui nous permet d'estimer les flux, les sections efficaces moyennes ainsi que les inventaires associés à leur barre d'erreur pour chaque zone axiale

et à chaque pas de temps.

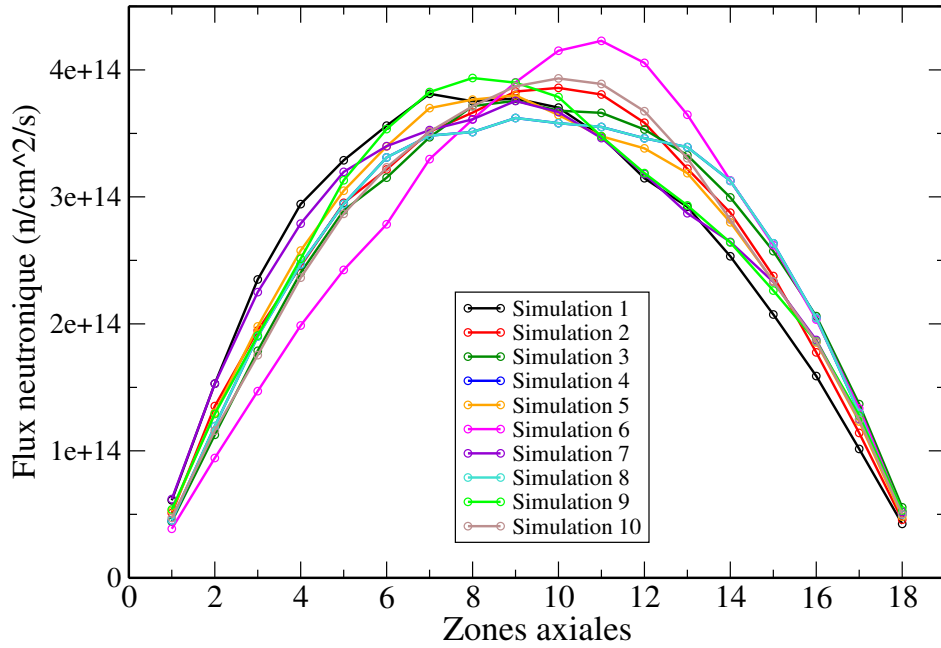


FIGURE 3.4 – Distribution axiale du flux neutronique pour 10 simulations indépendantes de l'assemblage ouvert en début d'irradiation

L'estimation des incertitudes statistiques associées aux observables étudiées peut être effectuée avec plusieurs méthodes. Une méthode consiste à approximer la distribution des observables par une gaussienne. Dans ce cas, l'incertitude statistique à 1σ de l'observable est représentée par l'écart type de la fonction gaussienne obtenue. L'échantillon statistique à notre disposition est malheureusement trop faible pour l'appliquer. Nous avons donc choisi une méthode numérique : tout d'abord, la moyenne arithmétique $\bar{X}$ de chaque observable est estimée, comme décrit dans l'équation 3.1.

$$\bar{X} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i \quad (3.1)$$

où N est le nombre total de simulations indépendantes réalisées et X_i est la valeur de la variable X pour la simulation i . Ensuite, l'écart type σ a été estimé comme dans l'équation 3.2.

$$\sigma_X = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\bar{X} - X_i)^2} \quad (3.2)$$

Pour comparer de manière cohérente l'incertitude statistique et les écarts relatifs des observables entre les différentes configurations, dans les tableaux des analyses nous reportons toujours l'erreur relative en pour-cent, qui est exprimée comme le rapport entre l'écart-type et la moyenne, comme dans l'équation 3.3.

$$\varepsilon_X = \frac{\sigma_X}{\bar{X}} \% \quad (3.3)$$

La problématique de la convergence des sources et de la fluctuation des grandeurs neutroniques associée se reflète sur les inventaires isotopiques. À titre d'exemple, la figure 3.5 reporte l'évolution du ^{239}Pu en fonction du temps pour l'ensemble des 80 simulations indépendantes réalisées pour les configurations *cube* et *assemblage fermé*. Nous observons que pour la configuration *cube* les courbes des inventaires du ^{239}Pu sont indiscernables les unes des autres, alors que les inventaires relatifs à la configuration *assemblage fermé* forment un faisceau de courbes assez épais. Dans cette figure, une seule zone de la configuration *assemblage fermé* est représentée puisque le *cube* a les dimensions d'une des 18 zones axiales de la configuration de taille réelle. Le choix de la zone 9 est justifié par sa position centrale dans la géométrie donc loin des conditions de réflexion des parois extérieures et de toute source possible de perturbation. En comparant les deux graphiques de la figure 3.5, nous observons l'effet de la valeur élevée du rapport dimension géométrique sur libre parcours moyen des neutrons qui caractérise l'*assemblage fermé*.

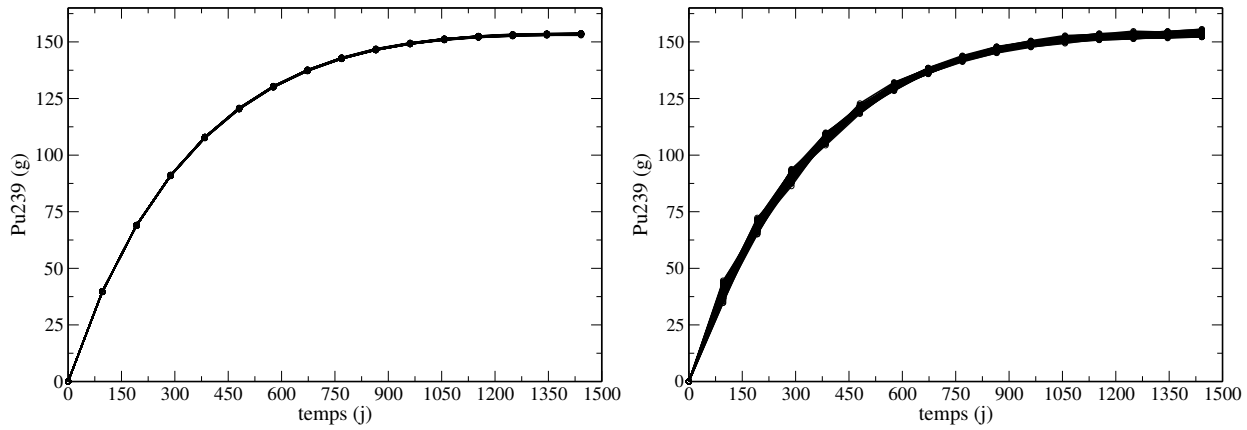


FIGURE 3.5 – Évolution du ^{239}Pu total en fonction du temps pour la configuration *cube* (à gauche) et du ^{239}Pu dans la zone 9 pour la configuration *assemblage fermé* (à droite), pour l'ensemble des 80 simulations indépendantes réalisées

À partir des valeurs des quantités isotopiques obtenues sur l'ensemble des simulations, nous avons pu calculer les valeurs moyennes des quantités en fin de cycle et estimer les erreurs statistiques. Ces données sont reportées dans le tableau 3.3 du paragraphe 3.3 pour les isotopes d'intérêt. Pour avoir une idée de l'écart entre les deux configurations, en début d'irradiation (à 10 GWj/t) l'incertitude statistique calculée du ^{239}Pu est de 0.11% pour le *cube* et de 1.82% pour la zone 9 de l'*assemblage fermé*.

Cette différence découle de la problématique de la convergence des sources : les barres d'erreurs associées aux grandeurs neutroniques comme le flux pour les configurations d'assemblages de hauteur de 4 m ne peuvent pas être réduites à des valeurs très faibles comme dans le cas de petites géométries (le *cube*). Cependant, en réalisant un nombre suffisant de simulations indépendantes, nous pouvons obtenir le profil axial du flux souhaité. La figure 3.6 montre le profil axial du flux neutronique pour les trois configurations *assemblages fermé*, *ouvert* et *complet*, en début d'irradiation moyenné sur les 80 simulations indépendantes et avec les barres d'erreur statistiques associées.

Les écarts-types relatifs pour les trois configurations en fonction des zones axiales sont

montrés dans la figure 3.7. Le profil axial de l'erreur statistique est similaire pour les trois configurations, avec des valeurs plus élevées aux bords et plus faibles au centre de la géométrie. Les erreurs de l'*assemblage fermé* sont toujours plus importantes des autres configurations, probablement à cause des conditions de réflexion sur les parois de la géométrie, comme expliqué dans § 2.4.1.4.

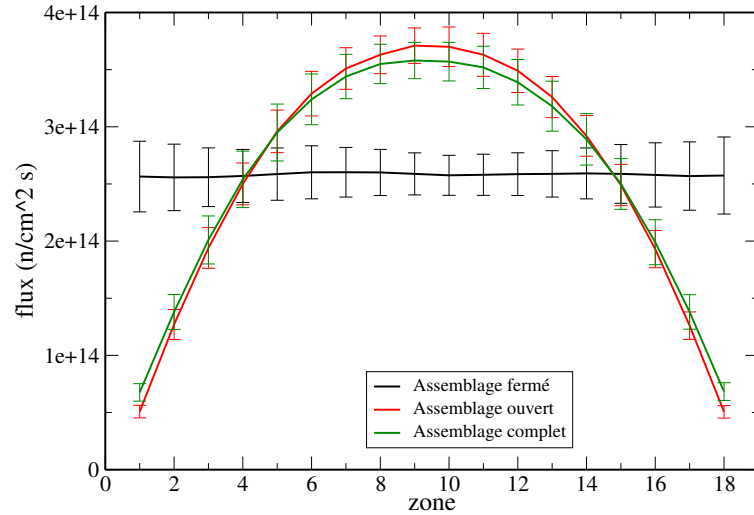


FIGURE 3.6 – Profil axial du flux neutronique pour les configurations assemblages fermé, ouvert et complet avec les barres d'erreur associées

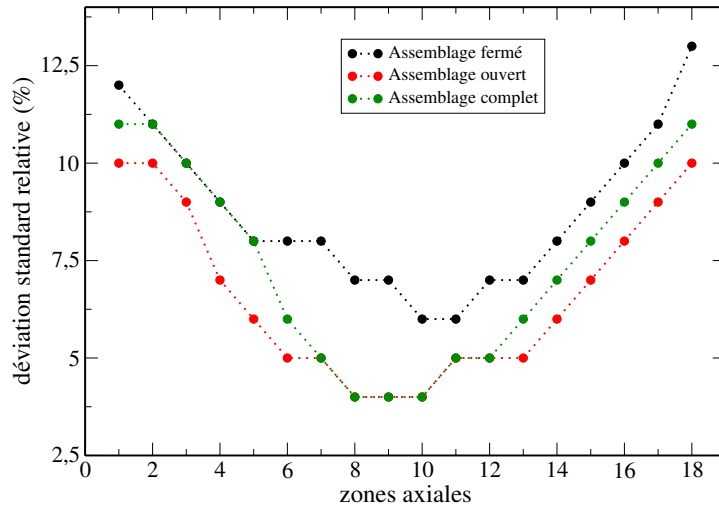


FIGURE 3.7 – Distribution axiale de l'écart-type relative du flux neutronique en début d'irradiation pour les configurations assemblages fermé, ouvert et complet

3.2.4 Paramètres des évolutions

Dans ce paragraphe nous décrivons les paramètres caractéristiques des évolutions réalisées pour l'étude des fuites neutroniques, étude qui comprend soit les fuites axiales abordées dans ce chapitre, soit les fuites radiales examinées dans les chapitres 4 et 5.

Nombre de particules, cycles actifs et cycles inactifs

Tout d'abord, afin d'avoir une convergence de la source de neutrons et du k_{eff} , nous utilisons 10^6 neutrons sources, répartis en 20 cycles inactifs, 100 cycles actifs et 8333 particules par cycle. Avec ces valeurs, l'écart-type de l'estimateur du k_{eff} est d'environ 70 pcm. Les géométries utilisées pour l'étude des fuites radiales et du voisinage, qui sont détaillées dans les chapitres 4 et 5, nécessitent un nombre différent de neutrons sources, à cause de leur importante extension spatiale.

Puissance thermique

Pour chaque assemblage *fermé*, *ouvert* et *complet*, une puissance thermique constante de 16 MW_{th} environ a été utilisée. Pour la configuration *cube*, la puissance est 18 fois plus faible (mais la puissance volumique est exactement la même, comme nous l'avons fixée). Cette puissance correspond à la puissance moyenne vue par un assemblage situé dans le cœur d'un REP900.

Une petite remarque doit être faite : si la géométrie est constituée de plusieurs assemblages dont seulement un évolue, la puissance thermique à déclarer dans le fichier MURE est exclusivement celle de l'assemblage qui évolue. Cette valeur de puissance est équivalente à la puissance dégagée par tous les crayons présents évoluant dans la géométrie. La distinction entre cellules évoluant ou non évoluant est traitée dans l'analyse du voisinage du chapitre 4.

Autres options

L'utilisation de l'option *Multigroupe* a été choisie, avec un binning en énergie deux fois plus fin que celui par défaut (voir § 2.4.2.2) soit 35 800 groupes en énergie au lieu de 17 900. La librairie prioritaire de la base des données des sections efficaces est ENDFB 7.1.

3.3 Comparaison des configurations *assemblages ouvert et complet* avec l'*assemblage fermé*

Dans ce paragraphe nous analysons les résultats des 80 simulations indépendantes réalisées pour les quatre configurations d'étude. Tout d'abord, les écarts entre les inventaires isotopiques totaux des configurations *assemblage ouvert* et *assemblage complet* avec ceux de l'*assemblage fermé* en fin d'irradiation, c'est-à-dire à 40 GWj/t, sont présentés. Les isotopes considérés sont les deux fissiles principaux, ^{235}U et ^{239}Pu , quelques isotopes du plutonium, ^{240}Pu , ^{241}Pu et ^{242}Pu , et des actinides mineurs, comme l' ^{241}Am , l' ^{243}Am et le ^{244}Cm . Cette comparaison est présentée dans § 3.3.1.

Une analyse plus détaillée, zone par zone, est effectuée dans § 3.3.3, où nous montrons les distributions des inventaires isotopiques en fonction du découpage axial. Des distributions non uniformes sont observées, avec des comportements assez particuliers dans les zones externes de la géométrie. Comme le montre la figure 3.6 du paragraphe précédent, les profils axiaux du flux des configurations *assemblage ouvert* et *assemblage complet* ne sont

pas plats. En conséquence, en fin d'irradiation, des niveaux de consommation de matière différents dans chaque zone sont attendus. Cependant, l'effet de spectre dû aux fuites neutroniques doit être aussi pris en considération pour expliquer ces distributions non uniformes des quantités isotopiques.

Pour vérifier que cette disparité entre les zones centrales et les zones externes ne dépende pas des différents niveaux des taux de combustion dans chacune des zones axiales, nous montrons dans § 3.3.4 les distributions des inventaires en fonction du Burn-Up local de chaque zone.

3.3.1 Écarts des inventaires isotopiques totaux en fin d'irradiation

Ce paragraphe est dédié à l'analyse des résultats de l'ensemble des simulations effectuées pour chaque configuration et à la comparaison aux résultats de la configuration de référence, c'est-à-dire l'*assemblage fermé*. Rappelons que les valeurs finales analysées sont des valeurs moyennes de 80 simulations indépendantes.

3.3.1.1 Choix de la configuration fermée comme référence

Afin d'avoir une comparaison cohérente nous avons choisi comme référence la configuration de taille réelle *assemblage fermé*. Pour nous assurer de l'équivalence entre la configuration *cube* de 20.32 cm de hauteur et celle 18 fois plus grande (configuration *assemblage fermé*), nous avons reporté dans le tableau 3.2 les écarts entre ces deux configurations. Puisque les quantités de matières ne sont pas directement comparables, nous avons multiplié chaque inventaire de la configuration *cube* par 18.

assemblage	fermé		cube		écart	
<i>Isotope</i>	valeur [g]	std [%]	valeur [g]	std [%]	valeur [%]	std [%]
^{235}U	3390.82	0.07	3390.23	0.05	-0.02	0.001
^{239}Pu	2741.59	0.10	2741.76	0.10	0.01	0.001
^{240}Pu	1177.78	0.16	1178.46	0.15	0.06	0.002
^{241}Pu	715.05	0.13	715.14	0.14	0.01	0.002
^{242}Pu	317.42	0.10	317.34	0.11	-0.03	0.002
^{241}Am	20.85	0.15	20.83	0.12	-0.11	0.002
^{243}Am	65.28	0.29	65.21	0.30	-0.11	0.004
^{244}Cm	25.87	0.28	25.82	0.27	-0.18	0.004

TABLE 3.2 – Comparaison des compositions isotopiques à 40 GWj/t pour les configurations *assemblage fermé* et *cube*

Nous observons que les écarts-types des deux configurations sont du même ordre de

grandeur. Il semble donc que les écarts de la configuration à taille réelle soient faibles comme pour la configuration *cube*. Mais ces écarts se réfèrent aux inventaires totaux. En réalité, les écarts-types dans chacune des zones axiales de l'*assemblage fermé* sont plus importants que ceux du *cube*.

La dernière colonne principale du tableau 3.2 nommée « écart » reporte les valeurs des écarts relatifs entre les deux configurations et les écarts-types correspondants. Les premiers sont calculés comme $(F - C)/C$, où F représente l'inventaire moyen de la configuration *assemblage fermé* et C l'inventaire moyen de la configuration *cube*. L'écart-type de cette différence est calculé comme dans l'expression 3.4.

$$\sigma(F/C) = \sqrt{\frac{\sigma^2(F)}{C^2} + \frac{\sigma^2(C)}{C^4} F^2} \quad (3.4)$$

Sa valeur est très faible, comme nous pouvons voir dans la dernière colonne du tableau. Nous observons que les deux configurations sont complètement équivalentes. Ainsi, nous vérifions que l'*assemblage fermé* peut servir de référence pour les comparaisons que nous effectuons dans les paragraphes suivants.

3.3.1.2 Présentation des écarts en fin de cycle

Le tableau 3.3 montre les valeurs des inventaires isotopiques en fin de cycle, à 40 GWj/t, pour les trois configurations d'assemblages de taille réelle ainsi que les incertitudes statistiques relatives. Ces estimations des incertitudes sont à comparer ensuite avec les écarts relatifs des inventaires par rapport à la configuration de référence, qui sont présentés dans le tableau 3.4.

assemblage	fermé		ouvert		complet	
<i>Isotope</i>	valeur [g]	std [%]	valeur [g]	std [%]	valeur [g]	std [%]
^{235}U	3390.82	0.07	3558.52	0.10	3468.25	0.09
^{239}Pu	2741.59	0.10	2720.84	0.10	2716.20	0.13
^{240}Pu	1177.78	0.16	1161.85	0.14	1168.85	0.14
^{241}Pu	715.05	0.13	702.11	0.16	705.66	0.16
^{242}Pu	317.42	0.10	325.23	0.12	321.23	0.11
^{241}Am	20.85	0.15	20.07	0.20	20.35	0.18
^{243}Am	65.28	0.29	69.59	0.34	67.53	0.33
^{244}Cm	25.87	0.28	29.74	0.34	28.07	0.42

TABLE 3.3 – Inventaires isotopiques et écarts-types relatifs à 40 GWj/t pour les configurations *assemblage fermé*, *ouvert* et *complet*

Pour chaque observable x^i , les différences relatives par rapport à la référence sont

calculées selon l'expression 3.5.

$$\Delta = \frac{x^i - x^{réf}}{x^{réf}} \% \quad (3.5)$$

où i représente une configuration particulière (*assemblage ouvert* ou *complet*) et *réf* celle de référence, l'*assemblage fermé*.

Les biais de simulation sont parfois importants en fonction des configurations simulées comme le montre le tableau 3.4, dans lequel nous avons reporté ces écarts relatifs pour les actinides principaux.

Isotope	$\Delta(\text{ouvert} - \text{fermé})[\%]$	$\Delta(\text{complet} - \text{fermé})[\%]$
²³⁵ U	4.95	2.28
²³⁹ Pu	-0.76	-0.93
²⁴⁰ Pu	-1.35	-0.76
²⁴¹ Pu	-1.81	-1.31
²⁴² Pu	2.46	1.20
²⁴¹ Am	-3.74	-2.40
²⁴³ Am	6.59	3.44
²⁴⁴ Cm	14.94	8.51

TABLE 3.4 – Écarts relatifs par rapport à l'assemblage fermé des inventaires isotopiques des configurations *assemblages ouvert et complet* à 40 GWj/t

La configuration *assemblage ouvert* montre des écarts importants et supérieurs aux incertitudes statistiques reportées dans le tableau 3.3 pour presque tous les isotopes considérés. Le ²³⁹Pu est le seul qui montre une différence relative par rapport à la configuration de référence de moins de 1%. Une analyse détaillée de l'évolution de cet isotope sera présentée dans § 3.3.3.

Plus particulièrement, l'assemblage ouvert montre une sous-consommation du fissile principal, avec un écart sur l'²³⁵U très élevé entre l'*assemblage ouvert* et l'assemblage entièrement réfléchi. *A priori*, l'impact sur cet isotope peut être dû aux fuites axiales des neutrons, qui s'échappent de l'assemblage en direction verticale. Les actinides mineurs pour cette configuration présentent tous des écarts importants en fin de cycle, de quelques pourcents pour les isotopes de l'américium à plus que dix pourcents pour le ²⁴⁴Cm.

La configuration avec plénum et réflecteur aux extrémités axiales montre, quant à elle, des écarts légèrement plus faibles mais toujours plus importants que les incertitudes statistiques, illustrant une vraie différence entre les modélisations des configurations *assemblage complet* et celle de référence. Nous observons que les signes des écarts relatifs du tableau 3.4 pour les deux configurations d'assemblages de taille réelle sont identiques : la configuration de référence apporte systématiquement un biais important sur les inventaires en fin de cycle.

3.3.1.3 Analyse de l'irradiation

Les écarts de compositions en fin de cycle peuvent être explicités en observant l'évolution des différents actinides principaux. Les figures 3.8, 3.9 et 3.10 représentent respectivement les évolutions des inventaires des isotopes de l'uranium, du plutonium et de l'américium en fonction du temps pour les configurations *assemblages fermé, ouvert et complet*. Le temps auquel nous avons effectué les comparaisons du paragraphe précédent, et qui correspond à un Burn-Up de 40 GWj/t, est de 1150 jours environ.

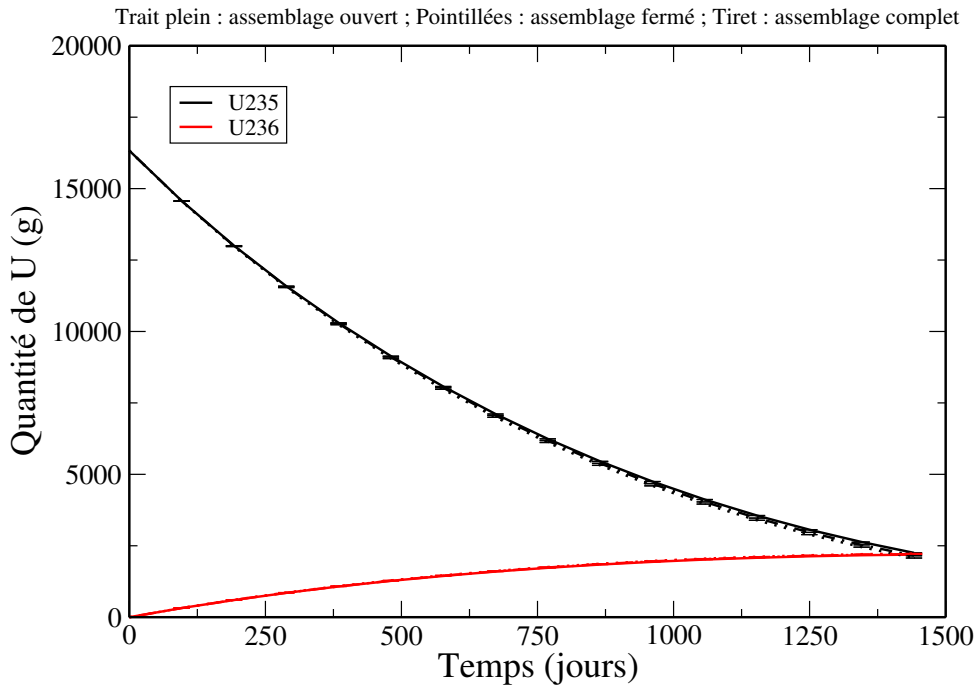


FIGURE 3.8 – Évolution en fonction du temps des inventaires d' ^{235}U et ^{236}U pour les configurations assemblage fermé, ouvert et complet

Attardons nous sur l'évolution de l' ^{235}U en fonction du temps représentée sur la figure 3.8. La quantité isotopique d' ^{235}U diminue le long de l'évolution du combustible. Le fissile principal est consommé à cause des réactions neutroniques, en particulier des fissions induites pas les neutrons, réactions qui permettent de produire la puissance thermique souhaitée. Suite à l'accumulation des produits de fission qui empoisonnent le combustible et à l'apparition du plutonium, la section efficace microscopique de fission de cet isotope diminue en fonction du temps.

Nos simulations sont réalisées à puissance constante. Cette contrainte implique que la puissance thermique totale dégagée soit constante en fonction du temps et identique pour l'ensemble des configurations réalisées. Cette puissance thermique est calculée comme la somme des taux de fission de tous les noyaux fissiles multipliés par l'énergie dégagée à chaque fission. À cause de la diminution de la quantité isotopique d' ^{235}U et de sa section efficace de fission pendant l'évolution, le flux neutronique doit augmenter pour maintenir la condition de puissance constante. Pour cette raison, le niveau du flux neutronique en fin d'irradiation est plus élevé que celui du début de cycle.

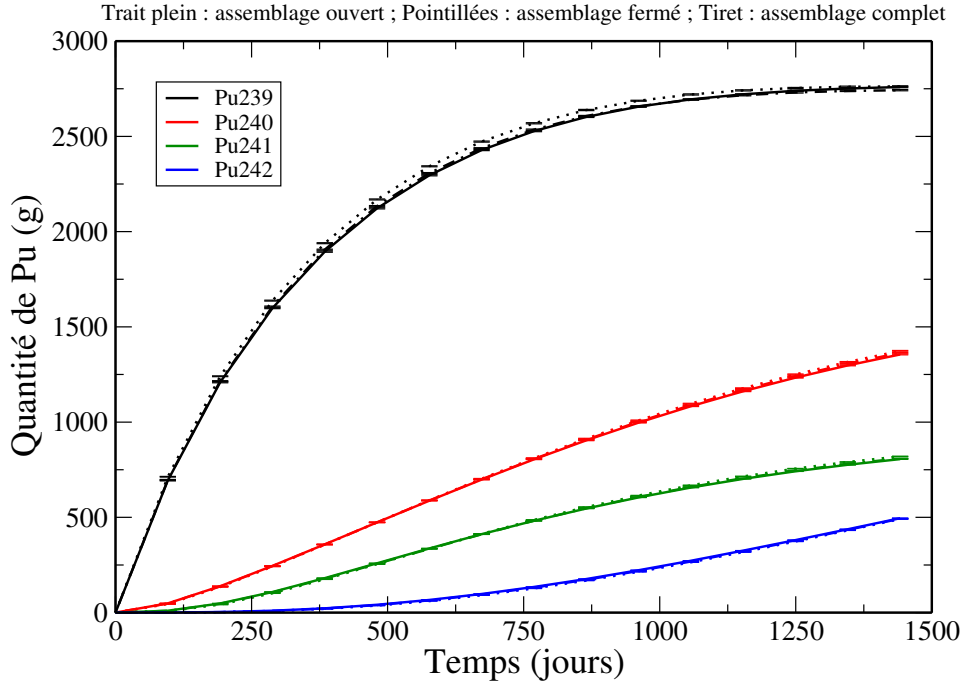


FIGURE 3.9 – Évolution en fonction du temps des inventaires du ^{239}Pu , ^{240}Pu , ^{241}Pu et ^{242}Pu pour les configurations assemblage fermé, ouvert et complet

Pendant l'évolution du combustible, le ^{239}Pu est produit. Ce noyau fissile est non négligeable dans la production de la puissance thermique dans un réacteur : près de 40% des fissions totales sont dues à ce noyau. Son évolution est montrée en noir dans la figure 3.9. La quantité isotopique du ^{239}Pu augmente de façon exponentielle jusqu'à rejoindre un plateau que nous appelons « équilibre ». Cette évolution est parfaitement conforme à celle attendue, décrite par l'équation 3.6, qui exprime le taux de variation de la quantité isotopique du ^{239}Pu dans le temps.

$$\frac{dN_{^{239}\text{Pu}}}{dt} = \sigma_{\text{capt}}^{^{238}\text{U}} N_{^{238}\text{U}} \Phi - N_{^{239}\text{Pu}} \Phi (\sigma_{\text{capt}}^{^{239}\text{Pu}} + \sigma_{\text{fiss}}^{^{239}\text{Pu}} + \sigma_{n,2n}^{^{239}\text{Pu}}) - \lambda_{^{239}\text{Pu}} N_{^{239}\text{Pu}} \quad (3.6)$$

Le niveau d'équilibre est atteint quand le taux de production est égal au taux de disparition. L'équation 3.7 montre que la quantité de ^{239}Pu à l'équilibre dépend du rapport des sections efficaces de capture de l' ^{238}U et de disparition du ^{239}Pu (la quantité d' ^{238}U peut être considérée constante).

$$\frac{dN_{^{239}\text{Pu}}}{dt} = 0 \quad (3.7)$$

$$\sigma_{\text{capt}}^{^{238}\text{U}} N_{^{238}\text{U}} \Phi = (\sigma_{\text{capt}}^{^{239}\text{Pu}} + \sigma_{\text{fiss}}^{^{239}\text{Pu}}) N_{^{239}\text{Pu}^{\text{eq}}} \Phi \quad (3.8)$$

$$N_{^{239}\text{Pu}^{\text{eq}}} = \frac{\sigma_{\text{capt}}^{^{238}\text{U}} N_{^{238}\text{U}} \Phi}{(\sigma_{\text{capt}}^{^{239}\text{Pu}} + \sigma_{\text{fiss}}^{^{239}\text{Pu}}) \Phi} \quad (3.9)$$

L'augmentation de la quantité du ^{239}Pu dans le temps influence aussi l'évolution de

^{235}U . En effet, au fur et à mesure que le ^{239}Pu croît, la concentration du noyau fissile augmente et compense la diminution de ^{235}U : à cause d'une section efficace plus importante ($\sigma_{fiss}^{239}\text{Pu} = 740\text{ b}$ contre $\sigma_{fiss}^{235}\text{U} = 580\text{ b}$), les fissions ont lieu préférentiellement sur le ^{239}Pu plutôt que sur ^{235}U . L'augmentation du flux est donc légèrement ralentie et impacte à son tour la disparition de ^{235}U .

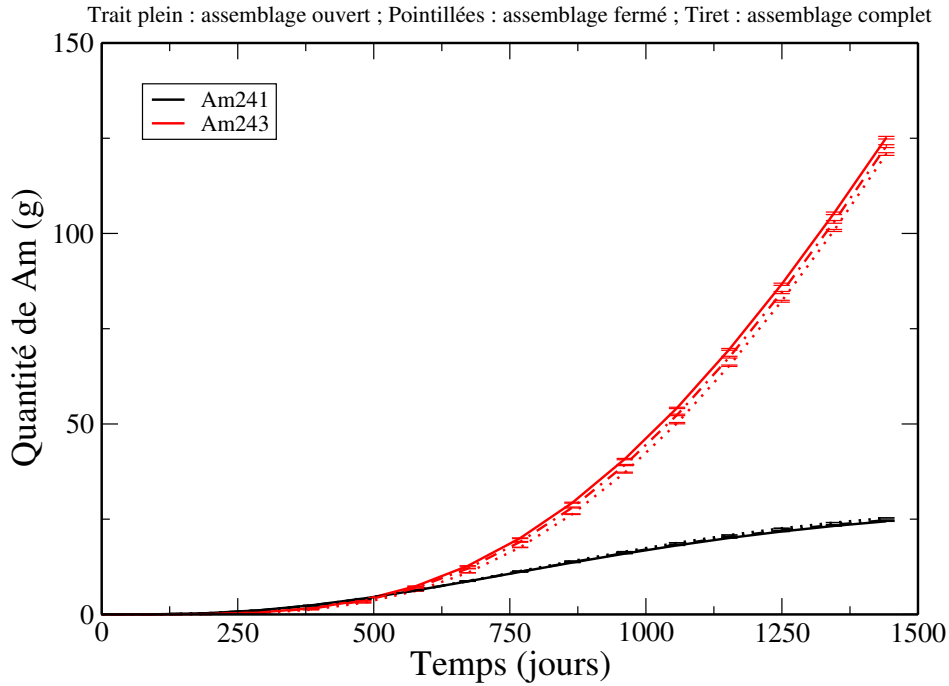


FIGURE 3.10 – Évolution en fonction du temps des inventaires de l' ^{241}Am et de l' ^{243}Am pour les configurations assemblage fermé, ouvert et complet

Les autres isotopes du ^{239}Pu sont produits par une chaîne de réactions de captures neutroniques. En ce qui concerne les isotopes de l'américium, l' ^{243}Am est généré par décroissance du ^{243}Pu , produit par la capture neutronique sur le ^{242}Pu . Puisque le temps de demi-vie du ^{243}Pu est faible, presque tout le ^{243}Pu se transforme en ^{243}Am . L' ^{241}Am est produit par décroissance du ^{241}Pu . Sa quantité isotopique augmente considérablement pendant la phase de refroidissement des assemblages usés dans laquelle le combustible n'est plus soumis à un flux neutronique.

3.3.2 Biais sur l'estimation du Burn-Up maximal atteignable

À partir des évolutions réalisées pour les 3 configurations *assemblages fermé, ouvert et complet*, nous avons estimé le Burn-Up maximum atteignable par les assemblages et calculé selon la méthode explicitée dans le chapitre 2. L'évolution d'un assemblage isolé peut être utilisée pour estimer la valeur du taux de combustion maximal que l'assemblage peut atteindre. L'expression de l'estimation du coefficient de multiplication du cœur, qui

est une moyenne sur les assemblages, est rappelée par l'équation 3.10 :

$$\langle k_{\infty}(t) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N k(t + i t_R) \quad (3.10)$$

où t_R est la durée de chaque cycle et N est le nombre de rechargement. Les évolutions des coefficients de multiplication des différentes configurations d'assemblages sont représentées sur la figure 3.11.

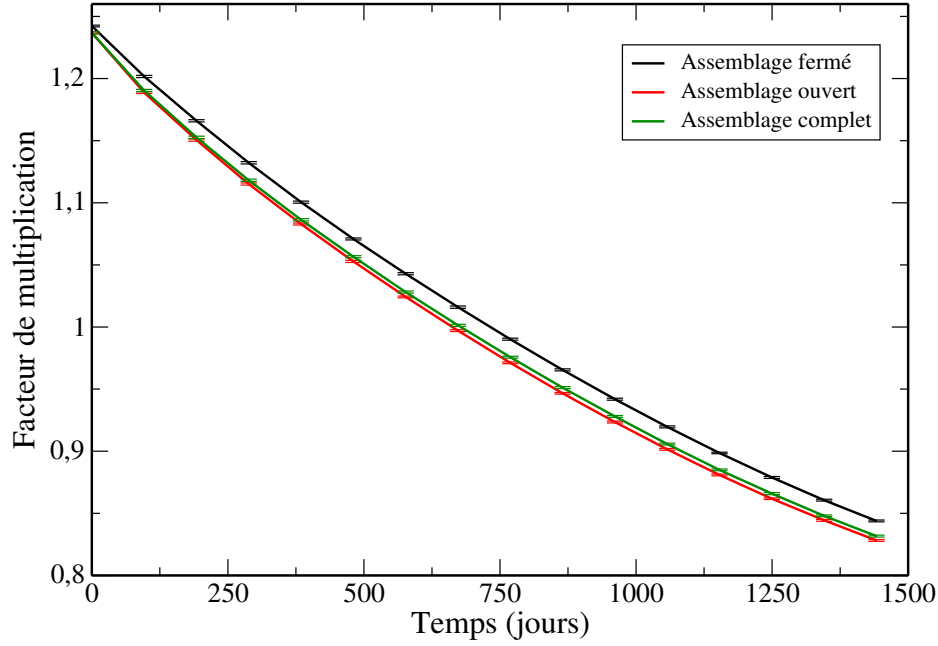


FIGURE 3.11 – Évolution en fonction du temps du coefficient de multiplication pour les configurations assemblage fermé, ouvert et complet avec les barres d'erreur associées

Il est ainsi possible d'estimer le temps T_{tot} où les assemblages les plus récents ne seraient plus suffisamment critiques pour compenser les assemblages les plus vieux. En effet, à T_{tot} l'ensemble des assemblages constituant le cœur d'un réacteur est juste assez critique pour compenser les fuites neutroniques et les absorptions parasites. Cette contrainte correspond à une valeur fixée de réactivité minimale en fin d'irradiation, exprimée par la valeur de k_{seuil} .

Comme expliqué dans le chapitre précédent, la valeur de k_{seuil} doit dépendre du niveau de fuites simulées, de la concentration en bore, ainsi que d'autres paramètres. Les coefficients de multiplication estimés par MCNP en début d'irradiation pour les trois configurations sont très similaires. Nous faisons donc l'hypothèse que les pertes de neutrons dues aux fuites axiales ne perturbent pas la valeur du k_{seuil} . Le k_{seuil} pour l'estimation du Burn-Up maximal atteignable des trois configurations que nous avons choisi est égal à 1.039, valeur de référence présente dans la littérature.

Le tableau 3.5 reporte les valeurs des Burn-Up max atteignables pour les assemblages des trois configurations pour deux choix de nombres de rechargements N . La valeur de BU_{max} la plus importante est celle de la configuration *assemblage fermé*, suivie par celle

de la configuration *assemblage complet*. Les écarts relatifs par rapport à la configuration de référence sont listés dans le tableau 3.6.

<i>assemblage</i>	$BU_{max}[MWj/t], N = 3$	$BU_{max}[MWj/t], N = 4$
<i>fermé</i>	33 364	35 876
<i>ouvert</i>	30 532	32 568
<i>complet</i>	31 145	33 221

TABLE 3.5 – BU_{max} atteignable pour les 3 configurations assemblages fermé, ouvert et complet pour deux types de rechargement, par tiers et par quarts

$\Delta(\text{ouvert} - \text{fermé})[\%]$	$\Delta(\text{complet} - \text{fermé})[\%]$
-9.22	-7.40

TABLE 3.6 – Écarts entre les BU_{max} atteignables

Les écarts des BU_{max} estimés sont très importants – presque dix pourcents – pour la configuration *assemblage ouvert* comme pour l'*assemblage complet*. Ces écarts pourraient être significatifs pour les études de scénarios que nous avons présentées dans § 1.1.2. Pour les simulations de parc complet, une estimation correcte du temps total d'irradiation est fondamentale pour l'identification du vecteur isotopique du combustible utilisé après son irradiation en réacteur. Le combustible irradié peut en effet être réutilisé, suite à retraitement, dans des réacteurs de type différent, dont les paramètres caractéristiques (temps de démarrage, composition du combustible à l'entrée) dépendent de l'étape d'irradiation précédente en REP.

3.3.3 Analyse du profil axial de l'évolution isotopique

Ce paragraphe est dédié à l'analyse des inventaires isotopiques en fonction des zones axiales. Pour comprendre l'origine des écarts (par rapport à la configuration de référence *assemblage fermé*) montrés dans le tableau 3.4, nous avons regardé la distribution axiale des inventaires à 40 GWj/t pour les 3 configurations *assemblages fermé, ouvert et complet*.

La figure 3.12 montre le profil axial de la quantité d' ^{235}U pour les 3 configurations en fin de vie du combustible.

3.3.3.1 Assemblage fermé

Comme supposé, pour l'*assemblage fermé* nous observons une consommation uniforme du fissile, indépendante de la position axiale, conséquence directe du profil du flux neutronique qui reste plat pendant toute l'évolution. La figure 3.13 montre l'évolution du profil axial du flux moyenné sur l'ensemble des simulations indépendantes de l'*assemblage fermé* pour les 13 pas de temps (jusqu'à 40 GWj/t). Le flux neutronique augmente progressive-

ment tout au long de l'évolution, comme nous l'avons vu dans § 3.3.1. À cause des conditions de réflexion sur l'ensemble des parois de l'assemblage, le profil du flux neutronique reste indépendant du zonage axial.

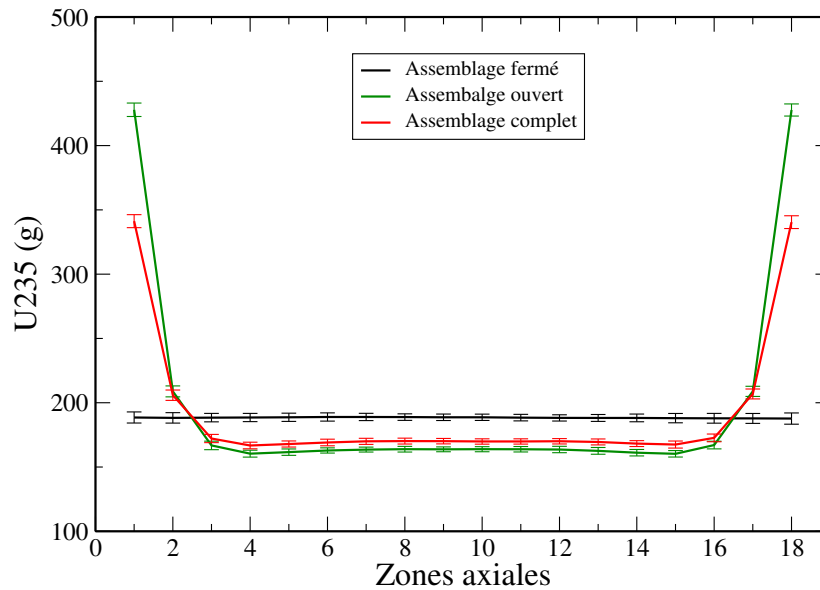


FIGURE 3.12 – Distribution d' ^{235}U en fonction des zones axiales pour les 3 configurations assemblages fermé, ouvert et complet avec les barres d'erreur associées à 40 GWj/t

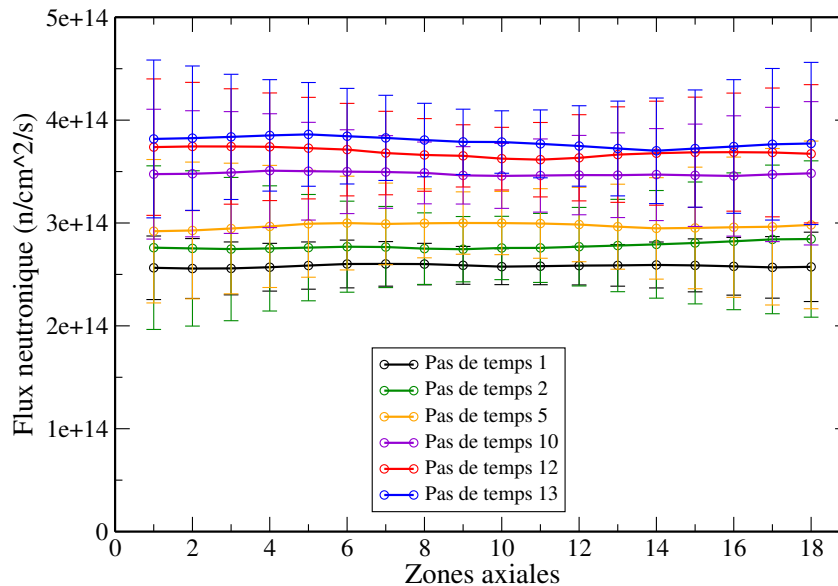


FIGURE 3.13 – Évolution du profil axial du flux neutronique de la configuration assemblage fermé avec les barres d'erreur associées pour les pas de temps numéros 1, 3, 5, 10, 12 et 13

Au contraire, pour les configurations *assemblages ouvert* et *complet*, la consommation du fissile principal n'est pas uniforme. Une sous-consommation d' ^{235}U est présente dans les zones externes, particulièrement dans la numéro 1 et la numéro 18 alors que dans les zones centrales (entre la numéro 3 et la numéro 17) la distribution de la quantité de fissile

est presque plate, comme nous pouvons observer dans la figure 3.12.

3.3.3.2 Assemblage ouvert

Dans cette configuration, la variation d' ^{235}U sur les zones externes est très importante, avec des variations de plus de 100% par rapport à la valeur moyenne, calculée comme la moyenne arithmétique de la quantité de fissile sur les 18 zones axiales. Les zones « centrales », au contraire, montrent une sur-consommation d' ^{235}U , avec des quantités isotopiques de 15% inférieures à la moyenne. Ce profil pourrait s'expliquer dans un premier temps par un effet de la répartition axiale du flux. En effet, le profil axial du flux neutronique en début d'irradiation n'est pas uniforme : il est piqué au centre pour diminuer vers les extrémités de l'assemblage. Rappelons que dans notre configuration les distributions axiales de la température et de la densité du modérateur ne sont pas prises en compte. Cette distribution spatiale des neutrons impactera donc la consommation d'uranium et la production de plutonium. L'évolution du profil de flux neutronique en fonction du temps est représentée dans la figure 3.14 et montre l'évolution progressive du flux dans les zones centrales de l'assemblage qui tend à s'uniformiser. À cause de cette répartition spatiale, la consommation du fissile est très faible sur les bords et plus élevée au centre.

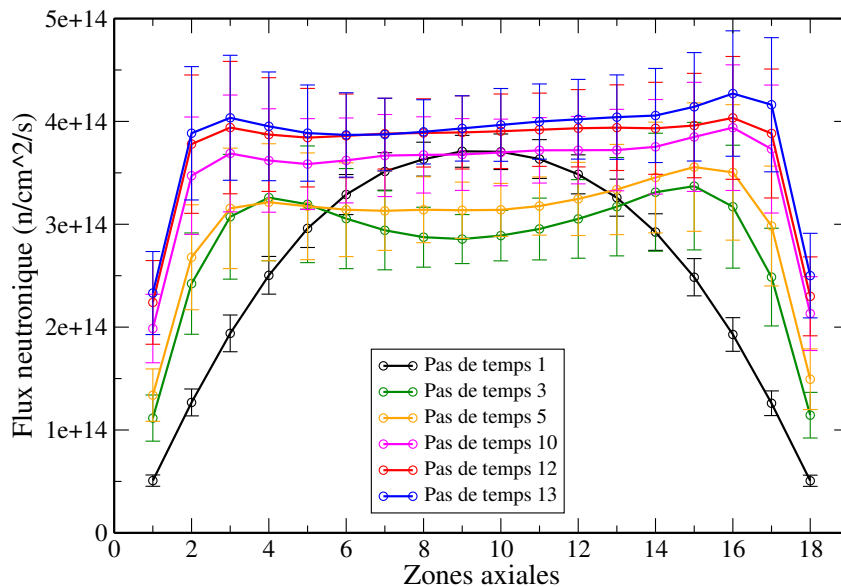


FIGURE 3.14 – Évolution du profil axial du flux neutronique de la configuration assemblage ouvert avec les barres d'erreur associées pour les pas de temps numéros 1, 3, 5, 10, 12 et 13

3.3.3.3 Assemblage complet

L'*assemblage complet* montre des variations d'inventaires significatives dans les zones 1 et 18, avec des différences de presque 70% par rapport à la valeur moyenne. Encore une fois, ces écarts devraient pouvoir s'expliquer par un effet de flux. Le profil axial du flux neutronique, qui est présenté dans la figure 3.15, montre une évolution proche de

celle de l'*assemblage ouvert*, conduisant à des effets similaires sur les disparités axiales de production et de disparition des différents actinides.

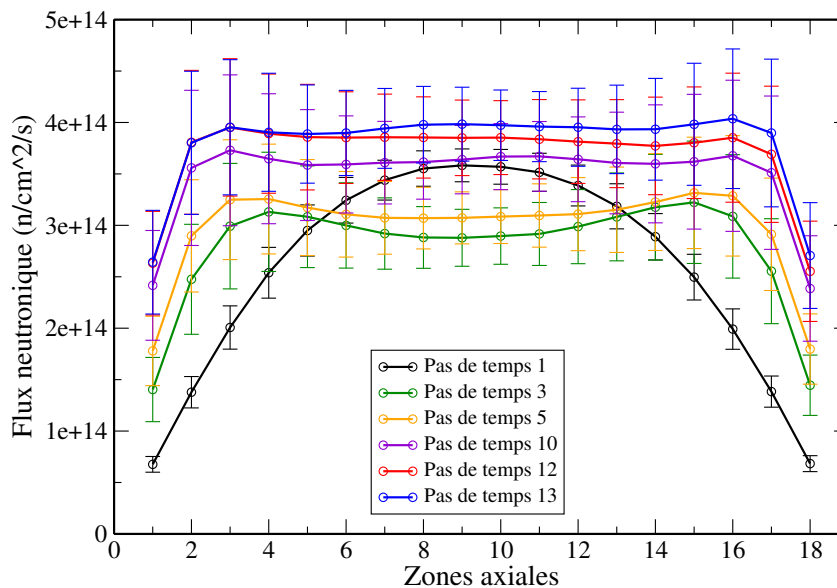


FIGURE 3.15 – Évolution du profil axial du flux neutronique de la configuration assemblage complet avec les barres d'erreur associées pour les pas de temps numéros 1, 3, 5, 10, 12 et 13

3.3.3.4 Évolution du plutonium

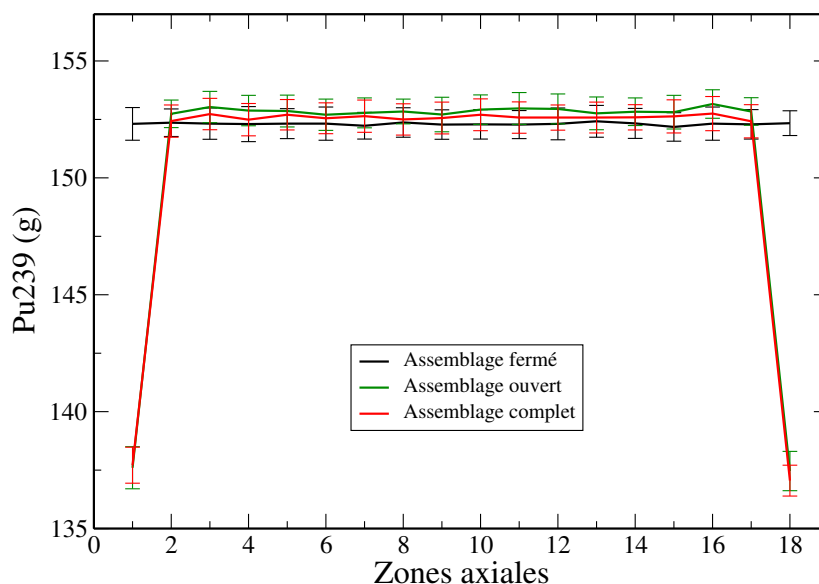


FIGURE 3.16 – Distribution du ^{239}Pu en fonction des zones axiales pour les 3 configurations assemblage fermé, ouvert et complet avec les barres d'erreur associées à 40 GWj/t

Regardons les profils axiaux du ^{239}Pu pour les 3 configurations. Encore une fois, pour l'*assemblage fermé*, la distribution de la quantité isotopique est uniforme en fonction des zones axiales de l'assemblage. Au contraire, les *assemblages ouvert et complet* présentent

une diminution importante de la quantité isotopique dans les zones périphériques de l'assemblage. Comparée aux variations d'inventaire de l' ^{235}U , cette variation est relativement faible : la quantité de ^{239}Pu dans les zones 1 et 18 des configurations *assemblages ouvert* et *complet* est seulement de 8% inférieure par rapport à la valeur moyenne. Cependant, cette différence d'évolution des zones externes est significative puisque bien au-delà des barres d'erreurs statistiques.

Nous représentons l'évolution de la distribution du ^{239}Pu dans la figure 3.17. La quantité isotopique du ^{239}Pu augmente rapidement vers une valeur qui devient constante dans les derniers pas de temps représentés, illustrant la montée à l'équilibre de cet isotope. Cet équilibre est atteint après 1000 jours d'irradiation environ. Puisque le Burn-Up de 40 GWj/t choisi pour comparer les inventaires correspond à 1150 jours, les écarts du ^{239}Pu du tableau 3.4 entre les différentes configurations sont moins importants que pour les autres isotopes. Comme le ^{239}Pu est à l'équilibre dans chacune des configurations et des zones axiales, les seules écarts résultent des effets de spectre impactant les différentes sections efficaces qui gouvernent l'équilibre.

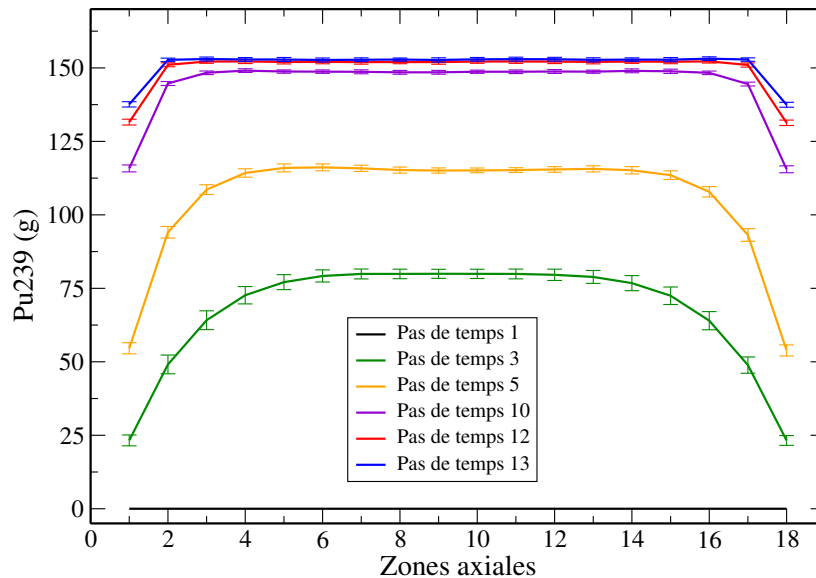


FIGURE 3.17 – Distribution du ^{239}Pu en fonction des zones axiales pour plusieurs pas de temps pour la configuration *assemblage ouvert*

En ce qui concerne les isotopes ^{241}Pu et ^{241}Am , représentés sur la figure 3.18 respectivement à gauche et à droite, la distribution de la quantité isotopique est similaire au ^{239}Pu . La masse de ^{241}Pu et d' ^{241}Am pour chacune des deux configurations *assemblages ouvert* et *complet* est plus faible dans les zones externes 1 et 18 par rapport aux zones du centre qui montrent toutes la même valeur.

Globalement, nous observons deux comportements différents selon les zones axiales : un comportement typique des zones sur les bords (zones 1 et 18), où les inventaires diffèrent beaucoup de la valeur moyenne, et un caractéristique des zones centrales, où les quantités isotopiques ont des valeurs uniformes et plus proches de la moyenne.

Une distribution non uniforme du profil axial du flux implique une consommation d'iso-

topes différente pour chaque zone. En conséquence, en fin d'irradiation, les taux de combustion dans les *assemblages ouvert et complet* ne sont pas constants en fonction de l'axe z . Les zones externes 1 et 18, dans lesquelles la consommation du fissile ^{235}U est moins élevée, présentent un taux de combustion inférieur comparé au taux de combustion moyen de l'assemblage. Cette problématique est traitée dans le paragraphe suivant, où nous réalisons une opération de normalisation des inventaires au taux de consommation local de chaque zone.

