Université de Provence

Aix-Marseille I

THESE

présentée pour obtenir le grade de

Docteur de l'université d'Aix-Marseille I

Mention : Science

Formation doctorale : Physique et Modélisation des Systèmes Complexes

PAR

Christophe MATTERA

Développement et qualification expérimentale du nouveau Formulaire de Sûreté-Criticité CRISTAL.

(Soutenue le : 10 NOVEMBRE 1998 devant la Commission d'examen)

M. BOYER	**Président**
M. MATHONNIERE	**Directeur de thèse**
M. NIMAL	**Rapporteur**
M. LEJEUNE	**Rapporteur**
M. SANTAMARINA	**Responsable de thèse**
M. REUSS	**Membre du jury**
M. SARTORI	**Membre du jury**

A Florence, ma femme,

A mes parents et toute ma famille.

REMERCIEMENTS

Monsieur G. MATHONNIERE, Chef du Laboratoire d'Etudes Neutroniques des Réacteurs du CEA Saclay, a accepté de diriger ce travail de thèse. Je tiens à le remercier vivement pour l'intérêt constant qu'il a porté à mes travaux.

Qu'il me soit permis d'exprimer à Monsieur le Professeur X ma reconnaissance pour avoir accepté de présider le jury de cette thèse.

Je tiens à exprimer ma gratitude à Messieurs E. SARTORI et P. REUSS pour m'avoir fait l'honneur de s'intéresser à ce travail et à Monsieur J.C. NIMAL pour avoir accepté d'en être rapporteur.

Cette thèse s'est déroulée dans le cadre d'un contrat cofinancé par le CEA et la COGEMA.
Je remercie Monsieur A. ZAETTA, Chef du Service de Physique des Réacteurs et du Cycle au CEA ainsi que Monsieur J.P GROUILLER, Chef du Laboratoire d'Etudes du Cycle pour leur accueil et leur soutien au cours de ces trois années.

Monsieur A. SANTAMARINA m'a fait profiter de sa grande expérience dans la recherche et a contribué par son appui technique à l'aboutissement de ce travail. Je lui témoigne ici toute ma reconnaissance pour l'aide qu'il m'a apportée et pour l'enthousiasme qu'il a manifesté à l'égard de ce travail.

Mademoiselle B. ROQUE a apporté un suivi et un intérêt constant à cette thèse ; ses connaissances de neutronique et les outils de calculs associés ainsi que ses conseils et ses corrections du manuscrit m'ont grandement aidé. Je désire tout particulièrement la remercier.

Que Monsieur E. LEJEUNE, Chef de la Section Protection, Criticité à SGN, trouve ici à plusieurs titres l'expression de ma profonde reconnaissance : d'une part, pour avoir manifesté un grand intérêt à ce travail, d'autre part pour avoir accepté de faire partie de la commission d'examen.

Je remercie également Messieurs M. TARNERO et C. HEULIN de COGEMA et Monsieur I. LEBARS de SGN d'avoir suivi avec attention cette thèse.

Qu'il me soit permis, enfin, d'adresser mes plus vifs remerciements à tout le personnel du SPRC pour son aide et son soutien moral.

RESUME

Cette thèse s'inscrit dans le cadre des études neutroniques de Sûreté-Criticité du cycle du combustible nucléaire français.
Nous présentons tout d'abord la spécificité de ces études par rapport à celles entreprises en physique des réacteurs ainsi que leurs champs d'application.
Afin de répondre aux besoins futurs du programme nucléaire français, un nouveau formulaire CRISTAL a été développé avec une bibliothèque de sections efficaces récente (CEA93) et des outils de calcul modernes (APOLLO2, MORET4, TRIPOLI4). Il comporte deux voies : une voie simplifiée dite "standard" qui sera utilisée par les industriels, l'autre de référence dite "étalon".
Pour transmettre ce formulaire à l'industrie, nous avons élaboré des schémas de calcul pour les solutions fissiles, les milieux dissolveurs, les châteaux de transport et les piscines de stockage. Ces schémas ont ensuite été utilisés pour la qualification expérimentale du formulaire CRISTAL.
Nous avons également contribué à la base de données expérimentales de ce formulaire, en réévaluant une expérience française représentative des milieux piscines de stockage : l'expérience CRISTO II. Cette réévaluation a par ailleurs été soumise au groupe de travail de l'OCDE afin qu'elle puisse être utilisée au niveau international pour la qualification de différents outils de calcul de criticité.
Le travail réalisé ici représente donc une forte contribution au développement du nouveau formulaire CRISTAL en terme de recommandations de schémas de calcul et de qualification expérimentale pour différents milieux de la criticité. Ceci a parfaitement répondu aux attentes des industriels.

ABSTRACT

This thesis is concerned with Criticality-Safety studies related to the French Nuclear Fuel Cycle.
We first describe the steps in the nuclear fuel cycle and the specific characteristics of these studies compared with those performed in Reactor Physics.
In order to respond to the future requirements of the French Nuclear Program, we have developed a new package CRISTAL based on a recent cross sections library (CEA93) and the newest accurate codes (APOLLO2, MORET4, TRIPOLI4). The CRISTAL system includes two calculations routes : a design route which will be used by French Industry (COGEMA/SGN) and a reference route.
To transfer this package to the French industry, we have elaborated calculation schemes for fissile solutions, dissolver media, transport casks and storage pools. Afterwards, these schemes have been used for the CRISTAL experimental validation.
We have also contributed to the CRISTAL experimental database by revaluating a French storage pool experiment : the CRISTO II experiment. This revaluation has been submitted to the OCDE working group in order that this experiment can be used by international criticality safety engineers to validate calculations methods.
This work represents a large contribution to the recommendation of accurate calculation schemes and to the experimental validation of the CRISTAL package. These studies came up to the French Industry expectations.

TABLE DES MATIERES

INTRODUCTION 13

CHAPITRE 1 : GENERALITES SUR LES ETUDES DE SURETE-CRITICITE 17

I. But des études de Sûreté-Criticité 17

II. Le champ d'application des études de Sûreté-Criticité 20

III. Les partenaires associés aux études de Sûreté-Criticité 23

CHAPITRE 2 : LES METHODES DE RESOLUTION DE L'EQUATION DU TRANSPORT DANS LES ETUDES DE SURETE-CRITICITE 25

I. Etablissement de l'équation du transport des neutrons 25

1. Forme intégrale 26

2. Forme intégro-différentielle 29

3. Propriétés de l'équation de Boltzmann dans les études de Sûreté-Criticité 30

II. Principe des méthodes utilisées dans les études de Sûreté-Criticité pour la résolution de l'équation du transport 31

1. Les méthodes déterministes 32

2. La méthode de Monte-Carlo 44

CHAPITRE 3 : LE FORMULAIRE DE CALCUL DE SURETE-CRITICITE : CRISTAL 47

I. Présentation du formulaire CRISTAL 47

II. Les outils de calcul du formulaire CRISTAL 49

1. Les données nucléaires de base 49

2. Le code APOLLO2 50

3. Le code MORET4 51

4. Le code TRIPOLI4 52

5. L'Interface Homme/Machine (IHM) 53

6. DARWIN 53

III. Les étapes de développement et qualification du formulaire CRISTAL 53

CHAPITRE 4 : LA BASE DE DONNEES EXPERIMENTALES DU FORMULAIRE CRISTAL 55

I. Sélection d'expériences pour la qualification du formulaire de criticité 56

1. Expériences de type "dissolveurs" 56

2. Expériences représentatives des milieux solutions fissiles 57

3. Les expériences de stockage en piscine 60

4. Les benchmarks théoriques des milieux dissolveurs 65

II. Contribution à la base de données expérimentales du Formulaire CRISTAL 67

1. Le projet ICSBEP 68

2. La réévaluation de l'expérience CRISTO II 69

CHAPITRE 5 : OPTIMISATION DU FORMULAIRE CRISTAL 81

I. Les procédures de calcul APOLLO2-Pij 81

1. Les sections efficaces multigroupes 81

2. Prise en compte des liaisons cristallines dans l'élargissement Doppler 82

3. L'Autoprotection 86

4. La géométrie 106

5. Le maillage de condensation énergétique 108

6. La stratégie d'homogénéisation et de condensation 111

II. Les procédures de calcul S_N 122

1. Méthode de résolution de l'équation du transport par la méthode S_N 122

2. Traitement de l'anisotropie du choc 124

3. Quadrature angulaire 126

4. Maillage spatial 127

CHAPITRE 6 : QUALIFICATION EXPERIMENTALE DU FORMULAIRE CRISTAL 129

I. Qualification des milieux dissolveurs 129

II. Qualification des milieux solutions 130

1. Les expériences VALDUC "PU-SOL-THERM-012" 130

2. Les expériences PNL-CML 133

3. Conclusions 137

III. Qualification des milieux piscines de stockage et châteaux de transport 137
1. L'expérience CRISTO II 137
2. Les expériences VALDUC 140

CONCLUSION 143

REFERENCES 147

Annexe A - Traitement de l'anisotropie du choc 159

Annexe B - Approche sous-critique 163

Annexe C - Transposition des mesures expérimentales
coeur nourricier → milieu infini 165

FIGURES 169

INTRODUCTION

Face à la progression dramatique de la pollution de l'air (effet de serre) et du sol par des substances toxiques provenant de la combustion du pétrole, de charbon et de gaz, l'énergie nucléaire respecte largement nos exigences en matière de sécurité et de compatibilité avec l'environnement. C'est actuellement le moyen le plus efficace pour produire de l'énergie : une centrale nucléaire classique produit avec 50 tonnes d'uranium 7 milliards de kWh en une année ; pour produire la même quantité d'électricité il faudrait brûler 1.5 million de tonnes d'huile lourde ou 2 millions de tonnes de charbon**[1]**.
Durant ces 30 dernières années, l'énergie nucléaire est donc devenue le pilier de l'approvisionnement électrique : elle couvre en effet déjà entre 30% et 85% des besoins en électricité des pays industrialisés.

Avec l'émergence des centrales nucléaires, les études liées au cycle du combustible nucléaire se sont intensifiées. Parmi celles-ci, les études de Sûreté-Criticité ont une place importante et couvrent la quasi totalité du cycle, de l'usine de fabrication à l'usine de retraitement du combustible en passant par les transports de matières fissiles.

Dans la mesure où elle met en oeuvre de la matière dite fissile, toute l'industrie nucléaire est préoccupée entre autres par le problème de la réaction en chaîne de fission. Cette réaction est basée sur deux principes qui se complètent :

- lors de la fission (cassure en deux morceaux) d'un noyau lourd, une quantité considérable d'énergie est obtenue ainsi que quelques neutrons à l'état libre, en moyenne deux et demi ;
- le neutron s'avère être, grâce à ses propriétés nucléaires, un projectile tout à fait adéquat pour briser les noyaux lourds les plus "fragiles" comme l'isotope 235 de l'uranium.

Si l'on parvient à limiter les pertes de neutrons (captures stériles, fuites hors du système) afin d'utiliser au moins l'un des deux neutrons et demi émis à chaque fission pour provoquer une nouvelle fission, la réaction en chaîne pourra se maintenir. Le problème principal de la neutronique se trouve là : calculer le nombre de fissions induites, en moyenne, par les neutrons émis lors d'une fission.
Contrairement aux études de la neutronique "classique" qui s'intéressent avant tout aux réacteurs, les études de Sûreté-Criticité ne recherchent pas la condition critique (lorsque le

nombre de neutrons émis par fissions est très exactement égal au nombre de neutrons disparaissant par absorptions et par fuites), mais l'évite. Et, traditionnellement, les risques de divergence intempestive des réacteurs sont traités, par les spécialistes de la sûreté, avec les autres accidents susceptibles de les concerner ; le "criticien" s'intéresse aussi aux risques de criticité mais essentiellement dans les installations du cycle du combustible nucléaire : enrichissement, fabrication, entreposages, retraitement, transport, stockage... Même si les conditions physiques et géométriques considérées par le "criticien" sont souvent assez différentes de celles des réacteurs, les problèmes de neutronique sont, fondamentalement, les mêmes.

Pour maîtriser le risque de la réaction en chaîne, les spécialistes en criticité d'une part, en physique des réacteurs d'autre part, mettent en oeuvre des outils de calcul capables de traiter l'équation régissant la population neutronique (Equation de Boltzmann). Ces outils sont développés au Commissariat à L'Energie Atomique (CEA) et utilisent des données nucléaires de base commune. Néanmoins, les besoins des uns et des autres étant parfois légèrement différents, aucun système français unifié et commun n'était disponible à ce jour. Le CEA a donc proposé d'unir tous ces efforts dans le développement du futur formulaire CRISTAL destiné aux études neutroniques de Sûreté-Criticité[2].
C'est dans ce cadre général que s'inscrit cette présente thèse.

Le travail présenté ici a pour objectif le développement du nouveau formulaire CRISTAL destiné aux études de Sûreté-Criticité. Mais quels sont le but et les caractéristiques de telles études ? C'est ce que nous décrirons dans le premier chapitre. Nous montrerons aussi leurs spécificités par rapport à celles concernant la physique des réacteurs.
Pour calculer un système contenant de la matière fissile, il faut disposer de méthodes numériques permettant de résoudre l'équation du transport des neutrons. Dans la criticité, nous utilisons aussi bien des méthodes déterministes que des méthodes statistiques. Leur principe est présenté dans le second chapitre.
Afin d'exploiter les performances de chacune des méthodes, le criticien se sert d'un formulaire : c'est un ensemble cohérent d'outils de calcul et de bibliothèques. Le formulaire CRISTAL décrit dans le chapitre 3, s'appuie sur des codes de neutronique de nouvelle génération et sur une bande de données nucléaires de qualité.

Tout formulaire de calcul qualifié s'appuie sur une base de données expérimentales qui est établie de façon à être aussi représentative que possible des problèmes que traite le formulaire. Dans le cadre de CRISTAL, cette base est donc constituée d'expériences modélisant des configurations fréquemment rencontrées dans les usines du cycle.

Afin d'enrichir cette base, nous avons réévalué une expérience française "CRISTO II", ce qui permettra de compléter la qualification du formulaire pour les milieux "piscines de stockage".

La base de données expérimentales de CRISTAL ainsi que ce travail font l'objet du chapitre 4.

Dans le domaine des études de criticité, les milieux physico-chimiques, les spectres, les géométries, les matériaux diffèrent fondamentalement de ceux traités dans le cadre de la physique des réacteurs. Ainsi des schémas de calcul très précis s'inscrivant dans la voie 'standard' de CRISTAL sont élaborés pour chacun des milieux propres à la Sûreté-Criticité. Ils sont présentés dans la cinquième partie de cette thèse.

Pour être transmis aux industriels, le formulaire CRISTAL doit être qualifié à partir d'expériences représentatives des installations du cycle du combustible nucléaire. Ces études, décrites dans le dernier chapitre, vont permettre d'une part de s'assurer de la capacité de CRISTAL à traiter de telles configurations et d'autre part de déterminer l'écart Calcul/Expérience pour chacun des milieux.

CHAPITRE 1
GENERALITES SUR LES ETUDES DE SURETE-CRITICITE

I. But des études de Sûreté-Criticité

Toute l'industrie de l'énergie nucléaire est basée sur le principe de la fission nucléaire. Lorsqu'un neutron fissionne un noyau d'uranium ou plutonium, il y a production d'énergie et de neutrons, mais aussi associé à la réaction des produits de fission, différents rayonnements.

Les réacteurs nucléaires mettent à profit ces réactions de fission pour produire de l'énergie, en contrôlant la réaction en chaîne, en protégeant contre les rayonnements et en confinant les produits de fission radioactifs.

De même, dans les opérations du cycle du combustible nucléaire, les moyens de contrôle, de protection et de confinement sont conçus et dimensionnés pour prévenir et maîtriser tout risque potentiel. Ainsi, dans le cycle du combustible, l'accident de criticité, résultant du déclenchement de la réaction de fission en chaîne incontrôlée, est l'un des principaux risques rencontrés.

Depuis l'origine de l'énergie nucléaire, 8 accidents de ce type sont connus dans le monde occidental**[3]** (7 aux Etats-Unis, 1 en Grande-Bretagne) et deux décès associés. Le risque de criticité est, certes, réel, mais il est convenablement "géré". De plus l'énergie libérée au cours d'une divergence intempestive d'un accident de criticité reste faible puisque les contre-réactions (dilatation, ébullition, évaporation, radiolyse de l'eau...) interviennent toujours rapidement ; ce sont plutôt les doses libérées (en neutrons et en gammas) qui constituent le vrai risque**[4]**.

Le but des études de Sûreté-Criticité est donc défini comme "**la prévention ou l'arrêt d'une réaction en chaîne incontrôlée**".

En pratique, le premier concept - la prévention - est de loin l'objectif principal. Il consiste à s'assurer que le système étudié est maintenu dans un état sous-critique, c'est à dire que le rapport entre le nombre de neutrons produits par fission et le nombre de neutrons perdus par

fuite ou absorption, appelé facteur de multiplication effectif "K_{eff}", soit inférieur à un, quels que soient les dysfonctionnements qui pourraient survenir.

Ainsi le rôle du criticien est de garantir l'état sous-critique, soit en limitant la production de neutrons par fissions, soit en favorisant leur fuite hors du milieu, soit encore en les capturant à l'aide de noyaux dits "poisons".

La prévention concerne donc chacun des trois termes :

- la *production* de neutrons de fission sera faible si la masse ou/et l'enrichissement de matière fissile sont réduits,
- la *capture* de neutrons est effectuée en introduisant des poisons neutroniques tels que le bore, gadolinium, cadmium, etc.,
- les *fuites* de neutrons sont favorisées par des récipients aux formes "élancées" avec un grand rapport surface/volume.

Ces trois modes de prévention sont directement exploitables par le criticien pour rendre un système contenant de la matière fissile sous-critique.

Cependant de nombreux autres facteurs plus difficilement maniables par le criticien influent sur l'état d'un système. Ces paramètres sont décrits dans les paragraphes suivants.

La modération consiste à introduire un modérateur (eau, graphite ...) dans le système et favoriser, par ralentissement des neutrons, les réactions de fission (la section efficace de fission de l'uranium 235 est importante à faible énergie) mais aussi les réactions de captures. En fait, seul un bilan neutronique exact permet de conclure sur l'état du système.

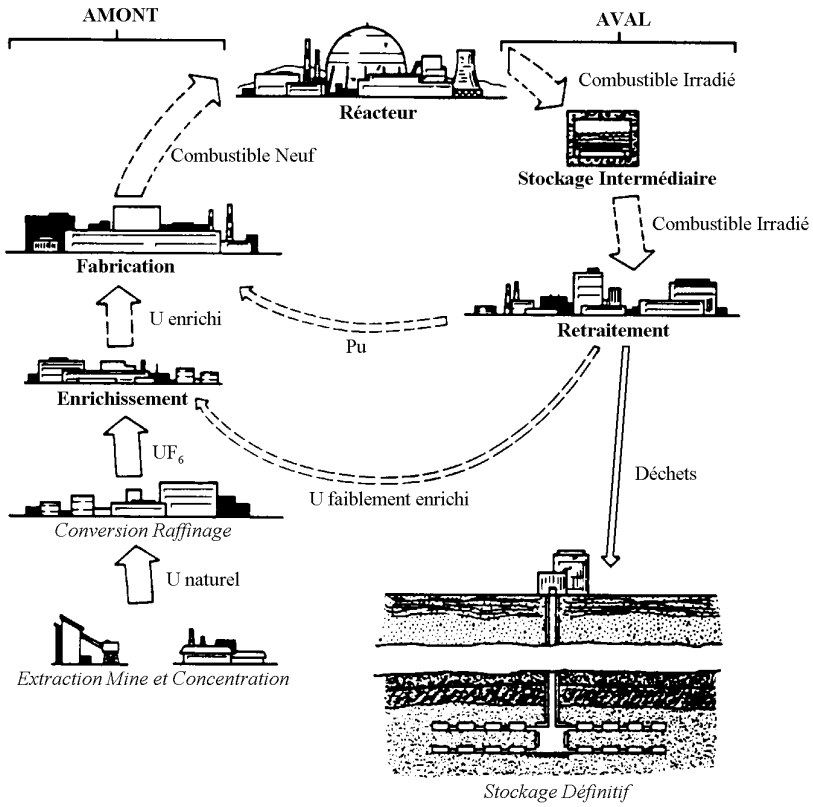
La densité d'un milieu est inversement proportionnelle au libre parcours moyen des neutrons λ_t ($\lambda_t = 1/N\sigma_t$, avec N concentration du milieu en atomes par cm^3 et σ_t section efficace totale du milieu). La probabilité d'un neutron de s'échapper est donc plus grande dans un milieu moins dense. L'utilisation de ce paramètre pour le contrôle de la réactivité est, cependant, délicat étant donné que l'on ne peut pas le dissocier du facteur de modération. En effet, diluer une solution revient à diminuer la concentration en noyaux fissiles mais revient également à augmenter la modération. Dans ces cas bien particuliers, on utilise des lois de dilution du type $N = \frac{No}{1 + a\frac{H}{X}}$ liant la concentration N au rapport de modération $\frac{H}{X}$, rapport du nombre d'atomes d'hydrogène au nombre d'atomes de noyaux fissiles dans la même unité de volume.

