PolyPublie
Polytechnique Montréal

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL
UNIVERSITÉ D'INGÉNIERIE

Titre: Title:	Développement de méthodes de calcul de coefficients de sensibilité des sections efficaces multigroupes autoprotégées et de sensibilité implicite du Keff aux densités isotopiques
Auteur: Author:	Maxime Dion
Date:	2015
Type:	Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis
Référence: Citation:	Dion, M. (2015). Développement de méthodes de calcul de coefficients de sensibilité des sections efficaces multigroupes autoprotégées et de sensibilité implicite du Keff aux densités isotopiques [Ph.D. thesis, École Polytechnique de Montréal]. PolyPublie. https://publications.polymtl.ca/1685/

Document en libre accès dans PolyPublie
Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: PolyPublie URL:	https://publications.polymtl.ca/1685/
Directeurs de recherche: Advisors:	Guy Marleau
Programme: Program:	Génie nucléaire

Ce fichier a été téléchargé à partir de PolyPublie, le dépôt institutionnel de Polytechnique Montréal
This file has been downloaded from PolyPublie, the institutional repository of Polytechnique Montréal

https://publications.polymtl.ca

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

DÉVELOPPEMENT DE MÉTHODES DE CALCUL DE COEFFICIENTS DE SENSIBILITÉ DES SECTIONS EFFICACES MULTIGROUPES AUTOPROTÉGÉES ET DE SENSIBILITÉ IMPLICITE DU K_{EFF} AUX DENSITÉS ISOTOPIQUES

MAXIME DION
DÉPARTEMENT DE GÉNIE PHYSIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

THÈSE PRÉSENTÉE EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE PHILOSOPHIÆ DOCTOR
(GÉNIE NUCLÉAIRE)
MARS 2015

© Maxime Dion, 2015.

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Cette thèse intitulée :

DÉVELOPPEMENT DE MÉTHODES DE CALCUL DE COEFFICIENTS DE SENSIBILITÉ DES SECTIONS EFFICACES MULTIGROUPES AUTOPROTÉGÉES ET DE SENSIBILITÉ IMPLICITE DU K_{EFF} AUX DENSITÉS ISOTOPIQUES

présentée par : DION Maxime
en vue de l'obtention du diplôme de : Philosophiæ Doctor
a été dûment acceptée par le jury d'examen constitué de :

M. TEYSSEDOU Alberto, Ph. D., président
M. MARLEAU Guy, Ph. D., membre et directeur de recherche
M. KOCLAS Jean, Ph. D., membre
M. BUIJS Adriaan, Ph. D., membre externe

REMERCIEMENTS

Je veux tout d'abord remercier mon superviseur Dr. Guy Marleau. Son aide a été primordiale dans pratiquement toutes les étapes de mes travaux, que ce soit pour le développement de nouveaux outils théoriques ou dans leur implémentation dans le code DRAGON. La réalisation de mes travaux et l'écriture de cette thèse auraient été impossible sans ses connaissances exhaustives de DRAGON et de la physique du réacteur et sans les nombreuses discussions que j'ai eues avec lui. Je tiens aussi à remercier Dr. Alain Hébert, avec qui j'ai aussi eu plusieurs discussions sur les considérations théoriques derrière DRAGON ainsi que sur les détails de sa programmation.

Finalement, je tiens à noter que mes travaux et cette thèse ont été réalisés avec le soutien financier du Fonds de recherche du Québec - Nature et Technologies (FQRNT), ce qui m'a grandement aidé.

RÉSUMÉ

Les codes de calculs déterministes utilisant un schéma de calcul multigroupe, il est nécessaire de procéder à des calculs d'autoprotection des résonances avant de procéder aux calculs de transport neutronique. Ces calculs donnent des sections efficaces multigroupes pour lesquelles les dépressions dans le flux aux énergies des résonances ont été adéquatement prises en compte. Pour chaque système pour lequel on veut faite un calcul de transport, on doit faire un calcul d'autoprotection préalable. Les sections efficaces multigroupes, pour les réactions résonantes, dépendent donc du système à analyser.

Cela implique donc qu'une variation sur un paramètre du système, par exemple sur une densité isotopique, a un impact sur les sections multigroupes résonantes. Il devient alors pertinent de distinguer entre deux types d'effets résultant d'une variation d'un tel paramètre. Le paramètre en question peut apparaître explicitement dans l'équation de transport (par exemple, une densité entre dans cette équation à travers la section macroscopique du mélange correspondant) et ainsi causer une perturbation sur le k_{eff} (ou toute autre quantité obtenue en résolvant l'équation de transport). Il s'agit alors d'un effet explicite.

Mais cette variation d'un paramètre peut aussi affecter les calculs d'autoprotection et perturber les sections efficaces résonantes multigroupes, qui à leur tour peuvent causer une perturbation sur le k_{eff}. C'est ce qu'on appelle un effet implicite. Ces effets implicites vont en général, pour diverses raisons, dans le sens contraire des effets explicites, c'est-à-dire qu'ils contribuent à une variation sur le k_{eff} ayant le signe opposé à celui de la contribution explicite.

Quand une variation sur un paramètre entraîne une perturbation sur un autre paramètre, suite à un calcul de transport par exemple, on peut établir des coefficients de sensibilité entre les deux paramètres. Dans cette thèse, il sera question des sensibilités des sections efficaces autoprotégées et du k_{eff} aux différentes densités isotopiques. Plus précisément, on développe ici des méthodes permettant de calculer les coefficients de sensibilité des sections autoprotégées pour deux modèles d'autoprotection, un par dilution équivalente et un par sous-groupes. Une fois ces coefficients obtenus, on peut les combiner avec les coefficients de sensibilité du k_{eff} aux sections efficaces multigroupes pour obtenir des coefficients de sensibilité implicite du k_{eff}.

Les méthodes de calcul de sensibilité de sections efficaces développées ici se basent sur un calcul des dérivées des probabilités de collision. Les deux modèles d'autoprotection que nous considérons se basent d'une façon ou d'une autre sur un calcul de probabilités de collision.

Ces probabilités sont ensuite utilisées pour résoudre l'équation de ralentissement dont la solution et utilisée indirectement pour obtenir des sections efficaces autoprotégées. Pour les deux modèles d'autoprotection, les coefficients de sensibilité sont obtenus en dérivant analytiquement les équations d'autoprotection pour obtenir des relations qui peuvent être résolues pour les dérivées des sections efficaces par rapport aux densités isotopiques.

On analyse ici plusieurs systèmes : une simple cellule REP avec du MOX comme combustible, un assemblage REP avec de l'UOX comme combustible, une cellule CANDU et une cellule SCWR canadien. Dans tous les cas, on compare les sensibilités obtenues par les méthodes basées sur les dérivées des probabilités de collision avec celles obtenues par un calcul direct qui consiste à simplement faire un calcul de référence et un calcul perturbé puis à comparer les résultats. On montre qu'en général l'accord entre les coefficients obtenus par les différentes méthodes est très bon.

On regarde aussi l'impact du facteur SPH (pour le modèle d'autoprotection par sous-groupes) sur les sensibilités et comment les sensibilités des sections efficaces résonantes varient spatialement quand on considère des "couches" dans les tiges de combustible ou quand on considère des tiges de combustibles à différentes positions dans un assemblage. Pour chaque système, on présente aussi une analyse détaillée des différentes contributions à la sensibilité du k_{eff}. Les composantes implicite et explicite sont calculées et comparées, et on montre comment chacune des réactions résonantes contribuent à la sensibilité implicite.

ABSTRACT

Since deterministic codes use a multigroup scheme, self-shielding calculations are required before one can carry out neutron transport calculations. These calculations are used to obtain multigroup cross sections where flux depressions at resonance energies are properly taken into account. For each system where a transport solution is required, self-shielding calculations must be carried out beforehand. Multigroup cross sections in the resonant energy range are therefore system-dependent quantities.

This means that a variation on a reactor parameter, an isotopic density for example, will have an impact on the resonant self-shielded cross sections. It is therefore relevant to distinguish between two types of effects resulting from a variation on a given parameter. This parameter can explicitly appear in the transport equation (for example, an isotopic density explicitly appears through the macroscopic cross sections of the corresponding mixture) and perturb the multiplication factor k_{eff} (or any other quantity obtained from solving the transport equation). This is called an explicit effect.

This parameter variation can also affect self-shielding calculations and perturb resonant multigroup cross sections, which can themselves cause a variation of k_{eff}. This is what we refer to as an implicit effect. In general, the k_{eff} perturbations resulting from the implicit effect have the opposite sign of those resulting from the explicit effect.

When a variation on a parameter leads to a perturbation on another parameter, following a transport calculation for instance, we can compute sensitivity coefficients between those two parameters. In this thesis, we consider the self-shielded cross sections and k_{eff} sensitivity coefficients to isotopic densities. More precisely, we develop methods to compute the self-shielded cross sections sensitivity to densities arising from two different self-shielding models, an equivalent dilution model and a subgroup model. Once these coefficients are known, they can be combined with the k_{eff} sensitivity coefficients to the multigroup cross sections to obtain the k_{eff} implicit sensitivity coefficients to the isotopic densities.

The self-shielded cross sections sensitivity computation methods developed here are based on the computation of the derivatives of the collision probabilities. Both self-shielding models considered here are based on the computation of the collision probabilities. These probabilities are then used to solve the slowing-down equation for the flux to be used for the evaluation of the self-shielded cross sections. For both self-shielding models, we develop a sensitivity analysis method by analytically differentiating all the relevant equations and then solve for the derivatives of the self-shielded cross sections with respect to the isotopic densities.

Several systems are analyzed in this work : a simple Pressurized Water Reactor (PWR) cell with mixed oxide (MOX) fuel, a PWR assembly with uranium oxide (UOX) fuel, a CANDU cell and a canadian SuperCritical Water Reactor (SCWR) cell. In each case, we compare the sensitivity coefficients resulting from the methods based on the derivatives of the collision probabilities with those obtained from a direct computation of the derivatives of the cross sections, where we carry out one reference calculation and one perturbed calculation and simply compared the cross sections. We show that the agreement between the sensitivity coefficients found using different methods is very good.

We also look at the effect of the SPH factor (for the subgroup self-shielding model) on the sensitivity coefficients and at how the self-shielded cross section sensitivities vary spatially when we consider several "layers" in a fuel pin or when we consider fuel pins at different positions in an assembly. For each system, we also present a detailed analysis of the different contributions to the k_{eff} sensitivity. The explicit and implicit components are computed separately and compared and we show the contributions of all the relevant resonant reactions to the implicit sensitivity.

TABLE DES MATIÈRES

REMERCIEMENTS iii

RÉSUMÉ iv

ABSTRACT vi

TABLE DES MATIÈRES viii

LISTE DES TABLEAUX xi

LISTE DES FIGURES xiii

CHAPITRE 1 Introduction 1

CHAPITRE 2 Traitement stochastique du transport de neutrons 6
2.1 Milieu homogène 6
2.1.1 Capture de neutrons 7
2.1.2 Fission et réactions à plusieurs neutrons 10
2.1.3 Difffusion 12
2.1.4 Résonances en énergie 13
2.2 Milieu hétérogène 14
2.2.1 Combustible et modérateur 15
2.2.2 Conditions frontières 17
2.3 Calcul Monte Carlo 17
2.3.1 Déroulement du processus stochastique 18
2.3.2 Condensation en énergie des sections efficaces 19

CHAPITRE 3 L'équation de transport 20
3.1 Forme différentielle et forme intégrale de l'équation de transport 20
3.1.1 Forme différentielle et considérations générales 20
3.1.2 Forme intégrale de l'équation de transport 22
3.1.3 Formalisme multigroupe 23
3.1.4 Source isotrope et correction de transport 24
3.1.5 Données expérimentales 26
3.2 Équation de transport avec probabilités de collision 27

3.2.1 Calcul des probabilités de collision 29
3.2.2 Normalisation des probabilités de collision 33
3.2.3 Conditions frontières 35
3.2.4 Calcul des dérivées des probabilités de collision 36

CHAPITRE 4 Modèles d'autoprotection 39
4.1 Autoprotection par équivalence de dilution 40
4.1.1 Implémentation dans DRAGON 45
4.2 Autoprotection par méthode des sous-groupes 47
4.2.1 Tables de probabilités physiques 47
4.2.2 Équation de ralentissement pour les sous-groupes 48
4.2.3 Superhomogénéisation (facteur SPH) 50
4.2.4 Implémentation dans DRAGON 51
4.3 Autoprotection spatiale 54

CHAPITRE 5 Sensibilité des sections autoprotégées et sensibilité implicite du k_{eff} . 59
5.1 Coefficients de sensibilité 59
5.2 Sensibilité des sections autoprotégées aux sections efficaces à dilution infinie 60
5.3 Calcul perturbatif des sensibilités explicites 62
5.3.1 Équation adjointe 62
5.3.2 Méthode perturbative 63
5.4 Sensibilité des sections efficaces autoprotégées 65
5.4.1 Autoprotection par dilution équivalente 66
5.4.2 Autoprotection par méthode des sous-groupes 72

CHAPITRE 6 Calculs de référence et différences entre les modèles d'autoprotection et les simulations Monte Carlo 76
6.1 Calculs de référence pour les sensibilités avec DRAGON 76
6.1.1 Références pour la sensibilité des sections efficaces 77
6.1.2 Références pour la sensibilité du k_{eff} 78
6.2 Calculs de référence pour les sensibilités avec Serpent 79
6.2.1 Validité et précision des sensibilités calculées dans Serpent 82
6.3 Comparaison entre les méthodes d'autoprotection et Serpent 87
6.3.1 Comparaison pour le k_{eff} 87
6.3.2 Comparaison pour les sections efficaces autoprotégées 88

CHAPITRE 7 Résultats et discussion 91

7.1 Cellule REP avec combustible MOX 91
7.1.1 Comparaison entre les calculs directs de sensibilité et les méthodes basées sur les dérivées des PC 91
7.1.2 Comparaison avec les sensibilités obtenues avec Serpent 98
7.1.3 Impact du facteur SPH sur les sensibilités 101
7.1.4 Impact de l'autoprotection spatiale sur les sensibilités 103
7.1.5 Sensibilités explicite et implicite du k_{eff} 106
7.2 Réacteur à eau sous pression (REP) 110
7.2.1 Comparaison entre les calculs directs de sensibilité et la méthode basée sur les dérivées des PC 111
7.2.2 Comparaison entre SHI : et SHISBG : 115
7.2.3 Impact de l'autoprotection spatiale sur les sensibilités 116
7.2.4 Sensibilités explicite et implicite du k_{eff} 118
7.3 Cellule CANDU 120
7.3.1 Comparaison entre les calculs directs de sensibilité et la méthode basée sur les dérivées des probabilités de collision. 121
7.3.2 Comparaison entre SHI : et SHISBG : 124
7.3.3 Impact de l'autoprotection spatiale sur les sensibilités 125
7.3.4 Sensibilités explicite et implicite du k_{eff} 126
7.4 Supercritical Water Reactor (SCWR) 130
7.4.1 Comparaison entre les calculs directs de sensibilité et la méthode basée sur les dérivées des probabilités de collision. 130
7.4.2 Comparaison entre les anneaux de combustible 135
7.4.3 Sensibilités explicite et implicite du k_{eff} 137
7.5 Comparaisons entre les différents systèmes 140
7.5.1 Uranium 238 141
7.5.2 Pu239 143
7.6 Temps de calcul 143

CHAPITRE 8 Conclusion 146

RÉFÉRENCES 151

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 7.1 Composition du combustible de la tige de MOX. 91
Tableau 7.2 Comparaison entre les coefficients de sensibilité trouvés pour chacun des modèles d'autoprotection et avec Serpent. 98
Tableau 7.3 Comparaison entre les coefficients de sensibilité trouvés pour deux simulations Serpent avec des nombres différents de neutrons. 99
Tableau 7.4 Différents coefficients de sensibilité pour une tige de MOX, calculs directs (valeurs de référence). 106
Tableau 7.5 Différents coefficients de sensibilité pour une tige de MOX, calculs basés sur un traitement analytique de l'équation de ralentissement basé sur les dérivées des PC. 107
Tableau 7.6 Contributions des différentes réactions à la sensibilité implicite du k_{eff} à la densité d'hydrogène, pour les deux modèles d'autoprotection. . . 109
Tableau 7.7 Contributions des différentes réactions à la sensibilité implicite du k_{eff} à la densité d'U238, pour les deux modèles d'autoprotection. 109
Tableau 7.8 Composition du combustible du REP. 110
Tableau 7.9 Différents coefficients de sensibilité pour un assemblage REP, calculs directs (valeurs de référence). 118
Tableau 7.10 Différents coefficients de sensibilité pour un assemblage REP, calculés avec un traitement analytique de l'équation de ralentissement basé sur les dérivées des probabilités de collision. 118
Tableau 7.11 Contributions des différentes réactions à la sensibilité implicite du k_{eff} à la densité d'hydrogène, pour les deux modèles d'autoprotection. . . 119
Tableau 7.12 Contributions des différentes réactions à la sensibilité implicite du k_{eff} à la densité d'U238, pour les deux modèles d'autoprotection. 119
Tableau 7.13 Composition du combustible du CANDU. 120
Tableau 7.14 Différents coefficients de sensibilité pour une cellule CANDU, calculs directs (valeurs de référence). 127
Tableau 7.15 Différents coefficients de sensibilité pour une cellule CANDU, calculs basés sur traitement analytique de l'équation de ralentissement basé sur les dérivées des probabilités de collision. 128
Tableau 7.16 Contributions des différentes réactions à la sensibilité implicite du k_{eff} à la densité de deuterium, pour les deux modèles d'autoprotection. . . 129

Tableau 7.17 Contributions des différentes réactions à la sensibilité implicite du k_{eff} à la densité d'U238, pour les deux modèles d'autoprotection. 129
Tableau 7.18 Composition du combustible du SCWR. 131
Tableau 7.19 Différents coefficients de sensibilité, à la densité d'isotopes légers, pour une cellule SCWR, calculs directs (valeurs de référence). 138
Tableau 7.20 Différents coefficients de sensibilité, à la densité d'isotopes lourds, pour une cellule SCWR, calculs directs (valeurs de référence). 138
Tableau 7.21 Différents coefficients de sensibilité pour une cellule SCWR, calculs basés sur le traitement analytique de l'équation de ralentissement basé sur les dérivées des probabilités de collision. 139
Tableau 7.22 Contributions des différentes réactions à la sensibilité implicite du k_{eff} à la densité d'hydrogène, pour les deux modèles d'autoprotection. . . 140
Tableau 7.23 Contributions des différentes réactions à la sensibilité implicite du k_{eff} à la densité de Th232 dans les tiges de l'anneau intérieur, pour les deux modèles d'autoprotection. 140
Tableau 7.24 Contributions des différentes réactions à la sensibilité implicite du k_{eff} à la densité de Th232 dans les tiges de l'anneau extérieur, pour les deux modèles d'autoprotection. 141
Tableau 7.25 Comparaison entre les temps de calcul pour les différentes méthodes de calcul de coefficients de sensibilité, pour différents systèmes. Tous les temps sont en secondes, et les calculs sont fait pour la sensibilité à la densité de l'isotope léger. 144

LISTE DES FIGURES

Figure 2.1 Section efficace de capture radiative du xenon 135. 8
Figure 2.2 Section efficace de capture radiative et de capture suivie de l'émission d'une particule α, pour l'U238. 9
Figure 2.3 Section efficace de fission du plutonium 239, dans la plage d'énergie contenant des résonances. 10
Figure 2.4 Spectre de fission pour le Pu239. 12
Figure 2.5 Sections efficaces de fission et de capture radiative de l'U235 et de capture radiative de l'U238, dans la plage d'énergie contenant des résonances. 15
Figure 4.1 Schéma représentant le déroulement de l'autoprotection par méthode de dilution équivalente telle que programmée dans DRAGON 3. . . . 46
Figure 4.2 Schéma représentant le déroulement de l'autoprotection par méthode de sous-groupes telle que programmée dans DRAGON 3. 54
Figure 4.3 Structure fine utilisée pour pondérer les sections efficaces, en fonction de la position dans une tige de combustible. Trois sous-groupes du groupe 60 sont présentés, en utilisant les valeurs de tables de probabilités pour l'U238. 56
Figure 4.4 Ratio entre la structure fine perturbée et la structure fine de référence (perturbation sur la densité d'hydrogène dans le modérateur) pour plusieurs positions dans la tige de combustible, pour un sous-groupe dans le groupe 57, en utilisant les valeurs de tables de probabilités pour l'U238. 58
Figure 6.1 Différence entre le k_{eff} de référence et celui obtenu pour plusieurs variations relatives sur la densité de l'hydrogène dans une cellule de REP, dans le contexte d'un calcul de sensibilité implicite, pour les modules SHI : (à gauche) et SHISBG : (à droite). 80
Figure 6.2 Écarts types divisés par la moyenne pour la sensibilité des sections efficaces de capture radiative, pour l'U238, dans une tige de MOX. Variation de 4% sur la densité. Les barres en rouge indiquent un ratio inférieur à 5%. 83
Figure 6.3 Écarts types divisés par la moyenne pour la sensibilité des sections efficaces de capture radiative, pour l'U238, dans une tige de MOX. Variation de 8% sur la densité. Les barres en rouge indique un ratio inférieur à 5%. 84

Figure 6.4 Comparaison entre les perturbations attendues (basées sur un modèle d'autoprotection par sous-groupes) et les perturbations résultant des incertitudes statistiques fournies par Serpent, pour une variation sur la densité de 4% (à gauche) et 8% (à droite). 85
Figure 6.5 Ratio entre les perturbations résultant des incertitudes statistiques fournies par Serpent et les perturbations attendues (basées sur un modèle d'autoprotection par sous-groupes). 85
Figure 6.6 Comparaison entre les dérivées des sections efficaces de capture radiative, pour une tige de MOX, pour l'U238, en utilisant des variations de densité de 4% et 8%. 86
Figure 6.7 Comparaison entre les dérivées des sections efficaces de capture radiative, pour l'U238, en utilisant une variation de densité de 4%, pour deux simulations avec un nombre différent de neutrons dans un tige MOX REP. 87
Figure 6.8 Comparaison entre les corrections apportées par les modèles d'autoprotection (ou la condensation en énergie avec Serpent). Calculées pour une tige de MOX, pour les sections efficaces de capture radiative de l'U238. 89
Figure 6.9 Différences entre les corrections d'autoprotection d'un modèle de sous-groupes et celles d'un modèle d'équivalence de dilution, divisées par les sections efficaces non autoprotégées. 89
Figure 7.1 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative (à gauche) et la fission (à droite) du Pu239, à la densité d'hydrogène dans le modérateur. Comparaison entre la méthode de calcul direct et les méthodes DFCD et TADPC. 92
Figure 7.2 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative de l'U238 (à gauche) à la densité d'hydrogène dans le modérateur. Différences relatives entre le calcul direct et les méthodes DFCD et TADPC (à droite). 93
Figure 7.3 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative de l'U238 (à gauche) à la densité d'U238. Différences relatives entre le calcul direct et les méthodes DFCD et TADPC (à droite). 95
Figure 7.4 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative (à gauche) et la fission (à droite) du Pu239, à la densité d'hydrogène dans le modérateur. Comparaison entre la méthode de calcul direct et la méthode dérivée, pour un modèle d'autoprotection de sous-groupes. 96

Figure 7.5 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative de l'U238 (à gauche) à la densité d'hydrogène dans le modérateur. Différences relatives entre le calcul direct et la méthode TADPC pour le module SHISBG : (à droite). 97
Figure 7.6 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative de l'U238 (à gauche) à la densité d'U238. Différences relatives entre le calcul direct et la méthode TADPC pour le module SHISBG : (à droite). 97
Figure 7.7 Différence relative entre les sensibilités calculées avec SHI : et SHISBG :, pour la capture radiative de l'U238. Comme pour toutes les figures de différences relatives, seulement les différences pour des coefficients de sensibilité d'au moins 0.02 sont présentées. Les sensibilités calculées par SHISBG : sont utilisées comme référence dans le calcul de la différence relative. 100
Figure 7.8 Comparaison entre les coefficients de sensitivité de l'U238 à la densité d'hydrogène, avec et sans facteur SPH (à gauche). Différence relative entre les sensibilités avec et sans facteur SPH (à droite). 101
Figure 7.9 Comparaison entre les coefficients de sensibilité de l'U238 à la densité de l'U238, avec et sans facteur SPH (à gauche). Différence relative entre les sensibilités avec et sans facteur SPH (à droite). 102
Figure 7.10 Sensibilité des sections efficaces de capture radiative de l'U238 à la densité d'hydrogène, pour différentes positions dans la tige ainsi que pour une moyenne sur la tige. 103
Figure 7.11 Sensibilité des sections efficaces de capture radiative de l'U238 à la densité d'U238, pour différentes positions dans la tige ainsi que pour une moyenne sur la tige. 104
Figure 7.12 Sections efficaces de capture radiative de l'U238, pour différentes positions dans la tige. 105
Figure 7.13 Un assemblage REP. Les crayons en gris clair correspondent au combustible et ceux en gris foncé aux trous d'eau. 111
Figure 7.14 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative (à gauche) et la fission (à droite) de l'U235, à la densité d'hydrogène dans le modérateur. Comparaison entre la méthode de calcul direct et la méthode TADPC. 112
Figure 7.15 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative de l'U238 (à gauche) à la densité d'hydrogène dans le modérateur. Différences relatives entre le calcul direct et la méthode TADPC (à droite). 113

Figure 7.16 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative de l'U238 (à gauche) à la densité d'U238. Différences relatives entre le calcul direct et la méthode dérivée dans ce travail pour le module SHI : (à droite). . . . 113
Figure 7.17 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative (à gauche) et la fission (à droite) de l'U235, à la densité d'hydrogène dans le modérateur. Comparaison entre la méthode de calcul direct et la méthode TADPC, pour le module SHISBG :. 114
Figure 7.18 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative de l'U238 (à gauche) à la densité d'hydrogène dans le modérateur. Différences relatives entre le calcul direct et la méthode TADPC, pour le module SHISBG : (à droite). 115
Figure 7.19 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative de l'U238 (à gauche) à la densité d'U238. Différences relatives entre le calcul direct et la méthode TADPC pour le module SHISBG : (à droite). 115
Figure 7.20 Comparaison entre les coefficients de sensibilité pour la capture de l'U238, à la densité d'hydrogène (à gauche) et à la densité d'U238 (à droite), pour les deux modèles d'autoprotection. 116
Figure 7.21 Comparaison entre les coefficients de sensibilité pour la capture de l'U238, à la densité d'hydrogène (à gauche) et à la densité d'U238 (à droite), pour une tige de combustible à deux positions différentes. . . 117
Figure 7.22 Une cellule CANDU. 120
Figure 7.23 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative de l'U238 (à gauche) à la densité de deuterium dans le caloporteur. Différences relatives entre le calcul direct et la méthode TADPC (à droite). 122
Figure 7.24 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative de l'U238 (à gauche) à la densité d'U238. Différences relatives entre le calcul direct et la méthode TADPC pour le module SHI : (à droite). 122
Figure 7.25 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative de l'U238 (à gauche) à la densité de deuterium dans le caloporteur. Différences relatives entre le calcul direct et la méthode TADPC, pour le module SHISBG : (à droite). 123
Figure 7.26 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative de l'U238 (à gauche) à la densité d'U238. Différences relatives entre le calcul direct et la méthode TADPC pour le module SHISBG : (à droite). 124

Figure 7.27 Comparaison entre les coefficients de sensibilité pour la capture de l'U238, à la densité de deuterium (à gauche) et à la densité d'U238 (à droite). 124
Figure 7.28 Comparaison entre les coefficients de sensibilité pour la capture de l'U238, à la densité de deuterium (à gauche) et à la densité d'U238 (à droite), pour différentes positions dans la tige centrale ainsi qu'une moyenne sur la tige au complet. 125
Figure 7.29 Comparaison entre les coefficients de sensibilité pour la capture de l'U238, à la densité de deuterium (à gauche) et à la densité d'U238 (à droite), pour la périphérie d'une tige dans l'anneau extérieur et la même région pour la tige centrale. 126
Figure 7.30 Une cellule SCWR. 130
Figure 7.31 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative (à gauche) et la fission (à droite) du Pu239, à la densité d'hydrogène dans le caloporteur. Comparaison entre la méthode de calcul direct et la méthode dérivée, pour SHI :. 132
Figure 7.32 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative du Th232 (à gauche) à la densité d'hydrogène dans le caloporteur. Différences relatives entre le calcul direct et la méthode TADPC (à droite). 132
Figure 7.33 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative du Th232 (à gauche) à la densité du Th232. Différences relatives entre le calcul direct et la méthode TADPC (à droite). 133
Figure 7.34 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative (à gauche) et la fission (à droite) du Pu239, à la densité d'hydrogène dans le caloporteur. Comparaison entre la méthode de calcul direct et la méthode TADPC, pour SHISBG :. 133
Figure 7.35 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative du Th232 (à gauche) à la densité d'hydrogène. Différences relatives entre le calcul direct et la méthode TADPC, pour le module SHISBG : (à droite). 134
Figure 7.36 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative du Th232 (à gauche) à la densité du Th232. Différences relatives entre le calcul direct et la méthode TADPC, pour le module SHISBG : (à droite). 135
Figure 7.37 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative du Th232 à la densité d'hydrogène, pour les deux anneaux contenant les tiges de combustible, pour le module SHI : (à gauche) et le module SHISBG : (à droite). 136

Figure 7.38 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative du Th232 à la densité de Th232 dans les tiges de combustible de l'anneau intérieur, pour les deux anneaux contenant les tiges de combustible, pour le module SHI : (à gauche) et le module SHISBG : (à droite). 137
Figure 7.39 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative de l'U238 à la densité d'hydrogène ou de deuterium, pour différents systèmes, pour le module SHI : (à gauche) et le module SHISBG : (à droite). 142
Figure 7.40 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative de l'U238 à la densité d'U238, pour différents systèmes, pour le module SHI : (à gauche) et le module SHISBG : (à droite). 143
Figure 7.41 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative du Pu239 à la densité d'hydrogène, pour différents systèmes, pour le module SHI : (à gauche) et le module SHISBG : (à droite). 144

CHAPITRE 1 Introduction

En physique des réacteurs, les différents calculs visent, de manière très générale, à déterminer les propriétés de la population de neutrons dans un système donné. Ces calculs dépendent de la géométrie du système en question ainsi que des densités isotopiques des noyaux présents dans le système. Pour une population de neutrons donnée, caractérisée spatialement et en énergie (et possiblement à un temps t donné), on peut déterminer des quantités dites macroscopiques. On peut par exemple moyenner les propriétés qui caractérisent les interactions matière-neutrons sur l'espace et en énergie, en utilisant les distributions énergétique et spatiale des neutrons. On peut aussi s'intéresser à la distribution de puissance dans le système. La fission libère des quantités importantes d'énergie dans le système, dont la distribution spatiale est importante. Une partie de cette énergie peut être extraite pour produire du travail, et au final toute l'énergie produite doit être extraite d'une façon ou d'une autre pour contrôler la température du système, une autre quantité importante dont on peut estimer la distribution en utilisant la thermohydraulique.

Dans ce travail, on se concentre sur des calculs à l'équilibre, c'est-à-dire pour lesquels la distribution de neutrons est constante dans le temps. De plus, il sera ici principalement question du calcul des propriétés concernant les interactions matière-neutrons et de comment celles-ci varient spatialement et en énergie en fonction des propriétés du système. Il sera aussi question du facteur de multiplication des neutrons qui, pour un système donné, est une indication de l'équilibre entre la production et la perte de neutrons.

Deux approches principales peuvent être considérées pour évaluer la distribution en énergie et espace de la population de neutrons dans un réacteur. On parlera alors de calculs déterministes ou de calculs probabilistes (ou stochastiques). Un calcul stochastique consiste à littéralement simuler une quantité importante de neutrons et à enregistrer leur "histoire" dans le système considéré. On peut ensuite établir des distributions spatiales et en énergie en considérant tous les neutrons. Les calculs déterministes consistent plutôt à résoudre un système d'équations qu'on obtient en discrétisant *l'équation de transport*. Cette équation est basée sur un bilan neutronique, qui implique les fuites de neutrons ainsi que les diverses réactions nucléaires que peuvent subir ces neutrons dans un réacteur nucléaire.

Les calculs de transport sont en général faits sur une géométrie relativement petite et souvent très détaillée, car faire de tels calculs sur un réacteur nucléaire au complet prend beaucoup de temps et de ressources informatiques. On choisit donc en général de faire des calculs de transport sur une cellule qui se répète dans le réacteur. Si cette géométrie se répète à l'infini,

alors le calcul sur la cellule devrait donner les propriétés de l'assemblage (aux dimensions infinies) au complet. Bien sûr, ce n'est pas le cas en réalité et un second calcul sur le réacteur au complet est nécessaire. On utilise alors les propriétés générées par un calcul de cellule dans un calcul de réacteur en théorie de la diffusion (une version simplifiée de l'équation de transport) où on suppose que les neutrons se déplacent de régions où leur densité est élevée vers celles où la densité est plus faible. Cette approximation est valable à l'échelle d'un réacteur au complet, avec des cellules homogénéisées, mais pas sur un assemblage ou sur une cellule individuelle.

Un détail important, particulièrement pour cette thèse, doit ici être précisé. Les données utilisées en entrée dans un calcul de transport déterministe ne sont pas exactement les mêmes que celles requises lors d'un calcul stochastique. En effet, dans un calcul déterministe, les données ne sont pas directement traîtées comme des fonctions continues en énergie. Comme expliqué plus haut, les calculs déterministes résultent d'une discrétisation en énergie de l'équation de transport. Pour procéder de cette façon, les propriétés nucléaires doivent être elles aussi discrétisées, c'est-à-dire qu'on définit des groupes d'énergie où la valeur de chacune des propriétés est constante. Cette détermination des quantités dites *multigroupes* est un point central pour cette thèse.

Pour les calculs probabilistes, on utilise généralement un traitement continu en énergie des interactions neutroniques. Précisons toutefois que même pour un traîtement continu en énergie, les données utilisées pour un calcul stochastique ne sont pas exactement des données tirées directement de mesures expérimentales. La température des mélanges dans le système doit être considérée pour faire certains ajustements aux propriétés des noyaux présents dans le système (effet Doppler).

Pour les isotopes légers, le comportement des propriétés nucléaires en fonction de l'énergie est assez simple. Les données nucléaires peuvent être traitées préalablement aux calculs de transport, et les mêmes propriétés condensées en énergie peuvent être utilisées pour différentes géométries. Pour les noyaux plus lourds, un aspect des propriétés nucléaires peut par contre compliquer la situation. Pour des raisons quantiques, les propriétés de ces noyaux présentent des *résonances*, c'est-à-dire des pics très prononcés, pour certaines énergies des neutrons. Tous les isotopes, excepté l'hydrogène, présentent de telles résonances, mais pour les isotopes légers celles-ci sont faciles à prendre en compte et ne jouent pas un rôle très important dans la condensation en énergie.

Pour les isotopes lourds par contre, la situation est significativement plus compliquée. Ceux-ci présentent une quantité importante de résonances dont l'amplitude peut être très grande. De plus, à certaines énergies, le nombre de résonances est tellement important que celles-ci ne

peuvent pas vraiment être séparées les unes des autres expérimentalement. Ces résonances font en sorte que les calculs de propriétés multigroupes demandent de prêter une attention particulière aux distributions neutroniques qui caractérisent un système donné. En fait, pour ces isotopes (appelés isotopes *résonants*), les propriétés multigroupes vont dépendre du système pour lequel on veut faire un calcul. Ainsi, avant chaque calcul de transport, les données nucléaires multigroupes pour les isotopes résonants doivent être ré-évaluées.

Sans entrer dans les détails pour l'instant, le calcul des propriétés multigroupes, qu'on appelle calcul *d'autoprotection des résonances*, se basent sur un calcul approximatif de la distribution en énergie et en espace des neutrons à l'équilibre. Cette distribution approximative est utilisée pour pondérer les propriétés continues en énergie pour ainsi obtenir des valeurs moyennes de ces propriétés dans chacun des groupes d'énergie. Une bonne méthode d'autoprotection des résonances doit donc prendre en compte les effets des résonances sur une distribution neutronique approximative pour pouvoir obtenir une valeur fiable et représentative des propriétés multigroupes. Idéalement, une telle méthode devrait pouvoir calculer des propriétés multigroupes qui, lorsqu'utilisées dans un calcul de transport multigroupe, donne des résultats très similaires à ceux obtenus par un calcul continu en énergie. Plusieurs méthodes existent pour faire de tels calculs. On considère dans ce travail deux méthodes différentes : une méthode par équivalence de dilution et une méthode des sous-groupes.

Si on désire étudier l'effet de varier un paramètre de système, par exemple une densité isotopique, sur la distribution de flux ou l'écart du système de l'équilibre (représenté par le facteur de multiplication), on doit alors prendre en compte deux types différents de perturbations résultant de la variation. Le système d'équations qu'on obtient en discrétisant l'équation de transport et qu'on doit résoudre sera légèrement différent puisque les densités des isotopes apparaissent directement dans ce système d'équations. De plus, il faut réaliser que les données nucléaires autoprotégées seront légèrement différentes, puisque la variation initiale aura aussi un impact sur les calculs d'autoprotection, effectués avant le calcul de transport. Si on considère au final l'impact de la perturbation sur le facteur de multiplication des neutrons, on devra alors prendre en compte les effets *explicites* et les effets *implicites* (causés par les calculs d'autoprotection).

Ces deux effets ont été étudiés dans plusieurs publications depuis les années 2000. Une méthode de calcul de sensibilité implicite basée sur un modèle d'équivalence de dilution relativement simple a été développée (Williams et Broadhead (2001)) et est généralisée dans ce travail pour une méthode plus complexe. D'autres travaux concernant les sensibilités de sections efficaces pour des géométries assez complexes ont aussi été présentés (Williams (2007)) pour analyser l'impact des effets implicites sur les incertitudes. Une thèse de maîtrise récente (Laville (2011))

traite aussi du sujet par rapport aux incertitudes aux données nucléaires fondamentales. De manière plus générale, l'analyse des incertitudes dans les calculs de transport et sur les sections efficaces peut être fait avec le logiciel TSUNAMI (Rearden *et al.* (2005)), avec les fonctionnalités de SCALE (SCALE (2009)). Un benchmark d'évaluation de sensibilité (Ivanova *et al.* (2012)) a aussi récemment été défini, les analyses de sensibilités jouant un rôle important dans les analyses de sécurité de réacteurs nucléaires.

Plus récemment, des travaux concernant des expressions purement analytiques de coefficients de sensibilité, spécifiquement aux densités isotopiques et pour des géométries relativement simples, ont aussi été présentés (Favorite et Armstrong (2013)). Les sensibilités associées au modèle d'autoprotection programmé dans DRAGON 3.06 ont été étudiées dans de récentes publications (Dion et Marleau (2013, 2015)), pour plusieurs systèmes différents. Les sensibilités des sections efficaces ont aussi été étudiées pour un modèle d'autoprotecion par sous-groupes, tel que celui programmé dans DRAGON 4 (Dion et Marleau (2014)). L'utilisation de codes Monte Carlo est aussi considérée pour procéder à des analyses de sensibilité et certains travaux ont déjà été publiés (Kiedrowski et Brown (2013); Park *et al.* (2014); Wu *et al.* (2012); Perfetti *et al.* (2012)). Finalement, des travaux sont aussi en cours pour utiliser des calculs Monte Carlo continus en énergie avec TSUNAMI-3D dans le but d'obtenir les sensibilités de diverses réponses neutroniques (Perfetti et Rearden (2014); Rearden *et al.* (2014)).

Cette thèse est organisée de la façon suivante. Le chapitre 2 explique les concepts importants de la physique du réacteur avec une approche stochastique où on considère ce qui se passe lorsqu'un neutron se déplace dans un réacteur. Le chapitre 3 traite de l'équation de transport sous ses différentes formes, en mettant l'accent sur la forme des probabilités de collision, qui est celle utilisée pour les calculs de cette thèse. La méthode des probabilités de collision consiste essentiellement à établir les probabilités qu'un neutron partant d'un élément de volume ait une interaction dans un autre élément de volume, sans interaction préalable, pour pouvoir résoudre l'équation de transport sous sa forme intégrale (plus de détails sur les formes de l'équation de transport seront donnés dans ce chapitre).

Certains modèles d'autoprotection seront ensuite expliqués dans le chapitre 4 et il sera aussi question de leur implémentation dans le code de transport DRAGON. Le chapitre 5 porte sur les méthodes développées pour cette thèse qui permettent de calculer les *coefficients de sensibilité* associés aux calculs d'autoprotection, une quantité utilisée pour représenter le comportement des données autoprotégées en fonction de la densité de certains isotopes. Le chapitre 6 explique les différences entre les modèles d'autoprotection et les résultats équivalents obtenus par un calcul stochastique ainsi que le calcul des sensibilités de référence.

Les résultats de plusieurs calculs sont ensuite présentés et discutés dans le chapitre 7, et la conclusion est présentée au chapitre 8.

CHAPITRE 2 Traitement stochastique du transport de neutrons

Nous commencerons par expliquer ce qui se passe physiquement dans un réacteur nucléaire en introduisant le transport de neutrons comme un processus stochastique. Nous présenterons aussi dans ce chapitre le concept de section efficace, dont la nature probabiliste se prête bien au traitement stochastique. Ce chapitre vise donc à établir les quantités de base utilisées tant dans le formalisme stochastique que dans le formalisme déterministe, ainsi qu'à aider le lecteur à comprendre comment les équations déterministes, présentées dans les chapitres suivants, sont reliées aux phénomènes physiques d'intérêt pour le fonctionnement d'un réacteur nucléaire.

Pour qu'un réacteur nucléaire fonctionne, il doit être à l'équilibre, c'est-à-dire qu'il y a autant de neutrons qui quittent le système que de neutrons générés par le système. Il y a deux façons par lesquelles un neutron peut quitter le système : par fuite et par absorption. Une fuite implique qu'un neutron atteint les limites du système, au delà desquelles il n'y aura plus d'opportunités d'y retourner. L'absorption implique qu'un noyau capture un neutron, qui quitte alors aussi le système. Pour la génération de neutron, il faut considérer la fission (et certaines autres réactions qui résultent en la production de neutrons). Au final, l'équilibre (ou le déséquilibre) entre les pertes et la production de neutrons caractérise la criticité du système, c'est-à-dire sa capacité à maintenir une densité neutronique constante.

2.1 Milieu homogène

Considérons tout d'abord un milieu contenant un mélange parfaitement homogène d'isotopes. Chaque isotope i est présent avec une certaine densité N^i (en atomes par cm^{-3}). Supposons maintenant qu'un neutron se déplace dans ce milieu. Dans le contexte d'un réacteur nucléaire, il y a bien sûr plusieurs neutrons, mais pour les densités neutroniques typiquement retrouvées dans les réacteurs (de l'ordre de 10^{15} neutrons par cm^3) les interactions neutron-neutron peuvent être négligées compte tenu de la densité beaucoup plus importante des noyaux (de l'ordre de 10^{22} noyaux par cm^3). On considère donc uniquement les interactions entre les neutrons et les noyaux présents dans le milieu. On néglige aussi les effets relativistes (les neutrons n'étant pas assez rapides) et on suppose que tous les noyaux présents dans le système sont en équilibre thermique avec le milieu (mais pas les neutrons, qui peuvent posséder des énergies très variables).

Les neutrons étant des particules de charge nulle, ils voyagent en ligne droite entre deux

interactions. Pour un neutron voyageant à une certaine vitesse et dans une certaine direction dans notre milieu homogène, la première quantité qu'il faut introduire est la probabilité que le neutron subisse une interaction avec un noyaux. Il est logique de supposer que cette probabilité soit proportionnelle à la densité de noyaux présents dans le milieu. Pour un système contenant un seul isotope avec une densité de N, si on considère un faisceau de neutrons parallèles et de même vitesse, caractérisé par son intensité I en $n \cdot s^{-1} \cdot cm^{-2}$ (n représente un nombre de neutrons), on aura alors l'expression suivante pour le taux de réactions dans un volume de longueur ds et d'aire équivalente à celle du faisceau,

$$dR = \sigma N I ds \tag{2.1}$$

où dR représente un nombre de réactions par seconde par unité d'aire ($s^{-1}cm^{-2}$). Dans le cas où M isotopes sont mélangés ensemble, le terme σN sera remplacé par

$$\Sigma = \sum_{i=1}^{M} \sigma^i N^i \tag{2.2}$$

où Σ est donné en cm^{-1}. Comme les termes σ ont une aire comme unité, nous les appellerons des sections efficaces. Pour les différencier de Σ nous appellerons les σ des sections efficaces *microcsopiques* et les Σ des sections efficaces *macroscopiques*. Les sections macroscopiques peuvent donc être interprétées comme des probabilités d'interaction par unité de distance parcourue. Ici, nous avons considéré toutes les interactions possibles entre les neutrons et les noyaux. Σ correspond donc à une section efficace *totale*, représentant l'ensemble de toutes les réactions. Il est toutefois important pour comprendre le comportement d'un réacteur nucléaire de faire la distinction entre trois types d'interaction : la capture de neutrons, la fission et la diffusion. Notons qu'il existe des réactions autres que la fission qui peuvent produire des neutrons. Celles-ci sont plutôt rares et seront discutées dans la section sur la fission.

Dans un réacteur nucléaire, les neutrons n'ont bien sûr pas tous la même énergie. Ainsi, les sections efficaces sont en réalité fonction de l'énergie du neutron incident. On écrira donc $\sigma(E)$ et $\Sigma(E)$, où E représente l'énergie du neutron.

2.1.1 Capture de neutrons

Nous présentons ici le premier type d'interaction entre un neutron et un noyau, la capture de neutrons, qui résulte en un neutron qui "quitte" le système. Dans ce type d'interaction, un noyau absorbe un neutron, et ne réémet pas de neutron. Le noyau final (après l'interaction) ne correspond donc pas au même isotope qu'avant la réaction. Notons toutefois que même si

un neutron n'est pas émis après la capture, d'autres particules peuvent être émises, donnant lieu à plusieurs types de réactions de capture. Notons aussi que dans cette section nous ne parlons pas de cas où le résultat de l'absorption est un noyau instable qui se scinde en un certain nombre de "fragments", un phénomène dont il sera question dans la section suivante sur la fission.

Tout d'abord un noyau peut simplement absorber un neutron et le garder. C'est le cas, par exemple, pour le xenon 135 (^{135}Xe) qui absorbe un neutron et devient du xenon 136. Typiquement, l'excédant d'énergie sera émis sous forme de photon. On parlera alors de capture radiative, où la désexcitation ne change pas la nature de l'isotope. Cette réaction est en général notée (n, γ), et la section microscopique est identifiée par $\sigma_{n,\gamma}(E)$. C'est de loin le type de capture le plus fréquent, sauf pour les noyaux fissiles. La section efficace microscopique de capture radiative du Xe135 est montrée à la figure 2.1.

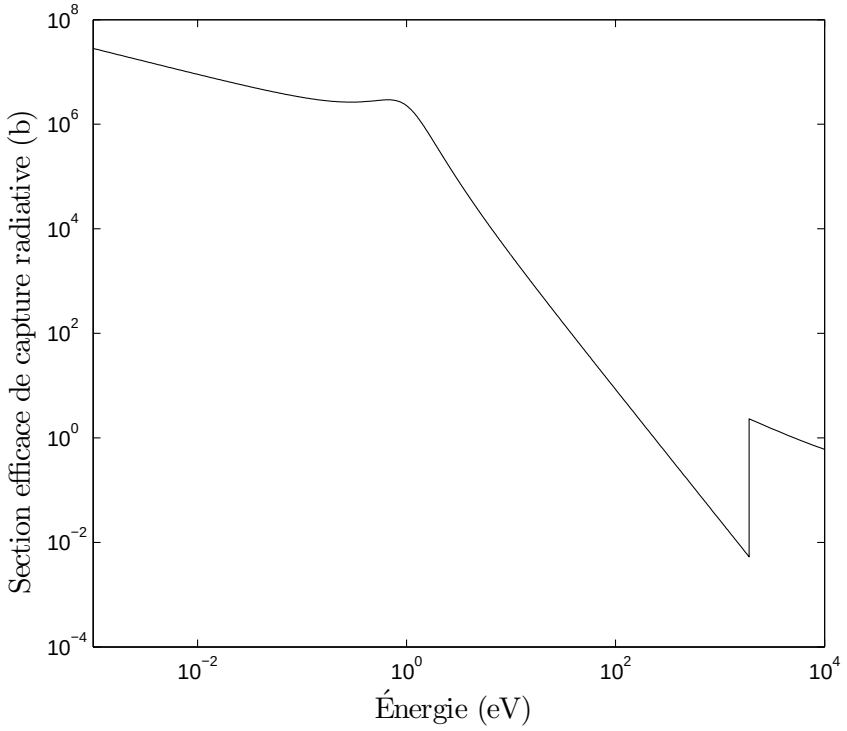

Figure 2.1 Section efficace de capture radiative du xenon 135.

Il est aussi possible que le noyau final émette soit un proton, soit une particule α (deux neutrons et deux protons). Si une particule alpha est émise après la capture d'un isotope X avec $Z = z$ et $A = a$, alors la réaction sera décrite par

$$X_z^a + n \rightarrow Y_{z-2}^{a-3} + \alpha_2^4 \tag{2.3}$$

et la réaction sera représentée par $\sigma_{n,\alpha}$. Alternativement, si un proton est émis, alors on aura

$$X_z^a + n \rightarrow Y_{z-1}^a + p, \tag{2.4}$$

ce qui est représenté par la section efficace $\sigma_{n,p}$. Ces deux types de réaction sont rares comparées à la capture radiative, comme on peut le voir sur la figure 2.2 où on compare la capture radiative de l'U238 avec la réaction (n, α). Précisons que quand une telle interaction a lieu, on ne suit pas le proton ou la particule α. Toute l'énergie apportée par le neutron initial est considérée comme étant déposée dans le milieu. Cette approximation est justifiée par le fait que les protons et particules α sont des particules chargées (et les α sont des particules plus lourdes que les neutrons), ce qui fait en sorte que celles-ci interagissent fortement avec la matière et perdent leur énergie rapidement. Il peut être intéressant dans certains cas de considérer le parcours des protons et des particules α avec plus de détails, mais pour les travaux présentés ici ce n'est pas important.

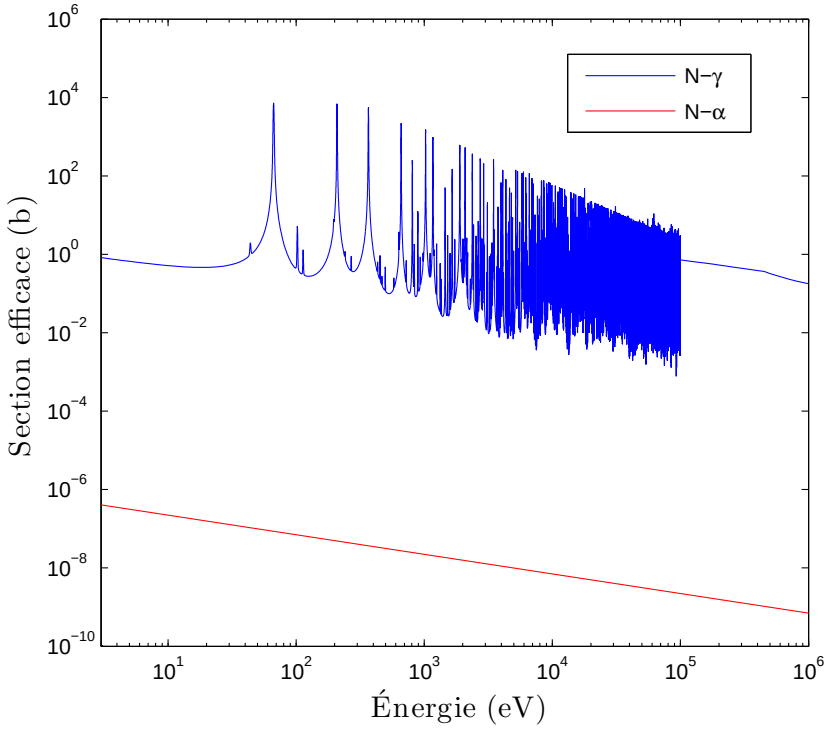

Figure 2.2 Section efficace de capture radiative et de capture suivie de l'émission d'une particule α, pour l'U238.

2.1.2 Fission et réactions à plusieurs neutrons

Pour que la population de neutrons dans un système puisse rester constante, il faut des réactions qui produisent des neutrons pour compenser la perte de neutrons par capture et par fuite. La réaction produisant un excès de neutrons la plus fréquente correspond à une absorption d'un neutron par un noyau, qui se fissionne par la suite en fragments de noyaux (formant ainsi de nouveaux isotopes) et émet un certain nombre de neutrons, en général 2 ou 3, et des photons (avec une énergie pour laquelle on classifie en général les photons de rayonnement gamma). Après la fission, les produits de fission (les fragments du noyau initial) peuvent se désintégrer et émettre des anti-neutrinos ($\bar{\nu}$) ainsi que des particules β^- (des électrons) et du rayonnement gamma, et possiblement des neutrons (les neutrons retardés). La section efficace correspondante est identifiée par $\sigma_f(E)$. La section efficace de fission du Pu239 est montrée à la figure 2.3.

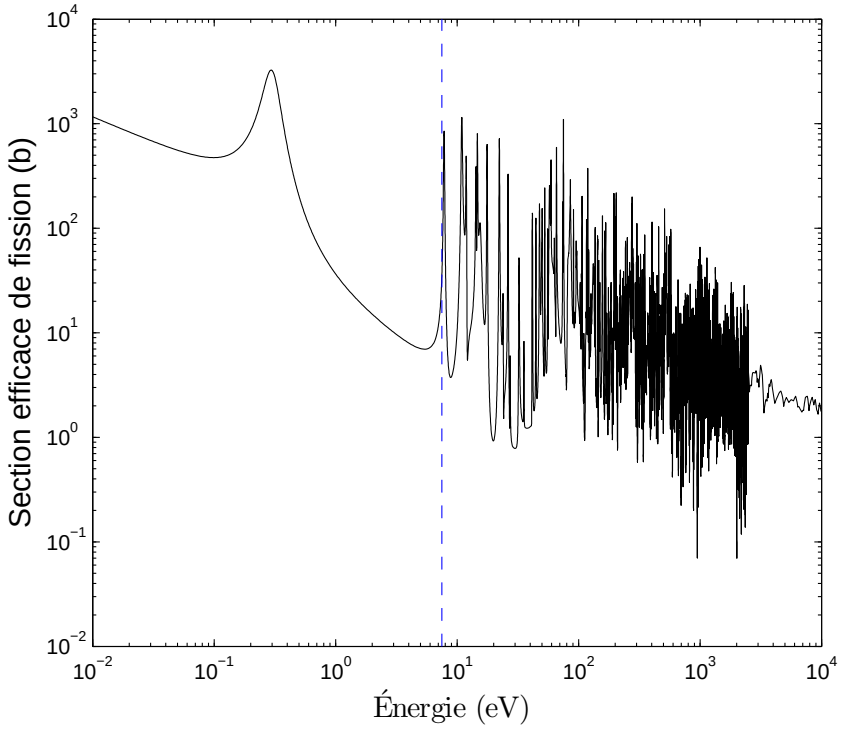

Figure 2.3 Section efficace de fission du plutonium 239, dans la plage d'énergie contenant des résonances.

Il est important de noter que lors d'une fission, les neutrons ne sont pas nécessairement émis instantanément. En fait, une certaine fraction des neutrons (typiquement de l'ordre de 1 %) sont émis plusieurs secondes (parfois dizaines de secondes) après la fission. De tels neutrons sont appelés neutrons retardés. Essentiellement, un fragment de fission peut garder

temporairement une partie de l'énergie relâchée par la fission, étant ainsi dans un état excité instable. Après un certain temps, le fragment se désexcite en émettant un neutron, produisant ainsi un neutron "en retard". Pour des calculs de réacteur à l'équilibre (comme c'est le cas dans cette thèse), la distinction n'est pas faite entre les neutrons émis au moment de la fission et ceux qui sont retardés.

Mentionnons toutefois que pour des calculs transitoires, où la population de neutrons évolue rapidement, les neutrons retardés jouent un rôle très important. Le fait que certains neutrons soient émis avec un délai permet de contrôler le réacteur nucléaire. Si tous les neutrons de fission étaient émis au moment de la fission sans aucun délai, les réacteurs nucléaires seraient tout simplement incontrôlables. Le moindre petit écart de la criticité ferait en sorte que le réacteur s'éteigne quasi instantanément (si il est légèrement sous-critique) ou que la réaction en chaîne ne soit plus contrôlable, menant évidemment à une catastrophe.

Deux autres quantités importantes sont reliées à la fission, le nombre moyen de neutrons émis à la suite d'une fission, $\nu(E)$, et le spectre en énergie des neutrons émis par fission, $\chi(E)$. Le nombre moyen de neutron par fission varie très légèrement en fonction de l'énergie des neutrons incidents et se situe en général entre 2 et 3 (par exemple environ 2.5 pour l'^{235}U et 2.7 pour le ^{239}Pu). Le spectre de fission augmente en fonction de l'énergie entre 0 et environ 1 MeV, pour ensuite diminuer en fonction de l'énergie. Les neutrons sont émis avec une énergie moyenne d'environ 2 MeV, mais pour une fission donnée un neutron peut avoir une énergie allant jusqu'à une dizaine de MeV. Le spectre de fission du Pu239 est montré à la figure 2.4.

D'autres réactions avec un bilan neutronique positif sont aussi possibles. Un noyau peut absorber un neutron puis en réémettre plus d'un, typiquement 2 ou 3 (bien que 4 soit aussi possible). Ces réactions sont appelées $(n, 2n)$ ou $(n, 3n)$, et les sections efficaces correspondantes sont $\sigma_{n,2n}$ et $\sigma_{n,3n}$. La différence entre ce type de réaction et la fission est que le noyau ne se scinde pas en fragments mais ne fait qu'émettre plus de neutrons qu'il en a absorbé. Ce genre d'interaction est toutefois beaucoup moins probable que la fission, du moins pour les isotopes dit fissiles (pouvant être fissionnés par des neutrons d'énergie relativement faible). Au final, pour un système donné, c'est la fission d'isotope comme le ^{239}Pu et l'^{235}U qui permet de maintenir la réaction dans un réacteur.