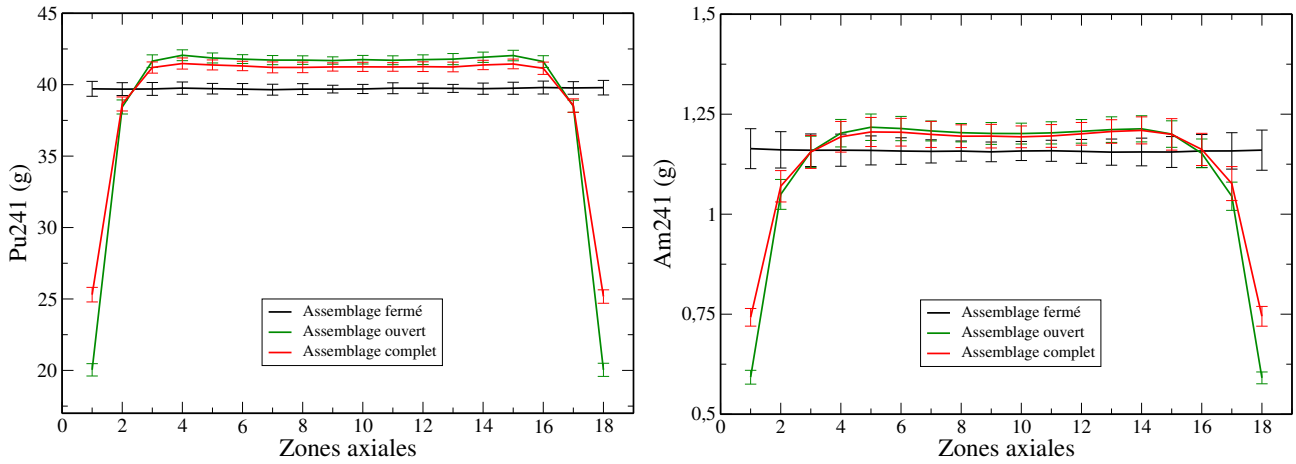


FIGURE 3.18 – Distribution du ^{241}Pu (à gauche) et de l' ^{241}Am (à droite) en fonction des zones axiales pour les 3 configurations assemblages fermé, ouvert et complet avec les barres d'erreur associées à 40 GWj/t

3.3.4 Analyse en fonction du Burn-Up local

Comme nous l'avons montré dans le paragraphe précédent, le profil axial du flux neutronique impacte la distribution des inventaires dans les zones axiales. Le flux neutronique de la configuration *assemblage fermé*, représenté sur la figure 3.13, est uniforme selon l'axe z et le reste pendant toute l'évolution. La distribution des inventaires en fin d'irradiation est donc uniforme pour tous les isotopes considérés dans notre analyse. Au contraire, pour des raisons physiques, les flux neutroniques des *assemblages ouvert et complet* montrent des profils axiaux non uniformes : ainsi, dans chacune des zones axiales la valeur du flux est différente. Même si pendant l'évolution les flux neutroniques s'uniformisent au centre des assemblages, comme montré sur les figures 3.14 et 3.15, les quantités isotopiques des zones externes 1 et 18 en fin d'irradiation diffèrent des quantités des zones centrales. En effet, une distribution non uniforme du profil axial du flux implique dans l'évolution une consommation d'isotopes différente pour chaque zone. En conséquence, en fin d'irradiation, les taux de combustion dans les *assemblages ouvert et complet* ne sont pas constants en fonction de l'axe z .

Pour s'assurer que cette disparité ne soit pas causée uniquement par une distribution des taux de combustion (et donc des énergies dégagées par zone axiale) non uniforme, nous

avons représenté les inventaires isotopiques en fonction de ce taux de combustion local pour chaque zone. Nous appelons ce taux de combustion le Burn-Up local, qui est ainsi non constant en fonction des zones axiales pour les configurations *assemblages ouvert* et *complet*.

Dans ce paragraphe, les inventaires isotopiques des configurations *assemblages ouvert* et *complet* sont à nouveau comparés par rapport à ceux de l'*assemblages fermé*, mais suite à une renormalisation au taux de combustion local.

3.3.4.1 Comparaison des inventaires en fonction du Burn-Up local

Nous allons maintenant comparer les inventaires isotopiques des deux fissiles principaux normalisés au Burn-Up local de certaines des 18 zones axiales pour les 3 configurations. À partir des distributions axiales des quantités isotopiques montrées dans § 3.3.3, nous pouvons diviser l'assemblage en 3 parties distinctes : les zones périphériques, numéros 1 et 18, les zones au centre, de la numéro 3 à la numéro 16, et les deux zones de transition, numéros 2 et 17.

La figure 3.19 montre l'évolution du ^{239}Pu normalisée au Burn-Up local dans les zones 1 et 18, 2 et 17 et dans la zone 9 pour la configuration *assemblage ouvert*. Tout d'abord, observons la symétrie attendue entre les couples des zones périphériques 1 et 18 et celles de transition 2 et 17, dont les courbes se superposent parfaitement. L'évolution de la zone 9 représente les évolutions de toutes les autres zones qui se trouvent dans la région asymptotique, c'est-à-dire entre les zones 3 et 16. En effet, les zones 3 à 16 montrent des évolutions isotopiques identiques lorsqu'elles sont exprimées en fonction du Burn-Up local, nous qualifierons ces évolutions « asymptotiques » dans la suite.

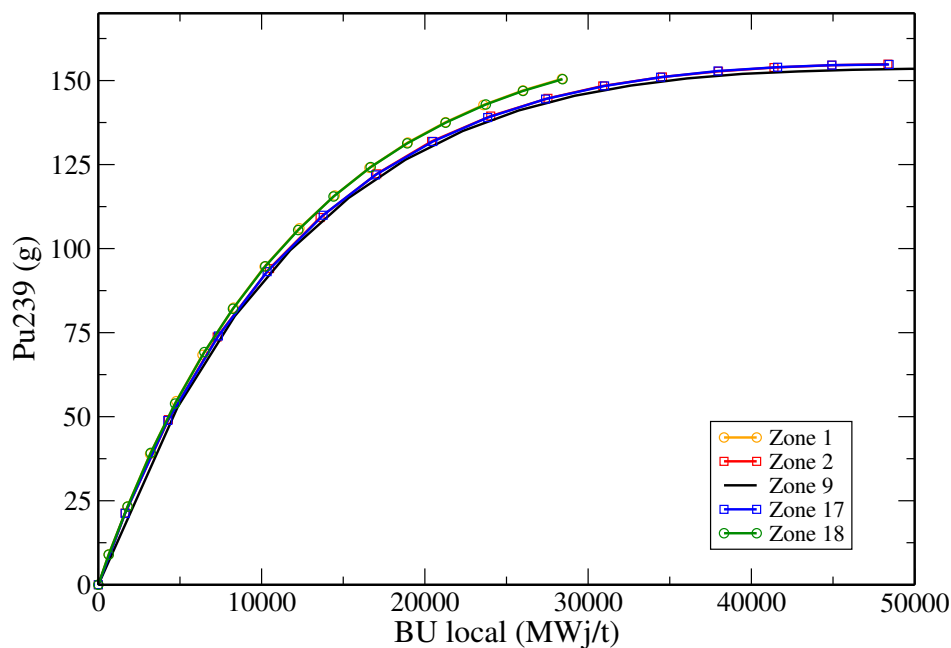


FIGURE 3.19 – Évolution du ^{239}Pu en fonction du Burn-Up local de la configuration assemblage ouvert pour les zones 1, 2, 9, 17 et 18

De plus, les valeurs finales des Burn-Up de chacune des zones sont très différentes pour les trois types de zones. La zone 9 atteint une valeur au-delà de 50 000 MWj/t . Le Burn-Up final des zones 2 et 17 est proche de celui des zones centrales, tandis que pour les zones externes cette valeur est beaucoup plus faible (inférieur à 33 GWj/t). En fin d'irradiation, les taux de combustion des zones extrêmes en haut et en bas de l'assemblage sont, en cas de fuites axiales de neutrons, significativement plus faibles que le taux de combustion moyen.

La comparaison des inventaires à la même valeur de Burn-Up local, réalisée à partir de la figure 3.19 qui représente uniquement l'*assemblage ouvert*, nous montre un écart important entre l'inventaire du ^{239}Pu de la zone 1 et celui de la zone 9. Ceci illustre un effet de spectre neutronique des fuites localisé proche des conditions limites. La figure 3.20 reporte les évolutions du ^{239}Pu normalisées au Burn-Up local des zones 1 (à gauche) et 9 (à droite) pour les 3 configurations considérées. Dans la figure de gauche, la courbe noire, représentant l'inventaire du ^{239}Pu de l'*assemblage fermé*, se détache des courbes verte et rouge. Comme pour l'*assemblage ouvert* de la figure 3.19, l'*assemblage complet* présente un Burn-Up local maximum plus faible pour l'inventaire dans les zones périphériques. Cette valeur de Burn-Up est de 28 000 MWj/t environ pour l'*assemblage ouvert* et de 34 000 MWj/t pour l'*assemblage complet*. Finalement, l'écart par rapport à la configuration de référence n'est pas négligeable. Au contraire, les courbes des inventaires des 3 configurations de la zone 9 sont confondues : à Burn-Up local égal, les quantités de ^{239}Pu sont identiques. Les configurations *assemblages ouvert et complet* montrent donc un comportement asymptotique dans les zones centrales comme nous avons pu l'observer précédemment.

3.3.4.2 Illustration des effets de spectres

La figure 3.21 représente la distribution axiale des inventaires de ^{239}Pu à gauche et de ^{235}U à droite pour les trois configurations à un Burn-Up local de 28 400 MWj/t . Cette valeur correspond au Burn-Up rejoint par la zone 1 de la configuration ouverte à la fin de la simulation. Nous avons choisi cette valeur parce que c'est la plus petite des valeurs de Burn-Up local en fin d'irradiation. Encore une fois, nous pouvons distinguer 3 parties : la zone asymptotique au centre, les deux zones externes et les deux zones de transition. Comme, dans cette figure, l'ensemble des zones est considéré au même Burn-Up local, le niveau des quantités asymptotiques est égal pour toutes les configurations. L'échelle de la figure à droite est plus fine que celle à gauche ; pour cette raison, nous avons l'impression que les valeurs de ^{235}U des zones 3 – 16 soient beaucoup plus élevées pour la configuration *assemblage fermé* par rapport aux autres. En réalité, l'écart entre les quantités isotopiques des *assemblages ouvert et complet* est compatible avec les incertitudes statistiques reportées dans le tableau 3.3, comme pour l'inventaire du ^{239}Pu .

La forme de la distribution des inventaires dans les zones externes de la configuration *assemblages ouvert* est opposée à celle de l'*assemblages complet* et diffère des observations issues des figures 3.12 et 3.16. À 28.4 GWj/t , la quantité de ^{235}U de l'*assemblage complet* dans les zones 1 et 18 est moins élevée par rapport à celle de l'*assemblage ouvert*. En effet, le modérateur présent juste au-dessus et au-dessous de l'assemblage de la configuration *assemblage complet* thermalise les régions périphériques de l'assemblage. Le fissile ^{235}U est

donc plus consommé dans ces zones et la quantité de ^{239}Pu produite est plus faible.

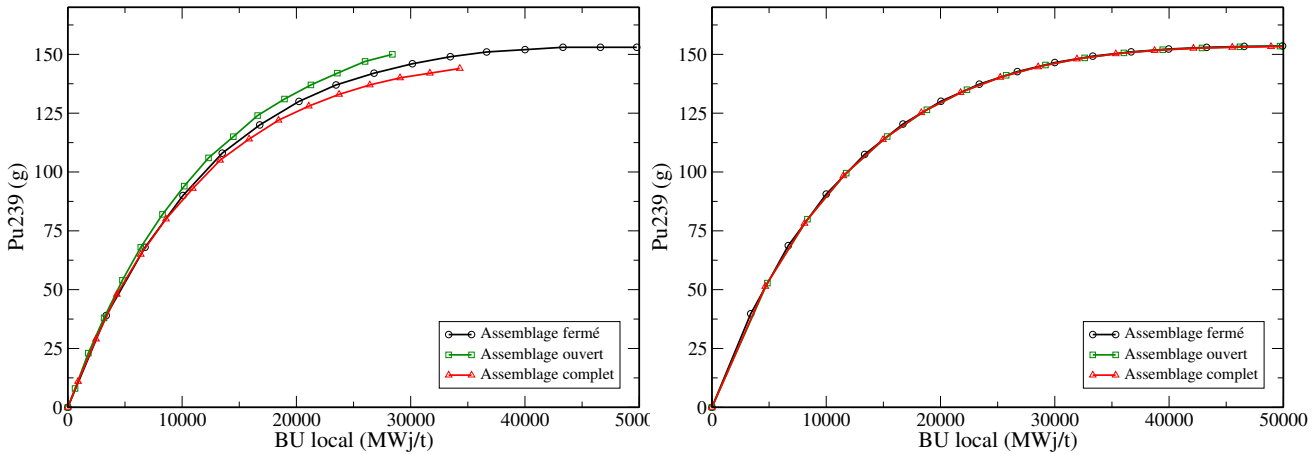


FIGURE 3.20 – Évolution du ^{239}Pu en fonction du Burn-Up local pour les 3 configurations assemblages fermé, ouvert et complet dans la zone 1 (à gauche) et dans la zone 9 (à droite)

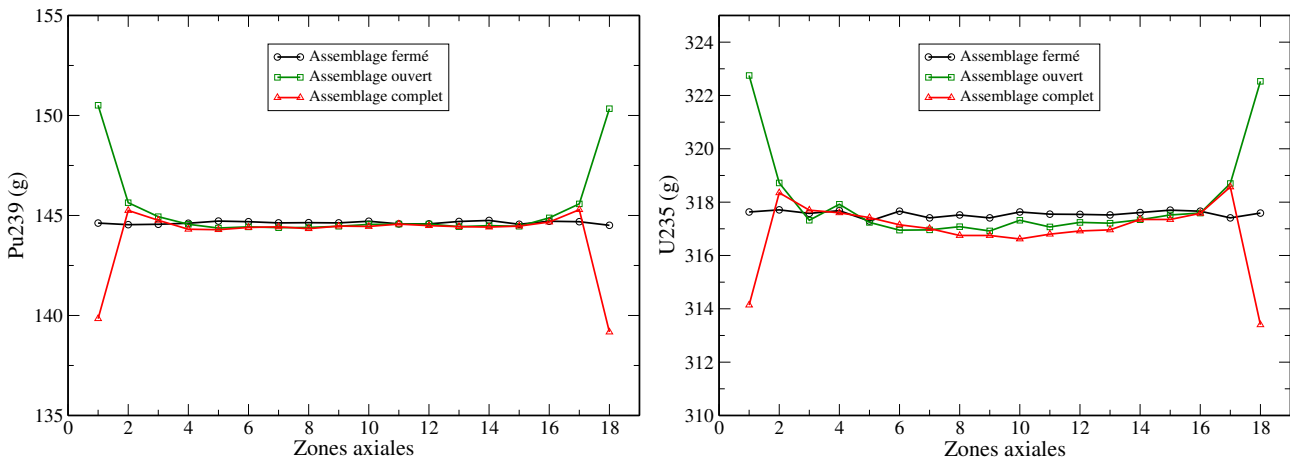


FIGURE 3.21 – Distribution du ^{239}Pu (à gauche) et de l' ^{235}U (à droite) en fonction des zones axiales pour les 3 configurations assemblages fermé, ouvert et complet au Burn-Up local de 28 400 MWj/t

En ce qui concerne l'assemblage ouvert, nous remarquons dans les zones 1 et 18 une consommation moins importante d' ^{235}U et une production plus élevée de ^{239}Pu par rapport à l'assemblage complet. La variation de la distribution des inventaires doit être liée à un effet de spectre. Dans le cas de l'assemblage ouvert, il s'agit d'un effet de durcissement de spectre. Cela signifie que les neutrons dans les zones périphériques sont, en moyenne, plus énergétiques que les neutrons au centre, résultant d'un durcissement global du spectre neutronique moyen sur l'ensemble de l'assemblage. Il en résulte une consommation d' ^{235}U plus petite et une production de ^{239}Pu plus élevée par rapport à la configuration de référence. Dans les deux cas, l'effet de spectre est localisé dans les zones externes, alors que toute la partie au centre des assemblages peut être considérée comme une seule zone. L'explication de ces effets de spectre est donnée dans les détails dans le paragraphe suivant.

3.4 Analyse neutronique en début de cycle

Dans les paragraphes précédents, après la description du benchmark choisi et des configurations étudiées § 3.2.1 et 3.2.2, nous avons estimé les écarts en fin de cycle des inventaires isotopiques principaux des configurations *assemblages ouvert* et *complet* par rapport à l'*assemblage fermé*, configuration de référence § 3.3.1. Nous avons remarqué des écarts importants pour l' ^{235}U et pour les actinides mineurs analysés, les isotopes 241 et 243 de l'américium et le ^{244}Cm (tableau 3.4). Afin de comprendre les raisons de ces écarts, nous avons regardé la distribution des quantités isotopiques en fin de cycle en fonction des 18 zones axiales § 3.3.3. À partir de la figure 3.12 par exemple, nous avons observé des distributions axiales des inventaires isotopiques non uniformes. Nous pouvons diviser les zones axiales en trois groupes : les deux zones périphériques (1 et 18), qui montrent des valeurs d'inventaires très différentes par rapport aux valeurs moyennes, les deux zones de transition (2 et 17) et toute la partie centrale qui peut être groupée sous une seule zone « asymptotique », avec une distribution isotopique uniforme. Ce niveau asymptotique est différent pour chacune des configurations. Enfin, pour nous assurer que ces variations ne soient pas causées seulement par un différent taux de combustion dans chaque zone axiale, nous avons tracé les distributions des inventaires d' ^{235}U et de ^{239}Pu en fonction du Burn-Up local § 3.3.4. Nous nous sommes aperçus que, en renormalisant de cette façon, les inventaires des fissiles se superposent dans la zone centrale asymptotique pour les trois configurations. Au contraire, dans les zones périphériques, un effet de spectre est présent et très important. Ce paragraphe est dédié à l'analyse de cet effet de spectre localisé sur les zones périphériques de l'assemblage, les numéros 1 et 18.

3.4.1 Analyse du spectre neutronique

Tout d'abord, rappelons la distinction entre flux neutronique et spectre de neutrons. Le premier est une grandeur volumique représentant une densité de neutrons par $\text{cm}^2 \text{ s}$, alors que le spectre neutronique est la distribution de la population de neutrons en fonction de leur énergie. Afin d'investiguer l'effet de spectre caractéristique des configurations *assemblage ouvert* et *assemblage complet* observé dans le paragraphe précédent, nous utilisons le rapport flux rapide sur flux thermique indiqué par Φ_1/Φ_2 . Les numéros 1 et 2 représentent respectivement les groupes énergétiques rapide et thermique. Le flux thermique Φ_2 est donc l'intégral du flux neutronique $\Phi(\vec{r}, E)$, fonction de l'espace et de l'énergie, sur l'ensemble des énergies des neutrons thermiques, à partir de l'énergie minimale $E_{\min}$ à une énergie de séparation des deux groupes, nommée E_c . Le flux rapide Φ_1 est donné par l'intégral du flux neutronique de l'énergie E_c à l'énergie maximale de 10 MeV. La coupure en énergie entre groupe thermique et groupe rapide que nous avons utilisée est celle de référence, égale à 0.625 eV.

À partir de ce ratio entre les deux flux, nous obtenons des informations concernant le spectre neutronique dans l'assemblage. Si le rapport Φ_1/Φ_2 est faible, le flux thermique est plus important que le flux rapide. En conséquence, le spectre est dit thermique, modéré ou doux. Au contraire, le spectre est défini rapide ou dur. Nous ne sommes pas vraiment

intéressés par la valeur absolue de ce rapport, mais plutôt par la variation de cette valeur en fonction des différentes configurations et par sa distribution dans les 18 zones axiales qui constituent l'assemblage. La figure 3.22 représente la distribution du ratio Φ_1/Φ_2 en fonction des 18 zones axiales en début de cycle pour les 3 configurations.

Nous observons que pour la configuration de référence, représentée par la courbe noire sur la figure 3.22, le rapport Φ_1/Φ_2 est constant en fonction des zones axiales, tandis que la courbe rouge, qui se réfère à l'*assemblage complet*, montre un profil non uniforme. Pour cette dernière configuration, la valeur de Φ_1/Φ_2 est constante dans les zones centrales, les mêmes qui constituent la zone dite *asymptotique* définie plus précisément dans § 3.3.4.1. Au contraire, dans les zones périphériques numéros 1 et 18, la valeur de ce rapport est beaucoup plus faible : elle passe de 6.44 à 6.15, avec une variation de 4% environ. Le spectre neutronique dans ces zones externes est plus doux comparé à celui des zones centrales. Cet effet est dû à la présence des pléniums supérieur et inférieur, où les neutrons sortis de l'assemblage en direction verticale sont ralentis avant d'y être renvoyés. Les zones périphériques voient donc un surplus de neutrons thermiques par rapport aux zones centrales. Nous nous attendons donc à un effet de thermalisation du spectre neutronique. Observons que la variation du rapport des flux est limitée seulement aux zones périphériques, alors que la valeur de Φ_1/Φ_2 dans la zone *asymptotique* est très similaire à la valeur asymptotique de la configuration de référence.

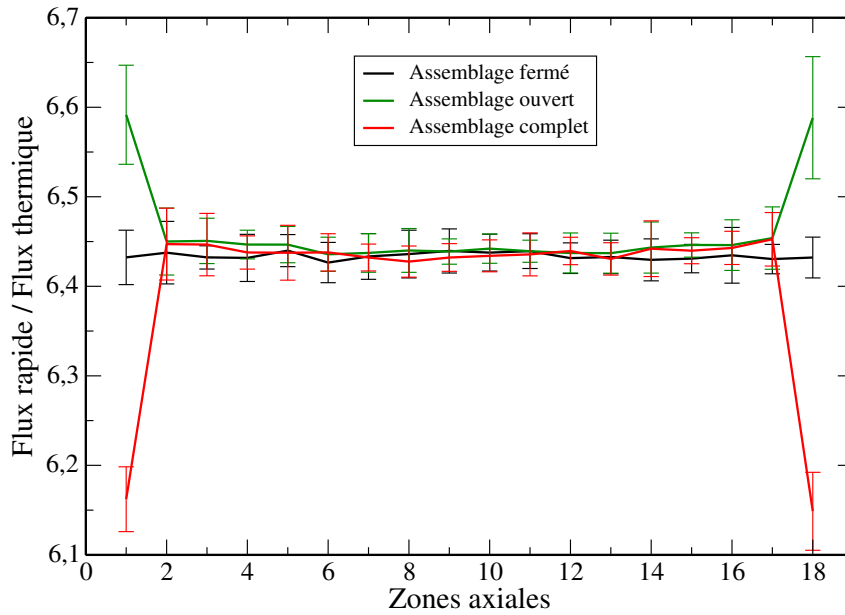


FIGURE 3.22 – Distribution du rapport Φ_1/Φ_2 en fonction des zones axiales en début d'irradiation pour les 3 configurations assemblages fermé, ouvert et complet

En ce qui concerne le ratio Φ_1/Φ_2 de la configuration *assemblage ouvert*, il présente deux valeurs distinctes, une pour la zone *asymptotique* et une pour les zones périphériques 1 et 18. Mais, à l'opposé de la configuration *assemblage complet*, l'assemblage avec les fuites axiales présente un durcissement de spectre sur les extrémités de la géométrie. Le ratio Φ_1/Φ_2 augmente sur les bords de l'assemblage, jusqu'à une valeur de 6.59. La variation en pourcent par rapport à la configuration de référence est moins importante que celle de l'*assemblage*

complet, mais elle reste du même ordre de grandeur (2.5% environ). L'augmentation du rapport Φ_1/Φ_2 dans les zones 1 et 18 montre donc un durcissement de spectre : dans ces régions, la densité volumique des neutrons rapides est plus importante que celle des neutrons thermiques. Or, cet effet n'était pas envisagé *a priori*. Pour en comprendre la raison, nous avons investigué ultérieurement et de manière plus fine d'un point de vue neutronique. L'analyse est développée dans le paragraphe suivant.

3.4.2 Analyse neutronique de l'*assemblage ouvert* avec MCNP

Dans ce paragraphe, nous analysons le spectre neutronique de la configuration qui présente l'effet des fuites axiales à travers le profil du rapport des flux Φ_1/Φ_2 : toutes les grandeurs qui sont calculées et présentées se réfèrent donc seulement à la configuration *assemblage ouvert*.

Nous avons observé dans le paragraphe précédent que le rapport Φ_1/Φ_2 en début d'irradiation augmente de manière brusque dans les zones périphériques de l'assemblage avec fuites de neutrons en haut et en bas, comme montré par la figure 3.22. Nous en avons donc déduit que les fuites axiales provoquent un durcissement de spectre sur les bords. À cause des fuites de neutrons vers le vide, les deux flux diminuent dans les zones périphériques (il y a une perte de neutrons), mais l'un des deux diminue plus vite que l'autre ce qui modifie le rapport des spectres dans les zones périphériques. Pour cette raison, le rapport des flux ne reste pas constant comme dans la zone asymptotique du centre.

Afin de caractériser cette variation de spectre neutronique avec z , nous avons choisi de considérer le courant neutronique $\vec{J}$, qui peut être quantifié par MCNP à travers un tally.

3.4.2.1 Calcul des courants rapides et thermiques

Le courant neutronique est défini comme le nombre de neutrons par seconde qui traversent une surface dans une direction donnée. Si nous regardons cette grandeur calculée pour chaque surface de l'*assemblage ouvert*, nous pouvons avoir des informations sur les pertes de neutrons induites par les fuites. Nous avons donc réalisé une simulation MCNP de la géométrie *assemblage ouvert* en définissant plusieurs surfaces et en calculant le courant neutronique net qui passe à travers chacune. Les surfaces sont numérotées selon la zone que les neutrons laissent derrière eux en sortant de l'assemblage. Dans la configuration *assemblage ouvert*, les directions préférentielles de propagation des neutrons sont deux : une vers la zone 1 au bord inférieur et l'autre vers la zone supérieure 18. Pour cette raison, nous avons coupé la zone 9 en deux parties équivalentes et créé une surface exactement au milieu de la géométrie de l'assemblage comme point de changement de direction préférentielle des neutrons. Une représentation schématique de l'attribution des surfaces est donnée sur la figure 3.23. Par exemple, le courant $\vec{J}_{18}$ est le courant qui sort de la zone 18 vers le vide, alors que le courant $\vec{J}_{17}$ est celui qui rentre dans la zone 18 depuis la zone 17.

Comme pour le flux de neutrons, nous avons calculé pour chaque surface i un courant rapide $\vec{J}_{1,i}$ et un courant thermique $\vec{J}_{2,i}$, avec une coupure entre les deux groupes en énergie à 0.625 eV. Nous avons calculé le rapport entre les deux courants $\vec{J}_1/\vec{J}_2$ en fonction des

zones axiales : son profil, que nous ne reportons pas ici, a la même forme que le rapport des flux rapide et thermique Φ_1/Φ_2 . En particulier, nous nous sommes intéressés à la variation des courants nets, rapide et thermique, entre les surfaces définissant chaque zone axiale, rapportée au flux neutronique de la zone considérée.

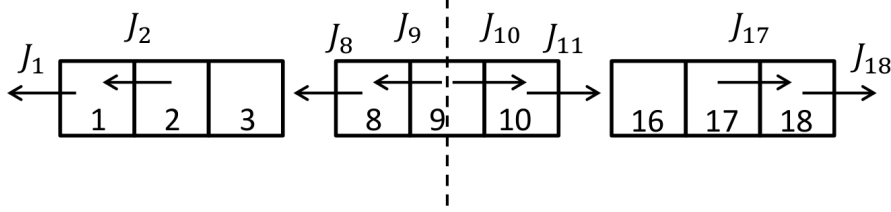


FIGURE 3.23 – Division et numérotation des surfaces et des courants dans la configuration assemblage ouvert pour les groupes des zones aux extrémités et dans le centre de l'assemblage

La différence nette entre le courant rapide et le courant thermique sortant de l'assemblage ne nous donne pas l'ensemble des informations sur le spectre neutronique. Dans notre cas, le courant net rapide sortant des zones périphériques est plus important que le courant thermique, pourtant dans ces zones le rapport des flux rapide sur thermique augmente. Le courant de neutrons rapides sortant de l'assemblage est, en valeur absolue, plus élevé : $\vec{J}_{1,1} = 8.33 \cdot 10^{-6} \text{ n} \cdot \text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ alors que $\vec{J}_{2,1} = 1.24 \cdot 10^{-6} \text{ n} \cdot \text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ et $\vec{J}_{1,18} = 6.34 \cdot 10^{-6} \text{ n} \cdot \text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ alors que $\vec{J}_{2,18} = 9.09 \cdot 10^{-7} \text{ n} \cdot \text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$. Globalement le nombre de neutrons rapides qui fuient de l'assemblage est plus grand que celui des neutrons thermiques. Pourtant, en proportion, les neutrons rapides fuient moins que les neutrons thermiques puisque le rapport Φ_1/Φ_2 augmente.

Nous avons donc calculé pour chaque zone j la différence des courants nets entrant et sortant $\Delta \vec{J}_{i,i-1}$ normalisée au nombre de neutrons présents dans la zone considérée, Φ_j .

Zone	$\frac{\vec{J}_{1,i} - \vec{J}_{1,i-1}}{\Phi_{1,j}}$	$\frac{\vec{J}_{2,i} - \vec{J}_{2,i-1}}{\Phi_{2,j}}$
1	-1.73	-2.13
2	-0.63	-0.73
3	-0.37	-0.38
8	0.01	0.00
9	-0.01	-0.05
10	-0.05	-0.05
16	-0.25	-0.30
17	-0.47	-0.51
18	-1.37	-1.61

TABLE 3.7 – Valeurs des différences de courants nets, rapide et thermique, normalisées au flux neutronique dans chaque zone j de l'assemblage ouvert

Le tableau 3.7 montre les valeurs de cette différence normalisée pour le groupe rapide (première colonne) et le groupe thermique (deuxième colonne) dans trois groupes de zones axiales de l'*assemblage ouvert*. Le premier groupe est constitué des dernières zones axiales vers le bas de l'assemblage : les zones 1, 2 et 3. Ensuite, le groupe des zones centrales, numéros 8, 9 et 10. Enfin, le groupe des dernières zones en haut de l'assemblage, les numéros 16, 17 et 18. Cette division reflète la séparation déjà détectée dans le paragraphe précédent : une zone centrale *asymptotique* et deux zones périphériques et deux de transition en haut et en bas de l'assemblage.

Nous observons que les valeurs reportées dans le tableau 3.7 pour les zones centrales sont très similaires entre les deux groupes en énergie : la différence des courants nets normalisée est pratiquement nulle au centre de l'assemblage. Cela indique une situation d'équilibre entre le nombre de neutrons entrant dans une zone et le nombre de neutrons qui en sortent. Au contraire, dans les zones plus proches des bords, cette valeur commence à augmenter progressivement en valeur absolue, jusqu'à rejoindre sa valeur maximale dans les zones 1 et 18. Dans ce cas, les deux groupes en énergie montrent des valeurs assez différentes. Les variations de courant net normalisées au flux de neutrons dans les zones périphériques sont plus importantes pour les neutrons thermiques que pour les neutrons rapides (-2.13 contre -1.73 pour la zone 1).

Même si les zones périphériques 1 et 18 montrent un comportement symétrique en ce qui concerne les inventaires isotopiques (figure 3.12) et le rapport des flux Φ_1/Φ_2 (figure 3.22), dans le tableau 3.7 les valeurs aux extrémités ne sont pas exactement identiques. Comme nous avons précisé ci-dessus, les résultats sont issus d'une seule simulation MCNP avec une correcte définition des surfaces sur lesquelles obtenir des tallies. Pour cette raison, l'incertitude statistique associée aux valeurs extraites est élevée. Cette imprécision n'est pas gênante dans ce cas puisque le but principal de cette simulation était de comprendre de manière qualitative la raison du durcissement de spectre dans les zones périphériques.

3.4.2.2 Expression des flux et durcissement du spectre au voisinage des extrémités

La figure 3.24 représente les profils du flux thermique (en rouge) et du flux rapide (en bleu) en fonction des zones axiales de l'assemblage. Les deux flux peuvent être ajustés avec une fonction cosinus, de la forme :

$$\Phi(z) = A \cos(Kz) \quad (3.11)$$

où A est une constante corrélée au niveau maximal du flux et K est le coefficient lié aux conditions aux limites. Comme nous pouvons le voir à partir de la figure 3.24, la différence entre $\Phi_1(z)$ et $\Phi_2(z)$ est donnée soit par la constante A ($A_1 > A_2$), soit par le coefficient K . Ce dernier est lié à la section efficace totale d'interaction Σ via la condition d'annulation du flux aux distances extrapolées. Les neutrons des deux groupes en énergie ont des probabilités d'interaction différentes ($\Sigma_1 < \Sigma_2$), ce qui implique deux coefficients K distinctes, K_1 et K_2 . Comme expliqué dans le chapitre 1, pour résoudre l'équation du transport et trouver la variable inconnue flux neutronique, au lieu d'utiliser une condition limite sur

le courant neutronique à la surface du domaine, une condition limite équivalente sur le flux est souvent utilisée § 1.2.6. Cette condition prévoit l'annulation du flux neutronique à une distance dite extrapolée, qui est égale à $2/3$ du libre parcours moyen des neutrons. Le flux neutronique est donc approximé par sa tangente. Puisque le libre parcours moyen est l'inverse de la section efficace totale, le flux de neutrons thermiques aura une distance d'extrapolation plus petite par rapport à celle du flux des neutrons rapides. Nous revenons sur les implications de cette condition dans le paragraphe suivant.

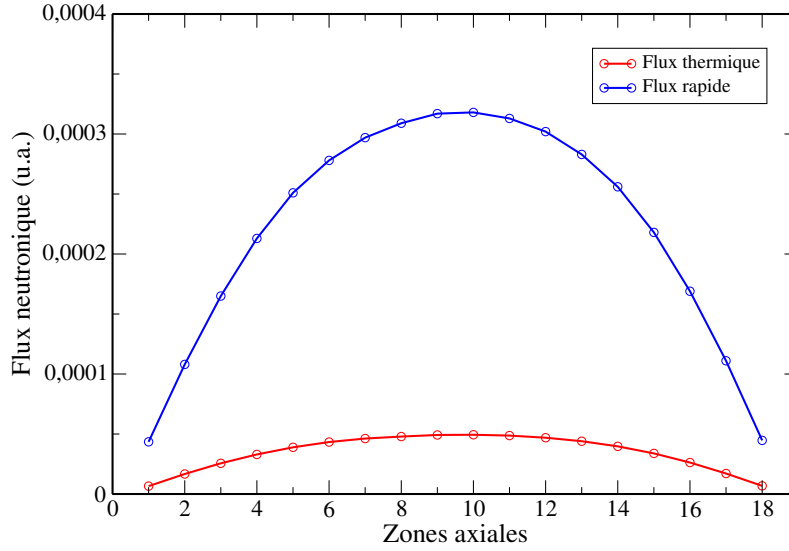


FIGURE 3.24 – Profils axiaux du flux rapide Φ_1 et du flux thermique Φ_2 en fonction des zones axiales en début d'irradiation pour la configuration assemblage ouvert moyennés sur les 80 simulations indépendantes

À partir de la forme des flux Φ_1 et Φ_2 , nous pouvons retrouver la condition sur les courants rapide et thermique utilisée précédemment ($\vec{J}_{1,1} > \vec{J}_{2,1}$ et $\vec{J}_{1,18} > \vec{J}_{2,18}$). Selon l'approximation de la diffusion (équation 1.22), $\vec{J} = -D\nabla\Phi$. En comparant les deux flux dans les dernières zones de l'assemblage, nous observons que $grad\Phi_1 \gg grad\Phi_2$. En conséquence, si D est constant, $\vec{J}_1 \gg \vec{J}_2$: le courant rapide sortant de l'assemblage est plus important que le courant thermique.

3.4.3 Application de la théorie de la diffusion : réacteur plaque

Nous cherchons dans ce paragraphe à savoir si la théorie de la diffusion suffit à expliquer le durcissement de spectre observé dans les zones périphériques de l'*assemblage ouvert*. Nous recherchons une expression analytique pour le spectre neutronique représenté par le rapport Φ_1/Φ_2 . Pour l'obtenir, nous allons suivre le déroulement mathématique de la résolution de l'équation du transport-diffusion dans un cas simplifié.

3.4.3.1 Rappel théorique

Considérons la géométrie appelée *réacteur plaque*, caractérisée par un matériau multiplicateur homogène d'épaisseur a entouré par un réflecteur et infini selon les directions x et y . Cette modélisation peut bien représenter la physique dans l'assemblage de la configuration *assemblage complet* (ou assemblage *ouvert* si l'épaisseur du réflecteur est nulle), avec $a = 3.65 \text{ m}$. Pour le réacteur plaque, le flux neutronique est fonction d'une seule variable spatiale, dans notre cas la variable z . Nous écrivons donc les équations du transport-diffusion à deux groupes énergétiques 3.12 et 3.13.

$$D_1 \nabla^2 \phi_1 + \frac{k_\infty}{p} \Sigma_{2,f} \Phi_2 - \Sigma_1 \Phi_1 = 0 \quad (3.12)$$

$$D_2 \nabla^2 \phi_2 + p \Sigma_{1,a} \Phi_1 - \Sigma_2 \Phi_2 = 0 \quad (3.13)$$

où k_∞ est le coefficient de multiplication infini, p est la probabilité de non-fuite des neutrons pendant le ralentissement, $\Sigma_{2,f}$ est la section efficace macroscopique de fission des neutrons thermiques et $\Sigma_{1,a}$ la section efficace macroscopique d'absorption des neutrons rapides [Lamarsh, 1966]. Dans l'équation du groupe rapide, le terme $(k_\infty/p \Sigma_2 \Phi_2)$ représente la production de neutrons rapides par fission des neutrons thermiques et il est donc équivalent à $(\eta \varepsilon f \Sigma_2 \Phi_2)$ selon la formule des quatre facteurs (équation 2.38).

Pour résoudre les équations, nous exprimons le flux thermique $\Phi_2(z)$ en fonction du flux rapide $\Phi_1(z)$ à partir de la première équation 3.12 et nous le substituons dans la deuxième 3.13. Nous obtenons ainsi l'équation 3.14 qui a comme seule variable le flux neutronique rapide.

$$\tau L^2 \nabla^2 \nabla^2 \Phi_1 - (\tau + L^2) \nabla^2 \Phi_1 - (k_\infty - 1) \Phi_1 = 0 \quad (3.14)$$

où $L^2 = D_2/\Sigma_2$ et $\tau = D_1/\Sigma_1$ sont respectivement la longueur de diffusion pour les neutrons thermiques et l'aire de diffusion des neutrons rapides. En divisant l'équation 3.14 par le produit τL^2 , nous pouvons la réécrire en utilisant une identité remarquable du deuxième degré, comme dans 3.15.

$$(\nabla^2 + \mu^2)(\nabla^2 - \lambda^2) \Phi_1 = 0 \quad (3.15)$$

où

$$\mu^2 \lambda^2 = \frac{k_\infty - 1}{\tau L^2} \quad (3.16)$$

$$\lambda^2 - \mu^2 = \frac{1}{\tau} + \frac{1}{L^2} \quad (3.17)$$

Les expressions des deux coefficients μ et λ sont données dans les équations 3.18 et 3.19.

$$\mu^2 = \frac{1}{2\tau L^2} [-(M^2) + \sqrt{M^2 + 4(k_\infty - 1)\tau L^2}] \quad (3.18)$$

$$\lambda^2 = \frac{1}{2\tau L^2} [(M^2) + \sqrt{M^2 + 4(k_\infty - 1)\tau L^2}] \quad (3.19)$$

où $M^2 = \tau + L^2$ est la longueur de migration des neutrons. La fonction $\Phi_1(z)$ solution de l'équation 3.15 est une combinaison linéaire de deux solutions X et Y du système suivant :

$$\begin{cases} (\nabla^2 + \mu^2)X = 0 \\ (\nabla^2 - \lambda^2)Y = 0 \end{cases} \quad (3.20)$$

À leur tour, les solutions X et Y sont composées par la somme de deux solutions élémentaires. Ces dernières sont tabulées dans [Lamarsh, 1966] selon la géométrie étudiée. Pour un réacteur plaque, elles correspondent à un cosinus $\cos(\mu z)$ et à un cosinus hyperbolique $\cosh(\lambda z)$. L'expression du flux rapide en fonction de z sera donc de la forme de l'équation 3.21.

$$\Phi_1(z) = A \cos(\mu z) + C \cosh(\lambda z) \quad (3.21)$$

Nous pouvons ainsi identifier l'expression de la constante multiplicative C dans l'équation 3.21 grâce à la condition aux limites d'annulation du flux au bord de la plaque. Dans ce cas, la dimension a , que nous avons posée égale à la hauteur de l'assemblage, doit prendre en compte aussi la longueur d'extrapolation. En supposant donc un flux nul en correspondance de $z = a/2$ (en posant l'origine de l'axe z au milieu de l'assemblage), nous obtenons l'expression de la constante C (éq. 3.23).

$$\Phi_1(a/2) = 0 = A \cos(\mu a/2) + C \cosh(\lambda a/2) \quad (3.22)$$

$$C = -A \frac{\cos(\mu a/2)}{\cosh(\lambda a/2)} = -A F \quad (3.23)$$

De cette façon le flux rapide $\Phi_1(z)$ peut être écrit selon l'expression 3.24 :

$$\Phi_1(z) = A (\cos(\mu z) - F \cosh(\lambda z)) \quad (3.24)$$

En ce qui concerne le flux thermique $\Phi_2(z)$, nous supposons la même décomposition que pour l'expression du flux rapide, mais avec des constantes différentes appelées A' et C' . Ces dernières peuvent être liées aux constantes présentes dans l'expression du flux rapide $\Phi_1(z)$ à travers les paramètres S_1 et S_2 , explicités dans les équations 3.30 et 3.31.

$$\Phi_2(z) = A' \cos(\mu z) + C' \cosh(\lambda z) = A S_1 \cos(\mu z) + C S_2 \cosh(\lambda z) \quad (3.25)$$

Comme pour le flux rapide, supposons que le flux thermique s'annule à la distance extra-

polée $a/2$. En imposant cette condition dans l'équation 3.26, nous obtenons les expressions de la constante C en fonction de S_1 et S_2 (équation 3.27) et une nouvelle expression pour le flux thermique (équation 3.28).

$$\Phi_2(a/2) = 0 = AS_1 \cos(\mu a/2) + CS_2 \cosh(\lambda a/2) \quad (3.26)$$

$$C = -A \frac{S_1 \cos(\mu a/2)}{S_2 \cosh(\lambda a/2)} = A \frac{S_1}{S_2} F \quad (3.27)$$

$$\Phi_2(z) = A(S_1 \cos(\mu z) - \frac{S_1}{S_2} F \cosh(\lambda z)) \quad (3.28)$$

Les termes S_1 et S_2 sont appelés coefficients de couplage entre le flux rapide $\Phi_1(z)$ et le flux thermique $\Phi_2(z)$. Ils sont obtenus en substituant l'expression du flux thermique 3.25 dans l'équation 3.13.

$$-(D_2 \mu^2 + \Sigma_2)A'X + p\Sigma_1 AX + (D_2 \lambda^2 - \Sigma_2)C'Y + p\Sigma_1 CY = 0 \quad (3.29)$$

L'équation 3.29 est entièrement fonction de X et Y , qui sont deux solutions indépendantes par hypothèse. En conséquence, les constantes qui multiplient ces fonctions doivent être nulles. Les expressions des coefficients de couplage sont donc les suivantes (équation 3.30 et 3.31) :

$$\frac{A'}{A} = \frac{p\Sigma_1/\Sigma_2}{1 + \mu^2 L^2} = S_1 \quad (3.30)$$

$$\frac{C'}{C} = \frac{p\Sigma_1/\Sigma_2}{1 - \lambda^2 L^2} = S_2 \quad (3.31)$$

À partir des expressions des flux neutroniques rapide et thermique des équations 3.24 et 3.28, nous pouvons chercher une formulation du rapport Φ_1/Φ_2 , qui s'exprime selon 3.32 :

$$\frac{\Phi_1(z)}{\Phi_2(z)} = \frac{\cos(\mu z) - F \cosh(\lambda z)}{S_1 \cos(\mu z) - F \frac{S_1}{S_2} \cosh(\lambda z)} \quad (3.32)$$

En supposant la composante en cosinus hyperbolique négligeable ($F \cosh(\lambda z) < \cos(\mu z)$ pour $z < a/2$) [Lamarsh, 1966], les deux flux sont exprimés donc seulement par la fonction cosinus, comme dans 3.33 et 3.34.

$$\Phi_1(z) = A \cos(\mu z) \quad (3.33)$$

$$\Phi_2(z) = A S_1 \cos(\mu z) \quad (3.34)$$

En conséquence, le rapport Φ_1/Φ_2 se simplifie, ne laissant que le coefficient de couplage S_1 . Nous obtenons enfin une solution pour le rapport du flux rapide sur le flux thermique

qui ne dépend plus de z :

$$\frac{\Phi_1}{\Phi_2} = \frac{1}{S_1} = \frac{1 + \mu^2 L^2}{p\Sigma_1/\Sigma_2} \quad (3.35)$$

L'expression du ratio des flux rapide et thermique comme une valeur constante correspond bien à la forme de Φ_1/Φ_2 de la courbe noire dans la figure 3.22. Par contre, sur les bords de l'assemblage l'hypothèse qui permet de négliger le coefficient F dans l'expression 3.28 n'est clairement plus valable comme z tend vers a . Ainsi, l'expression des flux comme de simples cosinus ne permet pas de représenter la physique sur les bords de l'assemblage. Une correction de la condition de criticité est nécessaire pour prendre en compte les différentes longueurs d'extrapolation du flux rapide et du flux thermique. Cette problématique est analysée dans le paragraphe suivant.

3.4.3.2 Correction de la condition de criticité

À partir des équations de la diffusion à deux groupes 3.12 et 3.13, et à travers un déroulement mathématique classiquement utilisé dans la littérature [Lamarsh, 1966] [Barjon, 1993], nous avons déduit dans le paragraphe précédent une expression du rapport des flux rapide et thermique liée au coefficient de couplage S_1 . L'expression 3.35 de Φ_1/Φ_2 ne dépend pas de z et prédit donc un ratio des flux neutroniques constant dans toutes les zones axiales de l'assemblage.

Or, nous avons montré dans la figure 3.22 que Φ_1/Φ_2 de l'*assemblage ouvert* présente des valeurs différentes dans les zones périphériques 1 et 18 par rapport à la valeur asymptotique des zones centrales. Une des approximations utilisées dans la résolution des équations de la diffusion est celle de considérer la même longueur d'extrapolation pour les deux groupes en énergie. Suivant cette hypothèse, nous obtenons des conditions aux limites identiques, exprimées dans les équations 3.22 et 3.26, pour le flux rapide pour le flux thermique. L'approximation à une seule longueur d'extrapolation pour le groupe rapide et le groupe thermique apporte très peu de biais, sauf près des limites du réacteur. Dans cette condition, l'utilisation d'une longueur extrapolée unique conduit à négliger une composante de l'expression de Φ_1/Φ_2 qui gagne en importance sur les bords du domaine, comme nous le montrons par la suite.

La résolution des équations 3.12 et 3.13 avec l'utilisation de deux longueurs d'extrapolation distinctes pour les groupes de neutrons rapides et thermiques est mentionnée dans le [Barjon, 1993], et nous n'avons pas trouvé d'autres ouvrages qui fassent références à cette différence de distance d'extrapolation.

Supposons que le flux thermique s'annule à une distance de l'origine de l'axe z égale à $a/2$, où a est la dimension caractéristique du réacteur plaque incluant la distance d'extrapolation propre du groupe thermique. Si nous prenons en considération que le libre parcours moyen des neutrons rapides est plus élevé que le libre parcours moyen des neutrons thermiques, nous pouvons fixer l'annulation du flux rapide à une distance égale à $a/2 + \varepsilon$ du milieu du réacteur, où ε est la différence entre les deux longueurs d'extrapolation. Ces

conditions aux limites sont exprimées dans 3.36 et 3.37.

$$\Phi_1\left(\frac{a}{2} + \varepsilon\right) = 0 = A \cos(Bz) + C \cosh(\lambda z) \quad (3.36)$$

$$\Phi_1\left(\frac{a}{2}\right) = 0 = A' \cos(Bz) + C' \cosh(\lambda z) \quad (3.37)$$

où A' et C' peuvent être écrits en fonction des coefficients de couplage respectivement comme AS_1 et CS_2 . Nous retrouvons donc les mêmes fonctions $\cos$ et $\cosh$ qui constituent les solutions de Φ_1 et de Φ_2 comme dans 3.21 et 3.25. La différence par rapport à la solution trouvée dans le paragraphe précédent est due à la condition limite sur le flux rapide. En conséquence, la condition de criticité (qui était écrite comme $B = \pi/a$ où B représente le buckling) est modifiée par rapport au cas précédent et devient :

$$a = \frac{\pi}{B} - \frac{2 S_2}{S_2 - S_1} \varepsilon \quad (3.38)$$

Les flux rapide et thermique sont donc donnés par les expressions 3.39 et 3.40.

$$\Phi_1(z) = \cos(Bz) + \varepsilon' \cosh(\lambda z) \quad (3.39)$$

$$\Phi_2(z) = S_1 \cos(Bz) + S_2 \varepsilon' \cosh(\lambda z) \quad (3.40)$$

où ε' est défini comme dans l'équation 3.41.

$$\varepsilon' = B \frac{S_1}{S_1 - S_2} \frac{1}{\cosh(\lambda a/2)} \varepsilon \quad (3.41)$$

Nous observons dans les expressions 3.39 et 3.40 que la composante du flux en cosinus hyperbolique n'est pas négligée comme dans la calcul précédent. Le flux est donc constitué de deux termes : le premier en cosinus, défini le *flux fondamental*, et le deuxième en cosinus hyperbolique, appelé *flux de transition*.

Comme le *flux de transition* est négligeable presque partout, le flux total, qui est donné par la somme des deux, est représenté très souvent par le flux fondamental. À proximité des bords du réacteur, la contribution du flux de transition devient significative et perturbe ainsi le rapport des flux thermiques et rapides. Afin de montrer cet effet, nous avons appliqué la théorie présentée dans un exercice numérique sur l'assemblage simulé.

3.4.3.3 Application numérique

Les données que nous avons utilisées pour cet exercice sont listées dans le tableau ci-dessous. Sauf la hauteur de l'assemblage a , les valeurs numériques ont été prises du [Lamarsh, 1966].

À partir des longueurs de diffusion D_1 et D_2 nous avons calculé les distances d'extrapolation comme $d_1 = 0.7104 * 3 * D_1 = 2.41 \text{ cm}$ et $d_2 = 0.7104 * 3 * D_2 = 0.34 \text{ cm}$ et la différence entre les longueurs extrapolées $\varepsilon = d_1 - d_2 = 2.07 \text{ cm}$. Ensuite, nous avons tracé les flux rapide et thermique totaux et leurs composantes (flux fondamental et flux

de transition) en fonction de la demi-hauteur de l'assemblage. La figure 3.25 représente les flux pour les deux groupes énergétiques.

Grandeur	Valeur	Grandeur	Valeur
L^2	2.67 cm^2	τ	27 cm^2
λ	0.651	a	365 cm
S_1	0.676	S_2	-5.26
D_1	1.13 cm	D_2	0.16 cm

TABLE 3.8 – Grandeurs utilisées pour l'application numérique

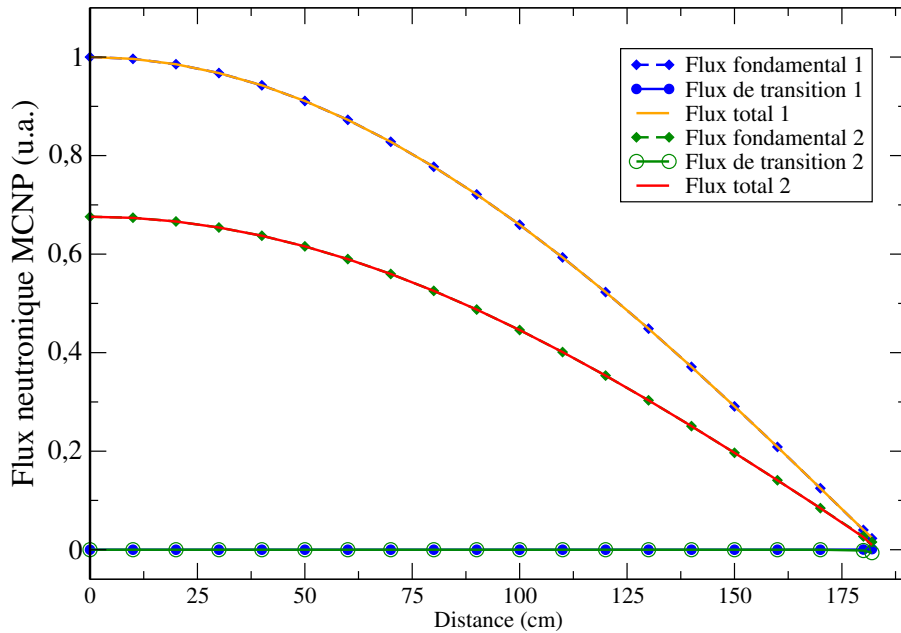


FIGURE 3.25 – Profils axiaux des flux totaux et de leurs composantes (flux fondamental et flux thermique) pour les deux groupes énergétiques sur la moitié de l'assemblage ouvert

Nous observons que, pour les neutrons thermiques comme pour les neutrons rapides, la composante du flux total la plus importante est le flux fondamental pour presque toutes les valeurs de z . La composante du flux de transition gagne d'importance seulement près des bords de l'assemblage avec la diminution du flux fondamental.

Les profils axiaux des flux de transition rapide et thermique sont montrés dans la figure 3.26. En bleu, le flux de transition du groupe rapide, qui augmente dans les derniers centimètres de l'assemblage, et en rouge le flux de transition thermique, qui au contraire diminue de manière consistante près du bord. Pour des z périphériques, le flux total rapide voit donc une composante de transition qui incrémente sa valeur, alors que le flux total thermique est diminué à cause de la chute de son flux de transition. Pour cette raison, le rapport des flux Φ_1/Φ_2 présenté dans § 3.4.1 augmente dans les dernières zones axiales de l'assemblage ouvert.

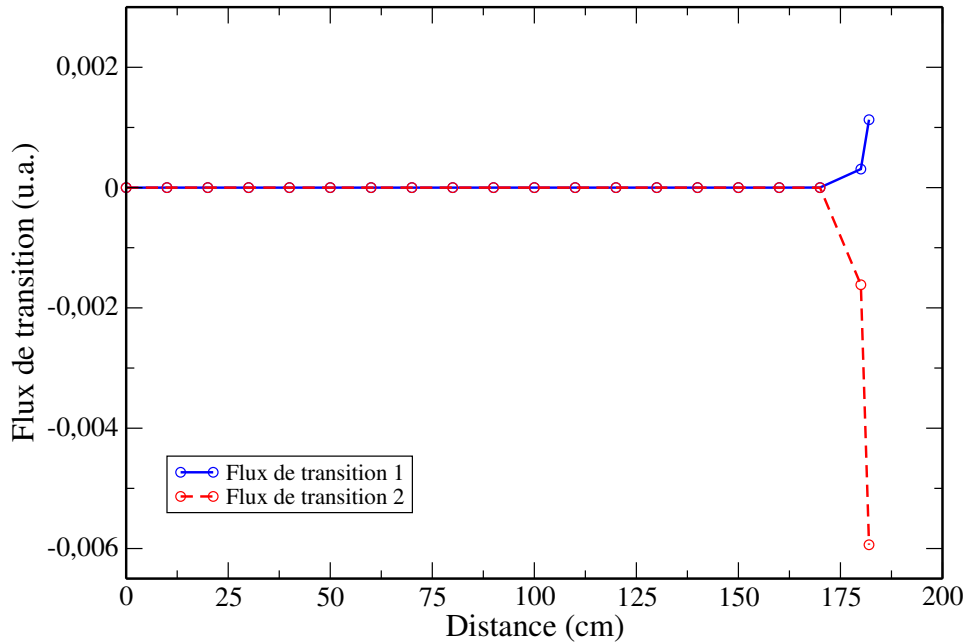


FIGURE 3.26 – Profils axiaux des flux de transition du groupe rapide et du groupe thermique sur la moitié de l'assemblage ouvert

Grâce aux figures des flux de transition, nous retrouvons la physique analysée dans § 3.4.2 : dans les zones périphériques de l'assemblage, la diminution du flux thermique est en proportion beaucoup plus importante que celle du flux rapide, ce qui engendre une augmentation du ratio des flux. Nous remarquons dans la figure 3.26 que la variation du flux est concentrée seulement dans les derniers centimètres de l'assemblage. Avec une discrétisation axiale tirée du benchmark, qui prévoit des zones de 20.32 cm , nous ne pouvons pas observer cette faible distance de la perturbation des fuites axiales. Avec la discrétisation en 18 zones, nous avons observé dans les zones ultimes un durcissement de spectre avec une augmentation de Φ_1/Φ_2 de 2% environ. Mais nous ne pouvons pas juger le vrai effet de spectre dû aux fuites ni en termes quantitatifs (valeurs de Φ_1/Φ_2 tout près des bords) ni qualitatifs (longueur de la zone impactée). Pour cette raison, nous avons réalisé une simulation avec une discrétisation axiale très fine qui est présentée dans le paragraphe 3.5.1. Des considérations sur cet effet de spectre localisé dans une petite région du domaine vis-à-vis des calculs cœur sont le sujet du paragraphe suivant.

3.4.4 Application aux simulations : prise en compte des fuites axiales dans un schéma de calcul à haute précision

Avant de réaliser un calcul de cœur, des grandeurs de diffusion sont extraites à partir des résultats du calcul cellule. Ces grandeurs sont par exemple le coefficient de diffusion et les sections efficaces, qui sont homogénéisées dans l'espace et condensées en énergie § 1.4.2. La figure 3.27 représente la section efficace de fission de l' ^{235}U condensée à 1 groupe mais discrétisée en espace (une valeur pour chaque zone axiale) pour les trois configurations.