La réflexion est la propriété qu'ont certains milieux (eau, plomb, béton...) à renvoyer une partie des neutrons d'un système fissile qu'ils entourent et ainsi de diminuer les fuites. Il faudrait donc les éviter si on veut favoriser la sous-criticité mais il est en fait impossible de les ignorer dans les études de Sûreté-Criticité étant donné qu'il peut y avoir réflexion partielle sur un récipient, par exemple par un mur ou une personne s'approchant du récipient.
On dit qu'il y a interaction entre deux milieux lorsqu'il peut y avoir échange de neutrons entre ces deux milieux. Ce couplage neutronique augmente donc la réactivité d'un système, il ne peut pas être utilisé par le criticien pour diminuer la réactivité d'un milieu.

En France, l'analyse du risque de criticité dans les installations nucléaires de base autres que les réacteurs nucléaires s'appuie sur la règle fondamentale I.3.c édictée en 1984 par le Service central de Sûreté des Installations Nucléaires[5], qui concerne à la fois la conception et le dimensionnement des installations, l'exploitation et la formation du personnel.
D'après cette règle, le dimensionnement d'une installation, les valeurs de masse de matière fissile et de concentration en poison neutronique, sont définis de telle sorte que les coefficients de multiplication effectifs K_{eff} soient inférieurs à 1 avec une marge de sécurité suffisante (les valeurs limites usuellement utilisées, jusqu'à présent, sont de 0.95 dans les conditions normales et 0.98 dans les conditions accidentelles). Cette marge peut être modulée selon le degré de confiance accordé aux techniques de calculs, fonction de la qualification de ces techniques par comparaison aux résultats d'expérience portant sur des configurations proches de celles étudiées.
L'enjeu du formulaire de calcul de Sûreté-Criticité est donc d'être suffisamment fiable et précis pour que les marges de sécurité prises soient faibles et pèsent aussi peu que possible sur les coûts économiques. De plus le nouveau formulaire sera qualifié pour le traitement de nouveaux problèmes apparaissant dans la Sûreté-Criticité tels que la prise en compte industrielle du crédit burnup, le retraitement poussé et l'incinération des actinides.

II. Le champ d'application des études de Sûreté-Criticité

Les études de Sûreté-Criticité jouent un rôle important dans les étapes du cycle du combustible illustré ci-dessous, où l'accident de criticité est possible. En s'appuyant sur la règle fondamentale de sûreté I.3.c[5], les installations, respectivement les transports utilisant de la matière fissile, concernés par un tel risque, sont indiqués en caractères gras, respectivement par des flèches pointillées.



Le cycle du combustible nucléaire en France

Les paragraphes suivants présentent une analyse succincte de chaque étape du cycle du combustible[6].

Les étapes d'obtention de l'uranium naturel, l'*extraction*, la *concentration*, la *conversion*, ne sont pas concernées par l'accident de criticité. En effet l'uranium naturel, de faible teneur en uranium fissile (0.771% U^{235}), ne peut engendrer une réaction en chaîne que sous certaines conditions très spécifiques de modération (eau lourde, béryllium, graphite) et d'arrangements géométriques (sous forme de réseaux de barreaux) ; à ce niveau du cycle, ces conditions sont loin d'être satisfaites.

En amont du cycle, ce sont donc seulement les **usines d'enrichissement** de l'uranium et les **ateliers de fabrication** qui sont touchés par un risque de criticité puisqu'ils utilisent non seulement de l'uranium dont la teneur en isotope fissile est supérieure à 1%, du plutonium, des mélanges uranium-plutonium mais aussi de l'eau comme modérateur.

Bien que faisant partie intégrante du cycle du combustible, toute la partie concernant le combustible à l'intérieur du réacteur est généralement exclue des études de Sûreté-Criticité. Cette partie est bien entendu prise en compte dans d'autres études de Sûreté concernant le cœur du réacteur proprement dit. Des études de criticité sont, cependant, menées sur l'entreposage et la manipulation, le plus souvent à sec, d'assemblages neufs sur **le site du réacteur**. Dans ce cas, le risque provient majoritairement de la présence éventuelle d'un modérateur (aspersion, inondation).

En aval du cycle, une première étape consiste en un **stockage intermédiaire** dont le but est le refroidissement des assemblages irradiés. Ce stockage a lieu dans la piscine aménagée sur le site même de la centrale. Les assemblages sont ensuite envoyés à la piscine aménagée sur le site de l'usine de retraitement. Dans ces piscines, le contrôle de la criticité est généralement assuré par les espacements aménagés entre ces assemblages et par la présence de poisons (bore, hafnium, acier boré, boral).

Suite à ces stockages, le procédé de **retraitement** (procédé PUREX(*)) démarre. Nous ne décrirons pas ici dans le détail toutes les opérations du retraitement car elles sont nombreuses mais nous nous limiterons aux opérations où le risque de criticité est réel. Ces opérations sont énumérées ci-dessous :

- cisaillage ;
- dissolution à l'acide nitrique ;
- extraction de l'uranium et du plutonium, les produits de fission et les autres transuraniens restant dans la solution aqueuse ;
- cycles de séparation et de purification de l'uranium et du plutonium.

La diversité des formes physiques, chimiques et isotopiques présents tout au long des étapes énumérées ci-dessus, suggère l'ampleur des études de criticité qui doivent être menées à ce stade du cycle du combustible.

(*) Plutonium, Uranium Recovery by Extraction

Les principaux paramètres intervenant ici dans la prévention du risque de criticité sont : la masse (notamment lors de la dissolution), la concentration (lors de l'extraction et séparation en solution), la géométrie (taille des paniers du dissolveur, diamètre des colonnes pulsées dans lesquelles peuvent être réalisées les extractions,...).

En cours de retraitement, on obtient trois solutions aqueuses distinctes :

- de nitrate d'uranium purifiée,
- de nitrate de plutonium purifiée,
- contenant les produits de fission et les autres transuraniens ainsi que des traces d'uranium et de plutonium non extraites.

La première et la deuxième solutions seront traitées pour mettre l'uranium et le plutonium sous forme recyclable et on bouclera ainsi le cycle en repartant soit vers les usines d'enrichissement d'uranium, soit vers les usines de fabrication pour le plutonium et nous retrouverons les risques de criticité cités précédemment.

La dernière solution constitue le déchet qui est vitrifié afin d'être *stocké définitivement*. Cette ultime étape du cycle ne présente pas de risque du point de vue de la criticité étant donné le peu de matière fissile et le bore que le déchet contient.

Du point de vue du *stockage définitif*, il faut cependant noter que le risque de criticité peut, parfois, se poser pour le stockage des coques(*) qui peuvent présenter une couche résiduelle de combustible.

A toutes ces étapes du cycle du combustible, il faut enfin ajouter **le transport** des combustibles frais ou irradiés qui bien entendu fait l'objet d'études de Sûreté-Criticité. Des conteneurs spécifiques à chaque type de combustible tiennent ainsi compte de la possibilité d'un accident.

Nous venons de voir que le champ d'investigation des études de Sûreté-Criticité est bien plus vaste que celui des réacteurs. Nous pouvons ainsi noter les spécificités suivantes**[3]** :

- des géométries variées et souvent compliquées (dissolveurs, château de transport...) ;
- des spectres couvrant la totalité du domaine énergétique (spectre thermique, épithermique rapide) ;
- des milieux plus hétérogènes que dans les réacteurs (dissolveur) ;

(*) On appelle ainsi les tronçons de gaine des éléments combustibles cisaillés

- des milieux fissiles avec des enrichissements très variables et des formes physico-chimiques diverses (métal, carbure, nitrure, oxyde, hexafluorure...) ;
- des matériaux non fissiles peu utilisés en physique des réacteurs tels que le béton, le polyéthylène, le plomb,... ;
- des "matrices" thermiques autres que celles de l'eau et en particulier l'acide nitrique, l'acide fluorhydrique ;
- l'interaction neutronique entre plusieurs récipients différents, implantés dans un même local, avec des couplages forts ou faibles.

III. Les partenaires associés aux études de Sûreté-Criticité

En France, l'organisation des études de Sûreté-Criticité s'appuie sur une répartition des tâches et des responsabilités entre les trois principaux partenaires[7] :

- les pouvoirs publics ;
- les exploitants et industriels ;
- les organismes de recherche et développement.

Les pouvoirs publics, en particulier le ministère de l'industrie, étudient la sûreté des installations avant de délivrer les autorisations nécessaires à la construction, au démarrage où à l'exploitation d'une installation nucléaire de base.

Ce rôle est confié à une direction du ministère, la *Direction de Sûreté des Installations Nucléaires* (*DSIN*), qui s'appuie au plan technique (pour effectuer les études nécessaires à la vérification de la sûreté de dispositifs ou pour analyser les rapports qui lui sont soumis par les exploitants) sur l'*Institut de Protection et de Sûreté Nucléaire (IPSN)* du Commissariat à l'Energie Atomique ainsi que sur l'avis et les recommandations de groupes d'experts, les Groupes Permanents.

Les industriels conçoivent et fabriquent les matériels des installations nucléaires, les exploitants assurent la responsabilité technique de leurs installations.

Parallèlement à ces deux partenaires, les organismes de recherche, les Services du CEA en l'occurrence, développent les connaissances nécessaires aux phénomènes physiques et ici aux phénomènes de criticité.

A l'intérieur du CEA, les deux intervenants sont l'IPSN et la DRN(*)**[6]**.

Le premier (l'IPSN/DRS/SEC(**)) regroupe des spécialistes de la criticité; ceux-ci réalisent les études et les calculs de Sûreté-Criticité à la demande des industriels. Ils possèdent également leur propre dispositif expérimental leur permettant de réaliser des expériences de criticité. Ce dispositif est situé à VALDUC. Les résultats de ces expériences de criticité sont utilisés pour qualifier les bibliothèques de sections efficaces et les codes de calculs développés par les physiciens neutroniciens de la DRN. Au sein de la DRN, le SERMA (Service d'Etudes de Réacteurs et de Mathématiques Appliquées) est chargé de développer les codes et les bibliothèques, le SPRC (Service de Physique des Réacteurs et du Cycle) d'élaborer des formulaires de calcul et de les qualifier.

(*) Direction des Réacteurs Nucléaires
(**) Département de Recherche en Sûreté/Service d'Etudes de Criticité

CHAPITRE 2
LES METHODES DE RESOLUTION DE L'EQUATION DU TRANSPORT DANS LES ETUDES DE SURETE-CRITICITE

Le neutronicien a le rare privilège de connaître l'équation exacte qui régit la population de neutrons dans une installation du cycle. Cette équation, due aux travaux de Boltzmann effectués en 1872 sur la cinétique des gaz, peut être appliquée, rigoureusement, à une population de neutrons à condition d'un traitement statistique (i.e. en moyenne) : c'est toujours le cas, en pratique, vu le grand effectif de cette population (de l'ordre de cent millions de neutrons par cm^3).

Cependant la résolution de cette équation est extrêmement complexe et seul un traitement numérique, moyennant des approximations physiques et des simplifications, peut être entrepris par le criticien.

Ce chapitre présente l'établissement de l'équation du transport ainsi que le principe des méthodes de résolution de l'équation de Boltzmann**[8]** utilisées dans les études de Sûreté-Criticité.

I. Etablissement de l'équation du transport des neutrons

L'équation de Boltzmann peut être écrite sous deux formes dites "intégro-différentielle" et "intégrale". Mathématiquement, les deux formes sont équivalentes : on passe de l'une à l'autre par intégration ou dérivation. Par contre, numériquement, elles conduisent à des méthodes totalement différentes mais complémentaires dans les études de Sûreté-Criticité (voir chapitre 3).

Avant de présenter les deux formes de l'équation de Boltzmann, nous devons préciser la représentation mathématique de la population des neutrons. Comme il s'agit d'un effectif moyen de neutrons par unité de volume, nous utiliserons la notion de densité et nous la

noterons n. Cette densité neutronique est fonction de sept variables, c'est le nombre de neutrons :

- par unité de volume au point $\vec{r}$ (3 variables, coordonnées du vecteur) ;
- par unité de vitesse v ou bien d'énergie E (1 variable) ;
- par unité d'angle solide autour de la direction $\vec{\Omega}$ (2 variables, colatitude et longitude de $\vec{\Omega}$) ;
- à l'instant t (1 variable)

En neutronique, comme le produit de la densité par la vitesse des neutrons intervient souvent, nous utilisons la notion de **flux** défini par :

$$\phi\left(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t\right) = v \cdot n\left(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t\right) \quad \textbf{(1)}$$

Le flux est commode pour exprimer le nombre de réactions du type i par unités de volume et de temps ou **taux de réactions** qui est une grandeur fondamentale. Ce taux de réaction est proportionnel au flux et au nombre N de noyaux par centimètres cube :

$$R_i\left(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t\right) = N\sigma_i\left(\vec{r}, E\right) \cdot \phi\left(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t\right) \quad \textbf{(2)}$$

Le facteur de proportionnalité σ_i, qui dépend de la position et de la vitesse des neutrons, a la dimension d'une surface et traduit la probabilité d'interaction que chacun de ces neutrons subisse une interaction du type i avec les différents noyaux : cette grandeur est appelée section efficace et s'exprime traditionnellement en une unité mieux adaptée, le barn, qui vaut $10^{-24}\,cm^2$. Le produit $N\sigma_i$, appelé section efficace macroscopique et noté Σ_i représente le nombre de réactions de type i probables par centimètre.

1. Forme intégrale

a) Approche élémentaire

Pour établir l'équation de Boltzmann sous sa forme intégrale, nous considérons d'abord un cas simplifié avec les hypothèses suivantes :

- le régime est stationnaire (t est constant) ;
- les neutrons sont monocinétiques (v ou bien E constant) ;

– les sources et les diffusions des neutrons sont isotropes ($\vec{\Omega}$ est constant).

Ce cas consiste à placer dans le vide une source ponctuelle émettant de façon isotrope (i.e. également dans toutes les directions) S neutrons par unité de temps. Pour évaluer le flux φ_0 à la distance R de cette source, nous comptons les neutrons dans l'élément de volume dV limité par les sphères de rayons R et R+dR centrées sur la source.

Comme les neutrons voyagent à la vitesse donnée v, il leur faut la durée dt = dR/v pour traverser cet élément de volume, puisqu'ils font un parcours dR pour l'intercepter. Autrement dit, nous observons en permanence dans cet élément le nombre dn = Sdt = SdR/v de neutrons émis pendant cette durée élémentaire. La densité dans l'élément de volume est ainsi :

$$n_0 = \frac{dn}{dV} = \frac{S\,dR/v}{4\pi R^2 dR} = \frac{S}{4\pi R^2 v} \qquad \textbf{(3)}$$

et donc le flux :

$$\varphi_0 = \frac{S}{4\pi R^2} \qquad \textbf{(4)}$$

Nous supposons maintenant que la source n'est plus dans le vide mais dans la matière (milieu homogène).

L'atténuation du flux φ en fonction de l'épaisseur r de matière traversée est :

$$d\varphi = -\varphi \Sigma_t dr \qquad \textbf{(5)}$$

où Σ_t est la section efficace macroscopique totale égale à la somme des Σ_i.

Nous en déduisons, par intégration, le flux φ au point R :

$$\varphi(R) = \varphi_0 e^{-\Sigma_t R} = \frac{S}{4\pi R^2} e^{-\Sigma_t R} \qquad \textbf{(6)}$$

L'expression **(6)** peut être généralisée en répartissant la source dans tout le système considéré[(*)] et en ajoutant à la source S, les sources dues à la diffusion des neutrons dans la matière, puisque les ré-émissions de neutrons jouent exactement le même rôle que les émissions :

(*) La linéarité de l'équation de Boltzmann permet d'écrire le flux comme la superposition des flux élémentaires dus aux sources élémentaires.

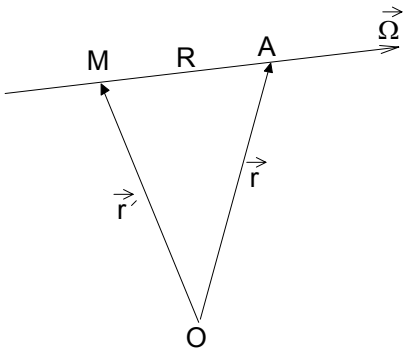
$$\phi(\vec{r}) = \int_{\text{système}} Q(\vec{r}\,')\,d^3r'\,\frac{e^{-\Sigma_t R}}{4\pi R^2} \qquad \textbf{(7)}$$

avec $R = |\vec{r}\,' - r|$ et $Q(\vec{r}) = S(\vec{r}) + \Sigma_s(\vec{r})\phi(\vec{r})$.

Cette expression est rigoureuse dans le cadre du problème considéré et fait apparaître les grandeurs Q, appelée densité d'émission ainsi que, le produit $\Sigma_t R$ dans l'exponentielle, appelé "parcours optique", qui est l'intégrale en ligne droite de Σ_t du point "source" $\vec{r}\,'$ au point d'observation $\vec{r}$.

b) Cas général

L'équation **(7)** se généralise facilement en ce qui concerne le spectre et le temps ; en ce qui concerne la phase, il faut adapter le raisonnement et comptabiliser selon une direction particulière : les neutrons "vus" en un point A placé en $\vec{r}$ et voyageant dans la direction $\vec{\Omega}$ sont tous ceux qui ont été émis ou ré-émis dans cette direction depuis un point M, à l'instant t-R/v, et qui ont réussi à faire le trajet de M à A sans collision avec la matière.



L'équation de Boltzmann sous forme intégrale s'écrit donc :

$$\phi(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t) = \int_0^\infty d\,R\,e^{-\omega}\,Q(\vec{r} - R\vec{\Omega}, v, \vec{\Omega}, t - R/v) \qquad \textbf{(8)}$$

avec, ω, le parcours optique, qui est l'intégrale :

$$\omega = \int_M^A \Sigma_t(\vec{r}, v, \vec{\Omega})\,dR$$

et, Q, la densité d'émission définie par :

$$Q\left(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t\right) = \int_0^{\infty} dv' \int_{(4\pi)} d^2\Omega' \Sigma_s\left[\vec{r}, \left(v' \to v, \vec{\Omega}' \to \vec{\Omega}\right)\right] \phi\left(\vec{r}, v', \vec{\Omega}', t\right) + S\left(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t\right)$$

L'expression **(8)** explicite donc l'opérateur de transport donnant le flux ϕ à partir de la densité d'émission et l'opérateur de collision exprimant Q à partir des sources et du flux.

2. Forme intégro-différentielle

La forme intégro-différentielle de l'équation de Boltzmann diffère de la forme intégrale en ce qui concerne l'opérateur du transport ; l'opérateur de collision reste le même dans cette forme de l'équation.