On considère que les neutrons sont émis de façon isotrope lors d'une fission, c'est-à-dire qu'ils sont émis dans toutes les directions avec une probabilité équivalente, dans le référentiel du noyau. Dans le référentiel du LAB, dans lequel les noyaux sont en mouvement (dû à l'agitation thermique), l'isotropie des neutrons de fission est une approximation, mais comme les neutrons sont typiquement émis avec une énergie de quelques MeV, la vitesse d'un noyau avec une énergie de quelques eV peut facilement être négligée. Les sources de fission sont

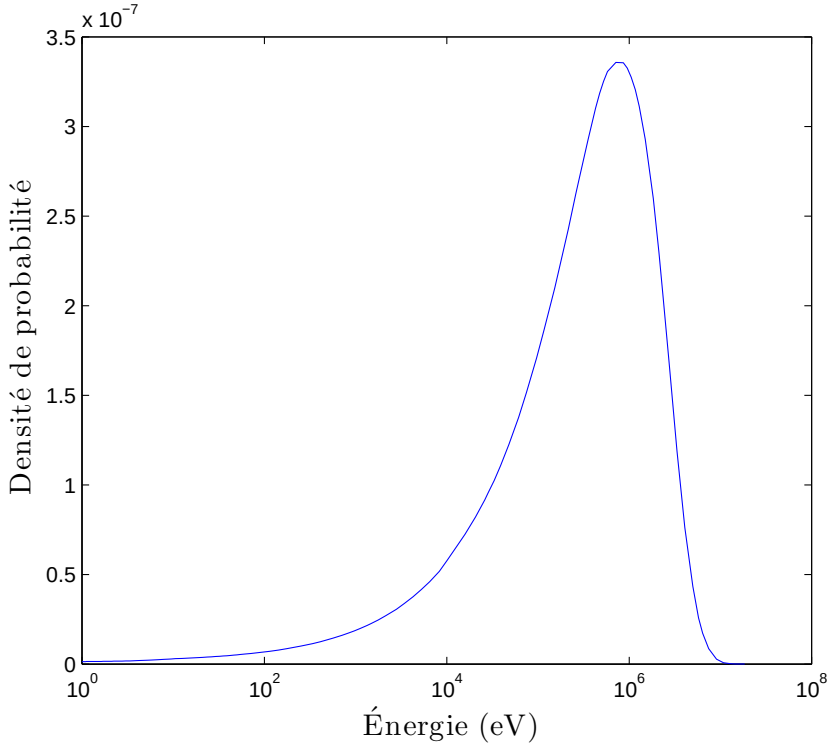

Figure 2.4 Spectre de fission pour le Pu239.

donc considérées comme isotropes. Notons finalement que l'isotropie des neutrons de fission et le spectre de fission indépendant de l'énergie du neutron incident sont des approximations qui sont valables si l'énergie du neutron incident est très faible comparée à celle des neutrons émis lors de la fission. Comme la fission est en général causée par des neutrons thermiques ou presque thermiques et les neutrons de fission ont des énergies de l'ordre du MeV, cette approximation est définitivement acceptable.

2.1.3 Difffusion

La diffusion est une autre interaction très importante entre les neutrons et les noyaux. Par diffusion, on entend une réaction avec un neutron entrant et un neutron sortant (possiblement le même), mais avec une direction et une énergie différente. Notons que d'un point de vue neutronique, le fait que le neutron final soit le même que le neutron initial ou soit un neutron différent n'a aucune importance (rigoureusement parlant, il est impossible de faire la différence).

On peut séparer la diffusion en deux types, la diffusion élastique et la diffusion inélastique. Dans le cas élastique, l'énergie cinétique du système neutron-noyau est conservée par la réac-

tion. Pour une collision inélastique, la réaction laisse le noyau dans un état excité qui résulte typiquement en l'émission d'un photon. Bien sur, l'énergie totale est toujours préservée, mais l'énergie cinétique du système neutron-noyau est alors plus faible qu'avant la réaction.

On peut aussi séparer les réactions de diffusion selon deux catégories, la diffusion potentielle et la diffusion résonante. Dans le cas de la diffusion potentielle, le neutron incident est "dévié" par le noyau, comme pour un collision entre deux objets macroscopiques. Pour la diffusion résonante, le neutron est absorbé par le noyau, qui émet ensuite un neutron pour se débarrasser de l'excédant d'énergie suite à la capture du neutron initial. Peu importe le type de réaction, ce qui importe est l'énergie et la direction du neutron final.

Le point le plus important est qu'une section efficace de diffusion, notée σ_s à cause du terme anglais *scattering*, représente en fait un ensemble de probabilité. Pour une collision entre un neutron d'énergie E, qui "sort" de la réaction de diffusion avec une énergie E' et dans une direction qui fait un angle θ avec sa direction initiale (toutes les quantités sont ici mesurées dans le référentiel du LAB), la section efficace de diffusion s'écrit $\sigma_s(E' \leftarrow E, \mu)$ où $\mu = \cos\theta$. La section efficace est donc donnée par une probabilité d'interaction de type diffusion, en fonction de l'énergie E du neutron incident, multipliée par une densité de probabilité pour l'énergie E' et la direction μ du neutron sortant.

Les détails de ce genre de section efficace seront discutés plus loin quand il sera question de transport déterministe. Pour l'instant, les considérations qualitatives suivantes sont importantes. Premièrement, plus le noyau à une masse similaire à celle du neutron incident, plus l'échange d'énergie entre le neutron et le noyau sera grand pour une collision élastique. Autrement dit, plus la masse d'un noyau s'approche de celle d'une neutron, plus le neutron sera ralenti lors de la collision, et plus la masse du noyau est grande, moins le neutron sera ralenti (en assumant que le neutron a initialement une énergie supérieure à celle du noyau). Deuxièmement, on considère que dans le référentiel du centre de masse du système neutron-noyau, le neutron sortant sera émis de façon isotrope. Cette approximation est valide jusqu'à des énergies de l'ordre de 1 MeV, et peut être invalide à des énergies plus élevées. Dans le référentiel du LAB toutefois, la direction dans laquelle le neutron est émis n'est pas indépendante de la direction du neutron incident, comme l'indique la dépendance en μ de la section efficace (Hébert (2009)).

2.1.4 Résonances en énergie

Nous avons pour l'instant donné peu de détails sur la structure des sections efficaces en fonction de l'énergie du neutron incident. Les résonances en énergie jouent un rôle extrêmement important en physique du réacteur. À cause de considérations quantiques (qui relèvent de la

physique nucléaire théorique), l'absorption de neutrons par les noyaux se produit principalement dans de très minces plages centrées sur des valeurs d'énergie précises. On appelle ces plages d'énergie des pics d'absorption, ou tout simplement des résonances.

Ces résonances sont importantes quand on traite les sections efficaces d'isotopes lourds (en fait tous les isotopes à part l'hydrogène possèdent aussi certaines résonances mais pour les isotopes légers elles ne sont pas très importantes). La capture radiative et la fission sont des réactions typiquement résonantes. Les résonances peuvent aussi jouer un certain rôle dans la diffusion, puisque comme expliqué plus haut les réactions où la capture d'un neutron est suivie par l'émission d'un autre neutron sont considérées comme de la diffusion. Différents isotopes ont des résonances à différentes énergies.

Un exemple de structure résonante est présenté à la figure 2.3. On peut y voir la section efficace de fission du Pu239. On constate facilement que celle-ci varie très fortement en fonction de l'énergie, en remarquant bien que les axes utilisent une échelle logarithmique. Par exemple, pour la première résonance du groupe à droite (celle un peu en dessous de 10 eV, identifiée par une ligne sur le graphique), une petite variation de l'énergie du neutron incident, de l'ordre de 1 ou 2 eV, peut causer une variation par un facteur de plus de 100 dans la section efficace.

Un autre aspect important qu'on peut constater en examinant la figure 2.3 concerne la séparation entre les résonances. Pour des énergies inférieures à environ quelques centaines d'eV (les énergies précises dépendent des réactions), on peut identifier les résonances individuellement. Ceci est le résultat de nombreuses mesures expérimentales sur plusieurs années. Par contre, à des énergies plus élevées, la résolution en énergie dont dispose les expérimentalistes n'est pas suffisante pour distinguer les résonances les unes des autres. Cette problématique sera discutée plus en détails dans la section 3.1.5.

2.2 Milieu hétérogène

Considérons maintenant un système plus réaliste, composé de régions avec des mélanges homogènes différents. Chacun des mélanges correspond à un mélange homogène tel qu'expliqué dans la section précédente. Nous utiliserons un tel système pour expliquer les rôles des différents isotopes et pour ensuite expliquer les conditions frontières qui peuvent être implémentées dans des calculs de transport neutronique.

2.2.1 Combustible et modérateur

Supposons un système comportant une tige composée d'un mélange d'^{235}U et d'^{238}U, le combustible, dans de l'eau légère (où on a des noyaux d'hydrogène pour les molécules d'eau), le modérateur. La tige de combustible est entourée d'une gaine de zirconium, comme c'est typiquement le cas dans les réacteurs. La frontière du système se situe juste après le modérateur et on y applique des conditions de réflexion (ce qui sera expliqué un peu plus loin). L'uranium 235 est un isotope fissile, alors que l'uranium 238 est un isotope qui absorbe beaucoup les neutrons (capture radiative). Leurs sections efficaces respectives (de capture radiative pour l'U238 et de fission et capture radiative pour l'U235) sont montrées à la figure 2.5.

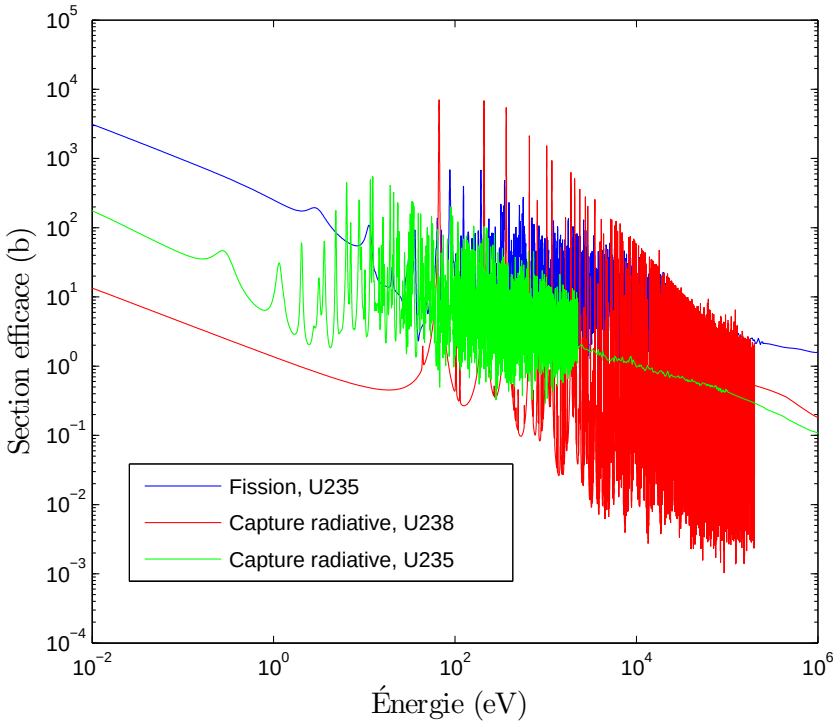

Figure 2.5 Sections efficaces de fission et de capture radiative de l'U235 et de capture radiative de l'U238, dans la plage d'énergie contenant des résonances.

Pour qu'un tel système soit critique, c'est-à-dire pour que la réaction nucléaire puisse s'autoentrenir, il faut que la fission des noyaux d'uranium 235 produise assez de neutrons pour compenser pour la perte par capture par les noyaux d'uranium 238, la perte par capture dans les autres matériaux (la gaine et le modérateur) et la perte de neutrons par fuites (si on a des conditions frontières qui permettent des fuites). Dans un réacteur nucléaire typique avec ce genre de combustible (par exemple un réacteur à eau sous pression), le pourcentage massique d'uranium 235 est en général de 2% à 5%. À cause de la structure résonante

de l'^{235}U et de l'^{238}U, pour des énergies allant jusqu'à quelques dizaines d'eV (de l'ordre de l'énergie thermique du système), la section efficace pour la fission de l'uranium 235 est beaucoup plus grande que celle pour la capture radiative par l'uranium 238. Par contre, à des énergies plus élevées, même si en moyenne la section efficace de capture de l'U238 reste plus faible que celle de fission de l'U235, les résonances sont beaucoup plus importantes dans le cas de l'U238 et comme en général l'uranium 238 est présent en quantité beaucoup plus importante que l'uranium 235 (par un facteur d'au moins 20), la capture radiative domine largement dans cette plage d'énergie. Notons que pour de très hautes énergies, il y a toujours des résonances mais elles sont tellement près les unes des autres qu'elles ne sont plus mesurées expérimentalement (la figure 2.5 présente essentiellement la moyenne des sections efficaces à haute énergie, lorsque les résonances arrêtent).

Comme les neutrons sont en général émis à des énergies de l'ordre du MeV à la suite d'une fission (figure 2.4), et comme l'uranium 238 est présent en quantité plus importante que l'uranium 235, le criticité d'un tel système implique que les neutrons doivent être ralentis jusqu'à des énergies où la section efficace de fission est assez importante pour compenser pour le faible pourcentage massique de l'isotope fissile. De plus, ce ralentissement doit se produire à l'extérieur du combustible, car si ce n'était pas le cas, les neutrons seraient en bonne partie absorbés par l'uranium 238 durant le processus de ralentissement.

L'eau légère présente dans le système joue donc un rôle particulièrement important, celui de modérateur. Notons que l'eau peut aussi jouer le rôle de caloporteur, très important pour garder le réacteur à une température acceptable et extraire une partie de l'énergie libérée par la fission. Toutefois, pour des considérations de neutronique ce rôle n'est pas important. Le rôle du modérateur est donc de ralentir les neutrons hors du combustible, jusqu'à (idéalement) des énergies thermiques, pour qu'à leur retour dans le combustible, les neutrons puissent contribuer au maintient de la réaction nucléaire.

Notons que quand on parle de "retour dans le combustible", il n'est pas nécessairement question d'un retour dans le combustible d'où le neutron origine. Dans un réacteur, les cellules se retrouvent typiquement dans des assemblages comprenant des milliers de cellules identiques. Un neutron provenant d'une tige de combustible donnée sera donc typiquement ralenti dans le modérateur avant d'aller interagir dans un autre tige de combustible. Comme expliqué dans la sous-section 2.2.2, on peut prendre cette possibilité en compte dans les conditions frontières.

2.2.2 Conditions frontières

Si la cellule considérée est entourée d'une frontière γ, alors il y a plusieurs possibilités pour le traitement d'un neutron qui atteint la frontière. Premièrement, si la cellule est entourée de vide et si on note la normale à la frontière (pointant vers l'extérieur) au point $r_s \in \gamma$ avec $\mathbf{N}(r_s)$, alors un neutron à la frontière avec $\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{N}(r_s) > 0$ quittera le système (et ne reviendra jamais). C'est ce qu'on appelle une condition frontière de vide.

En pratique, on utilise souvent des conditions frontières réflectives. Précisons d'abord que physiquement, les neutrons ne sont pas vraiment réfléchis. Il n'existe pas de matériaux qui réfléchissent les neutrons (comme un miroir avec des photons par exemple). Les conditions de réflexion sont plutôt utilisées pour prendre en compte le fait qu'un réacteur comprend généralement des milliers de cellules identiques, comme expliqué plus haut. Ainsi, du point de vue d'une cellule individuelle, la géométrie se répète (approximativement) à l'infini. Si on considère des cellules identiques et symétriques, alors statistiquement parlant, un neutron qui sort par un côté d'une cellule sera remplacé par un neutron entrant (avec $\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{N}(r_s) < 0$) provenant de la cellule voisine. Une condition de réflexion spéculaire correspond à imposer $\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{N}(r_s) = -\mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{N}(r_s)$, c'est-à-dire que les neutrons sont réfléchis comme des photons par une surface spéculaire.

On peut aussi considérer des frontière qui ne réfléchissent qu'une partie des neutrons incident, donnée par la fraction β. Cette fraction peut varier entre 0 (conditions de vide) et 1 (conditions réflectives) et possiblement être plus grande que 1. Comme il est ici question de calcul à l'état d'équilibre, s'il y a plus de neutrons qui sortent que de neutrons qui entrent par une frontière ($\beta < 1$), du point de vue d'une cellule, alors pour la cellule adjacente (qui partage la frontière) il y aura plus de neutrons qui entrent que de neutrons qui sortent ($\beta > 1$).

2.3 Calcul Monte Carlo

Pour faire suite aux considérations des sections précédentes, nous expliquons maintenant comment procéder à une simulation stochastique de neutrons (calculs Monte Carlo) utilisée dans le contexte du génie nucléaire (et dans plusieurs autres domaines) pour déterminer, entre autre, le facteur de multiplication des neutrons et la distribution de neutrons dans le système considéré.

2.3.1 Déroulement du processus stochastique

La présente section décrit le fonctionnement général d'une simulation Monte Carlo. Cette description permet de bien comprendre ce qui se passe dans un réacteur nucléaire ainsi que de bien comprendre les concepts de sections efficaces et de facteur de multiplication (le k_{eff}).

Considérons donc le milieu hétérogène présenté dans la section 2.2, avec une frontière réflective. Pour une simulation Monte Carlo, on précise un certain nombre de cycles, incluant des cycles "inactifs" en début de simulation. On doit aussi préciser combien de neutrons seront simulés par cycle. Les cycles inactifs se déroulent comme les cycles actifs, mais on ne calcule pas les quantités importantes à la fin de ces cycles puisqu'à ce stade (les premiers cycles) le système n'a pas encore atteint un état relativement stable.

Pour le premier cycle, une certaine distribution spatiale et en énergie est assumée, et les neutrons sont générés en suivant ces distributions. Il y aura le même nombre de neutrons générés à chaque cycle. Pour chaque neutron généré, on simule sa "vie", c'est-à-dire les déplacements du neutron jusqu'à ce que celui-ci quitte le système. Cela implique soit une absorption, soit un contact avec une frontière avec une direction dont le produit scalaire avec la normale à la frontière (pointant vers l'extérieur) est positif, si bien sûr la frontière n'est pas réflective.

L'absorption d'un neutron peut résulter en une capture ou en une fission. Dans les deux cas, la "vie" du neutron se termine par l'absorption de celui-ci, mais dans le cas d'une fission l'endroit où celle-ci s'est produite est enregistré et le nombre de neutrons produits par la fission est enregistré. Lorsque tous les neutrons ont été générés (et leur vie est terminée), le cycle prend fin. Pour un cycle actif, on prend la quantité totale de neutrons générés par fission puis on divise par le nombre de neutron au début du cycle, ce qui nous donne une estimation du k_{eff} pour ce cycle.

On passe ensuite au cycle suivant. On génère le même nombre de neutrons qu'au début du cycle précédent, mais en utilisant les positions des réactions de fission du cycle précédent comme distribution spatiale. L'énergie des neutrons est choisie parmi la distribution du spectre de fission du noyau correspondant. On suit ensuite chacun des neutrons, comme au cycle précédent, puis on fait un bilan neutronique pour le k_{eff} à la fin du cycle.

Une fois le nombre de cycles voulu terminé, on peut obtenir une estimation (et une estimation de l'incertitude) pour le k_{eff} à partir des k_{eff} obtenus pour chacun des cycles actifs. Cette façon de calculer le k_{eff} indique explicitement sa signification : c'est le facteur de proportionnalité entre le nombre de neutrons créés et le nombre de neutrons absorbés par ou ayant fuit le système. Si pour chaque neutron perdu, le système produit plus d'un neutron, ce système

est sur-critique ($k_{eff} > 1$). Si pour chaque neutron produit par le système, plus d'un neutron sont absorbés, le système est sous-critique ($k_{eff} < 1$).

Si on le désire, on peut aussi utiliser une simulation Monte Carlo pour obtenir la distribution spatiale et en énergie des neutrons dans une certaine région du système. Cela peut se faire en simulant un "détecteur" dans une région donnée du système. Lorsqu'on exécute une simulation avec un tel détecteur, l'énergie des neutrons qui passent dans la région en question est enregistrée, ce qui permet d'obtenir une distribution en énergie des neutrons.

2.3.2 Condensation en énergie des sections efficaces

Dans le chapitre suivant, il sera question de quantités *multigroupes*, c'est-à-dire de quantités qui ont été moyennées sur une certaine plage d'énergie, qui correspond à un *groupe*. Dans ce groupe, une section efficace aura une valeur constante, donnée par la moyenne de la section continue en énergie. Cependant, compte tenu de la structure résonante de certaines sections efficaces, le choix d'une fonction poids est très important pour calculer une valeur moyenne dans un groupe. En effet, une importante résonance de capture neutronique fera en sorte que la densité de neutrons présentera, pour la plage (très étroite) d'énergie de cette résonance, une dépression importante.

Tel que mentionné à la sous-section 2.3.1, une simulation Monte Carlo permet d'obtenir la distribution de neutrons à l'équilibre. Cette distribution peut être utilisée pour pondérer les sections efficaces continues en énergie pour obtenir les sections moyennées de façon acceptable dans chacun des groupes d'énergie. Le fait qu'on utilise la distribution neutronique à l'équilibre indique ce qu'on veut dire ici par "acceptable" : même si une section efficace présente des résonances très importantes, il faut prendre en compte que très peu de neutrons vont, à l'équilibre, "voir" ces résonances, ce qui est représenté par les dépressions dans la distribution neutronique.

Pour les calculs déterministes (prochain chapitre), la distribution neutronique n'est pas connue. On doit donc procéder à ce qu'on appelle des calculs d'autoprotection. Le but de ces calculs, dont il sera question au chapitre 4, est d'approximer la forme de la distribution de neutrons à l'équilibre, près des résonances, et d'utiliser cette distribution pour obtenir des sections efficaces multigroupes similaires à ce qu'on obtiendrait en condensant les sections efficaces continues en énergie avec la distribution neutronique obtenue avec un calcul Monte Carlo.

CHAPITRE 3 L'équation de transport

Un traitement alternatif du transport neutronique consiste à établir une équation basée sur un bilan neutronique, qu'on résout ensuite pour déterminer le flux neutronique (relié à la densité neutronique), le k_{eff} ou d'autres quantités d'intérêt. L'équation résultante, appelée équation de transport, sera considérée pour un état stationnaire dans le temps et sera discrétisée en espace et en énergie. Contrairement au traitement stochastique, on ne simule pas ici le déplacement des neutrons mais on solutionne une équation (en fait un système d'équations après la discrétisation). Concrètement, solutionner pour le flux neutronique et le k_{eff} consiste à résoudre un problème de valeur propre.

3.1 Forme différentielle et forme intégrale de l'équation de transport

L'équation de transport peut être représentée sous différentes formes équivalentes, donnant lieu à différentes méthodes de solution. Dans le présent travail, seulement la méthode de probabilités de collision sera utilisée, basée sur la forme intégrale de l'équation de transport. Nous commencerons toutefois par présenter la forme différentielle ainsi que certains aspects généraux reliés à l'équation de transport.

3.1.1 Forme différentielle et considérations générales

Présentons d'abord l'équation de transport dans sa forme différentielle générale (Hébert (2009)),

$$\frac{1}{V_n}\frac{\partial}{\partial t}\phi(\mathbf{r}, V_n, \mathbf{\Omega}, t) + \nabla \cdot \mathbf{\Omega}\phi(\mathbf{r}, V_n, \mathbf{\Omega}, t) + \Sigma(\mathbf{r}, V_n)\phi(\mathbf{r}, V_n, \mathbf{\Omega}, t) = Q(\mathbf{r}, V_n, \mathbf{\Omega}, t) \tag{3.1}$$

où $\phi = V_n n$ représente le flux angulaire et n est défini comme le nombre de particules dans un élément de volume d^3r centré sur $\mathbf{r}$, dans l'élément de vitesse dV_n centré sur V_n et dans l'élément de direction $d^2\Omega$ centré sur $\mathbf{\Omega}$, au temps t. Q représente la source de neutron et Σ la section efficace totale, qui est ici considérée comme étant indépendante du temps.

Si on suppose maintenant que le flux neutronique est dans un état stationnaire dans le temps, et qu'on exprime l'équation de transport en fonction de l'énergie plutôt qu'en fonction de la norme de la vitesse V_n, on obtient

$$\nabla \cdot \mathbf{\Omega}\phi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) + \Sigma(\mathbf{r}, E)\phi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) = Q(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}). \tag{3.2}$$

La source Q, dans un milieu isotrope peut être exprimée comme

$$Q(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) = \frac{1}{2\pi} \int_{4\pi} \int_0^\infty \Sigma_s(\mathbf{r}, E \leftarrow E', \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{\Omega}') \phi(\mathbf{r}, E', \mathbf{\Omega}') dE' d^2\Omega' + \frac{1}{4\pi k_{eff}} Q^{\text{fiss}}(\mathbf{r}, E) \quad (3.3)$$

où Σ_s représente la section efficace macroscopique de diffusion, qui "reçoit" un neutron avec une énergie E' et une direction $\mathbf{\Omega}'$ et "émet" un neutron à une énergie E et dans une direction $\mathbf{\Omega}$. Le terme Q^{fiss} représente la source de fission. Sans le facteur k_{eff}, il n'y a aucune garantie qu'une solution à l'équation stationnaire dans le temps existe (en fait il est très probable qu'il n'y ait pas de solution).

Il faut donc inclure ce facteur qui, en divisant la source de fission, permet d'obtenir un état stationnaire. En fait, l'équation de transport se résume en général à un problème de valeur propre. Le flux, la solution de cette équation, correspond alors au vecteur propre, et le k_{eff} à la valeur propre. Physiquement, la valeur obtenue pour le k_{eff} est une indication de la criticité du système considéré. Un k_{eff} plus grand que 1 indique que la source de fission est trop importante pour pouvoir obtenir un état stationnaire, alors qu'un k_{eff} plus faible que 1 indique que l'absorption de neutron est trop importante par rapport à la source de fission pour avoir un état stationnaire.

Il est commun d'exprimer la section efficace de diffusion comme une somme de polynômes de Legendre et le flux en fonction d'harmoniques sphériques. On aura alors

$$Q(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) = \int_0^\infty \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} \Sigma_{s,l}(\mathbf{r}, E \leftarrow E') \sum_{m=-l}^{l} R_l^m(\mathbf{\Omega}) \phi_l^m(\mathbf{r}, E') dE' + \frac{1}{4\pi k_{eff}} Q^{\text{fiss}}(\mathbf{r}, E) \quad (3.4)$$

$$\Sigma_{s,l}(\mathbf{r}, E \leftarrow E') = \int_{-1}^{1} \Sigma_s(\mathbf{r}, E \leftarrow E', \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{\Omega}') P_l(\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{\Omega}') d(\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{\Omega}') \quad (3.5)$$

$$\phi_l^m(\mathbf{r}, E) = \int_{4\pi} R_l^m(\mathbf{\Omega}) \phi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) d^2\Omega \quad (3.6)$$

où les R_l^m sont les harmoniques sphériques (Hébert (2009)). La source de fission (isotrope) peut s'écrire comme

$$Q^{\text{fiss}}(\mathbf{r}, E) = \sum_{m=1}^{M^{\text{fiss}}} \chi_m(E) \int_0^\infty \nu \Sigma_{\text{f},m}(\mathbf{r}, E') \phi(\mathbf{r}, E') dE' \quad (3.7)$$

où $\phi(\mathbf{r}, E') = \phi_0^0(\mathbf{r}, E')$, $\chi_m(E)$ représente le spectre de fission de l'isotope fissile m et ν représente le nombre moyen de neutrons par fission. $\Sigma_{\text{f},m}(\mathbf{r}, E')$ représente la section efficace

de fission de l'isotope fissile m. $\phi(\mathbf{r}, E)$ est le flux intégré donné par

$$\phi(\mathbf{r}, E) = \int_{4\pi} \phi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) d\Omega^2. \tag{3.8}$$

3.1.2 Forme intégrale de l'équation de transport

Pour établir la forme intégrale, il faut d'abord introduire la "caractéristique", définie comme une ligne droite dans la direction de propagation $\mathbf{\Omega}$ d'un neutron, sur laquelle on mesure le déplacement avec la variable s. On aura alors, pour un cas stationnaire dans le temps,

$$\frac{d}{ds} = \frac{dx}{ds}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{dy}{ds}\frac{\partial}{\partial y} + \frac{dz}{ds}\frac{\partial}{\partial z} = \mathbf{\Omega} \cdot \nabla = \nabla \cdot \mathbf{\Omega}. \tag{3.9}$$

En substituant l'expression (3.9) dans l'équation de transport et en exprimant la position d'un neutron comme $\mathbf{r} - s\mathbf{\Omega}$, on obtient l'équation

$$-\frac{d}{ds}\phi(\mathbf{r} - s\mathbf{\Omega}, E, \mathbf{\Omega}) + \Sigma(\mathbf{r} - s\mathbf{\Omega})\phi(\mathbf{r} - s\mathbf{\Omega}, E, \mathbf{\Omega}) = Q(\mathbf{r} - s\mathbf{\Omega}, E, \mathbf{\Omega}), \tag{3.10}$$

qui correspond à la forme caractéristique "avant" (*forward*) de l'équation de transport dans un état stationnaire. On introduit maintenant le facteur intégrant $\mathrm{e}^{-\tau(s,E)}$ avec

$$\tau(s, E) = \int_0^s \Sigma(\mathbf{r} - s'\mathbf{\Omega}, E) ds'. \tag{3.11}$$

On a alors la relation suivante

$$\frac{d}{ds}\Big(\mathrm{e}^{-\tau(s,E)}\phi(\mathbf{r} - s\mathbf{\Omega}, E, \mathbf{\Omega})\Big) = \mathrm{e}^{-\tau(s,E)}\Big(- \Sigma(\mathbf{r} - s\mathbf{\Omega})\phi(\mathbf{r} - s\mathbf{\Omega}, E, \mathbf{\Omega}) + \frac{d}{ds}\phi(\mathbf{r} - s\mathbf{\Omega}, E, \mathbf{\Omega})\Big). \tag{3.12}$$

En substituant l'expression pour la dérivée du flux par rapport à s, éq. (3.10), dans l'expression précédente, on trouve

$$-\frac{d}{ds}\Big(\mathrm{e}^{-\tau(s,E)}\phi(\mathbf{r} - s\mathbf{\Omega}, E, \mathbf{\Omega})\Big) = \mathrm{e}^{-\tau(s,E)} Q(\mathbf{r} - s\mathbf{\Omega}, E, \mathbf{\Omega}). \tag{3.13}$$

On peut alors intégrer sur s, de 0 à ∞ pour un calcul sur une région infinie, pour obtenir

$$\phi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) = \int_0^\infty \mathrm{e}^{-\tau(s,E)} Q(\mathbf{r} - s\mathbf{\Omega}, E, \mathbf{\Omega}) ds. \tag{3.14}$$

Cette équation représente la forme intégrale de l'équation de transport, pour un domaine infini et dans un état stationnaire. Pour un cas avec un domaine fini, on restreint l'intégrale

sur s sur le domaine en question, et on trouve

$$\phi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) = \mathrm{e}^{-\tau(b,E)}\phi(\mathbf{r} - b\mathbf{\Omega}, E, \mathbf{\Omega}) + \int_0^b \mathrm{e}^{-\tau(s,E)}Q(\mathbf{r} - s\mathbf{\Omega}, E, \mathbf{\Omega})ds \tag{3.15}$$

où b représente la frontière du domaine.

3.1.3 Formalisme multigroupe

Le traitement déterministe de l'équation de transport requiert une discrétisation en énergie. On définit des groupes, pour lesquels on utilise l'indice g. Un groupe donné g est défini par sa limite supérieure E_g et sa limite inférieure E_{g+1}. Le groupe 1 correspond donc au groupe avec la plus haute énergie, et pour un traitement avec G groupes au total, le groupe avec $g = G$ correspond à l'énergie la plus basse.

En passant au formalisme multigroupe à G groupes, on obtient un système de G équations, une par groupe. Dans un groupe g donné, on considère que les neutrons ont tous la même énergie et on moyenne toutes les quantités sur l'énergie, entre E_g et E_{g+1}. Définissons maintenant les quantités obtenues en procédant à cette moyenne sur l'énergie

$$\phi_g(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = \int_{E_{g+1}}^{E_g} \phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E)dE \tag{3.16}$$

$$\phi_g(\mathbf{r}) = \int_{E_{g+1}}^{E_g} \phi(\mathbf{r}, E)dE \tag{3.17}$$

$$\langle \Sigma(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r})\rangle_g = \int_{E_{g+1}}^{E_g} \Sigma(\mathbf{r}, E)\phi(\mathbf{r}, E)dE \tag{3.18}$$

$$\langle \Sigma_{s,l}(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r})\rangle_{g\leftarrow h} = \int_{E_{g+1}}^{E_g}\int_{E_{h+1}}^{E_h} \Sigma_{s,l}(\mathbf{r}, E \leftarrow E')\phi(\mathbf{r}, E')dE'dE \tag{3.19}$$

$$\chi_{m,g} = \int_{E_{g+1}}^{E_g} \chi_m(E)dE. \tag{3.20}$$

En général, au lieu d'écrire $\langle \Sigma(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r})\rangle_g$, on utilisera les valeurs multigroupes des sections efficaces,

$$\Sigma_g(\mathbf{r}) = \frac{1}{\phi_g(\mathbf{r})}\langle \Sigma(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r})\rangle_g \tag{3.21}$$

$$\Sigma_{s,l,g\leftarrow h}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\phi_h(\mathbf{r})}\langle \Sigma_{s,l}(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r})\rangle_{g\leftarrow h} \tag{3.22}$$

$$\nu\Sigma_{\mathrm{f},m,g}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\phi_g(\mathbf{r})}\langle \nu\Sigma_{\mathrm{f},m}(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r})\rangle_g. \tag{3.23}$$

Le terme source prend alors la forme

$$Q_g(\mathbf{r},\mathbf{\Omega}) = \sum_{h=1}^{G}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{2l+1}{4\pi}\Sigma_{\mathrm{s},l,g\leftarrow h}(\mathbf{r})\sum_{m=-l}^{l}R_l^m(\mathbf{\Omega})\phi_{l,h}^m(\mathbf{r}) + \frac{1}{4\pi k_{eff}}\sum_{m=1}^{M^{\mathrm{fiss}}}\chi_{m,g}\sum_{h=1}^{G}\nu\Sigma_{\mathrm{f},m,h}(\mathbf{r})\phi_h(\mathbf{r}). \tag{3.24}$$

Dans ce formalisme, l'équation de transport différentielle s'écrit

$$\mathbf{\Omega}\cdot\nabla\phi_g(\mathbf{r},\mathbf{\Omega}) + \Sigma_g(\mathbf{r})\phi_g(\mathbf{r},\mathbf{\Omega}) = Q_g(\mathbf{r},\mathbf{\Omega}). \tag{3.25}$$

Pour la forme intégrale, on aura

$$\phi_g(\mathbf{r},\mathbf{\Omega}) = \int_0^{\infty}\mathrm{e}^{-\tau_g(s)}Q_g(\mathbf{r}-s\mathbf{\Omega},\mathbf{\Omega})ds \tag{3.26}$$

avec

$$\tau_g(s) = \int_0^{s}\Sigma_g(\mathbf{r}-s'\mathbf{\Omega})ds'. \tag{3.27}$$

3.1.4 Source isotrope et correction de transport

On suppose en général les sources de fission comme étant isotrope, mais ce n'est pas le cas pour les sources de diffusion. En fait, en pratique on se doit de tronquer la sommation sur l dans l'équation 3.24 après un certain nombre de terme, qui indique en quelque sorte dans quelle mesure on veut prendre l'anisotropie en compte.

Considérons donc l'équation de transport multigroupe, où on veut se débarrasser de certains termes plus grand qu'un certain ordre L. On commence par tronquer la sommation sur l,

$$\mathbf{\Omega}\cdot\nabla\phi_g(\mathbf{r},\mathbf{\Omega})+\Sigma_g(\mathbf{r})\phi_g(\mathbf{r},\mathbf{\Omega}) = \sum_{h=1}^{G}\sum_{l=0}^{L}\frac{2l+1}{4\pi}\Sigma_{\mathrm{s},l,g\leftarrow h}(\mathbf{r})\sum_{m=-l}^{l}R_l^m(\mathbf{\Omega})\phi_{l,h}^m(\mathbf{r})+\frac{Q_{\mathrm{fiss}}(\mathbf{r})}{4\pi k_{eff}}. \tag{3.28}$$

On soustrait ensuite le terme $\Sigma_{s,L+1,g\leftarrow g}\phi_g(\mathbf{r},\mathbf{\Omega})$ de chaque côté. Le terme de gauche devient

$$\mathbf{\Omega}\cdot\nabla\phi_g(\mathbf{r},\mathbf{\Omega}) + \Big(\Sigma_g(\mathbf{r}) - \Sigma_{s,L+1,g\leftarrow g}(\mathbf{r})\Big)\phi_g(\mathbf{r},\mathbf{\Omega}). \tag{3.29}$$

Mais le terme qu'on soustrait de chaque côté peut aussi s'écrire en fonction des composantes d'harmoniques sphériques du flux,

$$\Sigma_{s,L+1,g\leftarrow g}\phi_g(\mathbf{r},\mathbf{\Omega}) = \Sigma_{s,L+1,g\leftarrow g}(\mathbf{r})\sum_{l=0}^{\infty}\frac{2l+1}{4\pi}\sum_{m=-l}^{l}R_l^m(\mathbf{\Omega})\phi_{l,g}^m(\mathbf{r}), \tag{3.30}$$

qu'on peut substituer du côté droit pour obtenir (en omettant la source de fission pour l'instant)

$$\sum_{h=1}^{G}\sum_{l=0}^{L}\frac{2l+1}{4\pi}\Sigma_{\mathrm{s},l,g\leftarrow h}(\mathbf{r})\sum_{m=-l}^{l}R_l^m(\mathbf{\Omega})\phi_{l,h}^m(\mathbf{r})-\Sigma_{s,L+1,g\leftarrow g}(\mathbf{r})\sum_{l=0}^{\infty}\frac{2l+1}{4\pi}\sum_{m=-l}^{l}R_l^m(\mathbf{\Omega})\phi_{l,g}^m(\mathbf{r}). \tag{3.31}$$

Le terme de droite peut être réécrit en séparant la somme sur les groupes comme $h=g$ et $\sum_{h\neq g}$,

$$\begin{aligned}
&\sum_{l=0}^{L}\frac{2l+1}{4\pi}\Big(\Sigma_{\mathrm{s},l,g\leftarrow g}(\mathbf{r})-\Sigma_{s,L+1,g\leftarrow g}(\mathbf{r})\Big)\sum_{m=-l}^{l}R_l^m(\mathbf{\Omega})\phi_{l,g}^m(\mathbf{r})\\
+&\frac{2L+3}{4\pi}\Big(\Sigma_{\mathrm{s},L+1,g\leftarrow g}(\mathbf{r})-\Sigma_{s,L+1,g\leftarrow g}(\mathbf{r})\Big)\sum_{m=-L-1}^{L+1}R_{L+1}^m(\mathbf{\Omega})\phi_{L+1,g}^m(\mathbf{r})\\
&-\Sigma_{s,L+1,g\leftarrow g}(\mathbf{r})\sum_{l=L+2}^{\infty}\frac{2l+1}{4\pi}\sum_{m=-l}^{l}R_l^m(\mathbf{\Omega})\phi_{l,g}^m(\mathbf{r})\\
&+\sum_{h\neq g}^{G}\sum_{l=0}^{L}\frac{2l+1}{4\pi}\Sigma_{\mathrm{s},l,g\leftarrow h}(\mathbf{r})\sum_{m=-l}^{l}R_l^m(\mathbf{\Omega})\phi_{l,h}^m(\mathbf{r}).
\end{aligned}\tag{3.32}$$

Le deuxième terme donne en fait 0, et le troisième terme est négligé puisqu'on coupe les sommes au terme L. On a donc

$$\begin{aligned}
&\mathbf{\Omega}\cdot\nabla\phi_g(\mathbf{r},\mathbf{\Omega})+\Big(\Sigma_g(\mathbf{r})-\Sigma_{s,L+1,g\leftarrow g}(\mathbf{r})\Big)\phi_g(\mathbf{r},\mathbf{\Omega})=\\
&\sum_{l=0}^{L}\frac{2l+1}{4\pi}\Big(\Sigma_{\mathrm{s},l,g\leftarrow g}(\mathbf{r})-\Sigma_{s,L+1,g\leftarrow g}(\mathbf{r})\Big)\sum_{m=-l}^{l}R_l^m(\mathbf{\Omega})\phi_{l,g}^m(\mathbf{r})+\\
&\sum_{h\neq g}^{G}\sum_{l=0}^{L}\frac{2l+1}{4\pi}\Sigma_{\mathrm{s},l,g\leftarrow h}(\mathbf{r})\sum_{m=-l}^{l}R_l^m(\mathbf{\Omega})\phi_{l,h}^m(\mathbf{r})+\frac{Q_{\mathrm{fiss}}(\mathbf{r})}{4\pi k_{eff}}.
\end{aligned}\tag{3.33}$$

La correction de transport consiste donc à corriger les sections efficaces totales et de diffusion $g\rightarrow g$ avec le terme $\Sigma_{s,L+1,g\leftarrow g}$. Ainsi, même si on coupe la sommation sur l après L termes, la source de diffusion est précise jusquà l'ordre $L+1$ en composantes sphériques du flux. Par exemple, on peut prendre (c'est le cas dans cette thèse) $L=0$, et on a alors

$$\begin{aligned}
&\mathbf{\Omega}\cdot\nabla\phi_g(\mathbf{r},\mathbf{\Omega})+\Big(\Sigma_g(\mathbf{r})-\Sigma_{s,1,g\leftarrow g}(\mathbf{r})\Big)\phi_g(\mathbf{r},\mathbf{\Omega})=\\
&\frac{1}{4\pi}\Big(\Sigma_{\mathrm{s},0,g\leftarrow g}(\mathbf{r})-\Sigma_{s,1,g\leftarrow g}(\mathbf{r})\Big)\phi_{0,g}^0(\mathbf{r})+\sum_{h\neq g}^{G}\frac{1}{4\pi}\Sigma_{\mathrm{s},0,g\leftarrow h}(\mathbf{r})\phi_{0,h}^0(\mathbf{r})+\frac{Q_{\mathrm{fiss}}(\mathbf{r})}{4\pi k_{eff}}.
\end{aligned}\tag{3.34}$$

3.1.5 Données expérimentales

Les sections efficaces ont jusqu'à présent été considérées comme des fonctions connues et bien définies de l'énergie, ce qui est loin d'être le cas en réalité. Cependant, lorsqu'on doit par exemple calculer une section efficace moyenne, il faut intégrer sur l'énergie une fonction qui dépend d'une section efficace,

$$\int_a^b f(\sigma(E))dE, \tag{3.35}$$

où a et b représentent les limites d'un groupe. Une évaluation numérique de cette intégrale implique de connaître un certain nombre de valeurs ponctuelles pour la section efficace en question. En pratique, pour les sections non-résonantes ce n'est pas un problème mais pour les sections comportant des résonances la situation est plus compliquée. Pour une section efficace résonante, on distingue en général deux régions (en énergie) : le domaine résolu et le domaine non-résolu.

Le domaine résolu contient des résonances dites résolues, c'est-à-dire qu'on peut les distinguer les unes des autres et pour lesquelles on dispose d'assez de mesures (à différentes énergies) pour pouvoir "tracer" la résonance. Le domaine non-résolu contient des résonances trop près les unes des autres pour pouvoir être distinguées et mesurées expérimentalement, et il est donc impossible de déterminer la structure précise des résonances dans ce domaine. Il est important de noter qu'avec le temps, des mesures de plus en plus précises pour des plages d'énergie de plus en plus grandes deviennent disponibles, diminuant graduellement l'importance du domaine non-résolu. Pour l'instant (en 2014), le domaine résolu peut s'étendre jusqu'à presque 1 keV pour certains isotopes, alors que pour des énergies plus élevées les résonances sont typiquement non-résolues.

Il est donc nécessaire de "simuler" le comportement résonant des sections efficaces dans le domaine non-résolu, en se basant sur la physique nucléaire théorique. Notons qu'en pratique, un code de calcul de transport (comme par exemple DRAGON) ne génère pas de résonances en temps réel pendant un calcul de cellule. Un code de traitement de données nucléaires (comme par exemple NJOY) est plutôt utilisé pour préparer un certain nombre de données qui sont utilisées par les codes de transport. Par exemple, des sections efficaces en fonction de la dilution peuvent être générées et ensuite être utilisées par un code de transport pour interpoler des valeurs de sections autoprotégées (l'autoprotection des résonances par dilution équivalente est expliquée en détails dans la section 4.1). La tabulation en fonction de la dilution peut aussi être utilisée pour générer des tables de probabilités (dont il sera question dans la section 4.2.1).

3.2 Équation de transport avec probabilités de collision

Dans ce travail, la méthode des probabilités de collision sera utilisée pour résoudre l'équation de transport (et l'équation de ralentissement, introduite plus loin et utilisée pour l'autoprotection). Notons tout d'abord que pour la méthode des probabilités de collision, on considère une source isotrope dans le référentiel du LAB. Cette approximation est corrigée en appliquant une correction de transport à certaines sections efficaces (section 3.1.4). Pour l'instant, on aura donc

$$Q(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} Q(\mathbf{r}, E) \tag{3.36}$$

ou alternativement, dans le formalisme multigroupe,

$$Q_g(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = \frac{Q_g(\mathbf{r})}{4\pi} = \frac{1}{4\pi} \sum_{h=1}^{G} \Sigma_{s,0,g\leftarrow h}(\mathbf{r})\phi_h(\mathbf{r}) + \frac{1}{4\pi k_{eff}} \sum_{m=1}^{M^{\text{fiss}}} \chi_{m,g} \sum_{h=1}^{G} \nu\Sigma_{\text{f},m,h}(\mathbf{r})\phi_h(\mathbf{r}). \tag{3.37}$$

On commence d'abord par intégrer le flux angulaire de l'équation intégrale multigroupe (éq. (3.26)) sur $d^2\Omega$ pour obtenir le flux intégré,

$$\phi_g(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} \int_0^{\infty} \mathrm{e}^{-\tau_g(s)} Q_g(\mathbf{r} - s\mathbf{\Omega}) ds d^2\Omega, \tag{3.38}$$

qu'on peut réécrire en fonction de la variable $\mathbf{r}' = \mathbf{r} - s\mathbf{\Omega}$,

$$\phi_g(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{\infty} \frac{\mathrm{e}^{-\tau_g(s)}}{s^2} Q_g(\mathbf{r}') d^3r' \tag{3.39}$$

avec $d^3r' = s^2 ds d^2\Omega$. On considère maintenant une cellule qu'on divise en un ensemble de volumes V_i. Pour cette thèse, nous considérons une seule cellule et les conditions frontières seront implémentées directement dans les probabilités de collision. On suppose des sources uniformes sur chaque volume V_i, et l'intégrale sur d^3r' sera exprimée comme une somme d'intégrales, chaque terme correspondant à un volume V_i. En multipliant l'équation (3.39) par $\Sigma_g(\mathbf{r})$ et en intégrant sur un volume V_j donné, on a

$$\int_{V_j} \Sigma_g(\mathbf{r})\phi_g(\mathbf{r}) d^3r = \frac{1}{4\pi} \int_{V_j} \Sigma_g(\mathbf{r}) \Big(\sum_i Q_{i,g} \int_{V_i} \frac{\mathrm{e}^{-\tau_g(s)}}{s^2} d^3r' \Big) d^3r \tag{3.40}$$

$$Q_{i,g} = \sum_h \Sigma_{\text{s}0,i,g\leftarrow h}\phi_{i,h} + \frac{1}{k_{eff}} \sum_{m=1}^{M^{\text{fiss}}} \chi_{m,g} \sum_h \nu\Sigma_{\text{f},i,m,h}\phi_{i,h}. \tag{3.41}$$

La variable r est utilisée dans le volume j alors que la variable r' est utilisée dans le volume i. Définissons maintenant quelques quantités moyennées sur l'espace,

$$\phi_{j,g} = \frac{1}{V_j} \int_{V_j} \phi_g(\mathbf{r}) d^3r \tag{3.42}$$

$$\Sigma_{j,g} = \frac{1}{V_j \phi_{j,g}} \int_{V_j} \Sigma_g(\mathbf{r}) \phi_g(\mathbf{r}) d^3r \tag{3.43}$$

ainsi que les probabilités de collision P_{ij} et p_{ij},

$$p_{ij,g} = \frac{P_{ij,g}}{\Sigma_{j,g}} = \frac{1}{4\pi V_i} \int_{V_i} \int_{V_j} \frac{\mathrm{e}^{-\tau_g(s)}}{s^2} d^3r d^3r'. \tag{3.44}$$

Nous sommes maintenant en mesure d'écrire l'équation de transport sous sa forme de probabilités de collision,

$$\phi_{i,g} = \sum_j Q_{j,g} p_{ij,g}. \tag{3.45}$$

Notons aussi que lorsqu'on veut inclure les conditions frontières dans le calcul d'une matrice de probabilités de collision, il nous faut aussi les probabilités de volume à surface et de surface à surface. Ces quantités représentent les probabilités qu'un neutron, né dans un volume i ou entrant par une surface α, respectivement, atteigne une surface (qu'on dénote par α ou β). Nous aurons les mêmes expressions que pour les probabilités volume à volume, éq. (3.44), mais au lieu d'intégrer sur les volumes initial et final, les probabililités volume à surface et surface à surface requièrent une intégration sur le volume initial et la surface finale et sur les surfaces initiale et finale, respectivement. Un facteur additionnel, donné par le produit scalaire entre la direction du neutron et la normale à la surface, doit aussi être inclus (Marleau (2001)). Nous avons donc

$$p_{i\alpha,g} = \frac{1}{4\pi V_i} \int_{V_i} \int_{S_\alpha} \frac{\mathrm{e}^{-\tau_g(s)}}{s^2} (\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_-) d^2r d^3r' \tag{3.46}$$

$$p_{\alpha\beta,g} = \frac{1}{\pi S_\alpha} \int_{S_\alpha} \int_{S_\beta} \frac{\mathrm{e}^{-\tau_g(s)}}{s^2} (\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_-)(\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_+) d^2r d^2r'. \tag{3.47}$$

Il faut aussi considérer les probabilités surface à volume,

$$p_{\alpha i,g} = \frac{1}{\pi S_\alpha} \int_{S_\alpha} \int_{V_i} \frac{\mathrm{e}^{-\tau_g(s)}}{s^2} (\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_+) d^3r d^2r'. \tag{3.48}$$

En pratique, les termes $p_{\alpha i}$ n'ont pas besoin d'être calculés puisque $\frac{S_\alpha}{4} p_{\alpha i} = V_i p_{i\alpha}$. On distingue deux normales à la surface, $\vec{N}_-$ pour la normale dirigée vers l'intérieur et $\vec{N}_+$ pour la

normale dirigée vers l'extérieur.

3.2.1 Calcul des probabilités de collision

Pour pouvoir solutionner l'équation (3.45), il nous faut maintenant calculer les probabilités de collision (PC). On peut interpréter le terme $p_{ij,g}$ comme étant la probabilité qu'un neutron dans le groupe g, "né" dans la région i, ait une première collision (n'importe quelle interaction) dans la région j. Pour le développement qui suit, on ne considérera qu'une géométrie en 2 dimensions, c'est-à-dire finie dans deux dimensions et qui s'étend à l'infinie dans l'autre.

Considérons l'équation (3.44), où on doit évaluer 6 intégrales, trois pour le volume final j, d^3r, et trois pour le volume initial i, d^3r' (Marleau (2001)). Pour le volume final, on écrit d'abord les intégrales en coordonnées sphériques, $d^3r = s^2 \sin\theta d\theta d\phi ds$,

$$p_{ij,g} = \frac{1}{4\pi V_i} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\theta \int_{s_{j-1/2}}^{s_{j+1/2}} \left(\int_{V_i} \mathrm{e}^{-\tau_g(s)} d^3r' \right) \sin\theta ds. \tag{3.49}$$

On peut ensuite projeter s dans le plan (x, y) avec $\rho = s\sin\theta$ et faire le changement de variable $u = \cos\theta$. On obtient

$$p_{ij,g} = \frac{1}{4\pi V_i} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{1} du \int_{\rho_{j-1/2}}^{\rho_{j+1/2}} \left(\int_{V_i} \mathrm{e}^{-\tau_g(s)} d^3r' \right) \frac{1}{\sqrt{1-u^2}} d\rho. \tag{3.50}$$

Pour les intégrales sur le volume initial, d^3r', on prendra un système de coordonnées défini par z', h' et ρ', où h' et ρ' représentent pour l'instant un système de coordonnées arbitraire qui décrit une position dans le plan (x, y). Comme on considère ici que la géométrie est homogène et infinie en z', on aura, pour une fonction f arbitraire,

$$\frac{1}{V_i} \int_{-\infty}^{\infty} dz' \int_{h' \in V_i} dh' \int_{\rho' \in V_i} f(\rho', h') d\rho' = \frac{1}{V_i^{2D}} \int_{h' \in V_i} \int_{\rho' \in V_i} f(\rho', h') d\rho' dh'. \tag{3.51}$$

On peut alors écrire l'expression pour une composante p_{ij} comme

$$V_i^{2D} p_{ij} = \tilde{p}_{ij} = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{h' \in V_i} dh' \int_{-1}^{1} du \int_{\rho_{i-1/2}}^{\rho_{i+1/2}} d\rho' \int_{\rho_{j-1/2}}^{\rho_{j+1/2}} \frac{\mathrm{e}^{-\tau(s)}}{\sqrt{1-u^2}} d\rho. \tag{3.52}$$

Pour ce qui suit (et pour l'expression précédente), on omet l'indice g, mais toutes les quantités présentées ici sont calculées pour chacun des groupes d'énergie. Il nous faut maintenant exprimer $\tau(s)$ en fonction des variables ρ et ρ'. D'après l'équation (3.27) et en considérant des sections efficaces constantes dans chaque région (Σ_i), $\tau(s)$ sera donc calculé comme une somme dont chaque terme sera une section efficace multipliée par la longueur du segment qui

traverse la région correspondante, la droite portant les segments étant donnée par l'angle ϕ. On aura donc, pour $i \neq j$,

$$\tau(s) = \frac{1}{\sqrt{1-u^2}}\Big((\rho_{i+1/2} - \rho')\Sigma_i + (\rho - \rho_{j-1/2})\Sigma_j + \sum_{k=i+1}^{j-1} \Sigma_k \Delta\rho_k\Big) \tag{3.53}$$

avec $\Delta\rho_k = \rho_{k+1/2} - \rho_{k-1/2}$ où $\rho_{i\pm1/2}, \rho_{j\pm1/2}$ et $\rho_{k\pm1/2}$ représentent les limites des régions i, j et k le long de la droite portée par l'angle ϕ. Si $i = j$,

$$\tau(s) = \frac{1}{\sqrt{1-u^2}}(\rho - \rho'). \tag{3.54}$$

On peut maintenant intégrer sur ρ et ρ', ce qui donne, pour $i \neq j$,

$$\int_{\rho_{i-1/2}}^{\rho_{i+1/2}} d\rho' \int_{\rho_{j-1/2}}^{\rho_{j+1/2}} \frac{\mathrm{e}^{-\tau(s)}}{\sqrt{1-u^2}} d\rho = \frac{\sqrt{1-u^2}}{\Sigma_i\Sigma_j} \exp(-\sum_{k=i+1}^{j-1} \Sigma_k \Delta\rho_k)$$
$$\Big(-1 + \exp(-\frac{\rho_{i+1/2} - \rho_{i-1/2}}{\sqrt{1-u^2}}\Sigma_i)\Big)\Big(\exp(-\frac{\rho_{j+1/2} - \rho_{j-1/2}}{\sqrt{1-u^2}}\Sigma_j) - 1\Big). \tag{3.55}$$

On obtient donc

$$\tilde{p}_{ij} = \frac{1}{4\pi\Sigma_i\Sigma_j} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{h' \in V_i} dh' \int_{-1}^{1} \sqrt{(1-u^2)}\Big(-\exp(\frac{-\tau_{i+1/2,j+1/2}}{\sqrt{1-u^2}}) +$$
$$\exp(\frac{-\tau_{i+1/2,j-1/2}}{\sqrt{1-u^2}}) + \exp(\frac{-\tau_{i-1/2,j+1/2}}{\sqrt{1-u^2}}) - \exp(\frac{-\tau_{i-1/2,j-1/2}}{\sqrt{1-u^2}})\Big) du \tag{3.56}$$

avec

$$\tau_{i\pm1/2,j\pm1/2} = (\rho_{i+1/2} - \rho_{i\pm1/2})\Sigma_i + (\rho_{j\pm1/2} - \rho_{j-1/2})\Sigma_j + \sum_{k=i+1}^{j-1} (\rho_{k+1/2} - \rho_{k-1/2})\Sigma_k. \tag{3.57}$$

L'intégrant étant symétrique par rapport à u, on peut intégrer sur u de 0 à 1, puis multiplier le résultat par 2. Finalement, on exprimera le résultat avec des fonctions de Bickley, définies comme

$$\mathrm{Ki}_n(x) = \int_0^1 \exp(\frac{-x}{\sqrt{1-u^2}})(\sqrt{1-u^2})^{n-2} du. \tag{3.58}$$

On a alors

$$\tilde{p}_{ij} = \frac{1}{2\pi\Sigma_i\Sigma_j} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{h' \in V_i} dh'\Big(-\mathrm{Ki}_3(\tau_{i+1/2,j+1/2})$$
$$+\mathrm{Ki}_3(\tau_{i+1/2,j-1/2}) + \mathrm{Ki}_3(\tau_{i-1/2,j+1/2}) - \mathrm{Ki}_3(\tau_{i-1/2,j-1/2})\Big). \tag{3.59}$$

Pour $i = j$, l'intégrale sur ρ doit être séparée en deux parties, une pour $\rho < \rho'$ et l'autre pour

$\rho > \rho'$,

$$\int_{\rho_{i-1/2}}^{\rho_{i+1/2}} d\rho' \int_{\rho_{j-1/2}}^{\rho_{j+1/2}} \frac{\mathrm{e}^{-\tau(s)}}{\sqrt{1-u^2}} d\rho =$$
$$\int_{\rho_{i-1/2}}^{\rho_{i+1/2}} d\rho' \frac{1}{\sqrt{1-u^2}} \Big[\int_{\rho_{i-1/2}}^{\rho'} \exp\Big(- \frac{(\rho'-\rho)\Sigma_i}{\sqrt{1-u^2}} \Big) d\rho + \int_{\rho'}^{\rho_{i+1/2}} \exp\Big(- \frac{(\rho-\rho')\Sigma_i}{\sqrt{1-u^2}} \Big) d\rho \Big]. \quad (3.60)$$

On obtient donc

$$\int_{\rho_{i-1/2}}^{\rho_{i+1/2}} d\rho' \int_{\rho_{j-1/2}}^{\rho_{j+1/2}} \frac{\mathrm{e}^{-\tau(s)}}{\sqrt{1-u^2}} d\rho =$$
$$\Big[\frac{(\rho_{i+1/2} - \rho_{i-1/2})}{\Sigma_i} + \frac{\sqrt{1-u^2}}{\Sigma_i^2} \Big(\exp\Big(- \frac{(\rho_{i+1/2} - \rho_{i-1/2})\Sigma_i}{\sqrt{1-u^2}} \Big) - 1 \Big) \Big]$$
$$+ \Big[\frac{(\rho_{i+1/2} - \rho_{i-1/2})}{\Sigma_i} + \frac{\sqrt{1-u^2}}{\Sigma_i^2} \Big(\exp\Big(- \frac{(\rho_{i+1/2} - \rho_{i-1/2})\Sigma_i}{\sqrt{1-u^2}} \Big) - 1 \Big) \Big]$$
$$= \frac{2}{\Sigma_i^2} \Big(\tau_{i-1/2,i+1/2} + \sqrt{(1-u^2)} \exp(-\frac{\tau_{i-1/2,i+1/2}}{\sqrt{1-u^2}}) - \sqrt{1-u^2} \Big). \quad (3.61)$$

Le terme $\tilde{p}_{ii}$ peut alors être exprimé comme

$$\tilde{p}_{ii} = \frac{1}{\pi \Sigma_i^2} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{h' \in V_i} dh' \Big[\tau_{i-1/2,i+1/2} + \mathrm{Ki}_3(\tau_{i-1/2,i+1/2}) - \frac{\pi}{4} \Big]. \quad (3.62)$$

Une précision est ici nécessaire. Quand on calcule les termes diagonaux de la matrice de probabilités de collision (les $\tilde{p}_{ii}$), l'expression (3.62) ne donne pas toujours toutes les contributions nécessaires. Si on considère par exemple une géométrie avec des cylindres concentriques, un segment peut partir de la région i, traverser un certain nombre de régions et ensuite repasser dans la région i. Ce segment donnera alors une contribution au terme $\tilde{p}_{ii}$, qu'on doit calculer avec l'expression (3.59). Cette contribution s'ajoute à la contribution calculée avec l'expression (3.62).