Nous observons que la section efficace condensée de l'*assemblage fermé* a une valeur constante dans toutes les zones axiales, tandis que celles des configurations *ouvert* et *com-*

plet présentent des variations dans les zones périphériques.

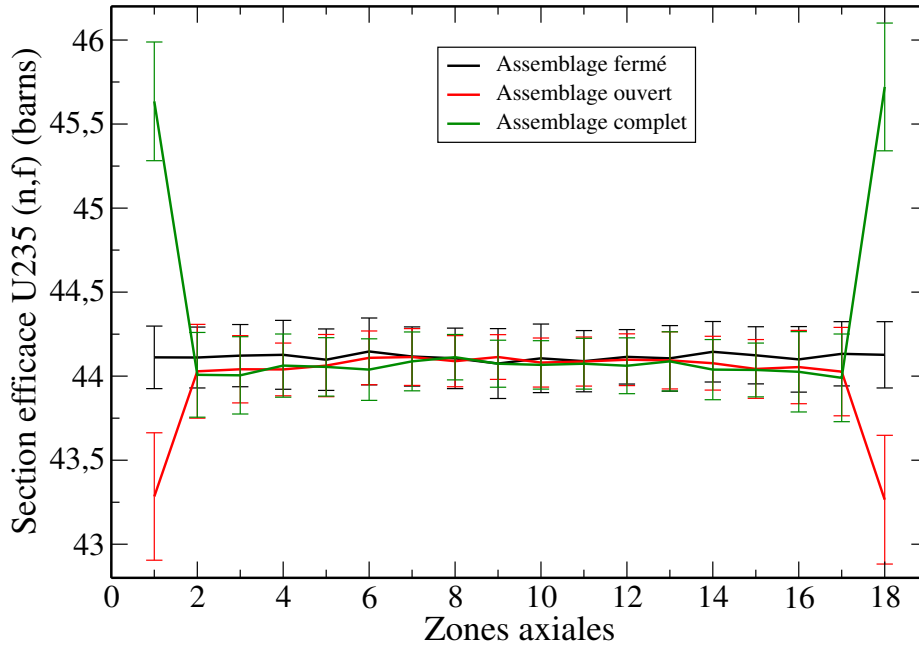


FIGURE 3.27 – Section efficace de fission de l' ^{235}U pour les trois configurations assemblages fermé, ouvert et complet en fonction des zones axiales

Ces profils sont le résultat de l'opération de condensation : la section efficace condensée est obtenue par une moyenne des sections efficaces des groupes en énergie considérés (dans notre cas, deux) pondérée par le spectre du flux neutronique, comme dans l'équation 3.42.

$$\langle \sigma(z) \rangle = \frac{\int \sigma_1(z, E) \Phi_1(z, E) dE + \int \sigma_2(z, E) \Phi_2(z, E) dE}{\int \Phi_1(z, E) dE + \int \Phi_2(z, E) dE} \quad (3.42)$$

En conséquence, selon la forme du spectre neutronique, et donc selon la valeur de $\Phi_1(z, E)$ et de $\Phi_2(z, E)$, la section efficace à 1 groupe a un profil axial différent. Nous remarquons pour l'*assemblage ouvert* la diminution de $\sigma_{fiss}^{235\text{U}}$ dans les zones 1 et 18 qui correspond au durcissement de spectre représenté sur la figure 3.22. Dans ce cas, une section efficace homogénéisée dans l'espace ne serait pas représentative de la physique aux bords d'un assemblage ouvert. Pour cette raison, une discrétisation spatiale optimisée pourrait être de diviser l'assemblage en trois zones : une grande zone centrale *asymptotique* et une zone à chaque bout de l'assemblage, où une discrétisation plus fine est nécessaire.

L'application de la théorie de la diffusion à deux groupes permettrait de retrouver le profil axial des sections efficaces condensées si les sections efficaces microscopiques σ_1 et σ_2 sont constantes en fonction de z . Or, ces sections efficaces ont un profil non uniforme en fonction de la hauteur de l'assemblage, comme montré dans la figure 3.28. En effet, les sections efficaces rapide et thermique diminuent dans les derniers centimètres de l'assemblage, même si dans la figure la variation de σ_1 n'est pas visible (mais elle est significative). Rappelons que le flux neutronique est le produit de la densité de neutrons n fois la vitesse des neutrons v § 1.2.3.1. Sur les bords de l'assemblage, les densités de neutrons n_1 et n_2

diminuent à cause des fuites, mais les vitesses v_1 et v_2 sont aussi modifiées puisque les sections efficaces microscopiques des deux groupes ne sont pas constantes. Une représentation à deux groupes en énergie ne semble donc pas suffisante pour prendre en compte cet effet de spectre.

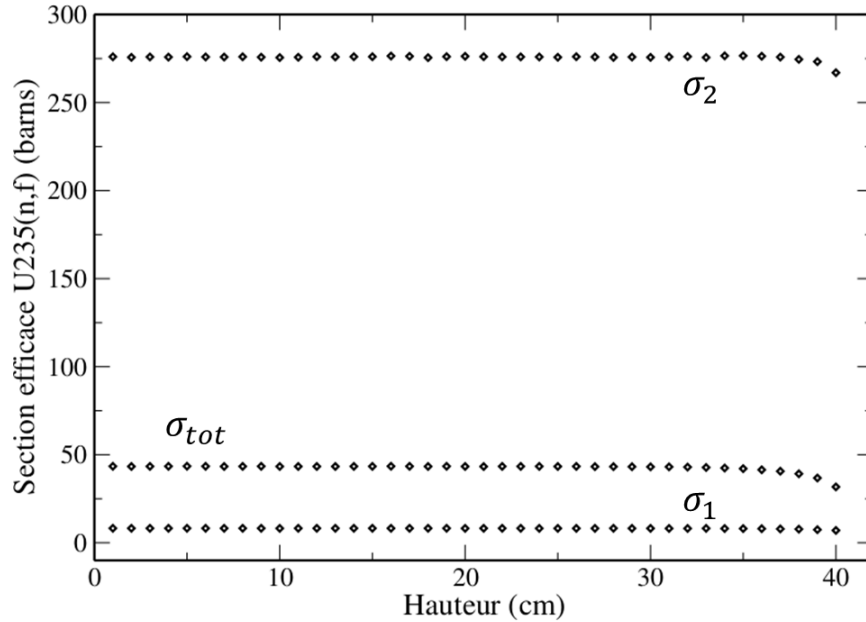


FIGURE 3.28 – Sections efficaces de fission de l’ ^{235}U du groupe rapide (σ_1), du groupe thermique (σ_2) et totale (σ_{tot}) en fonction de z dans les derniers 40 cm de l’assemblage ouvert

Considérons enfin que la géométrie que nous avons simulée présente une division axiale en zones de 20.32 cm chacune. Comme rappelé précédemment, avec cette discrétisation, un incrément du rapport des flux neutroniques dans les zones périphériques de l’ordre de 2% est observé. Mais le flux neutronique Φ est une grandeur volumique, dépendante du volume de la cellule dans laquelle on estime le tally MCNP. Si nous réalisons une simulation de l’assemblage ouvert sans discrétisation en zones, ou avec des zones très grandes, nous ne pourrions pas voir l’effet de durcissement du spectre sur les extrémités, parce qu’il serait noyé par l’opération de moyenne des flux sur le volume. Même avec la division axiale du benchmark, nous ne pouvons pas quantifier la zone réellement impactée par cet effet des fuites, car le flux est calculé par une moyenne volumique sur les derniers 20 cm. Pour cette raison, nous avons investigué l’effet du binning spatial, un des paramètres d’étude analysés dans la première partie du § 3.5.

3.4.5 Impact en évolution

Avant de passer à l’étude des paramètres de modélisation listés précédemment, nous regardons un autre aspect important des simulations : l’évolution dans le temps. Dans les paragraphes précédents, nous avons analysé le spectre neutronique des 3 configurations en début d’irradiation. Dans ce paragraphe, nous présentons l’évolution du spectre neutronique en fonction du temps.

Les figures 3.29, 3.30 et 3.31 représentent l'évolution de Φ_1/Φ_2 en fonction des zones axiales des configurations *assemblages fermé, ouvert et complet* pour certains pas de temps de l'évolution. Nous observons globalement une augmentation progressive du rapport des flux neutroniques du début d'irradiation à la fin du cycle : le spectre se durcit au fur et à mesure de l'irradiation. Pour le cas de référence *assemblage fermé*, le rapport Φ_1/Φ_2 augmente selon le temps tout en gardant son profil axial plat, alors que les deux autres configurations montrent un profil non constant en fonction des zones axiales (comme déjà observé en début d'irradiation, figure 3.22).

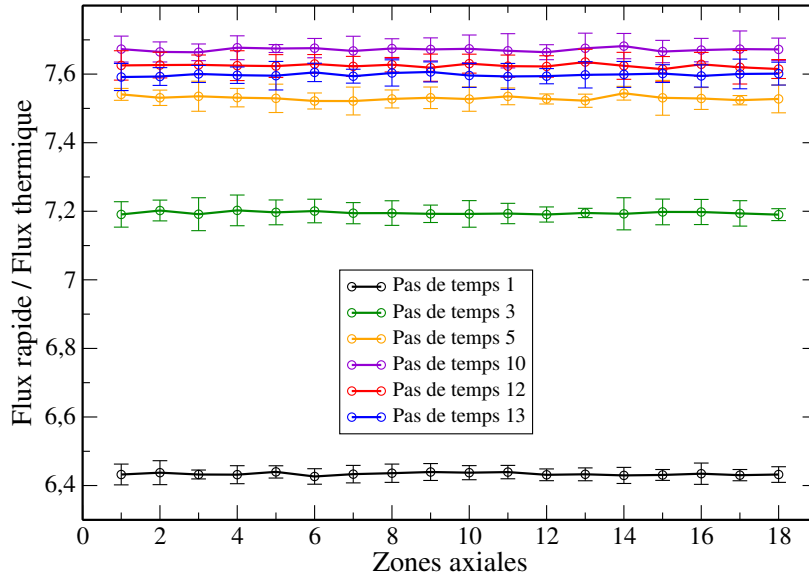


FIGURE 3.29 – Évolution dans le temps du ratio Φ_1/Φ_2 pour la configuration *assemblage fermé* en fonction des zones axiales pour les pas de temps 1, 3, 5, 10, 12 et 13

Le durcissement de spectre pendant l'évolution du combustible est dû à l'apparition du ^{239}Pu dans les différentes zones de l'assemblage § 1.2.2.2. Pour la configuration de référence, le profil de Φ_1/Φ_2 reste plat pendant toute l'irradiation puisque la production de cet isotope est uniforme dans toutes les zones axiales à tout moment de l'évolution (comme en fin de cycle, figure 3.16).

Au contraire, pour les deux autres configurations le ^{239}Pu n'est pas produit uniformément en z . La raison est la forme des profils axiaux des flux neutroniques, dont les évolutions sont montrées sur les figures 3.14 et 3.15. Nous observons sur la figure 3.30 pour la configuration *assemblage ouvert* une sorte d'inversion de tendance dans la forme du rapport des flux en correspondance des pas de temps intermédiaires 3 et 5 : la zone centrale montre une valeur de Φ_1/Φ_2 plus élevée que celle sur les bords. Dans ce cas, il faut tenir compte aussi de l'évolution du profil de la production du ^{239}Pu . À un certain moment, la très grande quantité de ^{239}Pu au centre de l'assemblage par rapport à celle dans les zones périphériques engendre une augmentation du rapport Φ_1/Φ_2 dans les zones centrales : le spectre est plus dur au centre même si l'effet des fuites axiales est toujours présent. La compétition entre l'effet de flux, lié au profil axial du flux neutronique et donc corrélé à la quantité de ^{239}Pu , et l'effet de spectre, dû aux fuites, donne lieu à cette évo-

lution non linéaire de Φ_1/Φ_2 . À la fin de l'irradiation, nous retrouvons la même forme du rapport Φ_1/Φ_2 du début de cycle, mais avec un effet de durcissement de spectre encore plus marqué dans les zones périphériques de l'assemblage.

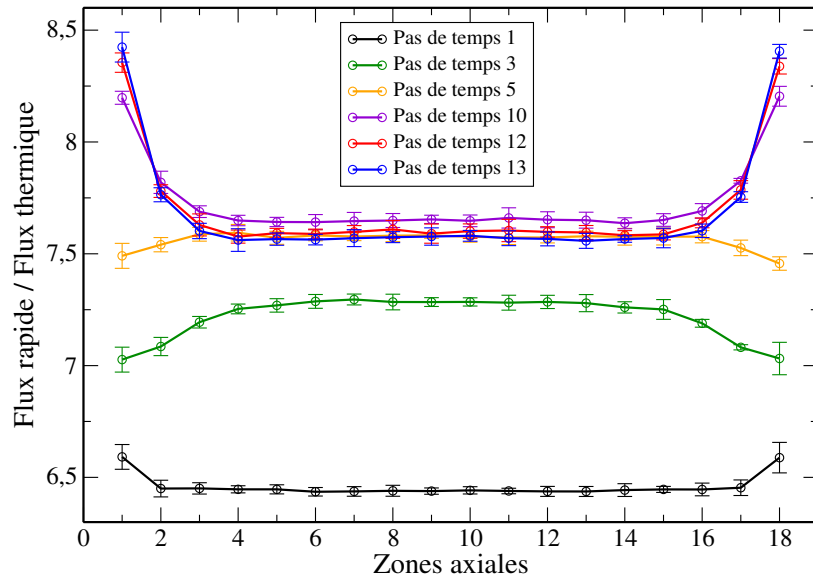


FIGURE 3.30 – Évolution dans le temps du ratio Φ_1/Φ_2 pour la configuration assemblage ouvert en fonction des zones axiales pour les pas de temps 1, 3, 5, 10, 12 et 13

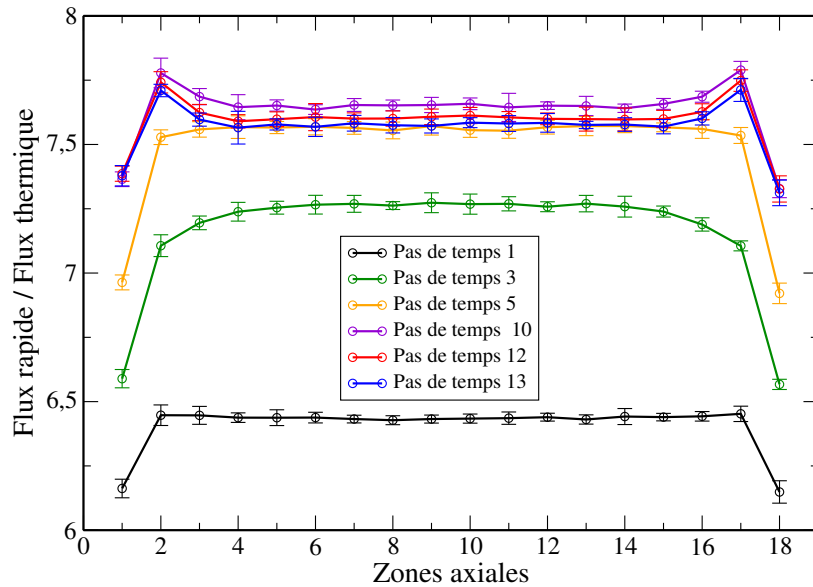


FIGURE 3.31 – Évolution dans le temps du ratio Φ_1/Φ_2 pour la configuration assemblage complet en fonction des zones axiales pour les pas de temps 1, 3, 5, 10, 12 et 13

Le ratio Φ_1/Φ_2 de l'*assemblage complet* montré sur la figure 3.31 a une évolution similaire à celle de l'*assemblage ouvert*, à l'exception des valeurs dans les zones périphériques, où le rapport des flux rapide et thermique est plus faible à cause de la modulation des pléniums sur les côtés de l'assemblage. Notons dans les derniers pas de temps, la remontée

relativement faible de Φ_1/Φ_2 en correspondance des zones 2 et 17 qui résulte de la compétition entre les effets de fuites et les effets de spectre dus au plutonium. En fin d'évolution, le ^{239}Pu a presque rejoint l'équilibre aussi dans ces zones de transition.

3.5 Effet des paramètres d'étude

Dans les paragraphes précédents, nous avons comparé les résultats des simulations des configurations *assemblages ouvert* et *complet* par rapport à celle de référence, l'*assemblage fermé*. Nous avons estimé et expliqué les écarts en fin de cycle des inventaires isotopiques, totaux § 3.3.1 et de chaque zone § 3.3.3. Nous avons remarqué un effet de spectre dans les dernières zones de l'*assemblage ouvert* causé par les fuites axiales § 3.3.4. Ce durcissement du spectre neutronique a été expliqué à travers une analyse détaillée des courants nets traversant les surfaces de l'assemblage § 3.4. Cette analyse a été focalisée sur le spectre neutronique en début d'irradiation, mais nous avons donné aussi un regard général à l'évolution dans le temps § 3.4.5.

Tous les paramètres caractéristiques de la géométrie et des matériaux utilisés dans nos simulations ont été pris du benchmark [Rearde et al., 2013]. Dans ce paragraphe, nous analysons les effets du changement de certains de ces paramètres de modélisation. Tout d'abord, la discrétisation axiale de la géométrie simulée est étudiée puisque l'analyse des flux neutroniques pour chaque *cm* de l'assemblage dans § 3.4.3.3 montre une variation des flux uniquement dans les tous derniers centimètres. Ensuite, deux autres paramètres sont analysés : la taille de l'assemblage, dans § 3.5.2, et l'enrichissement initial du combustible, lié à la criticité du système, dans § 3.5.3.2. Enfin, une comparaison des résultats obtenus avec des modèles de fuites implémentés dans le code Serpent est menée dans § 3.5.3.

3.5.1 Effet du binning

Afin de quantifier la zone d'impact des fuites axiales sur le spectre neutronique, nous avons réalisé une simulation d'un assemblage avec une discrétisation axiale très fine représenté sur la figure 3.32.

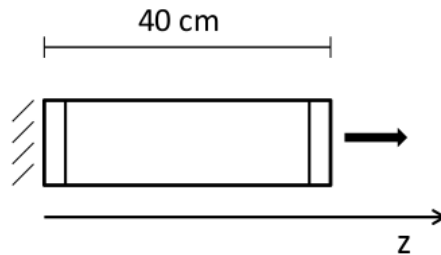


FIGURE 3.32 – Représentation de l'assemblage de 40 cm réfléchi en bas (à gauche) et ouvert en haut (à droite). Représentation de la zone asymptotique (à gauche) et de celle externe (à droite)

La hauteur de cet assemblage est de seulement 40 *cm*, soit environ deux zones axiales

de l'assemblage du benchmark. La représentation simplifiée de la géométrie utilisée donnée par la figure 3.32 met en évidence la zone la plus interne (celle « asymptotique ») et la dernière zone externe. La discrétisation utilisée prévoit des zones de 1 cm chacune. Puisque le rapport des flux Φ_1/Φ_2 est symétrique en fonction de z (figure 3.22), nous avons simulé seulement une moitié d'assemblage, avec des conditions de réflexion sur un côté. Cette dimension permet de s'affranchir de la problématique de la convergence des sources de neutrons avec MCNP et d'avoir ainsi une grande précision dans le calcul.

Nous avons calculé le flux rapide et le flux thermique dans toutes les zones axiales de cet assemblage réduit. Le rapport des flux Φ_1/Φ_2 en fonction de z est reporté dans la figure 3.33. À l'image de la variation des flux de transition observée dans § 3.4.3.3, la courbe de Φ_1/Φ_2 montre une augmentation du rapport des flux rapide et thermique qui n'est pas homogène sur les derniers 20 cm (correspondant à la zone 18 de l'assemblage du benchmark), mais concentrée seulement dans les 5 derniers.

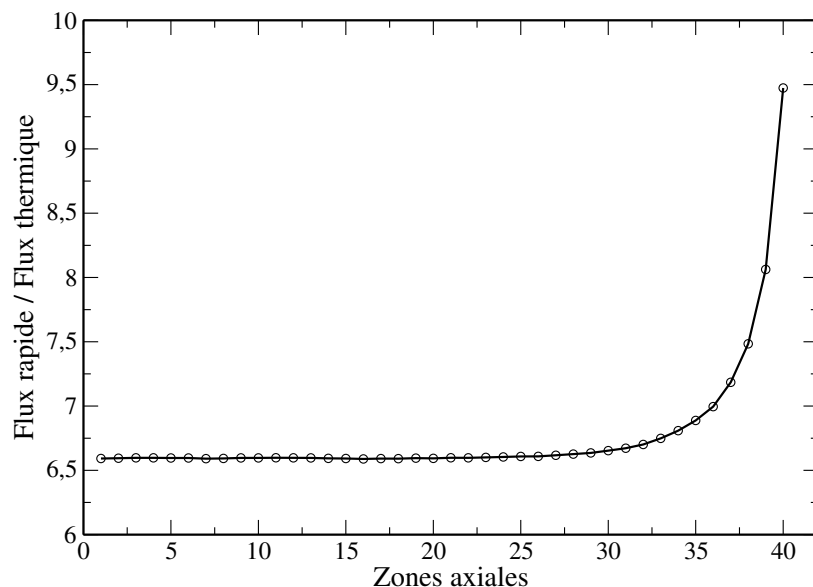


FIGURE 3.33 – Profil axial du rapport des flux Φ_1/Φ_2 pour chaque centimètre de l'assemblage réduit de 40 cm

Nous pouvons toujours diviser les zones axiales en deux parties : une zone asymptotique, composée par les zones où le ratio des flux est constant, et une zone périphérique, où Φ_1/Φ_2 varie brusquement. L'augmentation de Φ_1/Φ_2 dans les derniers cm de l'assemblage réduit est de 40% environ par rapport à sa valeur asymptotique. Cette variation est beaucoup plus importante que celle observée précédemment (entre Φ_1/Φ_2 de la zone 18 et Φ_1/Φ_2 asymptotique de l'assemblage ouvert). Pour prendre en compte l'effet de durcissement de spectre sur les bords de l'assemblage, une discrétisation axiale très fine de 1 cm sur les 5 derniers serait donc souhaitée.

Remarquons enfin que la valeur du plateau de Φ_1/Φ_2 de l'assemblage réduit n'est pas exactement la même que celle de l'assemblage ouvert. La raison de cette différence est expliquée dans le paragraphe suivant, qui traite l'effet de la taille de la géométrie simulée.

3.5.2 Effet de la taille de l'assemblage

Observons les profils axiaux des rapport des flux Φ_1/Φ_2 de l'*assemblage ouvert* et du demi assemblage de 40 cm représentés sur la figure 3.34. Afin d'avoir une meilleure lisibilité de la figure, nous représentons les rapports en fonction de la distance au bord de l'assemblage. La courbe rouge (demi-assemblage de 40 cm) montre bien l'effet de durcissement de spectre sur les bords de l'assemblage, effet beaucoup moins visible avec une discrétisation axiale plus grossière comme celle de l'assemblage du benchmark, représenté en noir. Remarquons aussi que la valeur asymptotique de Φ_1/Φ_2 n'est pas exactement la même pour les deux configurations : le plateau de l'assemblage réduit se trouve au-dessus du plateau de l'assemblage du benchmark.

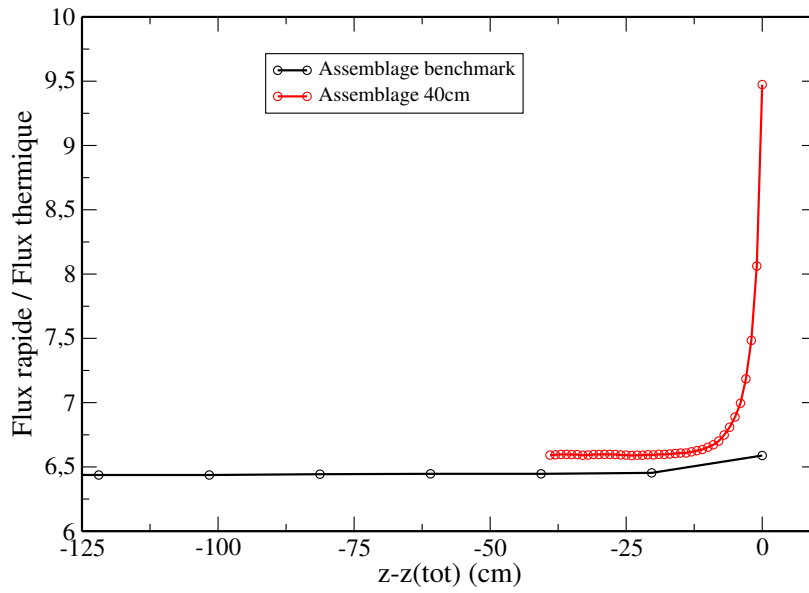


FIGURE 3.34 – Profils axiaux des rapports des flux Φ_1/Φ_2 de l'assemblage ouvert et de l'assemblage réduit de 40 cm en fonction de z rapporté à la hauteur totale de l'assemblage ouvert

La raison de cette différence est à chercher dans l'expression 3.35 de Φ_1/Φ_2 obtenue dans le paragraphe 3.4.3. En effet, nous avons vu que cette formulation exprime bien le rapport des flux dans la zone asymptotique de l'assemblage avec ouverture vers le vide. Si nous explicitons la composante B^2 , nous obtenons l'expression 3.43 :

$$\frac{\Phi_1}{\Phi_2} = \frac{1}{S_1} = \frac{1 + \pi^2 L^2 / a^2}{p \Sigma_1 / \Sigma_2} \quad (3.43)$$

Dans cette expression, la dépendance de Φ_1/Φ_2 avec la dimension a de l'assemblage simulé est évidente : plus l'assemblage est petit (a faible devant la longueur de migration L^2), plus le rapport des flux augmente. En conséquence, le rapport Φ_1/Φ_2 asymptotique de l'assemblage de 40 cm est plus important que celui de l'*assemblage ouvert* : 6.60 contre 6.44. L'écart relatif de Φ_1/Φ_2 asymptotique de l'assemblage réduit par rapport à l'assemblage ouvert est de 2.5%. Nous appelons ce phénomène *effet de taille* et nous le retrouvons aussi dans l'analyse du chapitre 5.

Cependant, cet effet arrive « à saturation » après une certaine valeur de a . En effet, le rapport $\pi^2 L^2 / a^2$ diminue comme l'inverse du carré de la dimension de la géométrie a . Quand l'assemblage est d'une dimension assez grande, ce rapport tend vers 0 et le numérateur de l'expression 3.43 tend vers 1. En conséquence, même si nous incrémentons la taille de l'assemblage simulé, la valeur asymptotique de Φ_1 / Φ_2 ne changera plus de manière significative.

Nous pouvons vérifier ce comportement à travers l'analyse de la section efficace de fission de l' ^{235}U , dont la valeur est directement liée au spectre neutronique. Le tableau 3.9 reporte les valeurs de $\sigma_{fiss}^{235\text{U}}$ pour les configurations *assemblages fermé* et *ouvert*, avec leur écart-type relatif. Dans la troisième colonne, l'écart relatif par rapport à la configuration *cube*, dont les valeurs de référence sont listées en première ligne.

$\sigma_{fiss}^{235\text{U}}$	Valeur [b]	std [%]	Δ_{∞} [%]
<i>cube</i>	44.12	0.11	-
moyenne <i>fermé</i>	44.12	0.11	-0.01
moyenne <i>ouvert</i>	43.98	0.09	-0.32
asymptotique <i>ouvert</i>	44.11	0.31	-0.02

TABLE 3.9 – Valeurs des sections efficaces microscopiques de fission de l' ^{235}U pour les configurations *assemblages fermé* et *ouvert* et écarts relatifs par rapport à la référence pour un assemblage de taille réelle

Comme attendu, la valeur moyennée de $\sigma_{fiss}^{235\text{U}}$ sur l'ensemble des zones axiales de l'*assemblage fermé* est compatible avec la valeur de référence. Au contraire, la section efficace moyennée pour la configuration avec les fuites neutroniques présente une petite différence comparée au *cube*, supérieure à l'incertitude statistique, montrant l'effet global (à cause de l'opération de moyenne sur les zones) des fuites axiales. Si nous excluons donc les zones périphériques impactées par les fuites et regardons seulement la valeur de $\sigma_{fiss}^{235\text{U}}$ asymptotique, nous obtenons deux sections efficaces identiques.

Le tableau 3.10 montre les mêmes données du tableau 3.9 pour l'assemblage de 40 cm. Puisque nous avons réalisé seulement une simulation de cette configuration, l'écart-type relatif n'est pas reporté.

L'écart de la $\sigma_{fiss}^{235\text{U}}$ par rapport au *cube* est dans les deux cas supérieur à l'incertitude statistique. Les sections efficaces de fission de l'assemblage réduit ouvert sont moins élevées que celle de référence, puisque le spectre neutronique est plus dur comparé au spectre infini. La valeur de a de l'assemblage réduit est ainsi assez faible pour que le rapport Φ_1 / Φ_2 asymptotique soit sensiblement différent comparé au Φ_1 / Φ_2 infini, comme nous avons vu dans la figure 3.34. Enfin, la section efficace de l'assemblage réduit dans des conditions de réflexion est bien égale à celle de la configuration *cube*.

σ_{fiss}^{235U}	Valeur [b]	$\Delta_{\infty}[\%]$
<i>cube</i>	44.12	-
moyenne <i>fermé</i>	44.20	0.18
moyenne <i>ouvert</i>	42.53	-3.60
asymptotique <i>ouvert</i>	43.32	-1.82

TABLE 3.10 – Valeurs des sections efficaces microscopiques de fission de l’ ^{235}U pour les configurations assemblages fermé et ouvert et écarts relatifs par rapport à la référence pour un assemblage de 40 cm

3.5.3 Correction de criticité

Comme expliqué dans le chapitre 2, la notion de fuites neutroniques est souvent liée à la notion de criticité. Un des facteurs à prendre en compte pour évaluer le k_{eff} d’un système est notamment les fuites des neutrons vers l’extérieur du réacteur. Plusieurs modèles mathématiques qui modélisent les fuites neutroniques sont basés sur la recherche d’un k critique. Ce sont les modèles de recherche de buckling § 2.2.2. Ces modèles conduisent à une modification du spectre neutronique et donc une correction de l’évolution par rapport à une modélisation infinie qui devrait prendre en compte les différents éléments présentés ci-dessus.

Les assemblages que nous avons simulés dans les paragraphes précédents ont un k supérieur à 1. Dans ce paragraphe, nous explorons la physique des fuites axiales pour deux assemblages avec un k différent par rapport à celui du benchmark. Nous avons donc réalisé des simulations d’un assemblage moins critique et d’un assemblage plus critique comparé à celui de référence. La criticité a été modifiée de plusieurs manières.

3.5.3.1 Modèles de fuites existants

Ce paragraphe est dédié à la comparaison entre les modèles de fuites implémentés dans le code Serpent et nos simulations. Comme expliqué dans le chapitre 2, le code Serpent présente deux options pour modéliser les fuites neutroniques : un modèle de buckling appelé B_1 et un modèle d’albédo différentiel.

Nous avons donc réalisé une simulation avec chacun des deux modèles de fuite. La géométrie est constituée d’un assemblage *cube* avec des conditions de réflexion sur toutes les parois.

Le tableau 3.11 reporte plusieurs valeurs de la section efficace microscopique de fission de l’ ^{235}U : respectivement, celle de la configuration *cube*, celles de l’*assemblage ouvert* dans la dernière zone et au centre (valeur asymptotique) et celles des simulations Serpent avec modèles de fuites (B_1 et *albédo*).

Tout d’abord, nous nous sommes assurés que les sections efficaces microscopiques de fission de l’ ^{235}U calculées par MCNP et par Serpent sont identiques. Nous avons donc reporté, dans la première ligne du tableau, une seule valeur « infinie » valable pour les deux

codes. Comme montré dans § 3.5.2, la valeur asymptotique de σ_{fiss}^{235U} de la zone centrale de l'*assemblage ouvert* est la même que celle calculée pour le *cube*. La section efficace de fission de la zone 1, au contraire, est plus faible (en vert dans la figure 3.27) : comme nous l'avons vu dans § 3.4, le spectre neutronique se durcit sur les bords de l'assemblage ouvert.

Configuration	$\sigma_{fiss}^{235U} [b]$
<i>cube</i>	44.12
<i>zone 1 ouvert</i>	43.27
<i>zone 9 ouvert</i>	44.11
<i>modèle B_1</i>	41.55
<i>modèle albédo</i>	39.97

TABLE 3.11 – Valeurs des σ_{fiss}^{235U} en début d'irradiation pour des simulations réalisées avec MCNP et Serpent

En accord avec nos simulations, l'application des modèles de fuites implémentés dans Serpent donne des sections efficaces de fission plus faibles par rapport à celle infinie. Par contre, la variation de σ_{fiss}^{235U} par rapport à la référence pour les modèles B_1 et *albédo* est largement plus importante que celle pour l'*assemblage ouvert*.

En appliquant ces modèles mathématiques, nous ne retrouvons pas les mêmes valeurs de σ_{fiss}^{235U} calculées à travers les simulations de l'assemblage de taille réelle ouvert aux extrémités axiales. La modification des sections efficaces par les modèles B_1 et *albédo* est très forte. Comme nous avons vu dans § 3.5.2, l'assemblage de taille réduite est fortement impacté par les fuites neutroniques. Nous pouvons donc comparer les sections efficaces de cette dernière configuration avec les résultats des modèles appliqués (tableau 3.12).

σ_{fiss}^{235U}	Valeur [b]	$\Delta_{\infty}[\%]$
B_1	41.55	-5.83
<i>albédo</i>	39.97	-9.41
moyenne 40 cm	42.53	-3.60
zone 40 40 cm	31.97	-27.54

TABLE 3.12 – Valeurs des sections efficaces microscopiques de fission de l' ^{235}U pour les configurations assemblages fermé et ouvert et écarts relatifs par rapport à la référence

Le tableau 3.12 montre une section efficace de fission très faible dans la dernière zone de l'assemblage réduit, cohérente avec l'incrément très brusque de Φ_1/Φ_2 observé dans la figure 3.34. Cependant, la valeur de σ_{fiss}^{235U} moyennée sur l'ensemble des zones reste plus élevée que celles données par les modèles de fuites, avec un écart de -3.60% par rapport à la configuration *cube* contre les presque -6% et -9% des méthodes B_1 et *albédo*.

Les raisons de la divergence entre les résultats présentés peuvent être nombreuses. Tout d'abord, les modèles utilisés considèrent des fuites neutroniques homogènes, alors que dans nos configurations nous prenons en compte seulement les fuites des neutrons en direction axiale. Deuxièmement, ces modèles sont basés sur une recherche itérative du flux neutronique fondamental qui satisfait la condition de criticité.

Pour cette raison, nous avons essayé de nous rapprocher à un cas critique, afin de vérifier si les écarts avec les modèles de fuite étaient plus faibles dans une configuration proche de la criticité. Nous avons donc adapté certains paramètres pour avoir un facteur de multiplication critique à partir de la configuration du benchmark (qui présente un k de 1.16 en début d'irradiation). Afin d'obtenir des configurations critiques, nous avons adopté trois méthodes : changer l'enrichissement initial en ^{235}U § 3.5.3.2, modifier le niveau de bore § 3.5.3.3 et ajuster artificiellement la valeur de ν § 3.5.3.4.

3.5.3.2 Configuration critique par modification de l'enrichissement

Pour rechercher la criticité, l'enrichissement initial en ^{235}U a été changé : nous avons choisi un enrichissement initial de 1% et un de 5%. Ensuite, nous avons calculé le rapport Φ_1/Φ_2 pour les deux nouvelles configurations et nous l'avons comparé à celui de référence, qui présente un enrichissement de 3.5%. La géométrie adoptée est celle de l'assemblage réduit de 40 cm avec ouverture d'un côté que nous avons défini dans § 3.5.1.

Le tableau 3.13 présente la valeur des facteurs de multiplication en fonction des enrichissements pour les 3 assemblages. Nous remarquons que l'assemblage moins enrichi est sous-critique, alors que les deux autres sont sur-critiques.

Enrichissement	k
1%	0.76
3.5%	1.16
5%	1.24

TABLE 3.13 – Valeurs des k en début d'irradiation pour les 3 enrichissements initiaux du combustible

La figure 3.35 montre le profil axial de Φ_1/Φ_2 pour les 3 assemblages simulés. Nous observons que le rapport des flux rapide et thermique asymptotique augmente avec l'enrichissement initial. Ceci est essentiellement dû au creusement de la bosse thermique dans le spectre neutronique induit par la présence de l' ^{235}U dans le combustible comme montré sur la figure 3.36.

À l'image de l'assemblage de référence, les deux autres courbes de la figure 3.35 présentent un incrément de Φ_1/Φ_2 dans les derniers centimètres de l'assemblage. L'effet de durcissement de spectre dû aux fuites axiales caractérise donc les trois configurations, quelles que soient leurs valeurs de criticité.

Pour essayer de retrouver les mêmes valeurs de $\sigma_{fiss}^{235\text{U}}$ données par les modèles de fuites,

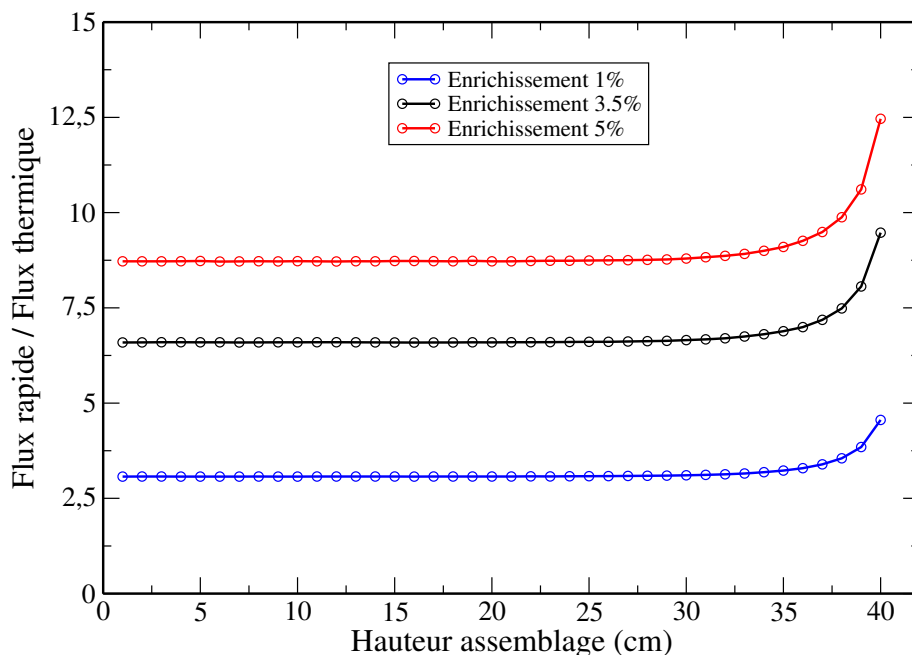


FIGURE 3.35 – Profil axial du rapport des flux Φ_1/Φ_2 en fonction de z pour 3 assemblages avec enrichissements différents : 1%, 3.5% et 5%

nous avons simulé un assemblage de 40 cm ouvert d'un côté et critique. Nous avons trouvé la valeur d'enrichissement initial en ^{235}U telle que le facteur de multiplication soit égal à 1, tout en gardant les caractéristiques géométriques du *cube*. Cette valeur correspond à 2.06% et les valeurs de k_{eff} et de $\sigma_{fiss}^{235\text{U}}$ asymptotique (dans le premier centimètre près du bord réfléchi) sont données dans le tableau 3.14. Dans la deuxième colonne nous avons reporté ces valeurs pour la configuration à 2.06% entièrement réfléchie.

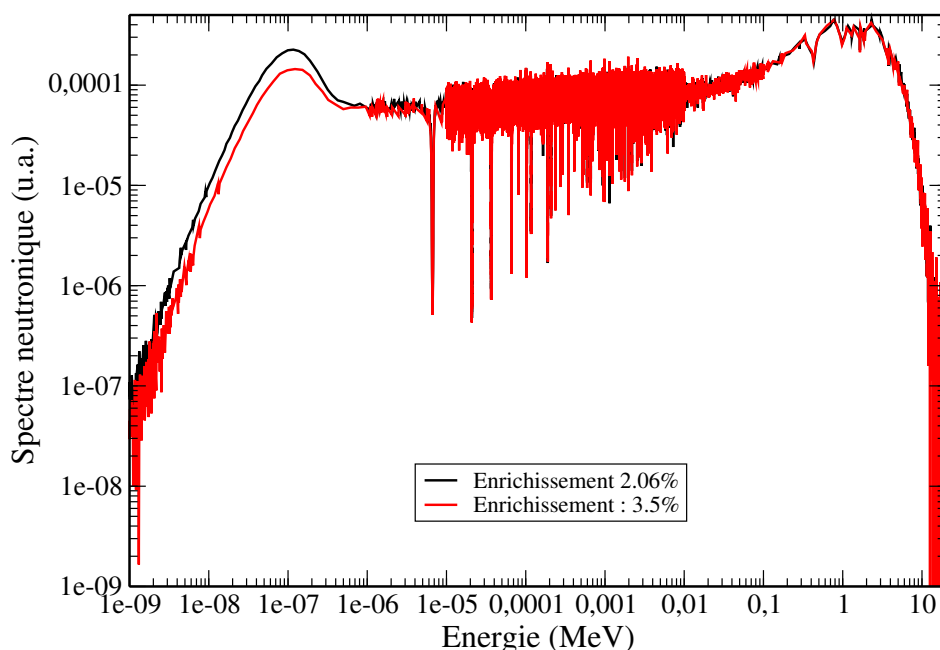


FIGURE 3.36 – Spectres neutroniques pour deux assemblages UOx enrichi en ^{235}U à 2.06% et à 3%

$\varepsilon = 2.06\%$		
grandeur	<i>ouvert</i>	<i>fermé</i>
$\sigma_{fiss}^{235U} [b]$	59.21	61.07
$k [-]$	1.0007	1.0774

TABLE 3.14 – Valeurs de σ_{fiss}^{235U} et de k pour les assemblages réduits de 40 cm ouvert et fermé

Comme pour l'assemblage enrichi à 3.5% § 3.5.2, la section efficace microscopique de fission change de manière significative entre la configuration ouverte et celle fermée. L'effet de spectre dû aux fuites impacte en fait la globalité de la géométrie. Même si l'assemblage ouvert et enrichi à 2.06% est critique, la valeur de la section efficace de fission asymptotique est très différente par rapport aux σ_{fiss}^{235U} calculées par les modèles B_1 et *albédo* du tableau 3.11. En modifiant l'enrichissement pour devenir critique, l'effet de spectre induit et la conséquente modification des sections efficaces sont très importants et supérieurs à l'effet des fuites.

3.5.3.3 Configuration critique par ajustement de la concentration en bore

Un autre moyen pour obtenir un assemblage critique à partir d'une géométrie et d'un enrichissement donné est de modifier la concentration en poison neutronique. Dans les assemblages du benchmark, l'eau du modérateur présente une concentration en bore de 450 ppm environ. Nous avons donc changé cette valeur, en réalisant une simulation avec des concentrations 3 fois et 4 fois plus élevées. Les assemblages, toujours de taille réduite de 40 cm, ont été simulés en configuration fermée. Le tableau 3.15 montre les valeurs de k et de la section efficace microscopique de fission pour les concentrations en bore choisies.

Nous observons une diminution de la section efficace de fission avec l'augmentation de la concentration en bore. Ce poison neutronique capture les neutrons thermiques. En conséquence, plus sa concentration est élevée dans le modérateur, plus la bosse thermique du spectre va baisser. Ainsi, le rapport Φ_1/Φ_2 augmente et la section efficace de fission de ^{235}U diminue.

$C_B [ppm]$	k	σ_{fiss}^{235U}
1350	1.050	37.70
1800	0.978	35.12

TABLE 3.15 – Valeurs de σ_{fiss}^{235U} et de k pour les assemblages réduits de 40 cm pour deux concentrations en bore : 1350 et 1800 ppm

Encore une fois, nous ne retrouvons pas les valeurs des sections efficaces données par les modèles de fuites pour aucun des deux cas, même si les k sont proches de 1. L'effet de spectre dû au bore est très fort, comme montré en figure 3.37 et bien plus important de l'effet des fuites. Si nous réalisons en fait une simulation de l'assemblage réduit avec

1350 ppm de bore ouvert d'un côté, nous obtenons un $k = 0.979$ et une $\sigma_{fiss}^{235U} = 37.12$. Or, l'impact sur la section efficace et donc sur le spectre neutronique à cause des fuites est sensiblement plus petit que celui dû au changement de la concentration en bore.

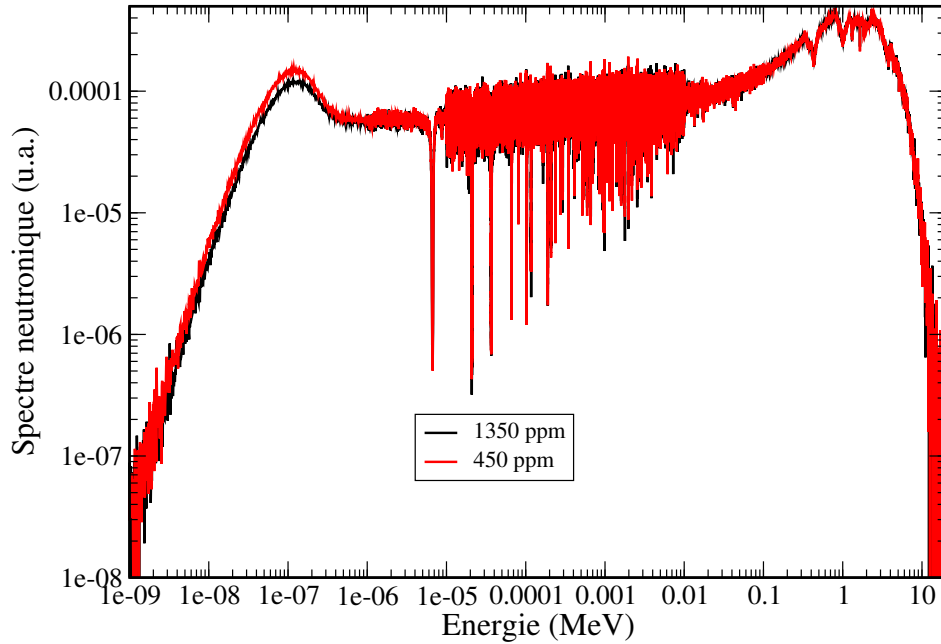


FIGURE 3.37 – Spectres neutroniques dans un assemblage UOx pour deux valeurs de concentration en bore : 450 et 1350 ppm

3.5.3.4 Configuration critique via changement de ν

La dernière méthode que nous avons utilisée pour simuler un assemblage critique consiste à changer artificiellement dans le code MCNP la valeur de ν , qui représente le nombre moyen des neutrons produits par fission. De cette façon, nous pouvons garder la même géométrie et le même enrichissement de 3.5% du benchmark et modifier seulement la valeur du k . Cette modification s'effectue dans la fonction *acenu.F90* des sources MCNP.

Pour effectuer cette opération, nous avons réalisé une simulation avec un $\bar{\nu}$ égal à $1/k_{\infty}$, qui correspond à $\bar{\nu} = \nu / 0.805$. Avec cette option, nous obtenons un k de 1.00076 (± 50 pcm). La valeur de la section efficace de fission de l' ^{235}U de cet assemblage fermé de 40 cm est de 44.30 b.

Comme avec les autres méthodes de modification du k , la valeur de la section efficace de fission obtenue diffère de celles données par les modèles de fuites. Le changement de ν ne modifie pas le spectre neutronique puisque la valeur de la section efficace de fission de l' ^{235}U calculée par cette méthode alternative est compatible avec le calcul *cube*. MCNP permet donc de calculer de manière fiable le facteur de multiplication même dans des conditions de sur ou de sous-criticité. Le flux neutronique pris en compte pour la simulation est bien le flux fondamental critique.

3.5.3.5 Validité des modèles de fuites au voisinage de la criticité

Comme dernier exercice, nous avons testé la validité du modèle B_1 dans un cas proche de la criticité. Reprenons la configuration critique utilisée dans § 3.5.3.2. L'assemblage ouvert enrichi à 2.06% présente un k de 1.007 et une section efficace de fission de l' ^{235}U de 59.21 b (tableau 3.14). Dans le cas réfléchi, le facteur de multiplication augmente à 1.07.

Nous avons donc réalisé une simulation de cet assemblage fermé en appliquant le modèle B_1 , cette simulation étant censée représenter la configuration à 2.06% ouverte. Le tableau 3.16 reporte les résultats de la simulation Serpent avec le modèle de fuites et de notre simulation MCNP de l'assemblage ouvert d'un côté.

Configuration	$\sigma_{fiss}^{235\text{U}} [b]$
<i>ouvert MCNP</i>	59.21
<i>fermé modèle B_1</i>	59.40

TABLE 3.16 – Valeurs de $\sigma_{fiss}^{235\text{U}}$ pour l'assemblage de 40 cm simulé avec MCNP (ouvert d'un côté) et avec Serpent (fermé et utilisant le modèle de fuites B_1)

Nous observons que la différence entre les deux valeurs de section efficace (écart relatif est de 0.3%, compatible avec les incertitudes statistiques) n'est pas aussi grande que celle entre les sections efficaces de fission calculées pour l'assemblage à 3.5%, qui présente un k fortement supérieur à 1. Il semble donc que le modèle B_1 estime bien l'impact des fuites neutroniques seulement aux alentours de la criticité.

Ainsi, nous observons que la correction de criticité due aux fuites neutroniques ne peut être valable uniquement si la configuration infinie est proche de la criticité (aux fuites neutroniques près). Dans la recherche de buckling effectué par Serpent, l'utilisateur rentre un coefficient de multiplication cible qui est pris égal à 1 puisque la modélisation représente un assemblage en situation critique. Cependant, nous montrons que les effets de spectre induits par les modifications d'enrichissement ou par la modification de la concentration en bore sont bien plus importants que les effets de spectre dus aux fuites. Les modèles de fuites ne sont donc pas pertinents pour corriger les sections efficaces asymptotiques dans les calculs d'évolution effectués à l'IN2P3 avant la réalisation de ce travail.

La recherche de criticité par modification du nombre de neutrons émis par fission montre aussi que cette correction de criticité porte très mal son nom puisqu'il s'agit bien d'une modification de spectre neutronique due aux fuites et non due à une mauvaise estimation de la production de neutron par rapport à leur disparition. Les modifications de spectre sont liées aux conditions aux limites des flux rapide et thermique (conditions d'annulation du flux), responsables du durcissement du spectre asymptotique dans nos simulations. La valeur absolue de la réactivité en tant que telle n'apporte pas d'effet de spectre, mais une modélisation largement sur ou sous-critique implique une mauvaise estimation des conditions d'irradiation du combustible (concentration en bore, fuites,...) et donc une mauvaise estimation du spectre.

3.6 Conclusions et bilan

Dans ce chapitre, nous avons étudié l'effet des fuites axiales de neutrons, grâce à la comparaison d'un assemblage ouvert avec un assemblage fermé, représentant la simulation infinie de référence. Afin de considérer une configuration plus réaliste, nous avons simulé aussi un assemblage avec plénum et réflecteur aux extrémités verticales. Ces trois configurations d'assemblages ont une hauteur de 4 m environ et présentent une discrétisation axiale en 18 zones de 20.32 cm chacune § 3.2.2.

La comparaison des inventaires totaux (moyennés sur les 80 évolutions indépendantes réalisées) en fin d'irradiation montre des écarts significatifs pour l'assemblage ouvert : presque 5% pour l' ^{235}U et de 3 à 14% pour les actinides mineurs, tels que américium et curium § 3.3.1.2. Même suite à la renormalisation au Burn-Up local de chacune des zones axiales, les écarts de cette configuration sont encore importants, montrant un effet de spectre fort et localisé dû aux fuites de neutrons § 3.3.4.1.

À travers une analyse neutronique fine nous remarquons un durcissement du spectre de neutrons dans les dernières zones axiales de l'assemblage ouvert : les fuites neutroniques rendent le spectre de neutrons plus dur au voisinage des extrémités ouvertes § 3.4. La théorie de la diffusion permet de retrouver de manière qualitative ce comportement observé seulement avec une modification des conditions aux limites du flux, pour tenir en compte de la différence des longueurs d'extrapolation du flux thermique et du flux rapide § 3.4.3.2.

Grâce à une discrétisation axiale plus fine, nous pouvons quantifier la zone d'impact des fuites : le durcissement de spectre est localisé sur les 5 derniers centimètres de l'assemblage ouvert § 3.5.1. La taille de l'assemblage simulé a aussi un impact important sur la valeur du spectre neutronique (et donc de la section efficace de fission de l' ^{235}U) asymptotique § 3.5.2. Enfin, une comparaison avec les modèles de fuites existants est réalisée § 3.5.3, montrant que, même si l'assemblage simulé est reporté dans des conditions de criticité comme celles recherchées par les modèles, les résultats de nos simulations sont toujours différents par rapport à ceux des modèles numériques. Par contre, si l'assemblage simulé en conditions ouvertes est dans une situation assez proche de la criticité, la simulation utilisant les modèles de fuites neutroniques donne des résultats comparables à ceux de nos études. Les évolutions assemblages étant parfois très loin d'une configuration proche de la criticité, l'utilisation des modèles pour prendre en compte l'effet dû aux fuites semble non adaptée avant la prise en compte des autres paramètres impactant le spectre de neutrons.

Synthèse des fuites axiales

Assemblage ouvert axialement de taille réelle discrétisé en 18 zones axiales :

Effet de spectre (BOC)

zone	$\Delta\sigma_{fiss}^{235U}\%$
asymptotique	-0.02
à l'interface	-1.92

- effet de durcissement de spectre dans les zones extrêmes de l'assemblage

Biais sur les inventaires (EOC)

40 GWj/t			
isotope	$\Delta_{\infty}\%$	isotope	$\Delta_{\infty}\%$
^{235}U	4.94	^{241}Pu	1.46
^{239}Pu	-0.76	^{241}Am	-3.74
^{240}Pu	-1.81	^{241}Cm	14.94

Assemblage ouvert axialement de 80 cm discrétisé en zones de 1 cm :

Effet de spectre (BOC)

zone	$\Delta\sigma_{fiss}^{235U}\%$
asymptotique	-1.82
à l'interface	-27.54

- effet de taille sur la valeur de la section efficace asymptotique

Cross-talking inter-assemblages

Sommaire

4.1	Introduction à la problématique du voisinage	122
4.2	Description de la méthodologie d'étude	124
4.3	Analyse de l'impact de la lame d'eau	126
4.3.1	Impact de la lame d'eau en début de cycle	127
4.3.2	Impact de la lame d'eau en évolution	128
4.3.2.1	Évolution du ^{239}Pu	129
4.3.2.2	Évolution de l' ^{235}U	130
4.3.3	Conclusion sur l'impact de la lame d'eau	131
4.4	Analyse de l'impact du voisinage	131
4.4.1	Analyse en début de cycle	132
4.4.1.1	Étude statistique	132
4.4.1.2	Étude en début d'irradiation	132
4.4.2	Analyse en évolution : configurations avec environnement non évoluant	133
4.4.2.1	Étude statistique	133
4.4.2.2	Étude en évolution	134
4.4.2.3	Impact de l'hétérogénéité du voisinage	141
4.4.3	Analyse en évolution : configurations avec environnement évoluant .	145
4.4.3.1	Analyse de l'évolution	145
4.4.3.2	Analyse de l' ^{241}Am	147
4.4.3.3	Conclusions sur l'environnement évoluant	149
4.5	Impact du voisinage : prise en compte du rechargement	150
4.6	Analyse de l'interaction UOx-MOx	153
4.6.1	Analyse en début d'irradiation	153
4.6.1.1	Configuration sans lame d'eau	154
4.6.1.2	Configuration avec lame d'eau	155
4.6.2	Analyse en évolution	155
4.6.2.1	Configuration avec entourage non évoluant	155
4.6.2.2	Configuration avec entourage évoluant	157
4.7	Conclusions et bilan	158

4.1 Introduction à la problématique du voisinage

Le cœur d'un réacteur nucléaire est fortement hétérogène : différents types d'assemblages sont placés les uns à côté des autres selon un pavage varié comme illustré dans la figure 4.1. Cette figure représente un plan de chargement d'un REP900 chargé avec du combustible UOx et MOx. Dans ce cas, l'hétérogénéité est donnée par les différents types d'assemblages (UOx ou MOx), mais aussi par le nombre de cycles de rechargement déjà effectués par chaque assemblage (1, 2, 3 ou 4), ce qui donne une composition isotopique différente. La distribution des assemblages est étudiée de manière à avoir la puissance la plus homogène possible dans tout le cœur. En fait, la puissance locale dégagée par chaque assemblage est limitée par des contraintes thermiques et technologiques afin d'assurer la sûreté du cœur à chaque instant. Pour éviter que certains assemblages ne dépassent la valeur de puissance locale maximale, il est souhaitable que la puissance soit la plus homogène possible pour éviter l'apparition de point chaud. Afin d'obtenir cette condition, plusieurs stratégies sont mises en œuvre.