Afin d'établir l'équation du transport sous la forme intégro-différentielle, nous considérons un domaine D quelconque du système contenant un nombre X de neutrons de vitesse v et de direction $\vec{\Omega}$ (pour simplifier l'écriture, nous sous-entendons dans ce paragraphe les éléments différentiels dv et $d^2\Omega$).

Par définition de la densité, ce nombre, dépendant en général du temps, est :

$$X\left(v, \vec{\Omega}, t\right) = \int_D n\left(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t\right) d^3r = \int_D \frac{1}{v} \phi\left(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t\right) d^3r \qquad \textbf{(9)}$$

Pendant l'intervalle de temps dt, sa variation est donc :

$$dX = \int_D \frac{1}{v} \frac{\partial \phi\left(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t\right)}{\partial t} d^3r \, dt \qquad \textbf{(10)}$$

Physiquement, il y a trois causes possibles de variation de X :

- les *fuites* de neutrons par la surface S (de normale $\vec{N}$) du domaine D qui s'expriment par le produit $\vec{\Omega}\phi$, appelé courant et noté $\vec{J}$ ($\vec{J}$ est algébrique : positif si la traversée des neutrons se fait dans le sens de $\vec{N}$, négatif en sens inverse) ;
- les *collisions* qui font disparaître les neutrons s'il s'agit d'absorptions ou qui leur font quitter la vitesse v et la direction $\vec{\Omega}$ s'il s'agit de diffusions et qui s'expriment par le produit $\Sigma_t\phi$;
- les *émissions* (sources et ré-émission par diffusion) qui s'expriment par la densité d'émission Q, déjà introduite à propos de la forme intégrale de l'équation.

En affectant le signe convenable à ces trois variations, il vient :

$$\begin{aligned} dX = & -\int_S \vec{J}\left(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t\right)\cdot\vec{N}\,dS\,dt \\ & -\int_D \Sigma_t(\vec{r}, v)\phi\left(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t\right)d^3r\,dt \\ & +\int_D Q\left(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t\right)d^3r\,dt \end{aligned} \qquad \textbf{(11)}$$

En rapprochant dX des relations **(10)**, **(11)** et en transformant, à l'aide du théorème d'Ostrogradsky, l'intégrale de surface exprimant les fuites, en une intégrale de volume, nous obtenons quatre intégrales de volume que nous pouvons regrouper en une seule. Cette dernière étant nulle quelle que soit D, la fonction intégrée doit être elle-même identiquement nulle. Le bilan ainsi obtenu est l'équation intégro-différentielle du transport et s'écrit :

$$\frac{1}{v}\frac{\partial\phi\left(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t\right)}{\partial t} = -div\vec{J}\left(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t\right) - \Sigma_t(\vec{r}, v)\phi\left(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t\right) + Q\left(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t\right) \qquad \textbf{(12)}$$

3. Propriétés de l'équation de Boltzmann dans les études de Sûreté-Criticité

Dans les études de Sûreté-Criticité, l'équation du transport compte deux propriétés importantes. Nous allons les énoncer au cours des paragraphes suivants.

Dans une installation du cycle, les neutrons sont émis par fission (les sources "autonomes" sont évidemment négligées : rayons cosmiques, fissions spontanées...) les sources s'expriment alors en fonction du flux et de la section efficace de "production" $\nu\Sigma_f$, section efficace de fission multipliée par le nombre de neutrons émis par fission. Nous pouvons admettre que tous les neutrons émis par fission le sont de façon isotrope (donc à raison de $1/4\pi$ par unité d'angle solide) et selon le même spectre de fission $\chi(v)$ (que nous supposons normalisé à 1). La source S est donc :

$$S\left(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t\right) = \frac{1}{4\pi}\chi(v)\int_0^\infty dv'\int_{(4\pi)} d^2\Omega'\nu\Sigma_f(\vec{r}, v')\phi\left(\vec{r}, v', \vec{\Omega}', t\right) \qquad \textbf{(13)}$$

Dans ces conditions et quelle que soit sa forme (intégrale ou intégro-différentielle), l'équation de Boltzmann prend un caractère **homogène** : tous les termes sont proportionnels au flux.
Dans les études de criticité, hors situation accidentelle, nous nous intéressons principalement aux calculs d'expériences critiques et aux situations sous-critiques ce qui permet de traiter

l'équation de Boltzmann en régime **stationnaire**. Ainsi cette équation, indépendante du temps, a une solution ϕ. Mais il faut noter que cette solution n'est définie qu'à un facteur près, disons A. En effet, si l'équation est vérifiée avec ϕ, il est clair qu'elle le reste lorsque ce flux, donc tous les termes de l'équation sont multipliés par cette constante. En pratique, il faudra se donner une règle de normalisation du flux : en criticité, nous utilisons un neutron émis par fission chaque unité de temps.

II. Principe des méthodes utilisées dans les études de Sûreté-Criticité pour la résolution de l'équation du transport

L'ensemble des méthodes numériques utilisées dans les études de Sûreté-Criticité peut être classé selon deux sous-ensembles qui correspondent à deux types de traitement numérique : l'un déterministe et l'autre probabiliste.

Les méthodes dites "déterministes" consistent à discrétiser l'équation du transport de façon à obtenir une forme matricielle qu'il deviendra possible d'inverser. Toutes les méthodes déterministes se basent sur la même discrétisation de la variable d'énergie. Ainsi, l'équation continue du transport est remplacée par une équation multigroupe. Par contre, la discrétisation des variables d'espace et des variables angulaires diffère selon qu'il s'agit de la méthode des ordonnées discrètes ou de la méthode des probabilités de première collision.

La méthode dite "probabiliste" est la méthode de Monte-Carlo qui résout l'équation du transport en simulant par un générateur de nombres aléatoires et selon les lois de probabilités des différents événements (longueur du parcours, angle de déviation...), l'histoire d'un grand nombre de neutrons. Cette méthode permet de traiter des problèmes complexes.

1. Les méthodes déterministes

a) Traitement multigroupe de l'équation du transport

L'équation du transport discrétisée en énergie (ou en vitesse car $E = mv^2/2$) est obtenue en subdivisant le domaine énergétique en N_g intervalles, ou groupes d'énergie. Les groupes sont généralement numérotés par des énergies décroissantes de façon à se succéder dans l'ordre naturel pour les neutrons qui se ralentissent. Si le domaine traité va des énergies E_0 à E_{Ng}, les N_g groupes sont définis en plaçant des bornes intermédiaires E_1, E_2,...E_{Ng-1} : le groupe g est constitué de neutrons dont l'énergie est comprise entre E_{g-1} et E_g.

Avec cette discrétisation en plusieurs groupes ou "multigroupe", le flux est représenté dans le groupe g considéré par l'intégrale (les variables $\vec{r}, \vec{\Omega}$ sont sous-entendues) :

$$\phi_g = \int_{E_{g-1}}^{E_g} \phi(E) dE \qquad \textbf{(14)}$$

Pour le spectre de fission, l'intégrale est similaire.

Comme le but d'un calcul est d'obtenir les grandeurs qui ont un réel sens physique c'est à dire les taux de réaction, les sections efficaces multigroupes pour la réaction i (absorption, capture ou fission) sont définies de façon à les préserver :

$$\sigma_i^g = \frac{\int_{E_{g-1}}^{E_g} \sigma_i(E)\phi(E) dE}{\int_{E_{g-1}}^{E_g} \phi(E) dE} \qquad \textbf{(15)}$$

Pour les sections de diffusion exprimant les transferts de neutrons, il faut intégrer sur le groupe de départ et d'arrivée :

$$\sigma_s^{g \to g'} = \frac{\int_{E_{g-1}}^{E_g} \phi(E) dE \int_{E_{g'-1}}^{E_{g'}} \sigma_s(E \to E') dE'}{\int_{E_{g-1}}^{E_g} \phi(E) dE} \qquad \textbf{(16)}$$

Ces expressions ne peuvent pas être utilisées puisque le vrai flux ϕ est inconnu. En pratique, il faut remplacer ce flux par une fonction de pondération connue, par exemple, pour le code APOLLO2, le spectre représentatif d'un réacteur.

Pour des sections efficaces qui varient lentement avec l'énergie, la section efficace multigroupe dépend peu du spectre de pondération. Ceci n'est pas le cas pour les sections efficaces présentant des variations rapides à l'intérieur des groupes ou résonances, comme par exemple l'uranium 238 (cf. Figure 1). Il est alors indispensable de prendre en compte

l'autoprotection des résonances, i.e. la décroissance du flux dans chaque résonance. Ce phénomène nécessite un traitement spécifique que nous aborderons au cours du chapitre 5.

Pour les opérateurs de collision (diffusion et production par fission), les intégrales sont remplacées par des sommes sur les groupes. Par exemple pour les productions :

$$\int \nu\Sigma_f(E)\phi(E) \rightarrow \sum_{g=1}^{N_g} \nu\Sigma_f^g \phi_g$$

L'approximation multigroupe transforme donc l'équation du transport en un système de N_g équations couplées par les termes de source. Ce système, souvent de grande taille, est résolu par un processus itératif conventionnel sur les sources de fission représentant les **itérations externes**. Dans chaque itération externe, le flux multigroupe est calculé en résolvant les équations groupe par groupe en supposant la source de fission connue. A la fin de l'itération externe, on utilise le flux obtenu pour calculer la nouvelle source de fission qui est ensuite utilisée dans l'itération suivante.

Le flux multigroupe est calculé à partir des sources par le processus des **itérations internes** : il s'agit là à proprement parler, de l'inversion de l'opérateur de Boltzmann. Ce type d'itération est composé de deux niveaux :

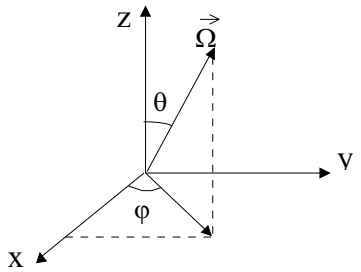
- le plus "*extérieur*", pour l'opérateur de collision, obtention de Q à partir des sources et du flux, est explicite dans le domaine du ralentissement si l'on traite les groupes de proche en proche dans l'ordre des énergies décroissantes, mais nécessite des itérations "**thermiques**" dès qu'on aborde le domaine où apparaissent des remontées de neutrons (up-scattering) ;
- le plus "*intérieur*", pour inverser l'opérateur de transport, permet d'obtenir ϕ à partir de Q et dépend de la méthode employée (méthode S_N ou méthode des probabilités de première collision).

b) Méthode des ordonnées discrètes

La méthode des ordonnées discrètes regroupe en fait tout un ensemble de techniques consistant à discrétiser la variable angulaire et à utiliser une formule de quadrature pour approximer l'intégrale exprimant l'opérateur de diffusion. Nous nous limiterons ici à la présentation de celle utilisée dans les études de Sûreté-Criticité, la méthode S_N.

La variable angulaire $\vec{\Omega}$ est un vecteur unitaire défini par la colatitude θ et la longitude φ ; les coordonnées de ce vecteur sont :

$$\Omega_x = \sin\theta\cos\varphi$$
$$\Omega_y = \sin\theta\sin\varphi$$
$$\Omega_z = \cos\theta$$



Dans la méthode S_N, cette variable est discrétisée par un découpage en "mailles" de la sphère de rayon unité : seules les directions correspondant aux centres de ces mailles sont considérées.

Cette discrétisation S_N est obtenue en découpant la sphère en N bandes délimitées par les parallèles de colatitude 0, π/N, 2π/N,... (N-1)π/N et π. En pratique, N est pair de sorte que "l'équateur" fait partie de ces limites. Ensuite, et pour avoir des mailles ayant des tailles toutes du même ordre de grandeur, on découpe ces bandes respectivement en 4, 8, 12, 2N-4, 2N, 2N, 2N-4,... 12, 8 et 4. Les limites sont les méridiens de longitudes 0, π/2, π et 3π/2, et les arcs de méridiens de longitudes intermédiaires conduisant à un maillage régulier dans chaque couronne. Les Figure 2 et Figure 3 montrent, sur un huitième de sphère, les maillages S_4 et S_8 les plus utilisés dans la criticité.

Les directions discrètes associées à chaque maille sont à la colatitude et à la longitude moyenne de celles des arêtes respectivement "horizontales" et "verticales" des mailles.

Le nombre de mailles sur la sphère unité est donc le nombre M de directions :

$$M = 2\cdot\left[2N + (2N-4) + \ldots + 4\right] = N(N+2) \qquad \textbf{(17)}$$

Ceci est en fait le nombre de directions pour des problèmes à trois dimensions. Pour ceux à deux ou une dimension, il faut en plus tenir compte des symétries. Celles-ci réduisent encore le nombre de directions nécessaires. En effet, pour une géométrie à deux dimensions, le nombre de directions est divisé par 2 et par 4 pour une géométrie à une dimension. Ainsi, si d est le nombre de dimensions, il vient :

$$M = \frac{2^d}{8} N(N+2) \qquad \textbf{(18)}$$

Les formules de quadrature permettent d'évaluer les intégrales angulaires de diffusions et de fissions en affectant à chaque direction discrète un poids qui permet de respecter les moments angulaires. Ce poids est choisi comme le rapport entre la proportion de la surface de la sphère associée à une direction donnée et la surface de la sphère totale.

Ayant explicité la discrétisation de la variable angulaire et les formules de quadrature, nous allons maintenant décrire, au niveau des itérations internes, la manière d'inverser l'opérateur de Boltzmann par la méthode S_N.

Dans un groupe g, nous pouvons obtenir, par les formules de quadrature, la densité d'émission Q à partir du flux de l'itération précédente. Dans ce groupe, il faut maintenant calculer une nouvelle approximation du flux, c'est à dire inverser l'opérateur de transport. Cela revient, pour la méthode S_N, à résoudre selon ϕ l'équation de Boltzmann écrite sous forme intégro-différentielle :

$$\mathrm{div}\left[\vec{\Omega}\cdot\phi\left(\vec{r},\vec{\Omega}\right)\right]+\Sigma_t\left(\vec{r}\right)\phi\left(\vec{r},\vec{\Omega}\right)=Q\left(\vec{r},\vec{\Omega}\right) \qquad \textbf{(19)}$$

Nous écrirons cette équation pour chacune des directions $\vec{\Omega}_m$ selon laquelle la variable angulaire a été discrétisée. Nous obtenons de la sorte un système d'équations aux dérivées partielles par rapport aux variables d'espace régissant les fonctions inconnues $\phi_m\left(\vec{r}\right)=\phi\left(\vec{r},\vec{\Omega}_m\right)$:

$$\left[\vec{\Omega}_m\cdot\vec{\nabla}+\Sigma_t\left(\vec{r}\right)\right]\phi_m\left(\vec{r}\right)=Q_m\left(\vec{r}\right) \qquad \textbf{(20)}$$

(Q_m désigne la densité d'émission Q pour $\vec{\Omega}=\vec{\Omega}_m$)

Ces équations aux dérivées partielles après discrétisation de la variable angulaire sont également discrétisées selon la variable d'espace. La discrétisation spatiale consiste à découper l'espace en plusieurs mailles dont la forme est imposée par le système de coordonnées (par exemple mailles rectangulaires dans un système cartésien). Les équations **(20)** sont alors écrites pour chaque maille et couplées de proche en proche par le terme de fuite $\vec{\Omega}_m\cdot\vec{\nabla}\phi_m\left(\vec{r}\right)$. Autrement dit, les flux sortant dépendent uniquement des flux entrant dans la maille. Cela suggère de résoudre le système d'équations dans le sens de la

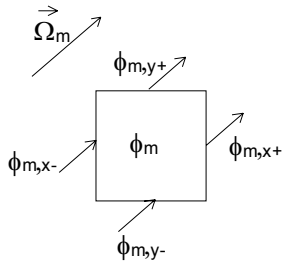
marche du neutron en partant des conditions aux limites. Par conséquent, le système d'équations se caractérise par une matrice triangulaire.

Dans le domaine de la criticité nous utilisons deux méthodes de discrétisation spatiale : l'approximation aux différences finies ou bien les approximations nodales**[9]** ; nous décrivons leurs spécificités dans les paragraphes suivants.

Approximation aux différences finies

Cette approximation consiste à calculer les flux moyens à l'intérieur et sur les frontières des mailles et à approcher les dérivées du premier ordre par des différences. Nous allons présenter, par exemple, cette méthode sur une géométrie bidimensionnelle XY, les autres cas sont décrits dans les références **[10][11]**.

Ecrivons l'équation **(20)** pour une maille de longueur Δx et de largeur Δy avec les notations de la figure ci-contre (les faces entrantes (-) et sortantes (+) suivant la direction $\vec{\Omega}_m$ du neutron) :



$$\frac{\Omega_{m,x}}{\Delta x}\left[\phi_{m,x+}-\phi_{m,x-}\right]+\frac{\Omega_{m,y}}{\Delta y}\left[\phi_{m,y+}-\phi_{m,y-}\right]+\Sigma_t\phi_m=Q_m \qquad \textbf{(21)}$$

L'équation (21) contient cinq valeurs de flux angulaire dont deux (les flux entrant) sont connus par les conditions aux limites, dans le cas d'une maille à la frontière du système, ou bien par les flux sortant, pour une autre maille. Pour obtenir les deux flux sortant inconnus, il faut deux équations supplémentaires, nous supposerons que le flux à l'intérieur de la maille dépend des flux aux bords selon les différences pondérées :

$$\phi_m=a\phi_{m,x+}+(1-a)\phi_{m,x-}=b\phi_{m,y+}+(1-b)\phi_{m,y-} \qquad \textbf{(22)}$$

où a et b sont des paramètres à choisir ou à calculer.

Dans le cas où a = b = 1/2, les flux sortant $\phi_{m,x+}$ et $\phi_{m,y+}$ sont donnés par :

$$\phi_{m,x+}=2\phi_m-\phi_{m,x-}\ ,\quad \phi_{m,y+}=2\phi_m-\phi_{m,y-} \qquad \textbf{(23)}$$

Il s'agit du schéma **'diamant'**. Cette approximation n'assure pas cependant, la positivité de la solution car il est possible d'avoir des valeurs négatives dues à l'extrapolation définie par les équations **(23)**. En utilisant les équations **(21)** et **(23)**, nous montrons que cet effet existe si les dimensions optiques de la maille sont trop grandes par rapport au libre parcours moyen du neutron défini par $\lambda = 1/\Sigma_t$, c'est à dire si $\Sigma_t \Delta x >> 1$ et/ou $\Sigma_t \Delta y >> 1$, et si les gradients du flux angulaire sont importants.

Ce problème de flux négatif pourrait être résolu en choisissant les paramètres a, b tout deux égaux à 1. Dans ce cas nous aurions les flux sortant égaux au flux à l'intérieur de la maille qui est toujours positif. Ce schéma appelé **'step'** est cependant d'une moins bonne précision.

Une autre possibilité consiste à calculer pour chaque maille les paramètres a, b pour faire en sorte que la positivité du flux soit assurée. Il s'agit du schéma **'thêta pondéré'**. Cette dernière méthode est cependant plus coûteuse en temps de calcul. Pour les études de criticité, nous adopterons ce schéma en association avec le schéma diamant pour diminuer ce coût.

Dans le code APOLLO2, utilisé dans les études de Sûreté-Criticité, les trois schémas (Diamant, step et thêta pondéré) ont été développés pour des géométries à une dimension et à deux dimensions (XY et RZ).

Approximations nodales

Les méthodes nodales, par rapport aux méthodes aux différences finies, utilisent des approximations spatiales du flux d'un ordre égal ou supérieur, avec des solutions analytiques, et non des extrapolations, qui définissent les conditions supplémentaires. Elles sont caractérisées par un plus grand nombre d'inconnues et d'opérations arithmétiques par maille mais leur précision supérieure permet d'employer un maillage plus gros.