Pour les probabilités volume à surface et surface à volume, considérons les équations (3.46) et (3.48). Dans le cas volume à surface, on exprime l'intégrale sur le volume initial comme pour les termes p_{ij}, et l'intégrale sur la surface finale avec $(\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_-) d^2r = s^2 \sin\theta d\phi d\theta = s^2 d\phi du$. On a donc

$$\tilde{p}_{i\alpha} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{h' \in V_i} dh' \int_0^1 du \int_{\rho_{i-1/2}}^{\rho_{i+1/2}} \mathrm{e}^{-\tau(s_\alpha)} d\rho' \quad (3.63)$$

où $\tau(s_\alpha)$ représente le chemin optique évalué entre le point ρ' et la surface α, pour un angle ϕ donné,

$$\tau(s_\alpha) = \frac{1}{\sqrt{1-u^2}} \Big((\rho_{i+1/2} - \rho')\Sigma_i + \sum_{k=i+1}^{N_{\phi,h'}} \Delta\rho_k \Sigma_k \Big) \quad (3.64)$$

et où $N_{\phi,h'}$ représente le nombre de régions traversées par le segment correspondant à (ϕ, h'). En intégrant sur ρ', on obtient

$$\tilde{p}_{i\alpha} = \frac{1}{2\pi\Sigma_i}\int_0^{2\pi} d\phi \int_{h'\in V_i} dh' \int_0^1 \sqrt{(1-u^2)}\Big(\exp\Big(-\frac{\sum_{k=i+1}^{N_{\phi,h'}}\Delta\rho_k\Sigma_k}{\sqrt{1-u^2}}\Big) - \exp\Big(\frac{(-\rho_{i+1/2}+\rho_{i-1/2})\Sigma_i - \sum_{k=i+1}^{N_{\phi,h'}}\Delta\rho_k\Sigma_k}{\sqrt{1-u^2}}\Big)\Big)du$$
$$= \frac{1}{2\pi\Sigma_i}\int_0^{2\pi} d\phi \int_{h'\in V_i} dh' \int_0^1 \sqrt{(1-u^2)}\Big(\exp(-\frac{\tau_{i+1/2,\alpha}}{\sqrt{1-u^2}}) - \exp(-\frac{\tau_{i-1/2,\alpha}}{\sqrt{1-u^2}})\Big)du. \tag{3.65}$$

On intègre finalement sur u pour obtenir

$$\tilde{p}_{i\alpha} = \frac{1}{2\pi\Sigma_i}\int_0^{2\pi} d\phi \int_{h'\in V_i} dh'\Big(\mathrm{Ki}_3(\tau_{i+1/2,\alpha}) - \mathrm{Ki}_3(\tau_{i-1/2,\alpha})\Big) \tag{3.66}$$

et $\tilde{p}_{i\alpha} = \tilde{p}_{\alpha i}$. Il reste maintenant à évaluer les probabilités surface à surface. Pour l'intégrale sur la surface initiale, nous aurons

$$\frac{1}{S_\alpha}\int_{S_\alpha}(\vec{\Omega}\cdot\vec{N}_+)f(h',\rho')d^2r' = \frac{1}{S_\alpha^{2D}}\int_{h'\in S_\alpha}\sqrt{1-u^2}f(h',\rho'(h'))dh'. \tag{3.67}$$

Pour l'intégrale finale sur la surface on procède comme pour le terme $p_{i\alpha}$ et dans ce cas-ci le paramètre τ sera donné par

$$\tau(s_{\alpha,\beta}) = \frac{1}{\sqrt{1-u^2}}\sum_{k=1}^{N_{\phi,h'}}\Delta\rho_k\Sigma_k = \frac{\tau_{\alpha,\beta}}{\sqrt{1-u^2}} \tag{3.68}$$

où $N_{\phi,h'}$ représente toujours le nombre de régions traversées par le segment correspondant à (ϕ, h') (donc on utilise le segment pour calculer la contribution à la probabilité qu'un neutron entre par une surface et atteigne une autre surface, sans aucune interaction). En suivant la même démarche que pour les autres probabilités, on trouve

$$\frac{S_\alpha^{2D}}{4}p_{\alpha,\beta} = \tilde{p}_{\alpha,\beta} = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} d\phi \int_{h'\in S_\alpha}\mathrm{Ki}_3(\tau_{\alpha,\beta})dh'. \tag{3.69}$$

En pratique, le processus pour l'intégration consiste à faire une sommation en utilisant les lignes d'intégration (les *tracks*) contenues dans un fichier généré avant le calcul des probabilités de collision (qu'on appelle fichier de *tracking*). Plusieurs valeurs d'angles ϕ sont représentées dans le fichier et pour un angle ϕ donné, plusieurs lignes d'intégration, toutes perpendiculaires à une même droite, sont données avec les numéros de régions traversées par chacune des lignes ainsi que la longueur du segment dans chacune des régions traversées.

Probabilités en 1D et 3D

Bien que dans le présent travail on utilise exclusivement des calculs en 2D, il est pertinent de mentionner que le calcul des probabilités de collision en 1D et 3D est similaire à celui en 2D. Au lieu de considérer une géométrie infinie en z comme dans l'équation (3.51), on considère toutes les directions comme étant finies (en 3D) ou on considère la géométrie infinie dans deux des trois dimensions (en 1D). Au final, pour calculer un élément p_{ij}, on intègre une fonction qui dépend du chemin optique entre deux points, mais la fonction qu'on intègre est différente. Par exemple, pour les composantes p_{ij}, on a

$$\tilde{p}_{ij}^{1D} = \frac{1}{2\Sigma_i\Sigma_j}\Big(E_3(\tau_{i-1/2,j+1/2}) - E_3(\tau_{i-1/2,j-1/2}) - E_3(\tau_{i+1/2,j+1/2}) + E_3(\tau_{i+1/2,j-1/2})\Big) \quad (3.70)$$

pour les probabilités en 1D, avec

$$E_n(x) = \int_0^1 \exp\big(\frac{-x}{u}\big)u^{n-2}du. \quad (3.71)$$

Pour les probabilités en 3D, on a

$$\tilde{p}_{ij}^{3D} = \frac{1}{4\pi\Sigma_i\Sigma_j}\int_0^{4\pi} d^2\Omega \int_{x'\in V_i} dx' \int_{y'\in V_i} dy' \Big(\exp\Big(-\tau_{i-1/2,j+1/2}\Big) - \exp\Big(-\tau_{i-1/2,j-1/2}\Big) - \exp\Big(-\tau_{i+1/2,j+1/2}\Big) + \exp\Big(-\tau_{i+1/2,j-1/2}\Big)\Big). \quad (3.72)$$

L'évaluation du terme τ est un peu différente dans le cas du 1D ou du 3D, mais dans tous les cas on évalue le chemin optique en considérant la trajectoire entre deux points dans deux éléments de volumes et les matériaux traversés par cette trajectoire. Dans le cas d'un calcul en 3D, on intègre sur deux angles au lieu d'un (comme pour le 2D) et pour une direction donnée, les lignes d'intégration sont perpendiculaires à un plan et non à une droite (comme pour le 2D).

3.2.2 Normalisation des probabilités de collision

Comme toutes probabilités, les probabilités de collision doivent satisfaire certaines conditions de normalisation. Dans le cas présent, nous aurons deux ensembles de conditions. Tout d'abord, un neutron "né" dans le volume doit nécessairement soit avoir une collision dans une des régions, soit se rendre à une des surfaces. Cette condition prend la forme, pour tout

i,

$$\sum_{\alpha}^{N_S} p_{i\alpha} + \sum_{j}^{N_I} p_{ij}\Sigma_j = 1 \tag{3.73}$$

où N_S représente le nombre de surfaces et N_I le nombre de régions. On a aussi qu'un neutron entrant par une surface doit soit avoir une collision dans une des régions, soit atteindre une surface, ce qui donne la condition, pour tout α,

$$\sum_{\beta}^{N_S} p_{\alpha\beta} + \sum_{i}^{N_I} p_{\alpha i}\Sigma_i = 1. \tag{3.74}$$

Lorsqu'on procède au calcul numérique des PC, en passant d'intégrales à des sommes sur les *tracks* contenues dans le fichier d'intégration, les conditions (3.73) et (3.74) ne sont pas exactement respectées. Bien que les écarts avec la normalisation soient en général assez faibles, il peut être important dans certains cas de s'assurer que la normalisation soit respectée en ajustant légèrement les matrices de PC. Il existe plusieurs façons de normaliser les matrices de PC. Nous utilisons pour cette thèse une normalisation de Gelbard (Gelbard (1989)).

Pour commencer, on détermine les erreurs (les écarts avec les conditions (3.73) et (3.74)), ce qui nous indique les ajustements totaux qu'il faudra apporter aux matrices de probabilités de collision. Ces erreurs seront données par

$$R_j = \Sigma_j V_j - \sum_{\alpha}^{N_S} \frac{S_\alpha}{4}\Sigma_j p_{\alpha j} - \sum_{i}^{N_I} \Sigma_j \Sigma_i V_i p_{ij} \tag{3.75}$$

$$R_\beta = \frac{S_\beta}{4} - \sum_{\alpha}^{N_S} \frac{S_\alpha}{4} p_{\alpha\beta} - \sum_{i}^{N_I} \Sigma_i V_i p_{i\beta}. \tag{3.76}$$

Si les conditions de conservation étaient parfaitement respectées, nous aurions $R_j = R_\beta = 0$ et les probabilités de collision seraient déjà normalisées. Si ce n'est pas le cas, alors on appliquera les corrections suivantes aux matrices volume-à-volume et surface-à-surface,

$$p_{ij}^G = p_{ij} + \frac{1}{\tilde{\Sigma}} \frac{1}{\Sigma_i \Sigma_j V_i} \Big(\Sigma_i V_i R_j + \Sigma_j V_j R_i - \Sigma_i \Sigma_j V_i V_j \tilde{R}_v \Big) \tag{3.77}$$

$$p_{\alpha\beta}^G = p_{\alpha\beta} + \frac{1}{\tilde{S}} \frac{4}{S_\alpha} \Big(\frac{S_\alpha}{4} R_\beta + \frac{S_\beta}{4} R_\alpha - \frac{S_\alpha}{4} \frac{S_\beta}{4} \tilde{R}_s \Big) \tag{3.78}$$

où

$$\tilde{\Sigma} = \sum_{i}^{N_I} \Sigma_i V_i \tag{3.79}$$

$$\tilde{S} = \sum_{\alpha}^{N_s} \frac{S_\alpha}{4} \tag{3.80}$$

$$\tilde{R_v} = \frac{1}{\tilde{\Sigma}} \sum_{i}^{N_I} R_i \tag{3.81}$$

$$\tilde{R_s} = \frac{1}{\tilde{S}} \sum_{\alpha}^{N_s} R_\alpha. \tag{3.82}$$

Les matrices ainsi obtenues respectent les conditions de conservations (3.73) et (3.74).

3.2.3 Conditions frontières

Une fois toutes les probabilités calculées, on peut appliquer les conditions frontières blanches à la matrice de probabilités de collision (volume à volume). Nous avons les matrices $\mathbf{P}_{vv}$, $\mathbf{P}_{vs}$, $\mathbf{P}_{sv}$ et $\mathbf{P}_{ss}$ tel que

$$\Big(\mathbf{P}_{vv}\Big)_{i,j} = \frac{1}{V_i}\tilde{p}_{ij} \tag{3.83}$$

$$\Big(\mathbf{P}_{vs}\Big)_{i,\alpha} = \frac{1}{V_i}\tilde{p}_{i\alpha} \tag{3.84}$$

$$\Big(\mathbf{P}_{sv}\Big)_{\alpha,i} = \frac{4}{S_\alpha}\tilde{p}_{\alpha i} \tag{3.85}$$

$$\Big(\mathbf{P}_{ss}\Big)_{\alpha,\beta} = \frac{4}{S_\alpha}\tilde{p}_{\alpha\beta}. \tag{3.86}$$

Pour appliquer les conditions frontières blanches, où tous les neutrons qui arrivent à la frontière sont retournés dans le système, on doit calculer la probabilité qu'un neutron sorte du système (avec des conditions de vide aux frontières) puis ajouter ces probabilités aux probabilités volume à volume, de sorte que la probabilité de sortie d'un neutron devient 0, et celle d'une collision dans le volume devient 1. Cette condition est appliquée de la façon suivante,

$$\Big(\mathbf{P}_{vv}\Big)^{\mathrm{c}} = \mathbf{P}_{vv} + \mathbf{P}_{vs}\Big(\mathbf{I} - \mathbf{P}_{ss}\Big)^{-1}\mathbf{P}_{sv} \tag{3.87}$$

où du côté gauche de l'équation on retrouve la matrice avec conditions frontières blanches et où le terme $\mathbf{P}_{vv}$ du côté droit représente la matrice de PC avec conditions de vide aux frontières.

3.2.4 Calcul des dérivées des probabilités de collision

Pour certains des calculs qui seront présentés plus loin, il sera nécessaire de calculer les dérivées des probabilités de collision. Nous pouvons obtenir les dérivées grâce à une propriété des fonctions de Bickley (Hébert (2009)),

$$\frac{d}{dx}\mathrm{Ki}_n(x) = -\mathrm{Ki}_{n-1}(x). \tag{3.88}$$

Dans cette thèse, nous dériverons les probabilités de collision par rapport à la densité d'un isotope, qu'on dénotera par N^p. Le raisonnement présenté dans cette section peut toutefois s'appliquer à des dérivées par rapport à d'autres quantités. On pourrait aussi dériver par rapport à une valeur de section efficace microscopique ou directement par rapport à une section efficace macroscopique. Dans la mesure où on peut évaluer la dérivée d'une section efficace macroscopique en fonction de la température, on peut aussi utiliser le développement présenté ici pour dériver par rapport à cette température. En considérant la relation (3.88), on peut donc écrire

$$\begin{aligned} q_{ij} = \frac{d(\Sigma_i\Sigma_j\tilde{p}_{ij})}{dN^p} = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} d\phi \int_{h'\in V_i} dh' \\ \Big[\mathrm{Ki}_2(\tau_{i+1/2,j+1/2})\frac{d\tau_{i+1/2,j+1/2}}{dN^p} - \mathrm{Ki}_2(\tau_{i+1/2,j-1/2})\frac{d\tau_{i+1/2,j-1/2}}{dN^p} \\ -\mathrm{Ki}_2(\tau_{i-1/2,j+1/2})\frac{d\tau_{i-1/2,j+1/2}}{dN^p} + \mathrm{Ki}_2(\tau_{i-1/2,j-1/2})\frac{d\tau_{i-1/2,j-1/2}}{dN^p}\Big] \end{aligned} \tag{3.89}$$

et

$$\frac{d\tilde{p}_{ij}}{dN^p} = \frac{1}{\Sigma_i\Sigma_j}\Big(q_{ij} - \tilde{p}_{ij}\frac{d(\Sigma_i\Sigma_j)}{dN^p}\Big). \tag{3.90}$$

Comme les surfaces et volumes ne dépendent pas de la densité (ou des sections microscopiques ou de la température), on peut exprimer dp_{ij}/dN^p en fonction de $d\tilde{p}_{ij}/dN^p$ de la même façon que pour p_{ij} et $\tilde{p}_{ij}$. Pour les probabilités volume à surface et surface à surface, on aura

$$q_{i\alpha} = \frac{d(\Sigma_i\tilde{p}_{i\alpha})}{dN^p} = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} d\phi \int_{h'\in V_i} dh'\Big[-\frac{d\tau_{i+\frac{1}{2},\alpha}}{dN^p}\mathrm{Ki}_2(\tau_{i+\frac{1}{2},\alpha}) + \frac{d\tau_{i-\frac{1}{2},\alpha}}{dN^p}\mathrm{Ki}_2(\tau_{i-\frac{1}{2},\alpha})\Big] \tag{3.91}$$

$$\frac{d\tilde{p}_{i\alpha}}{dN^p} = \frac{1}{\Sigma_i}\Big(q_{i\alpha} - \tilde{p}_{i\alpha}\frac{d(\Sigma_i)}{dN^p}\Big) \tag{3.92}$$

$$\frac{d\tilde{p}_{\alpha,\beta}}{dN^p} = \frac{-1}{2\pi}\int_0^{2\pi} d\phi \int_{h'\in V_i} dh'\frac{d\tau_{\alpha,\beta}}{dN^p}\mathrm{Ki}_2(\tau_{\alpha,\beta}). \tag{3.93}$$

Lorsqu'on applique une normalisation aux probabilités de collision (pour imposer les conditions de conservation), on doit aussi procéder à un ajustement pour les dérivées des PC. On

aura donc

$$\begin{aligned}\frac{dp_{ij}^G}{dN^p} &= \frac{dp_{ij}}{dN^p} - \frac{d\tilde{\Sigma}}{dN^p}\frac{1}{\tilde{\Sigma}^2}\frac{1}{\Sigma_i\Sigma_j V_i}\Big(\Sigma_i V_i R_j + \Sigma_j V_j R_i - \Sigma_i\Sigma_j V_i V_j \tilde{R}_v\Big) \\ &+ \frac{d}{dN^p}\Big(\frac{1}{\Sigma_i\Sigma_j V_i}\Big)\frac{1}{\tilde{\Sigma}}\Big(\Sigma_i V_i R_j + \Sigma_j V_j R_i - \Sigma_i\Sigma_j V_i V_j \tilde{R}_v\Big) \\ &+ \frac{1}{\tilde{\Sigma}}\frac{1}{\Sigma_i\Sigma_j V_i}\Big(\frac{d\Sigma_i}{dN^p}V_i R_j + \Sigma_i V_i \frac{dR_j}{dN^p} + \frac{d\Sigma_j}{dN^p}V_j R_i \\ &+ \Sigma_j V_j \frac{dR_i}{dN^p} - \frac{d(\Sigma_i\Sigma_j)}{dN^p}V_i V_j \tilde{R}_v - \Sigma_i\Sigma_j V_i V_j \frac{d\tilde{R}_v}{dN^p}\Big)\end{aligned} \tag{3.94}$$

pour les probabilités volume-à-volume et

$$\frac{dp_{\alpha\beta}^G}{dN^p} = \frac{dp_{\alpha\beta}}{dN^p} + \frac{1}{\tilde{S}}\frac{4}{S_\alpha}\Big(\frac{S_\alpha}{4}\frac{dR_\beta}{dN^p} + \frac{S_\beta}{4}\frac{dR_\alpha}{dN^p} - \frac{S_\alpha}{4}\frac{S_\beta}{4}\frac{d\tilde{R}_s}{dN^p}\Big) \tag{3.95}$$

pour les probabilités surface-à-surface, où

$$\frac{d\tilde{\Sigma}}{dN^p} = \sum_i^{N_I}\frac{d\Sigma_i}{dN^p}V_i \tag{3.96}$$

$$\frac{d\tilde{R}_v}{dN^p} = -\frac{d\tilde{\Sigma}}{dN^p}\frac{1}{\tilde{\Sigma}^2}\sum_i^{N_I} R_i + \frac{1}{\tilde{\Sigma}}\sum_i^{N_I}\frac{dR_i}{dN^p} \tag{3.97}$$

$$\frac{d\tilde{R}_s}{dN^p} = \frac{1}{\tilde{S}}\sum_\alpha^{N_s}\frac{dR_\alpha}{dN^p}. \tag{3.98}$$

En dérivant l'équation (3.87), on obtient une expression pour la dérivée de la matrice de probabilités de collision avec conditions blanches,

$$\begin{aligned}\frac{d(\mathbf{P}_{vv})^{\mathrm{c}}}{dN^p} &= \frac{d\mathbf{P}_{vv}}{dN^p} + \Big[\frac{d\mathbf{P}_{vs}}{dN^p}\big(\mathbf{I}-\mathbf{P}_{ss}\big)^{-1}\mathbf{P}_{sv} \\ &+ \mathbf{P}_{vs}\Big\{\Big((\mathbf{I}-\mathbf{P}_{ss})^{-1}\frac{d\mathbf{P}_{ss}}{dN^p}(\mathbf{I}-\mathbf{P}_{ss})^{-1}\Big)\mathbf{P}_{sv} + \big(\mathbf{I}-\mathbf{P}_{ss}\big)^{-1}\frac{d\mathbf{P}_{sv}}{dN^p}\Big\}\Big].\end{aligned} \tag{3.99}$$

Probabilités en 1D et 3D

Précisons ici qu'il est possible d'appliquer un raisonnement similaire pour obtenir les dérivées des probabilités de collision en 1D et 3D. Les dérivées des fonctions qu'on doit intégrer pour calculer les probabilités de collision peuvent être évaluées aussi facilement que pour les

fonctions de Bickley,

$$\frac{dE_n(x)}{dy} = -\frac{dx}{dy}E_{n-1}(x) \tag{3.100}$$

$$\frac{d\exp(-x)}{dy} = -\frac{dx}{dy}\exp(-x). \tag{3.101}$$

On peut donc obtenir les dérivées des PC en 1D et 3D avec

$$q_{ij}^{1D} = \frac{d(\Sigma_i\Sigma_j\tilde{p}_{ij}^{1D})}{dN^p} = \frac{1}{2}\Big(- \frac{d\tau_{i-1/2,j+1/2}}{dN^p}E_2(\tau_{i-1/2,j+1/2}) + \frac{d\tau_{i-1/2,j-1/2}}{dN^p}E_2(\tau_{i-1/2,j-1/2}) + \frac{d\tau_{i+1/2,j+1/2}}{dN^p}E_2(\tau_{i+1/2,j+1/2}) - \frac{d\tau_{i+1/2,j-1/2}}{dN^p}E_2(\tau_{i+1/2,j-1/2})\Big) \tag{3.102}$$

et

$$q_{ij}^{3D} = \frac{d(\Sigma_i\Sigma_j\tilde{p}_{ij}^{3D})}{dN^p} = \frac{1}{4\pi}\int_0^{4\pi} d^2\Omega \int_{x'\in V_i} dx' \int_{y'\in V_i} dy'\Big(- \frac{d\tau_{i-1/2,j+1/2}}{dN^p}\exp\Big(- \tau_{i-1/2,j+1/2}\Big) + \frac{d\tau_{i-1/2,j-1/2}}{dN^p}\exp\Big(- \tau_{i-1/2,j-1/2}\Big) + \frac{d\tau_{i+1/2,j+1/2}}{dN^p}\exp\Big(- \tau_{i+1/2,j+1/2}\Big) - \frac{d\tau_{i+1/2,j-1/2}}{dN^p}\exp\Big(- \tau_{i+1/2,j-1/2}\Big)\Big). \tag{3.103}$$

CHAPITRE 4 Modèles d'autoprotection

Dans ce chapitre, les détails des modèles d'autoprotection sont présentés. Dans la section 3.1.3, les quantités moyennées sur l'énergie ont été définies, incluant le flux neutronique et des sections efficaces multigroupes qui dépendent du flux neutronique mais qui sont aussi requises pour calculer le flux neutronique multigroupe. Toutes les sections efficaces, à part celles de l'hydrogène, ont des résonances. Toutefois, pour les isotopes plus légers, les résonances sont moins nombreuses que pour les isotopes lourds. De plus, ces isotopes ralentissent les neutrons beaucoup plus efficacement que les isotopes lourds, ce qui implique que les neutrons, dans un mélange avec des isotopes légers, font des "bonds" en énergie assez importants, réduisant de beaucoup la probabilité qu'un neutron "tombe" dans une résonance. On ne procède donc pas à des calculs d'autoprotection pour de tels isotopes.

Pour les isotopes plus lourds (typiquement ceux qu'on retrouve dans du combustible nucléaire), l'effet des résonances importantes sur le flux neutronique à l'équilibre doit être pris en compte, et les dépressions résultantes dans le flux font en sorte que cet effet est atténué quand on condense les sections efficaces sur un groupe d'énergie. On doit donc faire un calcul pour obtenir une approximation du flux assez précise pour prendre en compte les dépressions dans le flux. On appelle ce calcul l'autoprotection des résonances et on utilise une approximation du flux comme fonction poids, aussi appelée structure fine, pour pondérer les sections efficaces continues en énergie. Ce calcul se fait avant le calcul du "vrai" flux neutronique, qui utilise les sections multigroupes autoprotégées.

Pour les méthodes présentées ici, nous considérons un seul isotope résonant dans un système avec un ou plusieurs isotopes non-résonants. Si plusieurs isotopes résonants sont présents, ils seront traités un à la fois, indépendamment les uns des autres. Pour une section efficace résonante $\sigma_x(E)$, on peut définir une intégrale de resonance comme

$$I_x^g = \int_g \sigma_x(E)\varphi(E)dE \tag{4.1}$$

où φ correspond à une fonction poids appropriée pour la pondération de la section efficace continue en énergie. On aura alors l'expression suivante pour la section efficace multigroupe autoprotégée correspondante,

$$\sigma_{x,g} = \frac{I_x^g}{\int_g \varphi(E)dE}. \tag{4.2}$$

Deux approches différentes pour évaluer les sections multigroupes autoprotégées sont présentées ici, une méthode par équivalence de dilution et une méthode de sous-groupes.

4.1 Autoprotection par équivalence de dilution

La méthode d'autoprotection par équivalence de dilution utilisée dans cette thèse est la méthode de Stamm'ler généralisée (Hébert et Marleau (1991); Hébert (2004)). Examinons d'abord les approximations faites pour arriver à une équation de transport simplifiée, l'équation de ralentissement. Premièrement, les résonances sont présentes dans une plage d'énergie largement sous l'énergie à laquelle les neutrons sont typiquement produits par la fission. Les sources de fission sont donc négligées. La source dans l'équation 3.45 sera donc uniquement une source de diffusion élastique, qu'on peut exprimer en fonction de l'isotope résonant et des isotopes non-résonants (Hébert (2009)),

$$Q_j^s(E) = R_j^+(\phi_j(E)) + R_j^*(\phi_j(E)) \tag{4.3}$$

$$R_j^+(\phi_j(E)) = \int_0^\infty \Sigma_{s,j}^+(E \leftarrow E')\phi_j(E')dE' \tag{4.4}$$

$$R_j^*(\phi_j(E)) = \int_0^\infty \Sigma_{s,j}^*(E \leftarrow E')\phi_j(E')dE' \tag{4.5}$$

où $\Sigma_{s,j}^+(E \leftarrow E')$ et $\Sigma_{s,j}^*(E \leftarrow E')$ sont les premiers moments de Legendre des sections macroscopiques de diffusion des isotopes non-résonants et de l'isotope résonant, respectivement. L'équation de ralentissement prend alors la forme

$$\phi_i(E) = \sum_{j=1}^{I} p_{ij}(E)\Big(R_j^+(\phi_j(E)) + R_j^*(\phi_j(E))\Big) \tag{4.6}$$

$$p_{ij}(E) = \frac{P_{ij}(E)}{\Sigma_j^+(E) + \Sigma_j^*(E)} \tag{4.7}$$

où Σ^+ et Σ^* sont les sections efficaces macroscopiques totales pour les isotopes non-résonants et l'isotope résonant respectivement. Dans DRAGON, les calculs d'équivalence de dilution sont faits en considérant qu'il n'y a pas de pertes par fuites (conditions frontières réflectives). On aura donc $\sum_{i,j} P_{ij} = 1$.

Ensuite, on exprime le flux $\phi_i(E)$ comme étant le produit d'une partie dite macroscopique, ψ_i, qui représente le comportement asymptotique du flux (hors résonances), et une partie appelée la structure fine (ce dont on a besoin pour les calculs d'autoprotection), $\varphi_i(E)$, qui comprend les variations du flux causées par la structure résonante de certaines sections efficaces,

$$\phi_i(E) = \varphi_i(E)\psi_i(E). \tag{4.8}$$

Regardons maintenant la forme des opérateurs de ralentissement en fonction de ces composantes du flux. On définit d'abord la partie macroscopique du flux, qui correspond au

comportement asymptotique du flux total, en fonction de l'opérateur de ralentissement des isotopes non-résonants,

$$\psi_i(E) = \frac{E}{\Sigma_{s,i}^+(E)} R_i^+(\phi_i(E)). \tag{4.9}$$

On suppose ensuite que l'opérateur de ralentissement de l'isotope résonant agit sur une plage d'énergie très étroite, l'isotope résonant étant typiquement un isotope assez lourd. Nous avons alors

$$R_i^*(\phi_i(E)) = \psi_i(E) R_i^*(\varphi_i(E)). \tag{4.10}$$

L'équation (4.6) s'écrit alors

$$\varphi_i(E) = \sum_{j=1}^{I} p_{ij}(E) \Big(\frac{\Sigma_{s,j}^+(E)}{E} + R_j^*(\varphi_j(E)) \Big). \tag{4.11}$$

Pour déterminer la forme de l'opérateur de ralentissement de l'isotope résonant, on fait une approximation qui consiste à supposer que la perte d'énergie moyenne par collision est significativement plus grande que la largeur (en énergie) des résonances, et que celles-ci sont isolées. C'est ce qu'on appelle l'approximation des résonances étroites (*Narrow Resonances*, ou *NR*). Cela implique que le flux neutronique à proximité d'une résonance est essentiellement déterminé par ce qui se passe "loin" (en terme d'énergie) de la résonance. Ainsi, on néglige les résonances dans la section efficace de diffusion de l'isotope résonant et on ne considère que son comportement loin des résonances,

$$R^*(\varphi(E)) = \gamma \frac{\Sigma_p^*}{E} \tag{4.12}$$

où Σ_p^* représente la section efficace potentielle de l'isotope résonant et $\gamma = \Sigma_s^+ / \Sigma^+$.

Considérons maintenant un cas simple avec une seule région infinie, où un isotope résonant est mélangé avec un ou plusieurs isotopes non-résonants, formant un milieu homogène,

$$p_{ij} = \frac{1}{\Sigma^+ + \Sigma^*(E)} \tag{4.13}$$

$$\varphi(E) = \frac{\Sigma_p^* + \Sigma_s^+}{(\Sigma^*(E) + \Sigma^+)E}. \tag{4.14}$$

En divisant par la densité de l'isotope résonant N^* et en définissant la dilution $\sigma_e = \Sigma^+ / N^*$, on obtient

$$\varphi(E) = \frac{\gamma \sigma_p^* + \gamma \sigma_e}{(\sigma^*(E) + \sigma_e)E} \tag{4.15}$$

Le calcul de $\varphi(E)$ se fait donc assez aisément dans le cas d'un milieu infini et homogène.

Considérons maintenant un cas plus réaliste avec plusieurs régions. Pour ce qui suit, on prend $\gamma = 1$ pour simplifier les calculs. En théorie, la structure fine calculée par NJOY (Macfarlane et Boicourt (1975)) doit être multipliée par γ, mais en pratique ce facteur se simplifie quand on calcule les sections autoprotégées (ce qui implique un ratio de deux quantités qui sont multipliées par γ). Si on assigne toutes les régions résonantes à une seule région c (qu'elles soient connectées ou non), on obtient alors l'équation de ralentissement suivante,

$$\begin{aligned}\varphi_c(E) &= \frac{p_{cc}(E)}{E}\left(\Sigma_c^+(E) + \Sigma_{p,c}^*\right) + \sum_{j\neq c}\frac{p_{cj}(E)\Sigma_j^+(E)}{E} \\ &= \frac{p_{cc}(E)}{E}\left(\Sigma_c^+(E) + \Sigma_{p,c}^*\right) + \sum_{j\neq c}\frac{P_{cj}(E)}{E}. \end{aligned} \tag{4.16}$$

En utilisant le fait que $\sum_{i,j} Pij = 1$ (on travaille ici avec des conditions frontières de réflexion totale), et donc que $\sum_{j\neq c} P_{cj}(E) = 1 - P_{cc}$, on peut réécrire cette équation, dans la région c, comme

$$\frac{p_{cc}(E)}{E}\left(\Sigma_c^*(E) - \Sigma_{p,c}^*\right) = \frac{1}{E} - \varphi_c(E). \tag{4.17}$$

Le terme p_{cc} représente la probabilité combustible à combustible, c'est-à-dire la probabilité qu'un neutron créé dans le combustible (la région c) ait une première collision dans le combustible. La dépendance en E de p_{cc} vient de la section efficace totale de l'isotope résonant, $p_{cc}(\Sigma_c^*(E))$. La méthode présentée ici, une méthode dite de Stamm'ler généralisée, consiste à faire une expansion de la probabilité combustible à combustible, pour un groupe g donné,

$$p_{cc}(\Sigma_c^*(E)) = \sum_{m=1}^{M}\frac{\alpha_m^g}{\Sigma_c^*(E) + \Sigma_m^g}, \quad E_{g+1} < E < E_g \tag{4.18}$$

avec

$$\sum_{m=1}^{M}\alpha_m^g = 1. \tag{4.19}$$

Pour les travaux dont il est ici question, $M = 3$. En substituant l'expansion de p_{cc} dans l'équation (4.17), et en réarrangeant, on obtient

$$\varphi_c(E) = \sum_{m=1}^{3}\alpha_m^g\frac{\sigma_{p,c}^* + \sigma_m^g}{(\sigma_c^*(E) + \sigma_m^g)E} \tag{4.20}$$

avec $\sigma_m^g = \Sigma_m^g/N^*$. On peut donc remarquer que l'expression de la structure fine, pour un cas hétérogène, prend la forme d'une somme de M structures fines pour un cas homogène. Alternativement, on peut exprimer l'intégrale de résonance pour un cas hétérogène comme la somme de M intégrales de résonance associées à un cas homogène. Pour connaître les coefficients de cette somme, il faut donc déterminer 5 coefficients pour l'expansion de la

probabilité combustible à combustible. Définissons la fonction Ξ (*escape function*),

$$\Xi(\Sigma_c^*(E)) = \frac{1}{p_{cc}(\Sigma_c^*(E))} - \Sigma_c^*(E). \tag{4.21}$$

Le comportement de cette fonction peut être représenté par 5 degrés de liberté,

$$\Xi(\Sigma^*) = \frac{a_1(\Sigma^*)^2 + a_2\Sigma^* + a_3}{(\Sigma^*)^2 + b_1\Sigma^* + b_2}. \tag{4.22}$$

La procédure pour calculer les coefficients α_m^g et Σ_m^g est itérative. Elle consiste à calculer, à une itération donnée, la fonction Ξ pour 5 (ou $2M-1$ de manière générale) valeurs de la section efficace macroscopique totale de l'isotope résonant, Σ^*, en prenant des multiples de la valeur obtenue à l'itération précédente. Les coefficients a_1, a_2, a_3, b_1 et b_2 sont obtenus en solutionnant le système de 5 équations suivant,

$$a_1(\Sigma_i^*)^2 + a_2\Sigma_i^* + a_3 - b_1\Sigma_i^*\Xi(\Sigma_i^*) - b_2\Xi(\Sigma_i^*) = \Xi(\Sigma_i^*)(\Sigma_i^*)^2 \quad i = 1, ..., 5. \tag{4.23}$$

Les coefficients Σ_m sont ensuite déterminés en trouvant les 3 racines du polynôme suivant,

$$(\Sigma_m)^3 + (a_1 + b_1)(\Sigma_m)^2 + (a_2 + b_2)\Sigma_m + a_3 = 0. \tag{4.24}$$

Les deux coefficients α_m restant sont obtenus avec

$$\alpha_1 = \frac{(v - \Sigma_1)(w - \Sigma_1)}{(\Sigma_2 - \Sigma_1)(\Sigma_3 - \Sigma_1)} \tag{4.25}$$

$$\alpha_2 = \frac{(v - \Sigma_2)(w - \Sigma_2)}{(\Sigma_1 - \Sigma_2)(\Sigma_3 - \Sigma_2)} \tag{4.26}$$

où

$$v = \frac{b_1}{2} + \left[\left(\frac{b_1}{2}\right)^2 - b_2\right]^{1/2} \tag{4.27}$$

$$w = \frac{b_1}{2} - \left[\left(\frac{b_1}{2}\right)^2 - b_2\right]^{1/2}. \tag{4.28}$$

En général, une autre approximation est utilisée pour la méthode de Stamm'ler. Cette approximation consiste à remplacer la somme d'intégrales de résonance par une seule intégrale, évaluée à une "dilution" donnée par

$$\sigma_0^g = \frac{1}{N^*}\left\{\sum_{m=1}^{M} \alpha_m^g (\Sigma_m^g)^{1/2}\right\}^2 \tag{4.29}$$

avec

$$\varphi_c(E) = \frac{\sigma^*_{p,c} + \sigma^g_0}{(\sigma^*_c(E) + \sigma^g_0)E} \tag{4.30}$$

dans le groupe g. Nous aurons donc

$$\left(I^g_x\right)^{\text{hétérogène}} = \left(I^g_x(\sigma_e = \sigma^g_0)\right)^{\text{homogène}}. \tag{4.31}$$

La procédure pour déterminer l'intégrale de résonance dans un cas hétérogène consiste donc à interpoler dans des tables d'intégrales de résonance pour un milieu homogène. Ces tables sont obtenues en calculant les valeurs de I^g_x pour un cas homogène et infini, pour plusieurs valeurs de dilution. Pour un problème hétérogène donné, on calcule la valeur correspondante de σ_0, qu'on utilise pour interpoler parmi les valeurs de dilutions pour lesquelles les intégrales ont été calculées pour le cas homogène.

Il reste toutefois une dernière étape pour pouvoir calculer les sections efficaces autoprotégées avec une méthode de dilution équivalente. Le dénominateur de l'équation (4.2), la structure fine moyenne $\langle\varphi\rangle_g = \int_g \varphi(E)dE$, doit être déterminé. Cette structure fine peut être tabulée comme pour les intégrales de résonance et interpolée pour un cas hétérogène donné. Si ce n'est pas le cas, alors la structure fine moyenne peut être obtenue à partir de considérations sur la conservation des neutrons. En moyennant l'équation de ralentissement sur l'énergie pour un groupe donné, on a

$$\langle\varphi\rangle_g = \frac{1}{\ln\left(E_g/E_{g+1}\right)} - \frac{1}{\Sigma^g_0}\left[I^g - \sum_h I^{g\leftarrow h}_s\right] \tag{4.32}$$

où E_g et E_{g+1} représentent les limites d'un groupe et I^g et $I^{g\leftarrow h}_s$ sont les intégrales de résonance pour la section efficace totale et la section efficace de diffusion $g \leftarrow h$, évaluées à σ^g_0, et $\Sigma^g_0 = N^*\sigma^g_0$. Cette expression peut toutefois causer certaines erreurs pour des problèmes hétérogènes. Il peut être préférable de substituer l'éq. (4.21) dans l'éq. (4.17) et de moyenner sur l'énergie pour obtenir

$$\langle\varphi\rangle_g = \frac{1}{\ln\left(E_g/E_{g+1}\right)} - \frac{1}{\Xi(\Sigma^*_g)}\left[I^g - \sum_h I^{g\leftarrow h}_s\right]. \tag{4.33}$$

$\Xi(\Sigma^*_g)$ dépend de Σ^*_g, la section efficace résonante totale dans le groupe g, qui dépend de $\langle\varphi\rangle_g$, qui à son tour dépend de $\Xi(\Sigma^*_g)$ et Σ^*_g. Il est donc nécessaire d'effectuer quelques itérations pour converger sur une valeur de $\langle\varphi\rangle_g$ dans ce cas. Cette procédure s'appelle normalisation de Livolant-Jeanpierre (Livolant et Jeanpierre (1974)) et peut être utilisée (en option) dans le module SHI:.

4.1.1 Implémentation dans DRAGON

L'autoprotection par équivalence est faite par le module SHI: de DRAGON (Marleau *et al.* (2012)). L'algorithme d'autoprotection, tel que programmé (ce qui diffère un peu de la théorie présentée dans la section précédente) sera expliqué ici. Le module SHI: a été développé il y a assez longtemps et n'est pas nouveau, par conséquent son implémentation dans DRAGON ne sera que brièvement discutée. Cela rendra toutefois plus simple les explications pour l'implémentation des calculs de sensibilités de sections efficaces, dont il sera question dans la section 5.4.1.

Tout d'abord, DRAGON considère un certain nombre de régions résonantes (spécifié par l'utilisateur). Typiquement, le combustible représente une région résonante, et la gaine, qui contient souvent du Zr, un isotope avec des résonances importantes, en représente une autre. Notons que même s'il y a plusieurs régions avec du combustible ou plusieurs gaines, pour l'autoprotection une seule région résonante est considérée. Par la suite, pendant le traitement d'une région résonante, les autres (s'il y en a plus qu'une) sont considérées comme non-résonantes. Autrement dit, l'autoprotection se fait une région résonante à la fois.

Tel qu'expliqué, le processus d'autoprotection est itératif. Il est important de faire la distinction entre la première itération et les itérations subséquentes. En pratique, la première itération suit essentiellement ce qui est décrit dans la section 4.1 mais les autres itérations suivent un déroulement légèrement différent. Pour cette itération initiale, tous les isotopes résonants d'une région résonante donnée sont considérés pour déterminer la section efficace résonante totale macroscopique (Σ_c^*). Comme c'est la première itération, les valeurs de sections efficaces à dilution infinie sont utilisées quand on considère une section résonante.

À partir de cette section efficace totale, la dilution équivalente de chacun des isotopes résonant peut être calculée. Après avoir évalué la fonction Ξ correspondante, on peut déterminer les coefficients α_m et Σ_m, puis calculer la dilution pour chacun des isotopes en utilisant la densité correspondant à chacun (notons ici que la seule différence entre les dilutions équivalentes de chacun des isotopes résonants d'une même région résonante est la densité N^* utilisée dans le calcul, l'autre partie de la dilution étant identique pour tous les isotopes de la région). Cette première étape permet d'obtenir une première version des sections autoprotégées, en interpolant à la dilution obtenue (et la température correspondante).

Ensuite, on passe aux itérations suivantes. Contrairement à la première itération, la section efficace totale résonante (Σ_c^*) n'est pas explicitement utilisée. En fait, pour le calcul de la fonction Ξ, on utilise la section de dilution macroscopique (c'est-à-dire la dilution équivalente mais sans diviser par la densité d'un isotope) à la place de la section efficace résonante totale.

Ainsi, tous les mélanges inclus dans une région résonante (si il y en a plus d'un) auront, pour le calcul de la probabilité combustible à combustible et de la fonction Ξ, la même section efficace résonante totale, donnée par la dilution macroscopique. Si on ne procédait pas ainsi, il y aurait une certaine ambiguïté dans l'expression (4.21) si plusieurs mélanges composent la région résonante, puisque dans ce cas le terme Σ_c^* ne pourrait pas être choisi de façon unique.

À part ce changement, les itérations subséquentes se déroulent comme la première. Après avoir calculé une nouvelle dilution, les sections efficaces sont mises à jour, on utilise la dilution macroscopique comme section efficace résonante pour l'itération suivante et on procède ainsi jusqu'à ce que la différence entre les sections efficaces totales calculées à l'itération actuelle et celles calculées à l'itération précédente soit plus petite qu'un certain paramètre de convergence. On a alors terminé d'autoprotéger les sections efficaces. La figure 4.1 illustre les différentes étapes de calcul pour l'autoprotection par méthode de dilution équivalente.

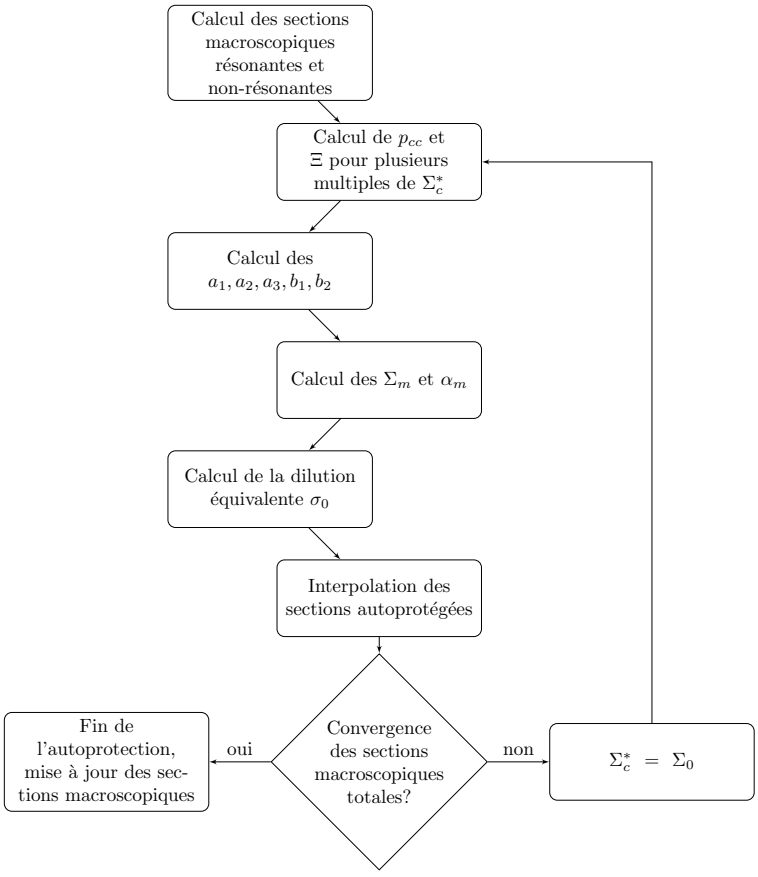

Figure 4.1 Schéma représentant le déroulement de l'autoprotection par méthode de dilution équivalente telle que programmée dans DRAGON 3.

4.2 Autoprotection par méthode des sous-groupes

La méthode des sous-groupes est basée sur le raisonnement suivant. En prenant, pour un groupe donné, quelques valeurs de sections efficaces résonantes continues en énergie, avec des poids appropriés, on peut solutionner l'équation de ralentissement et obtenir la structure fine correspondant aux points sélectionnés. En utilisant les valeurs de sections efficaces, les poids et les valeurs de structure fine calculées, il est alors possible de calculer une valeur de section efficace autoprotégée pour le groupe en question (Hébert (2009)). Pour que la valeur de la section efficace autoprotégée soit fiable et représentative, il faut donc faire un choix judicieux pour les points (les valeurs de sections efficaces continues en énergie) et les poids sélectionnés. Cette information se retrouve dans ce qu'on appelle les tables de probabilités. Il est possible de concevoir deux types de tables de probabilités, les tables physiques et les tables mathématiques (Hébert (2009); Hebert et Coste (2002)). Pour cette thèse, seulement les tables physiques seront considérées et utilisées.

4.2.1 Tables de probabilités physiques

Tout d'abord, une table de probabilité donnée correspond à une réaction donnée (par exemple la capture radiative d'un certain isotope) dans un groupe g. L'information qu'on y retrouve consiste en un ensemble de valeurs de sections efficaces prises dans la plage de valeurs possibles dans le groupe d'énergie en question, ainsi qu'un poids correspondant à chacune des valeurs. Les valeurs de sections efficaces (appelées les points de base) et les poids doivent être choisis de façon appropriée. Autrement dit, on ne choisit pas arbitrairement quelques points (par exemple en prenant des points à intervalle régulier) pour ensuite calculer les poids. Les poids et les points de base sont calculés simultanément.

Pour des tables de probabilités physiques, la procédure consiste à choisir les données pour reproduire le comportement de la section efficace considérée en fonction d'une dilution équivalente. Pour une section efficace totale, dans un groupe g, on commence par calculer les valeurs autoprotégées correspondant à plusieurs valeurs de dilution σ_e :

$$\sigma_g(\sigma_e) = \frac{\left\langle \dfrac{\sigma(E)}{\sigma(E)+\sigma_e} \right\rangle_g}{\left\langle \dfrac{1}{\sigma(E)+\sigma_e} \right\rangle_g} \tag{4.34}$$

où dans ce cas-ci $\langle ... \rangle$ indique une intégration sur l'énergie. Pour évaluer ces expressions, on utilise l'information disponible sur le comportement de la section efficace totale en fonction de l'énergie. Si cette information n'est pas disponible (c'est le cas pour les plages d'énergie où les

résonances ne sont pas résolues), on utilise des distributions statistiques et des considérations physiques (qui relèvent plus de la physique nucléaire théorique que de la physique du réacteur) pour évaluer les intégrales (Macfarlane et Boicourt (1975)). Une fois les $\sigma_g(\sigma_e)$ obtenus, on doit choisir les points de base et les poids tel que

$$\sigma_g(\sigma_e) = \frac{\displaystyle\sum_{k=1}^{K} \frac{\omega_k \sigma_k}{\sigma_k + \sigma_e}}{\displaystyle\sum_{k=1}^{K} \frac{\omega_k}{\sigma_k + \sigma_e}}. \tag{4.35}$$

Cette condition résulte en un système d'équations qui correspond à un problème de lissage. Une approximation de Padé est utilisée pour obtenir les points de bases et les poids pour reproduire le comportement de la section efficace en fonction de la dilution. Une fois les points de base pour la section efficace totale déterminés, on peut calculer les points de base pour une réaction x avec

$$\frac{\left\langle \dfrac{\sigma_x(E)}{\sigma(E) + \sigma_e} \right\rangle_g}{\left\langle \dfrac{1}{\sigma(E) + \sigma_e} \right\rangle_g} = \frac{\displaystyle\sum_{k=1}^{K} \frac{\omega_k \sigma_{x,k}}{\sigma_k + \sigma_e}}{\displaystyle\sum_{k=1}^{K} \frac{\omega_k}{\sigma_k + \sigma_e}}. \tag{4.36}$$

On procède ainsi pour toutes les réactions résonantes pour lesquelles on désire effectuer l'autoprotection. Toute cette information est stockée dans un ensemble de tables de probabilités.

4.2.2 Équation de ralentissement pour les sous-groupes

Considérons l'équation (4.6), l'équation de ralentissement sous sa forme de probabilités de collision. Pour l'opérateur de diffusion des isotopes non-résonant, éq. (4.4), on utilise les mêmes approximations que celles présentées à la section 4.1 pour la méthode de dilution équivalente. Pour l'opérateur de ralentissement de l'isotope résonant, éq. (4.5), on utilise l'approximation des résonances statistiques, qui consiste à supposer que les résonances sont étroites, nombreuses et statistiquement distribuées, ce qui limite l'intégrale dans l'équation (4.5) aux limites du groupe g. On a alors, dans le groupe g,

$$R_j^+(\phi_j(E)) = \frac{\Sigma^+_{\mathrm{s},j,g}}{E} \psi_j(E) \tag{4.37}$$

$$R_j^*(\phi_j(E)) = N_j^* \frac{\langle \varphi(E) \sigma^*(E) \rangle_g}{E} \psi_j(E). \tag{4.38}$$

L'équation de ralentissement, dans la plage d'énergie définie par le groupe g, s'écrira alors

$$\varphi_i(E) = \sum_{j=1}^{I} p_{ij}(E)\Big(\frac{\Sigma^+_{\mathrm{s},j,g}}{E} + N^*_j \frac{\langle\varphi_j(E)\sigma^*(E)\rangle_g}{E}\Big). \tag{4.39}$$

Dans un groupe donné, rappelons qu'il nous faut les valeurs de la structure fine correspondant aux points dans les tables de probabilités, $\varphi_{i,k}$. On peut donc écrire l'équation (4.39) pour un sous-groupes k, en évaluant le terme $\langle\varphi(E)\sigma^*(E)\rangle_g$ avec la table de probabilités du groupe en question,

$$\varphi_{i,k} = \sum_{j=1}^{I} \frac{p_{ij,k}}{E_k}\Big(\Sigma^+_{\mathrm{s},j,g} + N^*_j \sum_{l=1}^{K} \omega_l \sigma^*_{\mathrm{s},l}\varphi_{j,l}\Big). \tag{4.40}$$

Dans DRAGON, le traitement des tables de probabilités se fait en fonction de la léthargie $u = \ln(E_0/E)$, et le traitement de l'équation de transport (pour la méthode des sous-groupes) doit aussi être fait ainsi. Dans l'expression de la léthargie, E_0 représente un paramètre arbitraire pour lequel on choisit en général une valeur assez élevée, 10 MeV par exemple. La forme "léthargie" de l'équation de ralentissement est légèrement différente. Le facteur $1/E$ disparaît et,

$$\varphi_{i,k} = \sum_{j=1}^{I} p_{ij,k}\Big(\Sigma^+_{\mathrm{s},j,g} + N^*_j \sum_{l=1}^{K} \omega_l \sigma^*_{\mathrm{s},l}\varphi_{j,l}\Big), \tag{4.41}$$

car pour le changement de variable $E \to u$ un facteur E doit être inclus pour correctement exprimer les densités de probabilité en fonction de u (et les opérateurs de ralentissement représentent des densités de probabilité, tout comme la structure fine φ). Pour ce qui suit, la forme sans le facteur $1/E$ sera utilisée. Il est important de noter que bien que l'autoprotection pour la méthode des sous-groupes soit dérivée ainsi, la majorité des calculs dans DRAGON se font en fonction de l'énergie E, et sont parfaitement compatibles avec l'autoprotection telle que présentée ici puisque les limites des groupes sont les mêmes peu importe la variable utilisée.

Un processus itératif est utilisé pour solutionner pour la structure fine $\varphi_{i,k}$. On peut écrire l'éq. (4.41) sous forme matricielle, avec l'exposant (n) qui représente une solution à l'itération n,

$$\mathbf{\Phi}^{(n)}_k = \mathbf{P}_k \mathbf{S}^{(n)}_k. \tag{4.42}$$

La source est évaluée avec la solution de l'itération précédente,

$$S^{(n)}_{i,k} = \Sigma^+_{\mathrm{s},i,g} + N^*_i \sum_{l=1}^{K} \omega_l \sigma^*_{\mathrm{s},l}\varphi^{(n-1)}_{i,l}, \tag{4.43}$$

où $S^{(n)}_{i,k}$ représente l'élément i de $\mathbf{S}^{(n)}_k$. Une fois la structure fine convergée, on peut calculer

une section autoprotégée pour une réaction x, dans un groupe g et une région i, avec

$$\sigma_{x,i,g} = \frac{\langle \sigma_{x,i}\varphi_i \rangle_g}{\langle \varphi_i \rangle_g} \tag{4.44}$$

$$\langle \sigma_{x,i}\varphi_i \rangle_g = \sum_{l=1}^{K} \omega_l \sigma_{x,i,l}\varphi_{i,l} \tag{4.45}$$

$$\langle \varphi_i \rangle_g = \sum_{l=1}^{K} \omega_l \varphi_{i,l}. \tag{4.46}$$

4.2.3 Superhomogénéisation (facteur SPH)

Les sections efficaces qui résultent d'un calcul d'autoprotection par sous-groupes, si utilisées directement dans l'équation de transport multigroupe, ne préservent pas les taux de réactions correspondant à ce qu'on trouve pendant les calculs d'autoprotection. Autrement dit, la structure fine obtenue dans chaque groupe pendant l'autoprotection, éq. (4.46), ne correspond pas exactement au flux obtenu suite à un calcul multigroupe utilisant les sections autoprotégées (pour un isotope donné).

Un facteur de correction, le facteur de superhomogénéisation (SPH) μ, doit donc être apporté aux sections autoprotégées pour préserver les taux de réactions (Hébert (2009)). Pour obtenir ce facteur, on calcule le flux résultant de l'équation de ralentissement multigroupe, $\tilde{\varphi}$, en utilisant les valeurs autoprotégées de sections efficaces et les taux de réactions obtenus dans les calculs d'autoprotection,

$$\tilde{\varphi}_{i,g}^{(n)} - \sum_{j\in c} \tilde{p}_{ij,g}^{(n-1)} \tilde{\Sigma}_{j,g}^{(n-1)} \tilde{\varphi}_{j,g}^{(n)} = \sum_{j\in c} \tilde{p}_{ij,g}^{(n-1)} \Big[Q_{j,g} - \Sigma_{j,g}^{+} \langle \varphi_j \rangle_g - \langle \Sigma_j^{*} \varphi_j \rangle_g \Big] + \sum_{j\notin c} \tilde{p}_{ij,g}^{(n-1)} \Sigma_{\mathrm{s},j,g}^{+}, \tag{4.47}$$

dans la région i et le groupe g et à l'itération n, le processus étant itératif. c désigne les régions qui contiennent le combustible (l'isotope pour lequel on calcule le facteur SPH) et le terme $\tilde{\Sigma}_{j,g}^{(n-1)}$ correspond à la section efficace totale évaluée avec le facteur SPH (de l'itération $(n-1)$),

$$\tilde{\Sigma}_{j,g} = \Sigma_{j,g}^{+} + \mu_{j,g} \Sigma_{j,g}^{*} \tag{4.48}$$

où la section efficace non résonante inclut tous les isotopes excepté celui pour lequel on calcule le facteur SPH et la section efficace résonante est celle obtenue après l'autoprotection. Notons que pour obtenir l'équation 4.47 on a procédé à quelques manipulations pour accélérer le calcul du facteur SPH. Les matrices de probabilités de collision $\tilde{p}_{ij}$ sont évaluées avec les sections efficaces totales corrigées par le facteur SPH (i.e. $\tilde{p}_{ij,g}^{(n)} = \tilde{p}_{ij}(\tilde{\Sigma}_{j,g}^{(n)})$). Le terme Q_j est

donné par

$$Q_{j,g} = \Sigma^{+}_{\mathrm{s},j,g} + \langle \Sigma^{*}_{s,j} \varphi_i \rangle_g. \tag{4.49}$$

En définissant les matrices,

$$\tilde{S}^{(n)}_g = \mathrm{diag} \begin{cases} \tilde{\Sigma}^{(n)}_{i,g} & \text{si } i \in c \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \tag{4.50}$$

et

$$\tilde{W}^{(n)}_g = \left[\mathrm{I} - \tilde{p}^{(n-1)}_{ij,g} \tilde{S}^{(n-1)}_g \right]^{-1} \tilde{p}^{(n-1)}_{ij,g} \tag{4.51}$$

ainsi que le vecteur $\mathbf{S}_g$ avec les composantes S_i

$$S_i = \begin{cases} Q_{i,g} - \Sigma^{+}_{i,g} \langle \varphi_i \rangle_g - \langle \Sigma^{*}_i \varphi_i \rangle_g & \text{si } i \in c \\ \Sigma^{+}_{\mathrm{s},i,g} & \text{sinon} \end{cases} \tag{4.52}$$

on aura alors

$$\mathbf{\Phi}^{(n)}_g = \tilde{W}^{(n)}_g \mathbf{S}_g. \tag{4.53}$$

Une fois les flux calculés, on aura, pour l'itération n,

$$\mu^{(n)}_{i,g} = \frac{\langle \varphi_i \rangle_g}{\tilde{\varphi}^{(n)}_{i,g}}. \tag{4.54}$$

On peut ensuite utiliser ce facteur SPH pour calculer de nouvelles sections efficaces totales (éq. (4.48)), et continuer ainsi jusqu'à ce que la convergence soit atteinte. Quand des valeurs satisfaisantes sont trouvées, on a alors, pour toutes les réactions x d'un isotope,

$$\sigma_{x,i,g} = \mu_{i,g} \frac{\langle \sigma_{x,i} \varphi_i \rangle_g}{\langle \varphi_i \rangle_g} \tag{4.55}$$

où $\sigma_{x,i,g}$ représente la section autoprotégée, incluant le facteur SPH (c'est-à-dire la section efficace qui sera utilisée par la suite dans le calcul de transport).

4.2.4 Implémentation dans DRAGON

La méthode des sous-groupes n'était pas encore implémentée dans DRAGON 3 au début de ce travail (seulement dans DRAGON 4). Telle que programmée, dans le module SHISBG:, la version de DRAGON 3 peut traiter des géométries en 2 dimensions seulement, le calcul des probabilités de collision étant programmé pour une telle géométrie seulement.

Tout d'abord, l'information importante pour ce module est lue dans la bibliothèque et le

fichier de *tracking* et les sections efficaces nécessaires sont récupérées, c'est-à-dire les sections macroscopiques et les sections microscopiques (non-autoprotégées) des isotopes résonants. Les mots clés sont ensuite lus pour déterminer les options de calcul désirées, comme par exemple l'utilisation ou non de facteurs SPH et les calculs d'autoprotection spatiale.