	H	G	F	E	D	C	B	A
8	UO ₂ 3	UO ₂ 2	UO ₂ 2	UO ₂ 4	UO ₂ 2	UO ₂ 4	UO ₂ 1	UO ₂ 4
9	UO ₂ 2	UO ₂ 4	UO ₂ 3	UO ₂ 2	MOX 3	UO ₂ 3	MOX 1	UO ₂ 4
10	UO ₂ 2	UO ₂ 3	UO ₂ 2	MOX 3	UO ₂ 2	UO ₂ 3	UO ₂ 1	
11	UO ₂ 4	UO ₂ 2	MOX 3	UO ₂ 2	UO ₂ 4	MOX 1	UO ₂ 1	
12	UO ₂ 2	MOX 3	UO ₂ 2	UO ₂ 4	UO ₂ 2	UO ₂ 1		
13	UO ₂ 4	UO ₂ 3	UO ₂ 3	MOX 1	UO ₂ 1			
14	UO ₂ 1	MOX 1	UO ₂ 1	UO ₂ 1				
15	UO ₂ 4	UO ₂ 4						

FIGURE 4.1 – Plan de chargement en gestion hybride MOX de REP 900 MW_{el}. Source image [Bodin, 2010]

Pour le pilotage, des grappes de contrôle (déjà présentées dans le chapitre 2) sont placées à des endroits spécifiques du cœur et permettent de gérer la distribution axiale de puissance. Dans les calculs cellules réalisés à l'IN2P3, les barres de contrôle ne sont pas simulées. Par contre, des tubes guides remplis d'eau (25 sur les 289 totaux dans l'assemblage) permettent de simuler la chute des grappes.

En plus des grappes, des poisons neutroniques sont présents dans le cœur afin de gérer l'évolution de la réactivité au cours du temps. Ils sont soit solubilisés dans le modérateur (comme l'acide borique vu en chapitre 2), soit rajoutés au combustible dans un certain nombre d'assemblages (poisons consommables). Dans les réacteurs français, l'élément utilisé comme poison consommable est le gadolinium, présent sous forme de poudre d'oxyde Gd_2O_3 , mélangée à celle d'oxyde d'uranium. Le rôle du poison consommable est, d'une

part, de contribuer à réduire la réactivité initiale du cœur et, d'autre part, d'atténuer les hétérogénéités radiales de puissance. Pour cette dernière raison, la disposition des assemblages gadoliniés est étudiée de sorte à aplatir la nappe de flux dans le plan radial à certains endroits stratégiques. Leur utilisation est cependant réservée aux réacteurs appelant des combustibles fortement enrichis (au dessus de 3.7%) [Grard \[2014\]](#). Dans ce cas, la compensation de la réactivité initiale ne peut plus être faite seulement par le bore, dont la concentration est limitée pour garder un coefficient de contre-réaction du modérateur négatif. Dans nos simulations, les assemblages gadoliniés ne sont pas pris en compte puisque nous considérons des assemblages enrichis à 3.5% en début d'irradiation.

Une autre source d'hétérogénéité dans le cœur du réacteur concerne la gestion du combustible par rechargements partiels qui impose une juxtaposition d'assemblages neufs et d'assemblages plus vieux. La figure 4.2, qui représente un plan de rechargement d'un REP 1300 MW_{el} , en donne un exemple.

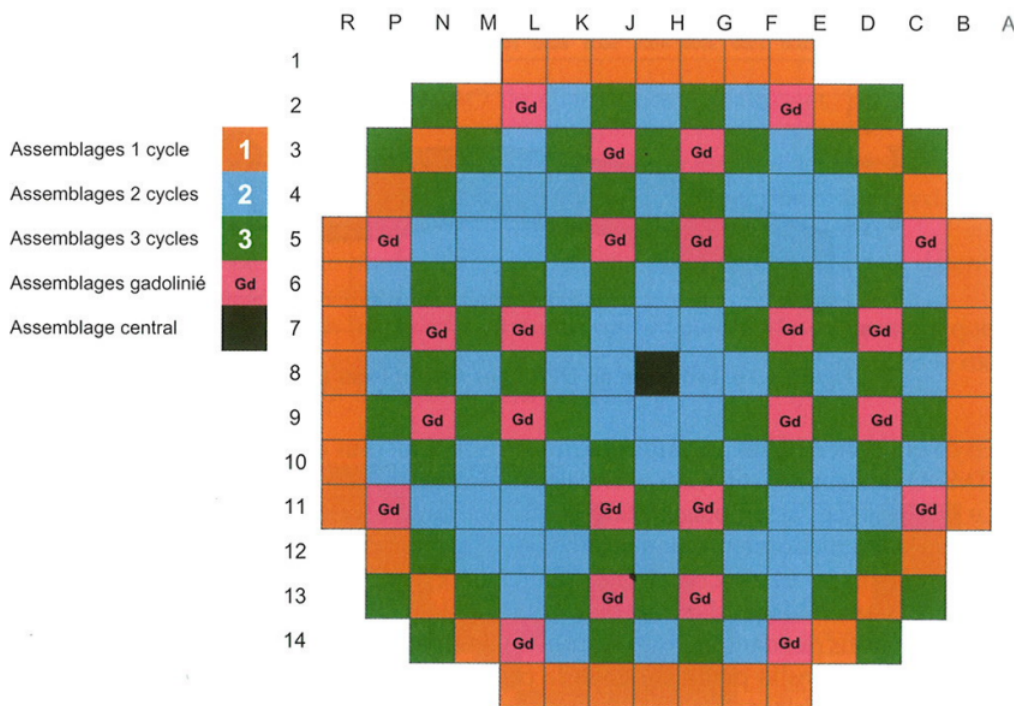


FIGURE 4.2 – Plan de chargement d'un REP 1300 MW. Source image [\[Grard, 2014\]](#)

Chaque couleur correspond à un différent niveau d'irradiation : les assemblages orange sont frais, ceux en bleu et ceux en vert ont déjà effectué respectivement un et deux cycles d'irradiation. Parmi eux, il y a aussi un certain nombre d'assemblage gadoliniés (normalement sur les 64 assemblages neufs d'une recharge, 24 sont gadoliniés). Les assemblages neufs sont placés vers les bords du cœur pour homogénéiser la puissance radiale, tandis que les autres assemblages moins réactifs sont disposés en damier au centre, à l'exception des bouts de diagonales, où l'on place des assemblages usés pour protéger la cuve.

Dans le calcul cellule, le déplacement de l'assemblage au cours de son séjour en réacteur n'est pas pris en compte : l'assemblage subit un flux caractéristique d'une géométrie infinie

pendant toute son évolution. C'est seulement *a posteriori*, dans la phase du calcul cœur, que le plan de rechargement entre en jeu pour l'estimation finale du temps de cycle. Négliger l'impact de l'environnement à l'étape du calcul cellule pourrait donner lieu à des biais importants sur les évolutions de grandeurs fondamentales pour le calcul cœur et pour l'estimation des inventaires en fin de cycle. La modification du spectre de l'assemblage environné, due à l'échange des neutrons avec les assemblages voisins, induit une variation des sections efficaces et donc de l'évolution des isotopes au cours du temps.

Ce chapitre présente l'étude et l'analyse de l'impact de l'environnement sur le modèle assemblage, en utilisant la géométrie décrite dans § 4.2. Le paragraphe 4.3 aborde l'effet de la présence d'une épaisseur d'eau dans l'espace inter-assemblages, nécessaire au bon déroulement du chargement du combustible dans le cœur. Cette épaisseur d'eau n'est pas toujours prise en compte dans les calculs cellules, notamment dans le benchmark utilisé dans le chapitre 3. Le paragraphe 4.4 étudie l'impact de l'environnement, constitué d'assemblages de Burn-Up différents. Enfin, dans § 4.5 l'impact du rechargement est évalué.

4.2 Description de la méthodologie d'étude

Afin d'étudier l'impact de l'environnement sur l'évolution d'un assemblage, plusieurs simulations de différentes configurations géométriques ont été réalisées. Chacune d'entre elles est constituée d'un assemblage central, qui représente l'assemblage d'étude, entouré par des assemblages différents. Le but est d'estimer les biais des inventaires en fin de cycle de l'assemblage central induits par la modification du spectre neutronique due aux assemblages voisins. Pour s'affranchir des effets de fuites, chacune des configurations est placée en condition infinie, c'est-à-dire que nous avons considéré l'ensemble des surfaces délimitant la géométrie comme des surfaces réfléchissantes. Dans la suite, les résultats sont comparés au cas de référence : l'assemblage infini. La quantification de cet effet de spectre permet ainsi de comprendre l'importance de l'approximation qui néglige le voisinage dans le modèle assemblage (chapitre 2).

Deux types d'environnement peuvent être envisagés : les réacteurs moxés, où des combustibles MOx se juxtaposent à des combustibles UOx, et les réacteurs non-moxés, où la différence entre les assemblages est donnée par une différence de Burn-Up. Ce chapitre est principalement dédié aux réacteurs 100% UOx, mais une analyse simplifiée d'un environnement UOx pour un assemblage MOx a été aussi étudiée et les résultats sont présentés dans § 4.6.

L'assemblage d'étude se trouve au centre d'une géométrie 3x3 représentée sur la figure 4.3. Les caractéristiques de l'assemblage central UOx sont les mêmes que celles du benchmark présenté dans le chapitre précédent (voir tableau 3.1). La hauteur simulée est de 81.28 cm et l'ensemble des surfaces délimitant la géométrie est réfléchissant. Les configurations choisies, montrées schématiquement sur la figure 4.4, diffèrent entre elles selon le Burn-Up des assemblages qui constituent l'environnement. Les assemblages d'entourage peuvent avoir le même Burn-Up (configurations notées dans la suite *A*, *B* et *Z*) ou des Burn-Up différents, repartis en damier (configurations *C*, *C2*). Les valeurs des Burn-Up

environnant (0, 15 ou 30 GWj/t) associés à chaque configuration sont données dans le tableau 4.1.

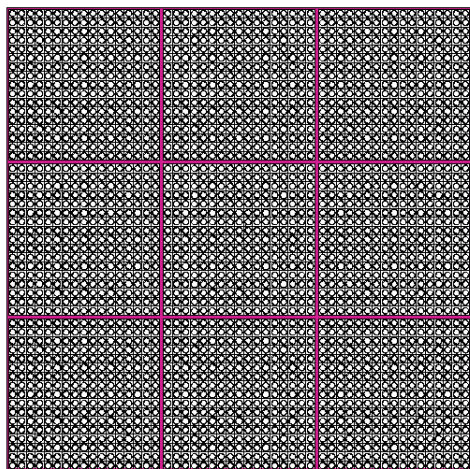


FIGURE 4.3 – Représentation des configurations 3x3 avec lame d'eau

Configuration	BU assemblages autour
Z	0 GWj/t
A	15 GWj/t
B	30 GWj/t
C	15 – 30 GWj/t ¹
C2	30 – 15 GWj/t
Options	
Entourage	Évoluant Pas évolutant
Lame d'eau	non oui

TABLE 4.1 – Caractéristiques des configurations

Le choix d'un Burn-Up environnant de 15 ou de 30 GWj/t est arbitraire et vise à montrer l'impact d'un entourage à faible et à moyen Burn-Up sur l'évolution de l'assemblage du centre de la géométrie. Les compositions des assemblages environnant sont issues de l'évolution infinie de référence. À partir de cette dernière, nous ne pouvons pas évaluer les inventaires exactement à 15 et à 30 GWj/t . Pour cette raison, nous avons pris les valeurs les plus proches, qui sont de 13 471 MWj/t et de 30 309 MWj/t . Précisons que ces configurations ne sont pas pensées pour être réalistes mais pour optimiser les effets physiques à observer et à prendre en compte lors d'une simulation plus précise d'un cœur REP.

L'ensemble des calculs a été réalisé en utilisant deux options : un entourage évoluant ou non et la prise en compte d'une lame d'eau entre les assemblages ou non. L'étude de la présence de la lame d'eau est due à deux raisons. D'une part, l'absence de lame d'eau devrait maximiser les effets de voisinage et, d'autre part, cette lame d'eau n'existait pas dans la géométrie du benchmark § 3.2.1. Cependant, comme les effets neutroniques de cet espace inter-assemblages rempli d'eau sont loin d'être négligeables, il nous est apparu important de la considérer.

Une fois l'impact de la lame d'eau quantifié § 4.3, les résultats concernant les différentes configurations seront traités dans les sous-paragraphe 4.4.1, 4.4.2 et 4.4.3, qui présentent respectivement la comparaison entre les configurations sans et avec lame d'eau, l'analyse des configurations avec entourage non évolutant et celle des configurations avec entourage évolutant.

Chaque simulation a été réalisée avec 10 000 particules par cycle, 200 cycles inactifs et

1. Dans l'ordre, les Burn-Up des assemblages en face et ceux sur les diagonales par rapport à l'assemblage central; ainsi dans la configuration C les assemblages en contact direct avec l'assemblage central sont à 15 GWj/t et ceux dans les coins à 30 GWj/t ; l'inverse pour la configuration C2

200 cycles actifs. Comme pour l'évolution de l'assemblage infini de référence, les évolutions des configurations environnées ont été coupées en 16 pas de temps.

Afin de connaître les erreurs statistiques et d'avoir une estimation fiable des inventaires isotopiques, plusieurs simulations indépendantes pour chaque configuration ont été effectuées. Le tableau 4.2 reporte le nombre de simulations réalisées pour chaque configuration. Pour certaines, ce nombre est très faible à cause du temps de calcul élevé. À titre d'exemple, une simulation d'évolution complète d'une configuration avec entourage non évoluant nécessite une durée de 7 heures et 30 minutes sur 7 processeurs.

Configuration	entourage fixe		entourage évoluant
<i>Option</i>	<i>sans lame</i>	<i>avec lame</i>	<i>avec lame</i>
∞	100	100	/
A	100	100	1
B	100	100	1
C	1	100	1
C2	1	100	1

TABLE 4.2 – Nombre de simulations indépendantes réalisées pour chaque configuration

Z			A			B		
0	0	0	15	15	15	30	30	30
0	<u>0</u>	0	15	<u>0</u>	15	30	<u>0</u>	30
0	0	0	15	15	15	30	30	30
C			C2			numérotation		
30	15	30	15	30	15	5	4	3
15	<u>0</u>	15	30	<u>0</u>	30	6	<u>1</u>	2
30	15	30	15	30	15	7	8	9

FIGURE 4.4 – Configurations étudiées et numérotation des assemblages

4.3 Analyse de l'impact de la lame d'eau

Ce paragraphe est dédié à l'étude de l'impact de la lame d'eau inter-assemblages. Une épaisseur de quelques millimètres d'eau modératrice est présente entre deux assemblages consécutifs et pourrait apporter un biais sur le calcul d'évolution si négligée puisque cette eau thermalise le spectre neutronique. Pour comprendre l'effet de la présence de cette

lame d'eau, des simulations avec et sans lame d'eau de 0.0025 m ont été comparées pour l'ensemble des configurations décrites précédemment. L'analyse se divise en deux parties : en début de cycle § 4.3.1, qui permet de quantifier l'effet de spectre dû à la présence du modérateur autour de l'assemblage, et en évolution, donnant l'estimation des écarts des inventaires en fin d'irradiation § 4.3.2.

4.3.1 Impact de la lame d'eau en début de cycle

Pour représenter l'effet de spectre induit par la lame d'eau, considérons le ratio des flux rapide sur thermique, Φ_1/Φ_2 , avec une coupure énergétique à 0.625 eV, à l'image de l'analyse effectuée dans le chapitre précédent. Les valeurs en début d'irradiation sont reportées dans le tableau 4.3. Lorsque l'étude statistique a été effectuée, les valeurs présentées dans ce tableau et dans la suite sont les moyennes arithmétiques de l'ensemble des calculs réalisés (tableau 4.2). Dans le cas contraire, les valeurs sont issues d'une simulation isolée.

Φ_1/Φ_2	∞	Z	A	B
<i>sans lame</i>	6.42	6.46	6.85	7.13
<i>avec lame</i>	6.01	6.06	6.41	6.66

TABLE 4.3 – Rapport des flux rapide et thermique pour les configurations avec et sans lame d'eau

Rappelons que plus la valeur de Φ_1/Φ_2 est élevée, plus le spectre est dur. Comme attendu, en rajoutant du volume de modérateur, les configurations avec lame d'eau présentent un spectre plus thermique : le ratio Φ_1/Φ_2 est plus faible que dans les configurations sans lame d'eau. La comparaison des configurations montre un durcissement du spectre neutronique de l'assemblage central induit par les assemblages voisins qui ont un Burn-Up plus élevé. Plus l'écart de Burn-Up est important, plus l'impact sur le spectre est visible.

La variation relative des sections efficaces, reportée dans le tableau 4.4, et définie par l'équation 4.1, peut être utile pour quantifier l'impact de la lame d'eau.

$$\frac{\sigma^{\text{avec lame}} - \sigma^{\text{sans lame}}}{\sigma^{\text{sans lame}}} \% \quad (4.1)$$

Notons que cet écart est du même ordre de grandeur pour toutes les configurations étudiées.

$\delta\sigma/\sigma\%$	∞	Z	A	B
$^{235}\text{U} (n, f)$	5.67	5.27	5.42	5.29
$^{239}\text{Pu} (n, f)$	5.05	4.73	5.10	4.97
$^{238}\text{U} (n, \gamma)$	1.43	1.42	1.11	0.71
Φ	-5.46	-5.11	-5.22	-5.04

TABLE 4.4 – Variations relatives des σ et de Φ entre configuration avec et sans lame d'eau

De même que pour le ratio Φ_1/Φ_2 , les sections efficaces moyennes des différentes configurations montrent une thermalisation du spectre pour les configurations avec lame d'eau : ces dernières présentent des sections efficaces de fission plus importantes d'environ 5% autant pour l' ^{235}U que pour le ^{239}Pu . En ce qui concerne la section efficace de capture de l' ^{238}U , les variations sont plus faibles (environ 1%). En effet, la section efficace de l' ^{238}U est beaucoup moins sensible à la variation du spectre neutronique.

Finalement, en début de cycle, la lame d'eau implique une modération plus importante du spectre neutronique qui aura une implication sur l'évolution des inventaires isotopiques. Le flux neutronique varie lui aussi de 5% environ, ce qui impactera l'ensemble des taux de réaction pendant l'évolution. En fait, les sections efficaces de fission et le flux sont fortement corrélés, à cause de la normalisation du flux à la puissance. Puisque les simulations sont réalisées à puissance constante (comme vu dans le chapitre 2), une variation de sections efficaces par effet de spectre impliquera une variation de flux de sorte à maintenir cette condition. En début de cycle, puisque le seul noyau fissile est l' ^{235}U , la puissance est donnée par l'équation 4.2.

$$P = N_{^{235}\text{U}} \sigma_{fiss}^{^{235}\text{U}} \Phi = \text{constante} \quad (4.2)$$

où $N_{^{235}\text{U}}$ est la densité atomique des noyaux d' ^{235}U , exprimée en at/cm^3 .

En conséquence, si la section efficace de fission des configurations avec lame d'eau est plus grande que celles sans lame et vu que la quantité de fissile à $t = 0$ est la même pour les deux configurations, la condition de puissance constante implique un flux diminué d'une quantité inversement proportionnelle à la section efficace de fission de l' ^{235}U . Pour estimer et comprendre les écarts des inventaires en fin de cycle il est donc nécessaire de connaître la valeur de $\langle \sigma \Phi \rangle$ de chacun des isotopes pour les configurations avec et sans lame d'eau.

4.3.2 Impact de la lame d'eau en évolution

Nous avons choisi de considérer pour cette étude les isotopes fissiles principaux : ^{235}U et ^{239}Pu . Les biais sur les quantités en fin d'irradiation (au Burn-Up de 40 GWj/t) induits par la présence de lame d'eau dans la modélisation sont estimés pour chaque configuration et reportés dans le tableau 4.5.

$\delta N^i / N^{i0}\%$	∞	Z	A	B
^{235}U	-4.63	-4.59	-4.02	-4.01
^{239}Pu	-7.03	-6.21	-6.16	-6.36

TABLE 4.5 – Variations relatives des inventaires à 40 GWj/t entre configurations avec et sans lame d'eau

4.3.2.1 Évolution du ^{239}Pu

Comme vu dans la section précédente, pour toutes les configurations nous observons que :

$$(\sigma_r^i)^{AL} > (\sigma_r^i)^{SL} \quad (4.3)$$

$$\Phi^{AL} < \Phi^{SL} \quad (4.4)$$

où σ_r^i symbolise la section efficace de la réaction r , sans seuil en énergie, de l'isotope i et où AL se réfère à la configuration « avec lame » d'eau et SL à celle « sans lame ». Par contre, comme la variation de la section efficace de capture neutronique de ^{238}U induite par la présence de la lame d'eau est plus faible que la variation de la section de fission de ^{235}U , le taux de réaction de production du ^{239}Pu vérifie l'inégalité 4.5.

$$(\sigma_c^{238\text{U}}\Phi)^{AL} < (\sigma_c^{238\text{U}}\Phi)^{SL} \quad (4.5)$$

Cette différence entre les taux de capture impacte donc l'évolution du ^{239}Pu qui est gouvernée par l'expression 4.6.

$$\frac{dN_{239\text{Pu}}}{dt} = \sigma_c^{238\text{U}} N_{238\text{U}} \Phi - \sigma_c^{239\text{Pu}} N_{239\text{Pu}} \Phi - \sigma_f^{239\text{Pu}} N_{239\text{Pu}} \Phi \quad (4.6)$$

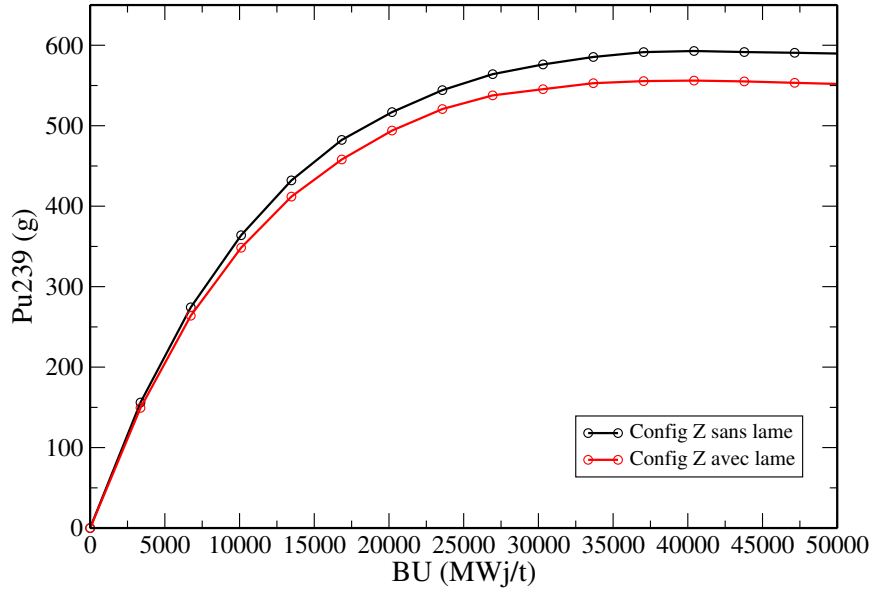


FIGURE 4.5 – Évolution du ^{239}Pu en fonction du temps pour les configurations Z sans et avec lame d'eau

Dans cette équation, la disparition du ^{239}Pu par réaction nucléaire peut être négligée pour des temps proches de zéro puisque la quantité de ^{239}Pu est très faible. La production de cet isotope est considérée en début d'évolution comme proportionnelle au taux de capture de ^{238}U . En conséquence, la pente de production du ^{239}Pu dans la première partie

de l'irradiation est plus faible pour les configurations avec lame d'eau par rapport à celles sans lame d'eau. Pendant toute la durée de l'irradiation, la variation de ^{239}Pu reste plus importante pour la modélisation qui prend en compte la lame d'eau. À l'équilibre l'expression de la quantité de ^{239}Pu fait apparaître le ratio des sections efficaces de capture de l' ^{238}U sur celle de fission du ^{239}Pu , comme vu dans le chapitre précédent (équation 3.9). Comme la variation de la section efficace du ^{239}Pu est plus importante que celle de l' ^{238}U , l'équilibre est modifié à la baisse par la modélisation de la lame d'eau. En fin d'irradiation (à 40 GWj/t), la différence atteint un écart de -6% pour toutes les configurations.

Cet effet de la lame d'eau tout au long de l'irradiation est visible dans la figure 4.5, qui montre l'évolution de l'isotope ^{239}Pu pour la configuration Z sans et avec lame d'eau.

4.3.2.2 Évolution de l' ^{235}U

En ce qui concerne l' ^{235}U , nous observons une consommation de cet isotope plus élevée pour les configurations avec lame d'eau, impliquant des écarts en fin de cycle de l'ordre de -4% . La figure 4.6 montre l'évolution de l' ^{235}U pour les configurations Z. Pour expliquer ces écarts, il faut considérer que la consommation d' ^{235}U est liée à la production de ^{239}Pu . En effet, la puissance est proportionnelle au taux de fission total, soit à la somme sur tous les noyaux fissiles de leur taux de fission. Son expression est rappelée en 4.7 (en ne considérant que l' ^{235}U et le ^{239}Pu) :

$$P = N_{^{235}\text{U}} \sigma_{fiss}^{^{235}\text{U}} V_{fuel} E_{fiss}^{^{235}\text{U}} \Phi + N_{^{239}\text{Pu}} \sigma_{fiss}^{^{239}\text{Pu}} V_{fuel} E_{fiss}^{^{239}\text{Pu}} \Phi \quad (4.7)$$

où V_{fuel} est le volume total du combustible, E_{fiss} : l'énergie libérée par chaque fission, dépendante de l'isotope fissile, et $(\sigma_{fiss} N_{fiss} \Phi)$: le taux de fission est le produit des termes restants.

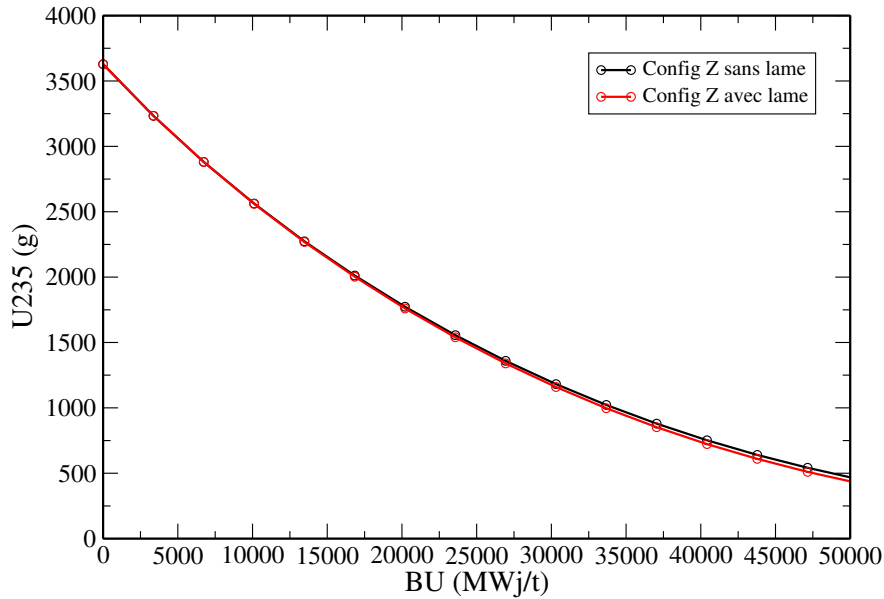


FIGURE 4.6 – Évolution de l' ^{235}U en fonction du temps pour les configurations Z sans et avec lame d'eau

Au cours de l'évolution, au fur et à mesure de l'apparition du ^{239}Pu , une partie des fissions de ^{235}U est compensée par les fissions du ^{239}Pu . Si la production de ^{239}Pu est plus importante, la concentration des noyaux fissiles sera plus importante et donc le flux neutronique sera plus faible. Par conséquent, ^{235}U sera moins consommé. Pour les configurations avec lame d'eau, la production du ^{239}Pu est plus faible comparée aux configurations sans lame, donc ^{235}U assure les fissions nécessaires au maintien de la puissance. Sa consommation est ainsi plus élevée pour les configurations avec lame d'eau.

4.3.3 Conclusion sur l'impact de la lame d'eau

Nous venons de montrer que la modélisation de l'espace inter-assemblages impacte grandement les simulations par la thermalisation globale du spectre neutronique. Cet effet de thermalisation induit des biais de sections efficaces moyennes très importants (de l'ordre de 5%). Du fait de la normalisation de la puissance, l'ensemble des taux de réaction est impacté, modifiant l'évolution des combustibles. Les biais observés en fin d'irradiation sur les quantités de ^{239}Pu sont d'environ 6%.

Dans le chapitre précédent, cette lame d'eau n'a pas été modélisée puisqu'elle n'apparaissait pas dans la description du benchmark. Cependant, au vu de son effet, il nous paraît important de la considérer et elle est systématiquement prise en compte dans la suite de ce travail.

4.4 Analyse de l'impact du voisinage

Ce paragraphe est dédié à l'analyse et à la comparaison des 5 configurations décrites dans § 4.2. Comme explicité précédemment, seules les configurations avec lame d'eau ont été prises en compte pour cette analyse qui se divise en deux parties : une étude en début de cycle § 4.4.1 et une étude en évolution § 4.4.2 et 4.4.3.

Les observables d'intérêt pour l'analyse en début d'irradiation sont les sections efficaces de fission des fissiles (^{235}U et ^{239}Pu) et celle de capture de l'isotope ^{238}U . À cause de la renormalisation à la puissance, une variation sur la section efficace de fission de ^{235}U en début d'irradiation provoque une variation du flux neutronique, ce qui implique une modification de l'ensemble des taux de réaction.

Les sections efficaces nous donnent une idée de la thermalisation du spectre neutronique, qui est aussi étudié via le rapport flux rapide sur flux thermique Φ_1/Φ_2 . Ces valeurs nous permettent d'évaluer l'impact des assemblages avoisinants sur le spectre de l'assemblage central. L'effet est dû aux compositions isotopiques différentes des assemblages voisins à cause de leur Burn-Up plus ou moins élevé.

L'analyse en évolution consiste à estimer les inventaires des isotopes principaux en fin de cycle, en les comparant à l'assemblage infini. Pour étudier de manière exhaustive l'impact de l'environnement en évolution, nous considérons un entourage évoluant ou fixe, c'est-à-dire que la composition isotopique des assemblages sera considérée comme constante en fonction du temps. Ces deux analyses seront traitées séparément dans deux parties

distinctes § 4.4.2.2 et 4.4.3.1.

4.4.1 Analyse en début de cycle

4.4.1.1 Étude statistique

Le tableau 4.6 montre les erreurs relatives pour les grandeurs qui sont utilisées dans la suite de l'analyse : les sections efficaces de fission des isotopes ^{235}U et ^{239}Pu et de capture de l' ^{238}U et le flux neutronique. Cette erreur relative est calculée grâce à l'expression 4.8 :

$$\varepsilon_X = \frac{\sigma_X}{\bar{X}} \% \quad (4.8)$$

où $\bar{X}$ est la moyenne de l'observable X pour chaque configuration sur le nombre de simulations indépendantes réalisées (nombres listés dans le tableau 4.2) et σ_X l'écart-type associé.

Configuration	∞	Z	A	B	C	C2
$\varepsilon_{\sigma_{fiss}^{235}\text{U}}$	0.09	0.18	0.16	0.16	0.18	0.19
$t = 0 \quad \varepsilon_{\sigma_{fiss}^{239}\text{Pu}}$	0.11	0.21	0.18	0.22	0.20	0.23
$\varepsilon_{\sigma_{capt}^{238}\text{U}}$	0.13	0.27	0.26	0.27	0.26	0.32
ε_{Φ}	0.09	0.17	0.15	0.15	0.16	0.17

TABLE 4.6 – Erreurs relatives des observables $\sigma_{fiss}^{235}\text{U}$, $\sigma_{fiss}^{239}\text{Pu}$, $\sigma_{capt}^{238}\text{U}$ et Φ pour toutes les configurations avec lame d'eau

Ce tableau nous montre que l'ensemble des incertitudes statistiques est inférieur à 0.3%.

4.4.1.2 Étude en début d'irradiation

Le tableau 4.7 représente le rapport Φ_1/Φ_2 ainsi que les sections efficaces d'intérêt pour l'ensemble des 5 configurations avec lame d'eau. Ces valeurs nous montrent un durcissement de spectre de l'assemblage central, équivalent à une augmentation du rapport Φ_1/Φ_2 , progressive avec le Burn-Up de l'entourage. Le cas Z, équivalent au cas infini de référence en début d'irradiation et présentant le Burn-Up environnant le plus faible, montre le spectre le plus thermique pour l'assemblage central. À l'opposée, le cas B a le spectre le plus rapide avec un Burn-Up environnant plus élevé.

Les valeurs de ce rapport de flux pour les configurations C et C2, qui ont comme Burn-Up environnant un mix des Burn-Up des configurations A et B, sont comprises entre la valeur de la configuration A et celle de la configuration B. Observons que les deux rapports Φ_1/Φ_2 sont très similaires, ce qui montre que l'effet de spectre en début d'irradiation est comparable pour les deux configurations qui présentent un même Burn-Up moyen des assemblages environnant. Le sous-paragraphe 4.4.2.3 étudie la possibilité

de modéliser l'hétérogénéité de l'environnement par des assemblages caractérisés par un Burn-Up moyen équivalent. Ce dernier est la simple moyenne des Burn-Up des assemblages constituant l'environnement dans la configuration hétérogène.

	∞	Z	A	B	C	C2
Φ_1/Φ_2	6.01	6.06	6.41	6.66	6.52	6.56
σ_{fiss}^{235U} [b]	46.49 $\delta\sigma/\sigma\%$	46.31 -0.38	44.11 -5.11	42.94 -7.82	43.46 -6.27	43.44 -6.42
σ_{fiss}^{239Pu} [b]	119.35 $\delta\sigma/\sigma\%$	118.97 -0.32	113.16 -5.19	109.86 -8.09	111.51 -6.37	111.12 -6.63
σ_{capt}^{238U} [b]	0.91 $\delta\sigma/\sigma\%$	0.91 0.00	0.89 -2.05	0.88 -3.54	0.88 -2.69	0.89 -2.68
Φ [$n\text{ cm}^2/s$]	$2.45\ 10^{14}$ $\delta\Phi/\Phi\%$	$2.45\ 10^{14}$ 0.37	$2.46\ 10^{14}$ 4.90	$2.57\ 10^{14}$ 7.32	$2.60\ 10^{14}$ 6.08	$2.60\ 10^{14}$ 6.21

TABLE 4.7 – Valeurs des rapports Φ_1/Φ_2 , valeur et variations des sections efficaces et du flux à $t = 0$ pour toutes les configurations

En ce qui concerne la configuration Z, comme elle représente strictement la configuration infinie en tout début de cycle, elle montre les mêmes valeurs de Φ_1/Φ_2 et de sections efficaces que l'assemblage infini, comme illustré dans le tableau 4.7.

Ce même tableau montre les différences relatives des sections efficaces listées précédemment et du flux par rapport à l'assemblage infini pour toutes les configurations analysées. Pour chaque grandeur X de la configuration i cette différence relative, exprimée par l'équation 4.9, doit être comparée aux incertitudes statistiques présentées dans le tableau 4.6.

$$\frac{X^i - X^\infty}{X^\infty} \% \quad (4.9)$$

L'effet de spectre dû à la présence d'un environnement différent par rapport à l'assemblage d'étude apporte une variation des sections efficaces de fission, qui à son tour provoque une contre réaction du flux neutronique (normalisation à la puissance). Nous observons en fait pour les flux neutroniques une variation similaire et de signe opposé à la section efficace de fission. Les valeurs des taux de réaction sont ainsi toutes modifiées. L'analyse de l'impact de l'entourage sur l'évolution de l'assemblage central commence par la comparaison des configurations avec un entourage non évoluant abordée dans le paragraphe suivant.

4.4.2 Analyse en évolution : configurations avec environnement non évoluant

4.4.2.1 Étude statistique

Le tableau 4.8 reporte les incertitudes statistiques relatives des inventaires isotopiques de l'ensemble des configurations avec entourage non évoluant pour deux valeurs de Burn-Up choisies. Observons que ces incertitudes sont très faibles (inférieures à 0.4% pour les

actinides majeurs), ce qui nous confirme une fois de plus la fiabilité des résultats des simulations effectuées.

Configuration	∞	Z	A	B	C	C2
30309 MWj/t	^{235}U	0.03	0.06	0.08	0.05	0.06
	^{239}Pu	0.08	0.21	0.18	0.17	0.19
	^{240}Pu	0.13	0.34	0.34	0.30	0.32
	^{241}Pu	0.15	0.30	0.30	0.29	0.30
	^{242}Pu	0.09	0.26	0.22	0.33	0.22
	^{241}Am	0.15	0.27	0.29	0.25	0.26
	^{244}Cm	0.37	0.85	0.75	0.71	0.74
40412 MWj/t	^{235}U	0.05	0.10	0.12	0.09	0.10
	^{239}Pu	0.09	0.21	0.19	0.19	0.22
	^{240}Pu	0.15	0.36	0.33	0.31	0.26
	^{241}Pu	0.13	0.29	0.29	0.27	0.26
	^{242}Pu	0.08	0.21	0.21	0.20	0.20
	^{241}Am	0.14	0.03	0.26	0.24	0.23
	^{244}Cm	0.26	0.68	0.53	0.53	0.55

TABLE 4.8 – Écarts-types en pourcent de plusieurs inventaires pour toutes les configurations à entourage non évoluant

4.4.2.2 Étude en évolution

Afin de comprendre les évolutions des inventaires des différentes configurations, nous regardons, comme dans § 4.3, la relation entre les taux de réaction des configurations environnées et ceux de l'assemblage infini. Nous avons observé que les écarts des configurations *C* et *C2* par rapport à l'assemblage infini sont toujours compris entre les écarts des configurations *A* et *B*, nous nous limitons donc à montrer les évolutions des inventaires des configurations *Z*, *A* et *B*. Le tableau 4.9 reporte les différences relatives en pourcentage par rapport à l'assemblage infini des isotopes principaux aux Burn-Up de 25 GWj/t et de 40 GWj/t et les figures 4.10 et 4.11 montrent, respectivement, les sections efficaces de fission de l' ^{235}U , de capture de l' ^{238}U et les flux, en fonction du Burn-Up de l'assemblage central.

Analyse de la configuration Z

Dans la configuration *Z*, l'assemblage central évoluant dans le temps est constamment entouré par des assemblages frais. Le spectre de ces assemblages sera donc toujours plus

thermique que celui de l'assemblage central. Les neutrons qui partent de l'assemblage central vers les assemblages environnants seront ainsi plus rapides que les neutrons qui voyagent en sens inverse. En conséquence, même si le spectre de l'assemblage central se durcit pendant l'évolution à cause de la production du ^{239}Pu (comme expliqué dans le chapitre 1, § 1.2.2.2), l'entourage constitué par des assemblages frais thermalise tout au long de l'évolution le spectre neutronique de l'assemblage d'étude.

Pendant toute l'évolution, la section efficace de fission de l' ^{235}U de la configuration Z , comme toutes les autres sections efficaces sans seuil, reste plus grande que celle de l'assemblage infini. Par conséquent, du fait de la normalisation à la puissance, le flux neutronique est plus faible. Les taux de réaction de la configuration Z sont plus petits comparés à ceux de l'assemblage infini, en particulier ceux qui régissent la production du ^{239}Pu et qui peuvent être explicités par les équations 4.10.

$$\begin{cases} \sigma_Z > \sigma_\infty \\ \Phi_Z < \Phi_\infty \\ (\sigma\Phi)_Z < (\sigma\Phi)_\infty \end{cases} \quad (4.10)$$

Cette équation est valable pour la section efficace de capture de l' ^{238}U . Les variations des sections sont telles que le taux de production du ^{239}Pu est plus faible dans la configuration Z . De plus, son taux de disparition $(\sigma_{(f+c)}\Phi)$ est plus important lui aussi, conduisant à un niveau d'équilibre du ^{239}Pu plus faible dans la configuration Z que dans l'assemblage infini. Comme le ^{239}Pu est moins produit, les isotopes fils sont moins produits également, comme montré sur la figure 4.9. À cause de ces inégalités, les écarts de la configuration Z montrés dans le tableau 4.9 sont négatifs pour les deux valeurs de Burn-Up.

isotope	Z	A	B	isotope	Z	A	B
25GWj/t				40GWj/t			
^{235}U	-0.70	0.49	1.12	^{235}U	-3.29	0.43	2.43
^{239}Pu	-3.16	0.58	2.71	^{239}Pu	-5.70	-0.95	1.41
^{240}Pu	-0.36	0.68	1.45	^{240}Pu	-1.39	-0.22	1.33
^{241}Pu	-1.41	1.03	1.70	^{241}Pu	-2.96	0.45	1.27
^{241}Am	-1.58	1.41	3.08	^{241}Am	-4.54	0.37	2.71

TABLE 4.9 – Écarts relatifs des inventaires par rapport à la configuration infinie à 25 et 40 GWj/t

Par rapport à l'assemblage infini, l'assemblage central de la configuration entourée consomme plus d' ^{235}U et produit moins de ^{239}Pu (comme illustré dans la figure 4.7). Cette sur-consommation de l' ^{235}U est expliquée par le manque de fissions produites par le ^{239}Pu .

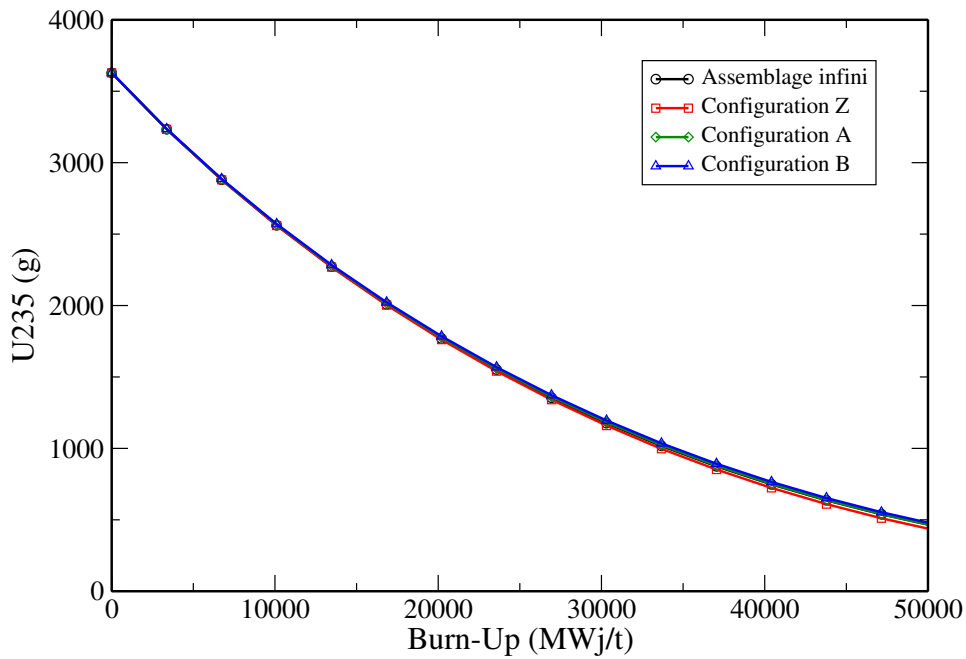
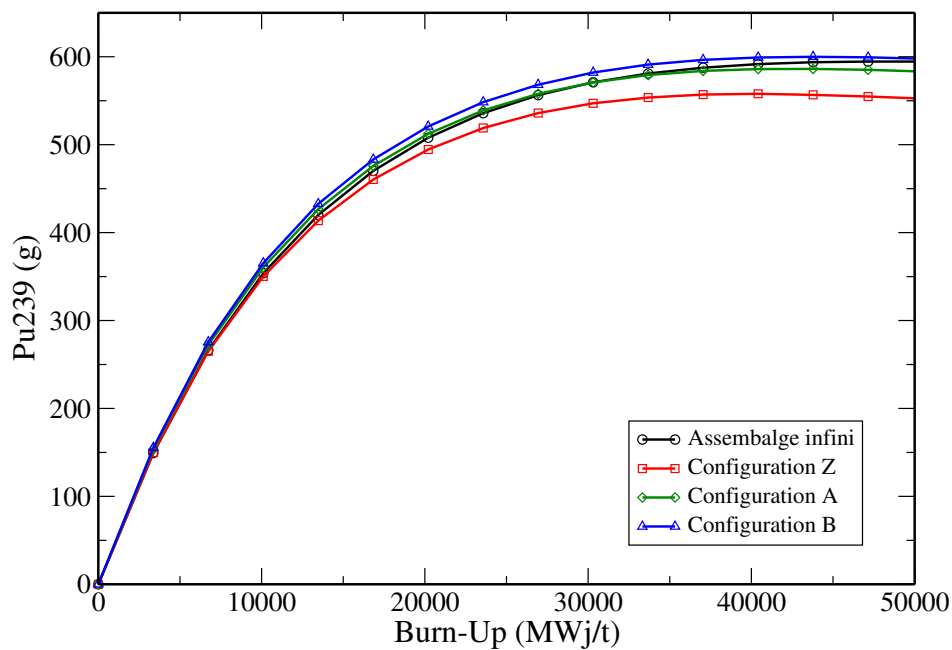
(a) ^{235}U en fonction du Burn-Up(b) ^{239}Pu en fonction du Burn-Up

FIGURE 4.7 – Évolution des inventaires des isotopes ^{235}U et ^{239}Pu en fonction du Burn-Up pour les configurations ∞ , Z, A et B

Analyse de la configuration B

En ce qui concerne la configuration B , nous pouvons raisonner de la même manière, mais les relations entre sections efficaces, flux et taux de réaction sont les suivantes 4.11 :

$$\begin{cases} \sigma_B < \sigma_\infty \\ \Phi_B > \Phi_\infty \\ (\sigma\Phi)_B > (\sigma\Phi)_\infty \end{cases} \quad (4.11)$$

Comme l'entourage durcit le spectre de l'assemblage central, les sections efficaces en début de cycle sont toutes plus faibles que pour le cas de référence (infini). Par conséquent, le flux neutronique est plus important pour compenser la relative faiblesse de la section efficace de fission de l' ^{235}U . Finalement, les taux de réaction de la configurations B sont plus importants que ceux de l'assemblage infini : la production du ^{239}Pu est donc plus importante pour la configuration entourée (à un écart de +1.4% à 40 GWj/t) et le fissile ^{235}U est moins consommé (écart de +2.4% en fin d'irradiation), comme illustré dans la figure 4.7.

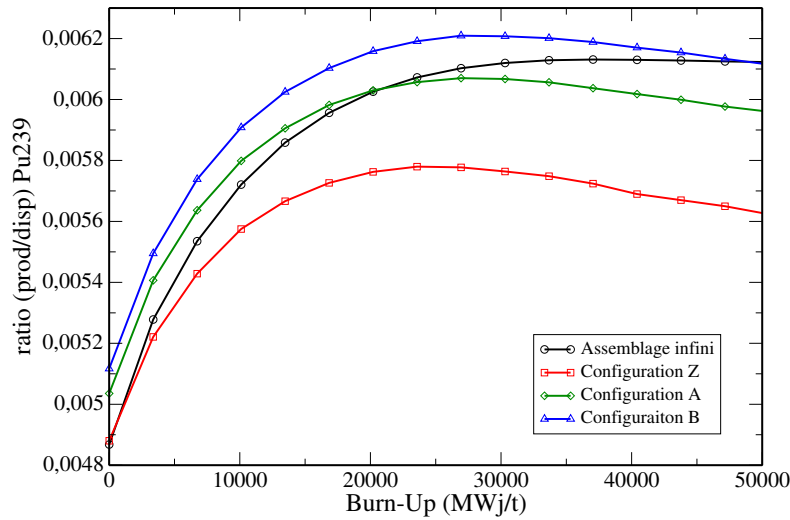


FIGURE 4.8 – Rapport de $\sigma_c^{U8}/\sigma_{f,c}^{Pu9}$ en fonction du temps

Même si les courbes noire et bleue de l'évolution du ^{239}Pu de la figure 4.7(b) se rapprochent lorsqu'on tend vers des Burn-Up élevés, elles ne se croisent jamais. En effet, les ratios de production sur disparition du ^{239}Pu , calculés comme le rapport entre la section efficace de capture de l' ^{238}U et celles d'absorption du ^{239}Pu , pour les deux configurations rejoignent la même valeur à 50 GWj/t environ, comme montré sur la figure 4.8. Cela signifie que l'assemblage central de la configuration entourée n'atteint pas le même inventaire isotopique que celui des assemblages avoisinant (issus d'une évolution infinie) avant la fin de l'irradiation. À 30 GWj/t , la quantité des isotopes dans l'assemblage central environné diffère encore de la configuration infinie à cause de l'effet de l'environnement, qui modifie l'évolution isotopique à partir du premier instant et pour toute l'irradiation.

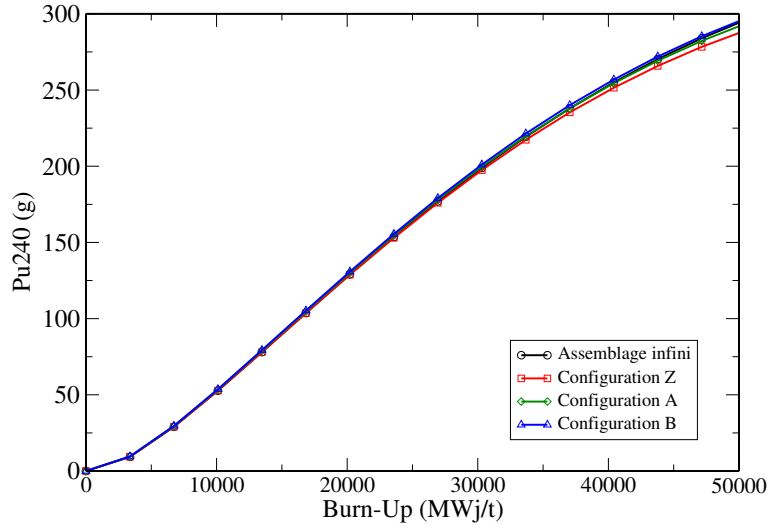
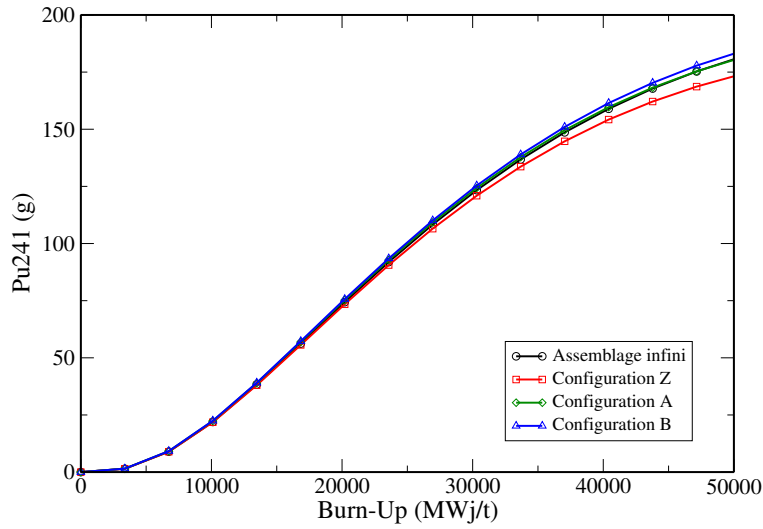
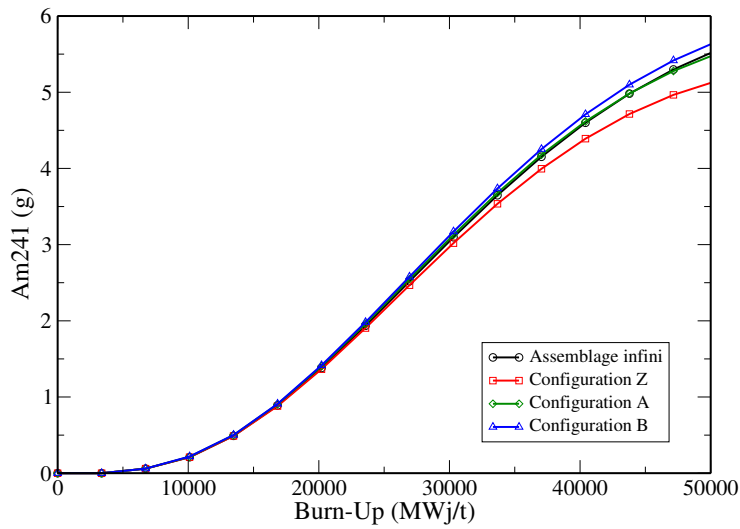
(a) ^{240}Pu en fonction du Burn-Up(b) ^{241}Pu en fonction du Burn-Up(c) ^{241}Am en fonction du Burn-Up

FIGURE 4.9 – Évolution des inventaires des isotopes ^{240}Pu , ^{241}Pu et ^{241}Am en fonction du Burn Up pour les configurations ∞ , Z, A et B

Analyse de la configuration A

Analysons la dernière configuration. Le comportement des inventaires de la configuration A se trouve à mi-chemin entre ceux des deux configurations précédentes. Les écarts de la configuration A sont les plus faibles parmi les trois configurations étudiées, ne dépassant pas 1% en fin d'irradiation pour aucun des isotopes considérés. Les courbes de l' ^{235}U et du ^{239}Pu (figure 4.7) semblent presque confondues à celles de l'assemblage infini. Par contre, à l'opposé des deux configurations précédentes, les écarts par rapport à la configuration infinie ne sont pas monotones : au milieu de la simulation, entre le Burn-Up de 25 et celui de 40 GWj/t , les écarts positifs deviennent négatifs et inversement.

Ce phénomène est visible pour l'évolution de l'isotope ^{239}Pu , illustrée en figure 4.7(b), où les courbes noire et verte se croisent à 35 GWj/t environ. Ce comportement est dû au changement dans le temps des valeurs des taux de réaction de la configuration A par rapport à ceux de l'assemblage infini. En fait, en début de cycle, la relation entre sections efficaces et flux est la même que pour la configuration B :

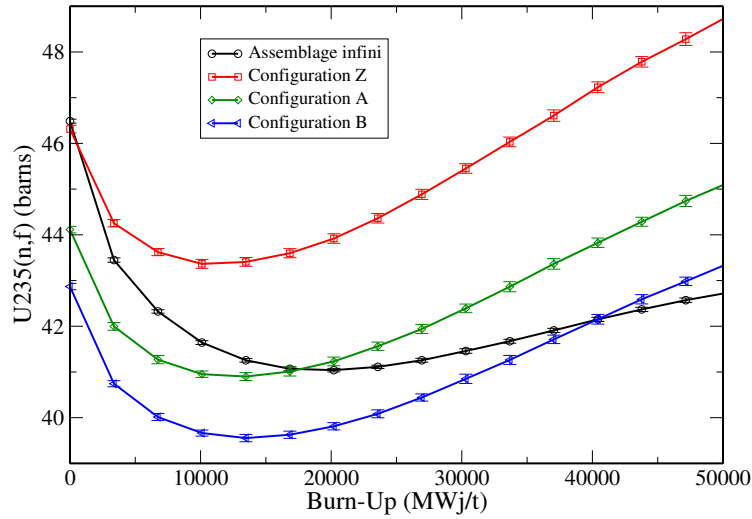
$$\left\{ \begin{array}{l} \text{En début d'irradiation :} \\ \sigma_A < \sigma_\infty \\ \Phi_A > \Phi_\infty \\ (\sigma\Phi)_A > (\sigma\Phi)_\infty \end{array} \right. \quad (4.12)$$

L'environnement caractérisé par un Burn-Up supérieur à celui de l'assemblage d'étude durcit le spectre neutronique. Mais, aux alentours de 20 GWj/t , la composition du fuel de l'assemblage central rejoint la composition isotopique correspondante à celle de l'entourage. À partir de cet instant, les effets de spectre de l'entourage s'inversent (d'un effet de durcissement à un effet de thermalisation), comme le montre l'évolution des sections efficaces en fonction du Burn-Up représentées dans la figure 4.10. L'assemblage d'étude se trouve entouré par des assemblages montrant un Burn-Up inférieur et son spectre subit un effet de thermalisation à l'image de la configuration Z .