Afin de les décrire, reprenons l'exemple d'une géométrie XY et écrivons l'équation **(20)** avec les coordonnées locales normalisées ($x = 2x/\Delta x$ et $y = 2y/\Delta y$) pour une maille de dimensions Δx, Δy :

$$\left[\frac{2\Omega_{m,x}}{\Delta x}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{2\Omega_{m,y}}{\Delta y}\frac{\partial}{\partial y} + \Sigma_t\right]\phi_m(x,y) = Q_m(x,y) \qquad \textbf{(24)}$$

Dans les méthodes nodales, les cinq flux $\phi_{m,x\pm}, \phi_{m,y\pm}, \phi_m$ sont approchés par des développements en polynôme de Legendre. Les coefficients de ces polynômes, auxquels on s'intéresse, sont les moments spatiaux des flux.

Pour les obtenir, l'équation **(24)** est multipliée par le produit des polynômes de Legendre $P_j(x)P_k(y)$ (où j et k sont les indices des polynômes par rapport aux variables x et y respectivement) et intégrée sur le volume de la maille :

$$L^{jk}_{m,x} + L^{jk}_{m,y} + \Sigma_t \phi^{jk}_m = Q^{jk}_m \qquad \textbf{(25)}$$

où

$L^{jk}_{m,x}, L^{jk}_{m,y}$ sont les fuites transversales hors de la maille géométrique provenant du terme de gradient et dépendant, non seulement, des moments des flux sur les surfaces de la maille ($\phi^{k}_{m,x\pm}, \phi^{j}_{m,y\pm}$) mais aussi des moments d'ordre inférieur du flux à l'intérieur (ϕ^{jk}_m) ;

Q^{jk}_m est le moment de la densité d'émission.

Afin d'exprimer les moments des flux sortant en fonction des moments des flux entrant et des moments à l'intérieur, comme dans l'approximation des différences finies, nous devons définir des conditions supplémentaires. Dans les méthodes nodales, à la place des formules d'extrapolation de type **(22)**, nous cherchons des relations analytiques d'un ordre d'approximation supérieur.

Les conditions supplémentaires sont obtenues en multipliant l'équation **(24)** par le polynôme $P_j(x)$, par exemple, et en intégrant le long de l'axe x entre les limites de la maille. Nous déterminons ainsi une équation différentielle en y. Une opération analogue se fait pour l'autre coordonnée. Cela produit deux ensembles d'équations à une dimension. Ces équations différentielles sont ensuite intégrées afin d'exprimer les approximations polynomiales des flux sur les surfaces de la maille en fonction des sources à l'intérieur. Les équations finales sont de la forme :

$$\phi^{k}_{m,x+} = \phi^{k}_{m,x-} \exp\left(-\frac{\Sigma_t \Delta x}{\Omega_{m,x}}\right) + \sum_j F^{j}_{m,x}\left(Q^{jk}_m - L^{jk}_{m,y}\right) \qquad \textbf{(26)}$$

$$\phi^{j}_{m,y+} = \phi^{j}_{m,y-} \exp\left(-\frac{\Sigma_t \Delta y}{\Omega_{m,y}}\right) + \sum_k F^{k}_{m,y}\left(Q^{jk}_m - L^{jk}_{m,x}\right) \qquad \textbf{(27)}$$

où les coefficients $F^{j}_{m,x}$ et $F^{k}_{m,y}$ dépendent de la direction des neutrons et des épaisseurs optiques de la maille.

Les trois équations **(25)**, **(26)**, **(27)** permettent de déterminer les trois inconnus qui sont les moments $\phi^{k}_{m,x+}$, $\phi^{j}_{m,y+}$, ϕ^{jk}_{m} à partir de Q^{jk}_{m} et $\phi^{k}_{m,x-}$, $\phi^{j}_{m,y-}$ connus.

Dans le code APOLLO2, les méthodes nodales ont été développées seulement pour la géométrie à deux dimensions XY et comprennent trois schémas correspondant à l'ordre de développement en polynôme de Legendre des flux sur les surfaces et à l'intérieur de la maille. Ils sont donnés dans le Tableau 1.

Tableau 1 : Développement en polynôme de Legendre des flux pour la méthode APOLLO2-SN nodal

SCHEMA	FLUX		Nombre d'équations de type			Nombre d'inconnues par maille
	Surface	Intérieur	**(25)**	**(26)**	**(27)**	
CC	constant	constant	1	1	1	3
CL	constant	linéaire	3	1	1	5
LL	linéaire	linéaire	3	2	2	7

c) Méthode des probabilités de première collision

- *Principe*

Nous allons expliciter, dans ce paragraphe, la manière d'inverser l'opérateur du transport, dans un groupe g, par la méthode des probabilités de première collision.

Cette méthode utilise la forme intégrale de l'équation du transport avec source et chocs isotropes ; cependant, en pratique, l'anisotropie des sources et des diffusions est prise en compte, d'une certaine façon, par la correction des sections efficaces de transfert et de diffusion avec un terme indépendant de la variable angulaire, appelé correction de transport à l'ordre un (voir annexe A).

Reprenons donc l'équation **(7)** mais non plus en comptabilisant les neutrons qui passent mais les collisions :

$$\Sigma_t(\vec{r}) \cdot \phi(\vec{r}) = \int Q(\vec{r}')d^3r' \frac{e^{-\Sigma_t R}}{4\pi R^2} \cdot \Sigma_t(\vec{r}) \qquad \textbf{(28)}$$

La méthode des probabilités de collisions consiste à découper de façon à priori arbitraire, "l'objet" à traiter en volumes finis V_i disjoints, l'équation **(28)** s'écrit alors :

$$\int_{V_i} \Sigma_t(\vec{r}) \cdot \phi(\vec{r})d^3r = \sum_j \int_{V_j} Q(\vec{r}')d^3r' \int_{V_i} \frac{e^{-\Sigma_t R}}{4\pi R^2} \cdot \Sigma_t(\vec{r})d^3r \qquad \textbf{(29)}$$

soit :

$$V_i \Sigma_{t,i} \phi_i = \sum_j V_j Q_j \tilde{P}_{ji} \qquad \textbf{(30)}$$

en désignant par $\Sigma_{t,i}$ la moyenne de $\Sigma\phi$ dans V_i et par Q_j celle de Q dans V_j, à condition de poser :

$$\tilde{P}_{ji} = \frac{\int_{V_j} Q(\vec{r}')d^3r' \int_{V_i} \frac{e^{-\Sigma_t R}}{4\pi R^2} \cdot \Sigma_t(\vec{r})d^3r}{\int_{V_j} Q(\vec{r}')d^3r'}$$

$\tilde{P}_{ji}$ représente le nombre de premières collisions dans V_i produits par les neutrons nés de façon isotrope dans V_j selon la répartition exacte Q, rapporté au nombre total de neutrons né dans V_j. Autrement dit, c'est la probabilité de première collision dans V_i pour des neutrons nés dans V_j selon la répartition Q.

Ce qui vient d'être écrit est rigoureux mais n'a malheureusement pas d'intérêt pratique : pour obtenir les flux, il faudrait calculer les probabilités $\tilde{P}$, donc connaître Q ; or cette densité d'émission s'exprime avec le flux que l'on cherche précisément à déterminer... Il faut donc faire une approximation : remplacer Q par une constante. C'est l'hypothèse dite "*du flux plat*[(*)]", qui devrait plutôt être qualifiée de "*densité d'émission plate*". Elle consiste à remplacer dans le calcul des flux les vraies probabilités de collision $\tilde{P}$ par les probabilités notées simplement P et définies par :

$$P_{ji} = \frac{1}{V_j} \int_{V_j} d^3r' \int_{V_i} \frac{e^{-\Sigma_t R}}{4\pi R^2} \cdot \Sigma_t(\vec{r})d^3r \qquad \textbf{(31)}$$

(*) Dans APOLLO1, on avait cependant la possibilité de traiter des "Pij linéaires".

P_{ji} est la probabilité qu'un neutron né dans V_j de façon isotrope et uniforme subisse sa première collision dans V_i.

Le système d'équations **(30)** donnant le flux est donc remplacé par le système approximatif :

$$V_i \Sigma_{t,i} \phi_i = \sum_j V_j Q_j P_{ji} \qquad \textbf{(32)}$$

Le calcul des flux à partir de ces équations suppose une inversion de matrice, puisque l'expression des densités d'émission fait intervenir les flux.

Si le système à traiter contient M volumes V_i, il y a M^2 valeurs de P_{ij} à calculer. Cependant, elles ne sont pas indépendantes et nous pouvons établir les relations suivantes.

Relation de conservation

Dans le cas où le système traité est infini, un neutron émis subira forcément une collision quelque part et donc :

$$\sum_i P_{ji} = 1 \qquad \textbf{(33)}$$

Relation de réciprocité

Le terme $e^{-\Sigma_t R}/4\pi R^2$ est symétrique relativement à $\vec{r}$ et $\vec{r}'$. Nous avons par conséquent :

$$V_j \Sigma_{t,j} P_{ji} = V_i \Sigma_{t,i} P_{ij} \qquad \textbf{(34)}$$

Grâce à ces deux relations, le nombre de probabilité à calculer est ramené à M(M-1)/2.

- *Application au traitement multicellule*

Dans les études de Sûreté-Criticité, nous serons souvent amenés(*) à utiliser la méthode des probabilités de première collision pour des réseaux réguliers d'assemblages de crayons combustible à deux dimensions XY (la hauteur des crayons de l'ordre de 50 cm est considérée comme infini par rapport au libre parcours moyen des neutrons de l'ordre du centimètre) comme par exemple des milieux piscines de stockage ou châteaux de transport.

(*) dans le formulaire CRISTAL, ces méthodes sont seulement utilisées pour l'obtention de jeux de sections efficaces nécessaires aux méthodes Sn et Monte-Carlo.

Un réseau régulier est un ensemble infini de cellules identiques (ce raisonnement se généralise sans difficulté pour un réseau constitué de mailles régulières comprenant un nombre quelconque de cellules différentes**[8]**). Chaque cellule est constituée de volumes V_j limités par une surface S.

Pour traiter ce type de problème, nous allons définir les probabilités :

- de fuites P_{jS} pour qu'un neutron né dans V_j de façon isotrope et uniforme atteigne sans choc S ;
- de transmission P_{ss} pour qu'un neutron entrant uniformément et de façon isotrope(*) par S atteigne de nouveau S sans collision.

Quand les fuites interviennent, il faut corriger la *relation de conservation* par :

$$\sum_i P_{ji} + P_{jS} = 1 \qquad \textbf{(35)}$$

De même, pour les probabilités concernant les neutrons entrant par une surface :

$$\sum_i P_{Si} + P_{SS} = 1 \qquad \textbf{(36)}$$

Enfin, nous pouvons démontrer en explicitant les intégrales doubles qui les expriment que les probabilités volume/surface et inversement sont reliées par la *relation de réciprocité* :

$$P_{Si} = \frac{4V_i\Sigma_{t,i}}{S} \cdot P_{iS} \qquad \textbf{(37)}$$

avec :

P_{si}, la probabilité pour qu'un neutron entrant uniformément par S de façon isotrope subisse sa première collision dans V_i ;

$\frac{4V_i\Sigma_{t,i}}{S}$ représente la corde moyenne.

Le principe du calcul de réseau consiste à trouver P_{ij} en sommant les probabilités de collision après un nombre quelconque de traversée de cellule :

(*) Hypothèse de "courant plat" à la surface des cellules

$$P_{ji} = \underbrace{P_{ji}^{+}}_{\substack{\text{collision}\\ \text{dans la}\\ \text{cellule}}} + \underbrace{P_{jS}^{+} \cdot P_{Si}^{+}}_{\substack{\text{collision}\\ \text{dans la cellule}\\ \text{adjacente}}} + \underbrace{P_{jS}^{+} \cdot P_{SS} \cdot P_{Si}^{+}}_{\substack{\text{collsion après}\\ \text{traversée}\\ \text{d'une cellule}}} + \underbrace{P_{jS}^{+} \cdot P_{SS}^{2} \cdot P_{Si}^{+}}_{\substack{\text{collsion après}\\ \text{traversée de}\\ \text{deux cellule}}} + \cdots \qquad \textbf{(38)}$$

avec l'exposant "+" désignant les probabilités pour lesquelles le neutron ne sort pas de la cellule considérée.

En utilisant la somme des séries géométriques représentant les P_{ij}, **(38)** devient :

$$P_{ji} = P_{jj}^{+} + \frac{P_{jS}^{+} \cdot P_{Si}^{+}}{1 - P_{SS}} \qquad \textbf{(39)}$$

Le second terme de **(39)** représentant l'interaction entre cellules correspond à **l'effet Dancoff**.

Nous venons de voir qu'il est possible d'obtenir les flux dans le cas d'un réseau régulier à partir du calcul des P_{ji}. Cependant, pour des raisons de coût de calcul, des perfectionnements sont apportés au niveau du traitement tant de l'intérieur des cellules que sur leur surface, c'est à dire des échanges de neutron entre cellules (le terme cellule désigne ici une cellule d'un réacteur à eau sous pression : cellule carrée comprenant un crayon combustible cylindrique entouré d'une gaine et modéré par de l'eau). Nous allons les expliciter en prenant pour exemple le code APOLLO2.

Le principe général de ces perfectionnements est d'introduire outre les inconnues principales qui sont les flux dans chacun des volumes élémentaires, des inconnues subsidiaires : les courants aux interfaces. Cela permet d'introduire une (ou plusieurs) étape(s) intermédiaires - une (des) traversées d'interface - entre l'émission et la première collision lorsque ces deux événements ne se situent pas dans la même cellule. Grâce aux hypothèses simplificatrices qui sont faites, en outre, sur ces courants d'interface, nous aurons seulement à calculer des P_{ji} (ou des probabilités faisant intervenir des surfaces) pour les combinaisons où les deux indices sont relatifs à une même cellule.

Différentes hypothèses simplificatrices sur le calcul des probabilités de première collision et sur les courants d'interface sont possibles dans le code APOLLO2, nous présentons celles couramment utilisées dans les études de Sûreté-Criticité :

- Le modèle de **ROTH** pour lequel la cellule réelle est cylindrisée pour le calcul des probabilités de collision à l'intérieur de la cellule et pour celui des probabilités de transmission.

- Le modèle **UP0** se distingue du précédent par la différenciation des faces de la cellule réelle. Ceci permet de respecter une caractéristique physique essentielle qui est la probabilité de transmission d'un côté de la cellule avec lui-même doit être nulle, ce que n'assure pas le modèle de ROTH. Ce modèle offre deux possibilités de calcul des probabilités de collision à l'intérieur de la cellule ; celles-ci peuvent être calculées sur la cellule cylindrisée (nous obtenons le modèle de ROTH généralisé ou ROTH*N, correspondant aux données &UP0 &ROTH) ou sur la cellule carrée (données &UP0 &HETE). Dans le cadre de ce modèle les flux angulaires sont uniformes par face et isotropes en angle.
- Le modèle **UP1** se distingue du modèle UP0 par une représentation de l'anisotropie des flux angulaires par un développement P1 (voir Annexe A).

Enfin il faut noter que les approximations dues au traitement multicellule peuvent être évitées, en utilisant une méthode dite "de probabilités de première collision en géométrie à deux dimensions" (module Pij 2D exactes ou Marsyas dans le code APOLLO2). Les matrices des P_{ji} s'obtiennent alors en intégrant les noyaux de transport sur des cordes définies par un pas ΔR et un angle $\Delta\Phi$. Cette méthode plus coûteuse en temps de calcul sert de "référence" par rapport aux méthodes "P_{ij} multicellule".

2. La méthode de Monte-Carlo

Pour les études de criticité, la méthode de Monte-Carlo doit simuler, le plus exactement possible, le cheminement d'un neutron dans un milieu fissile en régime stationnaire.

Nous allons montrer comment à partir de l'équation intégrale du transport, il est possible de construire un processus statistique permettant de déterminer la valeur du facteur de multiplication.

Dans cette méthode, nous représentons la population neutronique par les deux densités :

- de *collision* $\Psi\left(\vec{r},E,\vec{\Omega}\right)$ qui n'est autre que le produit $\Sigma_t\left(\vec{r},E\right)\phi\left(\vec{r},E,\vec{\Omega}\right)$;
- d'*émission* $X\left(\vec{r},E,\vec{\Omega}\right)$ qui est la densité d'émission Q.

Le cheminement d'un neutron est ponctué par deux types de phénomènes intervenant alternativement :

- Le *transport dans l'espace*, c'est à dire le cheminement en ligne droite sans interaction avec la matière, régit par l'opérateur du transport intégral T (défini dans l'équation (8)) de noyau $e^{-\omega}$:

$$\Psi = TX \qquad \textbf{(40)}$$

- La *collision* avec un noyau d'atome de la matière constituant le système, régit par l'opérateur intégral de collision C de noyau $\left[\Sigma_s\left(\vec{r},E\right)/\Sigma_t\left(\vec{r},E\right)\right]\times P\left[\vec{r},E\to E',\vec{\Omega}\to\vec{\Omega}'\right]$ qui exprime les ré-émissions de neutrons après une collision ; le premier facteur de ce noyau tient compte que seules les diffusions y contribuent (les absorptions terminent les cheminements), le deuxième est la loi de probabilité régissant les changements (corrélés) d'énergie et de direction dans le cas d'une diffusion. En ajoutant les sources de fission aux ré-émissions, nous avons :

$$X = C\Psi + S \qquad \textbf{(41)}$$

Les fonctions Ψ et X peuvent faire intervenir toutes les variables mais l'opérateur T ne concerne que l'espace et l'opérateur C que l'énergie et la phase.

La méthode de Monte-Carlo consiste à développer en série de Neumann les deux densités pour traiter le neutron choc par choc depuis son émission par la source jusqu'à n parcours en ligne droite :

$$\Psi = \sum_{n=0}^{\infty}\Psi(n) \qquad X = \sum_{n=0}^{\infty}X(n) \qquad \textbf{(42)}$$

avec :

$$X(0) = S$$
$$\Psi(n) = TX(n) \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$
$$X(n+1) = C\Psi(n)$$

La Figure 4 présente l'organigramme d'une simulation Monte-Carlo d'histoires de neutron de l'émission jusqu'à l'absorption dans le système ou hors du système (fuite). Nous y avons fait figurer par des cercles les alternatives, par des cases blanches les calculs à effectuer et par des cases grisées les tirages au sort de variables aléatoires.

Nous remarquons que pour obtenir une précision statistique acceptable avec cette méthode, il faut simuler un très grand nombre d'histoires, pouvant par exemple, se chiffrer en dizaines de milliers.

Une difficulté supplémentaire se pose pour l'évaluation d'un facteur de multiplication dans un système fissile puisque nous ne connaissons pas à priori la distribution spatiale des sources. Une itération externe à partir d'une approximation initiale de cette répartition est donc nécessaire. L'évaluation du facteur de multiplication à la génération n est alors le rapport du nombre de neutrons émis à la génération n+1 sur celui de la génération n.
Ce nombre fluctue et évolue en fonction de n à cause des imprécisions statistiques, d'une part, et de l'évolution de la distribution des sources (convergeant lentement vers la distribution exacte), d'autre part.
Si nous traitons N générations, nous évaluons le facteur de multiplication en prenant la moyenne arithmétique des facteurs de multiplication de la génération n, ce qui réduit l'erreur statistique, mais en éliminant les premières générations pour lesquelles la distribution des sources risque d'être trop éloignée de la distribution exacte. Un problème d'optimisation, étudié dans la référence **[12]**, se pose donc entre les trois paramètres :

- nombre de générations traitées,
- nombre de générations supprimées,
- effectif de chaque génération.

CHAPITRE 3
LE FORMULAIRE DE CALCUL DE SURETE-CRITICITE : CRISTAL

Pour concevoir et dimensionner les premières installations du cycle du combustible, les criticiens utilisaient soit des règles empiriques[13] (par exemple des courbes expérimentales donnant la masse critique d'une sphère en fonction de sa concentration en uranium) soit ils résolvaient, à la main, l'équation du transport des neutrons sous une forme simplifiée (par exemple la théorie de la diffusion à deux groupes). Ces techniques de calcul étaient approchées et conduisaient à des marges de sécurité colossales : pour dimensionner une installation de criticité, on se fixait un K_{eff} de l'ordre de 0.6.