On procède ensuite aux calculs d'autoprotection, un isotope à la fois. On commence par récupérer l'information contenue dans les tables de probabilité. Il faut aussi lire les sections efficaces de diffusion "groupe à groupe", c'est-à-dire les sections efficaces de diffusion $g \to h$. La longueur de ce bloc d'information varie d'un isotope à l'autre, c'est pourquoi il doit être lu isotope par isotope dans la bibliothèque.

On traite ensuite l'information des tables de probabilités groupe par groupe pour déterminer les points à utiliser pour les différentes réactions résonantes ainsi que les poids correspondants. On doit aussi "construire" les sections efficaces totales macroscopiques qui seront utilisées pour le calcul des probabilités de collision. Les sections macroscopiques, telles que lues dans la bibliothèque, sont données par groupe d'énergie mais pour la méthode d'autoprotection par sous-groupes il est nécessaire d'avoir les sections efficaces totales macroscopiques calculées avec les sections efficaces des tables de probabilités, pour chacun des isotopes.

Ainsi, pour le traitement d'un isotope donné, on doit soustraire la section totale macroscopique de cet isotope de la section totale macroscopique globale (celle donnée dans la bibliothèque). On a alors la section macroscopique totale de tous les isotopes, sauf celui pour lequel on fait présentement les calculs d'autoprotection. On additionne ensuite les sections efficaces totales des tables de probabilités, en multipliant bien sûr par la densité de l'isotope (les points des tables de probabilités correspondent à des sections efficaces microscopiques). On passe donc, pour chacun des groupes d'énergie, d'une seule valeur de section efficace macroscopique totale à autant de valeurs qu'il y a de points dans la table de probabilités correspondante.

Une fois tous les groupes traités, on passe au calcul des probabilités de collision. Notons ici que ce calcul se fait pour chacun des points de base des tables de probabilité de l'isotope qu'on autoprotège. Une fois les probabilités obtenues, on peut ensuite commencer le processus de résolution itératif (éqs. (4.42) et (4.43)) pour obtenir la structure fine (pour chacun des sous-groupes) dans chaque groupe d'énergie. Pour un groupe donné, il se peut qu'il n'y ait qu'un seul sous-groupe. Cela signifie que pour l'isotope considéré, le groupe d'énergie en question n'a pas besoin d'être autoprotégé. Le processus itératif arrête lorsque la convergence (déterminée par un facteur de précision) est atteinte pour chacun des sous-groupes, pour chacun des groupes.

Il est possible que l'on veuille (pour des raisons de précision) faire un calcul d'autoprotection

avec plus d'une région par mélange d'isotope. Si c'est le cas, on aura alors, dans un groupe donné, un ensemble de structure fine (une par sous-groupe) pour chacune des régions qui contient l'isotope résonant. Si on ne fait pas d'autoprotection spatiale (qui sera expliquée dans la section 4.3), on doit alors homogénéiser la structure fine sur tout le mélange. On fait donc une moyenne de la structure fine en considérant chaque région qui contient l'isotope qu'on autoprotège, en prenant comme pondération le "volume" (en 2D) de chacune des régions.

Après le calcul du flux (de la structure fine), on peut alors calculer les sections efficaces autoprotégées avec les expressions (4.44), (4.45) et (4.46). On écrit ensuite les sections microscopiques autoprotgégées dans la bibliothèque, puis on passe à l'isotope suivant. Notons ici que les sections efficaces macroscopiques ne sont pas mises à jour avant que tous les isotopes n'aient été traités. Ainsi, lorsqu'on calcule les probabilités de collision, les valeurs non-autoprotégées des sections efficaces résonantes sont utilisées dans le calcul des sections macroscopiques totales (sauf pour l'isotope qu'on autoprotège, pour lequel on utilise les tables de probabilités). De cette façon, les résultats de l'autoprotection ne dépendent pas de l'ordre dans lequel on autoprotège les isotopes et cette façon de faire simplifie les calculs des facteurs SPH. Précisons que des tests ont été effectués pour vérifier si procéder ainsi avait un impact important sur les calculs. En comparant avec un calcul où on met les sections efficaces à jour pendant le calcul d'autoprotection, en commençant par l'isotope le plus important, on obtient des différences sur le k_{eff} inférieures à 0.1 mk (pour les systèmes étudiés dans cette thèse).

Une fois les sections autoprotégées obtenues, on peut procéder au calcul du facteur SPH pour les différents isotopes. Le calcul itératif du facteur SPH se fait dans le sous-module SBGSPH. Le facteur SPH, pour chacun des groupes, est utilisé pour calculer la section macroscopique totale (éq. (4.48)). On peut ensuite calculer les probabilités de collision ainsi que toutes les quantités qui en dépendent. On calcule alors le flux moyen résultant, qu'on compare à la structure fine moyenne obtenue pendant l'autoprotection pour calculer le facteur SPH. Les nouveaux facteurs SPH peuvent alors être utilisés pour calculer les nouvelles sections macroscopiques totales, puis on continue ainsi jusqu'à ce que la convergence soit atteinte (le critère de convergence est appliqué au facteur SPH lui-même).

Un schéma illustrant les étapes du calcul est présenté à la figure 4.2. Le calcul des facteurs SPH y est présenté comme une seule étape. En réalité, ce calcul nécessite lui aussi un certain nombre d'étapes de calcul, qui sont toutefois assez similaires au calcul de la structure fine elle-même.

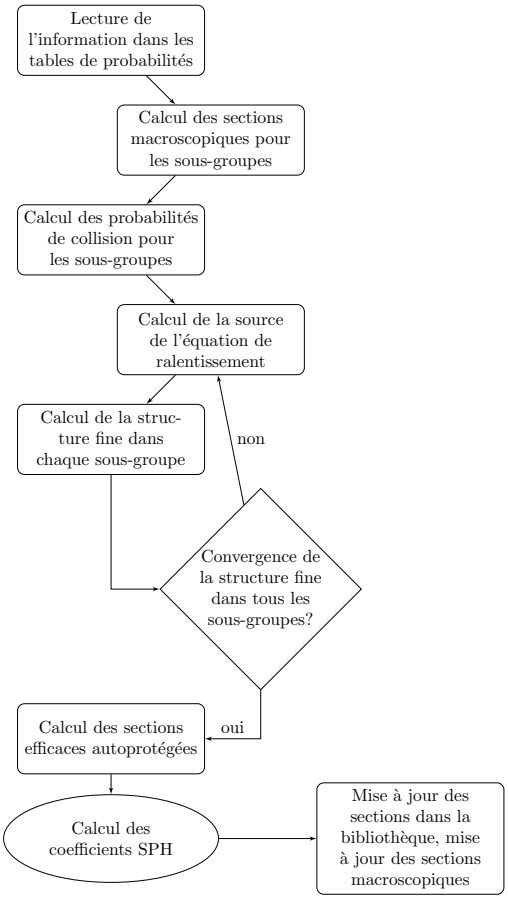

Figure 4.2 Schéma représentant le déroulement de l'autoprotection par méthode de sous-groupes telle que programmée dans DRAGON 3.

4.3 Autoprotection spatiale

Jusqu'à présent il a uniquement été question d'autoprotection des résonances, c'est-à-dire de la dépression du flux approximatif utilisé pour pondérer les sections efficaces. Le résultat est que les pics de résonances reçoivent une pondération faible quand on condense une section efficace sur un groupe d'énergie. Mais on peut aussi considérer un effet similaire (lui aussi relié à la présence de résonances dans les sections efficaces), qu'on appelle autoprotection spatiale.

Imaginons une tige de combustible dans du modérateur. Un neutron avec une énergie correspondant à une résonance d'un des isotopes présent dans le combustible se dirige vers la tige. Compte tenu de son énergie, il sera probablement absorbé dans le combustible, et si la résonance est très importante il le sera probablement dans la couche extérieure de la tige de combustible. Ainsi, plus on se dirige vers le centre de la tige (en partant de l'extérieur),

moins il y aura de neutrons aux énergies résonantes (à l'équilibre). Ce phénomène aura donc un effet sur le calcul des sections efficaces multigroupes.

Pour faire des calculs d'autoprotection spatiale, nous utiliserons ici un modèle d'autoprotection par sous-groupes. Il est aussi possible d'utiliser un modèle de dilution équivalente. Bien que cette variante de l'autoprotection par dilution équivalente (qui est disponible dans SHI:) ne soit pas utilisée dans ce travail, on explique ici brièvement le fonctionnement de cette technique d'autoprotection. Telle que présentée dans la section 4.1, l'autoprotection par équivalence de dilution est basée sur le calcul de la probabilité combustible à combustible. Pour prendre en compte l'autoprotection "distribuée", c'est-à-dire qui tient compte des différences entre les régions du combustible, on établit plutôt les probabilités d'un neutron né dans une région i appartenant au combustible d'avoir une collision avec un isotope non-résonant, dans n'importe quelle région (Hébert (2004)).

On peut établir de telles probabilités pour une région individuelle tout en prenant en compte l'isotope résonant dans toutes les régions du combustible, ce qui permet d'obtenir un ensemble de probabilités consistantes les unes avec les autres et avec la présence d'un isotope résonant dans plus d'une région. Par la suite, on peut procéder à une expansion similaire à celle pour la probabilité combustible à combustible (éq. 4.18) pour chacune des probabilités "combustible à isotope non-résonant". Pour ces approximations, on utilise toujours les mêmes coefficients au dénominateur mais un numérateur différent pour chacune des régions i. On procède ensuite de manière similaire à ce qui est fait dans la section 4.1, mais on obtient une dilution équivalente dans chacune des régions du combustible, prenant ainsi en compte des considérations spatiales sur l'autoprotection. Par exemple, pour un neutron né dans le milieu de la tige, la probabilité "centre de la tige à isotope non-résonant" ne sera pas la même que la probabilité "périphérie de la tige à isotope non-résonant" pour un neutron né dans la région extérieure de la tige, menant à une dilution différente et à des sections autoprotégées différentes.

Dans cette thèse, on utilise une méthode de sous-groupes, et il faut discrétiser la région qui nous intéresse (typiquement une tige de combustible) en plusieurs sous-régions. Lorsqu'on calcule les probabilités de collision, celles qui concernent une probabilité entre une région près du centre de la tige et une région à l'extérieur de la tige prendront en compte les régions extérieures du combustible qui sont très absorbantes pour certaines énergies (qui correspondent à des résonances). Les sections autoprotégées ainsi calculées incluront donc des effets d'autoprotection spatiale. La précision avec laquelle cet effet est pris en compte dépend du nombre de sous-régions utilisées pour discrétiser le combustible. Précisons ici que même si on effectue un calcul d'autoprotection (et de sensibilité) par région, un seul facteur SPH par mélange est utilisé (par groupe, par isotope bien sûr).

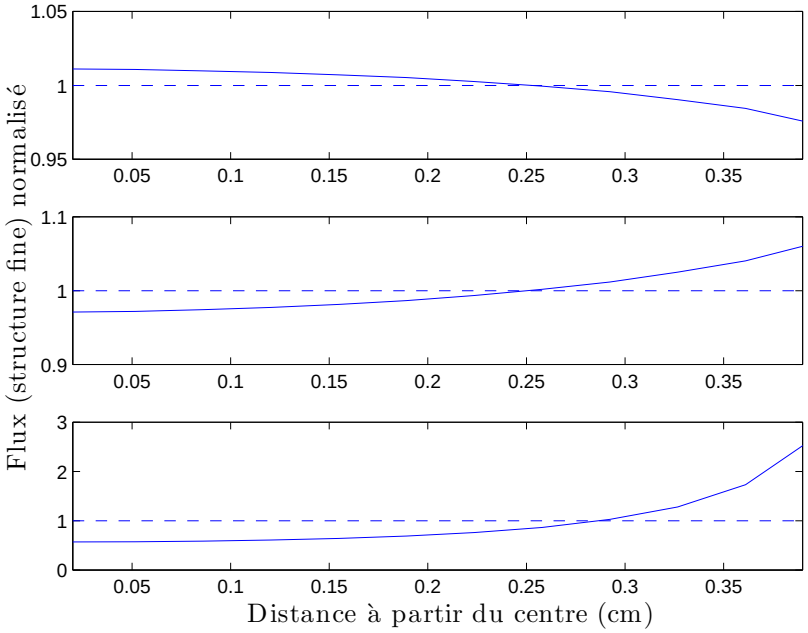

Figure 4.3 Structure fine utilisée pour pondérer les sections efficaces, en fonction de la position dans une tige de combustible. Trois sous-groupes du groupe 60 sont présentés, en utilisant les valeurs de tables de probabilités pour l'U238.

Un exemple de ce type de calcul est présenté à la figure 4.3. Dans ce cas, on considère une tige de combustible avec un rayon de 0.41 cm, dans une cellule carrée de 1.26 cm de côté. Les courbes montrées sur la figure 4.3 correspondent au flux approximatif (la structure fine), pour trois sous-groupes, qui sera utilisé pour calculer les sections autoprotégées de l'uranium 238, dans le groupe 60 (d'environ 453 eV à 677 eV). Les flux ont été normalisés en divisant la valeur de chacun des point par la moyenne de tous les points, pour chacun des sous-groupes. Les lignes pointillées correspondent à un flux indépendant de la position dans la tige, c'est-à-dire sans considérer les effets d'autoprotection spatiale.

Notons qu'il ne faut pas tirer trop de conclusions de cette figure, puisqu'elle représente quelques cas très particuliers (un groupe donné, dans lequel nous avons choisi quelques sous-groupes, le tout en utilisant les valeurs de tables de probabilités pour un isotope en particulier). Rappelons aussi que comme expliqué dans la sous-section 4.2.1, même si on utilise le terme "sous-groupes", il est en fait question de valeurs ponctuelles de sections efficaces, ces valeurs étant choisies pour reproduire le comportement statistique des résonances. Une section efficace pour un sous-groupe donné ne correspond pas à une valeur moyennée sur une plage d'énergie. Ces courbes permettent néanmoins de voir que le flux peut varier de façon significative dans une région de combustible. La courbe du haut, pour le premier sous-

groupe du groupe 60, montre même un flux qui augmente lorsqu'on s'approche du centre. Cette courbe correspond probablement à une énergie pour laquelle il n'y a pas de résonance.

L'importance des effets d'autoprotection spatiale dépend de la géométrie, plus particulièrement des dimensions de la région (ou des régions) qui contient le combustible. Dans le cas d'une ou plusieurs tiges cylindriques de combustibles, le rayon de la tige influencera beaucoup l'importance des effets d'autoprotection spatiale. Toutefois, même de relativement faibles différences peuvent dans certains cas être importantes, par exemple lors d'étude de l'évolution isotopique de combustible.

De plus, même dans le cas où les effets sur les sections multigroupes ne sont pas très grands, l'autoprotection spatiale peut jouer un rôle important sur les sensibilités des sections efficaces résonantes. Un exemple de ce genre de phénomène est présenté à la figure 4.4. Le même système que pour la figure 4.3 est considéré, mais on regarde cette fois-ci un sous-groupe du groupe 57 (entre environ 914 eV et 1010 eV), toujours en utilisant les tables de probabilités pour l'U238. Sur cette figure, le ratio entre le flux approximatif perturbé (suite à une variation sur la densité d'hydrogène) et le flux approximatif de référence, pour plusieurs positions dans la tige de combustible, est illustré. Si la variation sur la densité ne changeait pas la forme spatiale de la structure fine, la courbe serait une ligne droite, ce qui n'est pas le cas ici. Notons encore une fois qu'il s'agit d'un cas particulier et que le comportement peut être différent dans un autre groupe.

Les coefficients de sensibilité peuvent donc varier de façon importante en fonction de la position dans la région du combustible. En assignant une seule sensibilité à tout le combustible, on surestime alors la sensibilité des sections efficaces dans certaines régions, alors qu'on la sous-estime pour d'autres. On peut donc, quand on considère plusieurs sous-régions pour l'autoprotection du combustible, procéder à des calculs de sensibilité de sections efficaces qui prennent correctement en compte les variations spatiales des coefficients de sensibilité.

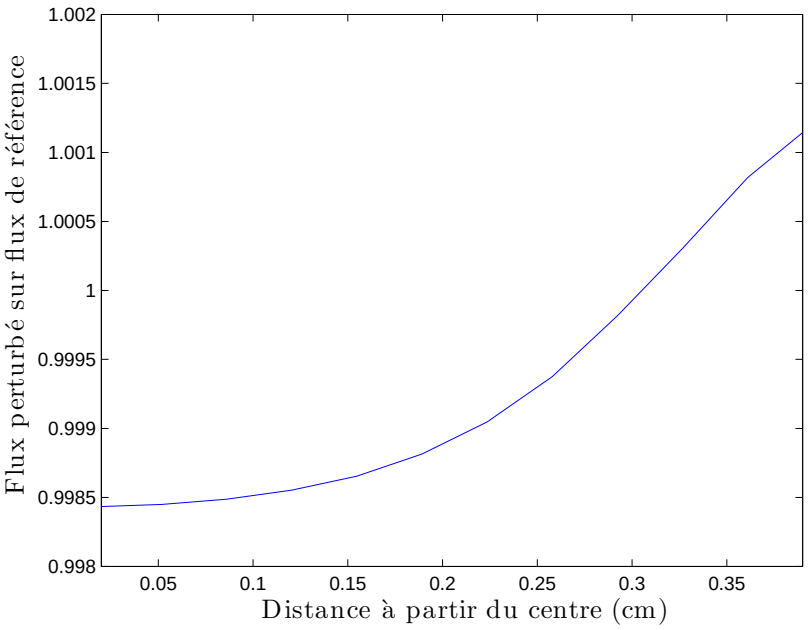

Figure 4.4 Ratio entre la structure fine perturbée et la structure fine de référence (perturbation sur la densité d'hydrogène dans le modérateur) pour plusieurs positions dans la tige de combustible, pour un sous-groupe dans le groupe 57, en utilisant les valeurs de tables de probabilités pour l'U238.

CHAPITRE 5 Sensibilité des sections autoprotégées et sensibilité implicite du k_{eff}

5.1 Coefficients de sensibilité

Tout d'abord, la principale quantité étudiée dans cette thèse concerne la sensibilité des sections efficaces et du k_{eff} par rapport aux densités des isotopes. Notons qu'il y a deux catégories d'isotopes qui peuvent être considérées : les isotopes légers, comme l'hydrogène, qui jouent un rôle important dans le ralentissement des neutrons et les isotopes lourds (ou résonants) qui jouent un rôle important dans la forme du flux dans les plages d'énergie résonantes. Par ralentissement, on entend la transition des neutrons entre l'énergie à laquelle ils sont émis et l'énergie où les phénomènes de résonances se produisent. On utilise les coefficients de sensibilité pour décrire la réponse d'une quantité A à une petite variation du paramètre B,

$$S_{A,B} = \frac{B}{A}\frac{dA}{dB}. \tag{5.1}$$

Par exemple, si $S_{A,B} = 0.1$, cela implique qu'une variation de 1% sur B résultera en une variation de 0.1% sur A. Dans l'expression ci-dessus, des dérivées totales ont été utilisées, impliquant un coefficient de sensibilité total. Dans ce travail, il sera question de deux composantes distinctes du coefficient de sensibilité, la partie explicite et la partie implicite. Pour expliquer les deux concepts, regardons un exemple, la sensibilité du k_{eff} à la densité d'un isotope que l'on notera N.

Considérons une variation sur la densité N de cet isotope. Cette densité apparaît explicitement dans l'équation de transport via le terme $\Sigma_g(\mathbf{r})$. Le k_{eff} obtenu en solutionnant l'équation de transport sera donc légèrement différent si on varie un peu une densité ce qui représente la sensibilité *explicite* du k_{eff}. Le coefficient associé sera

$$S_{k,N}^{\text{expl.}} = \frac{N}{k}\frac{\partial k}{\partial N} \tag{5.2}$$

où la dérivée partielle indique que tous les autres éléments présents dans l'équation de transport sont considérés comme constants par rapport à la densité en question.

Mais, il faut aussi considérer que le terme $\Sigma_g(\mathbf{r})$ inclus des sections efficaces résonantes, pour lesquelles on obtient les valeurs multigroupes avec des calculs d'autoprotection. Ces sections efficaces sont aussi affectées par une variation sur la densité de ce noyau, ce qui correspond,

pour une réaction x, dans le groupe g, au coefficient

$$S_{\sigma_{x,g},N} = \frac{N}{\sigma_{x,g}} \frac{d\sigma_{x,g}}{dN}. \tag{5.3}$$

Finalement, le k_{eff} montre aussi une certaine sensibilité à toutes les sections efficaces, incluant celles qui doivent être autoprotégées. Le coefficient pour le k_{eff}, pour une section efficace x dans le groupe g, est donné par

$$S^{\text{expl.}}_{k,\sigma_{x,g}} = \frac{\sigma_{x,g}}{k} \frac{\partial k}{\partial \sigma_{x,g}}. \tag{5.4}$$

On aura alors le coefficient de sensibilité total qui sera donné par

$$\Big(S_{k,N}\Big)^{\text{total}} = S^{\text{expl.}}_{k,N} + \sum_{\rho} S_{k,\rho} S_{\rho,N} = \frac{N}{k}\Big(\frac{\partial k}{\partial N} + \sum_{\rho} \frac{\partial k}{\partial \rho}\frac{d\rho}{dN}\Big) \tag{5.5}$$

où la somme sur ρ représente une somme sur toutes les sections efficaces résonantes. Cette somme peut être vue comme une somme de coefficients implicites, chaque coefficient implicite étant en fait le produit de deux coefficients explicites. Les coefficients de la forme $S_{k,\sigma_{x,g}}$ et $S^{\text{expl.}}_{k,N}$ peuvent être calculés avec une méthode perturbative bien établie, dont il sera question dans la section 5.3. Les coefficients de la forme $S_{\sigma_{x,g},N}$ doivent quand à eux être calculés avec des méthodes qui dépendent du modèle d'autoprotection utilisé. Deux méthodes seront présentées dans la section 5.4.

Pour valider les méthodes qui seront présentées, il est nécessaire d'avoir des valeurs de référence, obtenues avec des calculs complets qui permettent d'évaluer directement les dérivées. Le calcul de valeurs de référence des coefficients de sensibilité sera détaillé dans la section 6.1.

5.2 Sensibilité des sections autoprotégées aux sections efficaces à dilution infinie

Bien qu'on considère dans ce travail les sensibilités aux densités isotopiques, un sujet de recherche très important concerne les incertitudes sur différents paramètres résultant des incertitudes sur les données nucléaires fondamentales (Sabouri (2014); Takeda *et al.* (2014); Santamarina *et al.* (2014)). Les sections efficaces microscopiques multigroupes fournies par les expériences pour, par exemple, la diffusion par l'hydrogène ne sont pas exactes mais comportent certaines incertitudes. Pour les sections efficaces résonantes, on parlera des incertitudes sur les sections efficaces à dilution infinie ($\sigma_0 = \infty$). Tout comme une variation sur une densité, une variation sur une section efficace microscopique multigroupe peut causer une variation sur les sections efficaces autoprotégées, ce qui implique une certaine sensibilité.

La sensibilité d'une section autoprotégée pour une réaction x, dans un groupe g, à la section efficace multigroupe (à dilution infinie pour une section efficace résonante) de la réaction y, dans le groupe h, peut s'écrire

$$S_{\bar{\sigma}_{x,g},\sigma_{y,h}} = \frac{\partial \bar{\sigma}_{x,g}}{\partial \sigma_{y,h}} \frac{\sigma_{y,h}}{\bar{\sigma}_{x,g}} \tag{5.6}$$

où on a utilisé $\bar{\sigma}$ pour désigner une section autoprotégée, pour éviter la confusion. Notons que nous avons utilisé une dérivée partielle dans l'expression 5.6. Cet subtilité sera expliquée plus bas.

Il est possible d'évaluer ces sensibilités exactement de la même manière que pour les sensibilités aux densités. Lorsqu'on évalue les dérivées de probabilités de collision ou de section efficace macroscopique, il est aussi simple d'évaluer les dérivées par rapport à une section microscopique que par rapport à une densité. Par la suite, que ce soit pour les sensibilités résultant d'un modèle d'autoprotection par dilution équivalente ou par une méthode de sous-groupes, le reste du calcul des sensibilités des sections autoprotégées est le même.

Une remarque importante doit ici être faite par rapport aux sensibilités aux sections efficaces à dilution infinie. Si on exprime une section autoprotégée comme le produit d'un facteur de correction (dû à l'autoprotection) et de la section efficace correspondante à dilution infinie,

$$\bar{\sigma}_{x,g} = f^{\text{shi}} \sigma_{x,g}(\sigma_0^g = \infty), \tag{5.7}$$

alors on peut clairement établir une contribution de la section efficace à dilution infinie à la sensibilité de la section autoprotégée. Toutefois, la section efficace à dilution infinie entre aussi dans le calcul du facteur de correction (par exemple quand on calcule les probabilités de collision au début du calcul d'autoprotection). De plus, quand on utilise une méthode d'autoprotection où on met les sections efficaces à jour après chaque itération, comme pour la méthode de Stamm'ler généralisée telle qu'expliquée dans la section 4.1, les sections autoprotégées intermédiaires dépendent aussi de la section à dilution infinie de façon non triviale. Il est donc important de comprendre que pour des modèles d'autoprotection complexes, particulièrement si on utilise un processus itératif et qu'on met constamment les sections efficaces à jour, la sensibilité d'une section autoprotégée à la section efficace correspondante à dilution infinie n'est pas nécessairement facile à exprimer et n'est possiblement pas clairement définie.

Revenons maintenant sur les dérivées partielles par rapport aux sections multigroupes. En fait, pour des raisons expérimentales, les incertitudes sur une section efficace donnée ne sont pas nécessairement indépendante de celle sur d'autres sections efficaces ou paramètres nucléaires. Par exemple, si on utilise des noyaux d'hydrogène pour ralentir les neutrons dans les expériences où on détermine les sections efficaces des isotopes en les bombardant de

neutrons, il y a une corrélation entre les incertitudes sur les sections efficaces de l'hydrogène et celles des autres isotopes. En général, les incertitudes relatives sur les sections efficaces, ainsi que toutes les corrélations pertinentes, sont représentées dans les *matrices de covariance*.

Pour ce qui est de l'autoprotection des sections efficaces toutefois, les corrélations sont typiquement données pour les sections efficaces à dilution infinie. Dépendamment du modèle d'autoprotection utilisé et de la complexité des calculs, il pourrait être préférable dans certains cas d'avoir les corrélations pour toutes les dilutions qui sont utilisées pour interpoler les sections autoprotégées (pour un modèle d'équivalence de dilution). Dans le cas d'un modèle de sous-groupes utilisant des tables de probabilités, il faudrait possiblement établir des corrélations entre les incertitudes sur les différentes sections mutligroupes et celles sur les sections efficaces dans les tables de probabilités. Un traîtement rigoureux nécessiterait probablement aussi de calculer les corrélations entre les incertitudes sur les sections efficaces à dilution infinie et les poids dans les tables de probabilités, ce qui n'est probablement pas réaliste sur le plan technique. En résumé, pour des modèles d'autoprotection assez complexes (comme ceux présentés ici), il serait très difficile de rigoureusement prendre en compte les corrélations entre les incertitudes sur les différentes sections multigroupes et autoprotégées, et toute l'information requise n'est pas nécessairement disponible.

5.3 Calcul perturbatif des sensibilités explicites

Dans cette section il sera question d'une méthode permettant d'approximer la dérivée partielle du k_{eff} par rapport à une quantité qu'on retrouve dans l'équation de transport (une densité ou une section efficace microscopique). Il faut tout d'abord introduire le concept de flux adjoint, solution de l'équation adjointe (Hébert (2009)).

5.3.1 Équation adjointe

On explique ici comment obtenir le flux adjoint pour la forme des probabilités de collision de l'équation de transport (Courau et Marleau (2003, 2000)). Commençons par écrire l'équation (3.45) sous une forme plus pratique pour dériver l'équation adjointe,

$$\mathbf{A}\vec{\phi} - \frac{1}{k_{eff}}\mathbf{F}\vec{\phi} = 0 \tag{5.8}$$

$$\mathbf{A} = \mathbf{I} - \mathbf{P}\boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{s}} \tag{5.9}$$

$$\mathbf{F} = \mathbf{P}\boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{\lambda}}. \tag{5.10}$$

Précisons que cette forme de l'équation de transport est matricielle en espace *et* en groupes d'énergie. Le vecteur $\vec{\phi}$ comprend l'élément de flux $\phi_{i,g}$ à la position $(g-1)N_i + i$, c'est-à-dire que pour un groupe donné, les composantes spatiales sont stockées une après l'autre. La matrice $\mathbf{P}$ n'a pas ici d'indice de groupe et est une matrice diagonale par bloc $N_i G \mathrm{x} N_i G$ (chaque bloc est une matrice $N_i \mathrm{x} N_i$ de probabilités de collision pour un groupe donné). Les matrices $\boldsymbol{\Sigma_s}$ et $\boldsymbol{\Sigma_\lambda}$ sont composées des valeurs spatiales et en énergie des sections $\Sigma_{\mathrm{s},i,g\leftarrow h}$ et $\chi_{m,g}\nu\Sigma_{\mathrm{f},i,m,g}$. Les matrices $\mathbf{A}$ et $\mathbf{F}$ seront ici traitées comme des opérateurs, pour lesquels on définit les adjoints $\mathbf{A}^*$ et $\mathbf{F}^*$ comme

$$\langle \vec{\phi}^*, \mathbf{A}\vec{\phi} \rangle = \langle \mathbf{A}^* \vec{\phi}^*, \vec{\phi} \rangle \tag{5.11}$$

$$\langle \vec{\phi}^*, \mathbf{F}\vec{\phi} \rangle = \langle \mathbf{F}^* \vec{\phi}^*, \vec{\phi} \rangle \tag{5.12}$$

où

$$\mathbf{A}^* \vec{\phi}^* - \frac{1}{k_{eff}} \mathbf{F}^* \vec{\phi}^* = 0. \tag{5.13}$$

Ici, $\langle ... \rangle$ indique un simple produit scalaire entre deux vecteurs. Nous avons donc

$$\mathbf{A}^* = \mathbf{I} - (\boldsymbol{\Sigma_s})^T \mathbf{P} \tag{5.14}$$

$$\mathbf{F}^* = \boldsymbol{\Sigma_\lambda}^T \mathbf{P}. \tag{5.15}$$

Il est aussi possible de définir un équation pour l'adjoint généralisé associé à la source $\vec{S}^*$,

$$\mathbf{A}^* \vec{\Gamma}^* - \frac{1}{k_{eff}} \mathbf{F}^* \vec{\Gamma}^* = \vec{S}^*. \tag{5.16}$$

Pour qu'une solution existe à cette équation, il faut que $\langle \vec{S}^*, \vec{\phi} \rangle = 0$. Notons ici que le terme "adjoint" peut faire référence à plus d'un concept. Il est ici question de l'adjoint de l'équation de transport dans sa forme intégrale. Ailleurs dans la littérature (et dans DRAGON), il est souvent question de l'adjoint de l'équation de transport intégro-différentielle, qu'on peut noter $\vec{\phi}^+$. Cette quantité peut être reliée à l'adjoint dont il est ici question par $\vec{\phi}^+ = \mathbf{P}\vec{\phi}^*$ (Courau et Marleau (2003)).

5.3.2 Méthode perturbative

Nous expliquons maintenant comment obtenir une approximation de la dérivée du k_{eff} par rapport à un paramètre de l'équation de transport (Courau et Marleau (2003)). Supposons une variation sur une densité ou une section efficace ($\Delta\omega$) qui résulte en des opérateurs légèrement perturbés, $\mathbf{A} + \Delta\mathbf{A}$ et $\mathbf{F} + \Delta\mathbf{F}$. Si k représente le facteur de multiplication pour

l'équation non perturbée et $\vec{\phi}$ la solution associée, alors on aura

$$(k+\Delta k)(\mathbf{A}+\Delta\mathbf{A})(\vec{\phi}+\Delta\vec{\phi}) = (\mathbf{F}+\Delta\mathbf{F})(\vec{\phi}+\Delta\vec{\phi}). \tag{5.17}$$

Il est alors possible d'isoler la variation sur k en prenant le produit scalaire avec une fonction pour l'instant arbitraire $\vec{f}$,

$$\Delta k = \frac{\langle\vec{f}(\mathbf{F}+\Delta\mathbf{F})(\vec{\phi}+\Delta\vec{\phi})\rangle - k\langle\vec{f}(\mathbf{A}+\Delta\mathbf{A})(\vec{\phi}+\Delta\vec{\phi})\rangle}{\langle\vec{f}(\mathbf{A}+\Delta\mathbf{A})(\vec{\phi}+\Delta\vec{\phi})\rangle}. \tag{5.18}$$

En faisant une expansion du dénominateur et en ne gardant que les termes au premier ordre (en Δ), on obtient

$$\Delta k \simeq \frac{\langle\vec{f}(k\Delta\mathbf{A}-\Delta\mathbf{F})\vec{\phi}\rangle + \langle\vec{f}(k\mathbf{A}-\mathbf{F})\Delta\vec{\phi}\rangle}{\langle\vec{f}\mathbf{A}\vec{\phi}\rangle} \tag{5.19}$$

où on a utilisé le fait que $\mathbf{F}\vec{\phi} - k\mathbf{A}\vec{\phi} = 0$. Un choix judicieux de la fonction $\vec{f}$ nous permet maintenant d'éliminer une autre terme. Si on prend $\vec{f} = \vec{\phi}^*$, on a

$$\langle\vec{\phi}^*(k\mathbf{A}-\mathbf{F})\Delta\vec{\phi}\rangle = \langle\Delta\vec{\phi}(k\mathbf{A}^*-\mathbf{F}^*)\vec{\phi}^*\rangle = 0. \tag{5.20}$$

Nous aurons alors

$$\Delta k \simeq \frac{\langle\vec{\phi}^*(k\Delta\mathbf{A}-\Delta\mathbf{F})\vec{\phi}\rangle}{\langle\vec{\phi}^*\mathbf{A}\vec{\phi}\rangle} \tag{5.21}$$

où alternativement

$$\Delta k \simeq \frac{\langle\vec{\phi}^*(k\Delta\mathbf{A}-\Delta\mathbf{F})\vec{\phi}\rangle}{\langle\vec{\phi}^*\frac{1}{k}\mathbf{F}\vec{\phi}\rangle}. \tag{5.22}$$

En divisant par la petite variation sur le paramètre de l'équation de transport, $\Delta\omega$, et en supposant que

$$\frac{\Delta k}{\Delta\omega} \simeq \frac{\partial k}{\partial\omega}, \tag{5.23}$$

on a alors

$$\frac{\partial k}{\partial\omega} \simeq \frac{\langle\vec{\phi}^*(\partial_\omega\mathbf{A}-\partial_\omega\mathbf{F})\vec{\phi}\rangle}{\langle\vec{\phi}^*\frac{1}{k}\mathbf{F}\vec{\phi}\rangle}. \tag{5.24}$$

Il est important de noter que nous avons ici utilisé des dérivées partielles. Cela implique que quand on calcule $\Delta\mathbf{A}$ et $\Delta\mathbf{F}$ (ou $\partial\mathbf{A}$ et $\partial\mathbf{F}$), on ne considère que le terme ω qui apparaît explicitement dans le calcul de $\mathbf{A}$ et $\mathbf{F}$. De cette façon, le calcul peut rester rapide. Si on veut inclure les effets implicites dus aux sections efficaces autoprotégées, il faudrait alors refaire un calcul d'autoprotection avec la perturbation $\Delta\omega$, ou utiliser une des méthodes qui seront

expliquées plus loin pour calculer les sensibilités des sections autoprotégées.

Notons que l'on peut procéder de deux façons différentes pour calculer la sensibilité totale du k_{eff} (incluant les effets explicites et implicites). En premier lieu, on pourrait utiliser les méthodes qui seront présentées dans les sections suivantes pour évaluer la sensibilité des sections autoprotégées, puis utiliser ces sensibilités pour calculer les variations totales sur $\mathbf{A}$ et $\mathbf{F}$. On pourrait diviser par $\Delta\omega$ pour approximer les dérivées totales $d_\omega\mathbf{A}$ et $d_\omega\mathbf{F}$ et ensuite utiliser l'équation (5.24) pour trouver la sensibilité du k_{eff}. Ce n'est toutefois pas l'approche qui est utilisée ici.

Dans ce travail, on utilise plutôt une multiplication des coefficients de sensibilité, tel qu'indiqué par l'équation (5.5). On utilise l'équation (5.24) pour obtenir la sensibilité explicite du k_{eff} au paramètre ω, ainsi qu'à toutes les sections efficaces qui pourraient être affectées par le paramètre ω (donc pour $\omega \equiv N$, on calcule les $S_{k,N}^{\text{expl.}}$ et $S_{k,\alpha}$ dans l'équation (5.5)). Par la suite, on calcule les sensibilités des sections autoprotégées, qu'on multiplie avec les coefficients de sensibilité du k_{eff} pour les sections autoprotégées correspondantes. En procédant ainsi, on peut calculer chacune des composantes de la sensibilité implicite, c'est-à-dire les contributions de chacune des réactions (par exemple la capture radiative de l'U238, la fission de l'U235).

Notons finalement que des méthodes basées sur les adjoints peuvent être développées pour une multitude de calculs de sensibilité et d'incertitudes. De façon générale, il faut définir une "fonction réponse" et choisir la source adjointe appropriée pour obtenir les incertitudes sur cette "réponse" en fonction de celles sur différents paramètres (Williams (1986)). On peut entre autre développer de telles méthodes pour calculer les incertitudes sur le k_{eff} résultant des incertitudes sur les quantités nucléaires fondamentales (Sabouri (2014)) ou encore les incertitudes sur les coefficients de diffusion utilisés dans les calculs de coeurs résultant encore une fois de ces incertitudes sur les sections multigroupes (Pusa (2014)) fournies dans les diverses bibliothèques.

5.4 Sensibilité des sections efficaces autoprotégées

Les deux méthodes d'autoprotection utilisées dans ce travail étant considérablement différentes, nous présentons donc deux techniques pour évaluer les sensibilités des sections autoprotégées obtenues avec chacune des méthodes d'autoprotection. Pour le modèle d'équivalence de dilution, une méthode basée sur l'équation de ralentissement adjointe sera utilisée. Pour la méthode des sous-groupes, on obtient les dérivées des équations importantes qu'on exprime en fonction des dérivées des probabilités de collision.

5.4.1 Autoprotection par dilution équivalente

Commençons par écrire la dérivée d'une section autoprotégée $\sigma_{x,g}$ par rapport à une densité N. En utilisant les équations (4.1) et (4.2), on a

$$\frac{N}{\sigma_x^g}\frac{d\sigma_{x,g}}{dN} = \frac{\int_g \frac{Nd\sigma_x(E)}{dN}\varphi(E)dE}{\int_g \sigma_x(E)\varphi(E)dE} + \frac{\int_g \sigma_x(E)\frac{Nd\varphi(E)}{dN}dE}{\int_g \sigma_x(E)\varphi(E)dE} - \frac{\int_g \frac{Nd\varphi(E)}{dN}dE}{\int_g \varphi(E)dE}. \tag{5.25}$$

Dans ce travail, nous considérons uniquement des variations sur les densités d'isotopes donc le premier terme du côté droit de l'équation précédente disparaît, les sections continues en énergie étant indépendantes des densités. Nous commencerons par dériver une expression assez générale de la sensibilité des sections autoprotégées. Nous montrerons ensuite comment cette expression est utilisée avec le modèle d'équivalence de dilution utilisé ici. Supposons d'abord une équation de ralentissement de la forme

$$\mathbf{D}(E)\varphi(E) = Q(E) \tag{5.26}$$

où $\mathbf{D}(E)$ est l'opérateur de ralentissement et $Q(E)$ le terme source de l'équation. On peut aussi définir l'équation adjointe correspondante en utilisant l'adjoint de l'opérateur $\mathbf{D}(E)$, $\mathbf{D}^*(E)$,

$$\mathbf{D}^*(E)\varphi(E)^* = Q^*(E) \tag{5.27}$$

où $Q^*(E)$ est une source adjointe qu'il nous faut choisir, en respectant la condition $\langle Q^*(E), \varphi\rangle = 0$. Il est aussi possible de montrer que $\langle Q(E), \varphi^*\rangle = 0$. Un choix approprié pour les besoins de ce travail sera (Williams et Broadhead (2001)), pour le groupe g,

$$Q^*(E) \equiv \frac{1}{\sigma_{x,g}}\frac{\partial\sigma_{x,g}}{\partial\varphi_g(E)} = \left(\frac{\sigma_x(E)}{\int_g \sigma_x(E)\varphi_g(E)dE} - \frac{1}{\int_g \varphi_g(E)dE}\right) \tag{5.28}$$

pour $E_{g+1} < E < E_g$. Si on prend maintenant la dérivée de l'équation de ralentissement par rapport à N, on obtient

$$\mathbf{D}\frac{d\varphi_g(E)}{dN} = \frac{dQ(E)}{dN} - \frac{d\mathbf{D}}{dN}\varphi_g(E) \tag{5.29}$$

où la dépendance en E de l'opérateur de ralentissement à été omise. En multipliant l'équation précédente par φ^* et en intégrant sur l'énergie, on obtient

$$\int_0^\infty \mathbf{D}\frac{d\varphi_g(E)}{dN}\varphi_g^*(E)dE = \int_0^\infty \left(\frac{dQ(E)}{dN} - \frac{d\mathbf{D}}{dN}\varphi_g(E)\right)\varphi_g^*(E)dE. \tag{5.30}$$

Pour la suite, on suppose que $Q(E)$ peut être exprimée comme le produit d'un terme indépendant de l'énergie et d'un terme indépendant du paramètre N. La condition d'orthogonalité entre la source et la structure fine adjointe s'étend alors à la dérivée de la source,

$$\int_0^\infty Q(E)\varphi^* dE = \int_0^\infty \frac{dQ(E)}{dN}\varphi^* dE = 0. \tag{5.31}$$

Le côté gauche de l'équation (5.30) peut être réécrit comme

$$\begin{aligned}\int_0^\infty \mathbf{D}\frac{d\varphi_g(E)}{dN}\varphi_g^*(E)dE &= \int_0^\infty \frac{d\varphi_g(E)}{dN}\mathbf{D}^*\varphi_g^*(E)dE \\ &= \int_0^\infty \frac{d\varphi_g(E)}{dN}Q^*(E)dE.\end{aligned} \tag{5.32}$$

En combinant les équations (5.28), (5.30) et (5.32), on trouve

$$\begin{aligned}\frac{N}{\sigma_{x,g}}\frac{d\sigma_{x,g}}{dN} &= \frac{\int_g \sigma_x(E)N\frac{d\varphi_g(E)}{dN}dE}{\int_g \sigma_x(E)\varphi_g(E)dE} - \frac{\int_g N\frac{d\varphi_g(E)}{dN}dE}{\int_g \varphi_g(E)dE} \\ &= \int_0^\infty \Big(- \frac{d\mathbf{D}}{dN}\varphi_g(E)\Big)\varphi_g^*(E)dE.\end{aligned} \tag{5.33}$$

Il est alors possible d'appliquer cette équation en utilisant l'équation (4.30) comme équation de ralentissement, ce qui nous donne, dans un groupe g,

$$\mathbf{D}(E) = \mathbf{D}^*(E) = \sigma^*(E) + \sigma_0^g \tag{5.34}$$

$$Q(E) = \frac{\sigma_{p,g}^* + \sigma_0}{E} \tag{5.35}$$

$$\varphi^*(E) = \frac{1}{\sigma^*(E) + \sigma_0^g}\left(\frac{\sigma_x(E)}{\int_g \sigma_x(E)\varphi_g(E)dE} - \frac{1}{\int_g \varphi_g(E)dE}\right). \tag{5.36}$$

L'équation (5.33) prendra alors la forme

$$\frac{N}{\sigma_{x,g}}\frac{d\sigma_{x,g}}{dN} = \frac{\int_g \frac{N\frac{d}{dN}\sigma_0^g}{(\sigma^*(E)+\sigma_0^g)^2}\frac{dE}{E}}{\int_g \frac{1}{\sigma^*(E)+\sigma_0^g}\frac{dE}{E}} - \frac{\int_g \frac{\sigma_x(E)N\frac{d}{dN}\sigma_0^g}{(\sigma^*(E)+\sigma_0^g)^2}\frac{dE}{E}}{\int_g \frac{\sigma_x(E)}{\sigma^*(E)+\sigma_0^g}\frac{dE}{E}}. \tag{5.37}$$

Bien sûr, il aurait été possible de tout simplement substituer l'expression (4.30) dans l'équation (5.25) et d'évaluer la dérivée de la structure fine analytiquement. La méthode présentée

ici peut toutefois être appliquée à des cas plus complexes où on ne peut pas évaluer analytiquement la dérivée de la structure fine et où une évaluation numérique demanderait de répéter les calculs d'autoprotection. L'avantage de l'expression (5.33) est que la dérivée de la structure fine n'a pas besoin d'être évaluée.

Il faut maintenant exprimer la dérivée de la dilution équivalente en fonction des paramètres α_m et Σ_m. En se basant sur l'expression (4.29), avec $M = 3$, on a

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma_0}{dN} = {} & \frac{2}{N^*}\Big(\alpha_1\sqrt{\Sigma_1} + \alpha_2\sqrt{\Sigma_2} + \alpha_3\sqrt{\Sigma_3}\Big)\Big[\frac{d\alpha_1}{dN}\sqrt{\Sigma_1} + \frac{\alpha_1}{2}\frac{1}{\sqrt{\Sigma_1}}\frac{d\Sigma_1}{dN} \\ & + \frac{d\alpha_2}{dN}\sqrt{\Sigma_2} + \frac{\alpha_2}{2}\frac{1}{\sqrt{\Sigma_2}}\frac{d\Sigma_2}{dN} + \frac{d\alpha_3}{d\alpha}\sqrt{\Sigma_3} + \frac{\alpha_3}{2}\frac{1}{\sqrt{\Sigma_3}}\frac{d\Sigma_3}{dN}\Big] \\ & + \frac{dN^*}{dN}\Big(\alpha_1\sqrt{\Sigma_1} + \alpha_2\sqrt{\Sigma_2} + \alpha_3\sqrt{\Sigma_3}\Big)^2 \end{aligned} \tag{5.38}$$

où on considère la possibilité de dériver par rapport à la densité de l'isotope résonant.

Dérivées des coefficients de la dilution équivalente

On peut procéder de deux façons pour évaluer les dérivées des coefficients α_m et Σ_m. La façon la plus simple consiste à faire un deuxième calcul d'autoprotection partiel avec une densité perturbée. On fait le calcul jusqu'à ce qu'on obtienne les coefficients pour la densité perturbée, et on divise la différence entre les coefficients perturbés et ceux de référence par la variation sur la densité. On estime ainsi les dérivées des coefficients et on peut calculer la dérivée de la dilution avec 5.38. On peut toutefois procéder d'une manière plus complexe mais plus précise et rapide.

Cette autre façon consiste à évaluer analytiquement les dérivés des coefficients α_m et Σ_m à partir des dérivées des probabilités de collision, telles que calculées dans la section 3.2.4. Tout d'abord, on a

$$\frac{d\Xi(\Sigma^*)}{dN} = -\frac{1}{p_{cc}^2}\frac{dp_{cc}}{dN} - \frac{d\Sigma^*}{dN}. \tag{5.39}$$

Précisons ici que l'évaluation des termes dp_{cc}/dN et $d\Sigma^*/dN$ n'est pas aussi simple qu'on pourrait initialement le croire et implique certaines subtilités. Plus de détails seront fournis dans la sous-section suivante sur l'implémentation dans DRAGON. On aura ensuite un système d'équations qu'on solutionnera pour obtenir les dérivées des coefficients a_1, a_2, a_3, b_1 et

b_2 (éq. (4.23)),

$$\frac{da_1}{dN}(\Sigma_i^*)^2 + \frac{da_2}{dN}\Sigma_i^* + \frac{da_3}{dN} - \frac{db_1}{dN}\Sigma_i^*\Xi - \frac{db_2}{dN}\Xi = \frac{d\Xi}{dN}(\Sigma_i^*)^2 + 2\Xi\Sigma_i^*\frac{d\Sigma_i^*}{dN}$$
$$- 2a_1\Sigma_i^*\frac{d\Sigma_i^*}{dN} - a_2\frac{d\Sigma_i^*}{dN} + b_1\frac{d\Sigma_i^*}{dN}\Xi + b_1\Sigma_i^*\frac{d\Xi}{dN} + b_2\frac{d\Xi}{dN}, \quad i = 1, ..., 5, \tag{5.40}$$

les coefficients a_1, a_2, a_3, b_1 et b_2 ainsi que Ξ étant connus puisqu'on procède à ce calcul après avoir calculé la dilution à l'itération actuelle. Une fois le système d'équation solutionné, on peut calculer les dérivées des coefficients α_m et Σ_m. Pour commencer, on prend la dérivée de (4.24) pour obtenir une expression pour les dérivées des Σ_m. Notons qu'en réalité, on a trois équations, pour $m = 1, 2, 3$. En fait, il n'est pas nécessaire ici de trouver trois racines d'un polynôme. Une fois que les racines de (4.24) ont été déterminées, on dispose de trois équations qu'on peut tout simplement dériver, ce qui nous donne

$$\frac{d\Sigma_m}{dN} = \frac{-\Sigma_m^2(\frac{da_1}{dN} + \frac{db_1}{dN}) - \Sigma_m(\frac{da_2}{dN} + \frac{db_2}{dN}) - \frac{da_3}{dN}}{3\Sigma_m^2 + 2\Sigma_m(a_1 + b_1) + (a_2 + b_2)}, \quad m = 1, 2, 3. \tag{5.41}$$

On peut alors déterminer les dérivées des coefficients α_m puisque ceux-ci sont exprimés en fonction des coefficients Σ_m. On a premièrement

$$\frac{dv}{dN} = \frac{1}{2}\frac{db_1}{dN} + \frac{1}{2}\Big(\frac{b_1^2}{4} - b_2\Big)^{-1/2}\Big(\frac{b_1}{2}\frac{db_1}{dN} - \frac{db_2}{dN}\Big) \tag{5.42}$$

$$\frac{dw}{dN} = \frac{1}{2}\frac{db_1}{dN} - \frac{1}{2}\Big(\frac{b_1^2}{4} - b_2\Big)^{-1/2}\Big(\frac{b_1}{2}\frac{db_1}{dN} - \frac{db_2}{dN}\Big). \tag{5.43}$$

Ensuite, on a

$$\frac{d\alpha_m}{dN} = \frac{\frac{dA_m}{dN}B_m - A_m\frac{dB_m}{dN}}{B_m^2} \tag{5.44}$$

où

$$A_m = (v - \Sigma_m)(w - \Sigma_m)$$
$$\frac{dA_m}{dN} = (\frac{dv}{dN} - \frac{d\Sigma_m}{dN})(w - \Sigma_m) + (v - \Sigma_m)(\frac{dw}{dN} - d\Sigma_m dN)$$

et où les expressions pour B_m et dB_m/dN dépendent de la valeur de m. Par exemple, pour $m = 1$, on a

$$B_1 = (\Sigma_2 - \Sigma_1)(\Sigma_3 - \Sigma_1)$$
$$\frac{dB_1}{dN} = \Big(\frac{d\Sigma_2}{dN} - \frac{d\Sigma_1}{dN}\Big)(\Sigma_3 - \Sigma_1) + (\Sigma_2 - \Sigma_1)\Big(\frac{d\Sigma_3}{dN} - \frac{d\Sigma_1}{dN}\Big).$$

On a alors toutes les dérivées nécessaires pour l'équation (5.38).

Implémentation dans DRAGON

La méthode de calcul de sensibilité de sections efficaces décrite ci-haut a été implémentée dans DRAGON, dans le module SHI:, ainsi que dans un nouveau module appelé SENMUL:. Les coefficients de sensibilité du k_{eff} aux sections efficaces peuvent ensuite être multipliés par les sensibilités des sections efficaces à certaines densités isotopiques pour obtenir les sensibilités implicites du k_{eff} aux densités en question.

Pour le module SHI:, l'utilisateur doit préciser l'isotope par rapport auquel on veut obtenir la sensibilité (la sensibilité par rapport à sa densité). Il peut ensuite y avoir deux façons de procéder, dépendamment de la méthode choisie pour évaluer les dérivées des coefficients requises pour le calcul de la dilution.

La première méthode consiste à calculer les coefficients de référence et ceux perturbés et les soustraire l'un de l'autre pour ensuite évaluer les dérivées. Le *driver* pour le module SHI:, SHIDRV, est appelé deux fois, une fois avec la densité de référence et une seconde fois avec une densité légèrement augmentée pour l'isotope par rapport auquel on veut obtenir la sensibilité (ou plutôt la sensibilité à sa densité). Pour le premier appel à SHIDRV, l'exécution se déroule comme pour un calcul d'autoprotection standard, mais lorsque la convergence est atteinte, pour les sections autoprotégées, les coefficients α_m et Σ_m obtenus à la convergence sont sauvés dans une liste fournie en entrée au module SHI:.

Par la suite, le sous-module SHIDRV est appelé de nouveau, cette fois ci avec la densité perturbée. Une fois la convergence atteinte, les coefficients perturbés sont eux aussi sauvés. Toutefois, une fois la dilution équivalente convergée, les sections efficaces ne sont pas mises à jour dans la bibliothèque, le but de la deuxième exécution de SHIDRV étant uniquement de déterminer les coefficients perturbés. L'exécution du module SHI: se termine donc après la deuxième exécution partielle de SHIDRV.

Alternativement, on peut utiliser les dérivées des probabilités de collision pour obtenir la dérivée de la dilution pour chaque isotope résonant, pour chaque groupe (en appelant SHIDRV une seule fois). Il y a toutefois une subtilité très importante ici par rapport au calcul des dérivées des probabilités de collision. Pour la première itération, la dérivée de la section efficace résonante (Σ^* dans l'éq. (5.39)) par rapport à la densité est tout simplement 0 (ou égale à la section microscopique totale si on dérive par rapport à la densité de l'isotope résonant). Le calcul des dérivées des PC est alors assez direct, puisque seulement les sections macroscopiques qui correspondent à la densité par rapport à laquelle on dérive sont non

nulles.

Mais pour les itérations qui suivent, la situation est un peu plus compliquée. Tout d'abord, on n'utilise pas la section efficace résonante de l'isotope qu'on est en train d'autoprotéger, mais bien la dilution macroscopique. La dérivée de celle-ci peut être obtenue avec les dérivées des coefficients α_m et Σ_m, que l'on calcule à la fin d'une itération (l'objectif final est d'obtenir les dérivées convergées de ces coefficients pour calculer la dérivée de la dilution). Donc pour chaque itération (à l'exception de la première), on dispose d'une estimation du terme $d\Sigma_0/dN$, qui doit aussi être utilisée pour le calcul des dérivées des PC. De plus, si on autoprotège une géométrie avec plus d'une région résonante, alors la situation est encore plus complexe.

Si on a par exemple les régions résonantes 1 et 2, lorsqu'on autoprotège la région 2, les sections efficaces utilisées pour la région résonante 1, pour le calcul des PC, sont celles obtenues à l'itération précédente (les vraies sections efficaces, pas la dilution). Les dérivées des PC, pour la région résonante 2, dépendent donc des dérivées des sections efficaces totales des isotopes résonants de la région 1. Ainsi, après chaque itération, il faut obtenir les dérivées des sections efficaces totales qui correspondent à la dérivée de la dilution trouvée à cette itération. Celles-ci seront nécessaires pour obtenir des valeurs acceptables de dérivées de probabilités de collision à l'itération suivante.

On doit donc tenir compte du fait que dériver une section macroscopique d'un isotope $j \neq i$ par rapport à la densité de l'isotope i ne donne pas nécessairement 0. Autrement dit, il faut soigneusement considérer le fait que les données en entrée pour le calcul des PC ont été modifiées par le calcul d'autoprotection partiel et ont donc une dépendance non triviale par rapport aux densités isotopiques.

Le sous-module SHIDXS est utilisé pour calculer les dérivées des sections efficaces, par rapport à une densité, en fonction de la dérivée de la dilution dans chacune des régions résonantes. Si on calcule la dérivée de la dilution en calculant deux ensembles de coefficients α_m et Σ_m, un de référence et un perturbé, alors on appellera SHIDXS une seule fois, à la fin du calcul. Si on procède en se basant sur le calcul des probabilités de collision, alors SHIDXS doit être appelé après chaque itération, incluant une fois à la fin du calcul (donc après la dernière itération). L'exécution de ce sous-module prend un temps négligeable comparativement au reste du calcul d'autoprotection, et même plusieurs appels de celui-ci ralentissent peu le calcul total.

Deux méthodes différentes sont utilisées pour intégrer les sections efficaces continues en énergie. Premièrement, pour les groupes qui correspondent à des énergies résolues, les données "point par point" sont disponibles dans les bibliothèques, dans les répertoires de "BIN-***". Pour une bibliothèque à 172 groupes (format XMAS), les groupes 33 à 95 doivent généralement être autoprotégés (dans certains cas les premiers groupes n'ont pas besoin de l'être),

et les informations dans les répertoires “BIN-***” sont, en général, disponibles à partir du groupe 60. Donc, pour les groupes 60 à 95, on somme tout simplement les expressions à intégrer en utilisant les valeurs “point par point” de sections efficaces qui sont données dans les bibliothèques.

Pour les groupes 33 à 59, c'est-à-dire les groupes qui doivent être autoprotégés mais pour lesquels les résonances ne sont pas résolues, on doit utiliser les tables de probabilités. Ces tables sont expliquées dans la section 4.2.1. Au lieu de considérer un grand nombre de points (qui décrivent clairement la forme des résonances) et une simple somme, comme pour le domaine résolu, on prend seulement quelques points et on effectue une somme en considérant des poids pour chacune des valeurs de sections efficaces. Notons que les tables de probabilités peuvent aussi être utilisées pour les groupes résolus. Celles-ci ont été déterminées dans le but de reproduire le résultat d'une intégrale sur une fonction qui dépend des sections efficaces, pour tous les groupes autoprotégés.

Que ce soit pour le domaine résolu ou non résolu, on obtient alors les coefficients de sensibilité des sections efficaces résonantes. Ces coefficients, ainsi que les coefficients de sensibilité du k_{eff} aux sections multigroupes autoprotégées, sont alors passés au module SENMUL: qui combine les coefficients pour finalement obtenir les contributions des différentes réactions à la composante implicite de la sensibilité du k_{eff}.