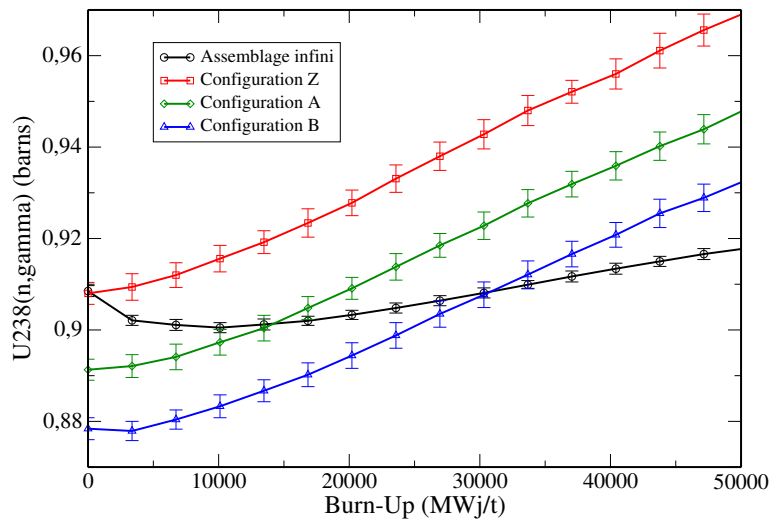
La relation entre les taux de réaction de la configuration entourée et ceux de l'assemblage infini s'inverse pour devenir l'équation 4.13.

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Pendant l'irradiation :} \\ \sigma_A > \sigma_\infty \\ \Phi_A < \Phi_\infty \\ (\sigma\Phi)_A < (\sigma\Phi)_\infty \end{array} \right. \quad (4.13)$$

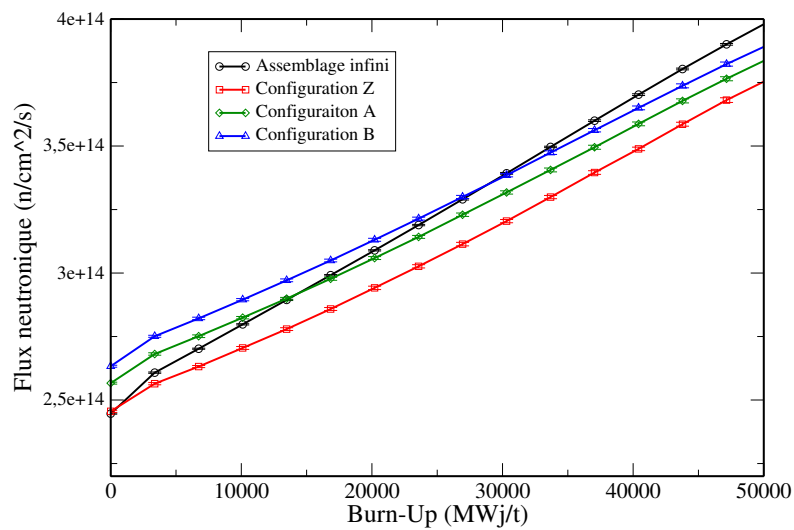
À partir de ce Burn-Up, l'environnement d'assemblages plus jeunes amène l'assemblage central à produire moins de ^{239}Pu par rapport à l'assemblage infini, à l'image de la configuration Z . L'écart estimé devient donc négatif. Puisque cette inversion apparaît au milieu de l'irradiation, les écarts positifs et négatifs se compensent, donnant une différence presque négligeable par rapport à l'assemblage infini, comme montré dans le tableau 4.9.



(a) Section efficace de fission de l'U235



(b) Section efficace de capture de l'U238

FIGURE 4.10 – Sections efficaces en fonction du Burn-Up pour les configurations ∞ , Z, A et BFIGURE 4.11 – Flux en fonction du Burn-Up pour les configurations ∞ , Z, A et B

En résumé

La modélisation d'un environnement par des assemblages tous frais ou tous en fin d'irradiation non évoluant n'est pas pertinente et apporte des biais maximums. Un environnement fixe à Burn-Up intermédiaire est bien représenté par la modélisation infinie grâce à une compensation de biais entre le début et la fin de l'irradiation. Cette compensation de biais est sensible à la composition des assemblages environnant, qui elle même doit être correctement choisie en fonction du Burn-Up cible de l'assemblage central.

Le retard avec lequel la composition isotopique de cet assemblage rejoint celle des voisins est lié à l'effet de spectre de l'environnement. Pour la configuration *A*, l'assemblage central arrive à une composition isotopique équivalente à celle des assemblages environnants à 20 GWj/t environ, montrant donc un retard de quelques GWj/t (de l'ordre de 5, comparable à l'incertitude de l'estimation du Burn-Up atteignable). Pour la configuration *B*, au contraire, les évolutions de l'inventaire du ^{239}Pu ne se croisent qu'après 50 GWj/t , un Burn-Up presque double que celui de l'entourage. L'effet de compensation visible en *A* n'est donc pas visible en *B* avant la toute fin d'irradiation. L'environnement constitué d'assemblages à 15 GWj/t a donc un impact inférieur par rapport aux assemblages environnant de la configuration *B*.

Pour la configuration *Z*, aucun effet de compensation n'est possible, parce que l'entourage a toujours un Burn-Up plus petit comparé à celui de l'assemblage central.

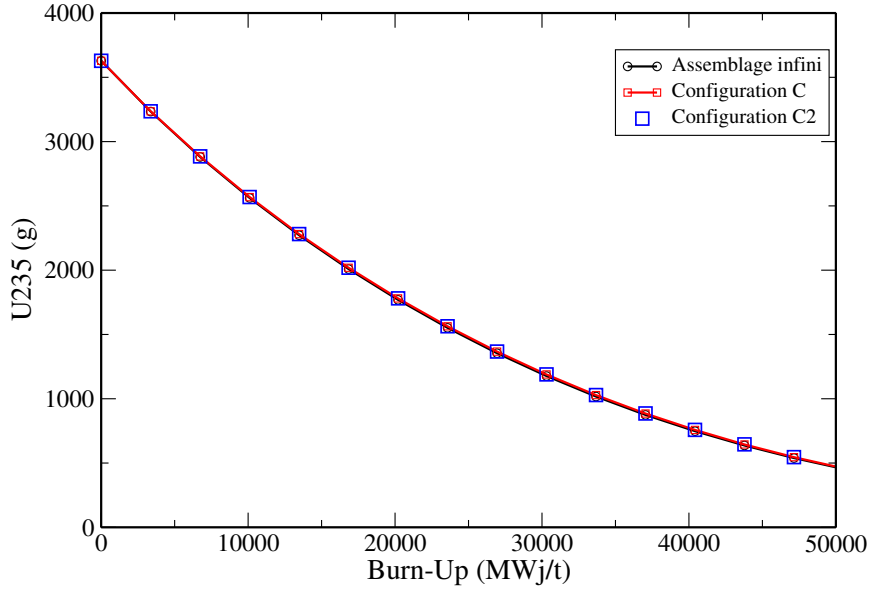
4.4.2.3 Impact de l'hétérogénéité du voisinage

Dans § 4.4.1, nous avons observé que les valeurs du rapport flux rapide sur flux thermique reportées dans le tableau 4.7, ainsi que les valeurs des trois sections efficaces et du flux sont presque identiques pour les deux configurations en damier *C* et *C2*. Ces configurations diffèrent entre elles par la disposition des assemblages environnant : dans la configuration *C*, les assemblages en face de l'assemblage central ont un Burn-Up de 15 GWj/t , alors que les assemblages dans les coins présentent un Burn-Up de 30 GWj/t . La disposition des assemblages voisins dans la configuration *C2* est inversée.

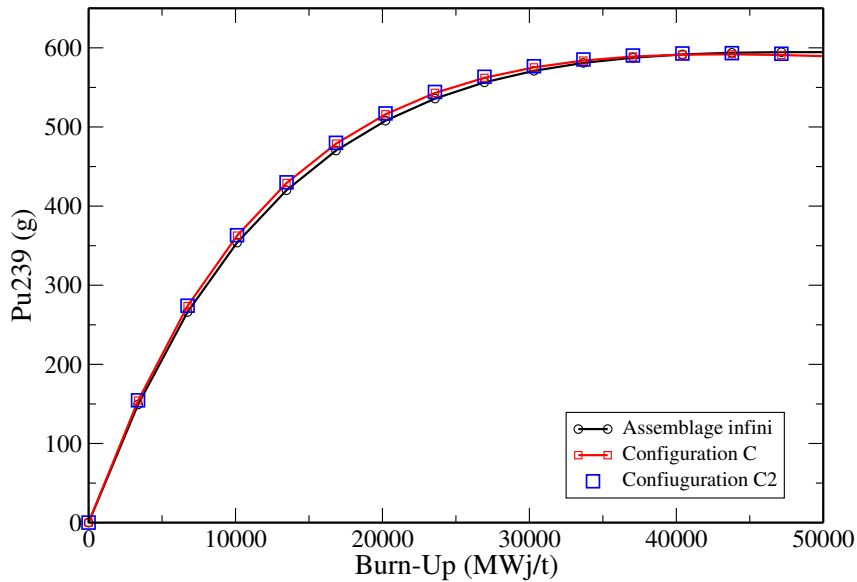
Les évolutions des inventaires isotopiques sont similaires pour les deux configurations, comme montré dans la figure 4.12. La position des assemblages qui constituent l'entourage ne semble donc pas impacter l'évolution de l'assemblage central. Dans ce paragraphe, nous étudions l'importance de l'hétérogénéité des assemblages positionnés autour de l'assemblage d'étude.

Pour ce faire, nous avons choisi de créer une nouvelle configuration, notée *M* (comme moyenne), constituée d'un assemblage neuf entouré par des assemblages ayant un Burn-Up de 21 807 MWj/t , qui correspond au Burn-Up moyen de l'entourage des configurations *C* et *C2*. Rappelons que la modification du spectre neutronique due au voisinage induit en début d'irradiation une variation de sections efficaces de fission de l' ^{235}U , suite à laquelle le flux neutronique est modifié pour maintenir la condition de puissance constante. La variation des taux de réaction, due à un spectre neutronique différent, cause une consommation du fissile principal différente. La production du ^{239}Pu dépend du taux de capture neutronique

de l' ^{238}U et son évolution isotopique est strictement liée à celle de l' ^{235}U . Les évolutions de ces deux isotopes nous permettent donc de comparer les trois configurations et de déterminer si un entourage à Burn-Up moyenné peut être représentatif d'un environnement hétérogène.



(a) Évolution de l' ^{235}U en fonction du Burn-Up pour les configurations infinie, C et $C2$



(b) Évolution du ^{239}Pu en fonction du Burn-Up pour les configurations infinie, C et $C2$

FIGURE 4.12 – Évolutions des inventaires des fissiles ^{235}U et ^{239}Pu pour les configurations ∞ , C et $C2$

En début d'irradiation

Le tableau 4.10 présente les valeurs des sections efficaces de fission de l' ^{235}U et du ^{239}Pu ainsi que celle de capture de l' ^{238}U pour l'assemblage infini, la configuration C et la configuration M en début de cycle.

Configuration	∞	C	M
$\sigma_{fiss}^{235\text{U}}$ [b]	46.49	43.57	43.56
$\sigma_{fiss}^{239\text{Pu}}$ [b]	119.35	111.75	111.53
$\sigma_{capt}^{238\text{U}}$ [b]	0.91	0.89	0.88

TABLE 4.10 – Valeurs des sections efficaces pour les configurations infinie, C et M en début d'irradiation

Nous observons que les valeurs des sections efficaces des configurations C et M sont presque identiques. En effet, l'écart relatif entre les deux sections efficaces de fission de l' ^{235}U est de 0.02% soit inférieur à l'incertitude statistique de la configuration C (0.18%). Rappelons toutefois que cet écart se réfère à une seule simulation pour la configuration M . Le spectre neutronique de l'assemblage central est donc supposé identique pour la configuration en damier et pour celle avec un environnement homogénéisé. La figure 4.10 montre des évolutions des sections efficaces en fonction du Burn-Up presque linéaires entre 15 et 30 GWj/t , ce qui explique l'équivalence entre les configurations C et M . L'évolution devrait aussi montrer des inventaires isotopiques similaires pour les deux configurations.

En évolution

Comme dans les paragraphes précédents, les différences relatives des inventaires isotopiques principaux par rapport à l'assemblage infini sont analysées pour deux valeurs de Burn-Up différentes. Le tableau 4.11 montre les écarts relatifs de l' ^{235}U et du ^{239}Pu à 25 et à 40 GWj/t .

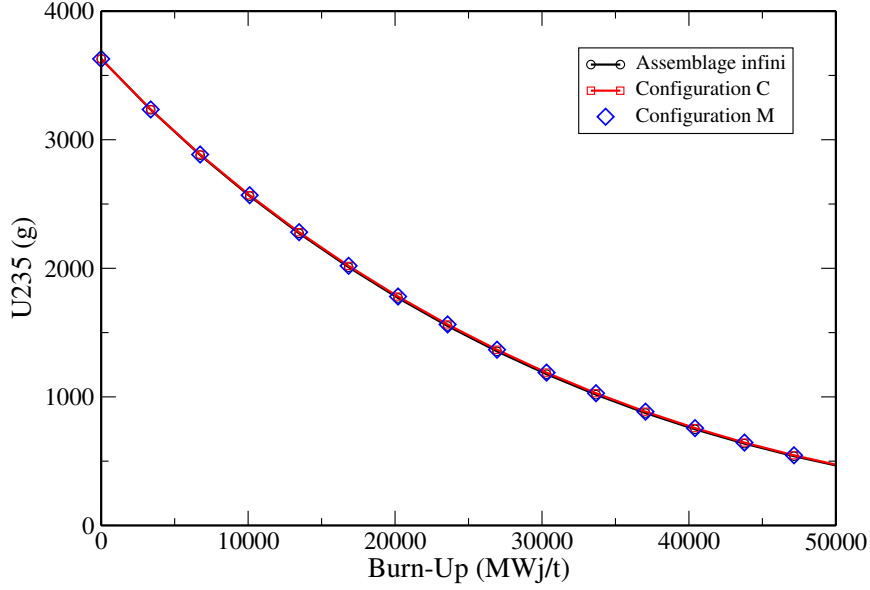
25 GWj/t	$C - \infty$ [%]	$C2 - \infty$ [%]	$M - \infty$ [%]
^{235}U	0.78 ± 0.07	0.81 ± 0.07	0.83
^{239}Pu	1.33 ± 0.17	1.57 ± 0.17	1.41
40 GWj/t	$C - \infty$ [%]	$C2 - \infty$ [%]	$M - \infty$ [%]
^{235}U	1.26 ± 0.10	1.34 ± 0.10	1.33
^{239}Pu	-0.04 ± 0.11	0.21 ± 0.11	0.01

TABLE 4.11 – Écarts relatifs des inventaires par rapport à l'assemblage infini pour les configurations infinie, C et M à 25 et à 40 GWj/t ; les incertitudes statistiques sont tirées du tableau 4.8

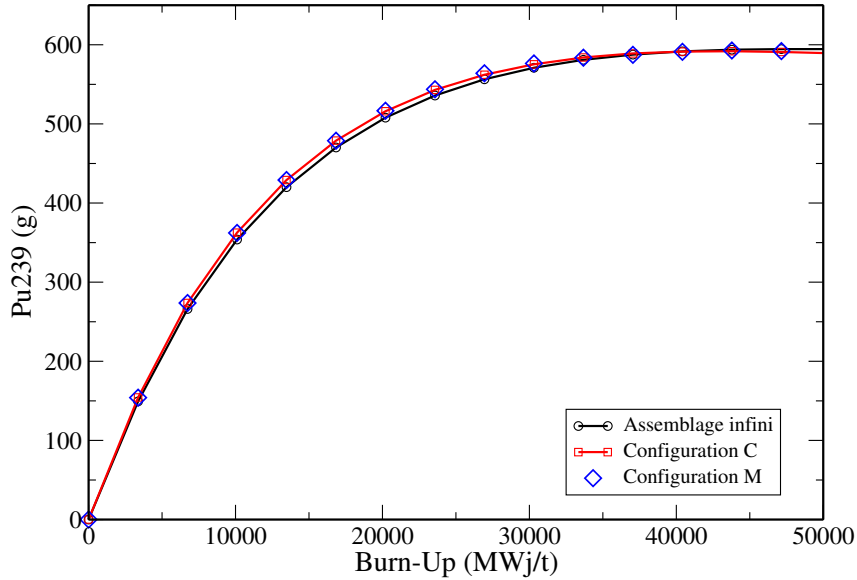
Ces écarts sont calculés comme dans le chapitre précédent selon l'expression 4.14.

$$\Delta N_i(X - \infty) = \frac{N_i^X - N_i^\infty}{N_i^\infty} \% \quad (4.14)$$

Nous observons que les écarts des inventaires de la configuration M par rapport à l'assemblage infini sont compatibles avec les écarts des configurations avec entourage hétérogène C et $C2$.



(a) Évolution de l' ^{235}U en fonction du Burn-Up pour les configurations infinie, C et M



(b) Évolution du ^{239}Pu en fonction du Burn-Up pour les configurations infinie, C et M

FIGURE 4.13 – Évolutions des inventaires des fissiles ^{235}U et ^{239}Pu pour les configurations ∞ , C et M

Les évolutions des inventaires isotopiques des fissiles ^{235}U et ^{239}Pu de la configuration avec environnement moyenné se superposent à celles des configurations C et $C2$, comme le montre la figure 4.13, qui présente les inventaires en fonction du Burn-Up de l'assemblage infini, de la configuration M et de la configuration C . Afin d'avoir une meilleure lisibilité de l'image, la configuration $C2$ n'a pas été représentée sur cette figure.

Nous pouvons conclure que, si les assemblages constituant l'environnement n'évoluent pas, leur disposition autour de l'assemblage central n'a pas un effet significatif sur le spectre ni sur l'évolution des inventaires isotopiques de l'assemblage d'étude. L'hétérogénéité de Burn-Up des assemblages de l'environnement n'apporte donc pas plus de biais de calcul. Une configuration avec un environnement homogène à Burn-Up de $X \text{ GWj/t}$ peut bien représenter une disposition réelle, où l'entourage est constitué d'assemblages à Burn-Up différents mais à Burn-Up moyen égal à $X \text{ GWj/t}$. Cette approximation semble pertinente tant que les variations de spectre restent linéaires avec le Burn-Up, ce qui n'est pas le cas en début d'irradiation.

4.4.3 Analyse en évolution : configurations avec environnement évoluant

Ce paragraphe est dédié à l'analyse de l'impact sur l'assemblage central de la géométrie 3x3 d'un environnement évoluant. Les assemblages entourant l'assemblage d'étude évoluent donc dans le temps, à partir de leur valeur de Burn-Up initial. Au vu du paragraphe précédent, la comparaison avec l'assemblage infini concerne uniquement les configurations Z , A et B .

Puisque l'analyse en début de cycle a été déjà présentée dans § 4.4.1, nous traitons directement l'étude des résultats en évolution, qui consiste à comprendre les écarts des inventaires par rapport à l'assemblage infini calculés à deux valeurs de Burn-Up différentes (25 et 40 GWj/t).

Dans ce cas, comme tous les assemblages évoluent, la comparaison entre les configurations environnées et celle infinie ne peut plus être effectuée juste en regardant les valeurs des inventaires au même instant de l'évolution. En effet, dans SMURE, il n'est pas possible de fixer la puissance d'un seul assemblage. L'utilisateur fixe uniquement celle portée par l'ensemble des matériaux évoluant. Pour cette raison, la puissance dégagée par l'assemblage central dépend de la configuration des assemblages voisins. Afin de réaliser des comparaisons pertinentes, nous devons regarder les inventaires en fonction du Burn-Up de l'assemblage central et non en fonction du temps. Pour représenter les évolutions des inventaires en fonction du Burn-Up local, nous utilisons la même méthode que dans le chapitre 3.

4.4.3.1 Analyse de l'évolution

Le tableau 4.12 montre les écarts relatifs par rapport à l'assemblage infini des inventaires isotopiques principaux aux Burn-Up de 25 et de 40 GWj/t pour les configurations Z , A et B avec entourage évoluant. La comparaison est effectuée, comme pour les configurations avec

entourage non évoluant, au milieu d'irradiation mais aussi en fin de vie du combustible de l'assemblage central, même si, à ce temps, les assemblages qui constituent l'environnement des configurations A et B arrivent à des Burn-Up bien au-delà de celui de la fin du cycle : 55 GWj/t et 70 GWj/t respectivement. Ces valeurs peuvent paraître irréalistes, cependant ces évolutions sont présentées afin d'analyser l'impact d'un environnement à très haut Burn-Up.

isotope	Z	A	B	isotope	Z	A	B
25 GWj/t				40 GWj/t			
^{235}U	0.11	0.78	1.34	^{235}U	0.58	2.10	3.34
^{239}Pu	0.26	1.53	2.00	^{239}Pu	1.08	1.92	3.12
^{240}Pu	1.11	0.32	-0.59	^{240}Pu	0.88	0.53	0.86
^{241}Pu	0.25	1.37	3.65	^{241}Pu	0.62	1.17	2.15
^{241}Am	-0.03	-10.58	-24.17	^{241}Am	1.07	-6.98	-17.23

TABLE 4.12 – Écarts relatifs des inventaires par rapport à la configuration infinie de référence à 25 et 40 GWj/t

En ce qui concerne la configuration Z , étant identique à celle infinie, elle présente des écarts négligeables et compatibles avec les incertitudes statistiques montrées dans le tableau 4.8. Rappelons que, à cause du temps de calcul trop élevé, les résultats montrés dans le tableau 4.12 correspondent seulement à une simulation d'évolution.

Nous observons que les écarts des deux configurations A et B sont presque tous positifs, à l'exception de ceux de l' ^{241}Am , qui présente d'ailleurs des écarts très importants et de signe opposé aux autres. La configuration B montre les écarts les plus élevés, à cause du très haut gradient de Burn-Up entre l'assemblage du centre et ceux de l'entourage.

Dans la configuration A , comme dans la configuration B , l' ^{235}U est moins consommé et le ^{239}Pu est en conséquence plus produit comparé à une évolution infinie. Pendant toute l'évolution, l'assemblage central est entouré par des assemblages plus vieux qui subissent donc un spectre plus rapide. Les raisons physiques qui expliquent les écarts sont similaires à celles qui expliquent les biais de la configuration B avec entourage non évoluant.

Les relations entre les sections efficaces et les flux sont exprimées par le système 4.15. Le niveau d'équilibre du ^{239}Pu est plus petit dans la configuration infinie que dans la configuration A , lui même plus petit que dans la configuration B . Ces inégalités sont dues aux variations des sections efficaces de l' ^{238}U et du ^{239}Pu . Ces différents niveaux d'équilibre expliquent les écarts plus élevés de B que de A , comme montré dans le tableau 4.12.

$$\begin{cases} \sigma_B < \sigma_A < \sigma_\infty \\ \Phi_B > \Phi_A > \Phi_\infty \end{cases} \quad (4.15)$$

Les évolutions des inventaires isotopiques de l' ^{235}U et du ^{239}Pu sont montrées dans la figure 4.14 pour les configurations ∞ , A et B en fonction du Burn-Up local.

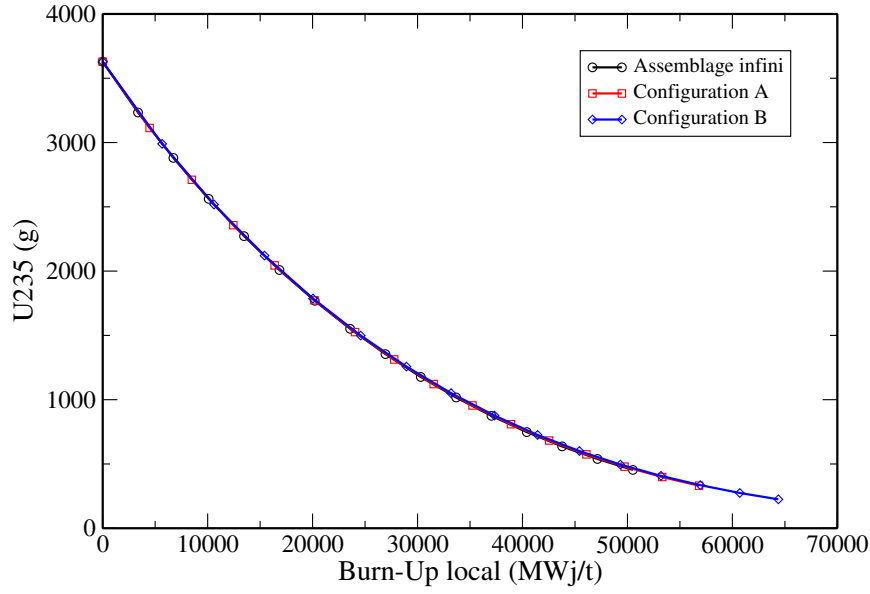
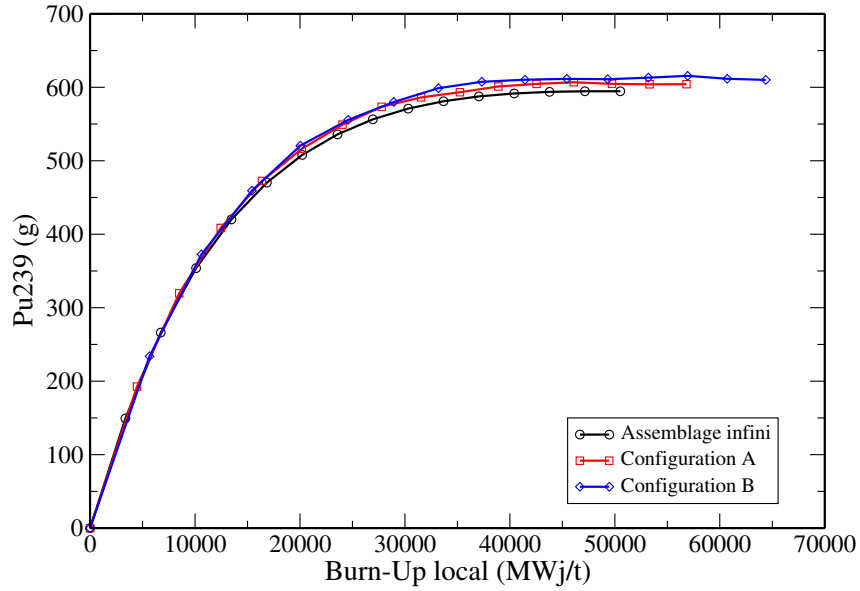
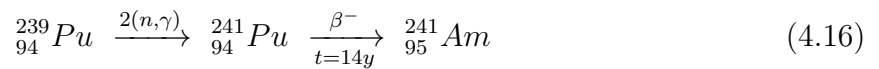
(a) ^{235}U en fonction du Burn-Up(b) ^{239}Pu en fonction du Burn-Up

FIGURE 4.14 – Évolution des inventaires des isotopes ^{235}U et ^{239}Pu en fonction du Burn-Up local pour les configurations ∞ , A et B

4.4.3.2 Analyse de l' ^{241}Am

L' ^{241}Am présente des biais très importants et négatifs : les configurations environnées produisent moins de ^{241}Am que l'assemblage infini, comme illustré sur la figure 4.15.



L' ^{241}Am est produit par décroissance β^- du ^{241}Pu , qui lui même est produit par successions de captures radiatives à partir du ^{239}Pu , comme montré dans l'équation 4.16. La quantité d' ^{241}Am est donc directement liée à celle du ^{241}Pu à travers la constante de

décroissance radioactive λ de l'équation 4.17.

$$\frac{dN_{241Am}}{dt} = \lambda N_{241Pu} \quad (4.17)$$

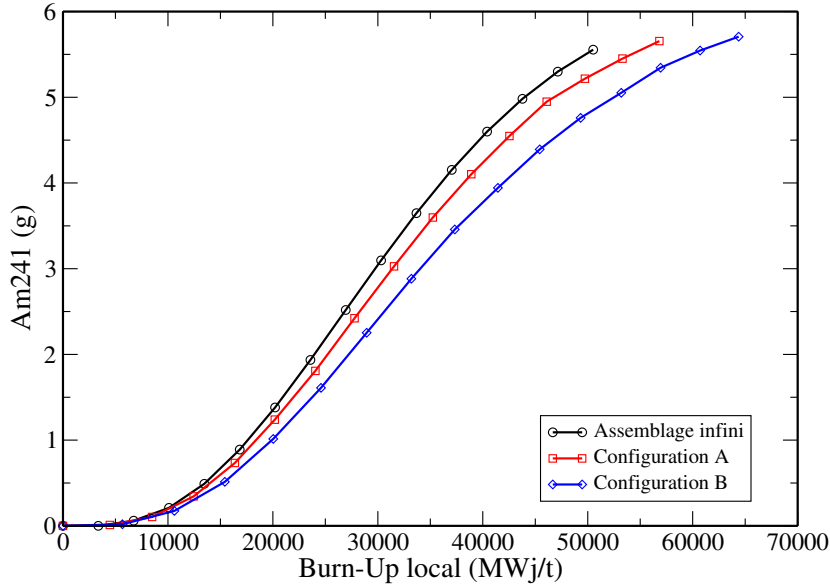


FIGURE 4.15 – Évolution de l' ^{241}Am pour les configurations ∞ , A et B en fonction du Burn-Up local

Les biais d'évolution de l' ^{241}Am peuvent être expliqués en reprenant l'opération de normalisation au Burn-Up local. Normaliser les inventaires au même Burn-Up local signifie normaliser au même produit $(\Phi * T)$ pour l'ensemble des assemblages d'étude (T étant le temps d'irradiation considéré). Les expressions des variations isotopiques dans le temps des isotopes analysés (depuis le ^{239}Pu jusqu'au ^{241}Am) en début d'irradiation sont rappelées dans les expressions 4.18 à 4.24.

$$\frac{dN_{239Pu}}{dt} = \sigma_{capt}^{238U} N_{238U} \Phi \quad (4.18)$$

L'équation 4.18 représente la variation de la quantité isotopique du ^{239}Pu (au début de l'irradiation) comme le produit entre la section efficace de capture neutronique de l' ^{238}U , sa quantité isotopique N_{238U} et le flux neutronique. L'intégration de cette expression sur le temps donne l'équation 4.19 :

$$N_{239Pu}(t) = \sigma_{capt}^{238U} N_{238U} \Phi t \quad (4.19)$$

Nous observons que la quantité du ^{239}Pu est proportionnelle au produit $(\Phi * t)$. Donc, la normalisation des inventaires au Burn-Up local impose de considérer les valeurs du ^{239}Pu à une valeur de $(\Phi * t)$ constante. Pour les comparaisons entre l'assemblage infini et l'assemblage central des configurations environnées, la différence entre les valeurs des quantités isotopiques n'est induite que par l'effet de spectre dû au voisinage. L'expression en début d'irradiation de la variation isotopique du ^{240}Pu est un polynôme du deuxième ordre du

temps, puisqu'il est produit à partir du ^{239}Pu (comme rappelé dans l'expression 4.20).

$$\frac{dN_{240}\text{Pu}}{dt} = \sigma_{\text{capt}}^{239}\text{Pu} N_{239}\text{Pu} \Phi = \sigma_{\text{capt}}^{239}\text{Pu} \sigma_{\text{capt}}^{238}\text{U} N_{238}\text{U} \Phi \quad (4.20)$$

L'équation 4.21 est obtenue à partir de l'intégration de l'équation 4.20 et de la substitution de l'expression du ^{239}Pu de l'équation 4.19.

$$N_{240}\text{Pu}(t) = \sigma_{\text{capt}}^{239}\text{Pu} \sigma_{\text{capt}}^{238}\text{U} N_{238}\text{U} (\Phi t)^2 \quad (4.21)$$

Cette fois, la quantité isotopique est proportionnelle au carré du produit $(\Phi * t)$. Nous procédons de la même manière pour l'isotope ^{241}Pu . L'expression de la variation de sa quantité isotopique dans le temps est donnée par l'équation 4.22.

$$\frac{dN_{241}\text{Pu}}{dt} = \sigma_{\text{capt}}^{240}\text{U} N_{240}\text{Pu} \Phi \quad (4.22)$$

L'équation 4.23 est obtenue après intégration et substitution de l'expression du ^{239}Pu .

$$N_{241}\text{Pu}(t) = \sigma_{\text{capt}}^{240}\text{U} \sigma_{\text{capt}}^{239}\text{Pu} \sigma_{\text{capt}}^{238}\text{U} N_{238}\text{U} (\Phi t)^3 \quad (4.23)$$

L'équation 4.23 est du troisième ordre, mais elle montre toujours une relation de dépendance directe au produit $(\Phi * t)$. À l'inverse des isotopes du plutonium produits par capture, l' ^{241}Am est généré par décroissance radioactive, processus qui dépend directement du temps, et non plus du flux neutronique. L'expression de sa quantité isotopique n'est plus proportionnelle au produit $(\Phi * t)$, comme nous pouvons observer dans l'équation 4.24.

$$N_{241}\text{Am}(t) = \lambda N_{241}\text{Pu} t = \sigma_{\text{capt}}^{240}\text{U} \sigma_{\text{capt}}^{239}\text{Pu} \sigma_{\text{capt}}^{238}\text{U} N_{238}\text{U} \Phi^3 t^4 \quad (4.24)$$

Ainsi, contrairement à l'ensemble des isotopes du plutonium, le Burn-Up local n'est pas une variable équivalente au temps pour décrire l'évolution de l' ^{241}Am . Pour cet isotope, l'évolution de la puissance dégagée par l'assemblage d'étude dans le temps est une caractéristique importante pour quantifier la production ou la disparition de cet isotope. Les effets de spectre ne suffisent plus à expliquer l'ensemble des biais de calcul de la modélisation.

4.4.3.3 Conclusions sur l'environnement évoluant

Contrairement à un environnement non évoluant, la modélisation de l'évolution du voisinage conduit à des écarts par rapport à la simulation infinie relativement importants en fin d'irradiation (de l'ordre de 1.7% pour le ^{239}Pu et entre 1 et 3% pour l' ^{235}U). L'évolution du voisinage ne permet pas une compensation des effets de spectre comme dans le cas d'un environnement non évoluant.

L'effet sur l' ^{241}Am est quant à lui très important dû à la redistribution de la puissance dans les 9 assemblages simulés dans ce paragraphe. Pour cet isotope il n'y a pas d'équivalence entre une évolution en temps et une évolution en Burn-Up.

4.5 Impact du voisinage : prise en compte du rechargement

Dans les paragraphes précédents, nous avons analysé des configurations dans lesquelles l'assemblage d'étude est entouré par un environnement fixe § 4.4.2 et un environnement évoluant § 4.4.3. Dans le sous-paragraphe 4.4.2.3 nous avons observé qu'un environnement à Burn-Up moyen représente proprement un entourage hétérogène non évoluant. Cependant, aucune des configurations étudiées ne correspond à une condition d'irradiation réelle d'un assemblage du cœur. En effet, les assemblages voisins évoluent dans le temps et ils changent de position à la fin de chaque cycle d'irradiation. Un assemblage se trouve donc environné par des assemblages possédant un Burn-Up différent pendant son évolution. Pour être représentatif d'une situation réelle et quantifier l'écart associé à une évolution infinie, nous avons raffiné les modélisations précédentes et réalisé des simulations avec rechargement.

Dans la configuration A évoluant, notée dans la suite $A_{évo}$, pendant que l'assemblage central évolue de 0 à 40 GWj/t , les assemblages qui constituent l'environnement passent d'un Burn-Up de 15 GWj/t à un Burn-Up de 55 GWj/t environ. Or, de manière plus réaliste, à 30 GWj/t leur positionnement dans le cœur devrait changer puisqu'ils ont terminé leur deuxième cycle d'irradiation. Leur place devrait être occupée par des assemblages du premier cycle, soit des assemblages frais. Nous avons donc arrêté la simulation au moment auquel l'assemblage central était arrivé à 15 GWj/t environ et nous avons substitué l'environnement (qui avait atteint entre-temps un Burn Up local de 30 GWj/t environ) par des assemblages frais, qui ont, à leur tour, évolué jusqu'à la fin d'irradiation de l'assemblage d'étude. Cette nouvelle configuration est appelée R (comme rechargement) et elle est schématiquement représentée sur la figure 4.16.

A			R		
15->30	15->30	15->30	0->15	0->15	0->15
15->30	<u>0->15</u>	15->30	0->15	<u>15->30</u>	0->15
15->30	15->30	15->30	0->15	0->15	0->15

FIGURE 4.16 – Représentation schématique de la configuration avec rechargement R

Nous avons comparé les inventaires isotopiques des fissiles ^{235}U et ^{239}Pu de l'assemblage central de la configuration avec rechargement aux inventaires de l'assemblage infini, aux Burn-Up locaux de 30 et de 40 GWj/t . Nous avons réalisé 10 simulations indépendantes de la configuration R afin d'avoir une estimation grossière de l'incertitude statistique.

Le tableau 4.13 reporte donc dans la case $R - \infty$ les écarts relatifs des inventaires par rapport à l'assemblage infini calculés sur la moyenne des 10 simulations. Pour comprendre l'effet du rechargement par rapport à un environnement non évoluant, nous avons aussi

rappelé dans le tableau 4.13 les écarts des inventaires entre la configuration A avec environnement fixe, notée A_{fixe} , et l'assemblage infini. La dernière colonne du tableau montre les écarts, par rapport à l'évolution infinie, de la configuration A avec entourage évoluant.

30 GWj/t	$A_{fixe} - \infty[\%]$	$R - \infty[\%]$	$A_{évo} - \infty[\%]$
^{235}U	0.56	0.12	1.03
^{239}Pu	-0.01	-0.93	2.11
40 GWj/t	$A_{fixe} - \infty[\%]$	$R - \infty[\%]$	$A_{évo} - \infty[\%]$
^{235}U	0.43	-0.17	2.10
^{239}Pu	-0.95	-0.98	1.92

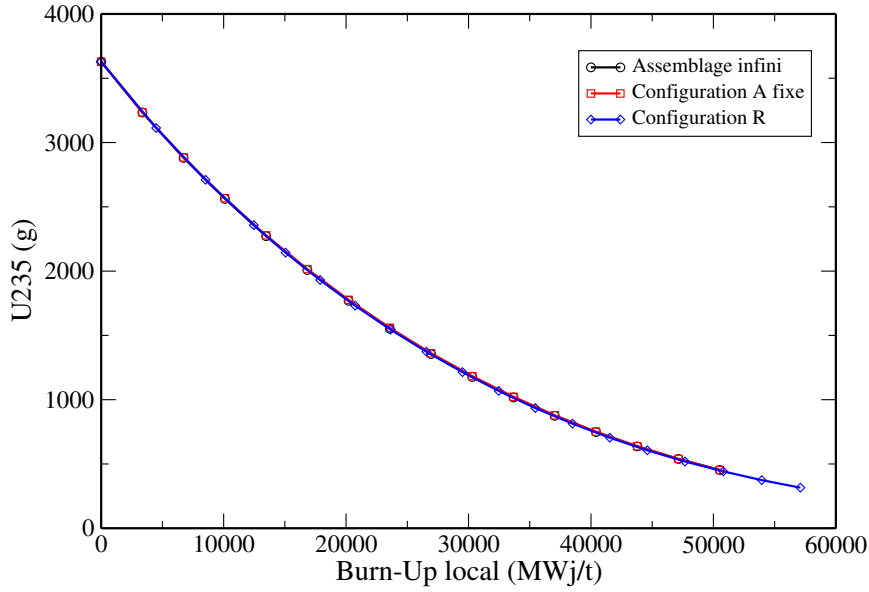
TABLE 4.13 – Écart relatif des inventaires des configuration A avec environnement évoluant et non et R comparées à l'assemblage infini pour deux valeurs de Burn-Up

Nous observons que les configurations A_{fixe} et R sont plus proches de la configuration infinie que la configuration $A_{évo}$. Si la configuration R représente la situation d'irradiation la plus réaliste, une modélisation comme A_{fixe} ou une modélisation infinie semblent bien la reproduire, apportant des biais de calcul faibles (inférieurs à 1%) en fin d'irradiation.

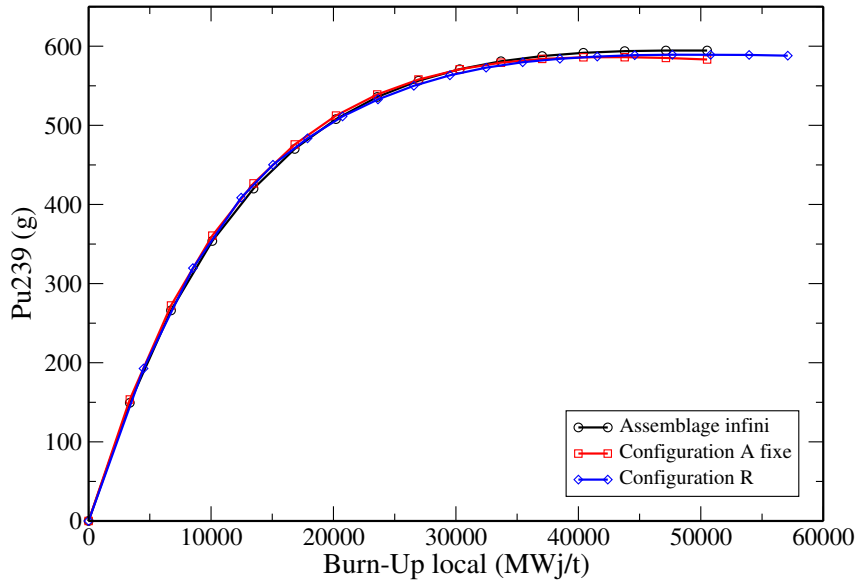
Rappelons l'explication des faibles valeurs des écarts de la configuration A_{fixe} par rapport à l'assemblage infini présentée dans § 4.4.2. Pendant la première partie de l'irradiation, l'assemblage central est environné par des assemblages plus usés, qui présentent un spectre neutronique rapide et qui durcissent le spectre de l'assemblage d'étude. Au fur et à mesure de l'évolution, à partir du moment où l'assemblage au centre rejoint le Burn-Up de l'entourage, son évolution est caractérisée par un adoucissement du spectre neutronique, dû au Burn-Up moins élevé des assemblages environnants, avec une production moins importante de ^{239}Pu par rapport à l'assemblage infini.

En ce qui concerne la configuration R , les écarts de l'isotope ^{235}U sont très faibles par rapport à l'assemblage infini, du même ordre de grandeur que l'écart statistique en fin de cycle reporté dans le tableau 4.8. Pour le ^{239}Pu les écarts sont plus importants, mais très proches à ceux de la configuration A_{fixe} en fin d'irradiation. Les évolutions des isotopes sont montrées dans la figure 4.17 et la figure 4.18 représente un zoom de l'évolution isotopique du ^{239}Pu à partir du moment du rechargement. La première partie de l'évolution du ^{239}Pu de l'assemblage central de la configuration R est exactement identique à celle de la configuration $A_{évo}$: la quantité isotopique de la configuration environnée est plus importante que celle de l'assemblage infini, comme expliqué dans § 4.4.3.1. Suite au rechargement, l'assemblage central évolue entouré par des assemblages frais. Ces derniers évoluent eux aussi, mais restent à des Burn-Up inférieurs à l'assemblage central pendant toute l'irradiation. En conséquence, la quantité produite de ^{239}Pu restera plus faible de celle de l'assemblage infini, à l'image de la configuration Z § 4.4.2.2, mais avec des écarts inférieurs dus à l'environnement évoluant.

Au contraire, la configuration $A_{évo}$ montre des écarts relatifs importants par rapport à l'assemblage infini et des écarts d'environ 2% comparée à la configuration avec rechargement. Nous concluons que la configuration avec entourage évoluant sans rechargement ne



(a) Évolution de l' ^{235}U en fonction du Burn-Up local pour les configurations ∞, R et A_{fixe}



(b) Évolution du ^{239}Pu en fonction du Burn-Up local pour les configurations ∞, R et A_{fixe}

FIGURE 4.17 – Évolutions des inventaires en fonction du Burn-Up local des fissiles ^{235}U et ^{239}Pu pour les configurations ∞, R et A_{fixe}

représente pas des conditions d'irradiation similaires à celles réelles d'un assemblage dans le cœur. Par contre, une configuration avec un environnement non évoluant à Burn-Up moyen, comme la configuration A_{fixe} , représente bien l'évolution de l'assemblage central de la configuration avec rechargement. Dans § 4.4.2.3, nous avons vu que l'évolution d'un assemblage avec environnement fixe à Burn-Up moyen est très similaire à une évolution avec environnement mixte non évoluant. Après cette comparaison, nous en déduisons que la configuration A_{fixe} peut être représentative d'une configuration avec rechargement, où le Burn-Up moyen des assemblages environnant est de 15 GWj/t mais où l'entourage pourrait

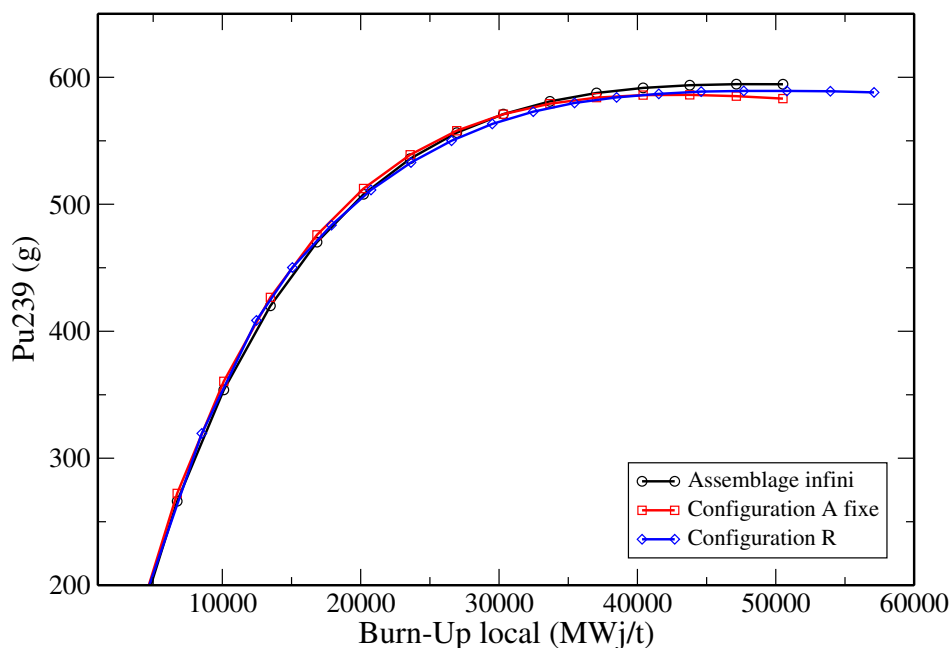


FIGURE 4.18 – Zoom sur l'évolution du ^{239}Pu en fonction du Burn-Up local pour les configurations ∞, R et A_{fixe}

être aussi hétérogène.

4.6 Analyse de l'interaction UOx-MOx

Dans les paragraphes précédents, nous avons analysé l'effet d'un environnement caractérisé par un Burn-Up différent. Afin de vérifier la validité des raisonnements établis dans ce chapitre, nous étudions maintenant l'effet d'un environnement constitué d'assemblages UOx sur un MOx, qui se trouve au centre d'une configuration 3x3 comme celle décrite dans § 4.2. Les assemblages avoisinants ont un Burn-Up de 0 et de 30 GWj/t , valeurs choisies pour représenter des cas enveloppes.

L'analyse est effectuée en deux parties distinctes : une analyse en début d'irradiation, afin d'étudier l'impact de la présence ou non de la lame d'eau sur les évolutions, § 4.6.1.1 et § 4.6.1.2, et une analyse en évolution, avec un environnement non évoluant § 4.6.2.1 ou évoluant § 4.6.2.2.

4.6.1 Analyse en début d'irradiation

Dans ce paragraphe, nous présentons l'étude effectuée sur les deux configurations moxées avec environnement constitué d'UOx frais (configuration noté $UOx-0$) et d'UOx à 30 GWj/t (configuration noté $UOx-30$). Les grandeurs analysées pour l'assemblage central MOx sont la section efficace microscopique de fission du ^{239}Pu et le rapport des flux rapide et thermique Φ_1/Φ_2 . Nous observons aussi les effets de l'assemblage MOx pour les assemblages UOx environnants. Les observables sont alors la section efficace microscopique de fission de l' ^{235}U et le rapport des flux rapide et thermique Φ_1/Φ_2 .

Toutes les comparaisons sont effectuées par rapport à une évolution MOx ou UOx infinie et tous les résultats présentés sont issus d'une seule simulation environnée. Il n'y a donc pas d'étude d'erreurs statistiques réalisée ici. La composition du MOx utilisée est issue de l'irradiation d'un UOx enrichi à 3.5% jusqu'à 50 GWj/t suivie par 5 ans de refroidissement et 2 ans de fabrication. L'enrichissement du combustible moxé est ajusté afin que l'assemblage puisse tenir une irradiation de 45 GWj/t . L'enrichissement en plutonium estimé est de 7.5% environ.

4.6.1.1 Configuration sans lame d'eau

Contrairement aux configurations 100% UOx, l'assemblage central dans la configuration MOx-UOx est fortement impacté par l'environnement. Les variations relatives par rapport à une configuration infinie sont reportées dans le tableau 4.14 et sont considérables, comme nous pouvons l'observer.

MOx	$\Delta(\infty - [UOx - 0])$	$\Delta(\infty - [UOx - 30])$
σ_{fiss}^{239Pu}	18.48	5.29
Φ_1/Φ_2	-18.93	-8.21
UOx	$\Delta(\infty - [UOx - 0])$	$\Delta(\infty - [UOx - 30])$
σ_{fiss}^{235U}	-1.82	-1.24
Φ_1/Φ_2	2.52	1.69

TABLE 4.14 – Écart relatif des sections efficaces de fission du ^{239}Pu (et de l' ^{235}U) et du rapport des flux Φ_1/Φ_2 par rapport à la configuration infinie pour le MOx au centre et les UOx environnants sans lame d'eau

Les écarts reportés pour les sections efficaces et le ratio des flux de l'assemblage MOx entouré par des UOx frais sont supérieurs à 15%. La configuration $UOx - 30$ présente des écarts inférieurs mais toujours très significatifs. Le spectre d'un assemblage UOx frais est bien plus thermique que le spectre d'un assemblage UOx en fin d'irradiation, dû à l'absence de plutonium à l'état initial. Il n'est donc pas surprenant que les écarts entre la configuration MOx infinie et la configuration $UOx - 30$ soient plus faibles que ceux avec la configuration $UOx - 0$. Cependant, vu les valeurs des premiers, nous confirmons que le spectre d'un assemblage MOx est beaucoup plus dur que celui d'un assemblage UOx, même en fin de cycle. Ceci est dû à la quantité de plutonium importante des assemblages MOx. En effet, il faut environ le plutonium de 8 assemblages UOx irradiés pour avoir un assemblage MOx. Ces écarts risquent de propager des biais importants lors de la simulation de l'évolution.

Comme attendu, les assemblage UOx environnant ont tendance à thermaliser le spectre neutronique de l'assemblage moxé. Les variation de rapport de spectres sont donc négatives et les variations de sections efficaces de fission sont positives. Cette thermalisation du spectre MOx par les assemblages UOx, quel que soit le temps d'irradiation, empêche toute compensation d'effet de spectre lors de l'évolution, comme nous avons pu l'observer dans l'analyse avec un environnement UOx.

Les UOx environnants sont aussi impactés par la présence d'un assemblage moxé au centre de la configuration. Les valeurs reportées dans le tableau 4.14 sont les sections efficaces moyennes de l'ensemble des 8 assemblages constituant l'environnement. Parmi ces assemblages, et du fait des conditions de réflexion, certains ont un seul assemblage voisin moxé alors que d'autres n'en n'ont pas. L'effet de durcissement du spectre des UOx à cause de la présence de l'assemblage MOx est donc limité.

4.6.1.2 Configuration avec lame d'eau

Regardons maintenant les mêmes grandeurs pour une modélisation qui prend en compte la lame d'eau inter-assemblages (épaisseur de 0.25 cm).

MOx	$\Delta(\infty - [UOx - 0])$	$\Delta(\infty - [UOx - 30])$
σ_{fiss}^{239Pu}	13.27	4.63
Φ_1/Φ_2	-20.33	-8.75
UOx	$\Delta(\infty - [UOx - 0])$	$\Delta(\infty - [UOx - 30])$
σ_{fiss}^{235U}	-1.14	-
Φ_1/Φ_2	2.31	-

TABLE 4.15 – Écart relatif des sections efficaces de fission du ^{239}Pu (et de l' ^{235}U) et du rapport des flux Φ_1/Φ_2 par rapport à la configuration infinie pour le MOx au centre et les UOx environnants avec lame d'eau

Nous remarquons que les écarts pour les sections efficaces sont réduits dans l'ensemble. La prise en compte de l'épaisseur inter-assemblages réduit donc les effets de spectre induits par le voisinage. Cependant ces écarts restent conséquents et justifient à eux seuls des évolutions environnées pour les calculs cellules des REP900 moxés.

Les écarts sur les valeurs des sections efficaces UOx sont aussi suffisamment importants pour que les évolutions UOx infinies pour un réacteurs moxé soient fortement biaisées.

4.6.2 Analyse en évolution

Afin d'avoir une estimation des écarts les plus importants et donc de borner les biais de calcul, nous avons réalisé des évolutions des configurations sans lame d'eau. Les isotopes analysés sont le ^{239}Pu et l' ^{235}U en fin d'irradiation.

4.6.2.1 Configuration avec entourage non évoluant

Les évolutions des deux isotopes pour les trois configurations (celles environnées et celle infinie) sont représentées sur les figures 4.19 et 4.20. Les écarts estimés du ^{239}Pu par rapport à la configuration infinie à 33 GWj/t sont de -9.72% et de -5.6% pour la configuration $UOx - 0$ et $UOx - 30$ respectivement. Les inventaires d' ^{235}U sont pratiquement identiques

à ceux de la configuration infinie. L' ^{235}U de cet assemblage provient de l'uranium appauvri qui complète le plutonium dans les assemblages MOx et est donc présent en très faible quantité.