Aujourd'hui, avec l'essor de l'informatique, les codes de neutronique permettent, par des modélisations physiques plus fines, de résoudre l'équation du transport régissant une population de neutrons d'une configuration du cycle du combustible. Ainsi l'objectif actuel des criticiens est de développer un formulaire de calcul de criticité, comprenant des données de bases et un schéma de calcul constitué par un enchaînement de codes de neutronique, performant, capable de calculer les installations du cycle et minimiser les marges opérationnelles en toute confiance.

I. Présentation du formulaire CRISTAL

Jusqu'à présent, le formulaire de criticité utilisé à la DRN, transmis aux industriels COGEMA/SGN en 1993, est CRIBLE[14]. Mais ce formulaire construit avec des éléments de neutronique (bibliothèques et codes) d'ancienne génération (par exemple, le code APOLLO1 et la bibliothèque CEA86) ne pourra pas satisfaire les besoins futurs du programme nucléaire français. En effet la pérennité de ses outils n'est pas garantie à terme et son domaine d'applicabilité est trop restreint pour inclure les besoins nouveaux potentiels (combustible MOX, programme d'incinération des actinides,...). De plus une qualité physique accrue est nécessaire pour améliorer la précision des calculs et réduire ainsi les marges de sécurité grâce

à un meilleur traitement des équations du transport (par exemple meilleure prise en compte des fuites neutroniques) ou bien à la réduction des conservatismes de calcul (par exemple la prise en compte de l'usure du combustible appelé "crédit burn-up").

En 1995, une concertation interne au CEA[15] a défini les grandes options du nouveau formulaire français de criticité CRISTAL[16] qui bénéficie, d'une part, de l'expérience de tous les intervenants du domaine de la criticité en terme de développement et de qualification et, d'autre part, de la synergie forte avec les autres applications de la neutronique (la physique des réacteurs et la protection).
Le développement du formulaire CRISTAL s'appuie sur des codes de neutronique de la génération actuelle développés soit pour la physique des réacteurs (APOLLO2), les protections (TRIPOLI4) ou la criticité (MORET4) et sur une base de données nucléaires de qualité (JEF2). Une interface Homme-Machine (IHM), est incluse pour minimiser le travail des utilisateurs, les guider dans l'établissement des modèles et le choix des options des différents codes. L'IHM assure également le couplage entre CRISTAL et un formulaire de calcul d'évolution du combustible.

Le formulaire CRISTAL, présenté sur le synoptique de la Figure 5, comporte deux voies de calcul qui utilisent les données nucléaires de l'évaluation JEF2.2 :

- une **voie 'étalon'** qui est fondée sur le code Monte-Carlo à énergie continue TRIPOLI4 dont le principe est d'utiliser le minimum d'approximations physiques et de modélisation.
- une **voie 'standard'** qui est basée sur une formulation multigroupe des sections efficaces de la bibliothèque CEA93 ; ces sections sont autoprotégées éventuellement condensées et homogénéisées par le code APOLLO2 et utilisées par le code Monte-Carlo multigroupe MORET4 ou bien par les modules S_N d'APOLLO2.

II. Les outils de calcul du formulaire CRISTAL

1. Les données nucléaires de base

a) L'évaluation JEF2.2

Depuis le début des années 80, le projet JEF[17] (Join European File), développé par l'ensemble des acteurs Européens des données nucléaires, s'est fixé comme objectif la production régulière de fichiers cohérents de haute qualité, utilisables pour l'ensemble des applications nucléaires et qualifiés suivant une démarche originale garante de qualité.

L'approche de la qualification formalisée tente de faire la synthèse de l'information microscopique (les données nucléaires et leurs incertitudes) et macroscopique (les mesures intégrales et leurs incertitudes). Une combinaison de ces informations aboutit à une estimation de la qualité des données et à des tendances quant à leur amélioration éventuelle. L'ensemble des domaines de la neutronique contribue à ce processus, y compris la criticité qui fournit des informations utiles pour des isotopes et des domaines d'énergie non couverts par d'autres intervenants. La qualité maximale est atteinte du fait de l'intégration de l'ensemble de l'information disponible et des tendances quant aux insuffisances des données nucléaires.

La qualification du formulaire CRISTAL s'intègre dans ce schéma général de qualification des données nucléaires. En effet, les calculs d'expériences intégrales, jugées utiles à la qualification globale, seront mis à la disposition des acteurs de la qualification de JEF.

Les données nucléaires utilisées par le formulaire CRISTAL sont issues de l'évaluation JEF 2.2.

b) La bibliothèque CEA93

La bibliothèque CEA93[18] est une bibliothèque de sections efficaces et de sections effectives à 99 et 172 groupes d'énergie des neutrons. Elle a été élaborée à partir de l'évaluation JEF2.2 par le système NJOY-THEMIS[19].

Cette bibliothèque bénéficie des études de qualification menées dans le cadre de la physique des réacteurs[20][21] ainsi que des travaux réalisés dans le cadre du groupe de travail JEF.

Cette bibliothèque est étendue aux besoins spécifiques des études de criticité et intègre l'ensemble des isotopes nécessaires aux calculs de criticité notamment les quinze produits de

fission et les actinides majeurs et mineurs nécessaires aux études portant sur le Crédit BurnUp.

2. Le code APOLLO2

Le code APOLLO2[22], écrit en FORTRAN 77, est un code modulaire conçu suivant l'architecture ACROPOLE[23].

Au niveau système, la gestion de la mémoire s'effectue de façon dynamique (librairie GEMAT), le langage utilisateur est le langage GIBIANE.

APOLLO2 résout l'équation de Boltzmann soit sous sa forme intégrale, par la méthode des probabilités de collision (Pij), soit sous forme intégro-différentielle, par la méthode aux ordonnées discrètes (S_N).

Il est capable d'utiliser des bibliothèques comportant les développements des sections de transfert en polynôme de Legendre à un ordre quelconque.

Ces développements ne sont utiles qu'à l'ordre 1 pour les calculs Pij mais peuvent être exploités en S_N ou Monte-Carlo.

Une différence importante par rapport au code APOLLO1 se situe dans les modélisations utilisées dans les calculs d'autoprotection.

Dans APOLLO1, l'équivalence homogène-hétérogène est réalisée sur un seul macrogroupe avec l'approximation résonance étroite.

Dans APOLLO2, on dispose de plusieurs modèles de ralentissement : le modèle résonance étroite (celui disponible dans APOLLO1), le modèle résonance large et le modèle statistique.

La détermination des taux effectifs peut être réalisé groupe par groupe ou sur un ou plusieurs macrogroupes recouvrant un certain nombre de groupes g d'énergie appelés Macrogroupes de Bell.

L'interaction spatiale, résultant de la présence d'isotopes résonnant dans plusieurs régions d'autoprotection (découpage des pastilles combustibles en couronnes) ou encore dans des milieux physiques différents (cas des milieux dissolveurs en criticité), peut être traitée soit par l'option PIC, soit par la méthode de la matrice de dilution.

Les modules qui résolvent l'équation du transport par la méthode S_N pour des géométries unidimensionnelles ou bidimensionnelles, y compris un module qui résout l'équation de la

diffusion pouvant ainsi fournir un flux d'initialisation au calcul S_N ont été développés sur la base d'une version du code BISTRO[24].

Les systèmes d'équation impliqués dans la méthode S_N étant longs à résoudre, des techniques d'accélération sont employées dans APOLLO2.
Ainsi, les itérations externes sont accélérées par une méthode de Tchebycheff et les itérations thermiques emploient une méthode de rééquilibrage du bilan par groupe[25].
D'autre part, trois méthodes numériques très efficaces (surrelaxation, directions alternées et "Strong Implicit method") sont disponibles pour résoudre l'équation de la diffusion. La méthode couramment employée est celle des directions alternées.

3. Le code MORET4

Le code MORET[26] est un code à 3 dimensions qui résout l'équation de Boltzmann par la méthode de Monte-Carlo en utilisant les sections efficaces multigroupes autoprotégées et éventuellement homogénéisées et condensées par le code APOLLO2. Il permet donc de calculer le facteur de multiplication de configurations quelconques et plus ou moins complexes à 3 dimensions ainsi que les taux de réaction dans les différents volumes de la géométrie. Développé depuis 1970 au Service d'Etudes de Criticité de l'IPSN, il a été appliqué à la criticité des procédés industriels mis en oeuvre dans les laboratoires et usines du cycle du combustible nucléaire.
Cette version 4 du code MORET comprend les récents développements sur la représentation de l'anisotropie de la diffusion des neutrons[27] et sur l'accélération de la convergence dans le cas des faibles couplages neutroniques[28].

4. Le code TRIPOLI4

TRIPOLI4[29] est un code de calcul du transport des particules (neutron et gamma), tridimensionnel et polycinétique, fondé sur la méthode de Monte-Carlo.
Il a pour but de traiter deux grandes catégories de problèmes:
"Les problèmes de protection" : propagation de particules sur de longues distances et avec de fortes atténuations de flux ; ce sont des problèmes à source en milieu non multiplicateur, en régime stationnaire ou dépendant du temps.
"Les problèmes de neutronique" : comportement des neutrons dans un système fissile (le milieu est multiplicateur de neutrons) critique ou sous-critique à source, sans ou avec source fixe, en régime stationnaire.
Dans le formulaire CRISTAL, TRIPOLI4 est le code de référence ou "étalon" permettant de valider les codes reposant sur des modélisations. Cela exige en particulier que TRIPOLI4 utilise, pour sa simulation, la représentation la plus exact possible des données nucléaires de base issues des évaluations.

Le code TRIPOLI4 fait suite aux versions précédentes de TRIPOLI (TRIPOLI1, TRIPOLI2 et TRIPOLI3) dont le développement a été entrepris fin des années 60 et début des années 70. Cependant TRIPOLI4 se distingue fondamentalement des versions antérieures sur plusieurs points :

- le langage de programmation : langages C et C++ ;
- la description de la géométrie : forme combinatoire ou surfacique ;
- la représentation des données nucléaires : représentation "exacte" ponctuelle en énergie ;
- les sources : distribution prédéfinie par le code ou définie algébriquement ;
- la simulation réalisée sur tout le domaine énergétique ;
- les estimateurs : cohérence avec MORET4 ;
- le calcul de la variance : méthode de rééchantillonage bootstrap ;
- le parallélisme : version parallélisée du code ;
- le calcul des perturbations ;
- la condensation des sections efficaces.

5. L'Interface Homme/Machine (IHM)

Une interface homme/machine est développée, par le groupe IHM CRISTAL[30], pour l'utilisation "industrielle" du formulaire CRISTAL. Le champ d'application très étendu, la variété des configurations géométriques et des milieux chimiques traités, la grande richesse des spectres neutroniques,... nécessitent des formalismes généraux et robustes. L'IHM permet une mise en oeuvre aisée du formulaire (pour minimiser le travail de l'utilisateur) et l'utilisation des procédures et de schémas de calculs préalablement optimisés (pour guider l'utilisateur dans le choix des options des différents codes).

6. DARWIN

Le formulaire du cycle DARWIN[31] sera couplé, à l'aide de l'interface homme/machine, au système CRISTAL pour lui fournir l'inventaire combustible dans les études de Sûreté-Criticité mettant en oeuvre du combustible irradié.

III. Les étapes de développement et qualification du formulaire CRISTAL

Nous avons décrit dans les précédents chapitres, l'équation qu'il faut résoudre et nous avons sélectionné les données nucléaires et codes de calcul nous permettant de le faire.
Il faut à présent organiser ces données et codes de manière à obtenir un "bon" formulaire.
Une première étape sera la mise au point puis la validation des schémas de calcul pour les différents milieux de la criticité : on sélectionnera les options du code utilisé les mieux adaptées au problème que l'on traite puis on validera ces recommandations soit par comparaison méthode à méthode étalon soit par comparaison avec une expérience.
L'étape suivante sera alors la qualification expérimentale à proprement dite : il s'agit alors d'utiliser les données nucléaires et les schémas de calcul recommandés et de comparer la valeur calculée à celle de l'expérience (le plus souvent en criticité on compare le K_{eff}). Cette qualification doit donc s'appuyer sur un ensemble d'expériences modélisant la majorité des situations rencontrées au cours du cycle du combustible.

La base de données expérimentales sur laquelle nous nous sommes appuyés dans le cadre de cette thèse, fait l'objet du chapitre suivant. L'optimisation puis la qualification du formulaire seront ensuite présentées.

CHAPITRE 4
LA BASE DE DONNEES EXPERIMENTALES DU FORMULAIRE CRISTAL

Dans les généralités, nous avons vu que le champ d'application des études de Sûreté-Criticité était vaste et incluait aussi bien les ateliers et usines du cycle ou de la production que le transport et l'entreposage de matière fissile.

Le formulaire de Sûreté-Criticité CRISTAL doit être capable de traiter toutes ces configurations du cycle et elles sont nombreuses puisque plus d'une centaine de situations ont pu être recensées[32]! Il est donc impératif de subdiviser ces situations en grandes classes à l'intérieur desquelles les configurations étudiées partagent soit des caractéristiques de physique neutronique (enrichissement, composition isotopique,...), soit des caractéristiques fonctionnelles (milieux dissolveurs, milieux solutions,...). Les classes suivantes ont été retenues pour la base expérimentale du formulaire CRISTAL[33] :

- les réseaux réguliers de crayon,
- les milieux solutions fissiles,
- les milieux faiblement modérés (poudres),
- les milieux dissolveurs,
- les milieux métalliques,
- les assemblages en piscine ou château de transport,
- les milieux en interaction neutronique,
- le crédit Burn up.

A l'intérieur de chacune de ces classes, nous trouverons évidemment des sous-classes qui peuvent être établies par exemple en fonction de la matière fissile étudiée ou en fonction d'un type de réflecteur utilisé.

Nous venons de voir que cette base expérimentale englobait un grand nombre d'expériences de criticité. Dans le cadre du travail de thèse, il serait difficile voire impossible de qualifier le formulaire CRISTAL à partir de toutes ces configurations. Nous avons donc sélectionné, dans la première partie de ce chapitre, les expériences les plus représentatives de chacune des trois classes de problème suivantes : les milieux dissolveurs, les milieux solutions et les milieux piscines de stockage ; d'ailleurs ces trois situations cernent la plupart des études réalisées dans le champ de la Sûreté-Criticité.

La majeure partie de la base expérimentale du formulaire CRISTAL est extraite de la base internationale de l'International Criticality Safety Benchmark Evaluation Project (ICSBEP)[**34**]. Nous avons contribué à cette base de données en réévaluant l'expérience CRISTO II ; ceci fait l'objet de la seconde partie de ce chapitre.

I. Sélection d'expériences pour la qualification du formulaire de criticité

1. Expériences de type "dissolveurs"

Par souci de comparaison avec l'ancien formulaire de criticité CRIBLE et des codes internationaux, nous avons sélectionné les benchmarks OCDE n°13 et 14[**35**], réalisés à BNFL (Angleterre) et qui traitent de la dissolution d'assemblage UO_2 type REP.
Ces expériences, présentées sur la Figure 6, mettent en jeu un réseau de crayons UO_2 enrichis à 4.3 % en ^{235}U. Les crayons baignent dans une solution de nitrate d'uranyle ayant chacune une concentration en gadolinium respectivement de 0.184 g/l et 0.124 g/l. Une cuve cylindrique contient la solution et les crayons. C'est en jouant sur les concentrations en gadolinium et les hauteurs critiques que l'approche sous-critique (voir annexe B) sera réalisée.
Ces expériences sont représentatives des problèmes de dissolutions du combustible REP car elles couvrent, d'une part, l'optimum de modération (le rapport de modération défini par le volume de modérateur sur le volume de combustible va de 2.3 à 4.95) et, d'autre part, le problème de la double hétérogénéité, que nous aborderons plus tard.

Les caractéristiques des deux benchmarks sont présentées dans les tableaux suivants.

Tableau 2 : Caractéristiques des assemblages

EXPERIENCES	TYPE DE COMBUSTIBLE ET ENRICHISSEMENT	NOMBRE DE CRAYONS	PAS (cm)	RAPPORT DE MODERATION
13	UO_2 4.3% en ^{235}U	451	2.286	2.305
14	UO_2 4.3% en ^{235}U	433	2.794	4.95

Tableau 3 : Paramètres critiques

EXPERIENCES	HAUTEUR CRITIQUE (cm)	CONCENTRATION GADOLINIUM (g/l)
13	74.4	0.184
14	56.5	0.124

2. Expériences représentatives des milieux solutions fissiles

Les solutions fissiles sont des milieux homogènes de nitrate d'uranium et/ou de plutonium. Elles sont à priori simples à étudier puisqu'elles ne font pas intervenir des problèmes de schéma de calcul lié à l'hétérogénéité. Seul l'aspect spectral est important et les écarts calcul-expérience que nous pourrons éventuellement observer lors de la qualification seront dus aux incertitudes sur les sections efficaces.

Les sections efficaces des isotopes de l'uranium sont généralement bien connues puisqu'elles font l'objet d'une qualification toute particulière pour les REP**[36][37]**.

Dans le paragraphe I.2.a, nous avons donc sélectionné des expériences qui permettent de qualifier les isotopes du plutonium et plus particulièrement la résonance à 1 eV du ^{240}Pu qui contribue à elle seule pour 80% à l'absorption totale des résonances.

Les expériences que nous avons choisies et décrites dans le paragraphe I.2.b mettent en jeu des solutions de nitrate mixte d'uranium/plutonium. Celles-ci ne donnent aucune information supplémentaire sur la qualification des noyaux lourds mais sont très intéressantes car représentatives des solutions que l'on rencontre au niveau du retraitement directement après la dissolution des combustibles.

Ces deux séries de benchmarks sont extraites de l'International Handbook of Evaluated criticality Safety Benchmark Experiments (documents ICSBEP).

a) Les expériences VALDUC[38](Titre ICSBEP : "PU-SOL-THERM-012")

Les expériences présentées ici ont été menées sur le site de Valduc (CEA-FRANCE). Elles traitent de solutions de nitrate de plutonium, avec 19% de Pu240, contenues dans une cuve en acier inoxydable parallélépipédique (130×130×100 cm). Cette cuve est surmontée d'un réflecteur mobile constitué par une boîte parallélépipédique avec des parois en lucoflex $(CH_2=CHCl)_n$. Deux types de configuration (cf. Figure 7) ont été étudiées :

Configuration 1 :

- cuve entièrement réfléchie par de l'eau
- le réflecteur mobile est rempli d'eau et flotte sur la solution
- la concentration en plutonium varie de 13.2 à 19.7 g/l

Configuration 2 :

- les faces latérales et inférieures de la cuve sont réfléchies par de l'eau (5 faces réfléchies)
- le réflecteur mobile est vide et verrouillé en position haute
- la concentration en plutonium varie de 13.2 à 105 g/l

Dans des cas minimisant les fuites (6 faces réfléchies), les expériences Valduc servent à qualifier les sections efficaces des noyaux lourds tel que le ^{240}Pu.
La description géométrique de ces expériences est représentée sur la Figure 7 et les principaux paramètres sont donnés dans le Tableau 4.

Tableau 4 : Caractéristiques des expériences Valduc traitées

Concentration en plutonium (g/l)	6 faces réfléchies		5 faces réfléchies	
	cas	Hauteur critique (cm)	cas	Hauteur critique (cm)
105			6	16.32
52.7			8	17.63
21.7			11	27.15
19.7	1	28.17	12	29.90
17.7	2	32.25		
14.7	4	45.68		
13.2	5	66.15	13	67.46

b) Les solutions PNL-CML[39] (Titres ICSBEP : "MIX-SOL-THERM-002" et "MIX-SOL-THERM-004")

Ces expériences ont été menées dans le cadre d'un programme conjoint entre les Etats-Unis (Department of Energy) et le Japon (Power reactor and Nuclear Fuel Development Corporation) et ont été réalisées à Pacific Northwest Laboratory (PNL-CML).