5.4.2 Autoprotection par méthode des sous-groupes

Considérons maintenant les équations (4.44), (4.45) et (4.46). En dérivant par rapport à la densité N, on obtient

$$\frac{d\sigma_{x,i,g}}{dN} = \frac{\frac{d\langle\sigma_{x,i}\varphi_i\rangle_g}{dN}\langle\varphi_i\rangle_g - \langle\sigma_{x,i}\varphi_i\rangle_g\frac{d\langle\varphi_i\rangle_g}{dN}}{\langle\varphi_i\rangle_g^2} \tag{5.45}$$

$$\frac{d\langle\sigma_{x,i}\varphi_i\rangle_g}{dN} = \sum_{l=1}^{K}\omega_l\sigma_{x,i,l}\frac{d\varphi_{i,l}}{dN} \tag{5.46}$$

$$\frac{d\langle\varphi_i\rangle_g}{dN} = \sum_{l=1}^{K}\omega_l\frac{d\varphi_{i,l}}{dN}. \tag{5.47}$$

Déterminer les coefficients de sensibilité des sections autoprotégées nécessite donc de calculer les $d\varphi_{i,k}/dN$. Pour obtenir une équation pour les dérivées de la structure fine, on dérive

l'équation (4.41), ce qui nous donne

$$\frac{d\varphi_{i,k}}{dN} = \sum_{j=1}^{I} \Big\{ \frac{dp_{ij,k}}{dN} \Big(\Sigma^{+}_{s,j,g} + N^{*}_{j} \sum_{l=1}^{K} \omega_l \sigma^{*}_{s,j,l} \varphi_{j,l} \Big) + p_{ij,k} \Big(\frac{d\Sigma^{+}_{s,j,g}}{dN} + N^{*}_{j} \sum_{l=1}^{K} \omega_l \sigma^{*}_{s,j,l} \frac{d\varphi_{j,l}}{dN} + \frac{dN^{*}_{j}}{dN} \sum_{l=1}^{K} \omega_l \sigma^{*}_{s,j,l} \varphi_{j,l} \Big) \Big\}. \tag{5.48}$$

Il faut donc premièrement calculer les dérivées des probabilités de collision, tel qu'expliqué dans la section 3.2.4. Une fois les $dp_{ij,k}/dN$ connus, on peut résoudre l'éq. (5.48) pour les dérivées de la structure fine comme pour la structure fine elle même,

$$\frac{d\varphi^{(n)}_{i,k}}{dN} = \sum_{j}^{I} p^{'}_{ij,k} S_{j,k} + p_{ij,k} S^{\prime(n)}_{j,k} \tag{5.49}$$

$$S^{\prime(n)}_{j,k} = \frac{d\Sigma^{+}_{s,j,g}}{dN} + N^{*}_{j} \sum_{l=1}^{K} \omega_l \sigma^{*}_{s,j,l} \frac{d\varphi_{j,l}}{dN}^{(n-1)} + \frac{dN^{*}_{j}}{dN} \sum_{l=1}^{K} \omega_l \sigma^{*}_{s,j,l} \varphi_{j,l}. \tag{5.50}$$

Le terme $S_{j,k}$ n'a pas d'indice itératif, puisqu'on prend ici la source évaluée avec la valeur convergée de la structure fine, qu'on connaît déjà. On applique une méthode similaire pour déterminer la dérivée du facteur SPH. En utilisant la notation de la section 4.2.3, on obtient les quantités suivantes en dérivant par rapport à une densité N,

$$\frac{dQ_{i,g}}{dN} = \frac{d\Sigma^{+}_{s,i,g}}{dN} + \frac{dN^{*}}{dN} \langle \sigma^{*}_{s,i} \varphi_i \rangle_g + N^{*} \frac{d\langle \sigma^{*}_{s,i} \varphi_i \rangle_g}{dN}, \tag{5.51}$$

$$\frac{dS_i}{dN} = \begin{cases} \frac{dQ_{i,g}}{dN} - \frac{d\Sigma^{+}_{i,g}}{dN} \langle \varphi_i \rangle_g - \Sigma^{+}_{i,g} \frac{d\langle \varphi_i \rangle_g}{dN} - \frac{dN^{*}}{dN} \langle \sigma^{*}_{i} \varphi_i \rangle_g - N^{*} \frac{\langle \sigma^{*}_{i} \varphi_i \rangle_g}{dN} & \text{si } i \in c \\ \frac{d\Sigma^{+}_{s,i,g}}{dN} & \text{sinon} \end{cases} \tag{5.52}$$

$$\frac{d\tilde{S}^{(n)}_{g}}{dN} = \operatorname{diag} \begin{cases} \frac{d\Sigma^{+}_{i,g}}{dN} + \frac{dN^{*}}{dN} \sigma^{*}_{i,g} \mu_{i,g} + N^{*} \frac{d\sigma^{*}_{i,g}}{dN} \mu_{i,g} + \Sigma^{*}_{i,g} \frac{d\mu^{(n)}_{i,g}}{dN} & \text{si } i \in c \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \tag{5.53}$$

et

$$\frac{dW^{(n)}_{g}}{dN} = \Big[\mathrm{I} - \tilde{p}_{ij,g} \tilde{S}_g \Big]^{-1} \Big[\frac{d\tilde{p}^{(n-1)}_{ij,g}}{dN} \tilde{S}_g + \tilde{p}_{ij,g} \frac{d\tilde{S}^{(n-1)}_{g}}{dN} \Big] \Big[\mathrm{I} - \tilde{p}_{ij,g} \tilde{S}_g \Big]^{-1} \tilde{p}_{ij,g} + \Big[\mathrm{I} - \tilde{p}_{ij,g} \tilde{S}_g \Big]^{-1} \frac{d\tilde{p}^{(n-1)}_{ij}}{dN}. \tag{5.54}$$

On aura alors

$$\frac{d\mathbf{\Phi}^{(n)}_{g}}{dN} = \frac{dW^{(n)}_{g}}{dN} \mathbf{S}_g + W_g \frac{d\mathbf{S}_g}{dN}, \tag{5.55}$$

qui nous permet de trouver les dérivées des facteurs SPH avec

$$\frac{d\mu_{i,g}^{(n)}}{dN} = \frac{\frac{d\langle\varphi_i\rangle_g}{dN}\tilde{\varphi}_{i,g} - \langle\varphi_i\rangle_g \frac{d\tilde{\varphi}_{i,g}^{(n)}}{dN}}{(\tilde{\varphi}_{i,g})^2} \tag{5.56}$$

On peut ensuite écrire

$$\frac{d\tilde{\sigma}_{x,i,g}}{dN} = \frac{d\sigma_{x,i,g}}{dN}\mu_{i,g} + \sigma_{x,i,g}\frac{d\mu_{i,g}}{dN}. \tag{5.57}$$

Implémentation dans DRAGON

La méthode de calcul de sensibilité de sections efficaces décrite à la section 5.4.2 est programmée dans le module SHISBG: de DRAGON. L'utilisateur doit préciser la densité perturbée et s'il désire que les sensibilités associées à l'autoprotection spatiale soient calculées.

Pour un isotope donné, le calcul des sensibilités suit le calcul des sections autoprotégées. Les taux de réaction (éq. (4.45)) et les flux moyens (éq. (4.46)) sont donc connus. On commence alors le calcul des dérivées de la structure fine, éq. (5.49) et éq. (5.50), et on itère jusqu'à ce que les dérivées aient convergé pour chaque sous-groupe. Le déroulement de cette partie du calcul est très similaire au calcul de la structure fine elle-même.

Pour calculer les sensibilités par mélange, il faut alors homogénéiser les dérivées de la structure fine sur le mélange contenant l'isotope résonant (si le mélange résonant en question est séparé en plusieurs régions bien sûr). Si on veut obtenir les sensibilités associées à l'autoprotection spatiale, alors les dérivées du flux, dans chacune des régions, sont directement utilisées pour obtenir la sensibilité des sections efficaces résonantes, dans chaque région. Il faut ensuite obtenir les dérivées des facteurs SPH. Dans la majorité des cas, le facteur SPH n'est pas important (sa valeur se situe en général entre 0.999 et 1.001) et la dérivée (par rapport à la densité voulue) sera aussi très faible et les termes de correction pourront être négligés.

Toutefois, pour certains groupes le facteur SPH peut modifier les sections efficaces par plus de 10%. Alors, une variation sur la densité peut avoir un impact important sur le facteur SPH et sur sa dérivée. Cela implique que le facteur SPH joue un rôle non négligeable dans la sensibilité de certaines sections efficaces. Il faut donc obtenir les dérivées de ces facteurs avec un processus itératif similaire à celui utilisé pour calculer le facteur lui-même.

En fait, le calcul des dérivées du facteur SPH doit se faire dans la même boucle itérative que le calcul du SPH, car l'évaluation de ces dérivées est en fait assez compliquée. Pour établir l'équation dont la dérivée est la solution, il nous faut les dérivées des probabilités de collision (éq. (5.54)). Les sections efficaces totales utilisées pour calculer les probabilités de collision sont obtenues en combinant les sections efficaces non-résonantes (toutes les sections efficaces

sauf celles de l'isotope résonant) et celles de l'isotope résonant (donc une section autoprotégée à ce stade ci du calcul) multipliée par le facteur SPH. Ainsi, les dérivées des probabilités de collision ne peuvent pas être calculées en considérant uniquement la dépendance explicite des sections macroscopique par rapport à la densité voulue.

On doit donc prendre en considération le fait que les dérivées des sections efficaces totales utilisées dans le calcul des probabilités de collision dépendent non seulement de la section microscopique correspondant à la densité requise mais aussi de la dérivée de la section efficace résonante autoprotégée et du facteur SPH par rapport à la densité,

$$\frac{d\Sigma_i}{dN} = \frac{d\Sigma_i^+}{dN} + N^* \frac{d\langle \sigma_i \varphi_i \rangle_g}{dN} \mu_{i,g} + N^* \langle \sigma_i \varphi_i \rangle_g \frac{d\mu_{i,g}}{dN} + \frac{dN^*}{dN} \langle \sigma_i \varphi_i \rangle_g \mu_{i,g} \tag{5.58}$$

où le dernier terme à droite est inclus pour prendre en compte la possibilité qu'on dérive par rapport à la densité de l'isotope résonant lui-même. Comme on peut le voir, la dérivée de la matrice de probabilités de collision, dans un groupe d'énergie donné, dépend de la dérivée du facteur SPH dans ce même groupe.

La procédure pour le calcul des dérivées du SPH consiste donc à évaluer les matrices de probabilités et autres quantités avec une certaine valeur du facteur SPH (valeur initiale de 1.0), déterminer les nouvelles valeurs du facteur SPH, recalculer les dérivées des matrices de probabilités et des autres quantités (qui peuvent dépendre de la dérivée du facteur SPH), évaluer la dérivée des SPH, puis recommencer le processus avec les nouvelles valeurs de SPH et des dérivées de SPH. On continue ainsi jusqu'à la convergence des facteurs SPH et de leurs dérivées.

CHAPITRE 6 Calculs de référence et différences entre les modèles d'autoprotection et les simulations Monte Carlo

Dans ce chapitre, nous présenterons les méthodes de simulation qui ont été utilisées pour produire les valeurs de référence utilisées pour valider les méthodes de sensibilités implicites et de sections efficaces développées ici. D'abord, il sera question des calculs de sensibilité avec un code déterministe, pour les deux méthodes d'autoprotection dont il est question dans ce travail. Nous discuterons ensuite de l'évaluation des sections autoprotégées avec un code Monte Carlo, le code Serpent (Leppänen (2012)) ici, ainsi que des calculs de sensibilité en utilisant ce même code. Finalement, les différences entre les deux méthodes d'autoprotection et Serpent seront discutées, tant pour les valeurs de sections autoprotégées que pour les sensibilités à une variation de la concentration d'un isotope.

6.1 Calculs de référence pour les sensibilités avec DRAGON

Pour valider les méthodes présentées dans les sections précédentes, il faut des valeurs de référence pour les coefficients de sensibilité. Ceux-ci peuvent être obtenus à partir de calculs de cellule complets, avec les méthodes d'autoprotection correspondantes. Il est important ici de préciser un point. Les techniques d'évaluation de sensibilité développées ici se basent chacune sur un modèle d'autoprotection. On désire donc que ces techniques soient en mesure d'estimer les sensibilités de ces modèles sans avoir à répéter les calculs deux fois en entier. Mais ces méthodes de calculs de sensibilité ont les mêmes faiblesses que les modèles d'autoprotection auxquels elles correspondent.

Concrètement, les sensibilités des sections efficaces sont reliées au phénomène (physique) de résonance des sections efficaces continues en énergie. Il existe donc des "vraies" valeurs de sensibilité, qui correspondent à ce qui se passe réellement avec la distribution de neutrons dans les régions résonantes lorsque la densité d'un isotope varie. Les calculs d'autoprotection permettent d'approximer le flux en présence de résonances pour calculer les sections efficaces dans chaque groupe de façon fiable et représentative de la physique nucléaire qui gouverne les réactions neutrons-noyaux. La précision des méthodes de calcul de sensibilité de sections multigroupes dépend donc directement de la qualité des résultats approximatifs que les modèles d'autoprotection peuvent calculer.

Autrement dit, ce n'est pas parce que l'accord entre une technique de calcul de sensibilité et le calcul complet direct basé sur un modèle d'autoprotection est bon que le résultat est

automatiquement fiable. Cette comparaison ne nous permet de vérifier que la capacité de nos méthodes à estimer la sensibilité d'un modèle d'autoprotection donné. Si ce modèle n'est pas bien adapté pour certains types de cellules ou est imprécis parce qu'il ne reproduit pas bien certains phénomènes physiques, alors il en sera de même pour les calculs de sensibilité.

6.1.1 Références pour la sensibilité des sections efficaces

Les valeurs de référence des sections autoprotégées sont assez faciles à obtenir. On commence par prendre une bibliothèque autoprotégée avec une densité de référence, puis on comparera avec une bibliothèque autoprotégée avec une densité légèrement perturbée. Pour une section donnée, on prend alors la différence entre la valeur dans la bibliothèque perturbée et la valeur dans la bibliothèque de référence, puis on divise par la variation sur la densité. Ce calcul approxime la dérivée de la section efficace,

$$\frac{d\sigma_{x,g}}{dN^H} \simeq \frac{\sigma_{x,g}(N^H + \Delta N^H) - \sigma_{x,g}(N^H)}{\Delta N^H}. \tag{6.1}$$

On multiplie ensuite par la densité (de référence) et on divise par la valeur de la section efficace (de référence) et on obtient le coefficient de sensibilité. Si pour une section efficace α et un groupe g on identifie le coefficient de sensibilité de référence comme $S^{\text{ref}}_{\alpha,N^H}$ et celui obtenu avec une des méthodes présentées dans les sections 5.4.1 et 5.4.2 comme $S^{\text{approx}}_{\alpha,N^H}$, on aura alors une erreur relative donnée par

$$\Delta S^{\text{rel}}_{\alpha,N^H} = \frac{|S^{\text{approx}}_{\alpha,N^H} - S^{\text{ref}}_{\alpha,N^H}|}{|S^{\text{ref}}_{\alpha,N^H}|}. \tag{6.2}$$

Notons ici que même si on considère que le coefficient obtenu en faisant des calculs complets représente la "vraie" valeur, dans les faits ce résultat reste lui aussi approximatif. On utilise une expression de premier ordre assez simple pour approximer la dérivée. Considérant que pour des variations importantes de la densité le comportement des sections autoprotégées est assez complexe et non-linéaire, l'approximation numérique des dérivées n'est certainement pas parfaite, mais en prenant de très petites valeurs pour ΔN^H on obtient des résultats qui on l'espère seront fiables (qui restent approximativement constants lorsqu'on fait varier le ΔN^H autour d'une valeur ΔN^H_0).

Précisons ici que la normalisation de Livolant-Jeanpierre n'est pas utilisée quand on calcule les coefficients de sensibilité par un calcul direct (éq. (6.1)). Ce choix (on pourrait très bien calculer les sensibilités avec la normalisation de LJ) est fait pour s'assurer de la cohérence entre les calculs directs et ceux avec la méthode décrite dans la sous-section 5.4.1. L'équation

(5.37) est basée sur une structure fine donnée par l'expression (4.30), qui est consistante avec la forme du flux moyen donnée par (4.32). Autrement dit, la structure fine utilisée dans les calculs de sensibilités faits avec l'équation (5.37) est cohérente avec les éqs. (4.29) et (4.30) et non avec celle de l'éq. (4.33).

6.1.2 Références pour la sensibilité du k_{eff}

Pour le k_{eff}, on distingue 4 cas : la sensibilité totale, la sensibilité explicite, la sensibilité implicite et la somme de la sensibilité implicite et explicite. En théorie, la somme des coefficients explicite et implicite devrait donner la sensibilité totale, mais en pratique il se peut qu'il y ait une légère différence entre ces deux valeurs à cause d'interférences entre les effets implicite et explicite qui sont négligées lorsqu'on calcule les coefficients de façon séparée.

Pour obtenir la sensibilité totale directement, on perturbe la densité d'hydrogène avant les calculs d'autoprotection puis on calcule le k_{eff} et le flux de façon standard. En comparant avec un calcul similaire mais avec la densité de référence, on peut approximer le coefficient de sensibilité total du k_{eff}. Les commentaires de la sous-section précédente, concernant la précision des dérivées évaluées numériquement, s'appliquent ici aussi, et les variations sur la densité sont choisies de façon à ce que les résultats pour les dérivées soient fiables.

Pour les coefficients explicite et implicite, on procède de manière similaire, mais la façon dont la perturbation sur la densité est appliquée est différente. Pour la sensibilité explicite, on perturbe la densité uniquement après le calcul d'autoprotection. Ainsi, les effets de cette variation sur les sections multigroupes résonantes ne sont pas inclus pour le calcul du k_{eff}. Pour la sensibilité implicite, on perturbe la densité avant l'autoprotection, puis on restaure la densité de référence avant le calcul du k_{eff}. En procédant de cette façon, les effets de la variation de la densité sur les sections résonantes est pris en compte, mais la densité utilisée pour calculer le k_{eff} n'est pas perturbée, permettant ainsi d'isoler le coefficient de sensibilité implicite.

Il y a essentiellement deux facteurs à prendre en compte lorsqu'on choisit la variation sur la densité à utiliser pour évaluer les dérivées en utilisant une simple différence. Il faut que le comportement du k_{eff} soit le plus linéaire possible en fonction de la densité. Comme en réalité le dépendance du k_{eff} sur les densités est beaucoup plus complexe, on doit s'assurer de garder la variation sur la densité assez petite pour que l'approximation linéaire reste valide.

En outre, les calculs dans DRAGON, que ce soit pour l'autoprotection ou pour le flux et le k_{eff}, dépendent souvent d'itération qu'on arrête après la convergence. Les différents critères de convergences relatifs sur le flux et le k_{eff} utilisés dans DRAGON varient entre 10^{-4} et

10^{-5}. Ceux-ci peuvent être réduits, mais des critères de convergence trop petits peuvent faire en sorte qu'il soit impossible d'atteindre la convergence désirée. Finalement, si on prend des variations sur la densité qui sont très (trop) faibles, les variations résultantes sur le k_{eff} peuvent être inférieures ou de l'ordre de la précision du calcul lui même, ce qui implique que les résultats seraient peu fiables.

On présente à la figure 6.1 la différence sur le k_{eff} (entre le cas de référence et le cas perturbé) causée par plusieurs variations de la densité, pour une simple cellule REP avec du MOX comme combustible. On montre ici la différence sur le k_{eff} dans le contexte d'un calcul de sensibilité implicite (on varie la densité avant l'autoprotection mais celle-ci est restaurée à sa valeur de référence avant le calcul de flux). Ici, c'est la densité d'hydrogène dans le modérateur qui est perturbée (le système est présenté plus en détails dans la section 7.1). Les deux modèles d'autoprotection sont considérés.

On peut voir que la différence sur le k_{eff} est presque parfaitement linéaire pour des variations de densité de 2% et moins. De plus, il est possible que pour de très petites variations, la perturbation résultante sur le k_{eff} soit plus petite que l'incertitude associée au critère de convergence. Il semble toutefois que cela ne soit pas le cas pour des variations aussi petites que 0.1% où on observe toujours un comportement approximativement linéaire. Par contre, pour les coefficients de sensibilité des sections autoprotégées, il est préférable de ne pas prendre des variations très petites puisque les perturbations résultantes sont souvent plus faibles que celles sur le k_{eff}. On choisit donc de prendre une variation de 1% sur les densités lorsqu'on fait des calculs de sensibilité directs avec une méthode déterministe.

6.2 Calculs de référence pour les sensibilités avec Serpent

Comme expliqué plus haut, la sensibilité des sections efficaces est reliée au phénomène (physique) de résonances des isotopes lourds. Toutefois, il peut être assez difficile d'obtenir les "vraies" valeurs de ces sensibilités. En fait, à partir d'un code déterministe, nous sommes limités à estimer la valeur de la sensibilité associée à un modèle d'autoprotection donné. Bien sûr, les modèles d'autoprotection présentés ici ont été testés extensivement et sont en général considérés comme fiables, mais il est important d'avoir des valeurs de sensibilité qui ne dépendent pas d'un modèle d'autoprotection et qui représentent la sensibilité réelle d'un système. On peut ainsi comparer avec les résultats obtenus avec différents modèles d'autoprotection et différentes méthodes de calcul de sensibilité.

Pour parvenir à cette fin, on utilise le code de transport neutronique Monte Carlo Serpent. Le fonctionnement général de ce code suit ce qui est décrit dans la section 2.3.1. Bien que le

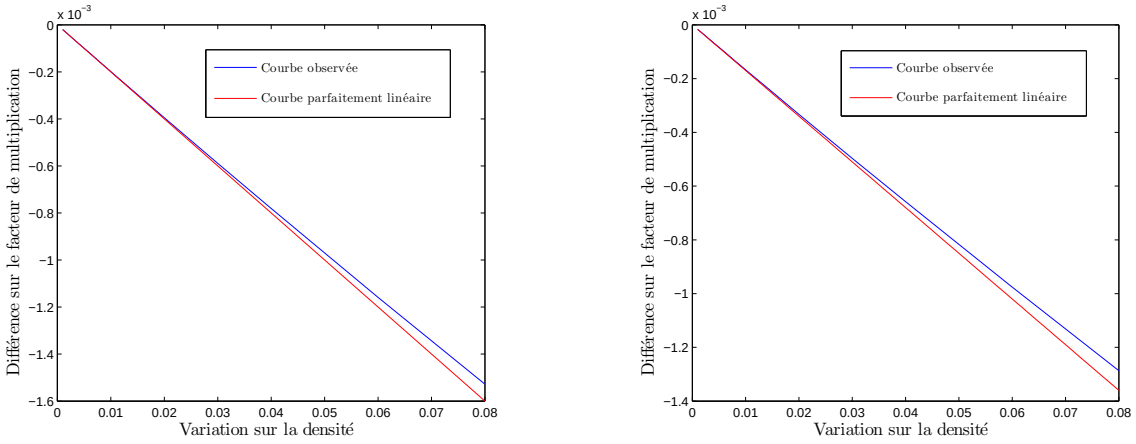

Figure 6.1 Différence entre le k_{eff} de référence et celui obtenu pour plusieurs variations relatives sur la densité de l'hydrogène dans une cellule de REP, dans le contexte d'un calcul de sensibilité implicite, pour les modules SHI : (à gauche) et SHISBG : (à droite).

temps de calcul associé à ce genre de traitement du transport neutronique soit beaucoup plus élevé que celui pour un calcul déterministe, les sensibilités obtenues avec Serpent peuvent nous permettre d'estimer la capacité des méthodes déterministes à évaluer les sensibilités réelles des sections efficaces.

Précisons qu'il n'est pas possible d'obtenir la sensibilité implicite du k_{eff} à partir d'un calcul Monte Carlo continu en énergie. En fait, le concept de sensibilité implicite est en quelque sorte un artefact du traitement multigroupe du transport neutronique. Dans un calcul Monte Carlo continu en énergie, les données multigroupes ne sont pas utilisées. Par contre, il est possible d'utiliser un code Monte Carlo pour obtenir une bonne approximation de la distribution en énergie du flux neutronique réel en "comptant" les neutrons et en notant leur énergie. On peut alors condenser les sections continues par groupe en les pondérant avec cette distribution (Kaltiaisenaho et Leppänen (2014)). En déterminant la distribution avec une densité de référence et une densité légèrement perturbée pour un isotope donné, il est possible, *en théorie*, d'obtenir les sensibilités de sections efficaces multigroupes à une variation de la densité d'un isotope.

En pratique toutefois, obtenir de telles sensibilités est très difficile. Les coefficients de sensibilité de sections autoprotégées varient typiquement de 0 à 0.15 pour la sensibilité à la densité d'hydrogène. C'est donc dire que pour une variation de 1 % de la densité d'hydrogène, les sections autoprotégées vont varier de 0.15 % au maximum, et de beaucoup moins dans plusieurs cas. À cause de la nature probabiliste des calculs Monte Carlo, deux simulations avec exactement les mêmes paramètres en entrée ne donneront pas exactement les mêmes résultats.

Imaginons qu'on fasse une simulation de référence, puis deux simulations perturbées. En comparant l'ensemble des sections multigroupes obtenues pour chacune des simulations avec la densité perturbées avec celui pour la simulation de référence, on peut estimer les sensibilités. Mais pour avoir des résultats le moindrement significatifs, il faut que les différences entre les deux simulations perturbées (les fluctuations purement statistiques), pour les sections efficaces, soient beaucoup plus petites que les différences causées par la variation sur la densité d'un isotope, l'hydrogène par exemple.

Toutefois, obtenir des fluctuations statistiques aussi faibles pour une section multigroupe est extrêmement difficile. D'abord, contrairement au calcul du k_{eff}, pour un groupe d'énergie donné seulement une faible fraction de tous les neutrons sont utilisés pour le calcul de la section efficace correspondante. Dans le cas du k_{eff}, tous les neutrons (pour les cycles actifs) apportent une contribution au calcul du k_{eff} final. Pour les sections autoprotégées, seulement les neutrons dans la bonne région et dans le bon groupe d'énergie contribuent au flux qui est utilisée pour pondérer les sections continues en énergie. Il faut donc simuler une quantité de neutrons très importante pour disposer d'un flux fiable, c'est-à-dire avec des écarts types relativement faibles.

Deuxièmement, comme les résonances font en sorte qu'une section efficace peut avoir, sur une courte plage d'énergie, une valeur supérieure de plusieurs ordres de grandeur à sa valeur "asymptotique" (en l'absence de résonances), la présence de quelques neutrons à proximité d'une résonance importante peut influencer la section multigroupe de façon très importante. En fait, au final la valeur elle-même d'une section efficace multigroupe ne changera pas beaucoup d'une simulation à l'autre mais comme on considère ici la *différence* entre des valeurs de sections efficaces pour deux simulations différentes, la moindre fluctuation statistique peut causer problème, et la présence de résonances importantes amplifiera ce problème. Une variation statistique de 0.1 % sur une section multigroupe peut potentiellement faire complètement "disparaître" l'information reliée aux sensibilités.

Il est possible de prendre certaines mesures pour partiellement contourner les problèmes explicités ci-haut. Tout d'abord, il est désirable d'avoir un nombre élevé de cycles inactifs afin de s'assurer que la distribution neutronique est déjà bien convergée avant le début des cycles actifs. Bien sûr, on veut aussi utiliser le plus de neutrons possibles par cycle et le plus de cycles possible par simulation, tout en étant limité par des contraintes de puissance de calcul et de temps.

Finalement, on peut utiliser des perturbations plus importantes pour les densités. Pour les calculs déterministes, on utilise typiquement des variations de 1 %. Pour les simulations Monte Carlo, une perturbation de 1 % ne sera en général pas assez importante pour obtenir

des résultats acceptables en un temps acceptable. Une analyse quantitative de la validité des sensibilités de sections efficaces obtenues avec Serpent est présentée dans la sous-section qui suit.

6.2.1 Validité et précision des sensibilités calculées dans Serpent

Dans le chapitre 7, il sera question, pour le premier système présenté, de sensibilités obtenues par des calculs Serpent, qui seront comparées avec les résultats des méthodes de calculs de sensibilité présentées dans cette thèse. Toutefois, lorsque les sensibilités sont trop faibles, les résultats Serpent ne sont pas nécessairement fiables. Pour pouvoir quantifier la précision d'un résultat de sensibilité Serpent, on fait plusieurs (ici 5) simulations perturbées avec Serpent, toutes avec les mêmes paramètres d'entrée. On fait aussi 5 calculs de référence avec Serpent, en utilisant les mêmes paramètres d'entrée que pour les simulations perturbées, excepté bien sûr pour la densité isotopique par rapport à laquelle on veut obtenir les sensibilités.

Pour chaque calcul de référence, on évalue les sensibilités des sections efficaces en comparant avec chacun des calculs perturbés. On obtient donc 25 valeurs de sensibilités pour les sections, qu'on peut utiliser pour calculer une moyenne μ et un écart type σ (pour chacun des groupes où la section est résonante). Notons ici qu'on calcule l'écart type uniquement à partir des 25 valeurs de sensibilité, sans utiliser les incertitudes données par Serpent. Celles-ci sont considérées un peu plus loin. En comparant la moyenne avec l'écart type, on peut quantifier la "fiabilité" statistique des résultats. Si, par exemple, l'écart type est de l'ordre de la moyenne, cela signifie que les fluctuations statistiques sont aussi grandes que la quantité qu'on veut extraire des calculs, et donc que le résultat n'est pas fiable. Si par contre l'écart type est de l'ordre que quelques pourcents (disons 5%) de la moyenne alors le résultat est considéré fiable. Les 10 calculs ont été effectués avec 800 000 neutrons par cycles, pour 800 cycles actifs et 100 inactifs.

Le système considéré est une tige de MOX avec une gaine, dans de l'eau légère. Les résultats analysés ici concernent la section de capture radiative de l'U238. De plus, nous présentons deux ensembles de résultats (d'écarts types divisés par la moyennes). Dans un cas, la variation de la densité de l'hydrogène était de 4%, et pour l'autre de 8%. Comme expliqué dans la section précédente, une plus grande variation sur la densité peut diminuer l'impact des fluctuations statistiques. Toutefois, une plus grande variation peut aussi nuire à la validité du calcul de sensibilité, car on utilise la différence entre une quantité perturbée et une quantité de référence pour estimer une dérivée qui n'est plus alors nécessairement une fonction linéaire de la perturbation. Les comparaisons entre les écarts types et la moyenne sont présentés dans les figures 6.2 et 6.3.

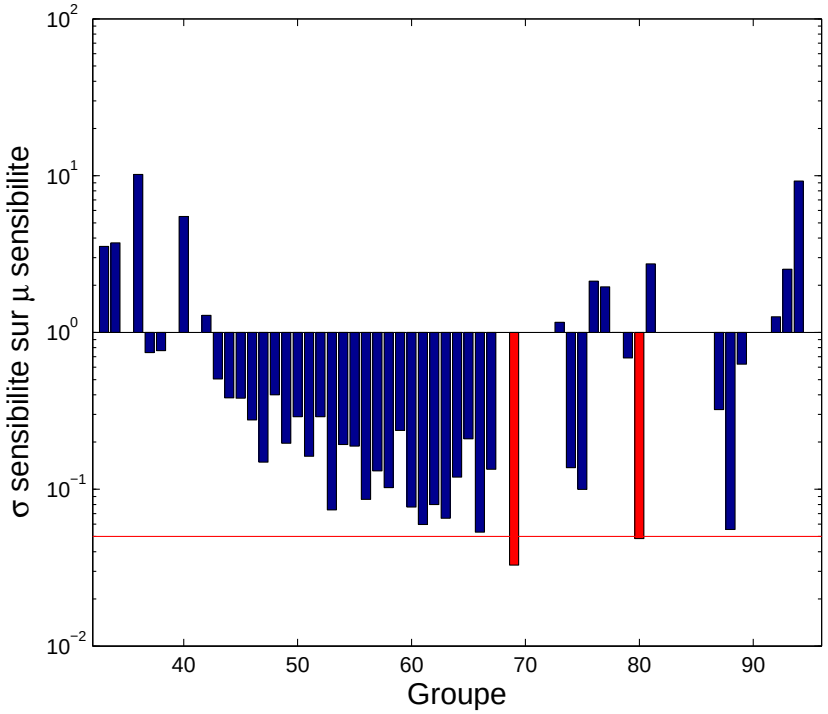

Figure 6.2 Écarts types divisés par la moyenne pour la sensibilité des sections efficaces de capture radiative, pour l'U238, dans une tige de MOX. Variation de 4% sur la densité. Les barres en rouge indiquent un ratio inférieur à 5%.

On peut voir qu'effectivement, extraire les sensibilités avec une variation de 8% sur la densité donne des résultats statistiquement plus fiables qu'avec une variation de 4%. Dans un fichier de sortie d'un calcul de détecteur Serpent, on retrouve aussi des incertitudes statistiques évaluées par Serpent pour chacune des valeurs calculées par le détecteur. Comme seconde validation de la précision des sensibilités obtenues avec un calcul Serpent, on compare les perturbations attendues sur les sections efficaces avec les incertitudes fournies par Serpent. Par perturbations attendues, on veut dire une estimation des perturbations sur les sections efficaces, résultant d'une variation sur une densité, calculée à partir des coefficients de sensibilité calculés pour DRAGON (en utilisant un modèle de sous-groupe dans ce cas-ci). Cette comparaison présentée à la figure 6.4.

Les ratios (perturbations dues aux incertitudes Serpent divisée par perturbations attendues basé sur DRAGON) sont présentés à la figure 6.5 pour les deux variations de densité. Notons qu'il est inutile de présenter les courbes au complet puisqu'il n'y a pas vraiment de différence entre un ratio égal à 1 et un autre égal à 10. Dans les deux cas, la perturbation causée par les incertitudes statistiques est plus grande ou égale à la perturbation attendue suite à une

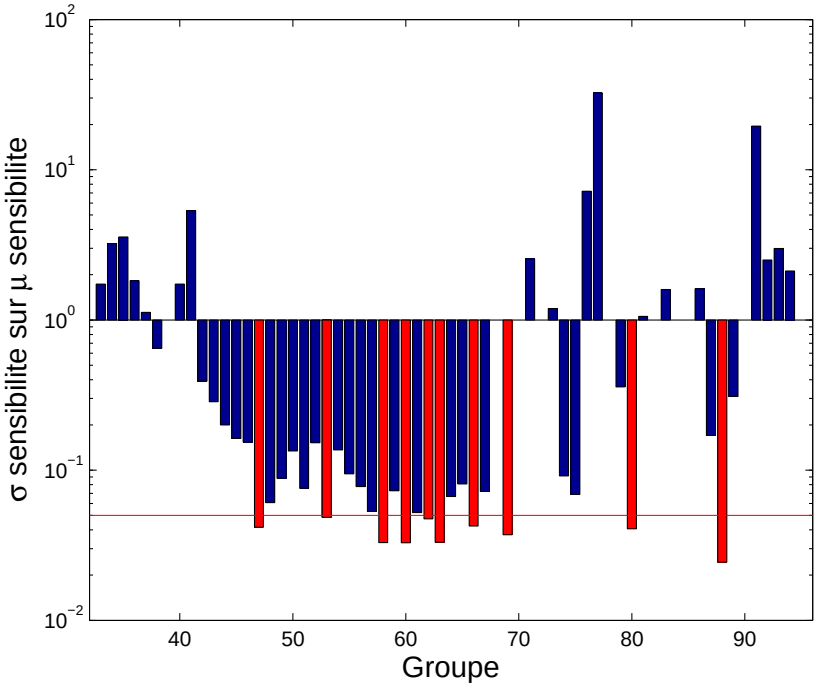

Figure 6.3 Écarts types divisés par la moyenne pour la sensibilité des sections efficaces de capture radiative, pour l'U238, dans une tige de MOX. Variation de 8% sur la densité. Les barres en rouge indique un ratio inférieur à 5%.

variation sur la densité. On peut voir que les incertitudes statistiques données par Serpent sont un peu plus "pessimistes" que celles obtenues par l'analyse présentée aux figures 6.2 et 6.3. Selon l'évaluation statistique de Serpent, il est assez rare que les incertitudes sur les sections condensées soient inférieures à 5% des perturbations auxquelles on s'attend pour les variations de densité, basé sur des calculs DRAGON.

De plus, les sensibilités obtenues avec une variation de 8% ne sont pas nécessairement très précises, car l'approximation de la dérivée par une différence est moins acceptable que pour des variations plus faibles. À la figure 6.6, on présente une comparaison entre les dérivées des sections efficaces obtenues avec les deux variations différentes.

Comme on peut observer sur cette figure, il y a pour certains groupes des différences importantes entre les dérivées de sections efficaces lorsqu'on compare des variations de densité de 4% et 8 %. Cela indique que les valeurs obtenues avec une variation de 8% n'approximent pas toujours très bien les dérivées, même si une telle variation est plus pratique à cause des fluctuations statistiques qu'on retrouve dans des simulations Monte Carlo. Toutefois, pour les dérivées les plus élevées, l'accord est plutôt bon et les groupes pour lesquels il y a des

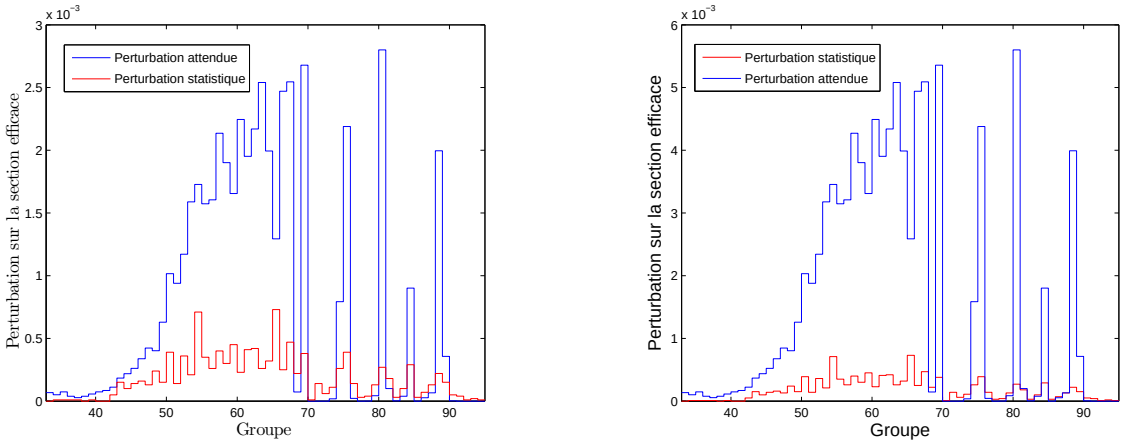

Figure 6.4 Comparaison entre les perturbations attendues (basées sur un modèle d'autoprotection par sous-groupes) et les perturbations résultant des incertitudes statistiques fournies par Serpent, pour une variation sur la densité de 4% (à gauche) et 8% (à droite).

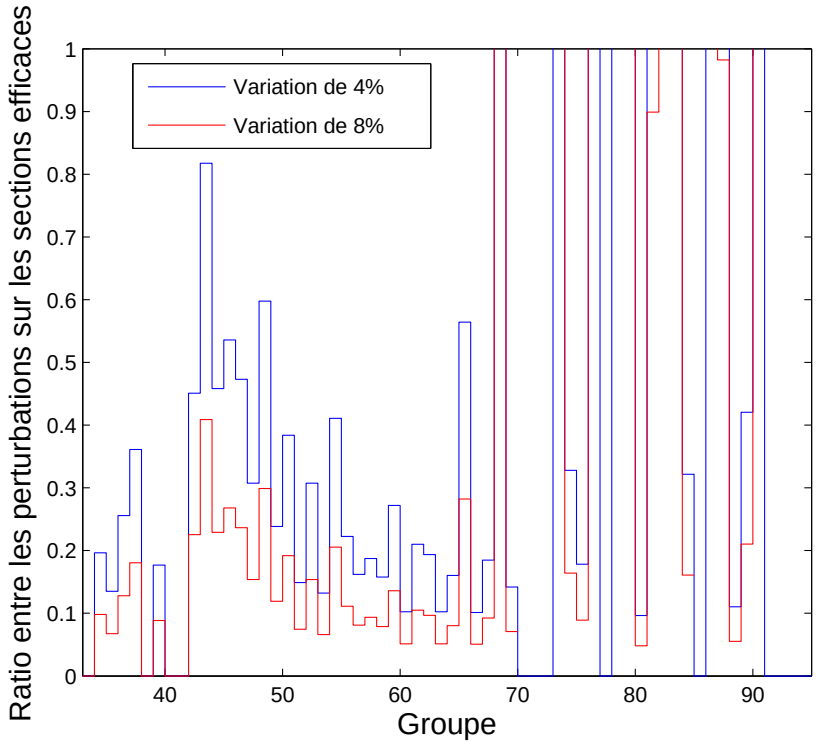

Figure 6.5 Ratio entre les perturbations résultant des incertitudes statistiques fournies par Serpent et les perturbations attendues (basées sur un modèle d'autoprotection par sous-groupes).

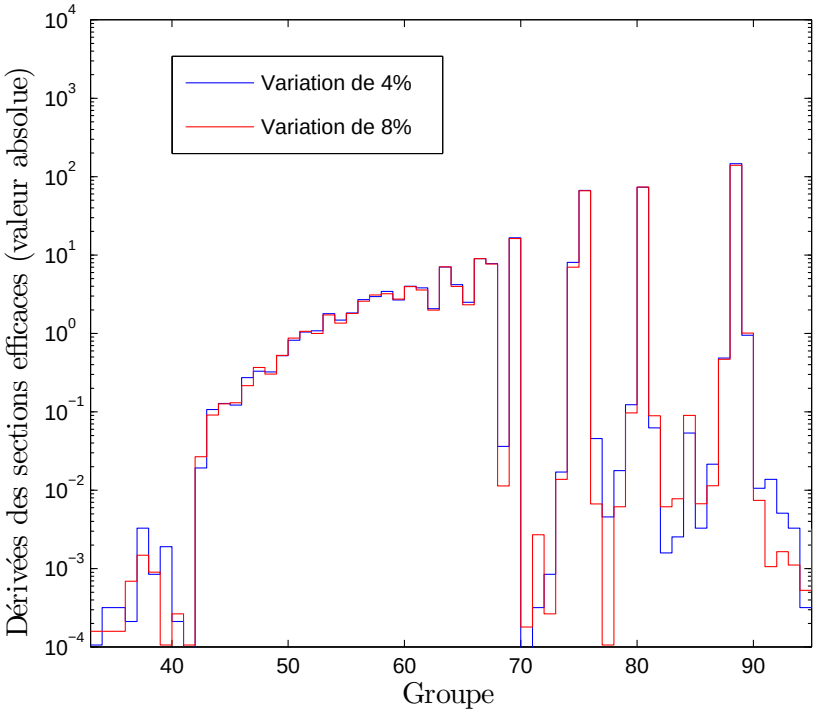

Figure 6.6 Comparaison entre les dérivées des sections efficaces de capture radiative, pour une tige de MOX, pour l'U238, en utilisant des variations de densité de 4% et 8%.

différences importantes sont ceux où les dérivées sont faibles.

Finalement, deux simulations Serpent (une de référence et une perturbée) ont aussi été effectuées avec 4000000 neutrons par cycle et 2400 cycles actifs (toujours 100 cycles inactifs). Ces simulations ont permis de vérifier la validité des résultats pour les simulations avec moins de neutrons. Nous avons ici considéré une variation de 4% de la densité, le nombre de neutrons permettant de diminuer les incertitudes statistiques. On présente à la figure 6.7 une comparaison entre les dérivées des sections par rapport à la densité d'hydrogène, pour l'ensemble des simulations avec 800000 neutrons par cycle et pour la simulation avec 4000000 neutrons par cycle (et 2400 cycles actifs).

On peut voir que pour les groupes avec des coefficients de sensibilité élevés, l'accord entre les simulations est très bon, ce qui semble indiquer que 800000 neutrons et 800 cycles actifs est suffisant pour obtenir une bonne précision pour les coefficients de sensibilité, du moins pour les groupes avec les valeurs les plus élevées.

Finalement, mentionnons que le comportement en $1/\sqrt{N}$ de l'écart type, auquel on s'attend en général pour une simulation stochastique, où N représente le nombre d'essais (par exemple

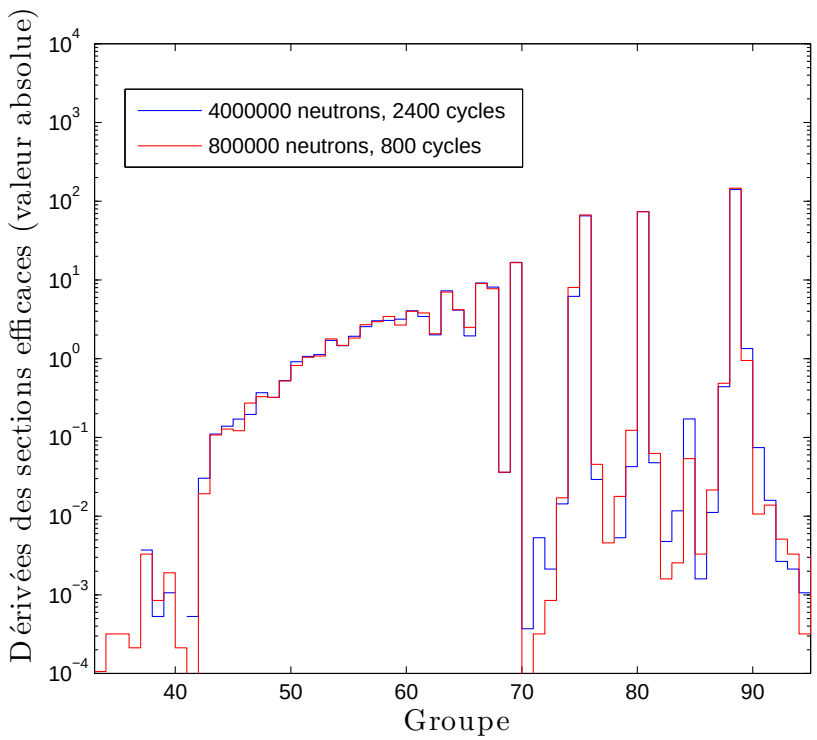

Figure 6.7 Comparaison entre les dérivées des sections efficaces de capture radiative, pour l'U238, en utilisant une variation de densité de 4%, pour deux simulations avec un nombre différent de neutrons dans un tige MOX REP.

le nombre de neutrons pour des simulations de transport neutronique), ne s'applique pas nécessairement ici. Sans entrer dans les détails, dans une simulation parfaite et bien convergée, il ne devrait pas y avoir de corrélation entre les différentes positions enregistrées pour les fissions pendant un cycle et celles du cycle précédent. En pratique, certaines corrélations sont définitivement observées (Endo *et al.* (2014); Herman *et al.* (2014)). Ceci fait en sorte que les incertitudes réelles sur les calculs Monte Carlo peuvent être difficiles à évaluer.

6.3 Comparaison entre les méthodes d'autoprotection et Serpent

6.3.1 Comparaison pour le k_{eff}

Le facteur de multiplication a été calculé avec chacune des méthodes d'autoprotection (et avec Serpent) pour une cellule REP avec du MOX comme combustible. Pour le module SHI:, en utilisant ici la normalisation de Livolant-Jeanpierre pour avoir un résultat le plus précis possible, nous avons obtenu un k_{eff} de 1.0605. Avec SHISBG:, on trouve un k_{eff} de 1.0600 alors qu'avec Serpent on obtient 1.0635. L'accord entre les deux méthodes est donc excellent,

alors qu'on trouve une différence de l'ordre de 3 mk entre les k_{eff} déterministes et celui trouvé avec Serpent, ce qui est quand même assez faible. Les différences peuvent être expliquées, entre autre, par l'utilisation de données continues en énergie pour le calcul Serpent alors que les calculs DRAGON se font avec des données multigroupes. De plus, la méthode utilisée pour trouver le k_{eff} avec Serpent est complètement différente de ce qui est fait dans DRAGON et les simulations Monte Carlo ne font en général pas autant d'approximations qu'un calcul déterministe.

6.3.2 Comparaison pour les sections efficaces autoprotégées

En plus de considérer les résultats de sensibilité, il est important de parler des différences entre les méthodes d'autoprotection simplement au niveau des sections efficaces (et non des sensibilités). Notons ici que les valeurs des sections efficaces, après autoprotection, ne sont pas nécessairement la meilleure façon de comparer les méthodes d'autoprotection et de condensation en énergie (pour les calculs Serpent). Comme certaines sections efficaces ne sont que légèrement modifiées par l'autoprotection, des valeurs similaires de sections autoprotégées pour deux méthodes différentes n'indiquent pas nécessairement un bon accord entre ces deux méthodes. On regardera donc plutôt les corrections relatives apportées par les modèles d'autoprotection, c'est-à-dire la différence entre la section autoprotégée et la section avant l'autoprotection, divisée par la section efficace avant l'autoprotection.

La figure 6.8 montre les corrections relatives pour toute la plage d'énergie concernée par l'autoprotection, pour les deux modèles d'autoprotection présenté ici ainsi que pour une condensation en énergie suite à un calcul Serpent. Les sections autoprotégées sont celles de capture radiative de l'U238, calculées pour une tige de MOX, avec gaine et eau légère comme modérateur. Notons qu'il n'existe pas vraiment de sections efficaces "non autoprotégées" pour Serpent, le concept d'autoprotection n'ayant de sens que pour des calculs déterministes. On compare donc les sections efficaces multigroupes trouvées avec Serpent (l'équivalent de sections autoprotégées) avec les sections multigroupes à dilution infinie d'une bibliothèque multigroupe utilisée dans les calculs DRAGON pour établir la correction en question.

On peut voir que l'accord est en général assez bon, mais pour de très petites corrections (un effet d'autoprotection relativement faible), on remarque que Serpent peut donner de petites corrections positives. Ceci est probablement dû au fait que les données à dilution infinie dans les bibliothèques pour DRAGON ne correspondent pas nécessairement parfaitement aux données utilisées dans les calculs Serpent.

Pour compléter la comparaison, on présente à la figure 6.9 les différences entre les corrections faites par SHISBG: (modèle de sous-groupes) et SHI: (modèle d'équivalence de dilution).

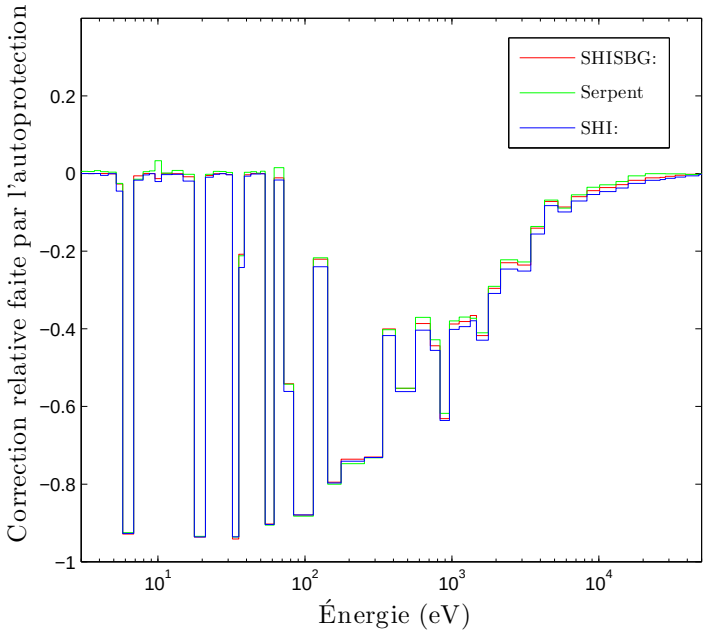

Figure 6.8 Comparaison entre les corrections apportées par les modèles d'autoprotection (ou la condensation en énergie avec Serpent). Calculées pour une tige de MOX, pour les sections efficaces de capture radiative de l'U238.

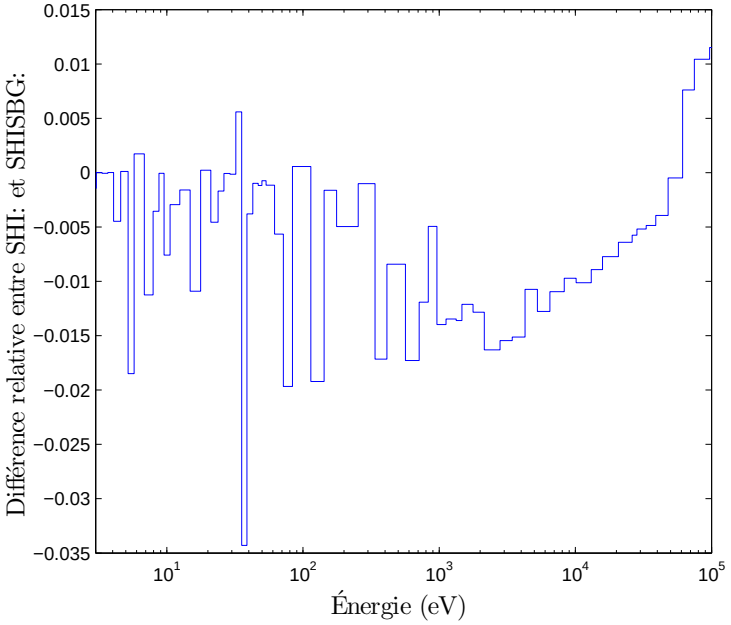

Figure 6.9 Différences entre les corrections d'autoprotection d'un modèle de sous-groupes et celles d'un modèle d'équivalence de dilution, divisées par les sections efficaces non autoprotégées.

Ici, on a choisi de diviser la différence entre les deux corrections par la valeur de la section non-autoprotégée. Ainsi, il n'est pas nécessaire d'éliminer les résultats où la correction faite par l'autoprotection est très petite (et où une petite différence absolue peut donner une très grande différence relative). On présente donc les différences entre les corrections faites par les deux modèles d'autoprotection exprimées en pourcentage de la section non-autoprotégée. Cela donne donc une bonne idée de l'importance de ces différences.

On peut donc observer que les écarts entre les corrections par chacun des modèles d'autoprotection sont en général assez faibles, particulièrement si on les compare aux sections efficaces elles-mêmes.

CHAPITRE 7 Résultats et discussion

Ici, nous analyserons les coefficients de sensibilité implicite et explicite aux concentrations isotopiques pour plusieurs systèmes différents. Nous procéderons premièrement à l'analyse complète d'une cellule REP (Réacteur à eau sous pression) avec du MOX comme combustible. Pour les autres systèmes, notre analyse se concentrera principalement sur leurs particularités en ce qui a trait aux sensibilités des sections efficaces ainsi que les sensibilités implicite et explicite du facteur de multiplication.

7.1 Cellule REP avec combustible MOX

Le premier système que nous analyserons est une simple cellule de REP contenant du combustible MOX. La cellule est un carré de 1.26 cm de côté, avec une tige de 0.41 cm de rayon et une gaine de 0.06 cm d'épaisseur. La gaine est faite de zirconium et le contenu du combustible est présenté dans le tableau 7.1.

Tableau 7.1 Composition du combustible de la tige de MOX.

Isotope	Densité (10^{24}atomes $\cdot\, cm^{-3}$)
O16	4.6824E-02
Pu238	7.8677E-06
Pu239	3.8847E-04
Pu240	1.5669E-04
Pu241	5.8272E-05
Pu242	3.0305E-05
Am241	9.7120E-06
U235	5.7628E-05
U238	2.2703E-02

7.1.1 Comparaison entre les calculs directs de sensibilité et les méthodes basées sur les dérivées des PC

Pour commencer, on compare, pour quelques sections efficaces, les sensibilités obtenues par un calcul direct (un calcul avec la densité de référence, un avec celle perturbée et on évalue ensuite les variations sur les sections efficaces et on estime les dérivées avec l'éq. (6.1)) avec celles obtenues par les méthodes décrites dans la section 5.4. On examine tout d'abord les sensibilités obtenues pour un modèle d'équivalence de dilution.

Module SHI:

Les sensibilités des sections de capture et de fission du Pu239 à la densité de l'hydrogène présent dans le modérateur sont présentées à la figure 7.1. On distingue ici, pour la technique de calcul de sensibilité expliquée dans la section 5.4.1, entre les deux méthodes pour évaluer la dérivée des coefficients utilisés pour calculer la dilution ($d\alpha_m/dN$ et $d\Sigma_m/dN$ dans l'éq. 5.38). Soit on effectue un deuxième calcul d'autoprotection partiel pour obtenir les coefficients perturbés, ce qu'on appellera une méthode basée sur les différences finies des coefficients de dilution (DFCD), soit on procède à un traitement analytique basé sur les dérivées des probabilités de collision (TADPC). Nous utiliserons pour le reste de cette section les acronymes DFCD et TADPC pour désigner les deux méthodes.

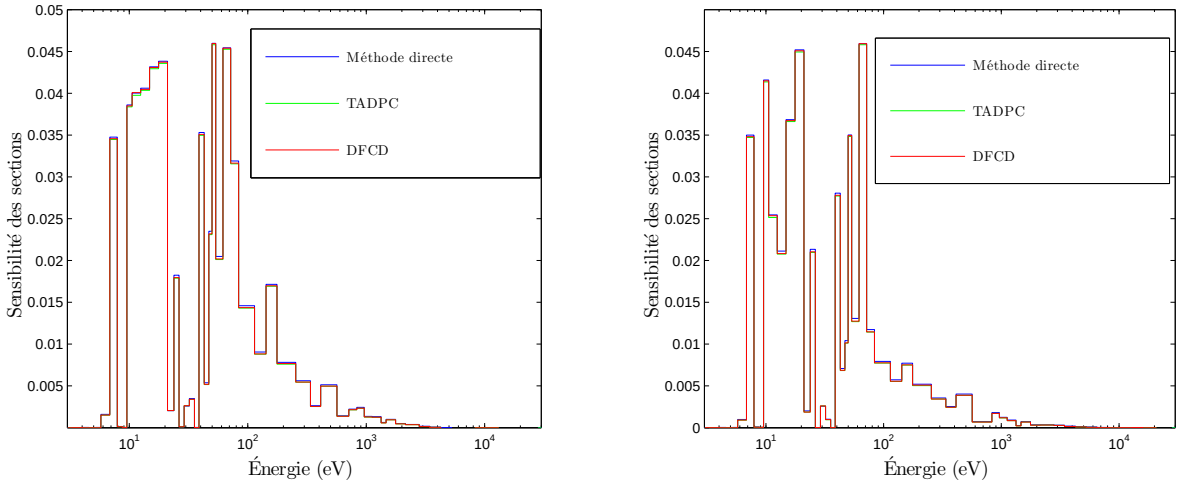

Figure 7.1 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative (à gauche) et la fission (à droite) du Pu239, à la densité d'hydrogène dans le modérateur. Comparaison entre la méthode de calcul direct et les méthodes DFCD et TADPC.

De manière générale, on voit que la méthode de calcul de coefficients de sensibilité dérivée dans la section 5.4.1 donne des résultats pratiquement identiques à ceux obtenus par une méthode directe. Comme on s'y attend, les coefficients obtenus par les méthodes développées dans cette thèse, peu importe la façon utilisée pour calculer les dérivées des coefficients de dilution, sont en très bon accord avec les coefficients calculés avec une méthode directe.

On peut aussi remarquer certaines ressemblances entre les sensibilités des deux réactions. Dans certains cas, les résonances qui mènent à la capture radiative mènent aussi à une fission, ce qui explique que dans certains groupes on obtient des sensibilités similaires pour la capture et la fission. On voit aussi que les sensibilités sont beaucoup plus élevées à basse énergie. Comme les résonances les plus importantes se trouvent en général vers les énergies

plus basses, il est normal d'observer que les sections efficaces qui sont le plus corrigées par l'autoprotection sont plus sensibles à une variation de la densité d'un isotope qui joue un rôle important dans les calculs d'autoprotection.

On peut aussi constater que les sensibilités sont relativement faibles pour les deux sections efficaces. Les coefficients les plus importants sont de l'ordre de 0.05, ce qui implique qu'une variation de 1 % de la concentration de l'hydrogène donne des variations maximales de 0.05% pour certains groupes. On présente à la figure 7.2 les coefficients de sensibilité pour la capture radiative de l'U238, toujours à la densité de l'hydrogène dans le modérateur, ainsi que les différences relatives entre le calcul direct des coefficients et les méthodes DFCD et TADPC. Pour les différences relatives, les résultats obtenus avec la méthode directe sont utilisés comme référence.

De plus, précisons que pour toutes les figures où on présente des différences relatives entre des coefficients, celles-ci ne sont présentées que si les coefficients eux-mêmes sont supérieurs à 0.02 (2 %). Quand les coefficients sont trop petits, des petites différences absolues peuvent mener à de grandes différences relatives, ce qui nécessiterait l'utilisation d'une échelle trop grande pour les autres différences relatives et rendrait les figures moins lisibles. Si le coefficient de sensibilité est trop petit, on ne calcule pas la différence relative et on utilise une valeur de 0 sur les figures.