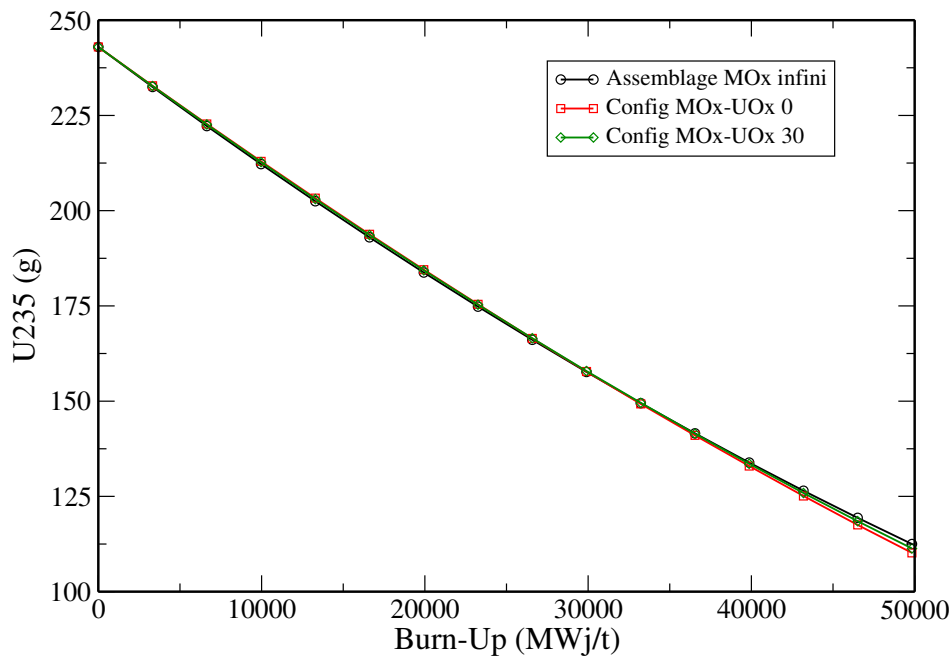


FIGURE 4.19 – Évolution de l' ^{235}U en fonction du Burn-Up pour les configurations ∞ , MOx entouré d'UOx à 0 GWj/t et MOx entouré d'UOx à 30 GWj/t avec entourage non évoluant

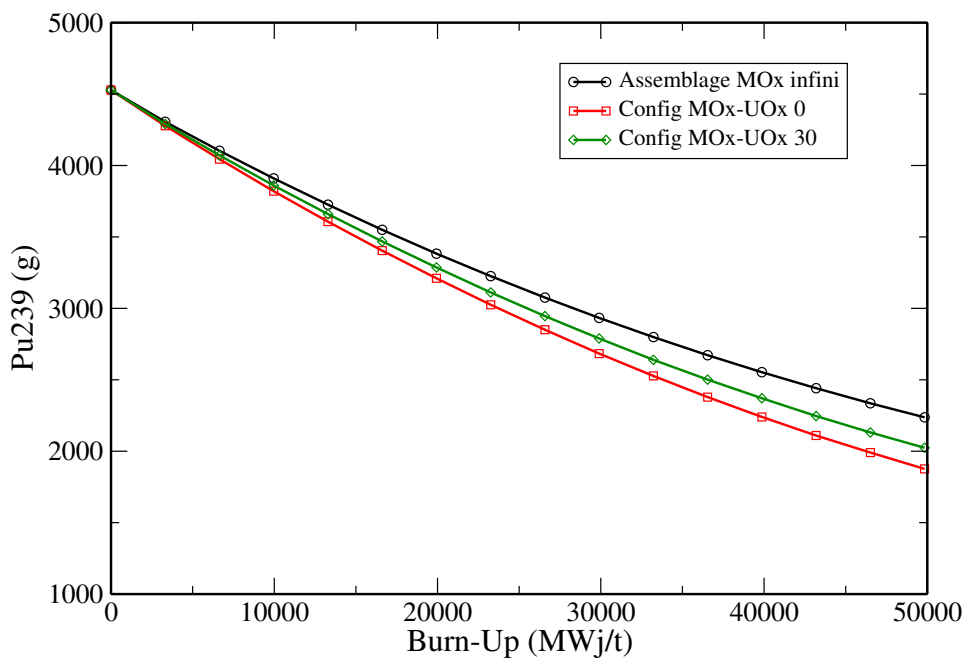


FIGURE 4.20 – Évolution du ^{239}Pu en fonction du Burn-Up pour les configurations ∞ , MOx entouré d'UOx à 0 GWj/t et MOx entouré d'UOx à 30 GWj/t avec entourage non évoluant

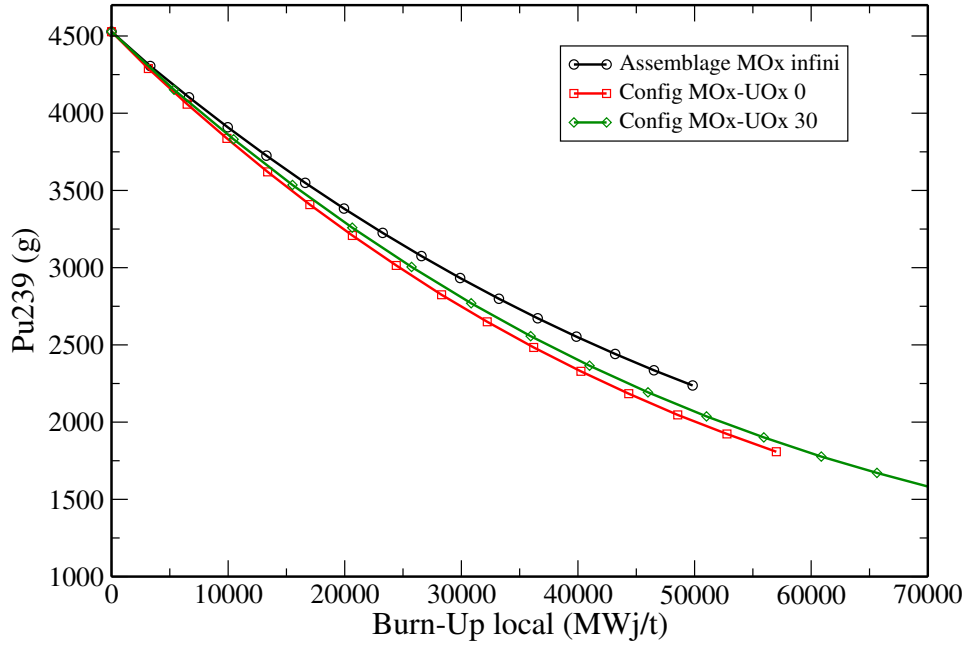


FIGURE 4.21 – Évolution du ^{239}Pu en fonction du Burn-Up pour les configurations ∞ , MOx entouré d'UOx à 0 GWj/t et MOx entouré d'UOx à 30 GWj/t avec entourage évoluant

4.6.2.2 Configuration avec entourage évoluant

Au vu des faibles écarts pour l' ^{235}U dans § 4.6.2.1, nous considérons uniquement l'évolution du ^{239}Pu . Puisque les assemblages constituant l'environnement évoluent, la quantité isotopique du ^{239}Pu est calculée en fonction du Burn-Up local de l'assemblage central.

Contrairement à ce que nous avons observé dans les paragraphes précédents pour des configurations entièrement UOx, l'entourage évoluant réduit les écarts estimés en fin d'irradiation (à 33 GWj/t) en comparaison à une configuration avec entourage non évoluant. Les écarts de cet isotope sont en fait de -6.82% et de -4.59% pour les configurations UOx – 0 et UOx – 30 respectivement.

Pendant l'évolution, le spectre des assemblages MOx évolue lui aussi pour se durcir du fait de l'augmentation de la quantité des isotopes pairs (^{240}Pu et ^{242}Pu). Ainsi, à cause de l'absence de compensation, un entourage fixe apporte un biais qui ne fait qu'augmenter au fur et à mesure de l'évolution.

L'évolution du ^{239}Pu en fonction du Burn-Up local est représentée sur la figure 4.21.

Nous observons, comme supposé, que la configuration UOx – 30 se trouve au milieu des configurations infinie et UOx frais. Comme attendu, elle ne représente jamais la configuration de référence comme la différence de spectre entre les UOx et les MOx est trop importante tout au long de l'évolution.

En conclusion, l'interaction MOx-UOx est très importante et modifie le spectre neutronique des deux types d'assemblages, donnant des écarts sur les inventaires isotopiques très importants en fin d'irradiation. L'effet sur un assemblage MOx d'un environnement composé d'UOx est bien plus important que celui d'assemblages UOx avec Burn-Up différents

sur un UOx, analysé dans § 4.4.2.2.

L'interaction entre les deux types d'assemblages doit donc être prise en compte pour une estimation correcte de l'évolution isotopique d'un assemblage dans le cœur du réacteur. Des études supplémentaires doivent être effectuées pour étudier la physique de la communication neutronique MOx-UOx. Des configurations plus réalistes faisant référence à un plan de chargement réel devraient être utilisées pour les simulations, afin de quantifier l'impact d'un environnement UOx sur un MOx et vice-versa. L'étude de [Bodin, 2010] montre que la prise en compte de cet interaction n'est pas évidente et que d'autres analyses sont à faire pour améliorer la simulation de l'environnement.

La prise en compte de l'évolution de l'environnement réduit les biais de calcul induits par l'entourage. En effet, la différence sur la quantité de ^{239}Pu en fin d'irradiation entre les configurations environnées par des UOx usés ou frais est plus importante lorsque l'environnement est fixe (6.5% contre 2.9%). Une modélisation avec entourage évoluant dont la composition serait mal maîtrisée semble donc plus fiable qu'une modélisation avec entourage fixe, même si elle apporte un écart systématique non négligeable.

4.7 Conclusions et bilan

Ce chapitre est dédié à l'étude des biais de simulation induits par l'omission du *cross-talking* inter-assemblages de la modélisation infinie. L'environnement d'un assemblage impacte son spectre neutronique et donc les sections efficaces moyennes des noyaux le composant. Les effets de spectre jouent aussi sur le flux neutronique, comme la puissance est normalisée dans nos simulations. L'impact de l'environnement est double : modification des sections efficaces et modification du flux, impliquant une variation globale de tous les taux de réaction neutroniques. La modélisation de l'environnement devrait donc induire des biais d'évolution qu'il faut quantifier.

Pour cela, nous avons étudié l'impact de l'épaisseur d'eau inter-assemblages qui n'est pas toujours prise en compte dans les calculs cellules § 4.3. Cette analyse nous a montré que la thermalisation du spectre induit une augmentation de sections efficaces de fission et donc une diminution du flux. La conséquence de ces effets conduit à une production de plutonium sur-évaluée dans les modélisations où la lame d'eau n'est pas prise en compte. Cette sur-estimation peut atteindre 7% pour le ^{239}Pu en fin d'irradiation. Ce biais fort est facilement évitable : il suffit de prendre en compte la lame d'eau dans la simulation infinie.

L'impact des assemblages voisins a été étudié en prenant en compte l'évolution de l'environnement ou non § 4.4. Les effets de spectre induits par l'entourage produisent les mêmes conséquences que ceux présentés au paragraphe précédent : une thermalisation du spectre par des assemblages plus frais que l'assemblage d'étude conduit à une sous-production du plutonium, alors que des assemblages plus usés durcissent le spectre neutronique et amènent à une sur-production du plutonium.

Après 15 GWj/t les variations de sections efficaces peuvent être assimilées à des fonctions linéaires, ce qui permet de moyenner le Burn-Up des assemblages constituant l'environnement. Un environnement fixe durcit le spectre de l'assemblage central en début

de cycle mais le thermalise en fin d'irradiation. Par jeux de compensation, une évolution infinie n'apporte que peu de biais par rapport à une évolution environnée d'assemblages non évoluant. La prise en compte de l'évolution de ces derniers ne conduit pas à une compensation des effets de spectre, impliquant de forts écarts sur les inventaires isotopiques en fin d'irradiation.

La modélisation réaliste d'un assemblage consiste à prendre en compte le rechargement § 4.5. Les biais observés du calcul infini utilisé pour la simulation de cette configuration sont suffisamment faibles pour être négligés dans un calcul de REP-UOx. L'entourage évoluant représente, quant à lui, la pire modélisation, avec des écarts de l'ordre de 2% en fin d'irradiation.

Il faut noter que dans le cas d'un REP moxé les effets de spectre des assemblages UOx sur l'assemblage MOx vont toujours dans le même sens quel que soit le Burn-Up des deux assemblages. Les écarts entre les assemblages UOx et MOx sont tels qu'il n'y a jamais de compensation de thermalisation (ou de durcissement). Dans ce cas, une simulation infinie apporterait des biais plus que significatifs. Une modélisation avec entourage évoluant permettrait de corriger une partie de ces biais.

Synthèse du voisinage

Effet de spectre (BOC)

$\Delta_{\infty}\%$	Z	A	B
σ_{fiss}^{235U}	-0.38	-5.11	-7.82
σ_{capt}^{238U}	0.00	-2.05	-3.54
Φ	0.37	4.90	7.32

- $Z = 0 \text{ GWj/t}$, $A = 15 \text{ GWj/t}$, $B = 30 \text{ GWj/t}$
- durcissement spectre par environnement
- variation de Φ pour maintenir la puissance constante

Biais sur les inventaires (EOC)

→ Environnement fixe :

40 GWj/t	$\Delta_{\infty}\%$		
isotope	Z	A	B
^{235}U	-3.29	0.43	2.43
^{239}Pu	-5.70	-0.95	1.41
^{241}Am	-4.54	-0.37	2.71

- assemblages frais : effet de thermalisation
- assemblages usés : durcissement de spectre
- effet de compensation pour la configuration A

→ Environnement évoluant :

40 GWj/t	$\Delta_{\infty}\%$		
isotope	A	B	R
^{235}U	2.10	3.34	-0.17
^{239}Pu	1.92	3.12	-0.98
^{241}Am	-6.98	-17.23	-

- pas de compensation avec environnement évoluant
- écarts réduits avec modélisation du rechargement
- mauvaise estimation des A.M. comme ^{241}Am

Synthèse de la modélisation de la lame d'eau

Effet de spectre (BOC)

observable	$\Delta\%$
σ_{fiss}^{235U}	~ 5
σ_{capt}^{238U}	~ 1
Φ	~ -5

- thermalisaiton du spectre par lame d'eau

Biais sur les inventaires (EOC)

40 GWj/t	
isotope	$\Delta \frac{lame-sans\ lame}{sans\ lame}$
^{235}U	-4.6 %
^{239}Pu	-7 %

- contre-réaction du flux en évolution : ^{235}U moins consommé et ^{239}Pu moins produit si modélisation lame d'eau

Analyse des assemblages en périphérie du cœur

Sommaire

5.1	Introduction à la problématique des assemblages aux bords du cœur	163
5.2	Présentation de l'étude	164
5.2.1	Description de la géométrie	164
5.2.2	Paramètres de simulation et statistique	165
5.3	Analyse en début d'irradiation	166
5.3.1	Comparaison avec l'assemblage infini	167
5.3.2	Sections efficaces de l' ^{235}U	168
5.3.2.1	Sections efficaces asymptotiques	169
5.3.2.2	Section efficaces à l'interface	170
5.4	Analyse en évolution	170
5.4.1	Évolution d'un assemblage unique	171
5.4.1.1	Assemblage 1	171
5.4.1.2	Assemblage 5	171
5.4.2	Simulation avec 6 assemblages évoluant	173
5.5	Prise en compte du rechargement	175
5.5.1	Déplacement de la périphérie à l'intérieur	176
5.5.2	Déplacement de l'intérieur à la périphérie	178
5.5.3	Conclusions sur la simulation des rechargements	180
5.6	Conclusions et bilan	181

5.1 Introduction à la problématique des assemblages aux bords du cœur

Comme nous l'avons vu dans l'introduction du chapitre 4, le cœur d'un réacteur est constitué d'assemblages hétérogènes dont la composition peut varier, selon le type de combustible (UOx ou MOx), l'enrichissement en ^{235}U initial et le Burn-up subit par les assemblages.

Ce chapitre est dédié aux assemblages à l'interface du cœur, aux extrémités du plan radial, en contact avec l'eau modératrice entourant le cœur. Comme nous l'avons vu dans le chapitre 3, le voisinage de l'eau impacte le spectre neutronique de l'assemblage (surtout dans les derniers centimètres) et implique une évolution différente des inventaires isotopiques par rapport à la configuration infinie. Nous pouvons donc supposer que l'évolution d'un assemblage qui se trouve tout près des bords ne sera pas la même que celle d'un assemblage au centre du cœur. Ainsi, un calcul cellule en conditions infinies ne représente pas de manière correcte un assemblage périphérique (rappelons que les écarts en fin de cycle entre l'*assemblage complet* et la configuration de référence sont de l'ordre de plusieurs pourcent comme montré dans le tableau 3.4).

Après la description de la configuration simulée § 5.2, l'analyse en début d'irradiation est présentée § 5.3. Une fois les effets de spectre dans l'assemblage périphérique en début de cycle quantifiés, une analyse détaillée de l'évolution de cet assemblage est effectuée dans § 5.4. Comme pour l'étude du voisinage du chapitre 4, deux types d'évolutions ont été réalisés : un présentant l'évolution d'un seul assemblage à la fois et un considérant l'évolution de tous les assemblages de la géométrie. Lors de ces évolutions, le rechargement partiel du cœur n'est pas pris en compte, mais, afin de comprendre l'impact sur un assemblage dû au changement de position (et la conséquente modification de son entourage) pendant l'irradiation, nous avons réalisé une évolution avec rechargement § 5.5.

5.2 Présentation de l'étude

5.2.1 Description de la géométrie

Afin d'étudier les caractéristiques neutroniques et l'évolution d'un assemblage près des bords du cœur, nous avons adopté une géométrie très simplifiée, constituée de plusieurs assemblages entourés d'un côté par de l'eau. Une représentation est donnée en figure 5.1. Dans cette image, la numérotation utilisée pour les 6 assemblages est aussi présentée.

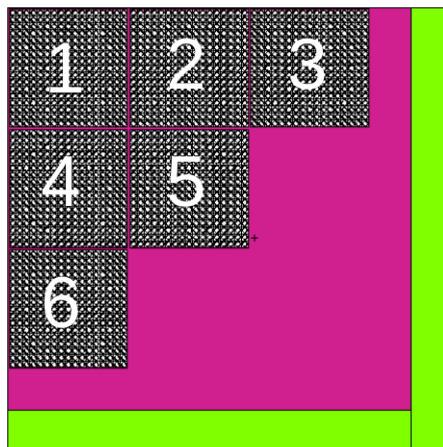


FIGURE 5.1 – Représentation de la géométrie utilisée pour l'étude des assemblages périphériques

Les caractéristiques des assemblages sont les mêmes que pour les chapitres précédents (tableau 3.1), en prenant en compte la lame d'eau, que nous avons gardée depuis les simulations du chapitre 4. Les valeurs des autres paramètres sont listées dans le tableau 5.1. L'épaisseur de l'eau entre l'assemblage 3 et le réflecteur (nommée épaisseur min de l'eau dans le tableau 5.1) est comparable avec celle du plénum de la configuration *assemblage complet* du chapitre 3 et égale à 0.14 m. L'épaisseur du réflecteur est telle que sa valeur est suffisante pour assurer une réflexion optimale des neutrons. Pour éviter des problèmes de convergence de source et pour rendre les calculs plus rapides, la hauteur de la géométrie a été fixée à 0.80 m environ, comme pour les configurations de l'étude du voisinage.

Grandeur	Valeur [cm]
lame d'eau	0.25
épaisseur réflecteur	7.14
épaisseur min d'eau	7.14
hauteur	81.28

TABLE 5.1 – Caractéristiques de la géométrie simulée pour l'étude des assemblages périphériques

Cette configuration, nommée « corner », devrait représenter un groupe d'assemblages qui se trouvent dans la périphérie radiale d'un cœur REP. Afin d'éviter des problèmes de convergence de source, nous avons choisi une géométrie réduite. Par contre, à cause de sa taille, le pois des fuites dans la géométrie corner est encore important, comme nous montrons dans § 5.3.

L'assemblage d'intérêt pour notre étude est le numéro 5. La géométrie est symétrique : en conséquence, nous nous attendons à voir les mêmes comportements pour les assemblages 2 et 4, que nous définissons internes, et les assemblages 3 et 6, appelés périphériques. L'assemblage 1 ne se trouve pas exactement dans les mêmes conditions que les assemblages 2 et 4, mais il semble assimilable à ces deux derniers en tant que assemblage interne. Au contraire, les conditions de l'assemblage 5 sont apparemment les mêmes que celles des assemblages périphériques 3 et 6. Par conséquent, nous les considérons comme faisant partie de ce groupe de symétrie d'assemblages périphériques.

5.2.2 Paramètres de simulation et statistique

Les paramètres de simulation sont les mêmes que pour l'étude des fuites axiales du chapitre 3 (voir § 3.2.4). Nous avons juste adapté le nombre de particules par cycle et le nombre des cycles, actifs et inactifs, pour cette géométrie. Nous avons utilisé 6000 particules/cycle, 200 cycles actifs et 200 inactifs. L'écart-type du facteur de multiplication calculé par MCNP est inférieure à 100 pcm.

Afin de réduire l'erreur sur les inventaires isotopiques et d'estimer l'incertitude statistique, nous avons réalisé plusieurs simulations indépendantes dont le nombre selon les différents types d'évolution est listé dans le tableau 5.2. Nous avons réalisé des simulations

d'évolution d'un seul des 6 assemblages de la géométrie (notées comme A suivi du numéro de l'assemblage évoluant), ainsi que des simulations où tous les assemblages évoluent. En ce qui concerne l'évolution avec la prise en compte du rechargement, nous avons réalisé une simulation par chacune des deux options de déplacement envisagées, présentées dans § 5.5 : un déplacement de la position 1 à la position 5 ($A1 \rightarrow A5$) et vice-versa ($A5 \rightarrow A1$).

<i>Configuration</i>	<i>Option</i>	N_{sim}
1 assemblage évoluant	$A1$	100
	$A5$	100
6 assemblages évoluant	-	50
évolution rechargement	$A1 \rightarrow A5$	1
	$A5 \rightarrow A1$	1

TABLE 5.2 – Nombre de simulations indépendantes réalisées pour chaque configuration étudiée

Le chapitre précédent est dédié à l'impact des assemblages voisins de Burn-Up différents sur l'évolution d'un assemblage donné. Dans ce chapitre, nous souhaitons étudier l'effet des fuites neutroniques radiales de manière indépendante du voisinage. Les compositions en début d'irradiation sont donc identiques pour tous les assemblages de la géométrie : UOx enrichi à 3.5%. Ce chapitre se limite à l'estimation de l'effet des fuites radiales, mais, afin d'étudier les effets croisés de voisinage et de fuites, des simulations de la configuration corner avec des assemblages à Burn-Up différents ont été réalisées. Les résultats ne sont pas développés ici, mais sont commentés dans les conclusions de ce chapitre.

5.3 Analyse en début d'irradiation

Comme dans le chapitre 4, la première partie de l'analyse consiste en une étude détaillée de la configuration en début d'irradiation. Tout d'abord, nous avons regardé les spectres neutroniques de chacun des six assemblages constituant la géométrie simulée. La grandeur représentative utilisée pour évaluer le spectre est, à l'image des chapitres précédents, le rapport des flux rapide et thermique Φ_1/Φ_2 .

La valeur de Φ_1/Φ_2 dans les assemblages périphériques 3, 5 et 6 est plus faible par rapport à celle des 3 assemblages internes 1, 2 et 3 à cause de la thermalisation due à l'eau environnante. Les valeurs reportées en figure 5.2 l'attestent. Grâce à cette figure, nous observons que la symétrie géométrique envisagée précédemment est respectée : les valeurs des rapports des flux sont presque identiques pour les 3 assemblages constituant chacun des deux groupes de symétrie définis dans § 5.2.

Φ_1/Φ_2	6.21	6.21	5.61
	6.18	5.70	
	5.72		

FIGURE 5.2 – Valeurs de Φ_1/Φ_2 pour les 6 assemblages en début d'irradiation. Résultats issus d'une seule simulation

5.3.1 Comparaison avec l'assemblage infini

Comparons maintenant les valeurs de Φ_1/Φ_2 des assemblages simulés avec celle de l'assemblage infini, qui vaut 6.01 (§ 4.3.1, tableau 4.3, configuration ∞ avec lame d'eau). Comme attendu, les valeurs des rapports du flux rapide sur flux thermique sont moins importantes pour les assemblages périphériques que pour l'assemblage infini. En effet, la présence de l'eau perturbe l'ensemble des crayons à l'interface eau/assemblage et cette perturbation est suffisamment forte pour impacter l'ensemble du spectre des assemblages situés à la périphérie du cœur. Afin de visualiser cet effet de thermalisation, supposé localisé sur les derniers crayons en bordure d'assemblage, nous avons utilisé un *MeshTally* de MCNP qui permet de calculer les distributions spatiales des flux avec une discrétisation très fine. Le résultat de ce calcul est montré dans la figure 5.3 représentant Φ_1/Φ_2 dans toute la géométrie. Nous observons que la thermalisation du spectre neutronique est bien concentrée dans les derniers crayons des assemblages aux bords. Notons que l'effet de thermalisation est de la même intensité pour les trois assemblages périphériques.

Pour les assemblages internes, les valeurs de Φ_1/Φ_2 sont plus élevées que celle de référence. Cet écart peut s'expliquer par l'effet de taille introduit et explicité dans § 3.5.2 du chapitre 3.

Reprenons l'expression de Φ_1/Φ_2 asymptotique exprimée dans l'équation 5.1 :

$$\frac{\Phi_1}{\Phi_2} = \frac{1}{S_1} = \frac{1 + \pi^2 L^2 / a^2}{p \Sigma_1 / \Sigma_2}, \quad (5.1)$$

qui est aussi valable pour un réacteur plaque avec réflecteur, [Lamarsh, 1966]. La dimension a caractéristique de notre géométrie, comme pour l'assemblage de 40 cm présenté dans § 3.5.1, est encore assez faible pour détecter une différence significative entre la valeur de Φ_1/Φ_2 asymptotique et celle de l'assemblage infini.

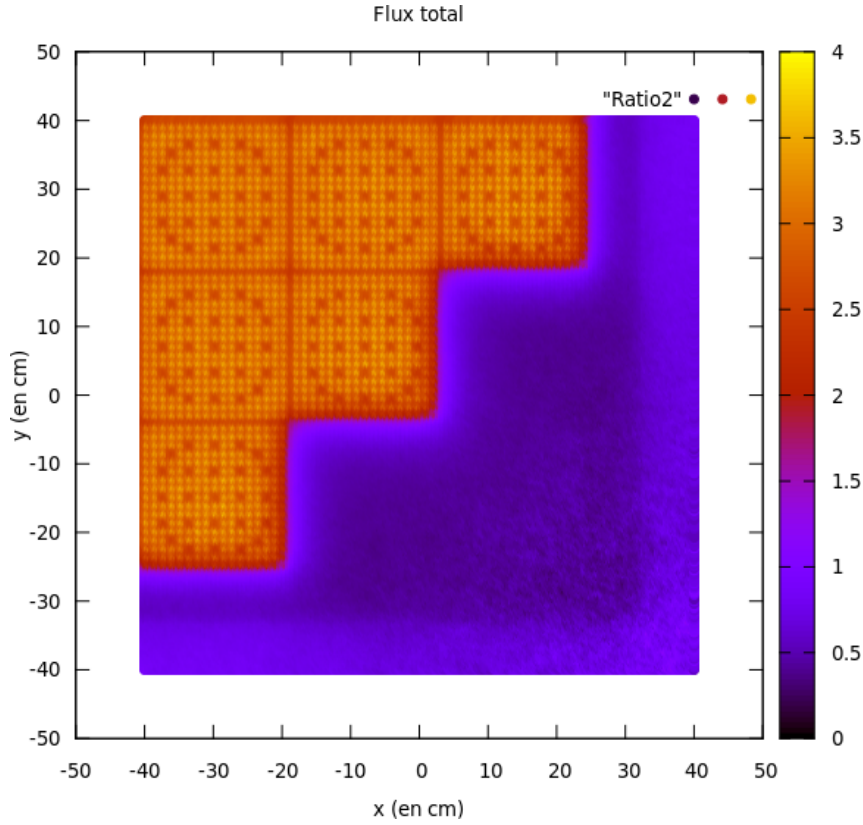


FIGURE 5.3 – Φ_1/Φ_2 dans la géométrie étudiée avec une discrétisation de 0.16 cm dans chacune des deux directions sur le plan (x,y)

5.3.2 Sections efficaces de ^{235}U

Après l'analyse préliminaire du spectre neutronique du paragraphe précédent, nous examinons maintenant les sections efficaces de fission de ^{235}U pour tous les assemblages en début d'irradiation. Les valeurs de sections efficaces, comme toutes les valeurs des inventaires isotopiques reportées dans la suite, sont des valeurs moyennées sur l'ensemble des 50 simulations indépendantes effectuées.

De manière cohérente avec l'augmentation du rapport flux rapide sur flux thermique, les sections efficaces de fission de ^{235}U des assemblages internes sont inférieures à la section efficace de fission de l'assemblage infini. Au contraire, les $\sigma_{fiss}^{235\text{U}}$ des assemblages périphériques 3, 5 et 6 sont plus grandes comparées au cas de référence. La figure 5.4 (a) montre les valeurs de section efficace ainsi que l'écart-type relatif pour les 6 assemblages et confirme nos affirmations précédentes : $\sigma_{fiss}(1, 2, 4) < \sigma_{fiss}(\infty)$ et $\sigma_{fiss}(3, 5, 6) > \sigma_{fiss}(\infty)$.

Les sections efficaces des assemblages internes sont identiques pour les 3 assemblages de ce groupe de symétrie. Par contre, la valeur de section efficace de fission de l'assemblage 5 n'est pas compatible avec celles des deux autres assemblages périphériques. La différence relative par rapport à l'assemblage infini, reportée sur la figure 5.4 (b), de l'assemblage 5 est plus faible que celles des assemblages 3 et 6, bien au-delà de l'incertitude statistique.

Pour expliquer cette incohérence apparente, considérons la forme du flux neutronique et sa condition d'annulation aux limites. Cette géométrie corner présente trois directions de développement du flux neutronique : les axes x et y et la direction diagonale $(x, -y)$.

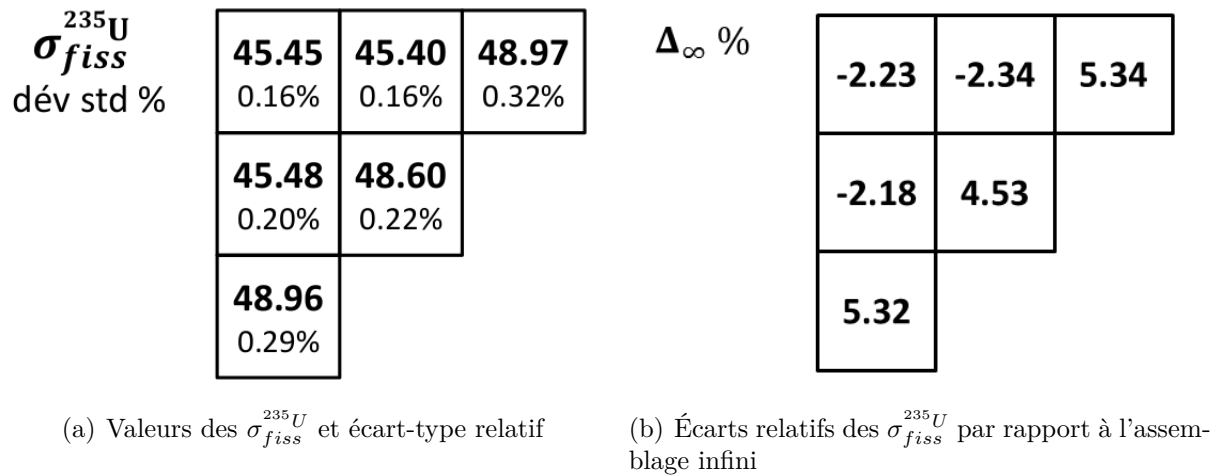


FIGURE 5.4 – Valeurs des sections efficaces de fission pour les 6 assemblages en début de cycle avec écart-type relatif (a) et écarts relatifs par rapport à l'assemblage infini (b) en début d'irradiation

5.3.2.1 Sections efficaces asymptotiques

Le long des axes x et y , complètement équivalents, le flux neutronique a une condition d'annulation aux bords identique. Les sections efficaces de fission de l' ^{235}U des assemblages internes sont donc plus petites par rapport à celle infinie à cause de l'effet de taille.

Afin de s'assurer de la validité de l'expression 5.1 du rapport asymptotique des flux pour notre géométrie, et ainsi vérifier que le spectre neutronique dépend bien de la taille de la géométrie simulée, nous avons calculé la section efficace de fission asymptotique pour deux configurations de tailles différentes d'un assemblage unique modéré sur un côté par une épaisseur d'eau de 5 cm et réfléchi de l'autre. Une présentation schématique de ce calcul est présentée sur la figure 5.5

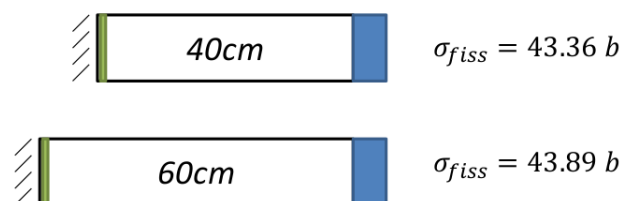


FIGURE 5.5 – Représentation des deux assemblages réfléchis d'un côté et modérés de l'autre (pas à l'échelle) et valeurs des σ_{fiss}^{235U} asymptotiques (zone verte)

La section efficace de fission asymptotique de l' ^{235}U (calculée dans la zone en vert de la figure 5.5) de l'assemblage de 60 cm est, comme attendue par la relation 5.1, plus importante que celle de l'assemblage de 40 cm. L'écart observé dans la figure 5.4 de -2% environ entre la σ_{fiss}^{235U} des assemblages internes par rapport à la valeur infinie peut donc être expliqué par cet effet de taille.

5.3.2.2 Section efficaces à l'interface

En ce qui concerne la direction diagonale $(x, -y)$, la longueur caractéristique est plus petite que celles des deux autres directions. En conséquence, puisque la taille diminue, la section efficace asymptotique de l'assemblage 5 est moins importante que celles des assemblages 3 et 6. Puisque l'effet de thermalisation de l'eau est constant pour les 3 assemblages, la valeur de σ_{fiss}^{235U} de l'assemblage qui se trouve le long de la diagonale reste plus faible que celles des autres assemblages périphériques.

La condition d'annulation des flux rapide et thermique est donc différente selon les deux directions (x ou y et la diagonale). La nappe de flux n'est pas homogène dans l'espace, comme montré dans la figure 5.6.

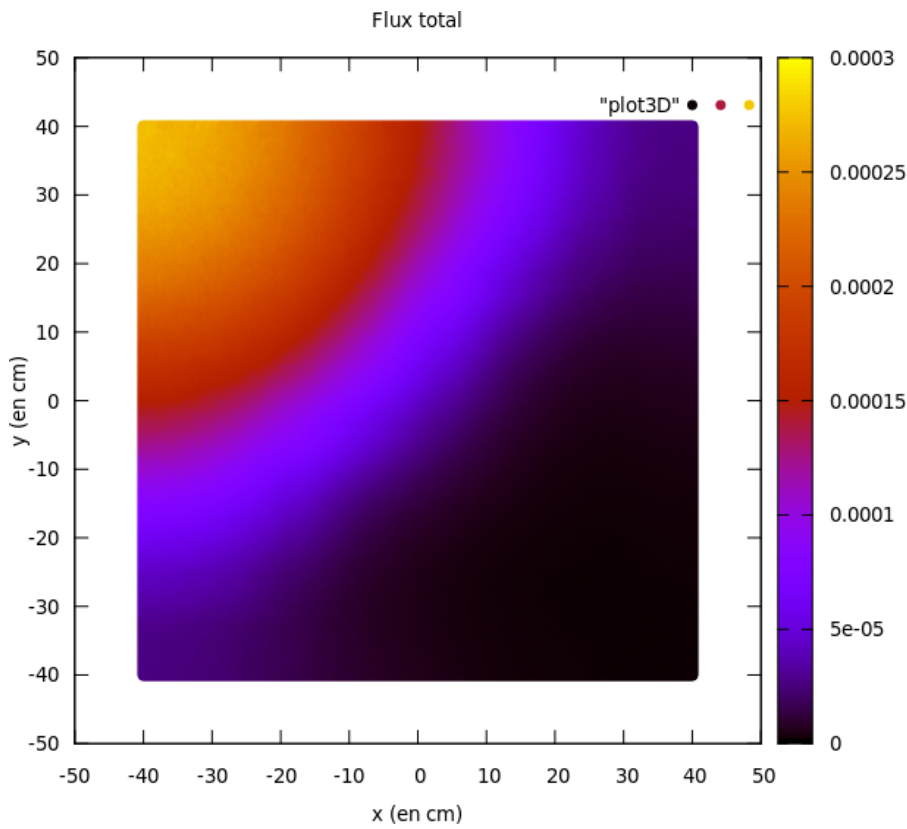


FIGURE 5.6 – Flux neutronique pour la configuration corner sur le plan (x, y) avec une discrétisation spatiale de 0.16 cm dans chacune des deux directions

Par conséquent, la relative faiblesse de la section efficace de l'assemblage 5 par rapport aux assemblages 3 et 6 peut s'expliquer par une inhomogénéité dans l'effet de taille montré par la relation 5.1.

5.4 Analyse en évolution

Dans ce paragraphe nous présentons l'analyse des assemblages de la configuration corner en évolution à travers la comparaison des inventaires isotopiques en fin de cycle par

rapport à l'assemblage infini. Comme précisé dans § 5.2, nous avons réalisé deux types d'évolution. Le premier type d'analyse, où seul un assemblage évolue, fait l'objet du paragraphe suivant, dans lequel seules les évolutions des assemblages 1 et 5 sont présentées. L'analyse de l'évolution de tous les assemblages constitue la deuxième typologie d'analyse et elle est montrée dans § 5.4.2.

5.4.1 Évolution d'un assemblage unique

Pour cette analyse nous avons choisi de présenter un assemblage interne, le numéro 1, et un assemblage périphérique, le numéro 5. En effet, à la vue des résultats en début d'irradiation présentés dans le paragraphe précédent 5.3.1, ces évolutions vont représenter les cas enveloppes des assemblages de notre géométrie. Nous avons estimé les inventaires isotopiques en fin d'irradiation et nous les avons comparés à ceux de l'assemblage infini. Les valeurs de ces inventaires sont des valeurs moyennes calculées sur chacune des deux séries de 100 simulations que nous avons réalisées afin de maîtriser les incertitudes statistiques de nos calculs. Pour ne pas surcharger ce manuscrit, nous ne présentons que les évolutions et les écarts par rapport à la configuration de référence des noyaux ^{235}U et ^{239}Pu .

5.4.1.1 Assemblage 1

L'assemblage numéro 1 fait partie, avec les assemblages 2 et 4, du groupe des assemblages internes. En considérant que la composition des assemblages avoisinants n'évolue pas, cet assemblage se trouve dans une condition similaire à celle de l'assemblage central de la configuration Z avec entourage non évoluant étudiée dans le chapitre 4. L'assemblage considéré est donc entouré par deux assemblages frais, comme pour la configuration Z , et par deux assemblages qui évoluent exactement comme lui-même (condition de réflexion sur les deux côtés externes).

Les effets physiques qui dominent l'évolution devraient être similaires à ceux de l'assemblage central de la configuration Z . Cependant, nous nous attendons à des écarts moins importants par rapport à la configuration de référence, vu la condition de réflexion qui sous-entend des voisins évoluant exactement comme l'assemblage d'intérêt. En effet, les écarts reportés dans le tableau 5.3 pour l'assemblage 1 montrent des valeurs plus faibles que ceux du tableau 4.9 qui présentent les écarts entre l'assemblage Z et l'assemblage infini. Le positionnement intermédiaire entre la configuration infinie et la configuration Z est bien visible dans la figure 5.8 qui représente l'évolution du ^{239}Pu pour les configurations considérées : assemblage infini, corner évolution assemblage 1, corner évolution assemblage 5 et configuration Z entourage non évoluant.

5.4.1.2 Assemblage 5

L'évolution de l'assemblage 5, est quant à elle, fortement impactée par l'effet de thermalisation de l'eau. La physique qui gouverne l'évolution isotopique expliquant les écarts doit être comparable à celle de la zone 1 de la configuration *assemblage complet* du chapitre 3.

	A1		A5	
	$\varepsilon\%$	$\Delta_\infty\%$	$\varepsilon\%$	$\Delta_\infty\%$
^{235}U	0.08	-1.16	0.27	-9.03
^{239}Pu	0.12	-1.89	0.37	-13.07

TABLE 5.3 – Écarts-types relatifs et écarts relatifs par rapport à la configuration infinie pour les simulations d'évolution des assemblages 1 et 5 à 40 GWj/t

Mais, à la différence de cette dernière, l'eau modératrice est présente sur les deux côtés de l'assemblage et thermalise les crayons à l'interface cœur/réflecteur, donnant un écart par rapport à l'assemblage infini plus consistant que celui de la zone axiale périphérique de l'assemblage modéré. En effet, la proportion du volume de combustible modéré par l'eau est plus importante ici que pour les zones extrêmes de la configuration *assemblage complet*.

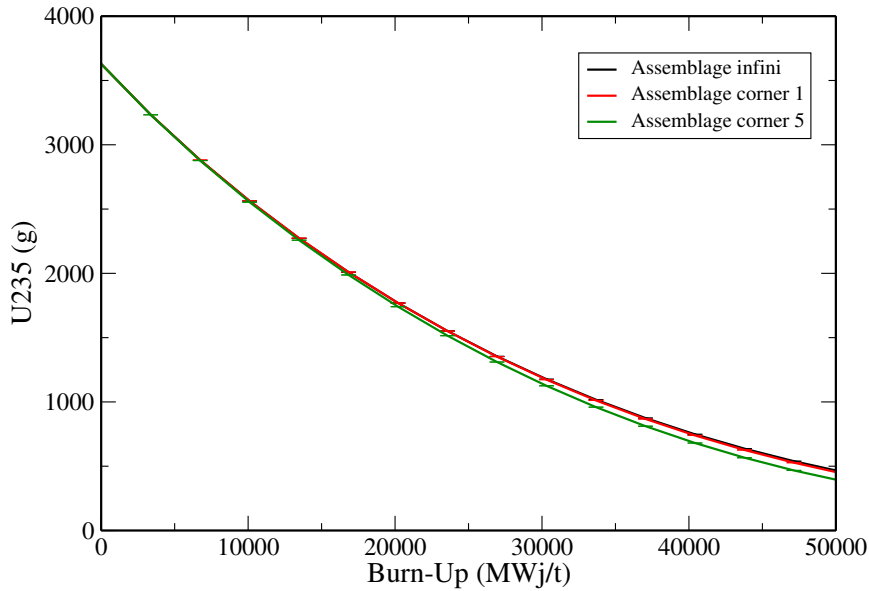


FIGURE 5.7 – Évolution de l' ^{235}U en fonction du Burn-Up pour les configurations infinie, corner évolution assemblage 1 et corner évolution assemblage 5 avec les barres d'erreur associées

Les valeurs des écarts pour l'assemblage 5, montrées en tableau 5.3, sont effectivement très importantes. À cause de la forte modération, l' ^{235}U est beaucoup plus consommé par rapport à l'évolution infinie, comme le montre la courbe verte dans la figure 5.7. De son côté, comme nous l'avons déjà abordé dans § 3.3.1.3 du chapitre 3, le ^{239}Pu est beaucoup moins produit.

En effet, la thermalisation augmente les sections efficaces, notamment celle de fission de l' ^{235}U , et par normalisation de puissance le flux neutronique est impacté à la baisse. Le ^{239}Pu est donc moins produit puisque l'augmentation relative de la section efficace de capture de l' ^{238}U est plus faible que la diminution du flux neutronique. Le niveau d'équilibre du ^{239}Pu est aussi ramené à la baisse comme sa section efficace de fission augmente avec

la thermalisation.

Ce noyau est ainsi *in fine* moins produit dans un assemblage périphérique que dans un assemblage asymptotique. Le plutonium prenant une part moins importante des fissions dans ces assemblages périphériques, l' ^{235}U est plus consommé.

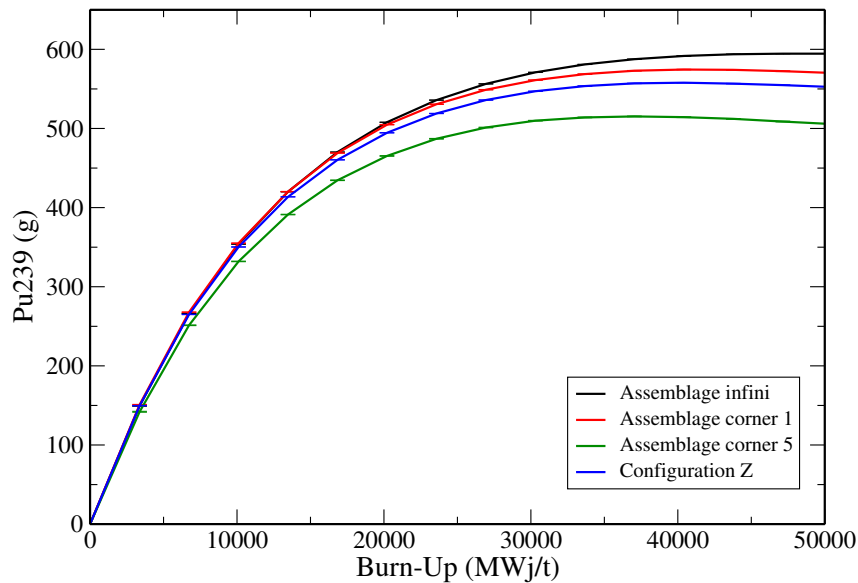


FIGURE 5.8 – Évolution du ^{239}Pu en fonction du Burn-Up pour les configurations infinie, corner évolution assemblage 1, corner évolution assemblage 5 et configuration Z entourage non évoluant avec les barres d'erreur associées

5.4.2 Simulation avec 6 assemblages évolutifs

Ce paragraphe est dédié à l'analyse de la configuration *corner* dans laquelle tous les assemblages évoluent. Nous avons estimé les inventaires isotopiques pour chacun des 6 assemblages et nous les avons comparés à ceux de la configuration de référence. Comme dans le cas des configurations 3x3 avec entourage évoluant § 4.4.3.1, nous avons calculé les valeurs des quantités isotopiques normalisées au Burn-Up local de chaque assemblage.

Le Burn-up final de la simulation est choisi égal à 50 GWj/t afin de pouvoir estimer le Burn-Up final des assemblages moins consommés. Pour atteindre ce temps de cycle, le Burn-Up local à la fin de la simulation n'est pas le même pour les 6 assemblages : les assemblages internes atteignent un Burn-Up une fois et demi plus important que celui des assemblages périphériques (en moyenne sur les trois assemblages 61.6 GWj/t pour les premiers et 39.7 GWj/t pour les seconds). Puisque les assemblages périphériques ont un Burn-Up de fin d'irradiation plus petit que celui que nous avons principalement utilisé pour nos comparaisons jusqu'à maintenant (40 GWj/t), les résultats sont présentés pour un Burn-Up de 30 GWj/t .

La figure 5.9 illustre les écarts des assemblages avec la configuration infinie. Comme attendu, la symétrie géométrique est respectée : le groupe d'assemblages internes et celui des assemblages périphériques montrent des évolutions isotopiques presque identiques entre

elles, avec des écarts entre les 3 assemblages qui ne dépassent pas l'incertitude statistique.

$\Delta_{\infty}(^{235}\text{U}) \%$	0.41	0.86	-2.72
	0.87	-2.58	
	-2.72		

$\Delta_{\infty}(^{239}\text{Pu}) \%$	0.65	0.97	-7.28
	0.97	-7.05	
	-7.24		

(a) Écarts des inventaires de l' ^{235}U par rapport à l'assemblage infini
(b) Écarts des inventaires du ^{239}Pu par rapport à l'assemblage infini

FIGURE 5.9 – Valeurs des écarts des inventaires de l' ^{235}U (a) et du ^{239}Pu (b) par rapport à l'assemblage infini pour les 6 assemblages à un Burn-Up local de 30 GWj/t

Les assemblages internes présentent un inventaire isotopique pour les deux fissiles principaux très similaire à celui de l'assemblage infini, comme montré dans les figures 5.10 et 5.11. Les écarts, même s'ils ne sont pas visibles du fait de l'incertitude statistique, peuvent être expliqués par l'effet de taille introduit et développé plus haut.

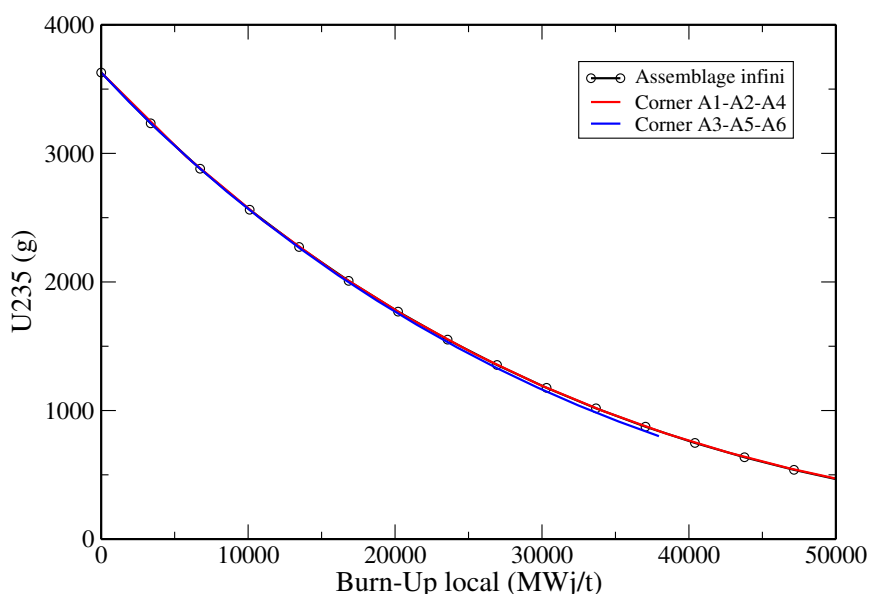


FIGURE 5.10 – Évolution de l' ^{235}U en fonction du Burn-Up local pour l'assemblage infini, les assemblages internes (représentés par le 1) et les assemblages périphériques (représentés par le 5) de la configuration corner

Au contraire, les assemblages en périphérie montrent une sur-consommation d' ^{235}U et une sous-production de ^{239}Pu , même si elles sont moins importantes que dans le cas d'évolution du seul assemblage 5 (tableau 5.3). Les écarts des fissiles principaux pour les assemblages périphériques ne sont pas négligeables, montrant que, du fait de la thermali-

sation de l'eau au voisinage, l'évolution d'un assemblage qui se trouve aux bords du cœur est différente de l'évolution d'un assemblage au centre. La modification du spectre due au modérateur en contact avec les assemblages périphériques modifie donc fortement les évolutions isotopiques dans ces assemblages, donnant des écarts par rapport à la configuration infinie plus importants que les écarts dus à l'environnement, présentés dans le chapitre précédent, dans le cas le plus impacté (l'assemblage environné par des UOx frais non évoluant - configuration Z).

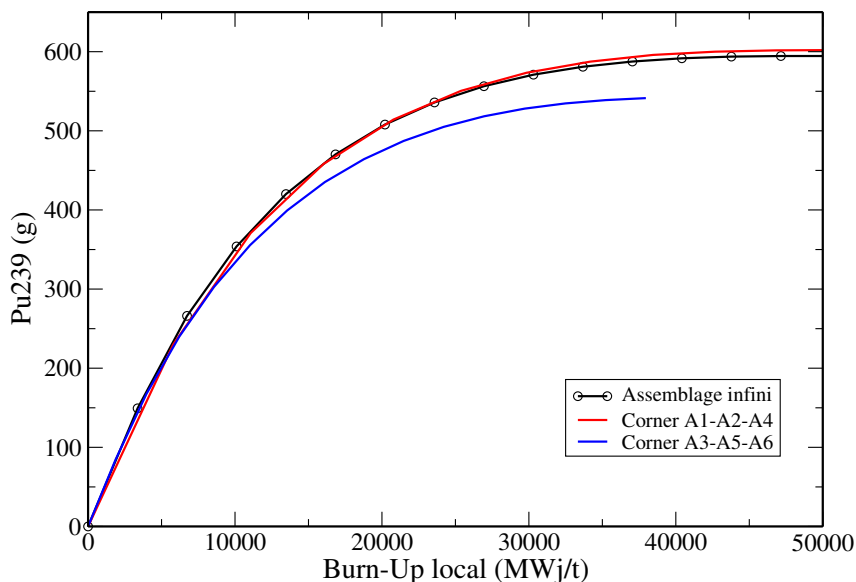


FIGURE 5.11 – Évolution du ^{239}Pu en fonction du Burn-Up local pour l'assemblage infini, les assemblages internes (représentés par le 1) et les assemblages périphériques (représentés par le 5) de la configuration corner

Afin de se rapprocher des conditions d'irradiation plus réalistes, nous avons effectué des simulations avec déplacement de l'assemblage 5 vers l'intérieur et vice-versa. L'analyse de ces résultats est présentée dans le paragraphe suivant.

5.5 Prise en compte du rechargement

Le paragraphe précédent montre que la position des assemblages joue un rôle clef dans l'évolution des combustibles. Dans un cœur, après un premier cycle d'irradiation, les assemblages sont déplacés et ce déplacement permet de remettre un assemblage périphérique en conditions asymptotiques. Cependant les biais accumulés pendant la première partie de son évolution peuvent s'amplifier après déplacement. Pour cette raison, nous cherchons ici à étudier l'impact des déplacements des assemblages.

Comme pour la configuration 3x3 dans § 4.5 du chapitre précédent, nous avons réalisé des simulations d'évolution pendant lesquelles l'assemblage d'étude change de position. Les options envisagées sont doubles : un déplacement de la périphérie à l'intérieur de la configuration corner et un déplacement de l'intérieur à une position externe.

Nous avons montré dans le chapitre précédent que les évolutions d'assemblages environnés où les compositions des assemblages voisins n'évoluent pas et restent égales à la composition initiale sont les configurations qui apportent un biais maximum du fait du fort impact des combustibles UOx frais. Pour les simulations de ce paragraphe, nous avons donc fait évoluer le combustible des assemblages voisins. Lors de la première partie de l'irradiation, les assemblages vont atteindre chacun leur propre Burn-Up. Au moment du rechargement, nous considérons que les assemblages voisins sont remplacés par des assemblages neufs.

5.5.1 Déplacement de la périphérie à l'intérieur

Cette évolution de rechargement prévoit le changement de position de l'assemblage de la position 5 à la position 1 à un moment donné de l'irradiation. Pour la réaliser, nous avons pris la composition isotopique de l'assemblage 5 issue de la simulation avec tous les assemblages évoluant à $13\,700\text{ MWj/t}$ et nous l'avons attribuée à l'assemblage en position 1. La simulation continue ensuite avec l'évolution de l'assemblage 1 et de ses voisins, tous évoluant. Une représentation schématique est donnée dans la figure 5.12, où dans chaque carré représentant un assemblage sont reportés les Burn-Up de début d'irradiation et de fin de simulation.

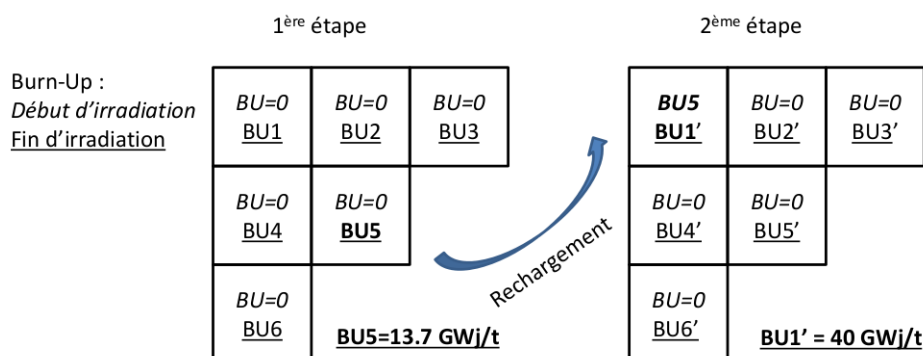


FIGURE 5.12 – Schéma de rechargement : une simulation des 6 assemblages évoluant. Quand l'assemblage 5 rejoint 13.7 GWj/t il est déplacé en position 1; une deuxième simulation d'évolution commence avec les autres assemblages frais

Nous avons comparé les inventaires isotopiques de l'assemblage déplacé avec la configuration infinie à 40 GWj/t . Pour comprendre l'effet du rechargement, nous avons confronté les écarts avec ceux des assemblages 1 et 5 de la configuration avec tous les assemblages évoluant. En effet, le paragraphe précédent montre que la position de l'assemblage est très importante pour l'évolution des combustibles. Ce calcul permet de vérifier si les biais issus de la première partie de l'évolution vont s'amplifier, après rechargement, dans la deuxième partie de l'évolution. Le tableau 5.4 reporte les écarts pour l' ^{235}U et le ^{239}Pu et les figures 5.13 et 5.15 les évolutions isotopiques en fonction du Burn-Up local.

Globalement, les écarts de la configuration avec déplacement sont plus faibles que les écarts de l'assemblage 5 qui ne change pas de position. Cependant, la valeur de la différence relative pour l' ^{235}U est assez élevée. Dans le zoom de l'évolution de l' ^{235}U reporté en

figure 5.14, les courbes verte et noire, représentant l'assemblage interne A1 et l'infini, sont presque entièrement confondues (écart de 1% en fin d'irradiation). La courbe violette de l'assemblage 5 reste au dessous des autres pour toute l'évolution, alors que celle rouge de l'assemblage déplacé semble se rapprocher à la courbe de référence, ce qui tend à supposer que les biais de modélisation diminuent avec le déplacement.

$\Delta_{\infty}\%$	$D(5 \rightarrow 1)$	A1	A5
^{235}U	-2.50	1.09	-5.56
^{239}Pu	-1.27	1.03	-8.09

TABLE 5.4 – Écarts des inventaires à 40 GWj/t de l' ^{235}U et du ^{239}Pu par rapport à l'assemblage infini pour la configuration avec déplacement 5 $\rightarrow$ 1 et des assemblages 1 et 5 de la configuration avec tous les assemblages évoluant

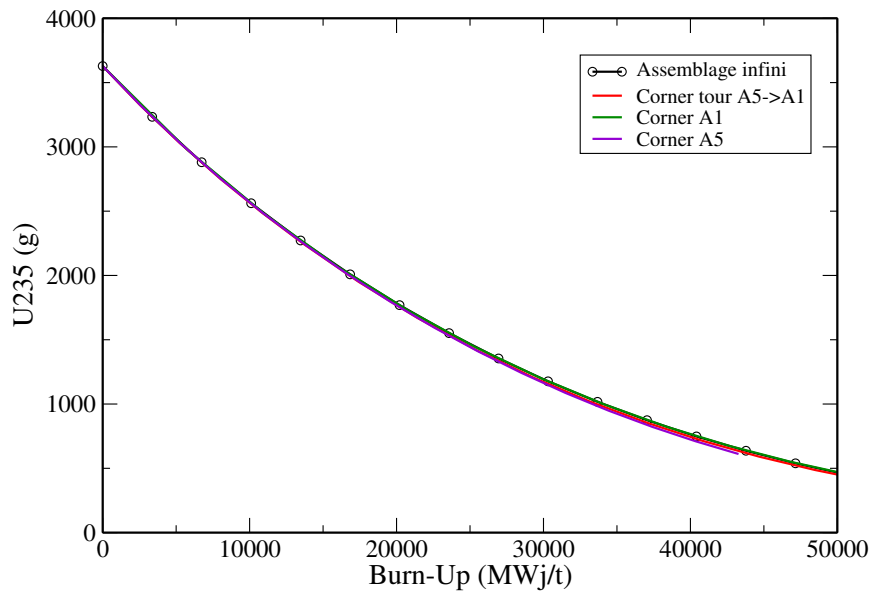


FIGURE 5.13 – Évolution de l' ^{235}U en fonction du Burn-Up local pour l'assemblage infini, les assemblages 1, 5 et l'assemblage déplacé de 5 à 1

En ce qui concerne le ^{239}Pu , le changement d'évolution de cet isotope après le déplacement est évident : la courbe rouge de la figure 5.15 se rapproche vite de la noire et il semble que, après le Burn-Up de fin d'irradiation, les deux courbes se rejoignent, les équilibres de cet isotope étant identiques.