Nous avons sélectionné deux types de configurations :

- des expériences utilisant une grande cuve cylindrique (de diamètre 68.68 cm) réfléchie par de l'eau répertoriées dans l'ICSBEP sous le titre MIX-SOL-THERM-002
- des expériences utilisant une petite cuve cylindrique (de diamètre 35.39 cm) nue ou réfléchie par de l'eau de titre ICSBEP MIX-SOL-THERM-004

Ces expériences servent à qualifier les milieux solutions et permettent aussi d'évaluer l'influence du rapport $\mathrm{Pu}/(\mathrm{Pu}+\mathrm{U})$ sur la réactivité. Les configurations expérimentales sont présentées sur les Figure 8 et Figure 9 ; leurs caractéristiques sont données dans le Tableau 5.

Tableau 5 : Caractéristiques des expériences PNL-CML

EXPERIENCES	Réflecteur	Pu (g/l)	U (g/l)	$Pu/(Pu + U)$	Hauteur Critique (cm)
Grand cylindre : diamètre intérieur 68.68 cm					
58	Eau	11.88	11.05	0.52	76.80
61	Eau	12.19	41.04	0.23	81.72
Petit cylindre : diamètre intérieur 35.39 cm					
65	Vide	41.69	63.38	0.40	44.46
66	Eau	41.89	63.65	0.40	28.11
69	Eau	119.04	174.67	0.41	25.26
70	Vide	118.9	174.53	0.41	41.08
77	Vide	172.56	262.79	0.40	57.97
78	Eau	172.82	262.55	0.40	28.93

3. Les expériences de stockage en piscine

a) L'expérience CRISTO II

L'expérience CRISTO II**[40]** est destinée à l'étude des réseaux de stockage compact avec une lame d'eau interassemblage de 4.5 cm et de 6.5 cm (cette dernière configuration ne sera pas étudiée par manque de dépouillement des informations expérimentales) et permet d'intercomparer l'antiréactivité introduite par différents types de plaques absorbantes de séparation (en acier inoxydable, en acier borée dopé à 2.6 mg/cm^2 et à 9.6 mg/cm^2 de B^{10}, en cadmium).

Elle a été réalisée dans le coeur du réacteur EOLE (CEA Cadarache) qui est divisé en deux zones (cf. Figure 10 et Figure 11) :

- Une partie centrale appelée cavité ou Zone Expérimentale dite ZE. Elle est constituée par une cuve en aluminium qui contient le réseau à étudier.
- Un coeur nourricier ou Zone Nourricière dite ZN composé d'éléments à plaques d'alliage aluminium-uranium enrichi à 90% et 93%. Ces éléments sont modérés à l'eau légère dans les conditions ambiantes de température et de pression.

Le coeur nourricier permet d'assurer la criticité de l'ensemble. Le contrôle du réacteur est réalisé par quatre barres fourchettes en AIC (Aluminium Indium Cadmium) coulissant dans des éléments combustibles spéciaux du coeur nourricier.

La cavité expérimentale peut contenir deux types de réseaux, les réseaux de type "assemblage" avec lames d'eau intermédiaires, et les réseaux réguliers ; nous les présentons dans les paragraphes suivants.

Les réseaux de type "assemblage"

Les réseaux de type "assemblage", appelés aussi "réseaux de stockage", sont composés de 4 assemblages type REP de 14 x 14 crayons UO_2 avec 16 trous d'eau et sont disposés dans la cavité expérimentale selon la Figure 12. Les caractéristiques du combustible sont semblables à celle d'un REP 17 x 17 avec un enrichissement de 3 % (gainage zircaloy). Pour assurer la criticité du réacteur, la cavité est entourée d'une zone nourricière, constituée d'éléments combustibles à plaques de type MTR ; un chargement de plus en plus abondant de plaques U-Al permet d'étudier dans la zone expérimentale des absorbants de plus en plus efficaces.

Cinq configurations simulant des piscines de stockage avec ou sans alvéoles (cf. Figure 13 et Figure 14) sont étudiées:

- sans absorbant (configuration A),
- avec écran en acier inoxydable (configuration B),
- avec écran en acier boré à 2.6 mg/cm^2 de B^{10} (configuration C),
- avec écran en acier boré à 9.6 mg/cm^2 de B^{10} (configuration D),
- avec écran en cadmium (configuration E).

Ces différentes plaques sont situées à 9.41 cm par rapport au centre du réseau de stockage ce qui correspond à une distance de 0.59 cm par rapport à l'extrémité des cellules périphériques. Leurs principales caractéristiques sont rappelées sur le Tableau 6 et le Tableau 7.

Tableau 6 : Caractéristiques des écrans absorbants en acier inoxydable et cadmium

ECRANS ABSORBANTS		Acier inoxydable	Sandwiches Acier inox + Cd
Epaisseur		2 mm	Inox : 2x0.5 mm Cd : 0.7 mm
Densité		7.83 g/cm^3	Inox : 7.83 g/cm^3 Cd : 8.64 g/cm^3
Composition massique en %	Fe	71.01	71.01
	Cr	17.9	17.9
	Ni	9.1	9.1
	C	0.024	0.024
	B	< 0.001	Inox : < 0.001
	Mo	0.05	0.05
	Mn	1.45	1.45
	Si	0.46	0.46
	Cd		Cd : 100

Tableau 7 : Caractéristiques des écrans en acier boré

ECRANS ABSORBANTS		Acier boré 2.6 mg/cm^2 B^{10}	Acier boré 9.6 mg/cm^2 B^{10}
Epaisseur		1.57 mm	5.5 mm
Densité		7.79 g/cm^3	7.74 g/cm^3
Composition massique en %	Fe	66.12	65.31
	Cr	18.44	18.25
	Ni	12.95	13.9
	Mn	0.62	0.81
	Mo	0.18	0.065
	C	0.035	0.038
	P	0.03	0.03
	S	0.006	0.011
	Si	0.55	0.46
	B naturel	1.07	1.125
Composition isotopique en %	B^{10}	20	20.08
	B^{11}	80	79.92

Les réseaux réguliers

Les réseaux réguliers sont formés de 28 x 28 crayons combustibles identiques au pas de 1.58 cm (voir Figure 15). Ces crayons ont les mêmes caractéristiques que ceux de type "assemblage". Les configurations de type réseaux réguliers (A', B', C', D', E') sont équivalentes

aux configurations de type "assemblage" (A, B, C, D, E). Cette équivalence est obtenue par l'ajout de bore dans les configurations de type réseaux réguliers.

L'installation expérimentale a permis des mesures :

- de distributions radiales et axiales de puissance dans la zone expérimentale et dans le coeur nourricier (spectrométrie gamma et chambres à fissions),
- de distributions de flux thermiques (détecteurs manganèse),
- d'indices de spectre (détecteurs et chambres à fission).

Ces mesures permettent de valider les calculs de coeur d'interprétation et de déterminer les causes d'un écart éventuel entre l'expérience et le calcul pour le facteur de multiplication infini des réseaux de stockage étudiés.

Le facteur de multiplication infini du réseau de stockage est mesuré à partir d'une équivalence avec un réseau régulier qu'on substitue dans la cavité et qu'on empoisonne par dilution d'acide borique jusqu'à la criticité du coeur. Le facteur de multiplication infini de ce réseau régulier " équivalent " est connu à partir des mesures des laplaciens radiaux et axiaux.

b) Les expériences Valduc

Les expériences sélectionnées sont extraites d'un important programme expérimental réalisé sur l'appareillage B du Centre de VALDUC**[41]**.

Les configurations traitées représentent des crayons combustibles UO_2 (type REP), enrichis à 4,75 % en ^{235}U, répartis en quatre assemblages, chacun d'entre eux formant un réseau de 18 x 18 crayons au pas carré de 1,35 cm ou 1.6 cm.

Les quatre assemblages sont disposés en croix et des écrans neutroniques cruciformes en cadmium, en hafnium, en boral ou en acier boré sont introduits dans les espaces interassemblages.

Les caractéristiques des écrans utilisés sont présentées dans les tableaux ci-après.

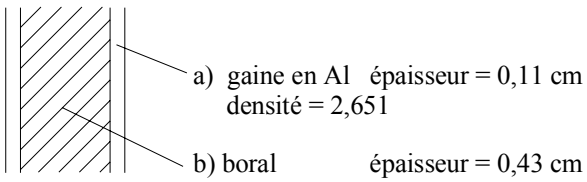
Tableau 8 : Caractéristiques des écrans utilisés

TYPE D'ECRAN	Hauteur (cm)	Largeur (cm)	Epaisseur (cm)	Densité
Hafnium	100	100	0.0146	13.29
Cadmium	100	70	0.08	8.65
Acier boré	100	70	0.155	8.033
Boral	100	70	0.65	2.6189

Tableau 9 : Composition de l'acier boré

ELEMENT	% en poids	ELEMENT	% en poids
C	0.036	Cr	18.49
Si	0.61	Ni	12.99
Mn	0.68	B	1.1
P	0.030	Fe	66.058
S	0.006		

Tableau 10 : Composition de l'écran en boral



Densité	Nombre d'atomes en 10^{24} at/cm^3		
	B	C	Al
2.6189	0.032357	0.0080894	0.041858

Dans les configurations que nous étudions, ces écrans sont placés au centre de l'interassemblage, ou forment des alvéoles de stockage.

Dans ces expériences Valduc, on mesure la hauteur d'eau rendant la configuration critique ; les hauteurs critiques mesurées pour les différents cas sont regroupées dans le Tableau 11 et le Tableau 12.

Les configurations géométriques de ces expériences sont présentées sur la Figure 16 et la Figure 17.

Les tableaux suivants regroupent les paramètres relatifs aux expériences sélectionnées.

Tableau 11 : Caractéristiques des piscines avec écran au centre de l'interassemblage, Pas = 1.35 cm

EXPERIENCES	Absorbant	Distance entre assemblages (cm)	Hauteur Critique (cm)
1890	Hafnium	1.8	37.66
1894	Hafnium	5.8	53.4
1856	Cadmium	1.7	38.61
1860	Cadmium	5.8	56.84
1910	Acier boré	1.7	33.83
1914	Acier boré	5.7	50.82
1906	Boral	5.8	70.61

Tableau 12 : Caractéristiques des piscines avec alvéoles de stockage Pas = 1.6 cm

EXPERIENCES	Absorbant	Distance entre étuis (cm)	Hauteur Critique (cm)
1988	Boral	0.5	53.01
1991	Boral	2	72.96
1974	Acier boré	0.6	34.33
1983	Acier boré	2	40.01

4. Les benchmarks théoriques des milieux dissolveurs

Parallèlement à cette base de données purement expérimentales, il faut considérer deux Benchmarks OCDE qui ont été spécifiquement conçus pour traiter les milieux dissolveurs et les problèmes physiques qui peuvent leur être associés.

L'élaboration de ces deux cas théoriques s'est révélée nécessaire étant donné le peu d'expériences existantes pour traiter le délicat problème des milieux dissolveurs.

a) Benchmark OCDE n°19[42]

Le combustible UO_2 se présente sous forme de pastilles sphériques de rayon r = 0,05 cm ou r = 1 cm.

L'enrichissement en ^{235}U est de 4 %.

Ces pastilles baignent soit dans une solution d'acide nitrique (7,5 M) contenant 1 g/l de nitrate de gadolinium soit dans une solution d'acide nitrique (3 M) contenant 300 g/l de nitrate d'uranyle et 1 g/l de nitrate de gadolinium.

Les pastilles sont arrangées suivant un pas carré pour lequel le "packing fraction" ou la "fraction volumique" appelé P.F, qui est le rapport volume de combustible sur volume de la cellule (il se déduit facilement du rapport de modération R_{mod} par $P.F = 1/(1 + R_{mod})$) prend les valeurs 0.3 ; 0.4 ; 0.5 ; 0.6 ; 0.7.

Une fraction volumique de 0,3 correspond à un REP "froid" alors qu'une fraction volumique de 0,4 correspond au REP en fonctionnement nominal.

Les cas P.F = 0.5 ; 0.6 ; 0.7 correspondent à des réseaux très sous-modérés ; enfin, la valeur extrême P.F = 0.7 correspondant au rapport de modération 0.43 représente le réacteur de projet le plus sous-modéré étudié en France[43].

On peut noter que les deux types de solutions étudiées, sans combustible dans la solution et avec combustible permettent de traiter différents problèmes. Ainsi, la solution sans combustible dissous permet de découpler des problèmes tels que la taille des pastilles en dissolution ou le fait que l'on soit dans un réseau sous-modéré du problème de la double hétérogénéité. Ce problème de double hétérogénéité est lui spécifiquement représenté par la solution contenant le combustible.

b) Benchmark OCDE n°20[44]

Contrairement au problème n°19 précédent, représentatif d'un problème dissolveur réaliste où le combustible se dissous dans une solution d'acide nitrique, ce benchmark n°20 est plutôt représentatif d'une situation accidentelle où le combustible se retrouve dans le modérateur (accident de rupture de gaine, accident de type Tree Mile Island, ...).

Ce problème a été élaboré par Oak Ridge National Laboratory (ORNL).

Le combustible est de l'UO_2 enrichi à 2.5 %. Le pas du réseau est triangulaire et deux fractions volumiques sont considérées ; l'une égale à 0.4 l'autre à 0.6.
Le combustible se présente sous forme de pastilles sphériques qui baignent dans une solution d'eau borée à 1500 ppm.
Le diamètre des pastilles est variable suivant le pourcentage de combustible qui passe en solution.

Les pourcentages de combustibles restant dans la pastille, celui passant dans l'eau borée et le diamètre associé sont présentés dans le Tableau 13.

Tableau 13 : Caractéristiques du Benchmark OCDE n°20

Pourcentage d'UO_2 dans la pastille	Pourcentage d'UO_2 dans l'eau borée	Diamètre de la pastille (cm)
100 %	0 %	0.96
75 %	25 %	0.872
50 %	50 %	0.762
25 %	75 %	0.605

II. Contribution à la base de données expérimentales du Formulaire CRISTAL

Comme nous venons de le voir, l'expérience CRISTO II a été réalisée dans le réacteur EOLE au CEA-Cadarache, et traite de réseaux de stockage compact. Effectuée en 1980, elle n'a jamais été, jusqu'à ce jour, utilisée pour la qualification des formulaires de criticité.
Afin d'intégrer cette expérience dans la base de données expérimentales du formulaire CRISTAL, nous l'avons réévaluée et soumise au groupe de travail de l'ICSBEP.
Nous décrivons d'abord le rôle de ce groupe de travail pour mieux comprendre l'objectif des études menées sur la réévaluation de l'expérience CRISTO II.

1. Le projet ICSBEP

L'idée d'évaluer des expériences de Sûreté-Criticité a été émise au "Department of Energy (DOE)" aux Etats-Unis en 1992. Ce projet appelé "CSBEP" (Criticality Safety Benchmark Evaluation Project) s'est rapidement étendu aux autres pays concernés par le cycle du combustible. Ainsi l'ICSBEP ("I" pour International) est maintenant une activité officielle de l'OCDE-AEN (Organisation pour la Coopération et le Développement Economique - Agence pour l'Energie Nucléaire).

Depuis le début de l'énergie nucléaire, des milliers d'expériences de criticité ont été réalisées. La majeure partie d'entre elles n'ont pas été menées avec un bon niveau d'assurance qualité et ne sont pas bien documentées. Les missions du groupe de travail de l'ICSBEP, destinées à l'évaluation des expériences, sont donc :

- d'identifier et d'évaluer les données expérimentales,
- de vérifier et d'étendre les données à l'aide de la documentation originale (ou révisée), des expérimentateurs ou bien du montage expérimental,
- de compiler les données sous un format standard ("format ICSBEP"),
- de calculer chaque expérience,
- de créer un document unique comprenant les données vérifiées.

Une fois évaluées, ces expériences doivent répondre à des critères d'acceptation, comme par exemple réaliser une série d'expériences pour montrer la reproductibilité des résultats. Ces critères sont établis par un groupe indépendant au DOE : le PCBWG "Physics Criteria for Benchmarks Working Group".

Les expériences acceptées sont regroupées et classées selon leur numéro d'identification dans les documents ICSBEP, appelés "International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments". Ce numéro a la forme suivante :
(Matériau fissile)-(Forme physique)-(Spectre)-(Numéro d'identification à trois chiffres) ;
par exemple, pour la solution de nitrate de plutonium décrite précédemment, nous obtenons le numéro suivant : PU-SOL-THERM-002.
Ces expériences forment ainsi une base de données expérimentales internationale qui est utilisée par les ingénieurs de la Sûreté-Criticité pour valider leurs techniques de calcul afin

d'établir le minimum de marges sous-critiques lors de leurs opérations avec de la matière fissile.

2. La réévaluation de l'expérience CRISTO II

Il y a plus d'une quinzaine d'années, l'expérience CRISTO II a fait l'objet de nombreuses études**[45][46]** et était plus particulièrement utilisée pour la qualification d'anciens schémas de calcul comme APOLLO1-DOT.

Aujourd'hui, afin de soumettre cette expérience à l'ICSBEP, nous la réévaluons en utilisant les nouveaux outils de calcul et nous créons un document unique au format standard ICSBEP de tous les rapports expérimentaux existants. Nous allons présenter ici les études menées sur sa réévaluation.

a) Méthode d'analyse des résultats expérimentaux CRISTO II

Comme nous l'avons vu lors de la description de l'expérience CRISTO II, le facteur de multiplication infini du réseau de stockage K_{∞}^{sto} est mesuré à partir d'une équivalence avec un réseau régulier. Nous rappelons ci-après cette méthode de la "pesée" du K_{∞}^{sto} :

1. Dans la cavité expérimentale, on substitue le réseau de stockage par le réseau régulier (la zone nourricière reste évidemment inchangée).

On ajoute de l'acide borique dans le réseau régulier jusqu'à la criticité du coeur et on obtient ainsi $K_{eff}^{sto} = K_{eff}^{reg} = 1$ (en fait les deux coeurs équivalents présentent une faible réactivité résiduelle, de l'ordre de la centaine de pcm**[40]**, qui est mesurée avec une grande précision).

2. On mesure les laplaciens axiaux et radiaux du réseau régulier et on en déduit le facteur de multiplication infini expérimental de ce réseau régulier $K_{\infty,exp}^{reg}$ par la relation $K_{\infty,exp}^{reg} = 1 + M^2 B_m^2$ en utilisant l'aire de migration M^2 donnée par le code APOLLO2.

Nous pourrions directement exploiter cette valeur du $K_{\infty,exp}^{reg}$ pour connaître le K_{∞}^{sto} expérimental si les effets d'interaction Zone expérimentale/Coeur nourricier restaient les mêmes dans les deux types de coeur. En fait, ces effets diffèrent**[47]** : variation des effets de couplage de spectre et des poids relatifs entre ZE et ZN et modification du niveau de fuite entre les deux types de coeurs expérimentaux.

Afin de comprendre comment interviennent ces effets d'interaction, décomposons le K_{eff} par le bilan neutronique suivant(*)**[48]** :

$$K_{eff} = \frac{P^{tot}}{A^{tot}} = \frac{P^{tot}}{A^{coeur}} \times \frac{A^{coeur}}{A^{coeur} + A^{refl}} = K_{\infty}^{coeur} \times F \qquad \textbf{(43)}$$

P^{tot}, A^{tot}, A^{coeur}, A^{refl}, K_{∞}^{coeur}, F sont respectivement la production totale (production coeur), l'absorption totale, l'absorption dans le coeur, l'absorption des réflecteurs (graphite+eau), le facteur de multiplication infini du coeur, le facteur antifuites (fuites radiales et fuites axiales).