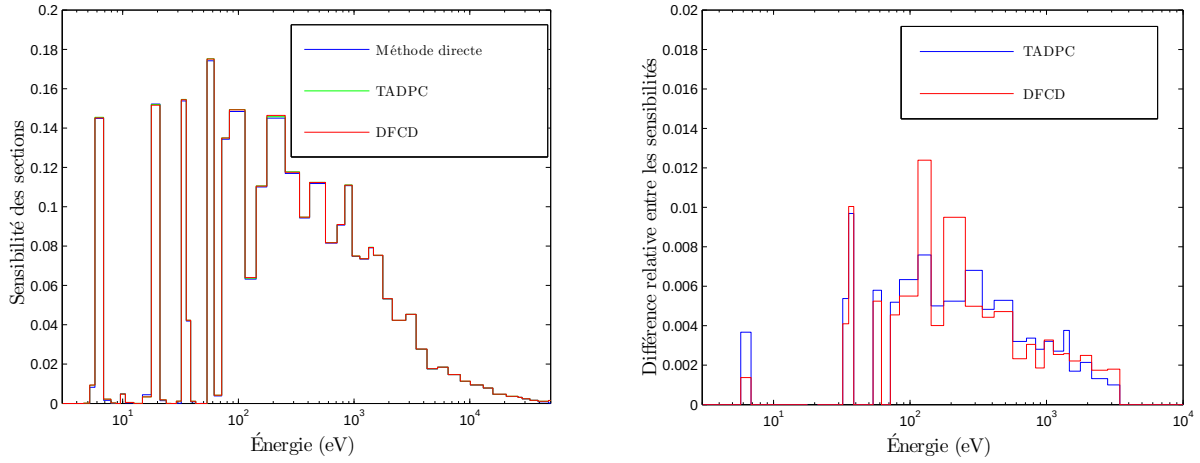

Figure 7.2 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative de l'U238 (à gauche) à la densité d'hydrogène dans le modérateur. Différences relatives entre le calcul direct et les méthodes DFCD et TADPC (à droite).

On peut voir encore une fois que l'accord entre toutes les méthodes présentées est excellent. Dans les pires cas, on a des écarts de l'ordre de 1% entre les différents résultats. Les différentes

méthodes de calculs de coefficients de sensibilité des sections efficaces semblent donc être consistantes les unes avec les autres.

La sensibilité de la capture radiative de l'U238, dans ce système, est considérablement plus élevée que celle des sections efficaces du Pu239. Les coefficients peuvent atteindre des valeurs de l'ordre de 0.15, ce qui implique des variations potentiellement importantes sur les sections efficace de l'U238 pour une variation significative de la densité de modérateur (d'hydrogène).

Peu importe la section efficace, les sensibilités demeurent positives. Du point de vue d'une méthode d'autoprotection par dilution équivalente, on peut dire qu'augmenter la densité d'hydrogène a pour effet d'augmenter la dilution (les noyaux lourds sont plus dilués). Ainsi, on s'approche du cas infiniment dilué (un seul noyau résonant mélangé avec des noyaux non-résonants) où il n'est pas nécessaire de faire de l'autoprotection et où les sections résonantes multigroupes ont des valeurs très élevées. Ainsi, quand on augmente la dilution, on augmente les sections efficaces résonantes.

Une autre façon d'expliquer ce qu'on observe consiste à considérer les effets sur le flux utilisé pour pondérer les sections efficaces continues en énergie. Augmenter la modération déplace légèrement le flux vers les groupes thermiques. En déplaçant un peu le flux vers les énergies thermiques, un peu plus de neutrons échapperont aux résonances. Pour mieux comprendre ce phénomène, considérons une seule résonance isolée et un neutron avec une énergie supérieure à celle de la résonance. La présence de plus de noyaux légers implique une probabilité plus importante que le neutron entre en contact avec un de ces noyaux. En une seule collision, le noyau peut passer à une énergie plus faible que celle de la résonance, ayant "échappé" à celle-ci. Bien sûr, en réalité il y a plusieurs résonances, mais une augmentation de la modération permettra tout de même à plus de neutrons de se rendre aux énergies thermiques. Au final, moins de neutrons captés dans les résonances implique une dépression plus faible dans le flux aux énergies résonantes et de plus grandes sections efficaces.

Regardons maintenant la sensibilité à la densité d'un isotope lourd, ici l'U238. Notons tout d'abord que la sensibilité à l'U238 de toutes les sections efficaces, à part celles de l'U238, sont complètement négligeables. Au maximum, les coefficients sont de l'ordre de 0.002, et pour la majorité des groupes bien en dessous de cette valeur. Comme les résonances des différents isotopes résonants ne sont généralement pas aux mêmes énergies, il est normal qu'une variation sur la densité d'une isotope lourd n'ait pratiquement pas d'effet sur les sections efficaces des autres isotopes lourds, puisque le structure fine sera principalement affectée aux énergies des résonances de l'isotope pour lequel on perturbe la densité, ce qui ne correspond pas aux résonances des autres isotopes. Certaines nuances doivent être apportées sur ce point et nous en discutons dans la sous-section 7.1.5.

Cette variation sur la densité de l'U238 a toutefois un effet important sur les sections efficaces de l'U238 lui-même. Les coefficients de sensibilité sont présentés à la figure 7.3, ainsi que les différences relatives entre les sensibilités obtenues par différentes méthodes.

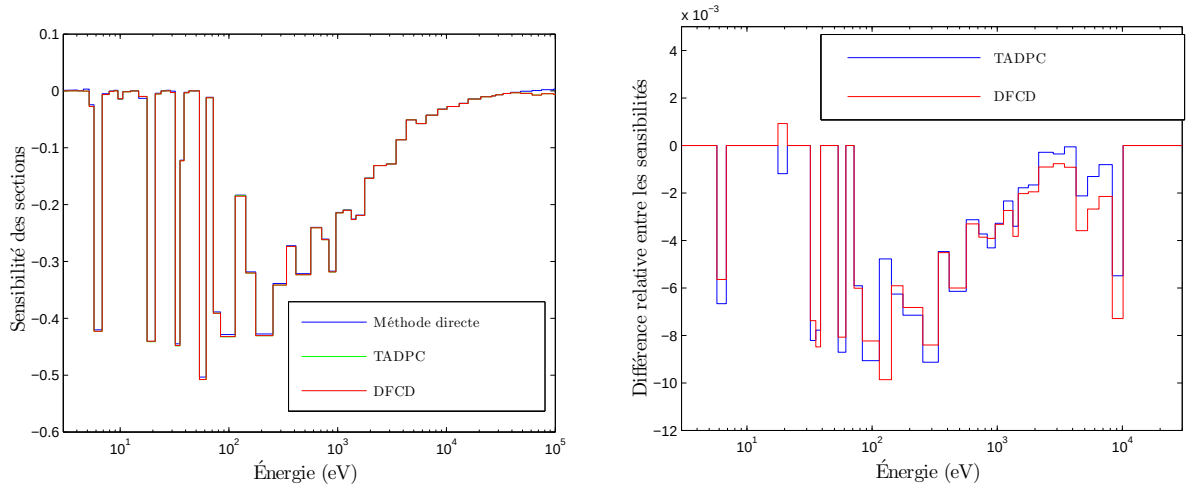

Figure 7.3 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative de l'U238 (à gauche) à la densité d'U238. Différences relatives entre le calcul direct et les méthodes DFCD et TADPC (à droite).

On remarque premièrement que les coefficients de sensibilité sont négatifs, et beaucoup plus grands (en amplitude) que pour les sensibilités à la densité d'hydrogène. Cela peut s'expliquer par le fait qu'en augmentant la concentration d'U238, la quantité de neutrons qui sont absorbés dans une des résonances de l'U238 augmente aussi, et la dépression de la structure fine aux énergies correspondant à ces résonances est donc plus prononcée. Ainsi, l'augmentation de la densité d'un isotope lourd cause une diminution des sections autoprotégées de cet isotope. Le fait que les résonances pour lesquelles la structure fine diminue soit parfaitement alignées avec celles de l'isotope qu'on autoprotège (ce sont les mêmes résonances) explique pourquoi dans ce cas-ci les sensibilités sont si élevées, de l'ordre de 0.5 (en amplitude).

Module SHISBG:

Regardons maintenant les mêmes coefficients de sensibilité, mais résultant cette fois d'un modèle d'autoprotection par sous-groupes, implémenté dans le module SHISBG:. Tout d'abord, les coefficients pour les sections efficaces du Pu239 sont présentés à la figure 7.4. On utilise encore l'acronyme TADPC pour désigner la méthode de calcul de sensibilité basée sur un traitement analytique de l'équation de ralentissement basé sur les dérivées des PC.

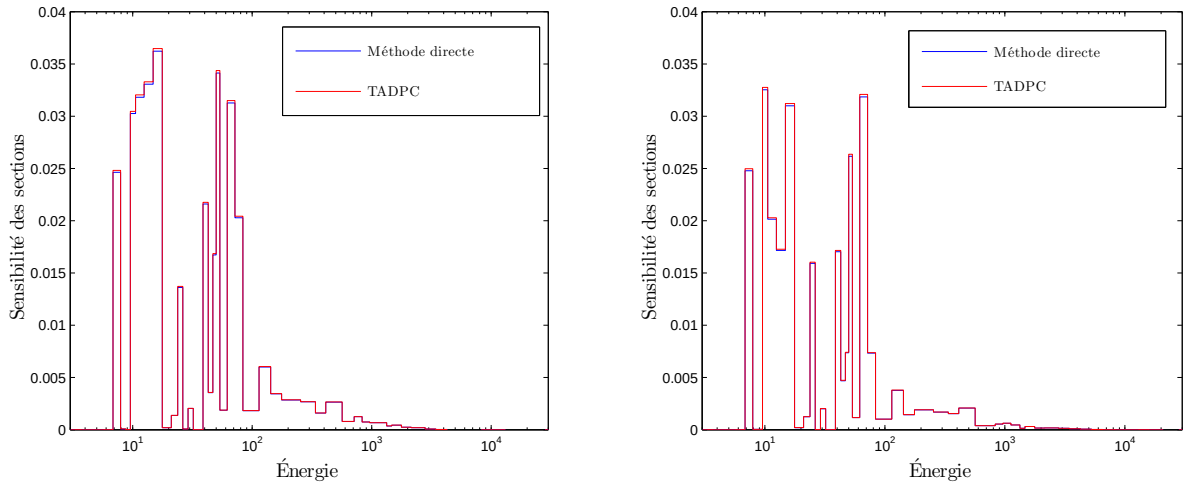

Figure 7.4 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative (à gauche) et la fission (à droite) du Pu239, à la densité d'hydrogène dans le modérateur. Comparaison entre la méthode de calcul direct et la méthode dérivée, pour un modèle d'autoprotection de sous-groupes.

L'accord entre le calcul direct et la méthode dérivée dans la section 5.4.2 est encore une fois très bon. On peut remarquer que les sensibilités résultant d'un modèle d'autoprotection par sous-groupes semblent un peu plus faibles que celles obtenues suite à un calcul par méthode d'équivalence. On peut remarquer la même chose pour les coefficients de sensibilité pour la capture radiative de l'U238, présentés à la figure 7.5 (avec la différence relative entre les deux méthodes de calcul de sensibilité).

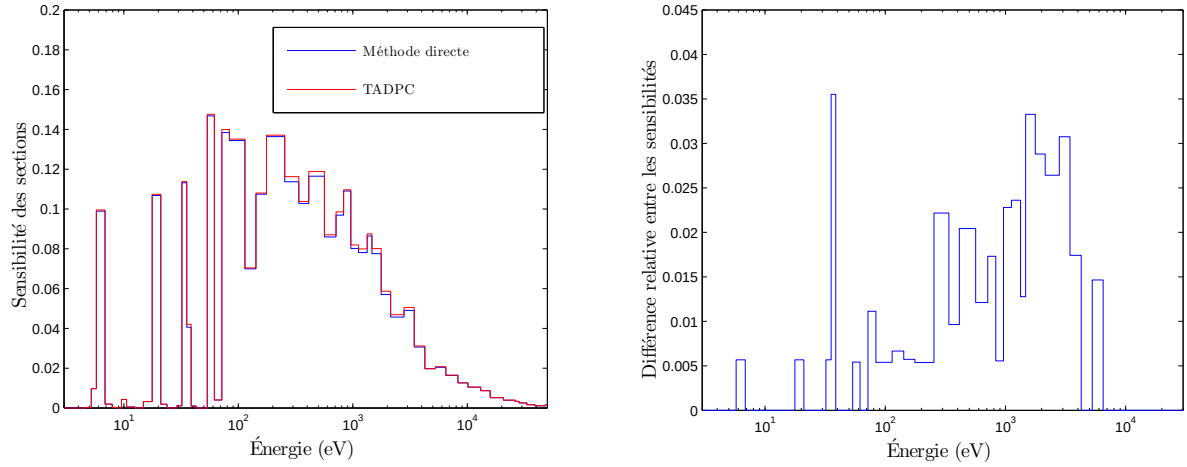

Figure 7.5 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative de l'U238 (à gauche) à la densité d'hydrogène dans le modérateur. Différences relatives entre le calcul direct et la méthode TADPC pour le module SHISBG: (à droite).

La différence entre les sensibilités obtenues par SHI: et par SHISBG: sera discutée plus en détails dans la section 7.1.2. Les coefficients pour la sensibilité des sections efficaces de l'U238 à sa propre densité sont présentés à la figure 7.6. On observe encore une fois des sensibilités assez importantes et négatives. On peut aussi voir que l'accord entre les sensibilités obtenues avec les deux méthodes est très bon, excepté pour un groupe où l'écart est de l'ordre de 8%.

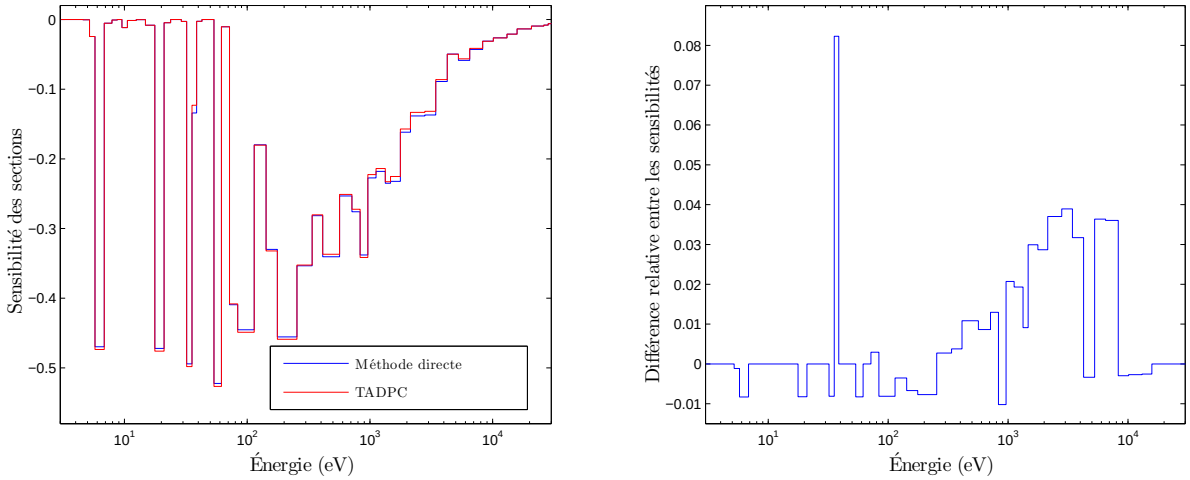

Figure 7.6 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative de l'U238 (à gauche) à la densité d'U238. Différences relatives entre le calcul direct et la méthode TADPC pour le module SHISBG: (à droite).

Cela n'implique pas nécessairement un calcul parfaitement fiable des coefficients de sensibilité. On compare donc, dans la prochaine section, les sensibilités obtenues pour chaque modèle entre elles ainsi qu'avec les sensibilités obtenues avec un calcul Monte Carlo, dans les groupes d'énergie où les calculs Monte Carlo donnent des résultats statistiquement fiables.

7.1.2 Comparaison avec les sensibilités obtenues avec Serpent

Précisons d'abord que lorsque les coefficients de sensibilité sont trop faibles, les calculs Monte Carlo ne permettent pas d'obtenir des résultats concluants à cause des fluctuations statistiques que l'on retrouve inévitablement dans ce type de calcul. Ainsi, les sensibilités ne seront illustrées que lorsque l'évaluation Monte Carlo est jugée fiable (telle que mentionné dans la section 6.2.1).

Comme il y a assez peu de groupes d'énergie où tel est le cas, on présente ces résultats dans un tableau plutôt que sur une figure. On a donc, dans le tableau 7.2, les coefficients obtenus avec Serpent pour les deux variations de densité, ainsi qu'avec SHI: et SHISBG:, pour la sensibilité de la capture de l'U238 à la densité d'hydrogène.

Tableau 7.2 Comparaison entre les coefficients de sensibilité trouvés pour chacun des modèles d'autoprotection et avec Serpent.

Groupe	Limites d'énergie	SHI:	SHISBG:	Serpent (Δdens = 4%)	Serpent (Δdens = 8%)
47	5530.8 à 7465.9 eV	0.0184	0.0208	–	0.0226
53	1507.3 à 2034.7 eV	0.0753	0.0801	–	0.0796
58	748.5 à 914.2 eV	0.0910	0.0986	–	0.0964
60	454.0 à 677.3 eV	0.1124	0.1183	–	0.1154
62	304.2 à 371.7 eV	0.1178	0.1162	–	0.1088
63	204.0 à 304.2 eV	0.1458	0.1371	–	0.1449
66	91.7 à 136.7 eV	0.1494	0.1351	–	0.1363
69	55.7 à 67.9 eV	0.1752	0.1475	0.1478	0.1453
80	19.4 à 22.6 eV	0.1519	0.1074	0.1205	0.1211
88	6.2 à 7.5 eV	0.1455	0.0995	–	0.1379

On peut voir que quand les coefficients extraits de calculs Serpent sont statistiquement fiables, l'accord avec les coefficients trouvés par des calculs déterministes est assez bon. En fait, les sensibilités obtenues pour les deux modules d'autoprotection ne sont pas toujours en très bon accord et les sensibilités trouvées avec Serpent sont pratiquement toujours entre les deux résultats déterministes, souvent assez près d'un des deux. De façon générale, la différence entre les coefficients trouvés avec Serpent et ceux avec la méthode déterministe la plus en

accord avec Serpent (pas toujours la même) ne dépasse pas 10% et est parfois bien en dessous de cette valeur. Toutefois, il arrive qu'on observe des écarts de l'ordre de 25% entre Serpent et une des méthodes déterministes.

Bien sûr, il faut prendre en considération le fait que les coefficients de sensibilité extraits de calculs Serpent ne sont pas nécessairement exacts, particulièrement pour les calculs où la densité est perturbée de 8%. Comme expliqué dans la section 6.2.1, il peut y avoir des différences significatives entre les coefficients trouvés avec une variation de 8% sur la densité et ceux trouvés avec une variation de 4%. Par contre, les différences importantes sont en général observées pour les sensibilités plus faibles. Comme on peut voir dans le tableau 7.2, pour les deux groupes où les résultats obtenus avec une variation de 4% sont fiables, les coefficients trouvés avec une variation de 4% sont en très bon accord avec ceux obtenus avec une variation de 8%, ce qui est une bonne indication que pour des sensibilités assez importantes, les résultats obtenus dans Serpent, avec une variation de 8%, sont tout de même acceptables.

Pour avoir une idée de la validité des coefficients trouvés avec une variation de la densité de 8%, on peut comparer les résultats obtenus avec la variation de 8% avec ceux obtenus pour une variation de 4% mais avec plus de neutrons. Cette comparaison est présentée dans le tableau 7.3. On peut constater que l'accord est assez bon, ce qui est une indication que même avec une variation de 8% sur la densité pour évaluer les dérivées, les coefficients extraits de calculs Serpent, pour les groupes qui sont statistiquement fiables, sont cohérents avec ceux obtenus avec des perturbations de la densité de 4 %.

Tableau 7.3 Comparaison entre les coefficients de sensibilité trouvés pour deux simulations Serpent avec des nombres différents de neutrons.

Groupe	Serpent 4e06 neutrons (Δdens = 4%)	Serpent 8e05 neutrons (Δdens = 8%)
47	0.0226	0.0226
53	0.0792	0.0796
58	0.0922	0.0964
60	0.1186	0.1154
62	0.1101	0.1088
63	0.1490	0.1449
66	0.1385	0.1363
69	0.1498	0.1453
80	0.1211	0.1211
88	0.1400	0.1379

On peut comparer les coefficients de sensibilité pour les deux méthodes déterministes d'autoprotection entre elles. Cette comparaison est présentée sous forme de différence relative (avec les résultats de SHISBG: utilisé comme référence) à la figure 7.7.

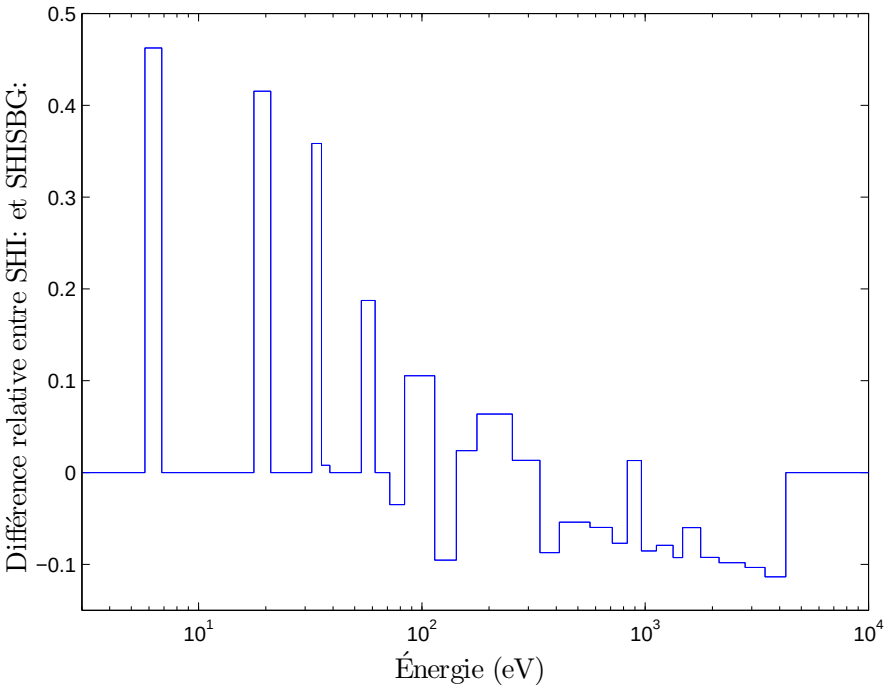

Figure 7.7 Différence relative entre les sensibilités calculées avec SHI: et SHISBG:, pour la capture radiative de l'U238. Comme pour toutes les figures de différences relatives, seulement les différences pour des coefficients de sensibilité d'au moins 0.02 sont présentées. Les sensibilités calculées par SHISBG: sont utilisées comme référence dans le calcul de la différence relative.

On peut voir que pour des énergies relativement faibles, les sensibilités résultant d'un modèle de sous-groupes sont considérablement différentes de celles résultant d'une méthode par équivalence de dilution. Pour des énergies supérieures à environ 70 eV, l'accord entre les deux modèles (pour la sensibilité des sections autoprotégées) est relativement bon, avec des écarts de 10% (en amplitude) et moins. De plus, l'accord avec les calculs Serpent, pour ce qui est des coefficients de sensibilité, est en général assez bon pour au moins une des deux méthodes d'autoprotection. En fait, à plus haute énergie, les deux méthodes déterministes sont assez bon accord entre elles et avec Serpent. Pour des énergies plus faibles, où on retrouve des résonances très importantes, ce n'est pas le cas.

7.1.3 Impact du facteur SPH sur les sensibilités

Comme expliqué dans les sections 4.2.3 et 5.4.2, le facteur SPH peut avoir une importance considérable sur les sections autoprotégées ainsi que sur les sensibilités. Nous présentons donc ici les différences entre les sensibilités obtenues avec et sans facteurs SPH, encore une fois pour la capture radiative de l'U238, à la figure 7.8. Il est ici toujours question de la sensibilité à la densité d'hydrogène dans le modérateur. Rappelons aussi que le facteur SPH est exclusivement utilisé pour la méthode d'autoprotection par sous-groupes.

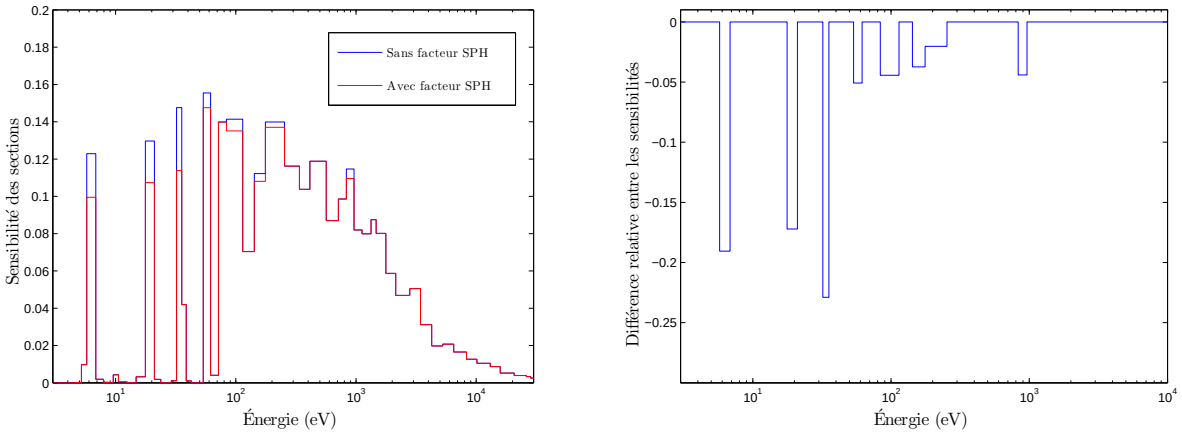

Figure 7.8 Comparaison entre les coefficients de sensitivité de l'U238 à la densité d'hydrogène, avec et sans facteur SPH (à gauche). Différence relative entre les sensibilités avec et sans facteur SPH (à droite).

On constate qu'inclure les facteurs SPH diminue significativement les sensibilités dans certains groupes d'énergie. Cela indique que bien qu'une augmentation de la densité d'hydrogène donne des sections efficaces plus grandes, le facteur SPH est, dans ce cas-ci, diminué par l'augmentation d'hydrogène. Ainsi, au final le facteur SPH diminue la sensibilité des sections efficaces à la densité de l'hydrogène. Regardons maintenant l'impact du facteur SPH sur la sensibilité à la densité de l'U238, présenté à la figure 7.9.

Ici, le facteur SPH augmente les sensibilités (en valeur absolue), ce qui implique qu'augmenter la densité de l'U238 diminue les facteur SPH (compte tenu du fait que les coefficients de sensibilité sont négatifs dans ce cas-ci). Pour comprendre ce qui se passe, rappelons que le facteur SPH est calculé pour s'assurer que les taux de réaction d'un calcul multigroupe et ceux d'un calcul utilisant les tables de probabilités soient consistants (section 4.2.3). La différence entre les deux calculs est que pour le cas multigroupe on utilise une seule valeur (autoprotégée) pour la section efficace résonante alors que pour le calcul avec les tables de

probabilité on représente la section efficace résonante avec les points et les poids qu'on trouve dans les tables de probabilités.

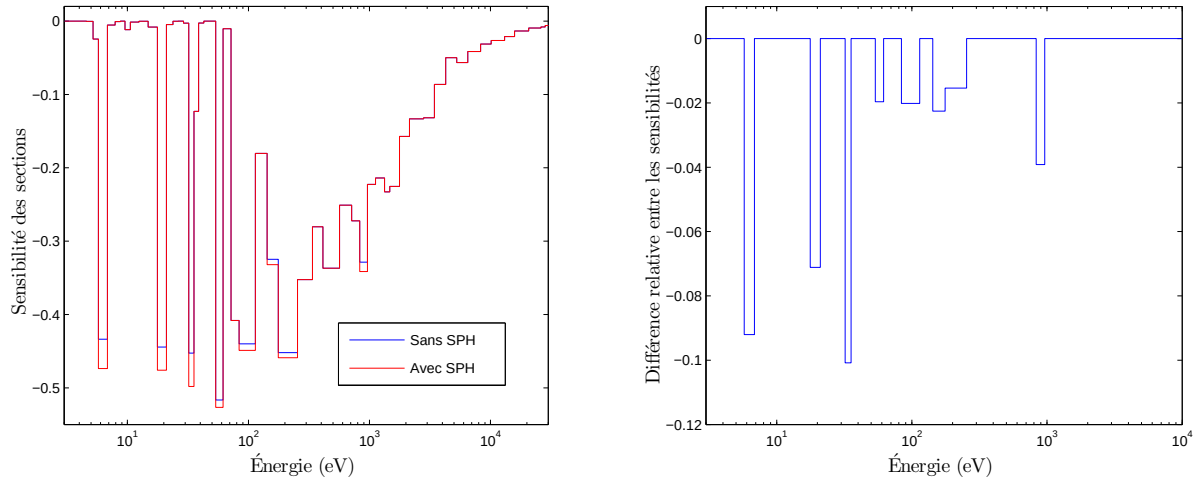

Figure 7.9 Comparaison entre les coefficients de sensibilité de l'U238 à la densité de l'U238, avec et sans facteur SPH (à gauche). Différence relative entre les sensibilités avec et sans facteur SPH (à droite).

Par contre, les sections efficaces non-résonantes sont les mêmes peu importe le calcul. La valeur absolue de la différence entre 1 et le facteur SPH indique donc dans quelle mesure le calcul multigroupe donne un flux différent du flux moyen obtenu par un calcul avec les tables de probabilités. Si on augmente la densité de l'isotope résonant, alors l'importance relative de cet isotope dans les calculs multigroupes et avec tables de probabilités augmente. La différence entre les deux calculs sera donc plus prononcée avec la densité plus élevée. Cela a donc pour effet d'augmenter l'importance du facteur SPH, c'est-à-dire d'éloigner sa valeur de 1. Les facteurs SPH sont ici inférieurs à 1, ce qui explique qu'une augmentation de la densité de l'U238 diminue le facteur SPH et donne des coefficients de sensibilité plus grand en valeur absolue (les coefficients sont négatifs).

Si on augmente la densité d'un isotope non-résonant, sans augmenter la densité de l'isotope résonant, la situation est un peu plus complexe. L'importance relative de cet isotope augmente pour les deux calculs, ce qui pourrait avoir comme effet de diminuer la différence entre les deux calculs (parce que les mêmes sections non-résonantes sont utilisées dans les deux cas) et de diminuer l'importance du facteur SPH. Ce n'est toutefois pas ce qu'on observe. En fait, une augmentation de la densité d'un isotope léger a aussi un effet sur le calcul de la section résonante multigroupe, ce qui a un effet sur le calcul du flux multigroupe. Cela augmente ici la

différence entre le flux multigroupe et celui calculé avec les tables de probabilités, augmentant ainsi l'importance du facteur SPH (en diminuant sa valeur dans ce cas-ci puisque le facteur SPH est inférieur à 1).

7.1.4 Impact de l'autoprotection spatiale sur les sensibilités

Nous examinons maintenant la dépendance des coefficients de sensibilité des sections efficaces en fonction de la position radiale du combustible à l'intérieur de la tige de MOX. La tige est divisée en 6 régions concentriques, la région centrale étant alors circulaire avec un rayon de 0.069 cm et les autres régions ayant une épaisseur de 0.069 cm. Pour la dépendance spatiale des sensibilités, on présente les résultats pour la région la plus externe, la région centrale ainsi que pour une moyenne sur toute la tige.

Les coefficients de sensibilité de l'U238 à la densité d'hydrogène sont présentés à la figure 7.10.

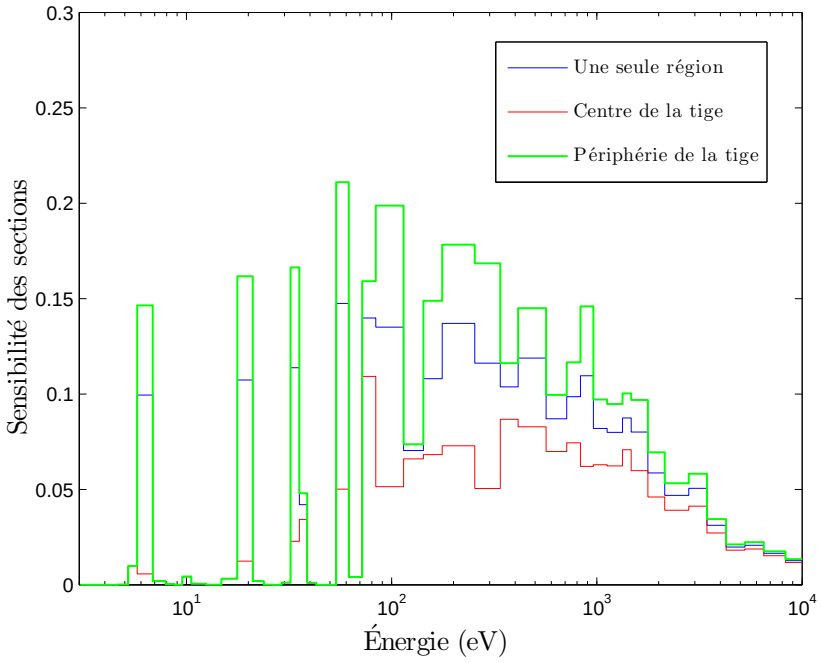

Figure 7.10 Sensibilité des sections efficaces de capture radiative de l'U238 à la densité d'hydrogène, pour différentes positions dans la tige ainsi que pour une moyenne sur la tige.

On peut tout de suite voir que la région externe de la tige est systématiquement plus sensible à la densité de l'hydrogène que lorsqu'on considère la moyenne sur une seule région, alors que c'est le contraire pour la région au centre de la tige. Nous avons expliqué dans la sous-section 7.1.1 que l'augmentation de la densité d'hydrogène pouvait au final permettre à un

peu plus de neutrons d'échapper aux résonances, diminuant la dépression dans le flux utilisé pour calculer les sections autoprotégées. En réalité, comme il y a un nombre important de résonances, certains neutrons peuvent se retrouver à des énergies non-résonantes, mais à proximité d'une résonance.

Comme une collision avec un noyau lourd ne fait perdre qu'une petite quantité d'énergie à un neutron, si ce neutron a une énergie proche de celle d'une résonance il risquera fortement de se faire absorber par cette résonance s'il se déplace dans le combustible (qui contient beaucoup de noyaux lourds), ce qui se produira probablement en périphérie de la tige de combustible. Cela fait en sorte qu'une région au centre d'une tige de combustible aura des dépressions dans son flux causées par la capture dans toutes les autres régions plus près du modérateur. Ainsi, l'augmentation des sections efficaces causée par une augmentation de la concentration d'hydrogène dans le modérateur est moins prononcée au centre d'une tige de combustible qu'en périphérie.

La situation est différente si on considère la sensibilité de l'U238 à sa propre densité, ce qui est présenté à la figure 7.11.

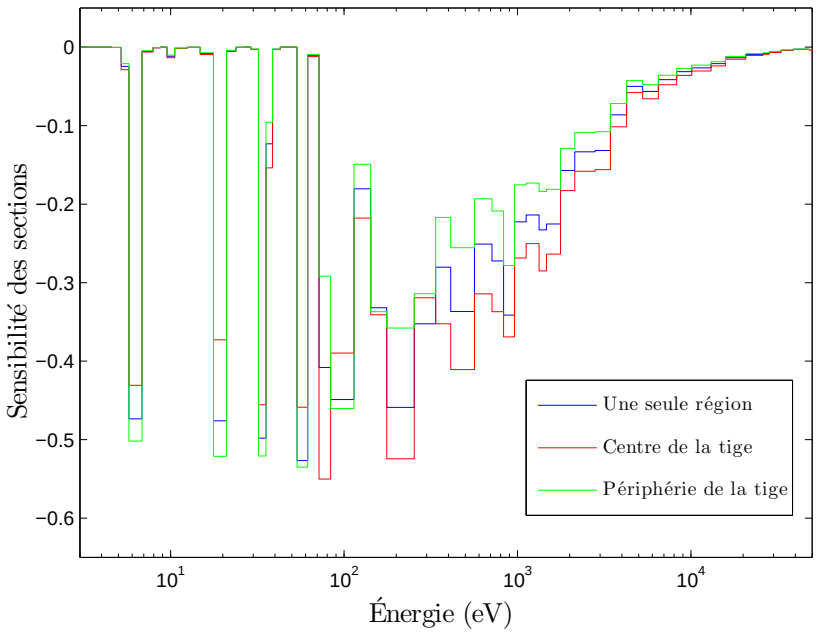

Figure 7.11 Sensibilité des sections efficaces de capture radiative de l'U238 à la densité d'U238, pour différentes positions dans la tige ainsi que pour une moyenne sur la tige.

Dans ce cas, la région centrale alterne entre être moins sensible et plus sensible que la région en périphérie. Comme expliqué dans les sections précédentes, augmenter la densité d'un

isotope lourd augmente la dépression dans le flux neutronique près des résonances de cet isotope, ce qui diminue la valeur des sections efficaces de l'isotope lourd en question. On s'attendrait à ce que cet effet soit amplifié lorsqu'on considère la région au centre de la tige, puisque l'augmentation de la densité devrait faire en sorte qu'une bonne partie des neutrons soit absorbés en surface de la tige. C'est ce qu'on observe pour les énergies intermédiaires et élevées.

Cependant, pour les énergies plus basses, on observe le contraire, c'est-à-dire que la sensibilité (négative) est plus importante en périphérie de la tige. Pour comprendre ce qui se passe, regardons le comportement des sections efficaces, pour les régions intérieure et extérieure de la tige de combustible, présenté à la figure 7.12. Plus particulièrement, regardons le comportement des sections efficaces pour les groupes où on observe les coefficients de sensibilité plus importants en périphérie qu'au centre de la tige. On peut voir que dans ces groupes, les sections efficaces en périphérie sont approximativement de 3 à 5 fois plus grandes que celles au centre de la tige, alors que pour les groupes à des énergies un peu plus élevées l'écart relatif est beaucoup moins important.

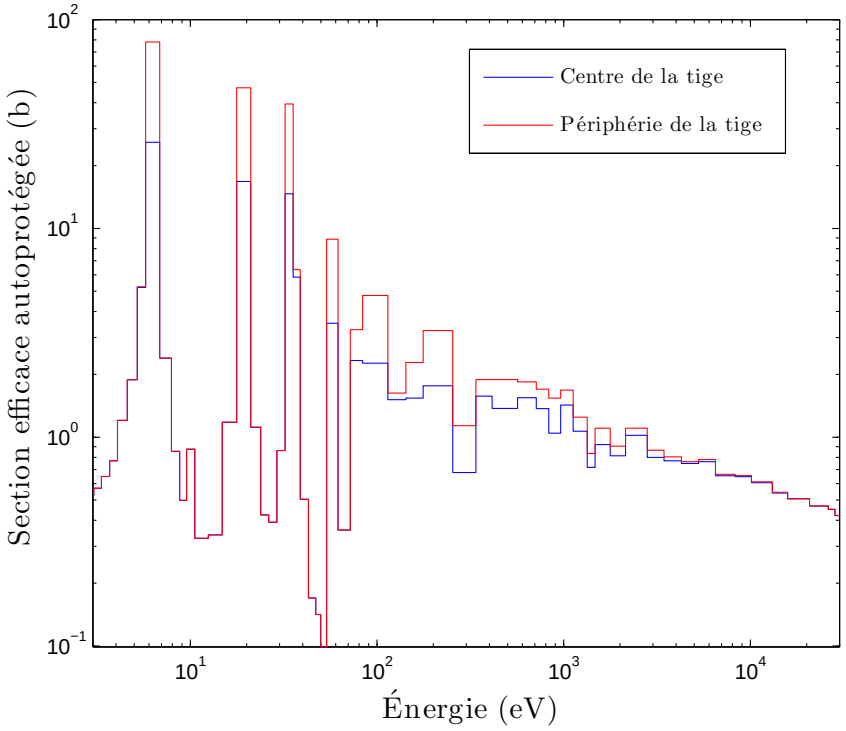

Figure 7.12 Sections efficaces de capture radiative de l'U238, pour différentes positions dans la tige.

Cela indique qu'à cause de résonances très importantes à basse énergie, très peu de neutrons

vont se rendre au centre de la tige à ces énergies. Autrement dit, la dépression dans le flux (la structure fine), au centre du combustible, est rendue très prononcée et les sections efficaces moyennées avec ce flux sont beaucoup plus faibles que celles près de l'extérieur de la tige, où la dépression dans le flux n'est pas aussi prononcée. Une explication possible pour le comportement observé des sensibilités est donc que les dépressions dans le flux, au centre de la tige et pour les groupes avec des résonances très importantes, sont tellement importantes qu'une variation sur la densité de l'isotope lourd a un effet atténué par rapport à l'effet en périphérie de la tige. Autrement dit, il ne reste que très peu de neutrons aux énergies résonantes au centre de la tige alors une variation sur la densité a moins d'effet sur cette population déjà très diminuée qu'en périphérie de la tige où il reste significativement plus de neutrons.

7.1.5 Sensibilités explicite et implicite du k_{eff}

Toutes ces sensibilités de sections efficaces aux densités, quand combinées avec les sensibilités du k_{eff} aux sections efficaces, nous donnent différentes composantes de la sensibilité implicite du k_{eff} aux densités. Les coefficients de sensibilité (explicite, implicite et total) obtenus avec des calculs directs sont présentés dans le tableau 7.4.

Tableau 7.4 Différents coefficients de sensibilité pour une tige de MOX, calculs directs (valeurs de référence).

	Sensibilité à la densité d'H	Sensibilité à la densité d'U238
SHI:		
Total	0.2174	-0.1517
Explicite	0.2362	-0.2059
Implicite	-0.0189	0.0541
SHISBG:		
Total	0.2188	-0.1487
Explicite	0.2345	-0.2065
Implicite	-0.0157	0.0578

Les coefficients implicites, obtenus par les méthodes TADPC sont présentés dans le tableau 7.5.

Tout d'abord on peut remarquer que les deux modèles d'autoprotection (et les calculs de sensibilité correspondant) donnent des résultats du même ordre de grandeur, mais avec un écart significatif. Pour la sensibilité du k_{eff} à la densité de l'hydrogène, la composante im-

Tableau 7.5 Différents coefficients de sensibilité pour une tige de MOX, calculs basés sur un traitement analytique de l'équation de ralentissement basé sur les dérivées des PC.

	Sensibilité à la densité d'H	Sensibilité à la densité d'U238
SHI:		
Implicite	-0.0188	0.0540
SHISBG:		
Implicite	-0.0157	0.0578

plicite causée par l'autoprotection par dilution équivalente est d'environ -0.0189 alors qu'elle est d'environ -0.0157 pour un modèle de sous-groupes. L'autoprotection par méthode de sous-groupes donne donc une sensibilité environ 17% moins importante qu'une méthode par équivalence de dilution. Pour la sensibilité à la densité de l'U238, l'écart absolu entre les deux modèles d'autoprotection est similaire, mais comme les sensibilités sont plus grandes, l'écart relatif est plus faible. Dans ce cas la sensibilité implicite obtenue avec un modèle de sous-groupes est environ 7% plus importante que celle trouvée avec un modèle de dilution équivalente.

On peut aussi constater que (sans surprise, considérant les résultats de sensibilités de sections efficaces présentés dans les sections précédentes) les résultats du tableau 7.5 sont en accord presque parfait avec ceux du tableau 7.4. En fait, même si dans quelques cas l'écart entre les calculs directs et les calculs basés sur la dérivée des PC peut atteindre des valeurs de l'ordre de 3%, au final l'écart correspondant pour les coefficients implicites du k_{eff} est bien inférieur à 1%.

Ceci est dû au fait que les sensibilités de sections efficaces à une densité isotopique doivent être combinées avec les sensibilités du k_{eff} aux sections efficaces pour obtenir la sensibilité implicite du k_{eff} à la densité isotopique. Ainsi, même si pour certains groupes d'énergie on observe des écarts de l'ordre de 3% pour les sensibilités de sections efficaces, le k_{eff} n'est probablement pas très "sensible" aux sections correspondant à ces groupes, et beaucoup plus sensible aux sections efficaces où l'écart observé est beaucoup plus petit. En fait, les écarts relatifs (entre un calcul direct et un calcul par les méthodes développées dans cette thèse) les plus faibles sont en général observés pour les groupes où la sensibilité (et la section efficace elle-même) est très élevée, et le k_{eff} est en général beaucoup plus sensible aux sections efficaces dans ces groupes d'énergie.

De plus, l'importance relative des coefficients implicites dans la sensibilité totale du k_{eff} aux densités isotopiques est significativement différent pour les deux noyaux étudiés ici. Si on con-

sidère la sensibilité à la densité de l'hydrogène, l'effet implicite diminue la sensibilité explicite d'environ 8% (un peu moins pour les calculs d'autoprotection avec SHISBG:). C'est donc dire que l'effet explicite d'une augmentation de la densité de modérateur, une augmentation du k_{eff} à cause de l'augmentation du ralentissement des neutrons, est légèrement atténué par une augmentation des sections efficaces des isotopes lourds, ce qui donne plus de capture neutronique.

Dans le cas de la sensibilité à la densité de l'U238, l'effet est plus important et en quelque sorte l'inverse de ce qu'on observe pour la densité d'hydrogène. L'effet implicite diminue l'importance de la sensibilité d'environ 26% (un peu plus pour les calculs avec SHISBG:). Quand on augmente la densité de l'U238, cela augmente la capture neutronique, ce qui diminue le k_{eff}. Cet effet est partiellement compensé par le fait que les sections de capture autoprotégées de l'U238 diminuent quand on augmente la densité de cet isotope. En négligeant l'effet implicite, on surestimerait donc significativement l'impact d'une augmentation de la densité de l'U238 sur le k_{eff}.

Il est particulièrement intéressant de s'attarder au fait que les coefficients implicite et explicite sont de signe différent. En fait, l'effet explicite concerne le "vrai" flux neutronique, qu'on obtient en solutionnant l'équation de transport multigroupe, et une diminution du k_{eff} implique que plus de neutrons sont absorbés dans les résonances quand on augmente la densité. À l'opposé, une augmentation du k_{eff} implique que plus de neutrons échappent aux résonances quand on augmente la densité. Rappelons ici que la forme de la structure fine utilisée pour calculer les sections autoprotégées devrait être relativement similaire à la forme du vrai flux à proximité des résonances. Bien sûr, la forme du vrai flux neutronique dans un groupe donné n'est pas calculée, puisqu'on fait un traitement multigroupe de l'équation de transport, mais on peut quand même remarquer qu'une augmentation du k_{eff} indique que plus de neutrons "traversent" les groupes avec des résonances sans être absorbés. Le signe opposé des coefficients implicites du k_{eff} indique donc qu'une augmentation du nombre de neutrons qui échappent aux résonances (coefficient explicite positif) mène à une augmentation des sections efficaces autoprotégées. Cette interprétation est cohérente avec les calculs d'autoprotection, puisque qu'une diminution de la quantité de neutrons absorbés dans les résonances implique des dépressions dans le flux moins prononcées, ce qui donne des sections efficaces multigroupes plus importantes.

Finalement, examinons les contributions de différents isotopes et différentes réactions à la sensibilité implicite totale. Pour la sensibilité à la densité d'hydrogène, bien que la section efficace de capture de l'U238 soit la principale contribution, d'autres isotopes et réactions contribuent un peu à la sensitivité implicite du k_{eff}. Les contributions les plus importantes

sont présentées dans le tableau 7.6.

Tableau 7.6 Contributions des différentes réactions à la sensibilité implicite du k_{eff} à la densité d'hydrogène, pour les deux modèles d'autoprotection.

	SHI:	SHISBG:
Pu239, $\sigma_{n,\gamma}$	-0.00065	-0.00045
Pu239, σ_f	0.00104	0.00067
Pu240 $\sigma_{n,\gamma}$	-0.00032	-0.00012
Pu241, $\sigma_{n,\gamma}$	-0.00003	-0.00002
Pu241, σ_f	0.00005	0.00004
Pu242 $\sigma_{n,\gamma}$	-0.00002	-0.00001
U238, $\sigma_{n,\gamma}$	-0.01869	-0.01589
U238, $\sigma_{s,0}$	0.00010	0.00006
Zr91, $\sigma_{n,\gamma}$	-0.00033	-0.00009

On peut voir que les sections efficaces de capture contribuent de façon négative à la sensibilité implicite alors que les sections efficaces de fission contribuent de façon positive. Ceci n'est pas une surprise, puisqu'on a déjà expliqué qu'augmenter la densité de modérateur avait pour effet d'augmenter les valeurs de sections efficaces. L'effet des sections efficaces de capture et de fission sur le k_{eff} est facile à comprendre et explique les signes observés pour les sensibilités. Pour la section efficace de diffusion de l'U238, on voit que la contribution est positive (et très faible). Une augmentation de la section efficace de diffusion de l'U238 augmente le ralentissement des neutrons, comme pour une augmentation de la densité de l'hydrogène, ce qui augmente le k_{eff}. Bien sûr, l'U238 est beaucoup moins efficace pour ralentir les neutrons que l'hydrogène, et l'effet implicite correspondant est très faible.

Pour la sensibilité à la densité d'U238, les contributions des différentes réactions sont présentées dans le tableau 7.7.

Tableau 7.7 Contributions des différentes réactions à la sensibilité implicite du k_{eff} à la densité d'U238, pour les deux modèles d'autoprotection.

	SHI:	SHISBG:
Pu239, $\sigma_{n,\gamma}$	~ 0	-0.00024
Pu239, σ_f	~ 0	0.00040
U238, $\sigma_{n,\gamma}$	0.05432	0.05799
U238, $\sigma_{s,0}$	-0.00028	-0.00034
Zr91, $\sigma_{n,\gamma}$	-0.00005	-0.00006

On peut ici remarquer un fait intéressant. Bien que la principale contribution (et de loin)

à la sensibilité implicite du k_{eff} vienne de la capture de l'U238, il y a tout de même une petite contribution qui vient du Pu239, et le modèle de sensibilité basé sur le module SHI: est incapable de mesurer cette sensibilité. La raison est la suivante. Le Pu239 est dans le même mélange que l'isotope pour lequel on perturbe la densité, ici l'U238, or pendant les calculs d'autoprotection les sections macroscopiques des isotopes résonants ne sont pas directement utilisées quand on procède à l'autoprotection d'un mélange résonant donné. Ainsi, lorsqu'on autoprotège, par exemple, le Pu239 dans le combustible, la densité de l'U238 n'apparaît explicitement nulle part dans le calcul.

Par contre, quand on autoprotège le Zr91, dans un mélange résonant différent, alors la vraie section macroscopique de l'U238 est utilisée, et le calcul de sensibilité est alors en mesure d'obtenir des coefficient de sensibilité. Remarquons qu'en réalité, la méthode de calcul de sensibilité basée sur SHI: calcule de très petits coefficient de sensibilité (de l'ordre de 10^{-7} et parfois beaucoup moins) pour les isotopes comme le Pu239. Ces très petites sensibilités viennent du fait que la densité de l'U238 a un impact sur les sections efficaces du Zr91 qui, à leur tour, ont un impact (très faible) sur l'autoprotection du Pu239.

7.2 Réacteur à eau sous pression (REP)

Le deuxième système que nous allons considérer est un assemblage d'un réacteur à eau sous pression (REP) typique. Il s'agit d'un assemblage 17x17 de crayons d'uranium enrichi à 3.3 %, avec une gaine de Zr91 et de l'eau légère comme modérateur. Certains sites de crayons sont remplacés par un trou d'eau. La géométrie du système est présentée à la figure 7.13. Notons que les analyses porteront sur seulement un huitième de l'assemblage pour accélérer le calcul en prenant en considérations les symétries du système. La composition du combustible est indiquée dans le tableau 7.8.

Tableau 7.8 Composition du combustible du REP.

Isotope	Densité (10^{24}atomes $\cdot\, cm^{-3}$)
O16	4.49355E-2
U235	7.39237E-4
U238	2.17285E-2

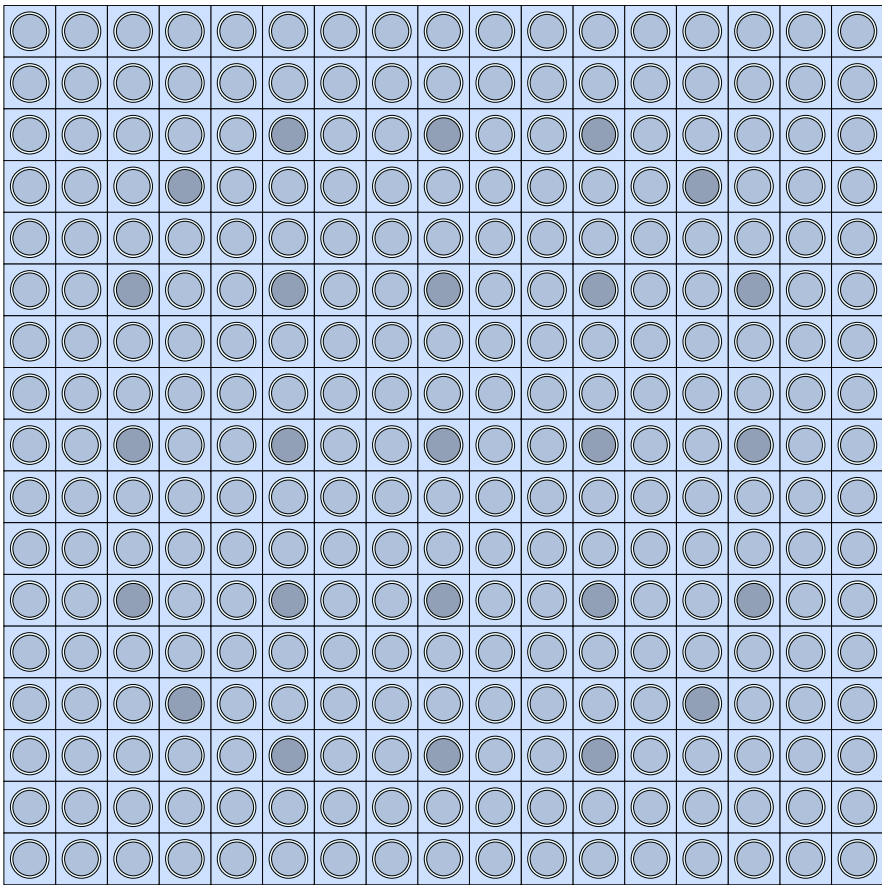

Figure 7.13 Un assemblage REP. Les crayons en gris clair correspondent au combustible et ceux en gris foncé aux trous d'eau.

7.2.1 Comparaison entre les calculs directs de sensibilité et la méthode basée sur les dérivées des PC

Nous commençons de nouveau par comparer les sensibilités obtenues par un calcul direct avec celles trouvées en utilisant les méthodes basées sur l'utilisation des dérivées des PC. Précisons ici que bien que l'eau dans les trous d'eau qui remplacent certains crayons de combustible soit la même que celle du modérateur, nous ne considérons ici que la sensibilité à l'hydrogène dans le modérateur. Ainsi, il sera possible d'observer certains aspects intéressants de la sensibilité des sections efficaces pour différentes positions dans l'assemblage (section 7.2.3).

Module SHI:

Les coefficients de sensibilité à la densité d'hydrogène dans le modérateur/caloporteur pour la capture et la fission de l'U235 sont présentés à la figure 7.14.

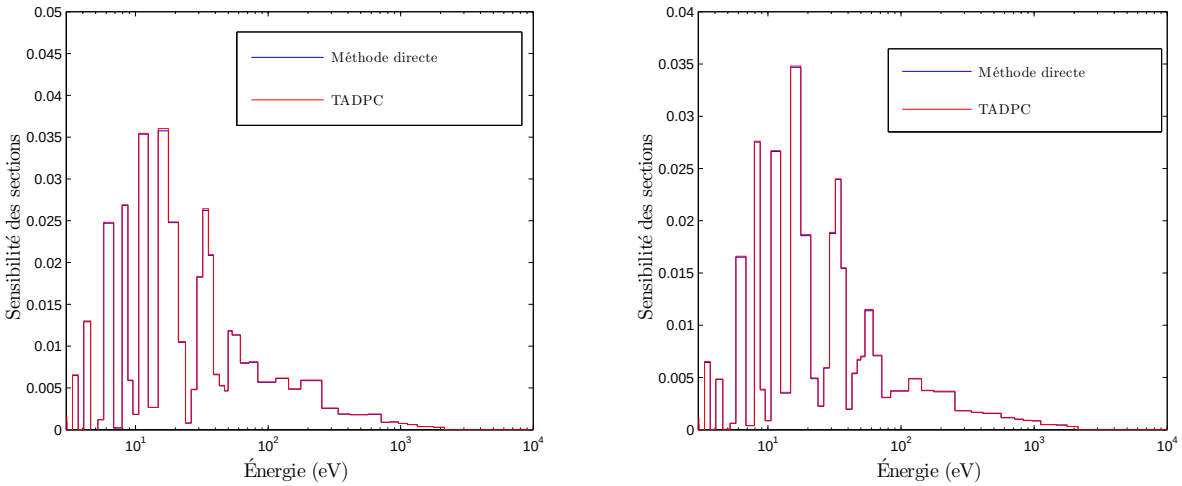

Figure 7.14 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative (à gauche) et la fission (à droite) de l'U235, à la densité d'hydrogène dans le modérateur. Comparaison entre la méthode de calcul direct et la méthode TADPC.

Dans le cas de la cellule utilisée ici, la fission provient de l'U235, alors qu'elle venait principalement du Pu239 dans le système précédent (la tige de MOX était composée d'uranium appauvri, avec une quantité très faible d'U235). On illustre, à la figure 7.15, les coefficients de sensibilité des sections efficaces de capture de l'U238, toujours à la densité d'hydrogène.

Les coefficients de sensibilité sont du même ordre de grandeur que pour la simple cellule REP (si on compare les coefficients de l'U235 avec ceux du Pu239 pour la cellule REP) et l'accord entre les calculs directs et les résultats de la méthode développée pour cette thèse est excellent. Regardons maintenant la sensibilité de l'U238 à sa propre densité, présentée à la figure 7.16.

La tendance observée ici (sensibilité importante et négative pour la capture de l'U238) est similaire à ce qu'on voit pour l'U238 dans la cellule REP avec du MOX de la section précédente. Comme dans les deux cas l'U238 est l'isotope qui compose principalement le combustible et on utilise de l'eau légère avec une gaine de Zr, il n'est pas surprenant d'observer des résultats similaires.

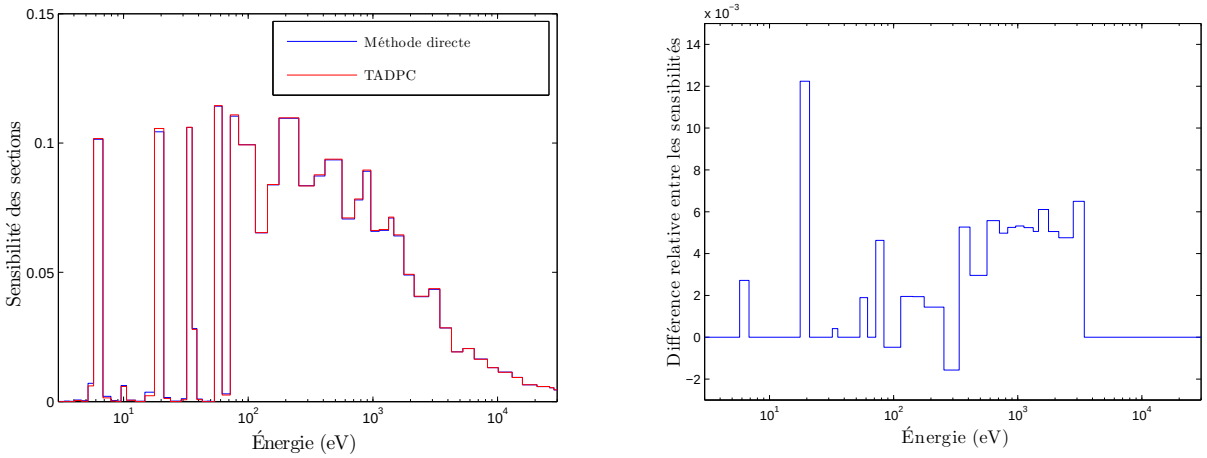

Figure 7.15 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative de l'U238 (à gauche) à la densité d'hydrogène dans le modérateur. Différences relatives entre le calcul direct et la méthode TADPC (à droite).