L'impact de l'histoire précédente de l'assemblage déplacé à l'intérieur conditionne l'évolution de l' ^{235}U et du ^{239}Pu : les écarts à 40 GWj/t par rapport à l'assemblage infini ont le même signe que ceux de l'assemblage 5, les courbes des inventaires restent au dessous de celle infinie et de celle de l'assemblage en position 1. Comme dans le cas des configurations 3x3 avec entourage non évoluant § 4.4.2, les courbes des inventaires semblent se rapprocher à celle de l'assemblage en position interne (et donc à l'assemblage infini), mais avec un certain retard, dû à l'influence de l'histoire précédente de l'assemblage et à son

environnement de l'étape d'avant de la simulation.

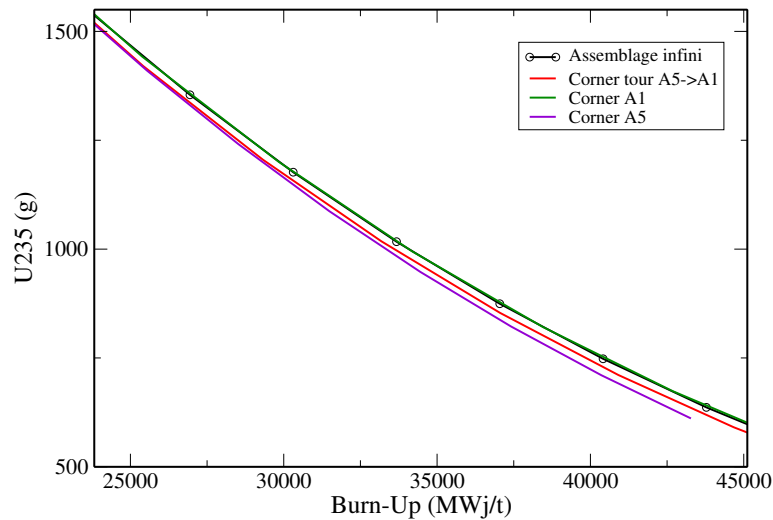


FIGURE 5.14 – Zoom de l'évolution de l' ^{235}U en fonction du Burn-Up local pour l'assemblage infini, les assemblages 1, 5 et l'assemblage déplacé de la position périphérique 5 à la position interne 1

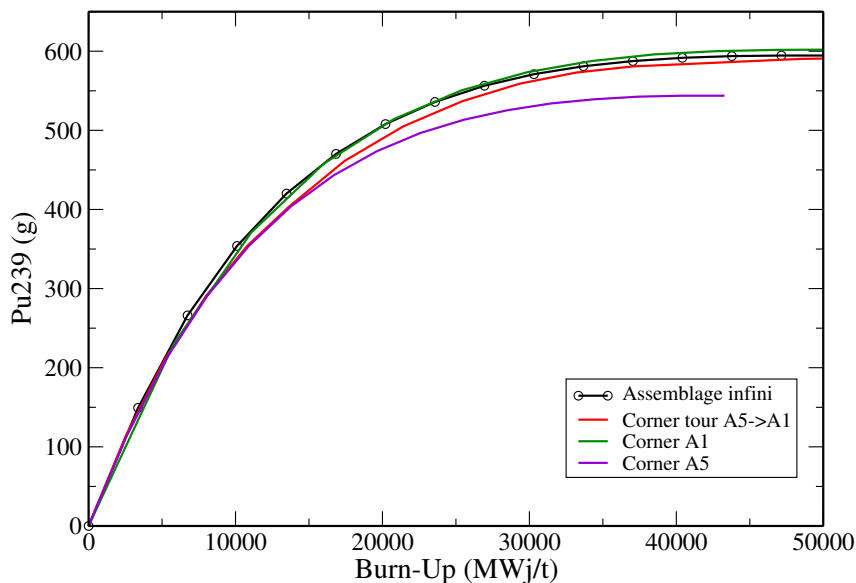


FIGURE 5.15 – Évolution du ^{239}Pu en fonction du Burn-Up local pour l'assemblage infini, les assemblages 1, 5 et l'assemblage déplacé de 5 à 1

5.5.2 Déplacement de l'intérieur à la périphérie

Pour réaliser le déplacement d'un assemblage initialement à l'intérieur vers une position périphérique, nous avons effectué l'opération inverse de celle décrite en figure 5.12, en inversant les positions 5 et 1. L'évolution de l'assemblage 1 et des assemblage voisins a été réalisée jusqu'à ce que le premier atteigne un Burn-Up de 16.1 MWj/t . Ensuite cet

assemblage a été déplacé en position 5 pour la fin de l'évolution. Lors du déplacement, les assemblages voisins ont été remplacés par des assemblages frais.

$\Delta_{\infty}\%$	$D(1 \rightarrow 5)$	A1	A5
^{235}U	-4.75	1.09	-5.56
^{239}Pu	-8.43	1.03	-8.09

TABLE 5.5 – Écarts des inventaires à 40 GWj/t de l' ^{235}U et du ^{239}Pu par rapport à l'assemblage infini pour la configuration avec déplacement 1 $\rightarrow$ 5 et des assemblages 1 et 5

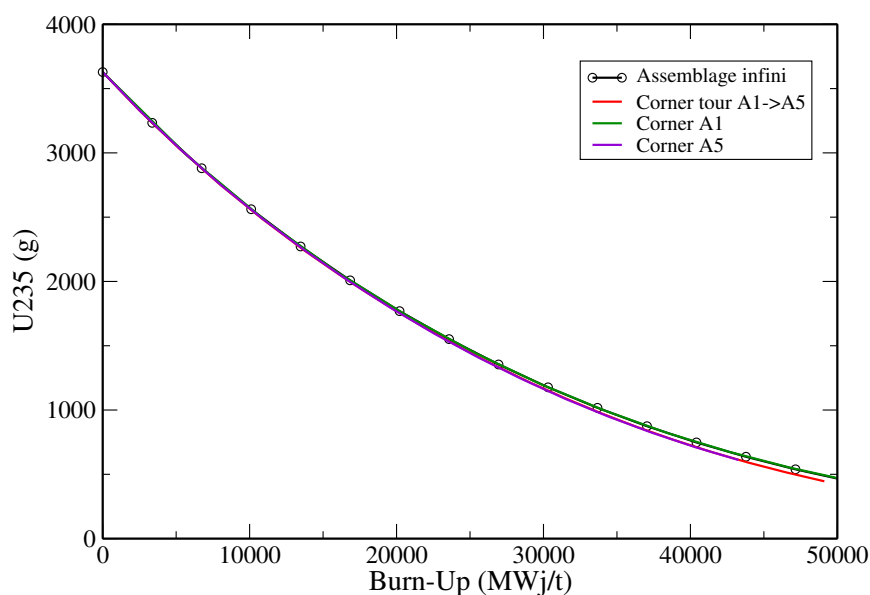


FIGURE 5.16 – Évolution de l' ^{235}U en fonction du Burn-Up local pour l'assemblage infini, les assemblages 1, 5 et l'assemblage déplacé de 1 à 5

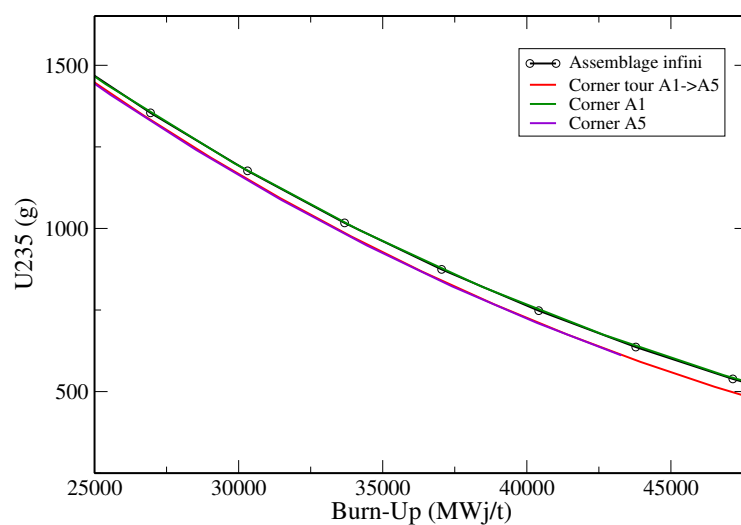


FIGURE 5.17 – Zoom de l'évolution de l' ^{235}U en fonction du Burn-Up local pour l'assemblage infini, les assemblages 1, 5 et l'assemblage déplacé de la position interne 1 à la position périphérique 5

L'impact du déplacement de l'assemblage dans la position périphérique est très fort : les évolutions des isotopes ^{235}U et ^{239}Pu , représentées sur les figures 5.16 et 5.18, changent rapidement de tendance suite au rechargement. Elles s'alignent presque parfaitement avec les évolutions des inventaires de l'assemblage 5. Les écarts à 40 GWj/t du tableau 5.5 de l'assemblage déplacé sont en fait très proches à ceux de l'assemblage 5. Dans le zoom de l'évolution de l' ^{235}U en figure 5.17 nous pouvons voir une superposition presque totale entre les courbes rouge et violette.

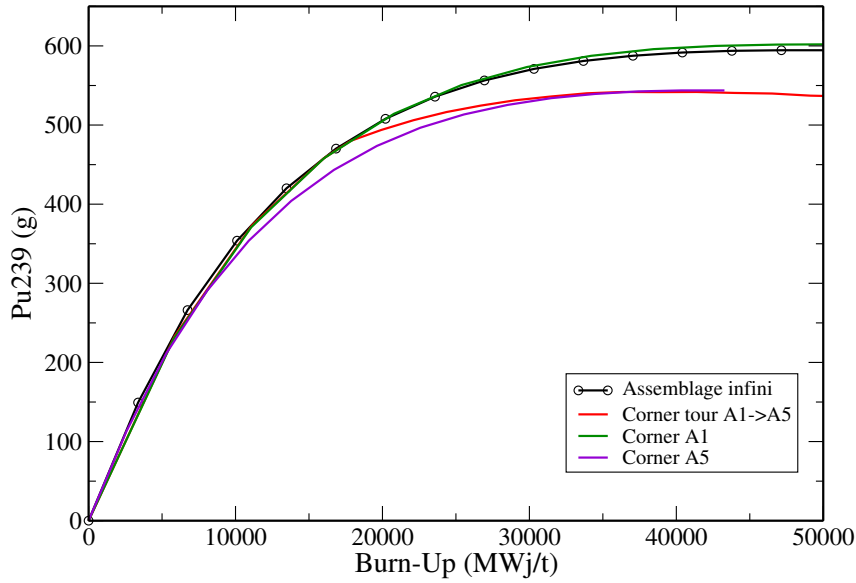


FIGURE 5.18 – Évolution du ^{239}Pu en fonction du Burn-Up local pour l'assemblage infini, les assemblages 1, 5 et l'assemblage déplacé de 1 à 5

5.5.3 Conclusions sur la simulation des rechargements

Grâce à l'analyse effectuée dans les paragraphes précédents, nous discernons deux comportements selon l'ordre de déplacement des assemblages : les assemblages périphériques qui sont déplacés vers une zone asymptotique et les assemblages asymptotiques qui sont déplacés vers la zone périphérique.

Les assemblages qui commencent leur évolution à la périphérie subissent un biais que le déplacement vers la zone asymptotique ne parvient pas à rattraper complètement. Les biais estimés de l'assemblage déplacé sont intermédiaires entre les biais des assemblages asymptotiques et les biais des assemblages périphériques. Cependant, si le déplacement n'était pas modélisé, il faudrait assimiler l'assemblage d'étude à celui qui est dans sa position finale afin de réduire les écarts sur le ^{239}Pu .

Au contraire, la modélisation d'un déplacement d'une position interne (1) à une périphérique (5) est très proche de celle d'un assemblage en position externe. Les inventaires en fin de cycle de l'assemblage déplacé sont proches des inventaires de l'assemblage 5. L'effet de spectre sur les assemblages en position périphérique est très fort, tel que l'évolution isotopique de l'assemblage déplacé en position 5 ne dépend plus vraiment de l'histoire

de l'assemblage avant le changement de position. Dans ce cas, seule la position finale de l'assemblage compte.

Ainsi si les assemblages d'un réacteur REP effectuent leur dernier cycle d'irradiation à la périphérie, nous pouvons modéliser, sans apporter de biais conséquents, ces assemblages comme étant fixes à l'interface. Malheureusement, comme vu dans l'introduction du chapitre 4, les assemblages périphériques peuvent être des assemblages neufs qui subiront leur dernier cycle d'irradiation dans une position plus centrale. Cette astuce de rechargement, qui permet d'aplatir la nappe de flux radialement, complexifie la modélisation puisque nous devons modéliser ce déplacement afin de ne pas introduire un biais trop élevé pour le ^{239}Pu .

5.6 Conclusions et bilan

Ce chapitre est dédié à l'analyse et à la compréhension de la physique de l'irradiation des assemblages qui se trouvent sur les bords du cœur en contact de l'eau modératrice. Ces assemblages périphériques se trouvent dans des conditions particulières et assez différentes par rapport aux assemblages situés dans la partie interne du cœur. Puisque l'assemblage infini est censé représenter tous les assemblages du cœur, nous avons comparé l'évolution isotopique d'un assemblage périphérique avec celle de référence afin d'estimer l'erreur apportée par une simulation infinie.

La géométrie dont nous nous sommes servis pour cette analyse, représentée dans la figure 5.1, est constituée de 6 assemblages : 3 définis internes et 3 en position périphérique. Dans § 5.3, une analyse préliminaire des spectres neutroniques et des sections efficaces en début d'irradiation pour chaque assemblage est réalisée. Les assemblages périphériques montrent un spectre plus thermique que celui de l'assemblage infini : l'effet de thermalisation de l'eau, même si concentré dans les derniers crayons aux bords (comme vu dans la figure 5.3), impacte la section efficace moyenne de fission de l' ^{235}U de l'assemblage entier, fortement plus élevée que celle infinie (voir la figure 5.4). Au contraire, le spectre neutronique des assemblages internes est plus dur que celui de l'assemblage infini, engendrant des sections efficaces de fission plus faibles. La raison est liée à l'effet de taille décrit dans § 3.5.2 du chapitre 3, applicable aussi à une configuration modérée § 5.3.1.

L'analyse en évolution se divise en deux parties : l'analyse de la configuration avec un seul assemblage évoluant à la fois § 5.4.1 et l'analyse de la configuration où tous les assemblages évoluent § 5.4.2.

Les écarts des inventaires normalisés au même Burn-Up par assemblage de l' ^{235}U et du ^{239}Pu pour la configuration avec évolution du seul assemblage 5 (périphérique) sont très élevés (tableau 5.3), de l'ordre du 10% pour les deux isotopes en fin d'irradiation. Par contre, l'évolution isotopique de l'assemblage interne 1 est similaire à celle infinie, avec des écarts de 1% environ, induits par l'effet de taille sur le spectre neutronique.

Les évolutions des assemblages dans la configuration entièrement évolutive montrent toujours deux groupes d'assemblages distincts : le groupe interne, avec des écarts par rapport à la configuration de référence plus faibles que 1%, et le groupe d'assemblages périphériques, dans lequel l' ^{235}U est sur-consommé d'environ 2% et le ^{239}Pu est sous-

produit de 7% par rapport à l'assemblage infini (figure 5.9).

En ce qui concerne les évolutions de la configuration corner avec des assemblages de Burn-Up différents, nous avons remarqué que l'effet de thermalisation sur les assemblages périphériques est beaucoup plus important que l'effet de l'environnement. Pour ce faire, nous avons étudié l'assemblage 5 avec des assemblages voisins à 15 ou à 30 GWj/t .

Afin de vérifier si la prise en compte du rechargement réduit les écarts des assemblages périphériques, nous avons réalisé deux simulations avec déplacement de l'extérieur à l'intérieur et vice-versa. Le changement de position de la numéro 5 à la numéro 1 § 5.5.1 montre une diminution significative des écarts par rapport à l'assemblage infini, plus proches à ceux de l'assemblage 1 mais pour autant non négligeables (tableau 5.4). Le déplacement dans l'autre sens amène au contraire à des écarts très importants (tableau 5.5) : l'évolution de l'assemblage déplacé en position périphérique est fortement similaire à celle de l'assemblage en position 5. Dans ce dernier cas, seule la dernière partie de l'irradiation semble importante pour l'estimation des quantités isotopiques en fin d'irradiation.

Généralement, les assemblages en périphérie sont des assemblages neufs ou du dernier cycle d'irradiation. L'évolution infinie ne correspond donc pas exactement à celle des assemblages neufs qui se trouvent initialement aux bords et ensuite sont déplacés vers le centre du cœur (rechargement de 5 vers 1). En ce qui concerne les assemblages avec un Burn-Up plus élevé placés en périphérie pour le dernier cycle d'irradiation, à cause du fort effet de spectre impactant les assemblages aux bords, ils montreront dans la dernière partie de l'irradiation des évolutions différentes par rapport à celle infinie.

Synthèse des assemblages périphériques

Effet de spectre (BOC)

assemblage	$\Delta\sigma_{fiss}^{235U}\%$
interne	-2.2
périphérique	5.0

- effet de taille pour les assemblages internes
- forte modération sur les assemblages périphériques

Biais sur les inventaires (EOC)

→ Environnement fixe :

40 GWj/t	$\Delta_{\infty}\%$	
isotope	A1	A5
^{235}U	-1.2	-9.0
^{239}Pu	-1.9	-13.1

Repartition des assemblages

A1	A2	A3
A4	A5	
A6		

→ Environnement évoluant :

40 GWj/t	$\Delta_{\infty}\%$	
isotope	A1	A5
^{235}U	<1	-2.5
^{239}Pu	<1	-7.0

- assemblages internes comme infini
- écarts significatifs assemblages périphériques

→ Assemblage frais 1^{er} tour de périphérie à l'intérieur :

40 GWj/t	
isotope	$\Delta_{\infty}\%$
^{235}U	-2.5
^{239}Pu	-1.2

- écarts réduits avec modélisation rechargement

→ Assemblage usé de l'intérieur à la périphérie :

40 GWj/t	
isotope	$\Delta_{\infty}\%$
^{235}U	-4.75
^{239}Pu	-8.40

- pas de mémoire de l'irradiation précédente
- à modéliser comme assemblages périphériques

Application à une simulation cœur

Sommaire

6.1	Introduction	185
6.2	Construction de la géométrie	186
6.2.1	Difficultés de simulation	186
6.2.2	Description de la géométrie	187
6.3	Simulation à 1 batch	187
6.3.1	Étude en début de cycle	188
6.3.2	Analyse en évolution	189
6.3.2.1	Inventaire isotopique de l' ^{235}U	189
6.3.2.2	Inventaire isotopique du ^{239}Pu	190
6.3.3	Reconstruction des inventaires	191
6.4	Simulation à 4 batches	193
6.4.1	Description du plan de chargement	193
6.4.2	Évolution des sections efficaces de fission entre deux rechargements	193
6.4.3	Reconstruction des inventaires	194
6.5	Conclusions	195

6.1 Introduction

Ce chapitre présente les résultats d'une application pratique des observations réalisées au cours des chapitres précédents. Une fois les effets des fuites, axiales et radiales, et du voisinage identifiés, nous vérifions leur validité dans une configuration plus réaliste : la simulation d'un petit cœur de type REP que nous avons conçu pour les besoins de ce chapitre. Le réacteur simulé ici ne prétend pas être un réacteur industriel, mais sa géométrie semble suffisamment représentative pour vérifier les raisonnements réalisés dans ce manuscrit.

La description de la géométrie simulée est donnée dans § 6.2, où nous présentons aussi les difficultés de simulation rencontrées dans la phase de conceptualisation de ce réacteur.

Deux types de configurations ont été simulés : un cœur à 1 batch (1 seul rechargement), dans lequel tous les assemblages de combustible sont frais en début d'irradiation, et un cœur à 4 batches, pour lequel nous avons choisi un plan de chargement que nous ne prétendons pas représenter de manière précise un plan de chargement réaliste. De plus, aucun moyen

de contrôle est simulé : les barres de contrôles sont gardées complètement insérées pendant toute l'évolution, comme au cours des simulations assemblages présentées dans les chapitres précédents. Les résultats des simulations, comparés à l'assemblage infini mais aussi aux différents types d'assemblages détectés dans les chapitres précédents, sont présentés dans les paragraphes 6.3 et 6.4 respectivement.

6.2 Construction de la géométrie

Comme nous l'avons expliqué dans le chapitre 1, réaliser une simulation cœur complète avec un code stochastique comme MCNP n'est pas une opération simple. Compte tenu du temps à notre disposition et selon les finalités de ce travail, nous ne nous sommes pas lancés dans la réalisation d'une simulation de ce type.

Nous avons choisi de construire un quart de cœur, avec des conditions aux limites qui permettent de représenter la totalité du cœur.

Dans la suite, les difficultés associées à la simulation d'une grande géométrie § 6.2.1 et la description de notre configuration finale choisie § 6.2.2 sont présentées.

6.2.1 Difficultés de simulation

Afin de vérifier les résultats tirés des chapitres précédents, nous souhaitons avoir une géométrie avec certaines caractéristiques. Tout d'abord, puisque la discrétisation axiale joue un rôle important dans la quantification des effets des fuites axiales, une discrétisation sur l'axe z a été notre premier objectif. Puis, pour simuler l'effet du voisinage, il suffisait de considérer l'évolution de chaque assemblage séparément. Enfin, pour avoir une vision sur l'impact du rechargement, nous avons choisi de simuler aussi une configuration d'assemblages mélangés et à différents niveaux d'irradiation, censé représenter les effets d'un rechargement. Les compositions ont été tirées de l'évolution d'un assemblage infini.

La première difficulté rencontrée concerne la discrétisation axiale de la géométrie. Nous avons essayé de couper les assemblages selon l'axe z en plusieurs zones axiales non uniformes : 5 zones de 1 cm aux extrémités axiales, représentant les zones les plus impactées par l'interface § 3.5.1, et 1 zone asymptotique de 1 m au centre. Entre les deux, nous avons considéré une zone de transition de 10 cm.

Malheureusement, nous n'avons pas pu appliquer cette discrétisation, à cause du nombre limité de cellules évoluant possible dans SMURE. En considérant que cette division axiale était appliquée sur 28 assemblages différents, le nombre de cellule à définir était trop élevé. Nous avons donc choisi de ne pas considérer la discrétisation axiale.

Pour éviter des problèmes trop pénalisants issus de la convergence des sources, nous avons choisi une configuration relativement petite, de 1.26 m d'extension maximale dans chacune des deux directions sur le plan radial.

6.2.2 Description de la géométrie

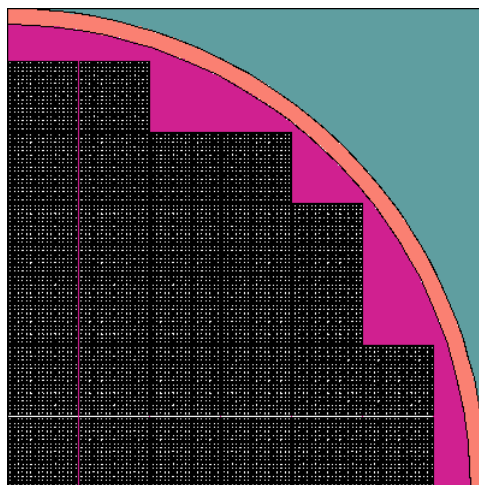


FIGURE 6.1 – Représentation de la géométrie du quart de cœur simulée

La géométrie simulée est constituée de 28 assemblages, disposés comme dans la figure 6.1, entourés par de l'eau modératrice et par un réflecteur radial. Les caractéristiques des assemblages sont les mêmes que celles utilisées pendant nos analyses précédentes (tableau 3.1, application de la lame d'eau).

Cette configuration n'est pas celle habituelle d'un quart de cœur de REP parce que cette géométrie n'est pas centrée sur un assemblage. Cependant, elle nous a permis de réaliser les comparaisons d'évolution avec les chapitres précédents.

La composition des assemblages dépend de l'option choisie. La première, appelée « 1 batch » présente des assemblages tous frais (UOx enrichis à 3.5%), alors que dans la deuxième, nommée « 4 batches », les assemblages ont de compositions différentes pour simuler un plan de chargement.

6.3 Simulation à 1 batch

Cette configuration est caractérisée par un pavage uniforme d'assemblages frais en début d'irradiation, chacun représentant une cellule évoluant. Cette première simulation nous permet d'identifier les effets de spectre que nous avons observés au cours des chapitres précédents afin d'évaluer si ces effets sont comparables avec ceux issus d'une simulation réaliste.

Nous avons réalisé une évolution de cette configuration sur une durée globale de 4 ans. Les assemblages atteignent des Burn-Up différents en fin d'irradiation.

À l'image des chapitres 4 et 5, nous présentons dans la suite une analyse en début d'irradiation § 6.3.1 et une analyse de l'évolution § 6.3.2.

6.3.1 Étude en début de cycle

Afin de quantifier les effets de spectre dans chacun des assemblages de la géométrie, nous avons calculé les sections efficaces de fission de l' ^{235}U et nous les avons comparées à celle de l'assemblage infini de référence. La comparaison est reportée dans la figure 6.2, où nous avons représenté les valeurs de $\sigma_{fiss}^{235\text{U}}$ ainsi que les écarts relatifs (en gras) par rapport à la référence.

Globalement, nous observons dans la figure trois types d'assemblages distincts : les assemblages périphériques avec 2 faces en contact de l'eau (en bleu), les assemblages périphériques avec 1 seule face en contact avec l'eau (en violet) et les assemblages internes (en vert). Les deux premiers types sont indiqués dans la suite comme assemblages « périphériques 2-faces » ou « périphériques 1-face ».

47.49 2.10%	49.43 6.25%				
46.11 -0.89%	46.17 -0.76%	47.60 2.31%	49.14 5.63%		
46.12 -0.86%	46.08 -0.94%	46.13 -0.83%	46.16 -0.77%	49.26 5.90%	
46.14 -0.82%	46.11 -0.88%	46.10 -0.90%	46.14 -0.81%	47.66 2.45%	
46.13 -0.84%	46.15 -0.79%	46.12 -0.85%	46.10 -0.90%	46.11 -0.87%	49.41 6.22%
46.10 -0.90%	46.15 -0.79%	46.13 -0.83%	46.10 -0.91%	46.09 -0.92%	47.38 1.84%

FIGURE 6.2 – Sections efficaces de fission de l' ^{235}U et écarts relatifs par rapport à l'assemblage infini (en gras) en début d'irradiation

Pour les premiers, les écarts des sections efficaces sont très importants, montrant un effet de thermalisation fort, comme déjà vu dans le chapitre 5 dans § 5.3.2. La valeur des écarts est du même ordre de grandeur que les écarts estimés pour les assemblages périphériques en début d'irradiation de la configuration corner (figure 5.4). Les assemblages périphériques avec une seule face de contact avec l'eau montrent des écarts plus faibles comparés aux assemblages proprement périphériques, mais toujours significatifs.

Les assemblages internes ne présentent pas des sections efficaces rigoureusement identiques à celle de la configuration infinie : des écarts non nuls (même si inférieurs à 1%) sont présents. Cette petite différence de spectre est imputable à l'effet de taille expliqué dans le chapitre 3 et vu au cours de l'étude de la configuration corner § 5.3.2.1. Étant donné que la géométrie simulée est plus grande que celle du corner, l'augmentation de la section

efficace par rapport à celle infinie est moins prononcée. Nous avons marqué en vert foncé un certain nombre d'assemblages internes. Ces assemblages ne montrent pas une différence significative par rapport aux autres assemblages internes en début d'irradiation, mais ils présenteront des effets particuliers pendant l'évolution que nous analysons dans § 6.3.2.

6.3.2 Analyse en évolution

Dans ce paragraphe, nous présentons les résultats de l'évolution de la configuration cœur 1 batch sur les inventaires isotopiques analysés. Dans ce manuscrit, nous reportons seulement les écarts des inventaires des isotopes fissiles principaux, ^{235}U et ^{239}Pu . Les écarts des inventaires sont estimés au Burn-Up local de chaque assemblage à 40 GWj/t .

6.3.2.1 Inventaire isotopique de l' ^{235}U

La figure 6.3 reporte les écarts des inventaires de l' ^{235}U par rapport à la configuration infinie en fin d'irradiation. Tout d'abord, notons que, à cause de l'incertitude statistique, la symétrie diagonale n'est pas respectée. Cependant, les différences entre les écarts des assemblages périphériques et des assemblages internes sont assez élevées pour distinguer de manière propre les comportements caractéristiques des différents types d'assemblages.

-2.43%	-6.33%				
0.53%	0.72%	-3.19%	-5.94%		
-0.37%	-0.10%	0.04%	0.00%	-6.01%	
-1.20%	-1.10%	-0.42%	0.08%	-2.80%	
-1.40%	-1.59%	-0.93%	-0.05%	0.56%	-6.46%
-2.11%	-1.70%	-1.23%	-0.35%	-0.44%	-2.40%

FIGURE 6.3 – Écarts relatifs des inventaires de l' ^{235}U par rapport à la configuration infinie à 40 GWj/t de la configuration cœur à 1 batch

Les écarts des inventaires de l' ^{235}U pour les assemblages périphériques, en bleu dans la figure 6.3, sont significatifs et supérieurs à 5%. L'ordre de grandeur est exactement celui des écarts isotopiques calculés pour la configuration corner (à 30 GWj/t , les écarts de la

configuration cœur sont de 3% environ, comparables avec ceux reportés dans la figure 5.9).

Les écarts des inventaires pour les assemblages périphériques 1-face présentent des valeurs intermédiaires entre les écarts très importants des assemblages périphériques 2-faces et ceux des assemblages internes, mais ils restent toujours significatifs.

Les assemblages internes, en vert clair, montrent des écarts par rapport à la configuration infinie inférieurs à 1%, alors que d'autres, en vert foncé, peuvent présenter des écarts de plus de 2%. En particulier, les assemblages situés près du centre ont des écarts plus élevés que les autres. Cette différence peut s'expliquer par l'effet vu dans § 6.3.1 : un écart de presque 1% sur la section efficace de fission de l' ^{235}U en début de cycle peut engendrer des écarts de cet ordre de grandeur pour l'isotope considéré en fin d'irradiation.

Tous les assemblages en vert clair montrent, contrairement aux autres assemblages internes, des écarts presque négligeables. Ce comportement est dû à un effet de Burn-Up des assemblages avoisinants : d'un côté, les assemblages internes montrent un effet de durcissement de spectre, de l'autre côté, les assemblages périphériques donnent un effet de thermalisation induit par l'évolution plus lente du combustible. La compensation entre ces deux effets, visible seulement au cours de l'évolution, explique le faible écart de la quantité d' ^{235}U dans ces assemblages internes. Le même écart initial de la section efficace de fission de l' ^{235}U abouti à des écarts sur les inventaires isotopiques différents à cause du voisinage des assemblages considérés.

6.3.2.2 Inventaire isotopique du ^{239}Pu

En ce qui concerne les inventaires du ^{239}Pu , les écarts suivent le même comportement que ceux calculés pour l' ^{235}U dans le paragraphe précédent.

-4.56%	-9.45%				
-0.90%	-0.73%	-5.36%	-9.10%		
-1.41%	-1.29%	-0.81%	-0.48%	-9.03%	
-1.55%	-1.45%	-1.45%	-0.91%	-5.49%	
-1.48%	-1.60%	-1.46%	-1.16%	-0.83%	-9.44%
-1.65%	-1.73%	-1.56%	-1.35%	-0.77%	-4.44%

FIGURE 6.4 – Écarts relatifs des inventaires du ^{239}Pu par rapport à la configuration infinie à 40 GWj/t de la configuration cœur à 1 batch

Des écarts très importants sont estimés pour les assemblages périphériques, de l'ordre de 9% et de 5% selon le nombre de côtés en contact avec l'eau. Pour les assemblages internes, des écarts de 1.5% sont reportés dans la figure 6.4 pour les assemblages en vert foncé, alors que ceux des assemblages en vert clair sont beaucoup moins significatifs. Nous pouvons donc définir ces assemblages comme des assemblages de transition, pour lesquels l'impact du voisinage est important pour une estimation des évolutions isotopiques correcte.

Nous ne reportons pas ici tous les écarts estimés pour l' ^{241}Am , mais nous donnons juste des valeurs représentatives des 3 types d'assemblages :

- assemblages périphériques 2-faces : -9.61%
- assemblages périphériques 1-face : -23%
- assemblages internes : -32.8%

Les valeurs des écarts estimés sont très élevées. Rappelons cependant que ces inventaires ne sont pas directement fonction du Burn-Up comme observé dans § 4.4.3.2. Des écarts si importants ne sont donc pas surprenants.

6.3.3 Reconstruction des inventaires

Comparons maintenant les inventaires isotopiques totaux du cœur par rapport à une évolution infinie. Afin d'estimer la validité du modèle assemblage face à une simulation réelle, nous avons comparé les inventaires isotopiques totaux du cœur au Burn-Up local de 40 GWj/t avec 28 fois les inventaires infinis.

Le tableau 6.1 reporte dans la première colonne des écarts relatifs importants pour les deux isotopes ^{235}U et ^{239}Pu entre la simulation de cœur et la modélisation infinie, de l'ordre de 2%.

$\Delta\%$	$\infty * 28$	$\infty * 24 + 4 * R_{15}$	$\infty * 20 + 8 * R_{15}$
^{235}U	-2.42	1.78	1.09
^{239}Pu	-2.99	1.84	0.06

TABLE 6.1 – Écarts des inventaires à 40 GWj/t de l' ^{235}U et du ^{239}Pu par rapport à la simulation cœur en considérant les Burn-Up locaux des assemblages, pour une modélisation infinie et pour une modélisation améliorée avec la prise en compte des assemblages périphériques

Afin de prendre en compte la différence d'évolution pour les assemblages périphériques, nous avons calculé l'inventaire total des isotopes en pondérant par le nombre d'assemblages à la périphérie. Nous avons donc calculé la quantité totale d' ^{235}U et de ^{239}Pu comme 4 fois la quantité isotopique à 40 GWj/t , issue du calcul de rechargement intérieur-périphérie du corner § 5.5.2, plus 24 fois la quantité isotopique infinie (deuxième colonne du tableau 6.2). Les derniers résultats du tableau se réfèrent à une modélisation qui considère 8 assemblages périphériques. Nous avons choisi les inventaires de la simulation corner avec rechargement $1 \rightarrow 5$ puisque les assemblages périphériques terminent leur dernier cycle d'irradiation à l'interface du cœur.

Nous observons que les écarts des inventaires isotopiques se réduisent grâce à une pon-

dération qui considère l'impact des assemblages en périphérie du cœur. La modélisation qui prend en compte 8 assemblages périphériques (comme celui de la configuration corner) pour représenter les assemblages 1-face et les 2-faces permet d'avoir des écarts inférieurs ou égaux à 1% pour les deux isotopes étudiés.

Cette procédure d'estimation des inventaires est cependant impossible puisqu'elle suppose de connaître le Burn-Up atteint par chacun des assemblages. Dans une évolution réelle, ces informations ne sont pas forcément connues et les inventaires sont plutôt estimés pour un Burn-Up moyen du cœur, plutôt que pour un Burn-Up local. Cependant, à un Burn-Up moyen de cœur de 40 GWj/t , les valeurs des taux de combustion locaux des assemblages diffèrent de cette valeur moyenne, comme montré dans la figure 6.5.

31 886	26 380				
45 745	42 226	35 313	26 036		
49 579	48 694	46 452	40 356	26 037	
49 873	49 858	49 400	46 489	35 360	
49 558	49 720	49 867	48 696	42 253	26 378
49 306	49 537	49 913	49 587	45 728	31 833

FIGURE 6.5 – Valeurs des Burn-Up locaux rejoins par chacun des assemblages de la configuration cœur à 1 batch

Une fois encore, nous pouvons voir la séparation entre les trois types d'assemblages, ceux périphériques 1 et 2-faces et ceux à l'intérieur. En particulier, la distinction entre les assemblages internes et ceux de transition est bien marquée : ces derniers rejoignent un Burn-Up inférieur par rapport aux assemblages internes.

Si nous réalisons la même comparaison en prenant les inventaires totaux au Burn-Up moyen de 40 GWj/t comme référence, nous obtenons des résultats très différents. Le tableau 6.1 montre des écarts vraiment importants, de l'ordre de 10 et de presque 4% pour l' ^{235}U et le ^{239}Pu respectivement. Avec la modélisation des assemblages périphériques, les écarts se réduisent, mais ils restent encore significatifs. Pour le ^{239}Pu , la situation est particulière puisque les écarts du tableau 6.2 et ceux du tableau 6.1 semblent proches. Cet isotope a déjà presque rejoint l'équilibre à 40 GWj/t : sa quantité isotopique est peu sensible au Burn-Up de l'assemblage. La connaissance des Burn-Up locaux des assemblages est donc nécessaire pour estimer correctement les inventaires isotopiques du fissile ^{235}U .

$\Delta\%$	$\infty * 28$	$\infty * 24 + 4 * R_{15}$	$\infty * 20 + 8 * R_{15}$
^{235}U	-10.48	-8.82	-7.17
^{239}Pu	3.85	2.57	1.28

TABLE 6.2 – Écarts des inventaires à 40 GWj/t de l' ^{235}U et du ^{239}Pu par rapport à la simulation cœur pour une modélisation infinie et pour une modélisation améliorée avec la prise en compte des assemblages périphériques

6.4 Simulation à 4 batches

6.4.1 Description du plan de chargement

Le deuxième type de simulation cœur que nous avons réalisé représente la même géométrie que celle décrite dans § 6.2.2, mais avec des assemblages de compositions différentes. Nous avons choisi de représenter un rechargement par quarts, illustré dans la figure 6.6.

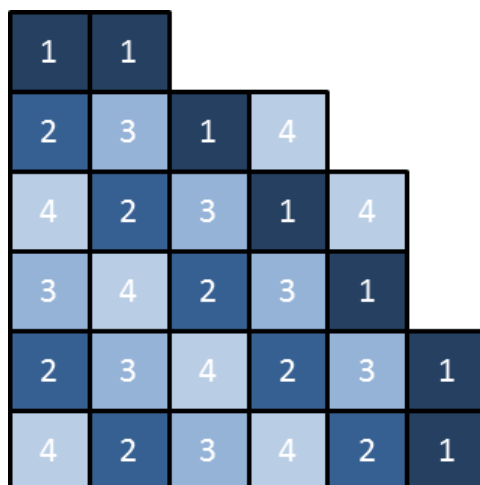


FIGURE 6.6 – Représentation du plan de chargement de la simulation à 4 batches

La disposition des assemblages a été choisie afin de chercher à aplatir la nappe de flux. Des assemblages au dernier cycle ont été placés au bout de la diagonale pour protéger la cuve. Les compositions de ces assemblages du deuxième, troisième et dernier tour sont issues d'une évolution infinie, à 10, 20 et 30 GWj/t respectivement. Là encore, ce plan de chargement peut sembler peu réaliste mais l'idée de cette analyse est d'étudier les effets du rechargement et du cross-talking inter-assemblages comme dans le chapitre 4.

6.4.2 Évolution des sections efficaces de fission entre deux rechargements

Nous avons réalisé la simulation de l'évolution isotopique du quart de cœur pour un cycle de rechargement, qui dure 10 GWj/t. La figure 6.7 montre les valeurs des sections

efficaces de fission de l' ^{235}U au Burn-Up global de 10 GWj/t , ainsi que les écarts relatifs par rapport à une évolution infinie entre les mêmes Burn-Up.

Les assemblages du dernier cycle qui se trouvent à la périphérie du cœur subissent un effet de thermalisation du spectre significatif, donnant des écarts supérieurs à 10% par rapport à la configuration infinie après un cycle d'irradiation. Cependant, l'origine principale des erreurs est la mauvaise estimation des Burn-Up, puisque l'irradiation des assemblages périphérique induit des taux de combustion inférieurs à 10 GWj/t . En effet, comme montré dans la figure 6.5, le Burn-Up de ces assemblages en fin d'irradiation est beaucoup plus faible que le Burn-Up moyen du cœur.

45.29 -2.58%	47.09 1.29%				
40.99 -1.57%	41.50 1.11%	45.38 -2.39%	46.18 11.38%		
42.43 2.34%	40.85 -1.92%	41.44 0.98%	43.61 5.19%	46.20 11.44%	
41.19 0.38%	42.40 2.29%	40.84 -1.92%	41.45 1.01%	45.43 -2.28%	
40.71 -2.23%	41.21 0.42%	42.43 2.35%	40.84 -1.94%	41.51 1.15%	47.06 1.23%
42.50 2.51%	40.81 -2.01%	41.26 0.53%	42.46 2.41%	40.96 -1.63%	45.38 -2.39%

FIGURE 6.7 – Valeurs et écarts relatifs des sections efficaces de l' ^{235}U après 10 GWj/t d'irradiation des assemblages de la simulation cœur à 4 batches

6.4.3 Reconstruction des inventaires

Pour preuve additionnelle, nous essayons de reconstruire les inventaires isotopiques du ^{239}Pu des assemblages qui vont être déchargés à la fin de leur dernier cycle d'irradiation. Comme dans § 6.3.3, nous comparons la somme des inventaires isotopiques des assemblages du dernier tour (ceux qui ne reviendront pas dans le cœur au cycle suivant) à la somme de 7 assemblages infinis après une irradiation moyenne de 10 GWj/t .

L'écart obtenu, montré dans le tableau 6.3, est assez élevé. Par contre, si nous prenons en compte les 2 assemblages qui ont subi une irradiation en position périphérique, nous nous rapprochons de la solution obtenue par la simulation du cœur.

Mais cette comparaison n'est pertinente uniquement pour le ^{239}Pu : même si il est estimé à des Burn-Up qui ne correspondent pas aux Burn-Up locaux réels, les différences ne sont

pas très significatives, puisqu'il est à l'équilibre. Par contre, pour l' ^{235}U , une estimation correcte des Burn-Up locaux est nécessaire pour quantifier les inventaires à la décharge du combustible.

$\Delta\%$	$\infty * 7$	$\infty * 5 + 2 * R_{15}$
^{239}Pu	2.91	-0.8

TABLE 6.3 – Écarts des inventaires du ^{239}Pu des assemblages à la décharge après 10 GWj/t d'irradiation pour une modélisation infinie et pour une modélisation améliorée avec la prise en compte des 2 assemblages périphériques par rapport à la simulation cœur

6.5 Conclusions

Dans ce chapitre, nous avons réalisé une simulation représentative d'un cœur du réacteur, afin de vérifier si les effets observés dans les chapitres 3, 4 et 5 sont applicables à une simulation réaliste. Malheureusement, une discrétisation axiale n'a pas pu être adoptée mais nous avons vérifié les effets du voisinage, de rechargement et des fuites radiales.

Comme attendu, l'analyse des sections efficaces de l' ^{235}U en début d'irradiation montre des écarts significatifs pour les assemblages périphériques par rapport à une configuration infinie § 6.3.1. Deux autres types d'assemblages sont discernés : les assemblages qui ont un côté en contact avec l'eau environnante et les assemblages internes. Ces derniers ont des valeurs de sections efficaces légèrement différentes de celle infinie, montrant que l'effet de taille présenté dans le chapitre 3 est encore valable pour une configuration de cette dimension.

Nous avons réalisé deux simulations de cette configuration de cœur : une simulation à 1 batch, où tous les assemblages sont des UOx frais enrichis à 3.5%, et une simulation à 4 batches, dans laquelle nous avons essayé de représenter l'évolution d'un cœur avec plan de chargement.

La première simulation montre des écarts, au Burn-Up local de 40 GWj/t , comparables avec ceux précédemment quantifiés pendant l'étude du chapitre 5. Une reconstruction des inventaires totaux du cœur à partir d'une configuration infinie amène à des écarts entre 2 et 3% pour l' ^{235}U et le ^{239}Pu en fin d'irradiation § 6.3.3. Si nous faisons une pondération pour le nombre d'assemblages périphériques, l'estimation des inventaires totaux est clairement meilleure (écarts inférieurs à 1% pour les deux isotopes).

Cependant, il faut renormaliser les inventaires isotopiques des assemblages au Burn-Up local. La non prise en compte de l'évolution différente des taux de combustion entre les assemblages périphériques et les assemblages internes engendre des biais importants si nous voulons représenter le cœur entier. Dans ce cas, même une pondération considérant les assemblages à la périphérie donne des écarts significatifs.

Une simulation plus réaliste d'un cœur avec un plan de rechargement nous montre que pour les isotopes à l'équilibre, comme le ^{239}Pu , l'estimation des inventaires selon un Burn-

Up moyen est acceptable, suite à pondération comme dans § 6.4.3. Par contre, la quantité d' ^{235}U ne peut pas être estimée de cette manière si l'on veut des erreurs inférieures à 7%.

Synthèse de la simulation cœur

Effet de spectre (BOC)

assemblage	$\Delta\sigma_{fiss}^{235U}$
interne	< 1%
périphérique 1 face	~ 2 %
périphérique 2 faces	~ 6%

- écarts négligeables pour les assemblages internes

Biais sur les inventaires (EOC)

→ Simulation 1 batch :

40 GWj/t		
assemblage	$\Delta^{235U}\%$	$\Delta^{239Pu}\%$
interne	< 1	0.5-1.5
périph. 1 face	~ -3	~ -5
périph. 2 faces	~ -6	~ -9

- modélisation assemblages périphériques nécessaire
- reconstruction inventaires si connaissance Burn-Up

→ Écarts entre la simulation du cœur et des reconstructions :

40 GWj/t			
1 batch	$\Delta^{239Pu}\%$	4 batches	$\Delta^{239Pu}\%$
reconstruction infinie	3.85	reconstruction infinie	2.91
reconstruction pondérée	1.28	reconstruction pondérée	-0.8

Conclusion

Dans le contexte actuel, caractérisé par la recherche continue de solutions énergétiques réalistes et capables de faire face au changement climatique, la simulation des réacteurs nucléaires est un enjeu majeur pour étudier la faisabilité des stratégies du futur. Face au problème des émissions de gaz à effet de serre, plusieurs mix énergétiques, mondiaux ou français, ont été proposés. La place du nucléaire dans ces différentes visions du futur énergétique n'est pas univoquement interprétée, ce qui laisse le futur du nucléaire face à une incertitude forte.

Les scénarios nucléaires, capables d'étudier plusieurs stratégies incluant tous types de réacteurs, sont un sujet de recherche d'actualité au CNRS/IN2P3. Le code CLASS, développé en collaboration entre plusieurs laboratoires, simule les flux de matières isotopiques entre les installations du parc électro-nucléaire sur une échelle de temps typiquement d'une centaine d'années, permettant ainsi d'évaluer les impacts à long terme. Les installations principales du parc, les réacteurs nucléaires, sont simulés dans CLASS grâce à des méta-modèles basés sur des évolutions numériques stochastiques représentatives du réacteur choisi. Puisque la simulation de l'évolution isotopique d'un cœur entier n'est pas réalisable aujourd'hui avec des codes ni déterministes ni stochastiques, les modèles utilisés dans les études de scénarios se basent sur des simulations d'un modèle simplifié : un seul assemblage isolé.

La réalisation de la simulation d'un réacteur nucléaire passe pourtant, au niveau industriel, à travers un schéma à deux étapes : un calcul cellule (un assemblage ou une portions d'assemblages) et un calcul cœur. La première étape est la résolution de l'équation du transport de neutrons et l'évolution des matières isotopiques d'un assemblage isolé, en conditions infinies. Pour résoudre les équations de la diffusion sur le cœur entier, des grandeurs neutroniques sont calculées à chaque pas de temps lors du calcul précédent. La deuxième étape, réalisée à l'aide d'un code déterministe, permet d'estimer le temps total d'irradiation du combustible en cœur, grandeur définie Burn-Up maximum atteignable. Une fois le temps de décharge du combustible usé connu, les quantités isotopiques d'intérêt sont estimées en fin d'irradiation à partir du calcul cellule de l'étape précédente.

Comme ce calcul cellule est à la base des grandeurs d'entrée du calcul de cœur, il doit être le plus représentatif possible d'un assemblage situé dans le réacteur. En effet, l'évolution de la matière isotopique dans l'assemblage du calcul cellule devrait être, autant que possible, similaire à celle d'un assemblage soumis à des conditions d'irradiation réelles, pour que la simulation à deux niveaux soit suffisamment prédictive. Dans le cas contraire, des biais sont engendrés sur la quantification de la matière au temps final de l'irradiation. C'est, entre autres, pour cette raison que des modèles de fuites neutroniques ont été développés et implémentés dans les codes de simulation, pour représenter l'effet de spectre dû aux fuites de neutrons sur un assemblage infini.

Cette problématique est abordée dans le chapitre 1, dans lequel le schéma à deux niveaux, ainsi que le calcul des grandeurs de diffusion sont décrits plus en détail.

Le chapitre 2 débute avec la perspective de réaliser la simulation du cœur en deux

étapes avec l'utilisation pour le calcul cellule des codes stochastiques au lieu des déterministes habituellement choisis. Le problème, presque insurmontable pour le moment, de la détermination des coefficients de diffusion à partir d'une simulation stochastique empêche le développement de ce couplage comme procédure de routine. Dans ce travail de thèse, nous avons donc choisi de nous focaliser sur le calcul cellule à la base des études de scénarios du CNRS/IN2P3 et d'étudier les biais causés par les approximations de ce modèle infini. Une vue d'ensemble des facteurs qui sont négligés (ou mal représentés) dans le modèle assemblage est donnée dans la deuxième partie du chapitre 2, qui termine par la description de la méthode de simulation adoptée. Pour les simulations d'évolution nous avons utilisé le code stochastique SMURE qui peut appeler le code MCNP ou SERPENT au choix de l'utilisateur.

La première approximation que nous avons étudiée dans le chapitre 3 est celle des fuites neutroniques axiales. Un nombre consistant de simulations d'un assemblage en conditions infinies et d'un assemblage ouvert axialement a été réalisé, afin de quantifier les écarts en fin de cycle des inventaires isotopiques moyennés. Les deux configurations représentent un assemblage de taille réelle, coupé en 18 zones axiales de 20.32 cm chacune. La comparaison entre la simulation infinie de référence et celle de l'assemblage ouvert montre des écarts importants sur les inventaires totaux d' ^{235}U (5%), des isotopes 240 et 241 du plutonium (2% environ) et des actinides mineurs analysés (entre 5 et 15%).

Ces écarts, beaucoup plus importants que l'incertitude statistique des simulations, peuvent être expliqués par le profil axial non uniforme du flux neutronique qui engendre des taux de combustion locaux différents pour chaque zone axiale. Nous avons donc réalisé une comparaison des inventaires isotopiques zone par zone avec une normalisation au Burn-Up local. Des comportements presque identiques ont été identifiés pour les quantités isotopiques des deux configurations dans les zones centrales des assemblages : aucun effet de spectre n'est présent et les évolutions isotopiques du centre de la configuration ouverte sont exactement les mêmes que celles infinies. Par contre, dans les zones externes, les quantités isotopiques de l'assemblage ouvert montrent une différence significative par rapport à la simulation de référence.

Afin d'étudier cet effet de spectre neutronique, nous avons réalisé une analyse neutronique fine avec MCNP. Le spectre de neutrons observé dans ces zones extrêmes est beaucoup plus dur que dans les zones centrales, où il est pratiquement superposé au spectre infini. L'application de la théorie de la diffusion nous permet de reconstruire le spectre neutronique de la configuration ouverte près des bords axiaux, mais seulement si deux longueurs d'extrapolation différentes pour les flux rapide et thermique sont prises en compte dans les conditions aux limites. Nous observons donc un effet de spectre localisé dans les derniers centimètres de l'assemblage.

Une simulation finement discrétisée d'un assemblage de 40 cm ouvert d'un des deux côtés axiaux et réfléchi de l'autre montre que la grandeur caractéristique de la simulation est un paramètre important. Nous avons nommé cet impact l'effet de taille. En effet, la valeur du rapport des flux rapide et thermique, grandeur utilisée pour étudier le spectre de neutrons, est impactée par la taille de la géométrie simulée. Enfin, nous avons comparé les résultats de notre simulation MCNP avec une simulation SERPENT utilisant les modèles

de fuites qui y sont implémentés. Il semble que les modèles de fuites développés dans SERPENT estiment bien l'effet des fuites si et seulement si l'assemblage simulé se trouve dans des conditions très proches de la criticité. Dans le cas opposé, la quantification de l'effet de spectre par ces modèles diffère significativement de la nôtre.

Une autre approximation du modèle assemblage concerne le voisinage : l'assemblage qui se trouve dans le cœur du réacteur est en réalité environné par d'autres assemblages de compositions différentes. Cette condition n'est pas du tout représentée dans la simulation d'un assemblage isolé comme pour le calcul cellule. Pour quantifier les biais dus à cette non prise en compte du voisinage, nous avons réalisé des évolutions d'un assemblage dans une configuration environnée. Les entourages considérés diffèrent de l'assemblage de référence par la valeur du Burn-Up.

La première partie du chapitre 4 est dédiée à l'étude de la modélisation de l'épaisseur d'eau inter-assemblages. Les écarts des inventaires des différentes configurations analysées sont du même ordre de grandeur indépendamment de la valeur du Burn-Up du voisinage. L'effet de spectre induit par l'ajout d'une lame d'eau autour de l'assemblage engendre un effet de flux qui amène à une production moins élevée de ^{239}Pu , non-anticipé, dans le cas avec lame d'eau.

La modélisation de l'environnement via des assemblages non évoluant dans le temps donne des écarts pour les inventaires isotopiques en fin de cycle acceptables si un effet de compensation se vérifie pendant l'évolution. En effet, si l'assemblage d'étude est entouré par des assemblages frais, l'effet de thermalisation de ces derniers est tellement fort que des écarts de l'ordre de 3% pour le ^{239}Pu sont observés en fin d'irradiation. Un environnement à Burn-Up moyen entre les valeurs de début et de fin d'irradiation de celui d'étude donne au contraire des écarts négligeables.

Puisque aucun effet de compensation n'est possible, la simulation d'un environnement évoluant donne des écarts assez significatifs comparée à une évolution infinie. Si un autre degré de complexité est rajouté par l'introduction du rechargement, nous observons que les simulations d'un assemblage entouré d'un environnement non évoluant à Burn-Up moyen ou entouré d'un environnement évoluant avec prise en compte du rechargement sont compatibles avec une évolution infinie. Cette dernière option est sûrement la plus souhaitable en termes de temps de calcul et de simplicité d'application.

Globalement, pour un assemblage UOx réaliser une simulation infinie au lieu de simuler l'environnement constitué d'autres assemblages UOx ne conduit pas à des biais très importants. Au contraire, pour un assemblage moxé, l'approximation de la non prise en compte du voisinage peut conduire à des biais importants en fin d'irradiation.

Une simulation infinie ne représente pas *a priori* un assemblage qui se trouve en périphérie du cœur. Cet assemblage, en contact avec l'eau qui entoure le cœur, subit un effet fort de thermalisation. Dans l'analyse approfondie du chapitre 5, les évolutions isotopiques des assemblages périphériques nous montrent des écarts significatifs même dans la configuration la plus réaliste où tous les assemblages évoluent (presque 3% pour l' ^{235}U et 7% pour le ^{239}Pu). La prise en compte du rechargement permet de réduire ces écarts, mais seulement si l'assemblage passe d'une position périphérique à une position plus interne.

Dans le cas contraire, l'effet de spectre est tellement fort qu'il conditionne entièrement la dernière partie de l'évolution que l'assemblage effectuée à la périphérie du cœur.

Afin de vérifier si les observations issues des chapitres précédents sont encore valables dans une simulation presque réelle, nous avons réalisé une simulation d'un quart de cœur hypothétique que nous présentons dans le chapitre 6. La comparaison des inventaires en fin d'irradiation d'une configuration chargée avec du combustible frais montre une équivalence avec les écarts quantifiés dans les chapitres précédents.