Le K_{∞}^{coeur} peut se décomposer en facteurs de multiplication infini effectifs K_{∞} (nous avons volontairement omis l'étoile pour simplifier les notations) des deux zones fissiles et leurs poids relatifs en absorption respectifs A_{rel} :

$$K_{\infty}^{coeur} = \frac{P^{ZE}}{A^{ZE}} \cdot \left(\frac{A^{ZE}}{A^{ZE} + A^{ZN}} \right) + \frac{P^{ZN}}{A^{ZN}} \cdot \left(\frac{A^{ZN}}{A^{ZE} + A^{ZN}} \right) = K_{\infty}^{ZE} \cdot A_{rel}^{ZE} + K_{\infty}^{ZN} \cdot A_{rel}^{ZN} \qquad \textbf{(44)}$$

En dérivant cette expression et en remarquant que $K_{\infty}^{coeur} = \frac{A_{rel}^{i}}{P_{rel}^{i}} \cdot K_{\infty}^{i}$ avec $P_{rel}^{i} = \frac{P^{i}}{P^{ZE} + P^{ZN}}$ où i représente ZE ou ZN, nous obtenons :

$$\frac{dK_{\infty}^{coeur}}{K_{\infty}^{coeur}} = P_{rel}^{ZE} \frac{dK_{\infty}^{ZE}}{K_{\infty}^{ZE}} + P_{rel}^{ZE} \frac{dA_{rel}^{ZE}}{A_{rel}^{ZE}} + P_{rel}^{ZN} \frac{dK_{\infty}^{ZN}}{K_{\infty}^{ZN}} + P_{rel}^{ZE} \frac{dA_{rel}^{ZN}}{A_{rel}^{ZN}} \qquad \textbf{(45)}$$

(*) Ce bilan neutronique n'est qu'une approche simplifié du problème, il faudrait en toute rigueur utiliser la théorie des perturbations.

Cette décomposition du K_{∞}^{coeur} nous permet de différentier le bilan neutronique **(43)** comme suit :

$$\frac{\Delta K_{eff}}{K_{eff}} = P_{rel}^{ZE}\left(\frac{\Delta K_{\infty}}{K_{\infty}}\right)^{ZE} + P_{rel}^{ZE}\left(\frac{\Delta A_{rel}}{A_{rel}}\right)^{ZE} + P_{rel}^{ZN}\left(\frac{\Delta K_{\infty}}{K_{\infty}}\right)^{ZN} + P_{rel}^{ZE}\left(\frac{\Delta A_{rel}}{A_{rel}}\right)^{ZN} + \frac{\Delta F}{F} \quad \textbf{(46)}$$

En introduisant le terme $\Delta X/X$ symbolisant la différence de contribution des effets d'interaction ZE/ZN entre les deux types de coeur, cette relation devient :

$$\frac{\Delta K_{eff}}{K_{eff}} = P_{rel}^{ZE}\left(\frac{\Delta K_{\infty}}{K_{\infty}}\right)^{ZE} + \frac{\Delta X}{X} \quad \textbf{(47)}$$

Le K_{∞}^{sto} expérimental est déduit de l'équation **(47)** :

$$K_{\infty,exp}^{sto} = K_{\infty,exp}^{reg} + \frac{K_{\infty,exp}^{reg}}{\left(P_{rel}^{ZE}\right)_{exp}}\left[\left(\frac{\Delta K_{eff}}{K_{eff}}\right)_{exp} - \left(\frac{\Delta X}{X}\right)_{exp}\right] \quad \textbf{(48)}$$

Si nous supposons que les termes de production relative dans la ZE et d'effet d'interaction sont bien pris en compte par les calculs de cœur, c'est à dire si $\left(\Delta X/X\right)_{exp} = \left(\Delta X/X\right)_{calc}$ et $\left(P_{rel}^{ZE}\right)_{exp} = \left(P_{rel}^{ZE}\right)_{calc}$, nous pouvons écrire le $K_{\infty,exp}^{sto}$ comme :

$$K_{\infty,exp}^{sto} = K_{\infty,exp}^{reg} + \frac{K_{\infty,exp}^{reg}}{\left(P_{rel}^{ZE}\right)_{calc}}\left[\left(\frac{\Delta K_{eff}}{K_{eff}}\right)_{exp} - \left(\frac{\Delta X}{X}\right)_{calc}\right] \quad \textbf{(49)}$$

b) Objectifs de notre réévaluation

Pour insérer l'expérience CRISTO II dans l'ICSBEP, les travaux suivants ont été réalisés :

(i) vérification de la cohérence des résultats expérimentaux,

(ii) réévaluation des résultats expérimentaux,

(iii) vérification des effets d'interaction calculés,

(iv) évaluation des incertitudes sur les paramètres expérimentaux.

Ces points vont être développés dans les paragraphes suivants.

(i) Vérification de la cohérence des résultats expérimentaux

Pour chacune des configurations, deux types de mesures ont été réalisées dans le réseau régulier :

- la concentration critique en bore,
- des distributions axiales et radiales des taux de fission afin d'obtenir le laplacien matière du réseau régulier.

Nous donnons ces mesures ainsi que le K_{∞}^{reg} expérimental dans le Tableau 14.

Tableau 14 : Mesures dans le réseau régulier et $K_{\infty,exp}^{reg}$

Conf.	Concentration en bore mesurée(mg/l)	B_m^2 mesuré en 10^{-3} cm^{-2}	M^2 APOLLO2	K_{∞}^{reg} (2) expérimental
A'	532 ± 4	5.79 ± 0.10	34.47	1.1996 ± 0.0044
B'	832 ± 4	3.58 ± 0.08	34.03	1.1218 ± 0.0032
C'	1550 ± 8	-0.98 ± 0.10 (1)	33.35	0.9673 ± 0.0035
D'	1800 ± 20	-2.20 ± 0.12	33.21	0.9269 ± 0.0045
E'	1940 ± 10	-	33.15	0.902 ± 0.0050 (3)

(1) Les configurations sous-critiques ont un $B_m^2 < 0$

(2) Le calcul des incertitudes associées au $K_{\infty,exp}^{reg}$ est explicité dans le paragraphe (iv).

(3) Les mesures de laplaciens axiaux et radiaux n'ont pas été effectuées pour cette configuration. La mesure du K_{∞}^{reg} de la configuration E' est donc déduite de l'extrapolation de la courbe des K_{∞}^{reg} en fonction de leurs concentrations en bore (cf. Figure 18).

La Figure 18 qui présente la décroissance des $K_{\infty,exp}^{reg}$ en fonction de la concentration en bore montre la cohérence des valeurs expérimentales.

(ii) Réévaluation des résultats expérimentaux

Quand certains résultats expérimentaux synthétiques ont été suspectés, le dépouillement des mesures a été repris. C'est le cas des configurations A' et B'.

Pour la configuration A', la note donnée en référence **[49]**, affichait un laplacien matière de $(5.3 \pm 0.04)\cdot 10^{-3}$ ce qui conduisait à un $K_{\infty,exp}^{reg}$ égal à 1.1777. Par rapport à la valeur expérimentale du K_{∞}^{sto} de 1.2005, cette valeur semblait incohérente. En effet pour cette configuration l'effet d'interaction $\Delta X/X$ est très faible. Nous avons donc réanalysé les distributions de puissance axiales et radiales et obtenu un nouveau laplacien matière de $5.79 \cdot 10^{-3}$. De cette mesure, nous avons déduit la valeur plus réaliste de 1.1996 pour le $K_{\infty,exp}^{reg}$ (la valeur de calcul APOLLO2 de ce réseau régulier est : 1.204).

Dans le cas de la configuration B', une erreur de retranscription s'était glissée dans la référence **[50]** : le $K_{\infty,exp}^{reg}$ affiché était de 1.105 ± 0.003 alors que la valeur du $K_{\infty,exp}^{reg}$ déterminée à partir du laplacien matière était de 1.1218. En conséquence, la valeur du K_{∞}^{sto} expérimental, déduite du $K_{\infty,exp}^{reg}$, était aussi incorrecte.

(iii) Vérification des effets d'interaction calculés

Pour obtenir le $K_{\infty,exp}^{sto}$, nous avons émis l'hypothèse que les effets d'interaction étaient bien déterminés par les calculs de coeur. Cette hypothèse est confirmée(*) car ces calculs ont été réalisés avec un schéma calcul de coeur APOLLO1-DOT**[50]** très précis :

- utilisation de la théorie du transport,
- condensation à 6 groupes d'énergie des neutrons et quadrature S4,
- géométrie réelle XY du coeur nourricier et de la zone expérimentale (les lames d'eau et les structures des assemblages nourriciers sont représentés explicitement),
- calculs R et RZ pour la prise en compte des effets 3D,
- nombre de mailles de calculs élevé (61x61 mailles dans le coeur nourricier).

(*) La conclusion est identique pour la production relative dans la ZE

Les effets d'interaction calculés avec APOLLO1-DOT sont présentés dans le Tableau 15.

Tableau 15 : Effets d'interaction calculés APOLLO1-DOT

Conf.	$\left(\Delta K_{eff}/K_{eff}\right)_{exp}$ (pcm)	$\left(\Delta K_{\infty}/K_{\infty}\right)_{exp}$ (pcm)	$\left(P_{rel}^{ZE}\right)_{calc}$ (%)	$\left(\Delta X/X\right)_{calc}$ **(pcm)**
A	-30	-120	39	**+20**
B	+70	-1380	30	**-490**
C	-150	-8780	25	**-2040**
D	-220	-9795	22	**-1940**
E	+200	-9575	21	**-2210**

Afin d'insérer l'expérience CRISTO II dans l'ICSBEP, nous voulions vérifier avec les outils de calcul actuels, pour une configuration donnée, que ces effets d'interaction étaient correctement calculés. Nous avons alors élaboré un schéma de calcul de coeur.

Ce schéma consiste, dans un premier temps, à obtenir avec APOLLO2 Pij des "pâtes" homogènes condensées à 20 groupes de tous les milieux. Ces milieux homogènes sont, dans un deuxième temps, utilisés pour le calcul de coeur qui est réalisé par un calcul APOLLO2-SN nodal XY 'S4 P1 20 groupes'. La géométrie XY employée est représentative de la configuration étudiée et est présentée sur la Figure 19. Afin d'éviter un calcul RZ, les fuites axiales sont modélisées par l'intermédiaire d'un B_z^2 par milieu déduit de la Figure 20.

En utilisant ce nouveau schéma de calcul sur les coeurs (A, A'), nous obtenons les K_{eff} présentés dans le Tableau 16. Nous y avons fait figurer aussi l'effet d'interaction déduit de ces valeurs.

Tableau 16 : Calculs de coeurs APOLLO2-SN et effet d'interaction
Configuration (A, A')

$\left(K_{eff}^{sto}\right)_{calc}$	$\left(K_{eff}^{reg}\right)_{calc}$	$\left(\Delta K_{eff}/K_{eff}\right)_{calc}$ (pcm)	$\left(P_{rel}^{ZE}\right)_{calc}\cdot\left(\Delta K_{\infty}/K_{\infty}\right)_{calc}$ (pcm)	$\left(\Delta X/X\right)_{calc}$ **(pcm)**
1.08807	1.08877	-64	-104	**+40**

L'effet d'interaction obtenu avec le schéma de calcul APOLLO2-SN montre un très bon accord avec celui déterminé par le schéma APOLLO1-DOT.

Nous venons de vérifier l'exactitude des effets d'interaction pour une configuration. Cette vérification est suffisante pour ne pas remettre en cause les valeurs $(\Delta X/X)_{calc}$ données dans le Tableau 15.

(iv) Evaluation des incertitudes sur les paramètres expérimentaux

Les incertitudes à associer au K_{∞}^{sto} expérimental sont de deux types : les incertitudes dites "technologiques" qui sont liées à la connaissance précise du bilan matière et de la géométrie (par exemple le pas du réseau, l'enrichissement des crayons...) et les incertitudes expérimentales dues à la méthode de détermination du K_{∞}^{sto} expérimental.

Lorsque l'on parle d'évaluation d'incertitudes technologiques, il s'agit en fait de "chiffrer" en terme de réactivité, par les outils de calcul, les incertitudes engendrées par le connaissance du bilan matière.

Dans le Tableau 17, nous présentons l'évaluation à 1σ des principales incertitudes technologiques associées au réseau de stockage. Cette évaluation est réalisée avec un calcul APOLLO2 SN nodal XY 'S4 P1 20 groupes' sur deux configurations "extrêmes" l'une sans absorbant, sur-critique, l'autre avec un absorbant "noir" (très neutrophage), sous-critique.

Tableau 17 : Evaluation des principales incertitudes technologiques pour les configurations A et D

		Incertitude à 1σ exprimée en réactivité (pcm) Calculs APOLLO2 S4/P1/20g	
Paramètres	Incertitudes	Configuration A	Configuration D
Pas du réseau (1.26 cm)	0.01 mm	1	63
Diamètre extérieur gaine (0.94 cm)	0.05 mm	48	303
Densité (10.21 g/cm^3)	0.05 g/cm^3	45	80
U^{235} Enrich. (3.00%)	0.05 %	387	439
Incertitude Totale		393	543

L'enrichissement est connu avec une faible précision puisque pour les deux configurations, l'incertitude convertit en terme de réactivité est de l'ordre de 400 pcm. Une analyse chimique plus fine des crayons combustible pourrait améliorer la connaissance de ce paramètre : cette analyse est en cours au CEA-Cadarache.
Par contre il n'est pas possible d'augmenter la précision sur le diamètre extérieur de la gaine, en effet il est difficile de mesurer à mieux que cinq centièmes de millimètre.

L'équation **(49)** montre que la "mesure" du K_{∞}^{sto} expérimental par la méthode de l'équivalence avec un réseau régulier introduit les incertitudes suivantes :

- sur le K_{∞} expérimental du réseau régulier,
- sur l'effet d'interaction calculé,
- sur la variation des excès en réactivité mesurés des deux coeurs (cette dernière incertitude est négligeable car les réactivités résiduelles ont été mesurées avec une grande précision, de l'ordre du pcm ; l'incertitude sur l'écart des réactivités résiduelles provient donc essentiellement de la mesure des temps de doublement et du βeff utilisé (environ ± 4% à 1σ)).

La première de ces incertitudes qui concerne la mesure du K_{∞}^{reg}, s'écrit comme la somme quadratique des incertitudes sur l'aire de migration calculée (nous estimons que nous calculons M^2 à mieux que 2%) et le laplacien matière mesuré :

$$\sigma_{K_{\infty,exp}^{rég}} = \frac{\Delta K_{\infty,exp}^{reg}}{K_{\infty,exp}^{reg}} = \sqrt{\left[\frac{\Delta M^2}{M^2}\left(\frac{M^2 B_m^2}{1+M^2 B_m^2}\right)\right]^2 + \left[\frac{M^2 \Delta B_m^2}{1+M^2 B_m^2}\right]^2} \qquad \textbf{(50)}$$

La seconde porte sur l'effet d'interaction $\Delta X/X$ que nous décomposons en une incertitude radiale et une incertitude axiale, en vue de son évaluation. Afin de déterminer l'incertitude due aux corrections de coeur calculées, nous avons introduit une modélisation plus grossière du coeur dans le calcul de référence. Pour évaluer le biais maximum lié au calcul de coeur, nous avons utilisé des représentations fortement simplifiées :

- radiale, en décrivant un contour approximatif du cœur nourricier ;
- axiale, en supprimant la représentation des fuites axiales.

Nous réalisons les calculs de cœur, d'une part avec la modélisation de référence (représentation précise), d'autre part avec la représentation grossière et à partir des $\Delta K_{eff}/K_{eff}$ calculés, nous déduisons les $\Delta X/X$ perturbés. A partir de l'écart sur la valeur calculée du $\Delta X/X$ dans la modélisation coeur de référence et la modélisation grossière, nous évaluons les incertitudes $\sigma^{rad}_{\Delta X/X}$ et $\sigma^{ax}_{\Delta X/X}$.

A titre d'exemple, nous présentons ci-dessous l'analyse menée dans le cadre de la configuration (A, A').

Pour créer une forte perturbation radiale, nous simplifions la représentation du coeur nourricier en supprimant la modélisation du décrochage du graphite et des éléments de contrôle comme le montre la Figure 21.

Le Tableau 18 présente les résultats des $\Delta K_{eff}/K_{eff}$ calculés dans le calcul de référence et dans la représentation radiale simplifiée (à fuites axiales nulles).

Tableau 18 : Modification des effets coeurs en fonction de la représentation de la zone nourricière

APOLLO2-SN 'S4 P1 20g' avec $B_Z^2 = 0$					
Géométrie représentative de la ZN			Géométrie "grossière" de la ZN		
K_{eff}^{sto}	K_{eff}^{reg}	$\Delta K_{eff}/K_{eff}$	K_{eff}^{sto}	K_{eff}^{reg}	$\Delta K_{eff}/K_{eff}$
1.13888	1.14289	-351 pcm	1.13307	1.13820	-451 pcm

La représentation radiale introduit un écart maximal de 100 pcm sur les $\Delta K_{eff}/K_{eff}$ et donc de 100 pcm sur $\Delta X/X$. Nous considérons que l'effet représenté ici donne un ordre de grandeur de l'écart type à associer à l'incertitude liée à la correction d'effet coeur. L'incertitude engendrée sur le K_∞ du stockage correspond à $\sigma^{rad}_{\Delta X/X}/P^{ZE}_{rel}$, soit $\sigma_{K^{sto}_\infty} = 250$ pcm.

Comme nous l'avons mentionné, une évaluation des erreurs créées par le calcul des fuites axiales est réalisée en supprimant les fuites axiales ce qui est présenté sur le Tableau 19.

Tableau 19 : Modification des effets cœurs en fonction des fuites axiales

APOLLO2-SN 'S4 P1 20g' - Géométrie représentative de la ZN					
B_Z^2			$B_Z^2 = 0$		
K_{eff}^{sto}	K_{eff}^{reg}	$\Delta K_{eff}/K_{eff}$	K_{eff}^{sto}	K_{eff}^{reg}	$\Delta K_{eff}/K_{eff}$
1.08807	1.08877	-64	1.13888	1.14289	-351 pcm

Cette modélisation simplifiée donne un effet de 290 pcm sur le terme $\Delta X/X$: elle correspond à un calcul 2D du coeur sans fuite et maximise donc fortement les incertitudes dues à la représentation des fuites axiales. Nous estimons que notre représentation des fuites axiales par un B_Z^2 fonction de l'abscisse peut introduire une erreur représentant 20% de l'erreur maximum (±60 pcm). L'incertitude engendrée sur le K_∞ du stockage correspond à $\sigma^{ax}_{\Delta X/X} / P^{ZE}_{rel}$, soit $\sigma_{K^{sto}_\infty}$ = 150 pcm.

L'incertitude totale sur le $K^{sto}_{\infty,exp}$ liée aux corrections de cœur $\Delta X/X$ peut donc être estimée à ±300 pcm (1σ).

En conclusion de cette étude, nous présentons sur le Tableau 20, pour chacune des configurations, l'évaluation (en pcm) de l'incertitude globale à associer au K^{sto}_∞ expérimental. Cette incertitude est la somme quadratique des incertitudes décrites auparavant.

Tableau 20 : Incertitude totale sur le K^{sto}_∞ expérimental

Configurations	$\sigma_{TECH.}$ (pcm)	$\sigma_{K^{reg}_{\infty,exp}}$ (pcm)	$\sigma_{\Delta X/X}$ (pcm)	$\sigma_{K^{sto}_{\infty,exp}}$ (pcm)
A	± 400	± 440	± 300	± 700
B	± 550	± 320	± 500	± 800
C	± 550	± 350	± 700	± 1000
D	± 550	± 450	± 800	± 1100
E	± 550	± 500	± 900	± 1200

c) Transposition CRISTO II à un réseau infini

Pour être accepté par l'ICSBEP, l'expérience CRISTO II doit être mise sous forme d'un benchmark simple et utilisable par les codes de calcul internationaux. Le benchmark que nous proposons, consiste à calculer uniquement les réseaux de stockage en milieu infini. Ayant réévalué les résultats expérimentaux, nous pouvons fournir à ce groupe de travail les $K^{sto}_{\infty,exp}$ associées à leurs incertitudes. Ces valeurs sont présentées dans le tableau suivant.