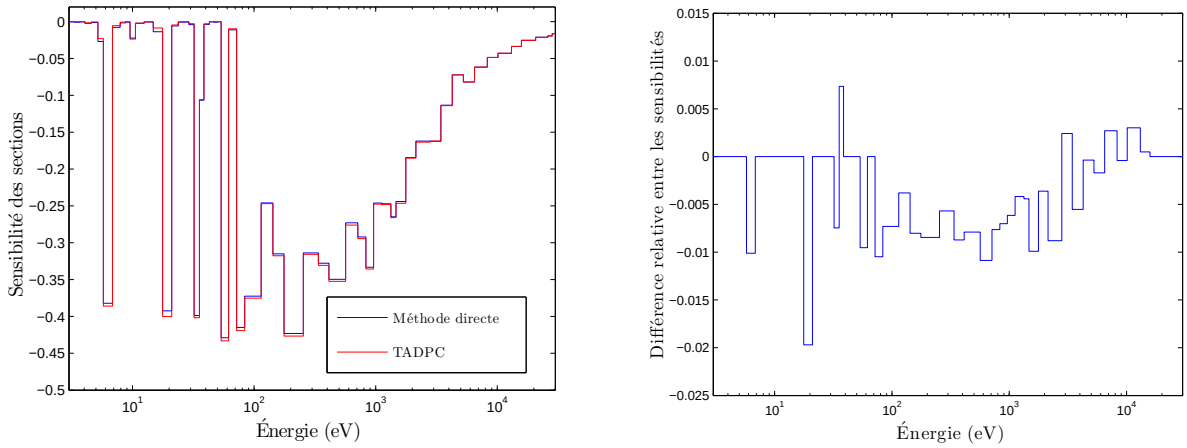

Figure 7.16 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative de l'U238 (à gauche) à la densité d'U238. Différences relatives entre le calcul direct et la méthode dérivée dans ce travail pour le module SHI: (à droite).

Module SHISBG:

Regardons maintenant les coefficients correspondants, mais pour le modèle de sensibilité basé sur le module SHISBG: (méthode de sous-groupes). Les coefficients de sensibilité à la densité d'hydrogène, pour la capture et la fission de l'U235, sont présentés à la figure 7.17.

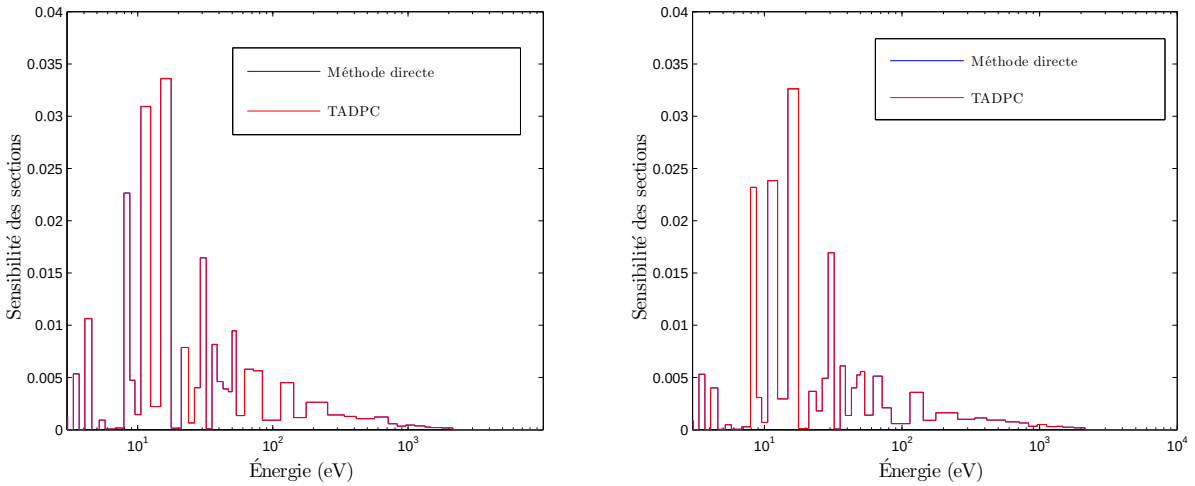

Figure 7.17 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative (à gauche) et la fission (à droite) de l'U235, à la densité d'hydrogène dans le modérateur. Comparaison entre la méthode de calcul direct et la méthode TADPC, pour le module SHISBG:.

Comme pour les autres résultats présentés à date pour les isotopes qui sont présents en quantité relativement faible (Pu239, U235), on voit que les méthodes de calcul de sensibilité basées sur les dérivées des PC donnent des résultats qui sont en accord avec ceux obtenus par un calcul direct (que ça soit avec SHI: ou SHISBG:). Les isotopes présents en faible quantité affectent moins la forme de la structure fine aux énergies correspondant à leurs propres résonances que les isotopes présents en grande quantité (comme l'U238). Ainsi, les sections efficaces des isotopes très dilués, du point de vue de l'autoprotection, sont beaucoup moins sensibles à des variations de densités, et l'évaluation des dérivées avec une méthode directe peut alors donner des résultats très précis, pratiquement les mêmes que ceux obtenus avec un calcul basé sur les dérivées des PC.

Les coefficients pour la capture de l'U238 sont présentés aux figures 7.18 (sensibilité à la densité d'hydrogène) et 7.19 (sensibilité à la densité d'U238).

L'accord entre les méthodes directe et basée sur les dérivées des PC est encore très bon (à l'exception d'un groupe avec un écart relatif d'environ 8%, le même que pour la cellule REP avec du MOX). On présente dans la prochaine sous-section une comparaison entre les sensibilités pour les deux méthodes d'autoprotection.

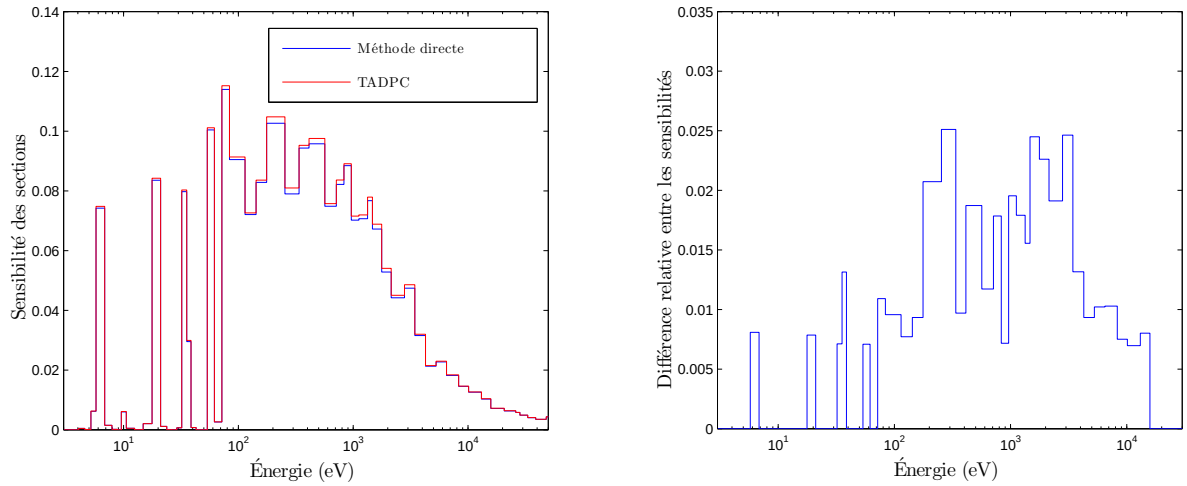

Figure 7.18 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative de l'U238 (à gauche) à la densité d'hydrogène dans le modérateur. Différences relatives entre le calcul direct et la méthode TADPC, pour le module SHISBG: (à droite).

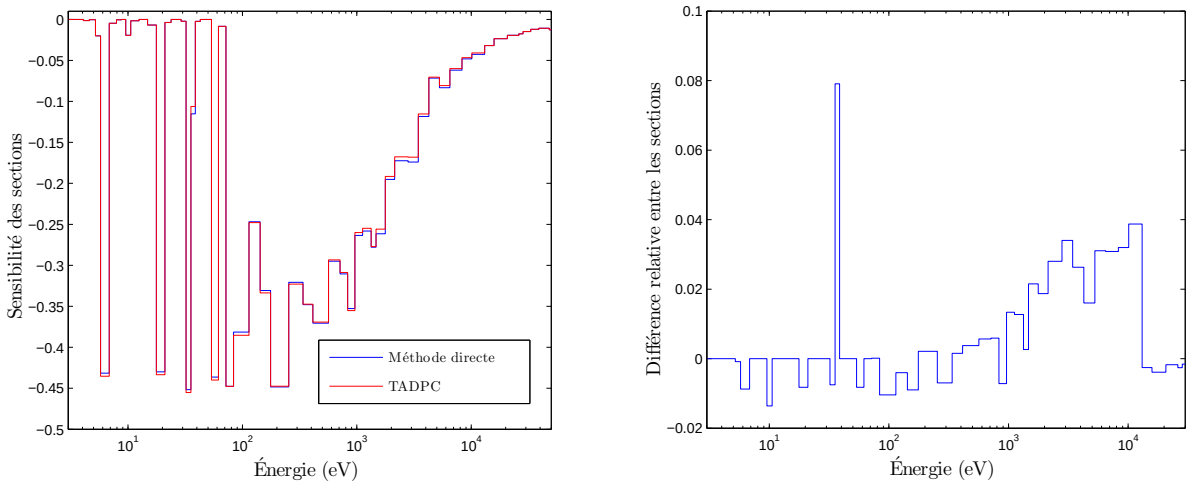

Figure 7.19 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative de l'U238 (à gauche) à la densité d'U238. Différences relatives entre le calcul direct et la méthode TADPC pour le module SHISBG: (à droite).

7.2.2 Comparaison entre SHI: et SHISBG:

La figure 7.20 montre les sensibilités obtenues pour chacun des modèle d'autoprotection, pour la section de capture de l'U238.

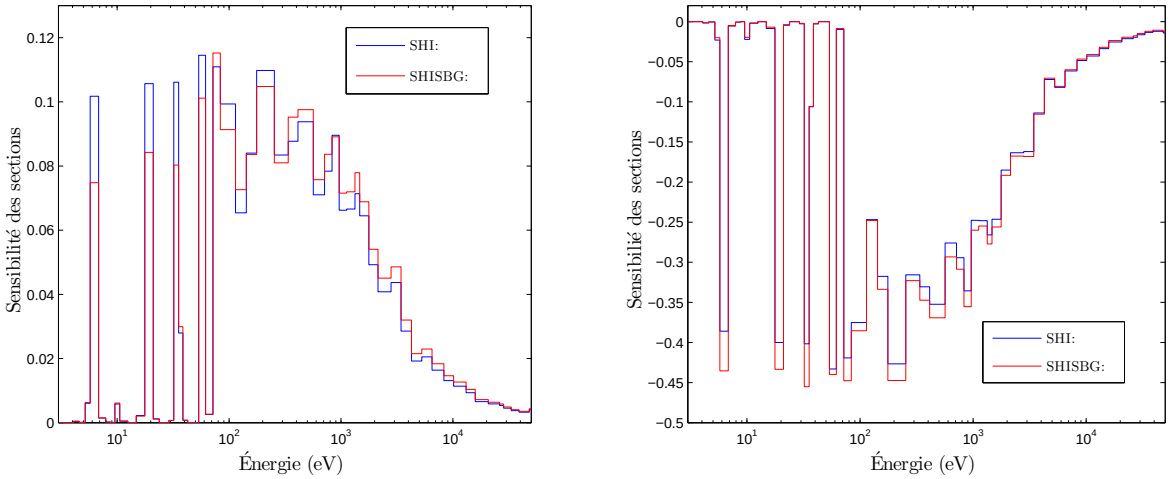

Figure 7.20 Comparaison entre les coefficients de sensibilité pour la capture de l'U238, à la densité d'hydrogène (à gauche) et à la densité d'U238 (à droite), pour les deux modèles d'autoprotection.

Dans les deux cas, la forme générale de la "courbe" de sensibilité est similaire, mais il y a tout de même des différences appréciables au niveau des valeurs des coefficients, des différences qui semblent plus prononcées pour la sensibilité à la densité d'hydrogène. En fait, les deux phénomènes concernés ici sont différents et il est normal que les deux méthodes puissent donner des résultats qui s'accordent mieux pour une des sensibilités que pour l'autre.

Comme expliqué plus haut, quand on regarde la sensibilité à la densité d'hydrogène, on regarde en fait l'effet d'une variation sur le ralentissement des neutrons. Pour la sensibilité à la densité d'U238, on regarde plutôt l'effet d'une variation sur l'importance des résonances dans le calcul de la structure fine (c'est-à-dire sur la dépression du flux). On peut difficilement expliquer ici pourquoi un modèle d'autoprotection donne dans certains cas des sensibilités plus importantes que pour l'autre, mais les comportements observés pour les sensibilités semblent indiquer un accord acceptable entre les deux modèles.

7.2.3 Impact de l'autoprotection spatiale sur les sensibilités

On présente ici une comparaison entre les sensibilités obtenues pour différentes positions dans l'assemblage. On montre donc les coefficients de sensibilité pour deux tiges de combustible différentes (une seule région par tige), une près du centre et à côté d'un trou d'eau et une dans le coin de l'assemblage. On présente à la figure 7.21 les coefficients pour les deux positions, pour les sensibilités à la densité d'hydrogène et d'U238.

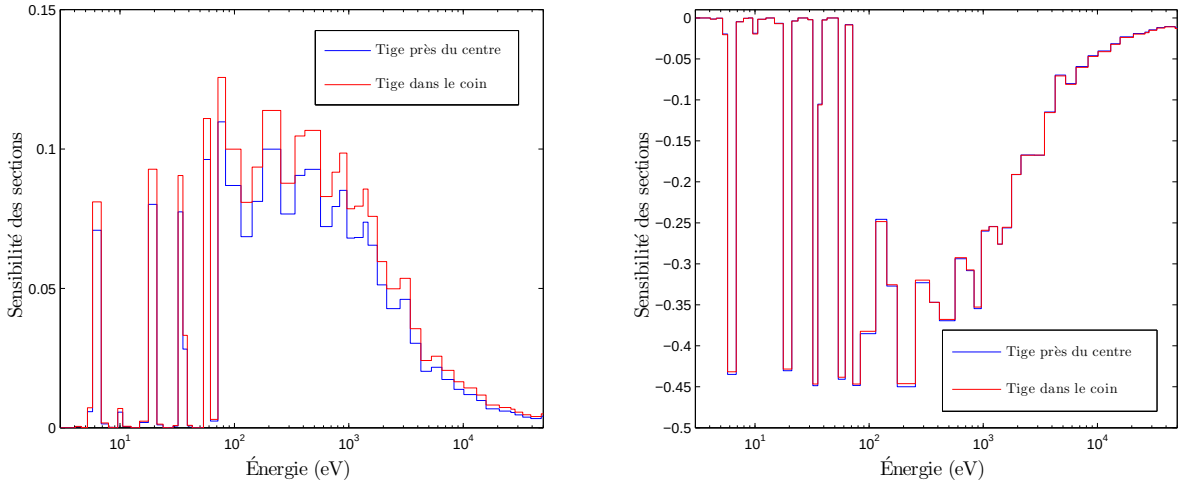

Figure 7.21 Comparaison entre les coefficients de sensibilité pour la capture de l'U238, à la densité d'hydrogène (à gauche) et à la densité d'U238 (à droite), pour une tige de combustible à deux positions différentes.

Pour la sensibilité à la densité d'U238, la position de la tige de combustible ne semble pas avoir un impact important sur les sensibilités. L'effet de la densité d'un isotope lourd sur les sections efficaces est très local, c'est-à-dire que pour une tige donnée, la densité de l'U238 dans la tige affecte beaucoup plus les sections efficaces que les densités d'U238 dans les tiges à proximité.

Pour la sensibilité à la densité de l'hydrogène, on observe toutefois une différence non négligeable entre la tige près du centre (et d'un trou d'eau) et celle dans le coin. En fait, il faut bien comprendre qu'on considère ici la sensibilité à la densité de modérateur, et non à la densité d'eau dans les trous d'eau. Si c'était le cas, les tiges près des trous d'eau seraient sûrement plus sensibles, mais il est plus intéressant de considérer l'effet sur les sensibilités à la densité du modérateur.

Pour une tige loin d'un trou d'eau, presque toute la modération vient du modérateur alors que pour une tige près d'un trou d'eau, une quantité significative de la modération peut venir de l'eau contenue dans le trou d'eau. Ainsi, le fait qu'une tige soit près d'un trou d'eau diminue sa sensitivité à la densité du modérateur dans le système, par rapport à une tige entourée de tiges de combustible.

7.2.4 Sensibilités explicite et implicite du k_{eff}

Les composantes explicite, implicite et totale de la sensibilité du k_{eff}, pour des calculs directs, sont présentées dans le tableau 7.9, pour les deux modules d'autoprotection, pour les deux densités isotopiques.

Tableau 7.9 Différents coefficients de sensibilité pour un assemblage REP, calculs directs (valeurs de référence).

	Sensibilité à la densité d'H	Sensibilité à la densité d'U238
SHI:		
Total	0.05052	-0.16114
Explicite	0.05979	-0.19479
Implicite	-0.00926	0.03358
SHISBG:		
Total	0.05022	-0.15878
Explicite	0.05818	-0.19481
Implicite	-0.00803	0.03588

Les coefficients implicites obtenus par la méthode basée sur les dérivées des PC sont présentés dans le tableau 7.10.

Tableau 7.10 Différents coefficients de sensibilité pour un assemblage REP, calculés avec un traitement analytique de l'équation de ralentissement basé sur les dérivées des probabilités de collision.

	Sensibilité à la densité d'H	Sensibilité à la densité d'U238
SHI:		
Implicite	-0.00909	0.03394
SHISBG:		
Implicite	-0.00800	0.03642

On observe encore un très bon accord entre les résultats d'un calcul direct et ceux obtenus par la méthode TADPC, de l'ordre de 2% dans le pire des cas. De plus, la différence entre les sensibilités implicites obtenues avec les deux modèles d'autoprotection est de l'ordre de 10%, que ça soit pour la sensibilité à la densité d'hydrogène ou à celle de l'U238. Remarquons que SHISBG: donne un coefficient de sensibilité plus faible (en valeur absolue) que le module SHI: pour la sensibilité à l'hydrogène mais plus important pour la sensibilité à la densité d'U238.

On peut aussi constater que tout comme pour la tige de MOX présentée dans la section précédente, l'importance de l'effet implicite pour la sensibilité totale est un peu plus grande pour la sensibilité à un isotope résonant que pour celle de l'hydrogène. Comme pour la tige de MOX, augmenter la densité d'U238 augmente la capture mais cet effet est atténué par la diminution des sections efficaces autoprotégées, alors qu'augmenter la densité d'hydrogène augmente la modération et le k_{eff} mais cet effet est atténué par l'augmentation des sections efficaces autoprotégées (ce qui au final augmente la capture).

Les contributions de chacune des réactions à la sensibilité implicite du k_{eff}, pour une variation sur la densité d'hydrogène, pour les deux modèles d'autoprotection (calculées avec la méthode basée sur les dérivées des PC), sont présentées dans le tableau 7.11.

Tableau 7.11 Contributions des différentes réactions à la sensibilité implicite du k_{eff} à la densité d'hydrogène, pour les deux modèles d'autoprotection.

	SHI:	SHISBG:
U235, $\sigma_{n,\gamma}$	-0.00036	-0.00025
U235, σ_f	0.00034	0.00021
U238, $\sigma_{n,\gamma}$	-0.00900	-0.00788
U238, $\sigma_{s,0}$	0.00004	0.00002
Zr91, $\sigma_{n,\gamma}$	-0.00011	-0.00010

On observe encore une fois que la sensibilité est dominée par la capture radiative de l'U238. Les sections efficaces de l'U235 contribuent aussi un peu à la sensibilité, mais les effets associés à la capture et à la fission se cancellent pratiquement parfaitement. Les coefficients équivalents, mais pour la sensibilité à la densité d'U238, sont présentés dans le tableau 7.12.

Tableau 7.12 Contributions des différentes réactions à la sensibilité implicite du k_{eff} à la densité d'U238, pour les deux modèles d'autoprotection.

	SHI:	SHISBG:
U235, $\sigma_{n,\gamma}$	~ 0	-0.00014
U235, σ_f	~ 0	0.00014
U238, $\sigma_{n,\gamma}$	0.03414	0.03666
U238, $\sigma_{s,0}$	-0.00014	-0.00018
Zr91, $\sigma_{n,\gamma}$	-0.00005	-0.00006

Encore une fois, on remarque que l'autoprotection par équivalence de dilution, pour l'implémentation dans DRAGON, ne peut pas vraiment calculer la sensibilité d'un isotope à une densité d'un autre isotope présent dans le même mélange. Ces sensibilités sont toutefois très

faibles, comme le démontrent les résultats obtenus en utilisant un modèle d'autoprotection par la méthode de sous-groupes.

7.3 Cellule CANDU

On analyse dans cette section un cellule CANDU, consistant en un carrée de 28.575 cm de côté avec de l'eau lourde comme modérateur. Les 37 tiges de combustible se trouvent au centre de la cellule, organisées en 4 anneaux concentriques et baignent dans l'eau lourde du caloporteur. Notons ici que le modérateur et le caloporteur sont séparés dans un CANDU. Le combustible et le caloporteur se trouvent dans un tube de force, qui se situe dans le tube de calandre. Un espace contenant du gaz se trouve entre les tubes de pression et de calandre. La cellule est présentée à la figure 7.22. La composition du combustible, de l'oxyde d'uranium naturel, est présentée dans le tableau 7.13.

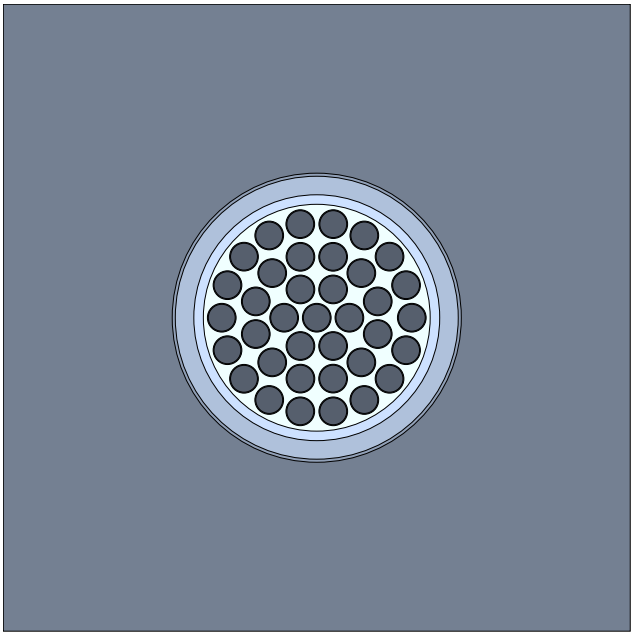

Figure 7.22 Une cellule CANDU.

Tableau 7.13 Composition du combustible du CANDU.

Isotope	Densité (10^{24}atomes $\cdot\, cm^{-3}$)
O16	4.6557E-02
U235	1.6771E-04
U238	2.3110E-02

Quelques précisions s'imposent ici. Premièrement, pour un CANDU, on calcule les coefficients de sensibilité à la densité de deuterium et non d'hydrogène. Les CANDU contiennent de l'eau lourde avec un très faible pourcentage d'hydrogène, ce qui rend l'analyse de la sensibilité à la densité d'hydrogène moins pertinente.

De plus, comme le modérateur et caloporteur sont séparés, il faut préciser de quelle densité il s'agit. En fait, tous les résultats qui seront présentés dans les sous-sections suivantes (excepté 7.3.4), quand il s'agit de sensibilité à la densité de deuterium, sont pour la densité du caloporteur, dans lequel baignent les tiges de combustible. Comme ce sera expliqué un peu plus loin, la sensibilité des sections efficaces (et donc la sensibilité implicite du k_{eff}) à la densité de deuterium dans le modérateur est essentiellement nulle. Des explications plus détaillées seront fournies dans la sous-section 7.3.4.

7.3.1 Comparaison entre les calculs directs de sensibilité et la méthode basée sur les dérivées des probabilités de collision.

On compare ici les sensibilités obtenues par un calcul direct avec celles trouvées en utilisant les méthodes de calcul de sensibilité basées sur l'utilisation des dérivées des PC.

Module SHI:

Les coefficients de sensibilité de l'U238 à la densité de deuterium dans le caloporteur sont présentés à la figure 7.23. Les sections efficaces de l'U235 jouent ici un rôle négligeable à cause de la très faible quantité d'U235 dans l'uranium naturel.

Les calculs directs et ceux basés sur les dérivées des PC sont encore en très bon accord. On peut toutefois remarquer qu'en augmentant la "complexité" du système (une cellule CANDU étant définitivement plus complexe qu'une simple cellule REP), les différences relatives (qui étaient dans les pires cas de l'ordre de 1% pour la cellule REP) ont tendance à augmenter (elles peuvent atteindre des valeurs de l'ordre de 3% dans les pires cas pour un CANDU).

La sensibilité de l'U238 à sa propre densité est présentée à la figure 7.24. Encore une fois, les écarts observés entre un calcul direct des sensibilités et un calcul basé sur la dérivée des PC sont un peu plus importants que pour la cellule REP, mais toujours relativement faibles. Comme expliqué précédemment, cela n'indique pas nécessairement que le calcul basé sur la dérivée des PC est moins précis. L'écart plus important peut aussi indiquer que la précision de l'évaluation numérique des dérivées des sections efficaces est moins bonne pour un système plus complexe.

Pour la cellule CANDU, le ratio entre les volumes du modérateur et du combustible est

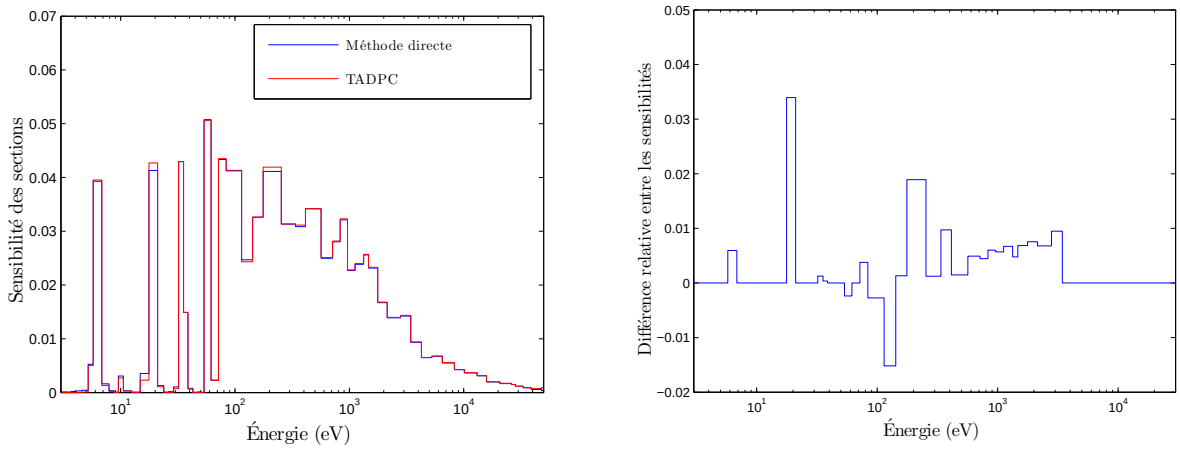

Figure 7.23 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative de l'U238 (à gauche) à la densité de deuterium dans le caloporteur. Différences relatives entre le calcul direct et la méthode TADPC (à droite).

significativement différent de celui pour un assemblage (ou une cellule) REP. L'augmentation de la modération peut avoir un impact sur la précision de l'évaluation directe des dérivées. De plus, la présence de plusieurs mélanges différents dans une géométrie plus complexe peut possiblement aussi nuire à la précision des dérivées évaluées numériquement.

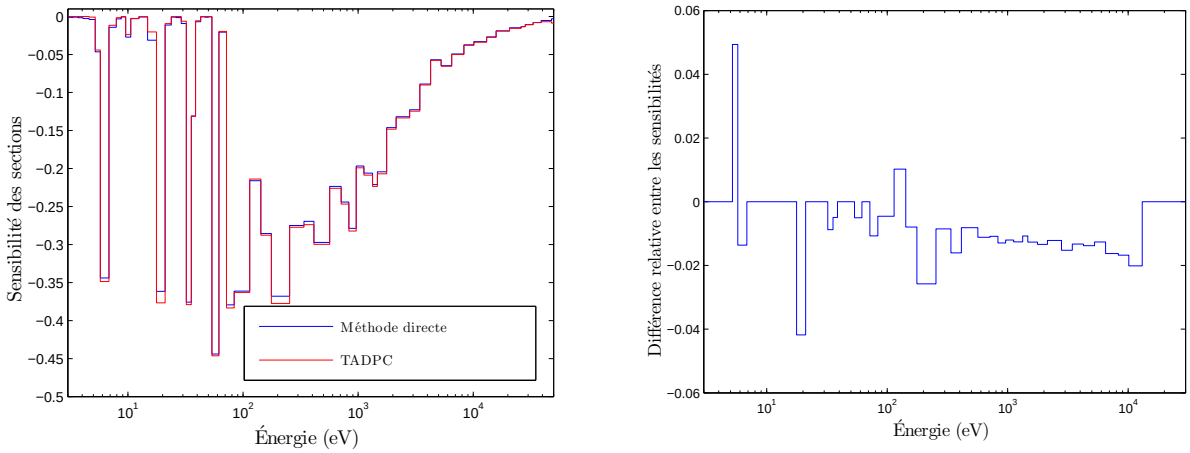

Figure 7.24 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative de l'U238 (à gauche) à la densité d'U238. Différences relatives entre le calcul direct et la méthode TADPC pour le module SHI: (à droite).

Module SHISBG:

Regardons maintenant les coefficients de sensibilité pour un modèle d'autoprotection par sous-groupes. Les coefficients pour la capture de l'U238, pour une variation sur la densité de deuterium, sont présentés à la figure 7.25. Ceux pour la sensibilité à la densité d'U238 sont présentés à la figure 7.26.

Les écarts par rapport aux calculs directs peuvent ici être relativement importants, allant jusqu'à 10% pour un groupe pour la sensibilité à la densité d'U238. Ces écarts plus importants surviennent par contre vers des énergies plus élevées (particulièrement pour la sensibilité à l'U238) où les sensibilités sont relativement faibles (ce qui peut potentiellement donner des écarts relatifs importants). Pour les groupes où les sections efficaces sont plus sensibles aux densités, les différences relatives restent de l'ordre de 1 ou 2% dans le cas de la sensibilité à la densité d'U238 et de l'ordre 4 ou 5% pour celle à la densité du deuterium.

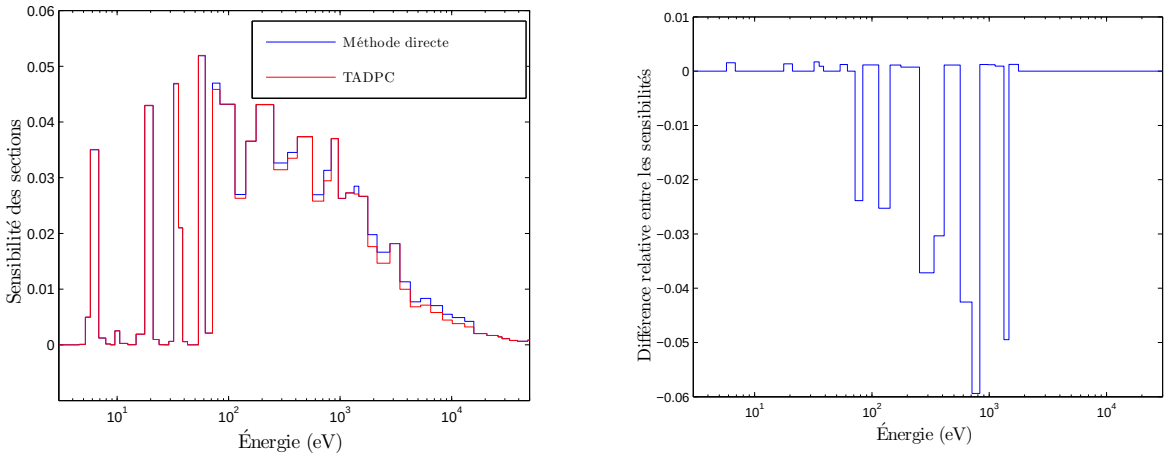

Figure 7.25 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative de l'U238 (à gauche) à la densité de deuterium dans le caloporteur. Différences relatives entre le calcul direct et la méthode TADPC, pour le module SHISBG: (à droite).

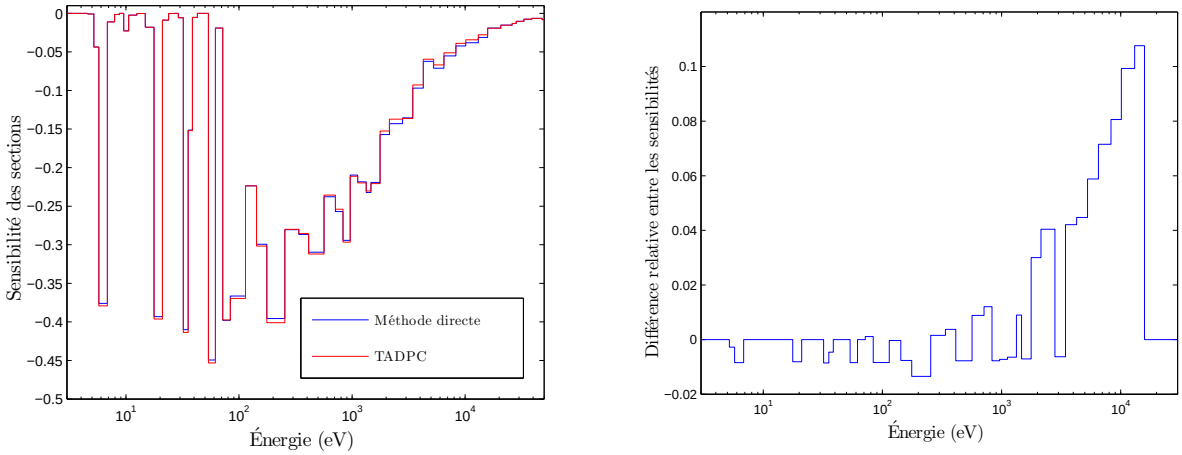

Figure 7.26 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative de l'U238 (à gauche) à la densité d'U238. Différences relatives entre le calcul direct et la méthode TADPC pour le module SHISBG: (à droite).

7.3.2 Comparaison entre SHI: et SHISBG:

Comparons maintenant directement les sensibilités obtenues par SHI: et SHISBG:. Cette comparaison est présentée à la figure 7.27.

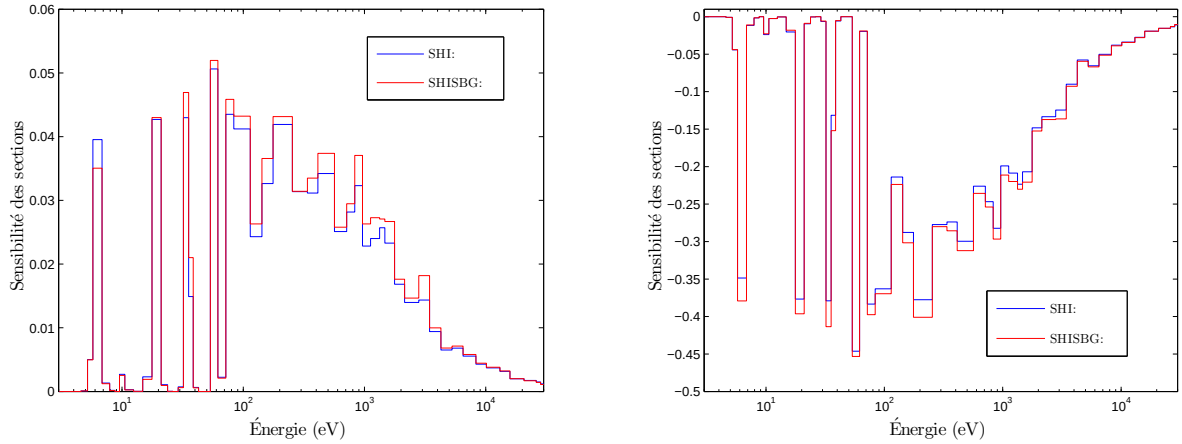

Figure 7.27 Comparaison entre les coefficients de sensibilité pour la capture de l'U238, à la densité de deuterium (à gauche) et à la densité d'U238 (à droite).

On peut remarquer ici que les sensibilités sont en meilleur accord (particulièrement pour la sensibilité à la densité du noyau léger) que pour une cellule ou un assemblage REP. Ici, il

semble que les deux méthodes d'autoprotection donnent des coefficients de sensibilité similaires.

7.3.3 Impact de l'autoprotection spatiale sur les sensibilités

L'assemblage étudié dans cette section comprend quatre anneaux contenant des tiges de combustible. Nous nous attarderons aux différences non seulement entre la sensibilité en périphérie d'une tige et son centre mais aussi entre les tiges situées dans l'anneau extérieur et celle située au centre.

De plus, lorsqu'il est question de comparaison entre la périphérie d'une tige, son centre et "une seule région", les calculs sont faits de manière à ce que seule la tige en question soit considérée, sans moyenne avec les tiges des autres anneaux. Autrement dit, on ne fait une moyenne que sur la tige pour laquelle on considère les sensibilités, sans moyenner en incluant toutes les tiges dans les autres anneaux comme ce serait le cas si on ne considérait aucune autoprotection spatiale (donc une seule valeur de section autoprotégée et de coefficient de sensibilité pour toutes les tiges).

Les coefficients pour la capture de l'U238 aux densités de deuterium et d'U238 sont présentés à la figure 7.28, pour différentes positions dans une tige ainsi que pour une moyenne sur une seule région. On considère ici la tige située au centre de la cellule.

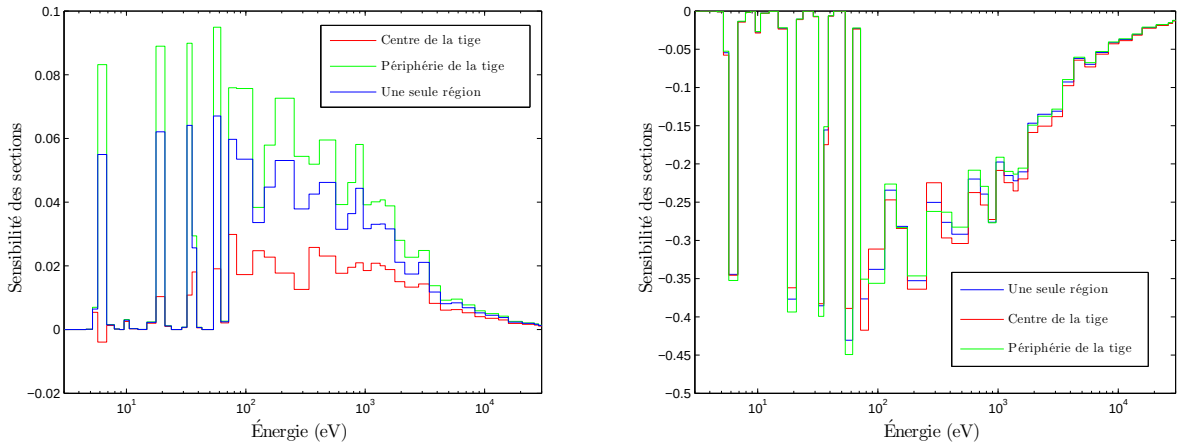

Figure 7.28 Comparaison entre les coefficients de sensibilité pour la capture de l'U238, à la densité de deuterium (à gauche) et à la densité d'U238 (à droite), pour différentes positions dans la tige centrale ainsi qu'une moyenne sur la tige au complet.

On peut encore une fois constater que le comportement spatial de la sensibilité dépend de la densité pour laquelle on calcule les coefficients de sensibilité. On peut aussi comparer les

coefficients de sensibilité entre les tiges de l'anneau extérieur et celle de l'anneau intérieur. On considère ici la sensibilité, pour chacune des tiges, de la région en périphérie. Les coefficients sont présentés à la figure 7.29.

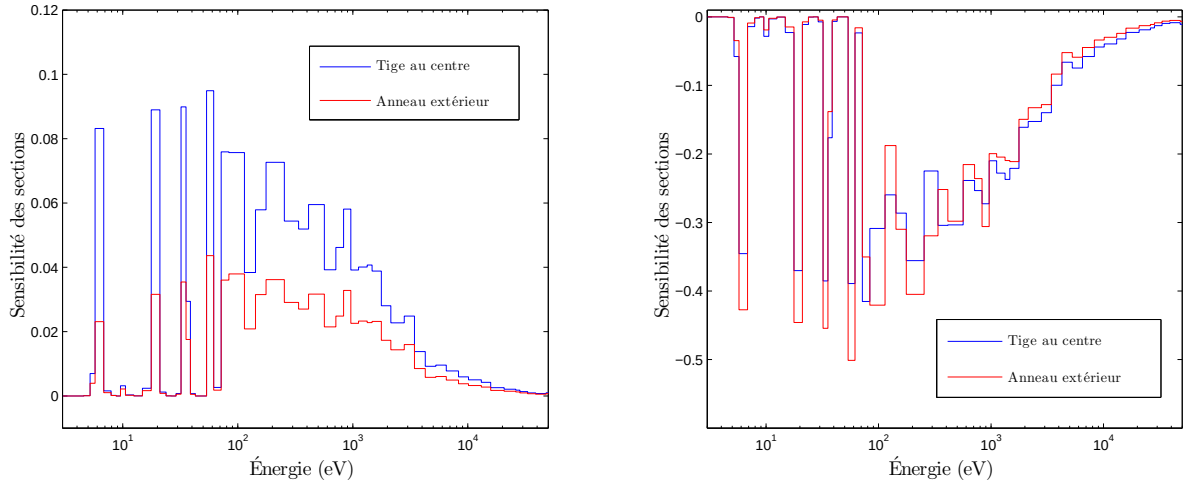

Figure 7.29 Comparaison entre les coefficients de sensibilité pour la capture de l'U238, à la densité de deuterium (à gauche) et à la densité d'U238 (à droite), pour la périphérie d'une tige dans l'anneau extérieur et la même région pour la tige centrale.

On voit ici aussi que pour la sensibilité à la densité de deuterium, le comportement des coefficients est très clair (plus grands pour l'anneau intérieur que pour ceux de l'anneau extérieur) alors que pour la sensibilité à la densité d'U238 la situation est plus complexe. Notons ici que quand il est question de la sensibilité à la densité de l'U238, on considère la sensibilité à la densité d'U238 dans toutes les tiges, même si on regarde la sensibilité des sections efficaces dans une tige en particulier.

7.3.4 Sensibilités explicite et implicite du k_{eff}

Les composantes explicite, implicite et totale de la sensibilité du k_{eff}, pour des calculs directs, sont présentées dans le tableau 7.14, pour les deux modules d'autoprotection, pour les deux densités isotopiques.

Comme mentionné plus haut, la sensibilité implicite associée à la densité du deuterium dans le modérateur est essentiellement nulle. Dans une cellule CANDU, la quantité de modérateur est très élevée et les neutrons sont très bien thermalisés (ce qui est nécessaire pour maintenir la réaction nucléaire avec de l'uranium naturel). Le k_{eff} montre une certaine sensibilité explicite à la densité de modérateur, de signe positif, car une augmentation du modérateur

Tableau 7.14 Différents coefficients de sensibilité pour une cellule CANDU, calculs directs (valeurs de référence).

	Sensibilité à la densité d'H2 (caloporteur)	Sensibilité à la densité d'U238	Sensibilité à la densité d'H2 (modérateur)
SHI:			
Total	-0.01299	-0.37423	0.07031
Explicite	-0.01130	-0.38847	0.07031
Implicite	-0.00169	0.01424	~ 0
SHISBG:			
Total	-0.01289	-0.37357	0.06924
Explicite	-0.01111	-0.38877	0.06924
Implicite	-0.00178	0.01520	~ 0

augmente la quantité de neutrons qui peuvent atteindre une énergie où la fission de l'U235 peut compenser pour la capture par l'U238.

Toutefois, comme les neutrons sont déjà très bien thermalisés par le modérateur, une variation sur sa densité n'a pas d'effet sur la forme de la distribution de ceux-ci (pour le calcul des sections autoprotégées). C'est pourquoi dans les sections précédentes seulement les sensibilités à la densité de deuterium dans le caloporteur sont présentées. Par contre, comme les tiges de combustibles sont directement dans le caloporteur, les neutrons peuvent y voyager sans avoir atteint le modérateur et donc sans être bien thermalisés. Ainsi, il y a une composante non nulle à la sensibilité implicite à la densité de deuterium dans le caloporteur.

Les signes des sensibilités implicites sont toujours les mêmes que pour les autres systèmes. Toutefois, la sensibilité explicite (et totale) du k_{eff} à la densité de caloporteur est négative, ce qui n'était pas le cas pour les deux autres systèmes. Cela implique qu'une diminution de la densité du caloporteur augmente le k_{eff}. Ce phénomène est bien connu pour les réacteurs CANDU, qui possède un *coefficient de réactivité du vide du caloporteur* (ou *coolant void reactivity*, *CVR*) positif. Une perte de caloporteur entraine une augmentation de la réactivité.

Cette tendance (le coefficient implicite avec le même signe que le coefficient explicite) est différente de ce qu'on observe pour les deux autres systèmes. Ici, les raisons qui expliquent le comportement (signe négatif) du coefficient explicite sont un peu plus complexes que pour les autres systèmes. Il y a essentiellement deux effets qui expliquent le signe négatif. D'abord, le caloporteur est significativement plus chaud que le modérateur, et comme les neutrons qui ont longuement voyagé dans le modérateur sont relativement bien thermalisés, cela implique une certaine diffusion vers des énergies supérieures (du *up scattering*). En augmentant la

densité du deuterium, on augmente cet effet, et ce (léger) déplacement des neutrons vers des énergies supérieures peut diminuer le k_{eff}, à cause du déplacement (en énergie) vers une région où le ratio de capture de l'U238 sur la fission de l'U235 est un peu plus élevé.

Ensuite, pour les neutrons qui n'ont pas encore atteint le modérateur et qui ont des énergies très élevées, suite à leur production par fission, le caloporteur les ralentit un peu, mais pas assez pour que les neutrons atteignent des énergies thermiques. Comme il y a des tiges de combustible dans le caloporteur, ce léger ralentissement peut faire en sorte que les neutrons soient absorbés dans les résonances de l'U238 (ils ne sont pas assez ralentis pour être à des énergies où la section de fission de l'U235 est devenue beaucoup plus importante que celle de capture radiative de l'U238). Cet effet contribue de façon négative à la sensibilité explicite du k_{eff}.

Finalement, remarquons que la sensibilité explicite à la densité de l'U238 est très élevée (comparée à celle des autres systèmes) mais que la sensibilité implicite associée est relativement faible. L'explication pour cette observation est la suivante. Le combustible d'un CANDU contient, en terme d'isotope résonant, presqu'uniquement de l'U238, et la structure fine utilisée pour calculer les sections autoprotégées est donc en grande partie déterminée par les résonances de l'U238. Ainsi, lorsqu'on augmente la densité de l'U238, l'effet sur les sections autoprotégées n'est pas très prononcé puisque la structure fine était déjà presque complètement déterminée par l'U238. Par contre, vu la faible quantité d'U235, le système est très sensible à l'augmentation de la capture causée par une augmentation de la densité de l'U238, ce qui explique le coefficient total négatif et très important.

Les coefficients implicites obtenus par la méthode basée sur les dérivées des PC sont présentés dans le tableau 7.15.

Tableau 7.15 Différents coefficients de sensibilité pour une cellule CANDU, calculs basés sur traitement analytique de l'équation de ralentissement basé sur les dérivées des probabilités de collision.

	Sensibilité à la densité d'H2	Sensibilité à la densité d'U238
SHI:		
Implicite	-0.00165	0.01423
SHISBG:		
Implicite	-0.00169	0.01500

On peut voir que l'accord entre les résultats de calculs basés sur les dérivées des PC et ceux de calculs directs n'est pas aussi bon que pour les systèmes précédents dans le cas de la sensibilité

à la densité du deuterium, mais toujours excellent pour la sensibilité à la densité d'U238. En fait, dans le cas de la sensibilité à la densité du deuterium, les sensibilités implicites sont assez faibles, et plus celles-ci sont faibles, plus des écarts absolus relativement faibles (de l'ordre de ce qu'on retrouve pour les autres systèmes) peuvent donner des écarts relatifs importants.

Les contributions de chacune des réactions à la sensibilité implicite du k_{eff}, pour une variation sur la densité de deuterium, pour les deux modèles d'autoprotection (calculées avec les méthodes basées sur les dérivées des CP), sont présentées dans le tableau 7.16.

Tableau 7.16 Contributions des différentes réactions à la sensibilité implicite du k_{eff} à la densité de deuterium, pour les deux modèles d'autoprotection.

	SHI:	SHISBG:
U238, $\sigma_{n,\gamma}$	-0.00163	-0.00170
U238, $\sigma_{s,0}$	0.00001	0.00002
Zr91, $\sigma_{n,\gamma}$ (tube de pression)	-0.00002	~ 0

La somme des coefficients ne donne pas exactement les mêmes résultats que les coefficients implicites présentés dans le tableau 7.15 à cause de l'addition de très petites sensibilités qui ne sont pas présentées ici. On peut observer sans surprise que la principale contribution à la sensibilité implicite vient ici de l'U238.

Les coefficients équivalents, mais pour la sensibilité à la densité d'U238, sont présentés dans le tableau 7.17. À part une légère contribution venant du Zr91 dans les tubes et la gaine, encore une fois la contribution principale à la sensibilité implicite vient des sections efficaces de l'U238.

Tableau 7.17 Contributions des différentes réactions à la sensibilité implicite du k_{eff} à la densité d'U238, pour les deux modèles d'autoprotection.

	SHI:	SHISBG:
U238, $\sigma_{n,\gamma}$	0.01448	0.01517
U238, $\sigma_{s,0}$	-0.00015	-0.00017
Zr91, $\sigma_{n,\gamma}$ (tube de pression)	-0.00006	~ 0
Zr91, $\sigma_{n,\gamma}$ (tube de calandre)	-0.00003	~ 0
Zr91, $\sigma_{n,\gamma}$ (gaine)	-0.00002	-0.00002

7.4 Supercritical Water Reactor (SCWR)

On analyse maintenant un assemblage d'un réacteur à eau supercritique canadien, qu'on appellera un SCWR pour *SuperCritical Water Reactor*. Cette cellule a un pas de réseau carré de 25 cm de côté, et utilise de l'eau lourde comme modérateur. Toutefois de l'eau légère est utilisée comme caloporteur (il y a en fait ici deux régions avec du caloporteur). Le tube central contient le "premier" caloporteur et les tiges de combustible se trouvent ensuite dans le "deuxième" caloporteur, contenu dans un tube qui est entouré d'un isolant et ensuite d'un tube de force. La géométrie est présentée à la figure 7.30. Les deux anneaux de combustible ne contiennent pas exactement les mêmes mélanges. La composition des deux combustibles se retrouve dans le tableau 7.18.

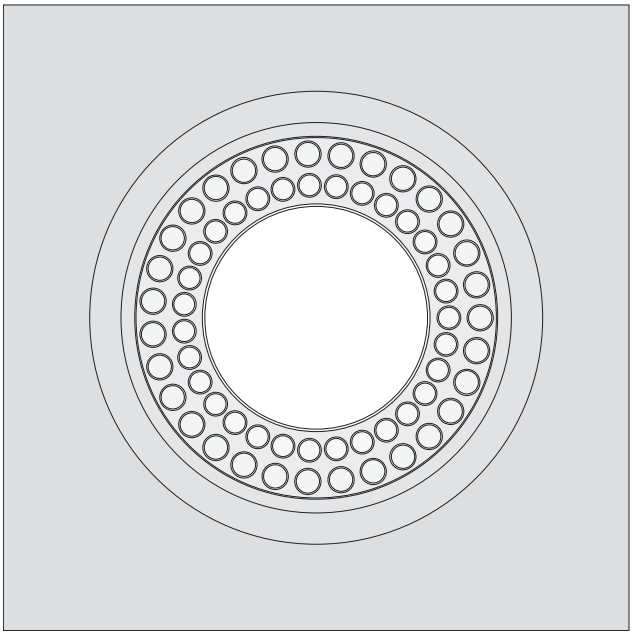

Figure 7.30 Une cellule SCWR.

7.4.1 Comparaison entre les calculs directs de sensibilité et la méthode basée sur les dérivées des probabilités de collision.

On compare ici les sensibilités obtenues par un calcul direct avec celles trouvées en utilisant les méthodes de calcul sensibilité basées sur l'utilisation des dérivées analytiques des PC. Notons que les crayons de combustible sont séparés entre un anneau interne (les crayons avec le plus petit rayon) et un anneau externe. Dans cette section, on considère les isotopes présents dans l'anneau interne. On présentera ensuite la comparaison entre les sensibilités des isotopes des deux anneaux de combustible.

Tableau 7.18 Composition du combustible du SCWR.

Isotope	Densité (10^{24}atomes $\cdot\, cm^{-3}$) (région interne)	Densité (10^{24}atomes $\cdot\, cm^{-3}$) (région externe)
O16	4.5017E-02	4.4868E-02
O17	1.7203E-05	1.7131E-05
Pu238	9.1212E-05	7.2709E-05
Pu239	1.7162E-03	1.3680E-03
Pu240	7.5517E-04	6.0198E-04
Pu241	4.9886E-04	3.9766E-04
Pu242	2.3159E-04	1.8461E-04
Th232	1.9213E-02	1.9809E-02

De plus, il sera ici question de la sensibilité à la densité d'hydrogène dans le "deuxième" caloporteur, c'est-à-dire celui dans la région qui contient les tiges de combustible. Les sensibilités des sections efficaces aux autres densités d'hydrogène (ou de deuterium) sont négligeables. Plus de détails sur cet aspect des sensibilités seront fournies dans la section 7.4.3.

Module SHI:

Les deux isotopes dont il sera ici question sont le Th232 et le Pu239. Comme pour la tige de MOX, on considérera la fission et la capture radiative pour le Pu239. Les coefficients pour le Pu239, pour la sensibilité à la densité d'hydrogène dans le caloporteur, sont illustrés à la figure 7.31. Précisons ici qu'on considère les isotopes dans les tiges de combustible de l'anneau intérieur. Comme les deux anneaux de combustible ne contiennent pas les mêmes mélanges, les sensibilités ne seront pas exactement les mêmes (une comparaison sera présentée dans la sous-section 7.4.2).

L'accord entre les deux méthodes est comme d'habitude très bon, et le comportement de la sensibilité du Pu239 ressemble à ce qui a été observé pour la tige de MOX. On présente les coefficients de sensibilité pour le Th232, à la densité d'hydrogène dans le caloporteur, à la figure 7.32.

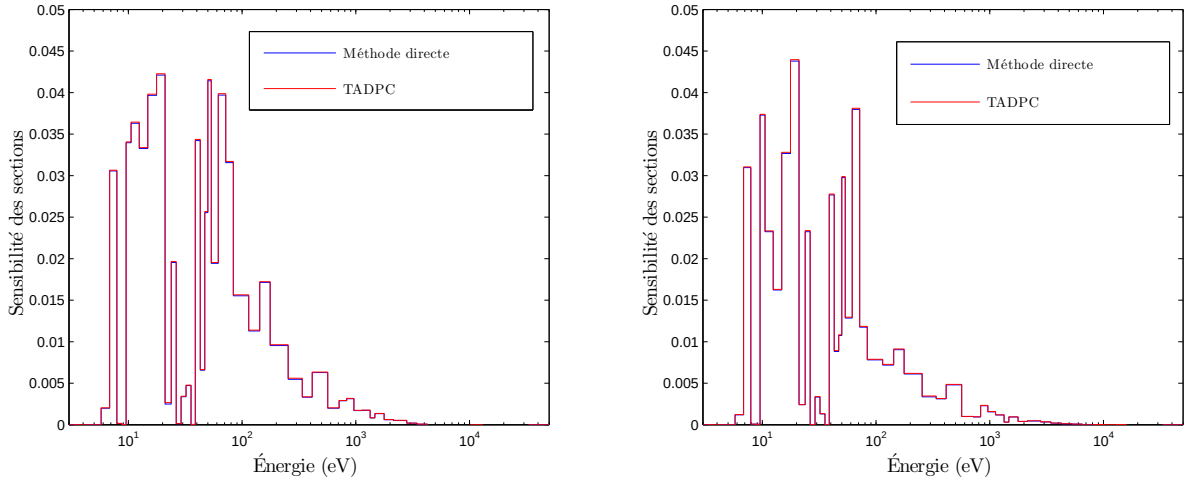

Figure 7.31 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative (à gauche) et la fission (à droite) du Pu239, à la densité d'hydrogène dans le caloporteur. Comparaison entre la méthode de calcul direct et la méthode dérivée, pour SHI:.

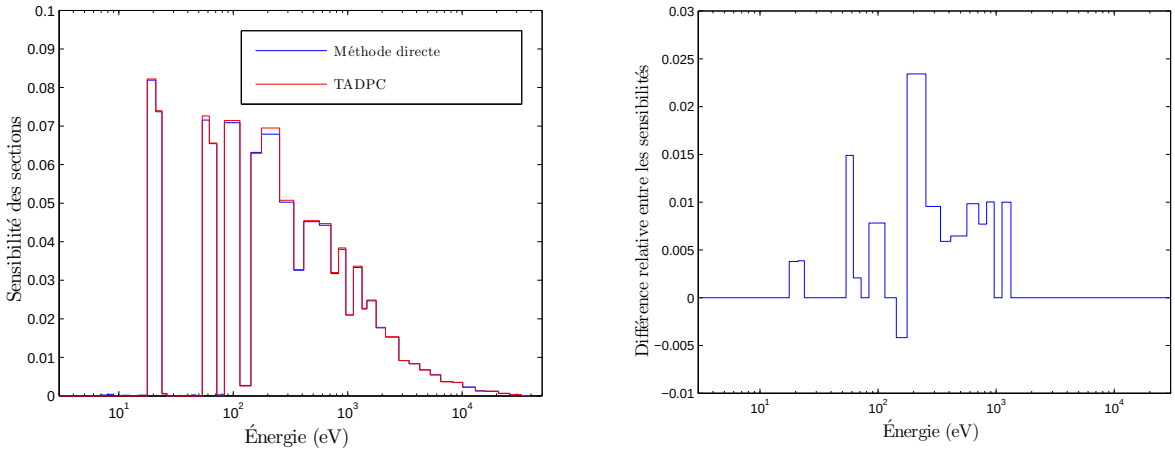

Figure 7.32 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative du Th232 (à gauche) à la densité d'hydrogène dans le caloporteur. Différences relatives entre le calcul direct et la méthode TADPC (à droite).