La simulation plus complexe du quart de cœur avec un plan de chargement donné nous montre qu'une simulation infinie seule ne permet pas de reproduire les évolutions isotopiques du cœur sans avoir des biais significatifs. Mais, suite à une pondération étudiée des inventaires considérant les effets précédemment étudiés, nous pouvons utiliser les résultats de l'évolution infinie pour avoir des écarts acceptables en fin d'irradiation. Cependant, cette dernière étude nous montre que cette opération de pondération par la prise en compte des effets de spectre n'est pas triviale.

En conclusion, nous avons estimé les écarts associés à l'approximation du modèle assemblage qui néglige les fuites neutroniques au sens large (fuite et cross-talking inter-assemblage). Des effets de spectre importants sont à considérer lorsqu'on représente un assemblage isolé comme un assemblage réel du cœur. Les écarts des inventaires isotopiques en fin de cycle peuvent être significatifs. À partir d'une simulation infinie, il est cependant possible d'obtenir des écarts un peu plus faibles en adoptant des schémas de calculs, qui considèrent des effets locaux du cœur très forts et qui sont négligés dans l'évolution infinie.

Le calcul cellule utilisé pour la simulation des réacteurs nucléaires à l'IN2P3 est donc limité en vue des nombreuses approximations à la base de l'équivalence cellule-cœur. Une étude détaillée des approximations permet au moins de quantifier les biais associés à une évolution infinie et peut-être d'améliorer ce modèle de référence. De nombreuses approximations au-delà des fuites neutroniques sont encore à explorer, comme le traitement des moyens de contrôle tel que l'acide borique, qui impacte fortement le spectre de neutrons.

Ce travail pourra être ensuite appliqué aussi aux études de scénarios pour la propagation des erreurs dans ces calculs qui utilisent le modèle cellule pour l'estimation des évolutions isotopiques du combustible des réacteurs nucléaires. Sur ce point, nous ne pouvons pas dire à priori si les écarts estimés lors de ce travail auront un impact significatif sur les grandeurs d'intérêt du scénario. Les effets de parc rendent difficile envisager de manière approximative la propagation des erreurs du calcul cellule sur les quantités isotopiques à estimer.

Nous pouvons cependant donner des exemples. Comme premier exemple, considérons le biais estimé sur la quantité d' ^{235}U en fin d'irradiation, évoqué dans le chapitre 3, d'environ 5%, qui implique une incertitude de près de 10% sur le Burn-Up maximum atteignable. Cet écart se répercute sur la quantité de noyaux fissiles à charger dans le cœur en début d'irradiation et, puisque cette dernière grandeur est directement liée à l'enrichissement initial en ^{235}U , le biais sur la consommation d'uranium naturel par unité d'électricité produite est par conséquent de près de 10%. Cet écart est comparable avec l'économie de 12% de consommation d'uranium naturel dû au choix stratégique d'utiliser des combustibles MOx :

cette valeur n'est pas négligeable pour les études de scénarios. Prenons l'écart de 1% sur la production du ^{239}Pu en fin d'irradiation des UOx comme deuxième exemple, qui peut induire, toujours dans une stratégie de REP UOx - REP MOx, une différence de près de 10% sur la quantité des assemblages MOx qui sont produits à partir des UOx usés.

La propagation des erreurs du calcul assemblage dans les études de scénario n'est pas une opération triviale et elle demande des efforts supplémentaires afin d'obtenir une vision complète de l'impact des simplifications de ce modèle sur les grandeurs d'intérêt du parc électronucléaire.

Bibliographie

- [Barjon 1993] BARJON, R.: *Physique des réacteurs nucléaires*. Institut des Sciences Nucléaires, 1993 – Cité en page 100.
- [Blomquist 2000] BLOMQUIST, R.N.: VIM Monte Carlo Neutron-Photon Transport Code User's Guide Version 4.0 , Argonne National Laboratory. 2000. – Technical Report – Cité en page 34.
- [Bodin 2010] BODIN, C.: *Analyse de l'impact de l'environnement dans un schéma de calcul à deux étapes avec Dragon et Donjon*, École Polytechnique de Montréal, Ph.D Thesis, 2010 – Cité en pages 29, 122, 158 et 216.
- [Bouneau et al. 2013] BOUNEAU, S. ; DAVID, S. ; LOISEAUX, J. ; MÉPLAN, O. ; TREINER, J.: Construction simplifiée d'un monde énergétique en 2050. in *Reflets de la physique* 36 (2013), Octobre, pages : 30–35 – Cité en page 5.
- [Briesmeister 1997] BRIESMEISTER, J.F.: *MCNP - A General Monte Carlo N-Particle Transport Code*. Los Alamos Lab report, 1997 (LA-12625-M) – Cité en page 19.
- [Brown 2006] BROWN, F.B.: On the Use of Shannon Entropy of the Fission Distribution for Assessing Convergence of Monte Carlo Criticality Calculations, Proceedings of PHY-SOR 2006 - ANS Topical Meeting on Reactor Physics, Septembre 2006 (Vancouver, BC, Canada) – Cité en page 50.
- [Calic et Trkov 2016] CALIC, D. ; TRKOV, A.: Use of Effective Diffusion Homogenization method with the Monte Carlo code for light water reactor. in *Annals of Nuclear Energy* 94 (2016), pages : 392–398 – Cité en page 37.
- [Cappelan 2009] CAPPELAN, N.: *Couplage 3D neutronique thermodynamique. Développement d'outils pour les études de sûreté des réacteurs innovants*, Université Paris Sud - Institut de Physique Nucléaire Orsay, Ph.D Thesis, 2009 – Cité en page 52.
- [Chang et al. 2009] CHANG, R.S. ; ROTH, P.A. ; LILLO, M.A.: ATR PDQ and MCWO fuel burnup analysis codes evaluation, Novembre 2009 (International Meeting on Reduced Enrichment For Research and TestReactors, Beijing, China) – Cité en page 56.
- [Cho 2005] CHO, N.Z.: Fundamentals and recent developments of reactor physics methods. in *Nuclear Engineering and Technology* 37 (2005), Février, pages : 25–78 – Cité en page 36.
- [Coquelet-Pascal et al. 2015] COQUELET-PASCAL, C. ; TIPHINE, M. ; KRIVTCHIK, G. ; FREYNET, D. ; GIRIEUD, R. ; ESCHBACH, R.: COSI6: a Tool for Nuclear Transition Scenarios studies, Septembre 2015 (Proceedings of Global 2015 September 20-24, 2015 - Paris (France)) – Cité en page 6.

- [Coste-Delclaux et al. 2013] COSTE-DELCLAUX, M.; DIOP, M.C.; GABRIEL, F.; LAUTARD, J.; MAGNAUD, C.; MALVAGI, F.; NAURY, S.; NICOLAS, A.: *Les méthodes de la neutronique - Méthodes déterministes de résolution de l'équation de Boltzmann en situation stationnaire*. CEA, Saclay - Département de modélisation des systèmes et structures, 2013 – Cité en pages 21 et 213.
- [DeHart 1996] DEHART, M.D.: Sensitivity and parametric evaluations of significant aspects of burnup credit for PWR spent fuel packages , ORNL Computational Physics and Engineering Division. 1996 (ORNL/TM-12973). – Technical Report – Cité en page 45.
- [Dorval 2016a] DORVAL, E.: Directional diffusion coefficients and leakage-corrected discontinuity factors: Implemenation in Serpent and tests. in *Annals of Nuclear Energy* 87 (2016), pages : 101–112 – Cité en page 37.
- [Dorval 2016b] DORVAL, E.: A comparaison of Monte Carlo methods for neutron leakage at assembly level. in *Annals of Nuclear Energy* 87 (2016), pages : 591–600 – Cité en pages 41 et 45.
- [Doval et Leppänen 2015] DOVAL, E.; LEPPÄNEN, J.: Monte Carlo current-based diffusion coefficients: Application to few-group constants generation in Serpent. in *Annals of Nuclear Energy* 78 (2015), pages : 104–116 – Cité en page 40.
- [Duderstadt et Hamilton 1976] DUDERSTADT, J.J.; HAMILTON, L.J.: *Nuclear Reactor Analysis* . John Wiley & Sons, 1976 – Cité en page 39.
- [Energythic] ENERGYTHIC: *Schéma de fonctionnement d'une centrale REP* . URL : <http://energythic.com> – Cité en pages 8 et 213.
- [Ernoul 2014] ERNOULT, M.: *Gestion avancée du Plutonium en REP - Complémentarité des cycles thorium et uranium*, Université Paris Sud, Ph.D Thesis, 2014 – Cité en page 6.
- [Farkas et al. 2008] FARKAS, G.; PETRISKA, M.; MICHALEK, S.; SLUGEN, V.; VANKOVA, A.: WWER-440 criticality calculations using MCNP5 code, URL : http://www.iaea.org/inis/collection/NCLCollectionStore/_Public/40/059/40059704.pdf, 2008 (eighteenth symposium of atomic energy research) – Cité en page 50.
- [Ferraro et Villairno 2016] FERRARO, D.; VILLAIRNO, E.: Full 3-D core calculations with refueling for the OPAL Reserarch Reactor using Monte Carlo Code Serpent 2. in *Annals of Nuclear Energy* 92 (2016), pages : 369–377 – Cité en page 27.
- [Fridman et Leppänen 2011] FRIDMAN, E.; LEPPÄNEN, J.: On the use of the Serpent Monte Carlo code for few-group cross section generation. in *Annals of Nuclear Energy* 38 (2011), pages : 1399–1405 – Cité en page 35.
- [Fridman et Shwageraus 2013] FRIDMAN, E.; SHWAGERAUS, E.: Modeling SFR cores with Serpent-DYN3D codes sequence. in *Annals of Nuclear Energy* 53 (2013), pages : 354–363 – Cité en page 35.

- [Gast 1981] GAST, R.C.: A Procedure for Obtaining Neutron-Diffusion Coefficients from Neutron-Transport Monte Carlo Calculations , Bettis Atomic Power Laboratory. 1981 (WAPD-TM-1446). – Technical Report – Cité en page 34.
- [Gelbard et Lell 1977] GELBARD, E.M.; LELL, R.: Monte Carlo treatment of fundamental-mode neutron leakage in the presence of voids. in *Nuclear Science and Engineering* 36 (1977), pages : 9–23 – Cité en page 40.
- [Gomin et al. 2008] GOMIN, E.A.; GUREVICH, M.I.; KALUGIN, M.A.; YUDKEVICH, M.S.; ZHIRNOV, A.P.; ROZHDESTVENSKIY, I.M.: MCU-FCP Code for neutron transport calculation using first collision probability method. in *Atomnaya Ehnergiya* 105 (2008), pages : 67–72 – Cité en page 34.
- [Grandi 2008] GRANDI, G.: SIMULATE-3K From a 3D kinetics code to a 3D safety analysis tool , Studsvik. 2008. – Technical Report – Cité en page 28.
- [Grard 2014] GRARD, Hubert: *Physique, fonctionnement et sûreté des REP*. EDP Sciences, 2014 (Collection Génie Atomique) – Cité en pages 123 et 216.
- [Guillemin 2009] GUILLEMIN, P.: *Recherche de la haute conversion en cycle thorium dans les réacteurs CANDU et REP - Développement des méthodes de simulation associées et étude de scénarios symbiotiques*, Institut Polytechnique de Grenoble, Ph.D Thesis, 2009 – Cité en pages 6, 28, 29 et 213.
- [Hébert et Benoist 1991] HÉBERT, A.; BENOIST, P.: A Consistent Technique for the Global Homogenization of a Pressurized Water Reactor Assembly. in *Nuclear Science and Engineering* 109 (1991), pages : 360–372 – Cité en page 37.
- [IEA 2017] IEA: *Energy Technology Perspectives 2017* . URL : <http://www.iea.org/etp2017/summary/>, Juin 2017 – Cité en page 4.
- [JORF 2006] JORF: *Loi n° 2006-739 du 28 juin 2006 de programme relative à la gestion durable des matières et déchets radioactifs* . Institute of Physics Publishing, Juin 2006. – URL : <https://www.legifrance.gouv.fr/affichTexte.do?cidTexte=JORFTEXT000000240700> – Cité en page 10.
- [JORF 2015] JORF: *LOI n° 2015-992 du 17 août 2015 relative à la transition énergétique pour la croissance verte* . Institute of Physics Publishing, Août 2015. – URL : <https://www.legifrance.gouv.fr/affichTexte.do?cidTexte=JORFTEXT000031044385&categorieLien=id> – Cité en page 4.
- [Kepitsy et al. 2016] KEPITSY, G.; CETNAR, J.; STANISZ, P.: Parametric studies of the PWR fuel assembly modeling with Monte-Carlo method. in *Annals of Nuclear Energy* 94 (2016), pages : 189–207 – Cité en pages 44, 45, 46 et 56.
- [Kerkar et Paulin 2008] KERKAR, N.; PAULIN, P.: *Exploitation des cœurs REP*. EDP Sciences, 2008 (Collection Génie Atomique). – ISBN 978-2-86883-976-3 – Cité en pages 45 et 213.

- [Koebke 1981] KOEBKE, K.: Advances in homogeneization and dehomogeneization, 1981 (International Topical meeting: advances in mathematical methods for the solution of nuclear engineering problems, Munich) – Cité en page 37.
- [Koebke et Hetzeltz 1985] KOEBKE, K. ; HETZELTZ, L.: On the Reconstruction of Local Homogeneous Neutron Flux and Current Distributions of Light Water Reactors from Nodal Schemes. in *Nuclear Science and Engineering* 91 (1985), pages : 123–131 – Cité en page 37.
- [Lamarsh 1966] LAMARSH, J. R.: *Introduction to NUCLEAR REACTOR THEORY*. American Nuclear Society, Inc., 1966 – Cité en pages 23, 58, 97, 98, 99, 100, 101 et 167.
- [Lautard et al.] LAUTARD, J.J. ; MAGNAUD, C. ; MOREAU, F. ; BAUDRON, A.M.: CRO-NOS 2 : un logiciel de simulation neutronique des cœurs de réacteurs , DTM/SERMA, CEA Sacaly. – Rapport scientifique – Cité en pages 27 et 28.
- [Leniau 2013] LENIAU, B.: *Caractérisation des sources radioactives du cycle du combustible. Applications au cycle du thorium. Synthèse de l' ^{232}U en combustibles solides*, Université Paris Sud - Institut de Physique Nucléaire Orsay, Ph.D Thesis, 2013 – Cité en page 52.
- [Leniau et al. 2015] LENIAU, B. ; MOUGINOT, B. ; THIOLLIÈRE, N. ; DOLIGEZ, X. ; BIDAUD, A. ; COURTIN, F. ; ERNOULT, M. ; DAVID, S.: A neural network approach for burn-up calculation and its application to the dynamic fuel cycle code CLASS. in *Annals of Nuclear Energy* 81 (2015), pages : 125–133 – Cité en page 6.
- [Leppänen 2005] LEPPÄNEN, J.: A new assembly-level Monte Carlo neutron transport code for reactor physics calculations, Septembre 2005 (Mathematics and Computation, Supercomputing, Reactor Physics and Nuclear and Biological Applications - Palais des Papes, Avignone (France)) – Cité en page 35.
- [Leppänen 2007] LEPPÄNEN, J.: *Development of a New Monte Carlo Reactor Physics Code*, Helsinki University of Technology (Espoo, Finland), Ph.D Thesis, 2007 – Cité en pages 34, 35, 38 et 40.
- [Leppänen et al. 2014] LEPPÄNEN, J. ; PUSA, M. ; VIITANEN, T. ; VALTAVITRA, V. ; KALTIAISENAHO, T.: The Serpent Monte Carlo code: Status, development and applications in 2013. in *Annals of Nuclear Energy* 82 (2014), Septembre, pages : 142–150 – Cité en pages 19 et 34.
- [Ma et al. 2015] MA, J. ; WANG, G. ; YUAN, S. ; HUANG, H. ; QIAN, D.: An improved assembly homogenization approach for plate-type research reactor. in *Annals of Nuclear Energy* 85 (2015), pages : 1003–1013 – Cité en page 37.
- [Maiorov 1985] MAIOROV, L.V.: Calculating neutron flux functions by Monte Carlo method in breeder systems with leakage specified by a geometric parameter. in *Atomnaya Énergiya* 58 (1985), pages : 93–96 – Cité en page 40.

- [Marguet 2011] MARGUET, S.: *La physique des réacteurs nucléaires*. Lavoisier, 2011 (Collection EDF R&D) – Cité en page 36.
- [Marleau et al. 2016] MARLEAU, G. ; HÉBERT, A. ; ROY, R.: A user's guide for DRAGON version4 , École Polytechnique de Montréal, Institut de Génie Nucléaire. Août 2016 (IGE-294). – Technical Report – Cité en pages 22 et 26.
- [Martin 2011] MARTIN, N.: *Application de la méthode des sous-groupes au calcul Monte-Carlo multigroupe*, École Polytechnique de Montréal, Ph.D Thesis, 2011 – Cité en page 40.
- [Martin et Hébert 2011] MARTIN, N. ; HÉBERT, A.: Adaptation of the B1 leakage model to Monte Carlo criticality calculations, 2011 (International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering, Rio de Janeiro (Brazil)). – ISBN 978-85-63688-00-2 – Cité en page 40.
- [Martin et al. 2012] MARTIN, W. M. ; LEE, J.C. ; BAXTER, A. ; WEMPLE, C.: CRONOS 2 : un logiciel de simulation neutronique des cœurs de réacteurs , NEUP (Nuclear Energy University Program), U.S. Departement of Energy. Juin 2012 (DE-AC07-05ID14517). – Project No. 09-771 – Cité en page 27.
- [Martin 2012] MARTIN, W.M.: Challenges and prospects for the whole-core Monte Carlo analysis. in *Nuclear Engineering and Technology* 44 (2012), Mars, Nr. 2 – Cité en page 27.
- [Michel-Sendis 2006] MICHEL-SENDIS, F.: *Contribution à l'étude de la production d' ^{233}U en combustible MOX-ThPu en réacteur à eau sous pression. Scénarios de transition vers des concepts isogénérateurs Th/ ^{233}U en spectre thermique. Développement du code MURE d'évolution du combustible*, Université Paris Sud, Ph.D Thesis, 2006 – Cité en pages 6, 44, 52 et 61.
- [Ministère de la Transition écologique et solidaire] MINISTÈRE DE LA TRANSITION ÉCOLOGIQUE ET SOLIDAIRE: *Approvisionnement en uranium et cycle du combustible nucléaire* . URL : <https://www.ecologique-solidaire.gouv.fr/approvisionnement-en-uranium-et-cycle-du-combustible-nucleaire> – Cité en pages 11 et 213.
- [Mouginot et al. 2014] MOUGINOT, Baptiste ; AL.: Core library for advanced scenario simulation, C.L.A.S.S.: principle and application. in *Proceedings International Conference "The Role of Reactor Physics towards a Sustainable Future"*, PHYSOR, 2014 (PHYSOR) – Cité en page 6.
- [Méplan et al. 2017] MÉPLAN, O. ; HAJNRYCH, J. ; BIDAUD, A. ; DAVID, S. ; CAPELLAN, N. ; LENIAU, B. ; NUTTIN, A. ; HAVLUJ, F. ; VOCKA, R.: MURE 2 : SMURE, Serpent-MCNP Utility for Reactor Evolution , Laboratoire de Physique Subatomique et de Cosmologie de Grenoble, France and Institut de Physique Nucleaire d'Orsay, France. URL : <http://lpsc.in2p3.fr/MURE/html/SMURE/UserGuide/UserGuide.html>, Février 2017 (LPSC 17002). – Technical Report – Cité en pages 26 et 52.

- [Nifenecker et al. 2003] NIFENECKER, H. ; MÉPLAN, O. ; DAVID, S.: *Accelerator driven subcritical reactors* . Institute of Physics Publishing, 2003 – Cité en pages 47 et 213.
- [Nithesh 2016] NITHESH, A.: *Simulation of PWR reactor evolution: study of the impact of the Boron concentration on the end of cycle inventories*. Internship Report, Master Nuclear Energy, 2016 (Institut de Physique Nucléaire d’Orsay) – Cité en page 44.
- [Nuttin 2012] NUTTIN, A.: *Physique des réacteurs à eau lourde ou légère en cycle thorium : étude par simulation des performances de conversion et de sûreté*, LPSC-CNRS/IN2P3, HDR, 2012 – Cité en page 62.
- [négaWatt 2017] NÉGAWATT, Association: Scénario négaWatt 2017-2050 , University of Wisconsin Computational Nuclear Engineering Research Group. URL : https://negawatt.org/IMG/pdf/synthese_scenario-negawatt_2017-2050.pdf, Janvier 2017. – Technical Report – Cité en page 5.
- [OECD 2014] OECD: *The JEFF .. Nuclear Data Library*. URL : http://www.oecd-neo.org/dbforms/data/eva/evatapes/jeff_32/, 2014 – Cité en page 13.
- [Onillon 2014] ONILLON, A.: *Prédiction des taux de fission des cœurs de Chooz et estimation des incertitudes associées dans le cadre de l’expérience Double Chooz*, Université de Nantes Angers Le Mans, Ph.D Thesis, 2014 – Cité en pages 50, 51, 52 et 213.
- [Patarin 2002] PATARIN, Louis: *Le cycle du combustible nucléaire*. EPD Sciences, INSTN, 2002 (Collection Génie Atomique) – Cité en page 11.
- [Petrovic et Benoist 1996] PETROVIC, I. ; BENOIST, P.: B_N theory: Advances and New Models for Neutron Leakage Calculation. in *Advances in Nuclear Science and Technologies* 24 (1996) – Cité en page 39.
- [Rearde et al. 2013] REARDE, B.T. ; MARSHALL, W.J. ; PERFETTI, C.M. ; MISS, J. ; RICHET, Y.: Quantifying the Effect of Undersampling Biases in Monte Carlo Reaction Rate Tallies, EGAMCT meeting, Kurchatov Institute, Moscow, 2013 – Cité en pages 67 et 108.
- [Redmond 1997] REDMOND, E.L.: *Multigroup cross section generation via Monte Carlo methods*, Massachusetts Institute of Technology, Ph.D Thesis, 1997 – Cité en page 34.
- [Rhodes et al. 2006] RHODES, J. ; SMITH, K. ; LEE, D.: CASMO-5: Development and Applications, Proceedings of PHYSOR 2006 - ANS Topical Meeting on Reactor Physics, Septembre 2006 (Vancouver, BC, Canada) – Cité en page 28.
- [Rochman et al. 2017] ROCHMAN, D. ; LERAY, O. ; HURSIN, M. ; FERROUKHI, H.: Nuclear Data Uncertainties for Typical LWR Fuel Assemblies and a Simple Reactor Core. in *Nuclear Data Sheets* 139 (2017), Janvier, pages : 1–76 – Cité en page 13.
- [Rodriguez et al. 2016] RODRIGUEZ, I.M. ; AL.: ANICCA code and the Belgian Nuclear Fuel Cycle. in *Technical Workshop : dynamic fuel cycle*, URL : <https://lpsc-indico.in2p3.fr/Indico/event/1357/session/8/contribution/5/material/slides/0.pdf>, Juillet 2016 (SCK·CEN) – Cité en page 6.

- [Sanchez et al. 2010] SANCHEZ, R. ; ZMIJAREVIC, I. ; AL: APOLLO2 Year 2010. in *Nuclear Engineering and Technology* 42 (2010), Octobre, Nr. 5 – Cité en pages 20 et 26.
- [Sanders et Wagner 2002] SANDERS, C.E. ; WAGNER, J.C.: Parametric Study of the Effect of Control Rods for PWR Burnup Credit , Oak Ridge National Laboratory. 2002 (NUREG/CR-6759, ONRL/TM-2001/69). – Technical Report – Cité en page 43.
- [Shim et al. 2012] SHIM, H.J. ; HAN, B.S. ; JUNG, J.S. ; PARK, H.J. ; KIM, C.H.: MC-CARD: Monte Carlo code for advanced reactor design and analysis. in *Nuclear Engineering and Technology* 44 (2012), pages : 161–176 – Cité en page 40.
- [Smith 1985] SMITH, K.S.: Assembly homogenization techniques for light water reactor analysis. in *Progress in Nuclear Energy* 17 (1985), Novembre, pages : 303–335 – Cité en page 36.
- [Somaini 2016] SOMAINI, A.: The impact of reactor model simplification for fuel evolution: a bias quantification for fuel cycle dynamic simulations, 2016 (2016 International Congress on Advances in Nuclear Power Plants - ICAPP2016, San Francisco (CA)). – ISBN 978-0-89448-725-5 – Cité en page 45.
- [Symon 2013] SYMON, Caroline: *Changement climatique : faits, tendances et implications pour le monde économique - Cinquième rapport d'évaluation du GIEC*. European Climate Foundation, 2013 – Cité en page 4.
- [Tohjoh et al. 2005] TOHJOH, M. ; WATANABE, M. ; YAMAMOTO, A.: Application of continuous-energy Monte Carlo code as a cross-section generator of BWR core calculations. in *Annals of Nuclear Energy* 32 (2005), pages : 857–875 – Cité en page 34.
- [TOTAL 2017] TOTAL: *Intègre le climat à notre stratégie*. 2017 – Cité en pages 4, 5 et 213.
- [Turinsky 1994] TURINSKY, P.J.: *NESTLE : few-group diffusion equation solver utilizing the nodal expansion method for eigenvalue, adjoint, fixed-source steady-state and transient problems*. Electric Power Research Center, North Carolina State University, Juin 1994 – Cité en page 28.
- [Varin et al. 2005] VARIN, E. ; HÉBERT, A. ; ROY, R. ; KOCLAS, J.: A user's guide for DONJON 3.01 , École Polytechnique de Montréal, Institut de Génie Nucléaire. 2005 (IGE-208 Rev 4). – Technical Report – Cité en page 28.
- [Wagner 2013] WAGNER, J.C.: Impact of soluble boron modeling for PWR burnup credit criticality safety analysis, Novembre 2013 (Winter Meeting with cooperation with Nuclear Energy Institute on "Nuclear Technology": Achieving Global Economic Growth While Safeguarding the Environment" - American Nuclear Society, New Orleans, USA) – Cité en page 43.
- [Wagner et DeHart 2000] WAGNER, J.C. ; DEHART, M.D.: Review of Axial Burnup distribution Considerations for Burnup Credit Calculations , ORNL Computational

- Physics and Engineering Division. 2000 (ORNL/TM-1999/249). – Technical Report – Cité en page 45.
- [Westinghouse Electric Company 2013] WESTINGHOUSE ELECTRIC COMPANY: *POLCA-T: System Analysis Code with Three-dimensional Core Model*. Westinghouse Electric Company LLC, Février 2013 – Cité en page 28.
- [Wilson et al.] WILSON, P. ; SCOPATZ, A. ; CARLSEN, R. ; DJOKIC, D. ; ELMORE, R. ; FLANAGAN, R.: CYCLUS , University of Wisconsin Computational Nuclear Engineering Research Group. URL : <http://fuelcycle.org/>. – Technical Report – Cité en page 6.
- [Yamamoto 2012a] YAMAMOTO, T.: Monte Carlo algorithm for buckling search and neutron leakage-corrected calculations. in *Annals of Nuclear Energy* 47 (2012), pages : 14–20 – Cité en page 40.
- [Yamamoto 2012b] YAMAMOTO, T.: Monte Carlo method with complex weights for neutron leakage-corrected calculations and anisotropic diffusion coefficient generations. in *Annals of Nuclear Energy* 50 (2012), pages : 141–149 – Cité en page 40.
- [Yu et al. 2015] YU, T. ; AL.: A study on the burn-up characteristics of inert matrix fuels. in *Progress in Nuclear Energy* 78 (2015), pages : 341–345 – Cité en page 56.
- [Yun et Cho 2010] YUN, S. ; CHO, N.Z.: Monte Carlo depletion under leakage-corrected critical spectrum via albedo search. in *Nuclear Engineering and Technology* 42 (2010) – Cité en page 40.

Table des figures

1.1	Mix énergétique mondial en 2016 (à gauche) et en 2035 (à droite) proposé par l'AIE dans le scénario des 2°C. Source image [TOTAL, 2017]	5
1.2	Illustration des générations de réacteurs nucléaires selon le temps de fabrication (réelle ou prévue)	7
1.3	Représentation d'un réacteur à eau pressurisée (REP). Source image [Energythic]	8
1.4	Représentation d'un crayon de combustible et d'un assemblage d'un REP .	9
1.5	Vue sur le plan (x,y) d'un coeur du réacteur, d'un assemblage et d'un pin de combustible	10
1.6	Schéma du cycle du combustible français. Source image [Ministère de la Transition écologique et solidaire]	11
1.7	Sections efficaces de capture et de fission de l' ^{235}U et de l' ^{238}U	12
1.8	Spectres de neutrons pour un combustible UOx et un combustible MOx .	14
1.9	Neutrons traversant perpendiculairement une surface A	15
1.10	Neutrons traversant perpendiculairement une surface A dans un intervalle de temps Δt	15
1.11	Représentation du phénomène d'autoprotection pour l'isotope ^{238}U . Source image [Coste-Delclaux et al., 2013]	21
1.12	Plaque de demi-épaisseur $a/2$ avec des conditions de vide à l'extérieur . . .	24
1.13	Représentation de la condition d'annulation du flux	24
1.14	Schéma de principe de l'équivalence coeur-cellule pour un REP avec couplage DRAGON-DONJON. Source image [Guillemin, 2009]	29
2.1	Représentation d'un assemblage isolé	43
2.2	Évolution du ^{239}Pu en fonction du Burn-Up pour six valeurs de concentration de bore : 100, 200, 400, 600, 700 et 1200 ppm	44
2.3	Illustration du déplacement des assemblages dans le coeur selon les 3 cycles d'irradiation pour un REP900. Source image [Kerkar et Paulin, 2008] . . .	45
2.4	Représentation schématique du fonctionnement de MCNP. Source image [Nifenecker et al., 2003]	47
2.5	Évolution de la distribution d'une source de neutrons initialement placée au centre d'une sphère homogène. Source image [Onillon, 2014]	51
2.6	Évolution de l'entropie de Shannon pour trois valeurs de nombre de neutrons source. Source image [Onillon, 2014]	52
2.7	Principe de fonctionnement du code d'évolution SMURE avec utilisation de MCNP pour l'étape en transport	53

2.8	Évolution en fonction du temps des inventaires de l' ^{235}U et du ^{239}Pu pour deux simulations avec pas de temps fixes et variables	55
2.9	Évolution en fonction du temps du facteur de multiplication pour deux simulations avec pas de temps fixes et variables	56
2.10	Évolution en fonction du temps du ^{135}Xe dans un combustible REP pour une simulation avec des pas de temps variables : 23 pas de 0.5 jours et 2 pas de 5 jours	57
2.11	Évolution d' ^{235}U de l'assemblage infini en fonction du temps	60
2.12	Représentation du k_{∞} , $\langle k_{\infty} \rangle$ et k_{seuil} en fonction du Burn-Up et de l'estimation des Burn-Up de fin de chaque cycle d'irradiation pour un rechargement par tiers	61
2.13	Représentation du k_{∞} , $\langle k_{\infty} \rangle$ et k_{seuil} pour deux concentrations de bore : 400 et 600 ppm	62
3.1	Vue sur le plan (x,y) de l'assemblage d'étude	67
3.2	Représentation de la configuration <i>cube</i> de référence et des trois configurations de taille réelle <i>assemblages fermé, ouvert et complet</i>	69
3.3	Distribution axiale du flux neutronique pour 10 simulations indépendantes de l' <i>assemblage fermé</i> en début d'irradiation	70
3.4	Distribution axiale du flux neutronique pour 10 simulations indépendantes de l' <i>assemblage ouvert</i> en début d'irradiation	71
3.5	Évolution du ^{239}Pu total en fonction du temps pour la configuration <i>cube</i> (à gauche) et du ^{239}Pu dans la zone 9 pour la configuration <i>assemblage fermé</i> (à droite), pour l'ensemble des 80 simulations indépendantes réalisées . . .	72
3.6	Profil axial du flux neutronique pour les configurations <i>assemblages fermé, ouvert et complet</i> avec les barres d'erreur associées	73
3.7	Distribution axiale de l'écart-type relative du flux neutronique en début d'irradiation pour les configurations <i>assemblages fermé, ouvert et complet</i>	73
3.8	Évolution en fonction du temps des inventaires d' ^{235}U et ^{236}U pour les configurations <i>assemblage fermé, ouvert et complet</i>	78
3.9	Évolution en fonction du temps des inventaires du ^{239}Pu , ^{240}Pu , ^{241}Pu et ^{242}Pu pour les configurations <i>assemblage fermé, ouvert et complet</i>	79
3.10	Évolution en fonction du temps des inventaires de l' ^{241}Am et de l' ^{243}Am pour les configurations <i>assemblage fermé, ouvert et complet</i>	80
3.11	Évolution en fonction du temps du coefficient de multiplication pour les configurations <i>assemblage fermé, ouvert et complet</i> avec les barres d'erreur associées	81
3.12	Distribution d' ^{235}U en fonction des zones axiales pour les 3 configurations <i>assemblages fermé, ouvert et complet</i> avec les barres d'erreur associées à 40 GWj/t	83

3.13 Évolution du profil axial du flux neutronique de la configuration <i>assemblage fermé</i> avec les barres d'erreur associées pour les pas de temps numéros 1, 3, 5, 10, 12 et 13	83
3.14 Évolution du profil axial du flux neutronique de la configuration <i>assemblage ouvert</i> avec les barres d'erreur associées pour les pas de temps numéros 1, 3, 5, 10, 12 et 13	84
3.15 Évolution du profil axial du flux neutronique de la configuration <i>assemblage complet</i> avec les barres d'erreur associées pour les pas de temps numéros 1, 3, 5, 10, 12 et 13	85
3.16 Distribution du ^{239}Pu en fonction des zones axiales pour les 3 configurations <i>assemblage fermé</i> , <i>ouvert</i> et <i>complet</i> avec les barres d'erreur associées à 40 GWj/t	85
3.17 Distribution du ^{239}Pu en fonction des zones axiales pour plusieurs pas de temps pour la configuration <i>assemblage ouvert</i>	86
3.18 Distribution du ^{241}Pu (à gauche) et de l' ^{241}Am (à droite) en fonction des zones axiales pour les 3 configurations <i>assemblages fermé</i> , <i>ouvert</i> et <i>complet</i> avec les barres d'erreur associées à 40 GWj/t	87
3.19 Évolution du ^{239}Pu en fonction du Burn-Up local de la configuration <i>assemblage ouvert</i> pour les zones 1, 2, 9, 17 et 18	88
3.20 Évolution du ^{239}Pu en fonction du Burn-Up local pour les 3 configurations <i>assemblages fermé</i> , <i>ouvert</i> et <i>complet</i> dans la zone 1 (à gauche) et dans la zone 9 (à droite)	90
3.21 Distribution du ^{239}Pu (à gauche) et de l' ^{235}U (à droite) en fonction des zones axiales pour les 3 configurations <i>assemblages fermé</i> , <i>ouvert</i> et <i>complet</i> au Burn-Up local de 28 400 MWj/t	90
3.22 Distribution du rapport Φ_1/Φ_2 en fonction des zones axiales en début d'irradiation pour les 3 configurations <i>assemblages fermé</i> , <i>ouvert</i> et <i>complet</i>	92
3.23 Division et numérotation des surfaces et des courants dans la configuration <i>assemblage ouvert</i> pour les groupes des zones aux extrémités et dans le centre de l'assemblage	94
3.24 Profils axiaux du flux rapide Φ_1 et du flux thermique Φ_2 en fonction des zones axiales en début d'irradiation pour la configuration <i>assemblage ouvert</i> moyennés sur les 80 simulations indépendantes	96
3.25 Profils axiaux des flux totaux et de leurs composantes (flux fondamental et flux thermique) pour les deux groupes énergétiques sur la moitié de l'assemblage ouvert	102
3.26 Profils axiaux des flux de transition du groupe rapide et du groupe thermique sur la moitié de l'assemblage ouvert	103
3.27 Section efficace de fission de l' ^{235}U pour les trois configurations <i>assemblages fermé</i> , <i>ouvert</i> et <i>complet</i> en fonction des zones axiales	104

3.28	Sections efficaces de fission de l' ^{235}U du groupe rapide (σ_1), du groupe thermique (σ_2) et totale (σ_{tot}) en fonction de z dans les derniers 40 <i>cm</i> de l' <i>assemblage ouvert</i>	105
3.29	Évolution dans le temps du ratio Φ_1/Φ_2 pour la configuration <i>assemblage fermé</i> en fonction des zones axiales pour les pas de temps 1, 3, 5, 10, 12 et 13	106
3.30	Évolution dans le temps du ratio Φ_1/Φ_2 pour la configuration <i>assemblage ouvert</i> en fonction des zones axiales pour les pas de temps 1, 3, 5, 10, 12 et 13	107
3.31	Évolution dans le temps du ratio Φ_1/Φ_2 pour la configuration <i>assemblage complet</i> en fonction des zones axiales pour les pas de temps 1, 3, 5, 10, 12 et 13	107
3.32	Représentation de l' <i>assemblage</i> de 40 <i>cm</i> réfléchi en bas (à gauche) et ouvert en haut (à droite). Représentation de la zone asymptotique (à gauche) et de celle externe (à droite)	108
3.33	Profil axial du rapport des flux Φ_1/Φ_2 pour chaque centimètre de l' <i>assemblage réduit</i> de 40 <i>cm</i>	109
3.34	Profil axiaux des rapports des flux Φ_1/Φ_2 de l' <i>assemblage ouvert</i> et de l' <i>assemblage réduit</i> de 40 <i>cm</i> en fonction de z rapporté à la hauteur totale de l' <i>assemblage ouvert</i>	110
3.35	Profil axial du rapport des flux Φ_1/Φ_2 en fonction de z pour 3 assemblages avec enrichissements différents : 1%, 3.5% et 5%	115
3.36	Spectres neutroniques pour deux assemblages UOx enrichi en ^{235}U à 2.06% et à 3%	115
3.37	Spectres neutroniques dans un assemblage UOx pour deux valeurs de concentration en bore : 450 et 1350 <i>ppm</i>	117
4.1	Plan de chargement en gestion hybride MOX de REP 900 <i>MW_{el}</i> . Source image [Bodin, 2010]	122
4.2	Plan de chargement d'un REP 1300 <i>MW</i> . Source image [Grard, 2014]	123
4.3	Représentation des configurations 3x3 avec lame d'eau	125
4.4	Configurations étudiées et numérotation des assemblages	126
4.5	Évolution du ^{239}Pu en fonction du temps pour les configurations <i>Z</i> sans et avec lame d'eau	129
4.6	Évolution de l' ^{235}U en fonction du temps pour les configurations <i>Z</i> sans et avec lame d'eau	130
4.7	Évolution des inventaires des isotopes ^{235}U et ^{239}Pu en fonction du Burn-Up pour les configurations ∞ , <i>Z</i> , <i>A</i> et <i>B</i>	136
4.8	Rapport de $\sigma_c^{U8}/\sigma_{f,c}^{Pu9}$ en fonction du temps	137
4.9	Évolution des inventaires des isotopes ^{240}Pu , ^{241}Pu et ^{241}Am en fonction du Burn Up pour les configurations ∞ , <i>Z</i> , <i>A</i> et <i>B</i>	138

4.10	Sections efficaces en fonction du Burn-Up pour les configurations ∞ , Z , A et B	140
4.11	Flux en fonction du Burn-Up pour les configurations ∞ , Z , A et B	140
4.12	Évolutions des inventaires des fissiles ^{235}U et ^{239}Pu pour les configurations ∞ , C et $C2$	142
4.13	Évolutions des inventaires des fissiles ^{235}U et ^{239}Pu pour les configurations ∞ , C et M	144
4.14	Évolution des inventaires des isotopes ^{235}U et ^{239}Pu en fonction du Burn-Up local pour les configurations ∞ , A et B	147
4.15	Évolution de l' ^{241}Am pour les configurations ∞ , A et B en fonction du Burn-Up local	148
4.16	Représentation schématique de la configuration avec rechargement R	150
4.17	Évolutions des inventaires en fonction du Burn-Up local des fissiles ^{235}U et ^{239}Pu pour les configurations ∞, R et A_{fixe}	152
4.18	Zoom sur l'évolution du ^{239}Pu en fonction du Burn-Up local pour les configurations ∞, R et A_{fixe}	153
4.19	Évolution de l' ^{235}U en fonction du Burn-Up pour les configurations ∞ , MOx entouré d'UOx à 0 GWj/t et MOx entouré d'UOx à 30 GWj/t avec entourage non évoluant	156
4.20	Évolution du ^{239}Pu en fonction du Burn-Up pour les configurations ∞ , MOx entouré d'UOx à 0 GWj/t et MOx entouré d'UOx à 30 GWj/t avec entourage non évoluant	156
4.21	Évolution du ^{239}Pu en fonction du Burn-Up pour les configurations ∞ , MOx entouré d'UOx à 0 GWj/t et MOx entouré d'UOx à 30 GWj/t avec entourage évoluant	157
5.1	Représentation de la géométrie utilisée pour l'étude des assemblages périphériques	164
5.2	Valeurs de Φ_1/Φ_2 pour les 6 assemblages en début d'irradiation. Résultats issus d'une seule simulation	167
5.3	Φ_1/Φ_2 dans la géométrie étudiée avec une discrétisation de 0.16 cm dans chacune des deux directions sur le plan (x,y)	168
5.4	Valeurs des sections efficaces de fission pour les 6 assemblages en début de cycle avec écart-type relatif (a) et écarts relatifs par rapport à l'assemblage infini (b) en début d'irradiation	169
5.5	Représentation des deux assemblages réfléchis d'un côté et modérés de l'autre (pas à l'échelle) et valeurs des $\sigma_{fiss}^{235\text{U}}$ asymptotiques (zone verte)	169
5.6	Flux neutronique pour la configuration corner sur le plan (x, y) avec une discrétisation spatiale de 0.16 cm dans chacune des deux directions	170

5.7	Évolution de l' ^{235}U en fonction du Burn-Up pour les configurations infinie, corner évolution assemblage 1 et corner évolution assemblage 5 avec les barres d'erreur associées	172
5.8	Évolution du ^{239}Pu en fonction du Burn-Up pour les configurations infinie, corner évolution assemblage 1, corner évolution assemblage 5 et configuration Z entourage non évoluant avec les barres d'erreur associées	173
5.9	Valeurs des écarts des inventaires de l' ^{235}U (a) et du ^{239}Pu (b) par rapport à l'assemblage infini pour les 6 assemblages à un Burn-Up local de 30 GWj/t	174
5.10	Évolution de l' ^{235}U en fonction du Burn-Up local pour l'assemblage infini, les assemblages internes (représentés par le 1) et les assemblages périphériques (représentés par le 5) de la configuration corner	174
5.11	Évolution du ^{239}Pu en fonction du Burn-Up local pour l'assemblage infini, les assemblages internes (représentés par le 1) et les assemblages périphériques (représentés par le 5) de la configuration corner	175
5.12	Schéma de rechargement : une simulation des 6 assemblages évoluant. Quand l'assemblage 5 rejoint 13.7 GWj/t il est déplacé en position 1; une deuxième simulation d'évolution commence avec les autres assemblages frais	176
5.13	Évolution de l' ^{235}U en fonction du Burn-Up local pour l'assemblage infini, les assemblages 1, 5 et l'assemblage déplacé de 5 à 1	177
5.14	Zoom de l'évolution de l' ^{235}U en fonction du Burn-Up local pour l'assemblage infini, les assemblages 1, 5 et l'assemblage déplacé de la position périphérique 5 à la position interne 1	178
5.15	Évolution du ^{239}Pu en fonction du Burn-Up local pour l'assemblage infini, les assemblages 1, 5 et l'assemblage déplacé de 5 à 1	178
5.16	Évolution de l' ^{235}U en fonction du Burn-Up local pour l'assemblage infini, les assemblages 1, 5 et l'assemblage déplacé de 1 à 5	179
5.17	Zoom de l'évolution de l' ^{235}U en fonction du Burn-Up local pour l'assemblage infini, les assemblages 1, 5 et l'assemblage déplacé de la position interne 1 à la position périphérique 5	179
5.18	Évolution du ^{239}Pu en fonction du Burn-Up local pour l'assemblage infini, les assemblages 1, 5 et l'assemblage déplacé de 1 à 5	180
6.1	Représentation de la géométrie du quart de cœur simulée	187
6.2	Sections efficaces de fission de l' ^{235}U et écarts relatifs par rapport à l'assemblage infini (en gras) en début d'irradiation	188
6.3	Écarts relatifs des inventaires de l' ^{235}U par rapport à la configuration infinie à 40 GWj/t de la configuration cœur à 1 batch	189
6.4	Écarts relatifs des inventaires du ^{239}Pu par rapport à la configuration infinie à 40 GWj/t de la configuration cœur à 1 batch	190

6.5	Valeurs des Burn-Up locaux rejoins par chacun des assemblages de la configuration cœur à 1 batch	192
6.6	Représentation du plan de chargement de la simulation à 4 batches	193
6.7	Valeurs et écarts relatifs des sections efficaces de l' ^{235}U après 10 GWj/t d'irradiation des assemblages de la simulation cœur à 4 batches	194

Liste des tableaux

2.1	Découpage énergétique dans l'option <i>multigroupe</i>	54
2.2	Écarts relatifs entre la simulation à pas de temps fixes et la simulation à pas de temps variables des inventaires des isotopes ^{235}U , ^{239}Pu et du facteur de multiplication	55
2.3	Valeurs des sections efficaces homogénéisées et condensées de diffusion et d'absorption pour un assemblage calculées via MCNP et Serpent et écarts relatifs entre les deux	64
3.1	Valeurs caractéristiques du réacteur utilisées pour notre étude. Les caractéristiques listées sauf celles de la dernière ligne sont directement issues du benchmark	67
3.2	Comparaison des compositions isotopiques à 40 GWj/t pour les configurations <i>assemblage fermé</i> et <i>cube</i>	75
3.3	Inventaires isotopiques et écarts-types relatifs à 40 GWj/t pour les configurations <i>assemblage fermé</i> , <i>ouvert</i> et <i>complet</i>	76
3.4	Écarts relatifs par rapport à l' <i>assemblage fermé</i> des inventaires isotopiques des configurations <i>assemblages ouvert</i> et <i>complet</i> à 40 GWj/t	77
3.5	BU_{max} atteignable pour les 3 configurations <i>assemblages fermé</i> , <i>ouvert</i> et <i>complet</i> pour deux types de rechargement, par tiers et par quarts	82
3.6	Écarts entre les BU_{max} atteignables	82
3.7	Valeurs des différences de courants nets, rapide et thermique, normalisées au flux neutronique dans chaque zone j de l' <i>assemblage ouvert</i>	94
3.8	Grandeurs utilisées pour l'application numérique	102
3.9	Valeurs des sections efficaces microscopiques de fission de l' ^{235}U pour les configurations <i>assemblages fermé</i> et <i>ouvert</i> et écarts relatifs par rapport à la référence pour un assemblage de taille réelle	111
3.10	Valeurs des sections efficaces microscopiques de fission de l' ^{235}U pour les configurations <i>assemblages fermé</i> et <i>ouvert</i> et écarts relatifs par rapport à la référence pour un assemblage de 40 cm	112
3.11	Valeurs des $\sigma_{fiss}^{235\text{U}}$ en début d'irradiation pour des simulations réalisées avec MCNP et Serpent	113
3.12	Valeurs des sections efficaces microscopiques de fission de l' ^{235}U pour les configurations <i>assemblages fermé</i> et <i>ouvert</i> et écarts relatifs par rapport à la référence	113
3.13	Valeurs des k en début d'irradiation pour les 3 enrichissements initiaux du combustible	114
3.14	Valeurs de $\sigma_{fiss}^{235\text{U}}$ et de k pour les assemblages réduits de 40 cm ouvert et fermé	116

3.15	Valeurs de σ_{fiss}^{235U} et de k pour les assemblages réduits de 40 cm pour deux concentrations en bore : 1350 et 1800 ppm	116
3.16	Valeurs de σ_{fiss}^{235U} pour l'assemblage de 40 cm simulé avec MCNP (ouvert d'un côté) et avec Serpent (fermé et utilisant le modèle de fuites B_1)	118
4.1	Caractéristiques des configurations	125
4.2	Nombre de simulations indépendantes réalisées pour chaque configuration .	126
4.3	Rapport des flux rapide et thermique pour les configurations avec et sans lame d'eau	127
4.4	Variations relatives des σ et de Φ entre configuration avec et sans lame d'eau	127
4.5	Variations relatives des inventaires à 40 GWj/t entre configurations avec et sans lame d'eau	128
4.6	Erreurs relatives des observables σ_{fiss}^{235U} , σ_{fiss}^{239Pu} , σ_{capt}^{238U} et Φ pour toutes les configurations avec lame d'eau	132
4.7	Valeurs des rapports Φ_1/Φ_2 , valeur et variations des sections efficaces et du flux à $t = 0$ pour toutes les configurations	133
4.8	Écarts-types en pourcent de plusieurs inventaires pour toutes les configurations à entourage non évoluant	134
4.9	Écarts relatifs des inventaires par rapport à la configuration infinie à 25 et 40 GWj/t	135
4.10	Valeurs des sections efficaces pour les configurations infinie, C et M en début d'irradiation	143
4.11	Écarts relatifs des inventaires par rapport à l'assemblage infini pour les configurations infinie, C et M à 25 et à 40 GWj/t ; les incertitudes statistiques sont tirées du tableau 4.8	143
4.12	Écarts relatifs des inventaires par rapport à la configuration infinie de référence à 25 et 40 GWj/t	146
4.13	Écart relatif des inventaires des configuration A avec environnement évoluant et non et R comparées à l'assemblage infini pour deux valeurs de Burn-Up	151
4.14	Écart relatif des sections efficaces de fission du ^{239}Pu (et de l' ^{235}U) et du rapport des flux Φ_1/Φ_2 par rapport à la configuration infinie pour le MOx au centre et les UOx environnants sans lame d'eau	154
4.15	Écart relatif des sections efficaces de fission du ^{239}Pu (et de l' ^{235}U) et du rapport des flux Φ_1/Φ_2 par rapport à la configuration infinie pour le MOx au centre et les UOx environnants avec lame d'eau	155
5.1	Caractéristiques de la géométrie simulée pour l'étude des assemblages périphériques	165

5.2	Nombre de simulations indépendantes réalisées pour chaque configuration étudiée	166
5.3	Écarts-types relatifs et écarts relatifs par rapport à la configuration infinie pour les simulations d'évolution des assemblages 1 et 5 à 40 GWj/t	172
5.4	Écarts des inventaires à 40 GWj/t de l' ^{235}U et du ^{239}Pu par rapport à l'assemblage infini pour la configuration avec déplacement $5 \rightarrow 1$ et des assemblages 1 et 5 de la configuration avec tous les assemblages évoluant .	177
5.5	Écarts des inventaires à 40 GWj/t de l' ^{235}U et du ^{239}Pu par rapport à l'assemblage infini pour la configuration avec déplacement $1 \rightarrow 5$ et des assemblages 1 et 5	179
6.1	Écarts des inventaires à 40 GWj/t de l' ^{235}U et du ^{239}Pu par rapport à la simulation cœur en considérant les Burn-Up locaux des assemblages, pour une modélisation infinie et pour une modélisation améliorée avec la prise en compte des assemblages périphériques	191
6.2	Écarts des inventaires à 40 GWj/t de l' ^{235}U et du ^{239}Pu par rapport à la simulation cœur pour une modélisation infinie et pour une modélisation améliorée avec la prise en compte des assemblages périphériques	193
6.3	Écarts des inventaires du ^{239}Pu des assemblages à la décharge après 10 GWj/t d'irradiation pour une modélisation infinie et pour une modélisation améliorée avec la prise en compte des 2 assemblages périphériques par rapport à la simulation cœur	195

Titre : Analyse des erreurs induites par une modélisation simplifiée sur l'évolution des combustibles REP - Impact des fuites neutroniques dans les calcul cellules

Keywords : Simulation réacteurs nucléaires, fuites neutroniques, MCNP évoluant, incertitudes, calcul cellule

Résumé : Les études de scénarios d'un parc électronucléaire, ainsi que les études de sûreté, sont essentielles pour explorer les différentes stratégies du nucléaire du futur. Pour mener à bien ces études, il est nécessaire d'estimer le temps d'irradiation d'un combustible donné, ainsi que sa composition isotopique pendant la campagne de production d'électricité. Ces estimations reposent sur des simulations de réacteurs nucléaires, dont les calculs d'évolution doivent être les plus représentatifs possible. Les schémas de calcul classiquement utilisés s'effectuent en deux étapes : un calcul cellule pour résoudre l'équation du transport des neutrons (de type déterministe ou Monte Carlo) suivi d'un calcul cœur (déterministe).

Le calcul cellule est une simulation d'évolution d'un assemblage dans des conditions infinies. À partir de ce calcul, des sections efficaces homogénéisées et condensées, ainsi que des grandeurs de diffusion, sont calculées comme données d'entrée pour l'étape suivante, celle du calcul cœur.

Le calcul cellule est donc une étape fondamentale et celui-ci doit être le plus représentatif possible d'un assemblage du cœur. Or, les approximations à la base de ce modèle sont nombreuses, plus particulièrement les fuites neutroniques sont négligées. L'objectif de ce travail est d'étudier les effets physiques de fuites neutroniques et de quantifier les biais associés par rapport à une simulation infinie. Dans une première partie, la problématique des fuites neutroniques axiales est étudiée. Dans ce cas, les fuites de neutrons provoquent une variation forte du spectre neutronique localisée dans les derniers centimètres de l'assemblage ainsi qu'une variation plus faible mais globale sur l'ensemble de l'assemblage. Une deuxième partie est dédiée aux fuites radiales de neutrons. L'effet des assemblages voisins, ainsi que le comportement particulier des assemblages en position périphérique sont étudiés et les biais de composition en fin d'irradiation sont quantifiés. Un calcul d'évolution d'un réacteur très simplifié permet de visualiser, dans une dernière partie, l'ensemble des effets physiques observés et qui impactent l'évolution de l'irradiation.

De nombreuses approximations du calcul cellule restent à explorer, comme le suivi de réactivité, par l'intermédiaire de la concentration du poison de neutrons thermiques solubilisé dans le modérateur ou présent dans le combustible. Cependant, la détermination des phénomènes physiques à prendre en compte pour le calcul cellule représente une première étape indispensable vers une amélioration de la représentativité du calcul cellule, voire conduire à des nouvelles méthodes de simulation d'un cœur du réacteur. À terme, les quantifications des biais liés aux fuites neutroniques serviront à estimer l'incertitude sur les compositions isotopiques du combustible en fin d'irradiation. Ces incertitudes, propagées dans les études de scénarios, permettront de quantifier le degré de validité des résultats obtenus.

Title : Analysis of biases induces by a simplified modelisation for the PWR fuel evolution - Neutron leakage impact on the cell calculations

Keywords : Nuclear reactor simulations, Neutron leakage, MCNP depletion calculation, biases, cell calculation

Abstract: Scenario studies of an electronuclear fleet, as well as safety studies, are essential to explore the different nuclear strategies of the future. To carry out these studies, it is necessary to estimate the irradiation time of a given fuel and its composition during the electricity production campaign. These estimates are based on the simulations of nuclear reactors, for which the calculations of the evolution must be as representative as possible. The calculation schemes usually used are divided into two stages: a cell calculation to solve the neutron transport equation (deterministic or Monte Carlo simulation) followed by a core calculation (deterministic code) .

The cell calculation is a simulation of the evolution of an assembly under infinite conditions. Based upon this calculation, homogenized and condensed cross-sections along with scattering quantities are calculated as input data for the next stage, the core calculation.

The cell calculation is therefore a fundamental step and must be representative of a core assembly evolution as much as possible. However, the approximations used for this model are numerous, especially the neutron leakages are neglected. The objectives of this work is to study the physical effects of neutron leakage and to compute the associated biases compared to an infinite assembly simulation. In the first part, the problem of axial neutron leakage will be broached. In this case, neutron leakage causes a strong variation of the neutron spectrum in the last centimeters of the assembly as well as a smaller variation but over the entire assembly. The second part deals with the radial leakage. The effect of the neighboring assemblies and the particular behavior of the assemblies in the peripheral position are studied. Moreover the isotopic composition biases at the end of the cycle are quantified. In the third and last part, a simplified calculation of the evolution of a reactor enables to visualize all the observed physical effects impacting the evolution of the irradiation.

Several other approximations of the cell calculation are still to be investigated, such as the reactivity monitoring through the concentration of thermal neutron poison dissolved in the moderator or present in the fuel. Nonetheless, establishing of the physical phenomena taken into account for the cell calculation represents an essential first step towards an improvement of the cell calculation and may lead to new simulation methods for reactor cores. In the future, the quantification of the biases related to neutron leakage will be used to estimate the uncertainties on the isotopic composition of the fuel at the end of the cycle. These uncertainties, propagated into the scenarios studies, will assess the validity of the obtained results.