Encore une fois, l'accord entre les deux méthodes est très bon, avec des écarts relatifs de l'ordre de 1%, atteignant au maximum environ 2.5%. Les coefficients pour la sensibilité des sections efficaces du Th232 à sa propre densité sont présentés à la figure 7.33. On peut y observer des coefficients de sensibilité dont le comportement est similaire à celui de l'U238 pour le CANDU. Les écarts relatifs entre les deux méthodes sont de l'ordre de 2%.

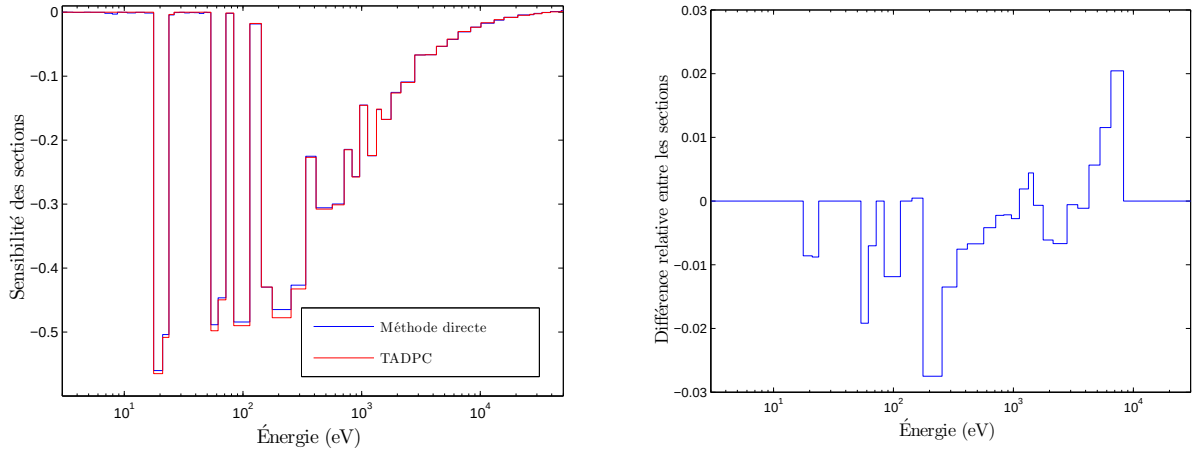

Figure 7.33 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative du Th232 (à gauche) à la densité du Th232. Différences relatives entre le calcul direct et la méthode TADPC (à droite).

Module SHISBG:

Les coefficients de sensibilité du Pu239 à la densité d'hydrogène dans le caloporteur sont présentés à la figure 7.34. Ceux pour le Th232 sont présentés à la figure 7.35. On considère encore une fois les isotopes dans les tiges de combustible de l'anneau intérieur.

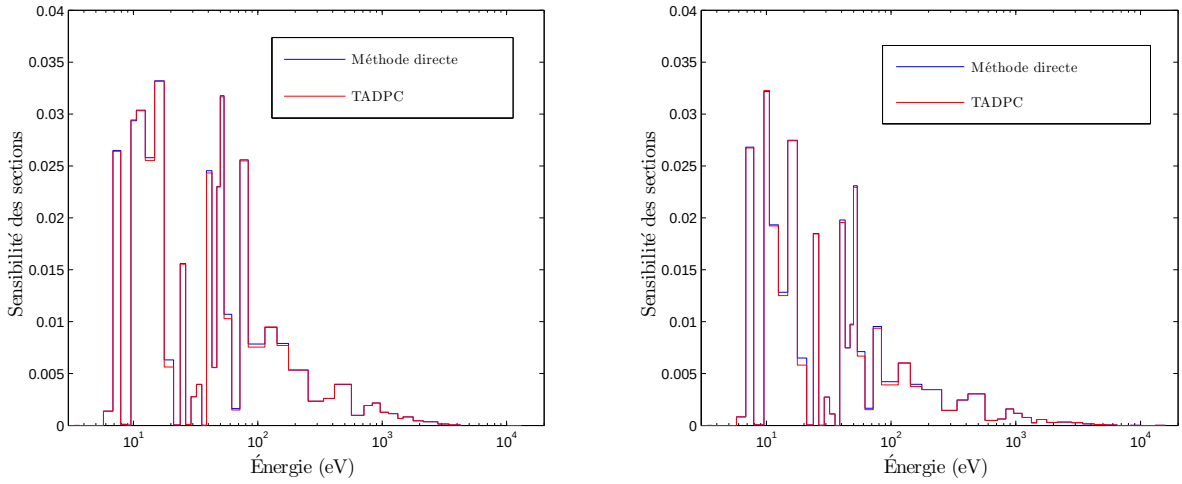

Figure 7.34 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative (à gauche) et la fission (à droite) du Pu239, à la densité d'hydrogène dans le caloporteur. Comparaison entre la méthode de calcul direct et la méthode TADPC, pour SHISBG:.

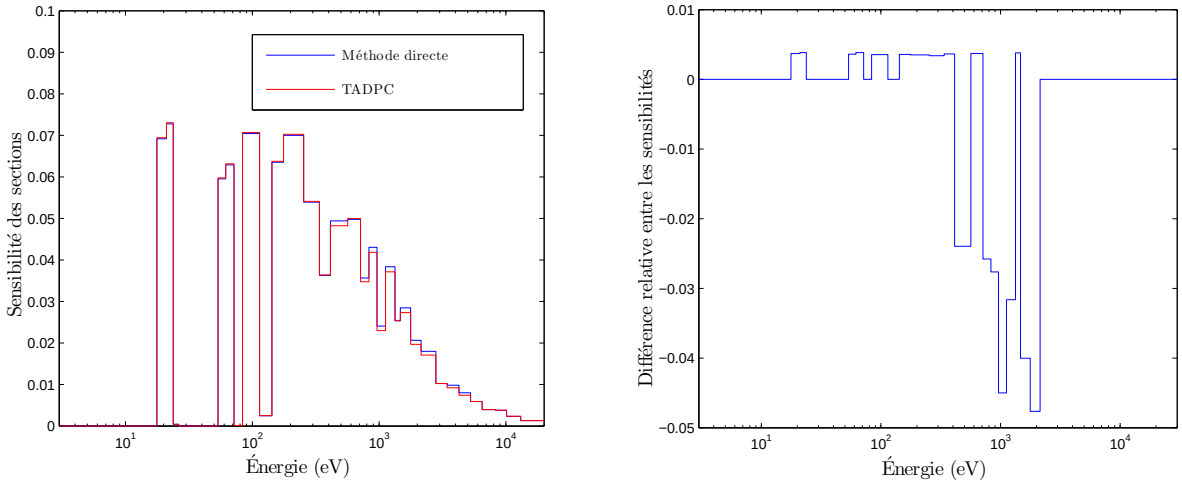

Figure 7.35 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative du Th232 (à gauche) à la densité d'hydrogène. Différences relatives entre le calcul direct et la méthode TADPC, pour le module SHISBG: (à droite).

Les écarts entre les calculs directs et les calculs basés sur les dérivées des PC sont un peu plus élevés en général que pour le modèle d'autoprotection par équivalence de dilution, mais l'accord entre les deux méthodes de calcul reste somme toute très bon. Les coefficients de sensibilité à la densité du Th232, pour les sections de capture du Th232, sont présentés à la figure 7.36 (toujours pour le Th232 dans le combustible de l'anneau intérieur).

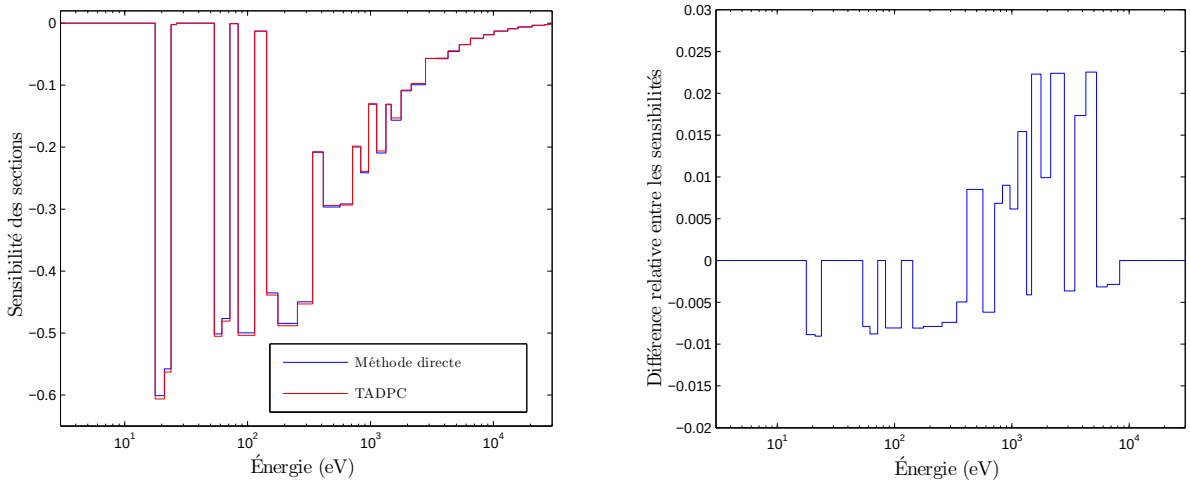

Figure 7.36 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative du Th232 (à gauche) à la densité du Th232. Différences relatives entre le calcul direct et la méthode TADPC, pour le module SHISBG: (à droite).

L'accord entre les deux méthodes de calcul est encore très bon, les écarts étant au maximum d'environ 2.5%.

7.4.2 Comparaison entre les anneaux de combustible

Les deux anneaux de tiges de combustible du système présenté ici ne contiennent pas les mêmes mélanges et il est donc intéressant de voir les différences entre les sensibilités obtenues pour chacun des anneaux. Tout d'abord, regardons la sensibilité à la densité de l'hydrogène dans le caloporteur, présentée à la figure 7.37.

Comme on peut le constater, la méthode d'autoprotection par équivalence de dilution utilisée dans ce travail ne peut pas vraiment calculer les différences de sensibilité entre les deux combustibles différents. En fait, la seule différence qui peut être mesurée est causée par la différence entre les densités de Th232 dans les deux mélanges. La dilution équivalente utilisée pour interpoler les sections efficaces est la même dans les deux cas puisqu'on doit considérer un seul mélange résonant pour les deux anneaux, sinon le fait que les deux mélanges ont des résonances au même endroit ne serait pas pris en compte. La méthode basée sur un modèle de sous-groupes peut, quand à elle, calculer des sensibilités différentes puisque la structure fine peut être calculée dans chacune des régions de façon indépendante, tout en prenant en compte le fait que le même isotope est présent dans plus d'un mélange.

On montre maintenant, à la figure 7.38, la sensibilité à la densité du Th232 dans l'anneau

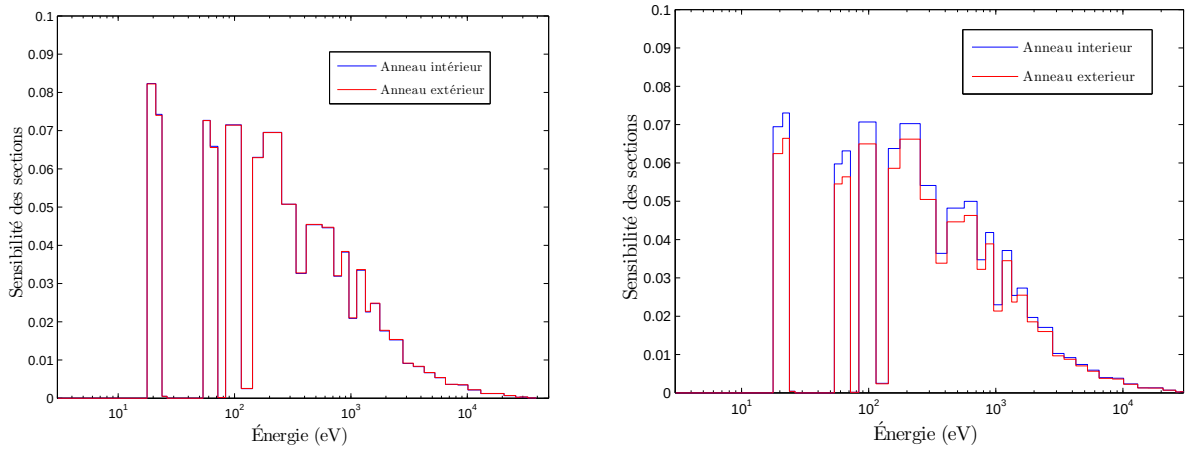

Figure 7.37 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative du Th232 à la densité d'hydrogène, pour les deux anneaux contenant les tiges de combustible, pour le module SHI: (à gauche) et le module SHISBG: (à droite).

intérieur, pour les sections efficaces de capture du Th232 dans chacune des tiges.

On remarque bien sûr que pour le module SHI:, comme la dilution macroscopique est en fait utilisée dans les calculs (et non la section macroscopique de l'isotope résonant), on ne peut pas estimer les effets de la variation de la densité du Th232 dans une tige sur les sections efficaces du Th232 dans une tige avec un autre mélange contenant du Th232. En fait, la raison pour laquelle on ne peut pas obtenir ces sensibilités est la même que celle expliquée dans la section 7.1.5, lorsqu'il était question des sensibilités des sections efficaces du Pu239 à la densité d'U238.

En utilisant un modèle de sous-groupes par contre, il devient assez facile de mesurer les effets de la densité du Th232 sur les sections efficaces du même isotope mais dans un mélange différent. On voit que les coefficients de sensibilité des sections efficaces du Th232 dans l'anneau extérieur, à la densité du Th232 dans l'anneau intérieur, sont beaucoup plus petits que ceux du Th232 dans le mélange dans lequel on varie la densité de Th232, sans toutefois être complètement négligeables (contrairement à ce qu'on trouve avec SHI:). On peut vérifier sur ce graphique une affirmation qui a été faite à de nombreuses reprises dans les sections précédentes : l'effet d'une densité d'un isotope lourd sur l'autoprotection est très local.

Dans le cas d'un isotope léger, son rôle dans l'autoprotection consiste à ralentir les neutrons, ce qui joue un rôle déterminant dans la distribution approximative de neutrons aux énergies résonantes (utilisée pour calculer les sections autoprotégées). Le rôle d'un isotope lourd dans l'autoprotection consiste à déterminer la position et l'amplitude des dépressions dans la

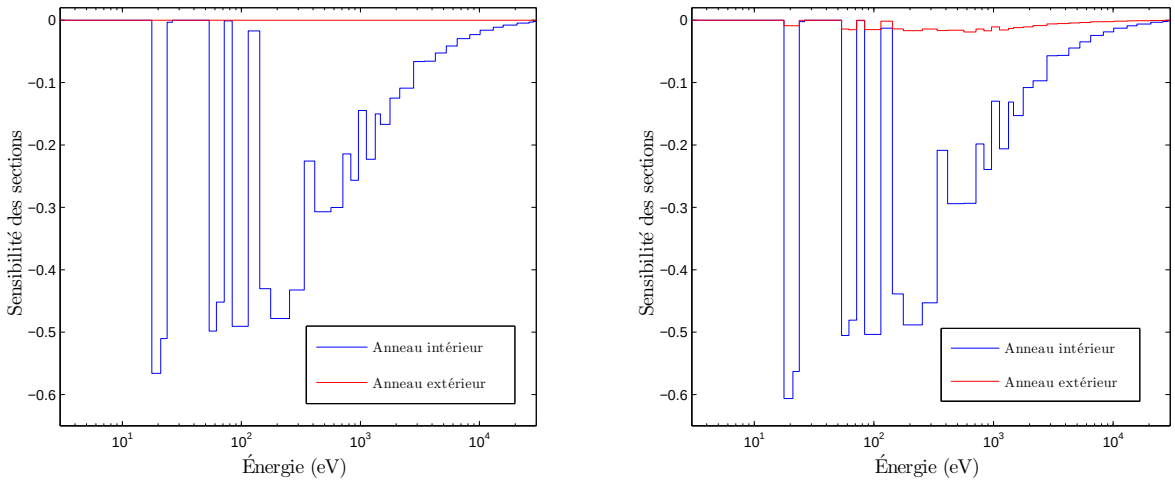

Figure 7.38 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative du Th232 à la densité de Th232 dans les tiges de combustible de l'anneau intérieur, pour les deux anneaux contenant les tiges de combustible, pour le module SHI: (à gauche) et le module SHISBG: (à droite).

distribution approximative de neutrons. L'effet des densités d'isotopes légers n'est pas local, puisque les neutrons ralentis interagissent dans d'autres régions, alors que pour les densités d'isotopes lourds l'effet est local puisque les dépressions dans la distribution neutronique locale ont moins d'effet sur les autres régions.

Précisons toutefois que les coefficients des sections efficaces du Th232 à la densité "d'un autre" Th232 sont de l'ordre de -0.01 à -0.02, ce qui n'est pas négligeable si on les compare avec les coefficients, par exemple, du Pu239 à la densité d'hydrogène (qui sont de l'ordre de 0.03 à 0.04).

7.4.3 Sensibilités explicite et implicite du k_{eff}

On présente ici les coefficients de sensibilité du k_{eff} aux différentes densités. On doit en fait considérer 5 densités différentes. Pour les isotopes légers, on a la densité du deuterium dans le modérateur, celle de l'hydrogène dans la caloporteur qui contient les tiges de combustible et celle de l'hydrogène dans le caloporteur au centre de la cellule. Pour les isotopes lourds, on a la densité du Th232 dans les tiges de combustible de l'anneau extérieur et celle du Th232 dans l'anneau intérieur. Les coefficients obtenus par des calculs directs sont présentés dans le tableau 7.19 pour la sensibilité aux isotopes légers et dans le tableau 7.20 pour les isotopes lourds.

Tout d'abord, les sections efficaces semblent ne montrer aucune sensibilité à la densité du

Tableau 7.19 Différents coefficients de sensibilité, à la densité d'isotopes légers, pour une cellule SCWR, calculs directs (valeurs de référence).

	Sensibilité à la densité d'H2 (modérateur)	Sensibilité à la densité d'H (calo. avec tige)	Sensibilité à la densité d'H (calo. au centre)
SHI:			
Total	0.06355	0.00659	-0.00659
Explicite	0.06355	0.00947	-0.00659
Implicite	~ 0	-0.00287	~ 0
SHISBG:			
Total	0.06375	0.00699	-0.00629
Explicite	0.06375	0.00955	-0.00629
Implicite	~ 0	-0.00264	~ 0

Tableau 7.20 Différents coefficients de sensibilité, à la densité d'isotopes lourds, pour une cellule SCWR, calculs directs (valeurs de référence).

	Sensibilité à la densité du Th232 (extérieur)	Sensibilité à la densité du Th232 (intérieur)
SHI:		
Total	-0.04236	-0.02910
Explicite	-0.05237	-0.03662
Implicite	0.00993	0.00745
SHISBG:		
Total	-0.04162	-0.02865
Explicite	-0.05249	-0.03696
Implicite	0.01079	0.00815

modérateur ou du caloporteur au centre de la cellule. Pour le modérateur, l'explication est la même que dans le cas d'un assemblage CANDU. Pour le caloporteur au milieu de l'assemblage, il se produit essentiellement la même chose que pour le modérateur. La cellule contient beaucoup d'eau (et d'hydrogène), et une variation sur la densité ne change pas beaucoup la distribution de neutron utilisée pour les calculs d'autoprotection puisque celle-ci est déjà très bien thermalisée par la grande quantité de caloporteur (qui est plus efficace que le modérateur pour le ralentissement des neutrons, car il contient de l'hydrogène, pas du deutérium).

Pour les sensibilités à la densité d'hydrogène dans le caloporteur qui contient les tiges, les coefficients explicite et total sont relativement faibles par rapport à ce qu'on obtient pour les

autres systèmes, mais la sensibilité implicite est quand même un peu plus élevée que pour un CANDU, possiblement à cause de l'utilisation de l'hydrogène au lieu du deuterium. Pour que la densité du caloporteur ait un effet non négligeable, il faut que certains neutrons soient assez ralentis pour interagir dans le combustible avant de sortir du caloporteur (si ils sortent, les neutrons vont probablement être presque parfaitement thermalisés avant de pouvoir revenir dans le combustible). L'hydrogène étant plus efficace pour ralentir les neutrons que le deuterium, on obtient donc une sensibilité implicite plus importante ici que pour un CANDU. Remarquons qu'ici les coefficients implicite et explicite sont de signe opposé, comme c'était le cas pour la cellule et l'assemblage REP.

Les sensibilités implicites obtenues par la méthode TADPC sont présentées dans le tableau 7.21. Les différentes contributions à la sensibilité implicite sont présentées dans le tableau 7.22, pour la sensibilité à la densité d'hydrogène dans le caloporteur.

Tableau 7.21 Différents coefficients de sensibilité pour une cellule SCWR, calculs basés sur le traitement analytique de l'équation de ralentissement basé sur les dérivées des probabilités de collision.

	Sensibilité à la densité d'H (calo. au centre)	Sensibilité à la densité du Th232 extérieur	Sensibilité à la densité du Th232 intérieur
SHI:			
Implicite	-0.00291	0.01004	0.00757
SHISBG:			
Implicite	-0.00252	0.01067	0.00806

Remarquons que même si les coefficients de sensibilité des sections efficaces sont essentiellement les mêmes pour les anneaux de combustible intérieur et extérieur, la contribution à la sensibilité implicite du k_{eff} est plus grande pour les tiges extérieures puisque le k_{eff} est plus sensible à ces sections efficaces (possiblement à cause du volume plus important de ces tiges). On peut aussi voir que même si individuellement les contributions des sections de capture et de fission du Pu239 sont relativement importantes (comparées à la contribution principale, celle du Th232), la combinaison des deux donne une contribution pratiquement négligeable.

On présente finalement les différentes contributions pour la sensibilité à la densité du Th232 dans les tiges de l'anneau intérieur dans le tableau 7.23, puis à la densité du Th232 dans les tiges de l'anneau extérieur dans le tableau 7.24.

Tableau 7.22 Contributions des différentes réactions à la sensibilité implicite du k_{eff} à la densité d'hydrogène, pour les deux modèles d'autoprotection.

	SHI: (intérieur)	SHI: (extérieur)	SHISBG: (intérieur)	SHISBG: (extérieur)
Pu239, $\sigma_{n,\gamma}$	-0.00035	-0.00035	-0.00022	-0.00025
Pu239, σ_f	0.00040	0.00040	0.00024	-0.00026
Pu240, $\sigma_{n,\gamma}$	-0.00017	-0.00018	-0.00009	-0.00010
Pu241, $\sigma_{n,\gamma}$	-0.00007	-0.00006	-0.00004	-0.00005
Pu241, σ_f	0.00010	0.00010	0.00006	0.00007
Pu242, $\sigma_{n,\gamma}$	-0.00002	-0.00002	-0.00002	-0.00002
Th232, $\sigma_{n,\gamma}$	-0.00109	-0.00145	-0.00106	-0.00130
Zr91, $\sigma_{n,\gamma}$ (isolant)	-0.00003		~ 0	
Zr91, $\sigma_{n,\gamma}$ (tube de pression)	-0.00011		~ 0	

Tableau 7.23 Contributions des différentes réactions à la sensibilité implicite du k_{eff} à la densité de Th232 dans les tiges de l'anneau intérieur, pour les deux modèles d'autoprotection.

	SHI: (intérieur)	SHI: (extérieur)	SHISBG: (intérieur)	SHISBG: (extérieur)
Pu239, $\sigma_{n,\gamma}$	~ 0	~ 0	-0.00030	-0.00003
Pu239, σ_f	~ 0	~ 0	0.00040	0.00004
Pu240, $\sigma_{n,\gamma}$	~ 0	~ 0	-0.00020	-0.00002
Pu241, $\sigma_{n,\gamma}$	~ 0	~ 0	-0.00004	~ 0
Pu241, σ_f	~ 0	~ 0	0.00007	0.00001
Pu242, $\sigma_{n,\gamma}$	~ 0	~ 0	-0.00002	~ 0
Th232, $\sigma_{n,\gamma}$	0.00760	~ 0	0.00784	0.00034
Th232, $\sigma_{s,0}$	-0.00002	~ 0	-0.00002	~ 0
Zr91, $\sigma_{n,\gamma}$ (isolant)	~ 0		~ 0	
Zr91, $\sigma_{n,\gamma}$ (tube de pression)	-0.00002		~ 0	

7.5 Comparaisons entre les différents systèmes

Dans cette section, on compare les sensibilités des isotopes qui se retrouvent dans plusieurs des systèmes étudiés. Comme on considère les mêmes isotopes, les différences observées sont uniquement causées par les géométries et compositions isotopiques des systèmes considérés. Autrement dit, on autoprotège exactement les mêmes résonances, et toute différence au niveau

Tableau 7.24 Contributions des différentes réactions à la sensibilité implicite du k_{eff} à la densité de Th232 dans les tiges de l'anneau extérieur, pour les deux modèles d'autoprotection.

	SHI: (intérieur)	SHI: (extérieur)	SHISBG: (intérieur)	SHISBG: (extérieur)
Pu239, $\sigma_{n,\gamma}$	~ 0	~ 0	-0.00003	-0.00031
Pu239, σ_f	~ 0	~ 0	0.00004	0.00041
Pu240, $\sigma_{n,\gamma}$	~ 0	~ 0	-0.00002	-0.00021
Pu241, $\sigma_{n,\gamma}$	~ 0	~ 0	~ 0	-0.00004
Pu241, σ_f	~ 0	~ 0	~ 0	0.00007
Pu242, $\sigma_{n,\gamma}$	~ 0	~ 0	~ 0	-0.00002
Th232, $\sigma_{n,\gamma}$	~ 0	0.01011	0.00030	0.01035
Th232, $\sigma_{s,0}$	~ 0	-0.00004	~ 0	-0.00005
Zr91, $\sigma_{n,\gamma}$ (isolant)	~ 0		~ 0	
Zr91, $\sigma_{n,\gamma}$ (tube de pression)	-0.00002		~ 0	

des sensibilités est causée par les différentes structures fines obtenues pour chacun des systèmes. On étudie ici deux isotopes, l'U238 (tige de MOX, REP, CANDU) et le Pu239 (tige de MOX, SCWR).

7.5.1 Uranium 238

L'U238 se retrouve dans trois systèmes différents. Les sensibilités obtenues pour chacun de ces systèmes n'est pas la même. Une comparaison est présentée à la figure 7.39, pour la sensibilité à la densité d'hydrogène, pour les deux méthodes d'autoprotection. Notons ici que quand il est question de sensibilité à la densité d'hydrogène ou de deuterium, on parle du caloporteur pour la cellule CANDU et du caloporteur qui contient les tiges de combustible pour la cellule SCWR.

On peut voir ici une tendance claire, c'est-à-dire que les sections de capture radiative de l'U238 sont plus sensibles à la densité d'hydrogène dans une simple tige de MOX que dans un assemblage REP. De plus, la sensibilité des sections efficaces de l'U238 est encore plus faible quand on considère la densité de deuterium dans un CANDU.

Pour ce qui est du CANDU, nous avons déjà expliqué que le fait d'avoir un spectre de neutrons très bien thermalisé réduit la sensibilité des sections efficaces puisqu'une variation de cette densité a relativement peu d'effet sur la distribution neutronique, qui est utilisée comme fonction poids pour pondérer les sections efficaces. De plus, le deuterium est moins efficace

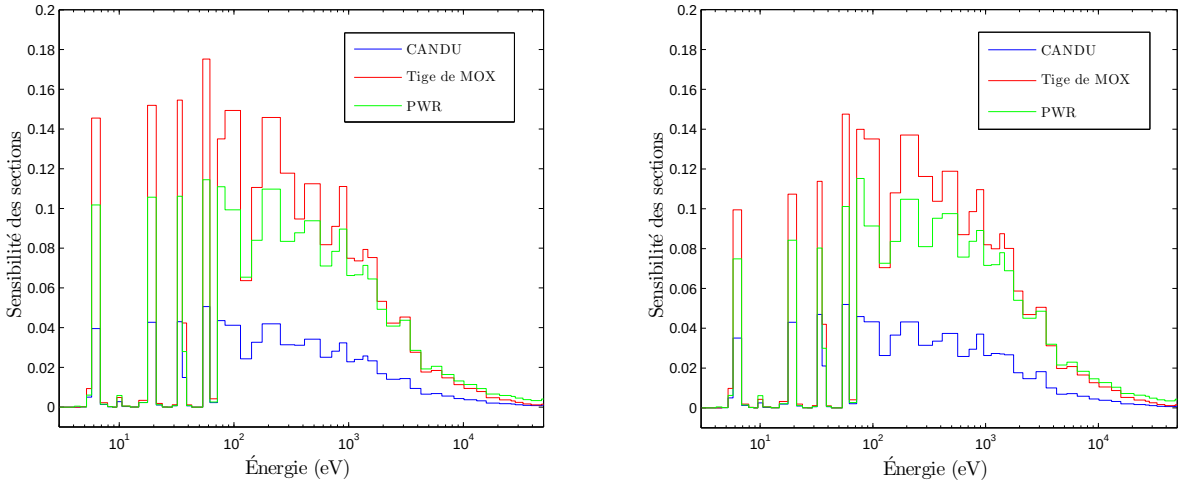

Figure 7.39 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative de l'U238 à la densité d'hydrogène ou de deuterium, pour différents systèmes, pour le module SHI: (à gauche) et le module SHISBG: (à droite).

que l'hydrogène pour ralentir les neutrons, et une augmentation de sa densité à donc un effet moins important (sur le ralentissement) qu'une augmentation équivalente de la densité d'hydrogène.

La différence entre une seule tige de MOX et un assemblage REP peut probablement être expliquée par la présence de trous d'eau dans l'assemblage REP, avec de l'eau ayant une densité différente de celle du modérateur/caloporteur et pour laquelle on ne considère pas les sensibilité. Ces trous d'eau jouent un rôle dans le ralentissement des neutrons ce qui peut diminuer l'importance du modérateur/caloporteur par rapport à la sensibilité des sections efficaces (comparé à une seule tige où le modérateur/caloporteur est responsable de presque tout le ralentissement des neutrons). La composition du combustible est aussi différente, comme on peut voir dans les tableaux 7.1 et 7.8.

Regardons maintenant les coefficients pour la sensibilité des sections efficaces de l'U238 à sa propre densité, présentés à la figure 7.40. Contrairement à la sensibilité des sections efficaces aux densités d'isotopes légers, il n'y a pas ici de tendance claire. En fait, les coefficients de sensibilités des sections efficaces de l'U238 à sa propre densité varient assez peu d'un système à l'autre. La seule légère tendance qu'on peut observer est que pour la majorité des groupes, la cellule CANDU présente des sensibilités légèrement inférieures à celles pour les deux autres systèmes.

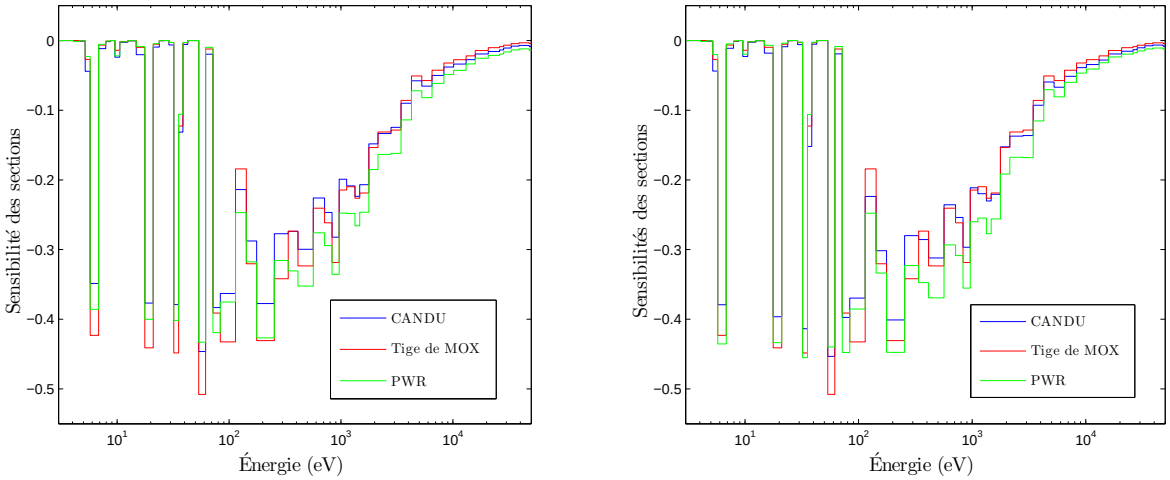

Figure 7.40 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative de l'U238 à la densité d'U238, pour différents systèmes, pour le module SHI: (à gauche) et le module SHISBG: (à droite).

7.5.2 Pu239

Les coefficients de sensibilité des sections de capture du Pu239, pour une tige de MOX et une cellule SCWR, sont présentés à la figure 7.41. Pour le SCWR, on considère le combustible dans une tige dans l'anneau intérieur.

On peut voir que comme déjà mentionné, les sensibilités montrées ici sont un peu plus faibles pour le module SHISBG: que pour SHI: (la comparaison n'est pas très rigoureuse pour l'assemblage SCWR, puisque pour SHI: on considère un seul mélange résonant alors que pour SHISBG: on considère chaque mélange de combustible individuellement). On peut aussi constater qu'il n'y a pas de tendance claire, pour certains groupes la sensibilité est plus grande pour le SCWR alors que pour d'autres les coefficients pour la cellule REP avec du MOX sont plus grands. Les mélanges isotopiques ne sont pas les mêmes (il y a de l'U238 dans la tige de MOX et du Th232 dans l'assemblage SCWR) dans les deux systèmes, ce qui peut expliquer les comportements différents des sensibilités, sans tendance identifiable.

7.6 Temps de calcul

Les méthodes présentées ici pour le calcul des coefficients de sensibilité ne sont utiles que si le temps d'exécution reste raisonnable. En fait, idéalement, l'exécution des modules d'autoprotection, incluant un calcul de coefficient de sensibilité, devrait être plus rapide qu'exécuter un calcul d'autoprotection standard deux fois de suite, ce qui est nécessaire pour obtenir les coefficients de sensibilité par un calcul direct. Les temps de calcul pour les méthodes développées

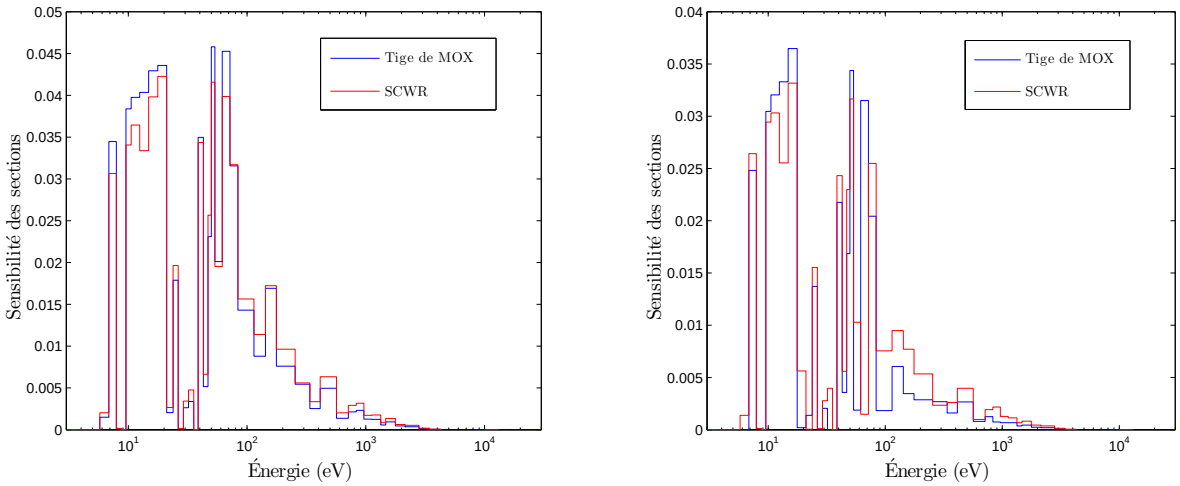

Figure 7.41 Coefficients de sensibilité pour la capture radiative du Pu239 à la densité d'hydrogène, pour différents systèmes, pour le module SHI: (à gauche) et le module SHISBG: (à droite).

dans cette thèse, ainsi que pour deux exécutions standards des modules d'autoprotection, sont donc présentés dans le tableau 7.25. On considère les sensibilités aux isotopes légers (hydrogène, deuterium).

Tableau 7.25 Comparaison entre les temps de calcul pour les différentes méthodes de calcul de coefficients de sensibilité, pour différents systèmes. Tous les temps sont en secondes, et les calculs sont fait pour la sensibilité à la densité de l'isotope léger.

	SHI:, calcul direct	SHI:, dérivées des PC	SHISBG:, calcul direct	SHISBG:, dérivées des PC
Tige de MOX	8.60	5.69	37.86	27.64
REP	773.60	768.33	1345.02	1382.44
CANDU	54.28	47.29	69.76	62.47
SCWR	329.18	321.69	1291.64	1086.30

Précisons tout d'abord que différents degrés de précision ont été utilisés pour les différents temps présentés dans le tableau. Pour un système donné toutefois, tous les calculs d'autoprotection se sont fait avec les mêmes paramètres, le but de cette section étant de comparer l'impact sur le temps de calcul des méthodes de calcul de sensibilité basées sur les dérivées des PC. Ainsi, il n'est pas vraiment pertinent de comparer les temps d'autoprotection de système différents. Par exemple, le temps présenté pour le REP correspond à un calcul d'autoprotection fait avec un *tracking* plus précis que pour le temps présenté pour le CANDU.

Aussi, pour le module SHISBG:, le temps nécessaire pour l'autoprotection varie en fonction du nombre d'isotope qu'on veut autoprotéger, ce qui n'est pas le cas pour SHI: (si tous les isotopes sont dans le même mélange résonant).

Le point important ici est de regarder les différences entre le temps pour un calcul direct et le temps pour un calcul basé sur les dérivées des PC. Pour une tige de MOX, les calculs basés sur les dérivées des PC sont significativement plus rapides que les calculs directs (de l'ordre de 25-30% plus rapide). Pour les autres systèmes, l'amélioration du temps de calcul n'est que d'environ 10% au mieux, et peut même être légèrement négative (i.e. le calcul basé sur les dérivées des PC est légèrement plus lent) pour un REP.

Pour comprendre le comportement du temps de calcul, il faut considérer les géométries des différents systèmes. Pour une simple tige de MOX, les probabilités de collision qu'on doit considérer, avant d'appliquer les conditions frontières, sont celles du combustible à lui-même, du combustible à la gaine, du combustible au modérateur ainsi que les probabilités similaires mais avec la gaine et le modérateur comme région initiale. Les probabilités gaine-gaine, combustible-gaine et combustible-combustible n'impliquent pas la densité de modérateur, et les dérivées de ces probabilités en fonction de cette densité sont donc nulles. Ainsi, une partie significative des dérivées n'ont pas besoin d'être calculées.

Par contre, pour les autres systèmes, qui sont des géométries plus complexes, la proportion des probabilités de collision pour lesquelles les dérivées sont nulles est beaucoup plus faible. Ainsi, dans ces cas, les dérivées de presque toutes les probabilités de collision doivent être calculées. Comme celles-ci prennent essentiellement le même temps à calculer que les probabilités elles-mêmes et considérant les quelques étapes de calculs supplémentaires nécessaires au calcul des dérivées des PC, on obtient donc des temps de calcul qui ne sont que légèrement plus petits que pour les calculs directs.

L'efficacité, en termes de temps de calcul, des méthodes développées dans cette thèse dépend donc de considérations géométriques associées aux systèmes étudiés. Dans les pires cas, il semble qu'un calcul basé sur ces méthodes prennent autant de temps qu'un calcul direct, alors que dans certaines circonstances on peut obtenir des résultats environ 30% plus rapidement. Notons toutefois que même quand il n'y a pas d'amélioration substantielle au niveau du temps de calcul, les méthodes basées sur le calcul des dérivées des PC et des autres quantités importantes pour l'autoprotection peuvent donner des résultats qui sont au final très précis, possiblement plus qu'un calcul direct où on approxime numériquement les dérivées, ce qui en soit peut être utile.

CHAPITRE 8 Conclusion

Les objectifs des travaux ayant mené à cette thèse étaient de développer des méthodes fiables pour calculer les sensibilités des sections efficaces résonantes aux densités isotopiques et les composantes implicites de la sensibilité du k_{eff} résultant de ces sensibilités. De plus, ces travaux portent aussi sur l'analyse de ces sensibilités pour différents systèmes dans le but de comprendre le rôle que les différents isotopes jouent dans les interactions entre les neutrons et les noyaux résonants, ce qui, dans les calculs déterministes, correspond aux calculs d'autoprotection des résonances.

Les objectifs ont été atteints avec succès et pour chacun des modèles d'autoprotection utilisés dans ce travail, une méthode par dilution équivalente et une méthode par sous-groupes, une méthode de calcul de sensibilité de sections efficaces autoprotégées à été développée, testée et utilisée pour plusieurs analyses sur différents systèmes. Les résultats présentés dans ce travail concernent 4 géométries différentes : une cellule REP avec du MOX, un assemblage REP typique, une cellule CANDU et une cellule SCWR canadien.

Avant de procéder à des analyses de sensibilité, les différents modèles d'autoprotection ont été analysés et comparés entre eux, ainsi qu'avec une condensation en énergie des sections efficaces résonantes faite avec le code Monte Carlo Serpent (pour obtenir l'équivalent Monte Carlo de sections autoprotégées). Cette analyse a montré que bien qu'il y ait une certaine constance entre les corrections aux sections efficaces apportées par les deux modèles d'autoprotection et l'équivalent pour Serpent, les deux méthodes déterministes ne donnent pas toujours des résultats parfaitement en accord avec Serpent. De plus, les deux méthodes peuvent aussi donner des écarts relativement élevés lorsqu'on les compare entre elles.

Aussi, dans le but d'extraire des coefficients de sensibilité des calculs Serpent, une analyse des fluctuations statistiques au niveau des sections efficaces condensées obtenues par Serpent a été réalisée. Cette analyse a permis de voir que les différences entre deux simulations Serpent avec les mêmes paramètres (donc exclusivement causées par les fluctuations statistiques) pouvaient, dans plusieurs cas, être de l'ordre des différences causées par une légère variation sur une densité isotopique. Ainsi, comme la méthode utilisée ici consiste à prendre des différences entre des sections efficaces perturbées et des sections efficaces de référence pour estimer les dérivées par rapport à une densité isotopique, Serpent n'est utilisé pour obtenir des valeurs de coefficients de sensibilité que quand les sensibilités en question sont importantes, de sorte que les différences sur les sections efficaces condensées causées par une variation de densité soient plus importantes que les fluctuations statistiques.

Plusieurs aspects des sensibilités de sections efficaces autoprotégées ont été considérés. Pour commencer, les coefficients obtenus avec les méthodes qui ont été présentées dans cette thèse, basées sur un traitement analytique de la dérivée de l'équation de ralentissement utilisant les dérivées des probabilités de collision, ont été comparés avec ceux obtenus par un calcul direct. Un calcul direct consiste à faire deux calculs d'autoprotection au complet, un avec une densité de référence, l'autre avec la densité perturbée, puis à utiliser les résultats pour estimer numériquement les dérivées des sections efficaces autoprotégées et ensuite les coefficients de sensibilité. Cette façon de faire, assez longue et basée sur des approximations numériques, permet d'obtenir des coefficients de sensibilité qu'on peut utiliser comme référence.

Les résultats trouvés avec les méthodes développées pour ce travail, au niveau des coefficients de sensibilité de sections efficaces, sont en très bon accord avec les valeurs de référence trouvées par un calcul direct. Pour la cellule avec du MOX, le système le plus simple étudié ici, les écarts entre les coefficients de référence et ceux obtenus par la méthode TADPC sont au maximum de 1%. Pour les autres systèmes, ceux-ci dépassent rarement 3% et sont bien souvent de l'ordre de 1%. Comme expliqué dans la thèse, cela signifie uniquement que les méthodes basées sur les dérivées des probabilités de collision sont en mesure de bien calculer les sensibilités de sections efficaces correspondant à un modèle d'autoprotection donné, ce qui n'implique pas nécessairement que ce sont les "vraies" sensibilités.

De façon générale, peu importe le système, il a été possible d'observer que les coefficients de sensibilité des sections efficaces autoprotégées aux densités d'isotopes légers (hydrogène ou deuterium) sont positifs alors que ceux pour la sensibilité aux densités d'isotopes lourds sont négatifs. Dans le cas d'une variation sur la densité d'un isotope léger (dans le modérateur), tous les isotopes résonants sont affectés, peu importe la méthode d'autoprotection, et le changement sur les sections efficaces a le même signe que celui de la variation sur la densité (coefficients positifs). Dans le cas d'un isotope lourd (dans le combustible), l'isotope dont les coefficients de sensibilité sont les plus importants est celui pour lequel on varie la densité. En fait, pour une méthode d'équivalence de dilution, tous les coefficients de sensibilité à la densité d'un isotope lourd, sauf ceux de l'isotope en question, sont pratiquement nuls. Pour une méthode par sous-groupes, les coefficients les plus importants sont ceux de l'isotope pour lequel on varie la densité et ceux des autres isotopes résonants sont significativement plus petits mais pas complètement négligeables dans certains cas.

De plus, il a aussi été question des facteurs SPH et de leur impact sur les sensibilités des sections efficaces. Pour les deux sensibilités (à la densité d'hydrogène et à la densité d'U238), inclure le facteur SPH diminue les coefficients de sensibilité. Notons que les coefficients pour la sensibilité à la densité d'hydrogène sont positifs et diminuent donc en valeur absolue alors

que ceux à la densité d'U238 sont négatifs et augmentent en valeur absolue. Cela implique que dans les deux cas l'augmentation de la densité d'un isotope diminue le facteur SPH.

Une comparaison entre les coefficients obtenus par chacune des méthodes (correspondant chacune à un modèle d'autoprotection) ainsi qu'avec ceux trouvés par Serpent a aussi été effectuée, du moins pour le système le plus simple étudié ici, une cellule de REP avec du MOX. Pour les autres systèmes, les coefficients n'ont pas été calculés avec Serpent mais on présente aussi une comparaison entre les sensibilités pour chacun des deux modèles d'autoprotection. L'accord entre les deux méthodes basées sur les dérivées des PC est en général relativement bon, mais on peut quand même observer, dans certains cas, des écarts de l'ordre de plusieurs dizaines de % entre les sensibilités calculées pour les deux méthodes. Les écarts les plus importants ont été observés pour la cellule REP avec du MOX, et pour les autres systèmes les écarts dépassent rarement 10 % et sont en général plus faibles.

Un aspect important de ce travail a aussi été de considérer les variations spatiales des sensibilités des sections efficaces. Les effets de l'autoprotection spatiale sur les sensibilités ont été considérés pour différentes positions dans une tige de combustible ainsi que pour différentes positions de tiges de combustible dans un assemblage. Nous avons observé que la sensibilité en fonction de la position radiale dans une tige de combustible avait un comportement très différent dépendamment de la sensibilité considérée. La sensibilité à la densité d'un isotope léger dans le modérateur est plus importante en périphérie de la tige qu'en son centre, alors que pour la sensibilité à la densité d'un isotope lourd, les coefficients sont, dans la majorité des cas, plus importants au centre de la tige qu'en périphérie. Toutefois, pour les énergies plus basses, la sensibilité à la densité d'un isotope résonant est plus importante en périphérie qu'au centre.

Nous avons aussi examiné le comportement de la sensibilité pour différentes positions des tiges de combustibles. Pour un assemblage REP, nous avons montré qu'un crayon de combustible près d'un trou d'eau est moins sensible à la densité d'un isotope dans le modérateur (mais pas dans l'eau du trou d'eau) qu'un crayon entouré uniquement d'autres crayons de combustible (sans trou d'eau). Ceci est dû au fait qu'un crayon de combustible à proximité d'un trou d'eau reçoit des neutrons mieux modérés qu'une tige entourées uniquement d'autres tiges de combustible. Pour la sensibilité à un noyau lourd, la position de la tige n'a pratiquement pas d'effet.

Finalement, les composantes explicite et implicite (reliée aux sensibilités des sections efficaces) de la sensibilité totale du k_{eff}, pour tous les systèmes, ont été calculées et analysées. Toutes les sensibilités, totale, explicite et implicite, ont été calculées par une méthode directe, utilisant un calcul de référence et un calcul perturbé. Les coefficients de sensibilité des sections efficaces

aux densités isotopiques, calculés avec les méthodes basées sur les dérivées des PC, ont aussi été combinés avec les coefficients de sensibilité du k_{eff} aux sections autoprotégées pour obtenir les coefficients de sensibilité implicite du k_{eff} aux densités isotopiques. De façon générale, l'accord entre les calculs directs et ceux basés sur les dérivées des PC est très bon, avec des écarts ne dépassant pas les 6-7% et en général de l'ordre de 1-2 %.

Les contributions de chaque réaction résonante pertinente à la sensibilité implicite du k_{eff} ont aussi été présentées. Pour tous les systèmes, il y a un isotope résonant, qui compose la majorité du combustible, qui est responsable d'une grande partie de la sensibilité implicite par sa section efficace de capture radiative. Dans le cas de tous les systèmes sauf pour le SCWR, il s'agit de l'U238. Pour le SCWR c'est plutôt le Th232 qui joue ce rôle. Des contributions beaucoup plus faibles mais non négligeables ont aussi été calculées pour le Zr91 présent dans les gaines et dans les tubes de pression, ainsi que pour l'isotope fissile principal, c'est-à-dire le Pu239 pour la cellule contenant du MOX et le SCWR et l'U235 pour l'assemblage REP (la cellule CANDU ne contient qu'un très petit pourcentage d'U235, qui ne contribue presque pas à la sensibilité implicite).

Somme toute, le présent travail a été un succès et plusieurs aspects importants des sensibilités de sections efficaces autoprotégées ont pu être observés avec les méthodes de calcul développées et présentées dans cette thèse. Plusieurs éléments de ce travail sont particulièrement innovateurs et les différentes analyses effectuées dans cette thèse ont permis d'améliorer la compréhension des effets des densités isotopiques sur les sections autoprotégées. D'abord, les différentes publications dans la littérature se concentrent en général sur les sensibilités aux sections multigroupes à dilution infinie pour propager les incertitudes expérimentales sur ces quantités. Assez peu de travaux se penchent sur les sensibilités des sections autoprotégées aux densités isotopiques.

De plus, les calculs de coefficients de sensibilité des sections autoprotégées utilisent en général des modèles d'autoprotection relativement simples, ce qui est parfois nécessaire pour traiter des sensibilités aux sections multigroupes à dilution infinie. Le traitement rigoureux des sensibilités pour des modèles d'autoprotection avancés, dont il est question dans ce travail, est donc très innovateur. Finalement, l'analyse de la variation spatiale des sensibilités des sections efficaces et les nombreuses discussions sur les comportements des sensibilités en fonction des densités considérées permettent de mieux comprendre la physique derrière le concept d'autoprotection ainsi que l'impact de différents isotopes sur les distributions neutroniques à l'équilibre.

Plusieurs améliorations sont possibles et les travaux menés ici ouvrent la porte au développement de plusieurs autres méthodes très intéressantes. D'abord, il serait intéressant de dévelop-

per une méthode de calcul de sensibilité basée sur la méthode de Nordheim appliquée à un modèle d'équivalence de dilution (disponible dans le module SHI:). Les calculs d'autoprotection basés sur une dilution permettent des interprétations intéressantes des résultats de sensibilité, notamment parce que le lien entre l'effet d'une variation de densité sur la dilution et l'effet sur les sections efficaces autoprotégées est relativement simple à comprendre. Il serait donc intéressant d'étendre ce qui a été développé ici à une méthode qui peut calculer le comportement spatial de la dilution.

Aussi, les interférences entre les résonances de différents isotopes est un aspect très intéressant et important des calculs d'autoprotection modernes. Les méthodes d'autoprotections présentées ici traitent les isotopes résonants un à la fois et ne prennent pas en compte les effets que deux résonances rapprochées (pour deux isotopes différents) ont une sur l'autre. Ceci n'est donc pas non plus pris en compte pour les calculs de sensibilité présentés ici. Il pourrait donc être très pertinent d'étudier comment la densité d'un isotope lourd affecte les sections efficaces d'un autre isotope lourd pour des groupes d'énergie où les deux isotopes ont des résonances à des énergies similaires. Une analyse similaire à ce qui est présenté dans cette thèse mais avec une discrétisation en énergie différente (par exemple avec 281 ou 315 groupes) pourrait aussi être intéressante puisque la largeur des groupes a certainement un impact sur les sensibilités des sections efficaces autoprotégées.

Pour terminer, il serait sans doute pertinent de comparer les résultats de sensibilité de sections efficaces avec des calculs de sensibilité Monte Carlo plus sophistiqués que ce qui est fait ici. Comme mentionné à plusieurs reprises, la méthode employée ici pour calculer les coefficients de sensibilité avec Serpent est assez rudimentaire et est très sensible aux fluctuations statistiques du calcul Monte Carlo. Des méthodes de calcul de sensibilité Monte Carlo plus complexes et fiables sont en développement et il serait donc intéressant d'utiliser de telles méthodes pour faire une validation exhaustive des méthodes de calculs de sensibilité déterministes.

RÉFÉRENCES

COURAU, T. et MARLEAU, G. (2000). Calculating adjoint fluxes in the code DRAGON using the collision probability method. PHYSOR 2000, Pittsburgh, PA.

COURAU, T. et MARLEAU, G. (2003). Perturbation theory for lattice cell calculations. *Nuclear Science and Engineering*, *143*, 19–32.

DION, M. et MARLEAU, G. (2013). Resonance self-shielding effects on eigenvalue sensitivity. M&C 2013, Sun Valley, Idaho.

DION, M. et MARLEAU, G. (2014). A collision probability based method to compute cross sections sensitivities for the subgroup self-shielding technique. PHYSOR 2014, Kyoto, Japan.

DION, M. et MARLEAU, G. (2015). Eigenvalue implicit sensitivity to self-shielding calculations in heterogeneous geometries. *Nuclear Science and Engineering*, *179*, 186–198.

ENDO, T., YAMAMOTO, A. et SAKATA, K. (2014). Theoretical prediction on underestimation of statistical uncertainty for fission rate tally in Monte Carlo calculation. PHYSOR 2014, Kyoto, Japan.

FAVORITE, J. A. et ARMSTRONG, J. C. (2013). Uncertainty analysis of densities and isotopics : Handling correlations. M&C 2013, Sun Valley, Idaho.

GELBARD, E. M. (1989). Refinements in the computation of collision probability. M&C 1989, Knoxville, Tennessee.

HÉBERT, A. (2004). Revisiting the Stamm'ler self-shielding method. Annual Canadian Nuclear Society conference, Toronto, Ontario.

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

HEBERT, A. et COSTE, M. (2002). Computing moment-based probability tables for self-shielding calculations in lattice codes. *Nuclear Science and Engineering*, *142*, 245–257.

HÉBERT, A. et MARLEAU, G. (1991). Generalization of the Stamm'ler method for the self-shielding of resonant isotopes in arbitrary geometries. *Nuclear Science and Engineering*, *108*, 230–239.

HERMAN, B. R. *ET AL.* (2014). Analysis of tally correlation in large light water reactors. PHYSOR 2014, Kyoto, Japan.

IVANOVA, T. *ET AL.* (2012). Benchmark on sensitivity calculation (phase 3). PHYSOR 2012, Knoxville, TN.

KALTIAISENAHO, T. et LEPPÄNEN, J. (2014). Analysing the statistics of group constants generated by Serpent 2 Monte Carlo code. PHYSOR 2014, Kyoto, Japan.

KIEDROWSKI, B. C. et BROWN, F. B. (2013). Methodology, verification and performance of continuous-energy nuclear data sensitivity capability in MCNP. M&C 2013, Sun Valley, Idaho.

LAVILLE, C. (2011). *Étude de différentes méthodes de calculs de coefficients de sensibilités du keff aux données nucléaires*. Mémoire de maîtrise, École Polytechnique de Montréal.

LEPPÄNEN, J. (2012). Serpent - a continuous-energy Monte Carlo reactor physics burnup calculation code. Rapport technique, VVT Technical Research Center of Finland.

LIVOLANT, M. et JEANPIERRE, F. (1974). Autoprotection des résonances dans les réacteurs nucléaires. application aux isotopes lourds. Rapport technique CEA-R-4533, Commissariat à l'Énergie Atomique.

MACFARLANE, R. E. et BOICOURT, M. (1975). NJOY, a neutron and photon processing system. *Trans. Am. Nucl. Soc.*, *22*, 720.

MARLEAU, G. (2001). DRAGON theory manual, part 1 : Collision probability calculations. Rapport technique IGE-236 R1, École Polytechnique de Montréal.

MARLEAU, G., HÉBERT, A. et ROY, R. (2012). A user guide for DRAGON 3.06. Rapport technique IGE-174 R10, École Polytechnique de Montréal.

PARK, H. J., CHO, J. Y. et SONG, J. S. (2014). Monte Carlo perturbation method for geometrical uncertainty analysis using McCARD. PHYSOR 2014, Kyoto, Japan.

PERFETTI, C. M. et REARDEN, B. T. (2014). Continuous-energy Monte Carlo methods for calculating generalized response sensitivities using TSUNAMI-3D. PHYSOR 2014, Kyoto, Japan.

PERFETTI, C. M. *ET AL.* (2012). Development of continuous-energy eigenvalue sensitivity coefficient calculation methods in the Shift Monte Carlo code. PHYSOR 2012, Knoxville, Tennessee.

PUSA, M. (2014). Adjoint-based sensitivity and uncertainty analysis of lattice physics calculations with CASMO-4. PHYSOR 2014, Kyoto, Japan.

REARDEN, B. *ET AL.* (2005). Advances in TSUNAMI sensitivity and uncertainty analysis codes beyond SCALE-5. *Trans. ANS*, *92*, 760.

REARDEN, B. T. *ET AL.* (2014). Enhancements in continuous-energy Monte Carlo capabilities for SCALE 6.2. PHYSOR 2014, Kyoto, Japan.

SABOURI, P. (2014). *Application of Perturbation Theory Methods to Nuclear Data Uncertainty Propagation using the Collision Probability Method*. Thèse de doctorat, Université de Grenoble.

SANTAMARINA, A. *ET AL.* (2014). Nuclear data uncertainty propagation on power maps in large LWR cores. PHYSOR 2014, Kyoto, Japan.

SCALE (2009). SCALE : a modular code system for performing standardized computer analysis for licensing evaluation. Rapport technique ORNL/TM-2005/39, Radiation Safety Information Computational Center at Oak Ridge National Laboratory.

TAKEDA, T. *ET AL.* (2014). Sensitivity and uncertainty calculations methods of neutronics parameters in PWR cores part I : Theory and snesitivity calculations. PHYSOR 2014, Kyoto, Japan.

WILLIAMS, M. L. (1986). *CRC Handbook of Nuclear Reactor Calculations*. Boca Raton.

WILLIAMS, M. L. (2007). Sensitivity and uncertainty analysis for eigenvalue-difference responses. *Nuclear Science and Engineering*, *155*, 18–36.

WILLIAMS, M. L. et BROADHEAD, B. L. (2001). Eigenvalue sensitivity theory for resonance-shielded cross sections. *Nuclear Science and Engineering*, *138*, 177–191.

WU, Z., KENNEDY, C. et ABDEL-KHALIK, H. (2012). Application of GPT-free method to sensitivity analysis in Monte Carlo. *Trans. Am. Nucl. Soc.*, *106*, 763.