Tableau 21 : Facteurs de multiplication infini expérimentaux des réseaux de stockage

Configurations	K_{∞}^{sto} expérimental
A	1.198 ± 0.007
B	1.106 ± 0.008
C	0.882 ± 0.010
D	0.836 ± 0.011
E	0.815 ± 0.012

d) Vérification de la pertinence des résultats expérimentaux

L'ICSBEP demande d'appuyer les valeurs expérimentales que nous lui donnons par des calculs "étalon" : ceci permet de mettre en évidence une éventuelle incohérence de la manipulation.

Pour vérifier les $K_{\infty,exp}^{reg}$, nous avons choisi le code APOLLO2, avec la bibliothèque CEA93 dérivée des évaluations JEF2.2 de données nucléaires. En effet APOLLO2 a fait l'objet d'une qualification toute particulière pour ce type de calcul dans les REP**[51]**. Les valeurs obtenues figurent dans le Tableau 22.

Tableau 22 : Vérification des K_{∞}^{reg} expérimentaux avec APOLLO2-Pij

Configurations	K_{∞}^{reg} expérimental	K_{∞}^{reg} APOLLO2
A'	1.1996 ± 0.0044	1.20422
B'	1.1218 ± 0.0032	1.12176
C'	0.9673 ± 0.0035	0.96581
D'	0.9269 ± 0.0045	0.92183
E'	0.902 ± 0.0050	0.89905

Les résultats APOLLO2 sont du même ordre de grandeur que les valeurs expérimentales. Ces calculs montrent une certaine cohérence par rapport à l'expérience : nous n'observons pas de dérive flagrante en fonction du bore.

La vérification des $K^{sto}_{\infty,exp}$ s'est faite à partir de calculs Monte-Carlo TRIPOLI4 polycinétiques et est présentée dans le Tableau 23. Avec ce type de méthode qui ne fait aucune approximation, le désaccord calcul/expérience que nous pourrons observer ne sera dû qu'aux données nucléaires JEF2.2 ou bien à une erreur dans les résultats expérimentaux.

Tableau 23 : Vérification des K^{sto}_{∞} expérimentaux avec TRIPOLI4

Configurations	K^{sto}_{∞} expérimental	$K^{sto}_{\infty} \pm 1\sigma$ TRIPOLI4
A	1.198 ± 0.007	1.2010 ± 0.0005
B	1.106 ± 0.008	1.1016 ± 0.0005
C	0.882 ± 0.010	0.8774 ± 0.0005
D	0.836 ± 0.011	0.8300 ± 0.0005
E	0.815 ± 0.012	0.8040 ± 0.0005

Au regard de l'incertitude liée à l'expérience et de celle sur les données nucléaires (inférieure à 1000 pcm) nous pouvons dire que les calculs sont cohérents avec les valeurs expérimentales.

e) Conclusion

L'expérience CRISTO II est à présent réévaluée et permet d'étendre la base de qualification du formulaire CRISTAL pour les milieux piscines de stockage.

Une fois acceptée par l'ICSBEP, elle donnera la possibilité de comparer ce formulaire avec les codes de calcul internationaux pour ce type de configuration.

CHAPITRE 5
OPTIMISATION DU FORMULAIRE CRISTAL

Le formulaire CRISTAL comporte deux voies : une voie standard simplifiée qui sera utilisée par les industriels et une voie étalon, qui ne comporte aucune approximation physique et sert de référence.
Pour la voie standard, il est nécessaire d'élaborer des schémas de calcul optimisés pour les configurations variées rencontrées dans les études de Sûreté-Criticité et de les valider par rapport à la voie étalon.
Les études, présentées dans ce chapitre, portent sur l'optimisation des procédures de calcul APOLLO2-Pij et de calcul en transport APOLLO2-SN pour les milieux dissolveurs, solutions, piscines de stockage et châteaux de transport.

I. Les procédures de calcul APOLLO2-Pij

Le but des procédures de calcul APOLLO2-Pij est d'obtenir des sections efficaces multigroupes, autoprotégées, homogénéisées voire condensées pour chacun des milieux de la criticité étudiés. Les techniques d'obtention de ces sections efficaces doivent faire l'objet d'études spécifiques puisqu'elles sont utilisées par les calculs en transport et conditionnent donc fortement le résultat final.

1. Les sections efficaces multigroupes

Le code APOLLO2 utilise les sections efficaces multigroupes de la bibliothèque CEA93 qui comporte deux maillages énergétiques : un maillage à 99 groupes qui correspond au maillage CRIBLE[6] et un nouveau maillage à 172 groupes. Ce dernier a été élaboré dans le cadre d'une collaboration européenne de laboratoires de physique des réacteurs[52]. Plusieurs

critères physiques font la spécificité de ce maillage ; en particulier les groupes ont été choisis suffisamment fins pour représenter :

- les résonances larges des isotopes légers et intermédiaires les plus importants que sont l'oxygène et le fer,
- les grandes résonances des éléments lourds dans le domaine thermique,
- les matrices de diffusion élastique et les sections de transfert.

Nous utiliserons donc ce maillage énergétique pour élaborer les schémas de calcul de chacun des milieux traités (ce choix est d'ailleurs confirmé par de récentes études explicitées dans la référence **[53]**).

2. Prise en compte des liaisons cristallines dans l'élargissement Doppler

L'élargissement Doppler des résonances avec la température du combustible est un facteur prépondérant dans les études de neutronique. Nous allons montrer qu'il est nécessaire de définir une température effective pour modéliser les effets des liaisons cristallines ou des liaisons chimiques dans le calcul des sections efficaces élargies par effet Doppler.

a) La température de Debye dans le code APOLLO2

On peut prendre en compte les effets des liaisons cristallines dans le code APOLLO2 en utilisant le modèle de Lamb. Le modèle consiste à calculer l'élargissement Doppler des sections efficaces, pour des neutrons de haute énergie et à haute température, en utilisant le modèle du gaz libre qui simule l'agitation thermique des atomes dans le cristal par une maxwellienne. Le modèle de Lamb engendre une température dite "effective" plus élevée que la température du milieu. La relation liant cette température effective T_{eff} et la température réelle du milieu T, dépend de la forme cristalline ou moléculaire de ce milieu. Elle est déterminée en égalant l'énergie cinétique moyenne de vibration par degré de liberté du noyau dans le cristal ou bien dans la molécule $\bar{\varepsilon}$, avec celle du noyau d'un gaz monoatomique :

$$\bar{\varepsilon} = \frac{3}{2} KT_{eff} = \frac{3}{4} \int_0^{h\nu_{max}} h\nu \cdot \rho(h\nu) \coth\left(\frac{h\nu}{2KT}\right) \cdot d(h\nu) \qquad \textbf{(51)}$$

où

h est la constante de Planck et est égale à $4.136 \cdot 10^{-15}$ eV/K,

ν est la fréquence des phonons(*),

$\rho(h\nu)$ est la distribution de fréquence phonique pour l'isotope considéré dans le réseau cristallin ou le composé chimique,

K est la constante de Boltzmann et vaut $8.617 \cdot 10^{-5}$ eV/K.

En développant la cotangente hyperbolique à l'ordre 2, nous obtenons l'expression suivante de la température effective :

$$T_{eff} \approx T \cdot \int \rho(h\nu) \left[1 + \frac{1}{12} \left(\frac{h\nu}{2KT} \right)^2 - \frac{1}{720} \left(\frac{h\nu}{2KT} \right)^4 + \ldots \right] d(h\nu) \qquad \textbf{(52)}$$

Dans le code APOLLO2, la distribution de fréquence phonique est représentée par une distribution de Debye. C'est une distribution continue variant comme le carré de la fréquence des phonons $(h\nu)^2$ jusqu'à un maximum $K\theta_D$ où θ_D est la température de Debye.

La température effective correspond alors à une loi de Debye et en posant $x = \frac{h\nu}{K\theta_D}$, nous obtenons

$$T_{eff} = \frac{3 \cdot \theta_D}{2} \int_0^1 x^3 \coth\left(\frac{x\theta_D}{2T} \right) dx \qquad \textbf{(53)}$$

en utilisant le développement limité de coth(x) à l'ordre 2, **(53)** devient :

$$T_{eff} \approx T \cdot \int_0^1 x^2 \cdot \left[3 + \frac{1}{4} \left(\frac{x\theta_D}{T} \right)^2 - \frac{1}{240} \left(\frac{x\theta_D}{T} \right)^4 + \ldots \right] dx \qquad \textbf{(54)}$$

soit

$$T_{eff} \approx T \cdot \left[1 + \frac{1}{20} \left(\frac{\theta_D}{T} \right)^2 - \frac{1}{1680} \left(\frac{\theta_D}{T} \right)^4 + \ldots \right] \qquad \textbf{(55)}$$

(*) Les phonons sont des *quasiparticules* : il ne s'agit pas de véritables particules car elles n'existent que dans la mesure où le cristal leur fournit leur support matériel ; elles sont assimilés à des ondes avec, dans certains cas, les propriétés d'une particule.

Pour calculer une température de Debye équivalente, la méthode consiste à égaler le terme en $1/T^2$ dans l'expression approchée **(52)** avec le terme correspondant de la distribution de Debye **(55)**. Bien sûr, il serait possible d'utiliser l'expression **(51)** directement pour calculer la température effective.

Lorsqu'il y a un seul isotope présent dans le milieu traité, comme par exemple un combustible composé d'uranium sous forme métallique, l'approximation à une seule fréquence ou modèle d'Einstein est utilisé et **(52)** devient alors :

$$T_{eff} \approx \left[1 + \frac{1}{12}\left(\frac{h\nu}{KT}\right)^2\right] \qquad \text{pour } h\nu < KT \qquad \textbf{(56)}$$

En égalant le terme en $1/T^2$ de **(56)** avec celui de l'équation **(55)**, nous obtenons une température de Debye équivalente approximative :

$$\theta_D \approx \left(\frac{20}{12}\right)^{1/2} \cdot \left(\frac{h\nu}{K}\right) \approx 1.291 \cdot \left(\frac{h\nu}{K}\right) \approx 15 \cdot h\nu \qquad \textbf{(57)}$$

avec $h\nu$ en meV.

Lorsque le milieu comprend deux isotopes ou plus (dans le cas par exemple d'un combustible UO_2), nous utilisons généralement l'approximation à deux fréquences de Nernst-Lindemann, avec des énergies $h\nu_1$, $h\nu_2$ et les coefficients associés, a_1, a_2 (où $a_1+a_2 = 1$) :

$$T_{eff} \approx T \cdot \left[1 + \frac{a_1}{12}\left(\frac{h\nu_1}{KT}\right)^2 + \frac{a_2}{12}\left(\frac{h\nu_2}{KT}\right)^2\right] \qquad \text{pour } h\nu_2 < KT \qquad \textbf{(58)}$$

De cette équation, nous tirons la température de Debye équivalente approximative:

$$\theta_D \approx 1.291 \cdot \left[\frac{\left(a_1 \cdot (h\nu_1)^2 + a_2 \cdot (h\nu_2)^2\right)^{1/2}}{K}\right] \approx 15 \cdot \left(a_1 \cdot (h\nu_1)^2 + a_2 \cdot (h\nu_2)^2\right)^{1/2} \qquad \textbf{(59)}$$

avec $h\nu_1$ et $h\nu_2$ en meV.

b) Températures de Debye propres aux milieux de la criticité

Les milieux dissolveurs, solutions, piscines de stockage et châteaux de transport contiennent du combustible composé au moins d'un isotope. Nous avons donc choisi l'approximation à deux fréquences pour calculer la température de Debye.

En ce qui concerne les crayons combustibles, la matière fissile est sous forme d'un oxyde d'uranium et/ou de plutonium. Des récentes mesures réalisées à l'institut JRC-IRMM de Geel**[54]** ont donné pour l'UO_2, à température ambiante, les énergies $h\nu_1 = 13.4$ meV, $h\nu_2 = 51.8$ meV et les coefficients associés $a_1 = 0.9$, $a_2 = 0.1$. De ces mesures, nous déduisons par **(59)** la température de Debye de l'ordre de 300 K. On peut supposer que cette valeur reste valable pour les oxydes de plutonium et les oxydes mixtes d'uranium et de plutonium**[55]**. Nous la recommandons pour les réseaux UO_2 et MOX.

L'effet de l'influence de la température de Debye est illustré dans le Tableau 24.

Tableau 24 : Effet de la température de Debye dans le problème n°19 (milieu dissolveur)

Fraction volumique	K_∞ APOLLO2-Pij **DEBYE 300°K**	K_∞ APOLLO2-Pij **DEBYE 620 K**
0.3	1.03072	1.02796
0.4	1.11084	1.10751
0.5	1.13624	1.13252
0.6	1.11993	1.11590
0.7	1.07071	1.06646

La température de Debye de 620 K correspond à la recommandation de l'ancien formulaire CRIBLE. Par rapport à la nouvelle valeur recommandée, nous observons des écarts pouvant aller jusqu'à 400 pcm, ce qui démontre l'importance d'une prise en compte précise de l'effet des liaisons cristallines. L'étude menée en [**54**] basée sur des calculs exacts de l'absorption résonante à partir de la forme réelle des sections efficaces dans le cristal UO_2 fournit la loi réelle $T_{eff} = f(T)$ à utiliser ; il y est montré qu'aux températures ambiantes, régnant généralement dans les études de Sûreté-Criticité, un modèle de Debye avec $\theta = 300$K donne une bonne évaluation de la température effective.

Pour les milieux de nitrate d'uranium et/ou de plutonium, les énergies $h\nu_1 = 14$ meV, $h\nu_2 = 54$ meV et leurs coefficients $a_1 = 0.82$, $a_2 = 0.18$ ont été mesurés, à température ambiante, par Seidel et Al.[56]. Ces mesures donnent θ_D égale à 390 K pour les sels combustibles. On ne dispose pas toutefois d'expériences permettant de chiffrer l'effet des liaisons chimiques dans une solution fissile.

Dans le Tableau 25, nous illustrons l'effet d'une température effective par rapport au cas sans correction de Debye, dans le cas des solutions fissiles.

Tableau 25 : Effet de la température de Debye dans les configurations "PU-SOL-THERM-012" et "MIX-SOL-THERM-004"

	K_∞ APOLLO2-Pij **DEBYE 390°K**	K_∞ APOLLO2-Pij **DEBYE 0°K**
Pu = 105 g/l	1.49563	1.49639
Pu = 102 g/l et U = 365 g/l	1.50429	1.50559

Ces résultats indiquent que les éventuelles corrections d'effet d'état non gazeux ont un faible poids en réactivité dans les solutions fissiles.

En conclusion, une température de Debye de 300 K est recommandée de manière générale pour les calculs de criticité des combustibles oxydes.

3. L'Autoprotection

Dans le chapitre concernant les méthodes de résolution de l'équation du transport, nous avons soulevé le problème de l'autoprotection pour les codes utilisant des sections efficaces multigroupes.

Nous allons maintenant décrire le principe du formalisme d'autoprotection développé dans le code APOLLO2[57] et les schémas d'autoprotection élaborés pour chaque milieu de la criticité traité.

a) Formalisme d'autoprotection dans APOLLO2

Le but du formalisme d'autoprotection dans APOLLO2 est d'évaluer pour une géométrie donnée les sections multigroupes des isotopes résonnants présents dans cette géométrie pour les groupes du maillage multigroupe correspondant au domaine des résonances. Ces sections sont appelées "autoprotégées" et sont déterminées par une double équivalence. La première appelée "équivalence hétérogène/homogène" permet d'obtenir les taux de réaction à préserver dans la géométrie réelle. La seconde dite "équivalence multigroupe" donnent les sections efficaces multigroupes qui préservent ces taux de réaction. Nous allons expliciter ces équivalences dans les paragraphes suivants.

(i) Equivalence hétérogène/homogène

Le but de l'équivalence hétérogène/homogène est d'obtenir les taux de réaction dans la géométrie réelle. Pour obtenir ces taux, il est évidemment nécessaire de connaître les flux pour chaque groupe du domaine des résonances et chaque région d'autoprotection(*).
Nous effectuerons donc le calcul d'autoprotection en supposant que le flux dans le domaine des résonances est principalement régi par une équation de ralentissement pur. Nous allons montrer qu'il est très simple de résoudre cette équation dans un milieu homogène infini, un peu plus difficile dans une géométrie hétérogène. Et enfin nous décrirons le principe de l'équivalence hétérogène/homogène.

Ecrivons donc l'équation du ralentissement pour un mélange homogène de noyaux lourds (indicés par 0) et de noyaux modérateurs (indicés par 1) :

$$R_0\phi + R_1\phi = \left(\Sigma_{t0} + \Sigma_{t1}\right)\phi \qquad \textbf{(60)}$$

où R l'opérateur de ralentissement défini selon la léthargie u(**) et le gain maximum de léthargie ε comme :

$$R_i\phi = \int_{u-\varepsilon_i}^{u} \Sigma_{si}\left(u' \to u\right)\phi\left(u'\right)du' \qquad (i = 0 \text{ ou } 1) \qquad \textbf{(61)}$$

(*) Une région d'autoprotection α est définie comme l'ensemble des régions de calcul d'un ou plusieurs milieux dans lesquels les mélanges résonnants sont les mêmes.

(**) $u = \ln(E_0/E)$; E_0 est une énergie de référence quelconque qu'on prend en général suffisamment grande pour que u soit positive.

En décomposant le flux ϕ par une fonction Φ à variation lente définie comme $\Phi = R_1\phi/\Sigma_{s1}$, appelée flux macroscopique et φ une fonction de structure fine "dentelée" par les résonances, nous pouvons montrer que la solution de l'équation du ralentissement, en milieu homogène infini, devient lorsqu'on utilise l'approximation de Livolant ($R_0\phi = \Phi \cdot R_0\varphi$) :

$$(\sigma_{t0} + \sigma_b)\varphi = r_0\varphi + \gamma_b\sigma_b \qquad \textbf{(62)}$$

avec $\sigma_{t0} = \frac{\Sigma_{t0}}{N_0}$, $r_0 = \frac{R_0}{N_0}$, $\sigma_b = \frac{\Sigma_{t1}}{N_0}$, $\gamma_s = \frac{\Sigma_{s1}}{\Sigma_{t1}}$ où N_0 est la concentration du noyau résonnant.

σ_b est appelée section de dilution.

Cette équation, dite de structure fine puisqu'elle ne fait intervenir que φ, ne dépend que d'un seul paramètre σ_b. Elle est résolue, une fois pour toutes, par des codes multigroupes (THEMIS[19], CALENDF[58]...) très fins (plusieurs milliers de groupes) situés en amont d'APOLLO2. Les différents taux de réactions obtenus dits "taux de réaction effectifs" sont tabulés en fonction de la température et de la section de dilution et sont "exacts".

Donnons à présent la solution de l'équation du ralentissement pur dans le cas d'une géométrie hétérogène. Pour cela, écrivons l'équation matricielle du ralentissement, dans le cadre du formalisme des probabilités de première collision avec flux plat et choc isotrope dans le référentiel du laboratoire :

$$\Sigma_t\phi V = PV(R_0\phi + R_1\phi) \qquad \textbf{(63)}$$

où Σ_t est la matrice diagonale des sections efficaces totales, V la matrice diagonale des volumes des régions de calcul, ϕ le vecteur flux dans chaque région de calcul, P la matrice des probabilités de collision, R_0 la matrice diagonale des opérateurs de ralentissement par les noyaux lourds et R_1 la matrice diagonale des opérateurs de ralentissement par les noyaux légers.

En utilisant la même décomposition que dans le milieu homogène infini, nous pouvons montrer que la solution sous forme matricielle de l'équation du ralentissement en milieu hétérogène est :

$$\varphi_0 = Cr_0\varphi_0 + S \qquad \textbf{(64)}$$

où nous définissons, pour les régions d'autoprotection α et β, la matrice C et le vecteur S par :

$$C_{\alpha\beta} = \frac{\sum_{i\in\alpha}\sum_{j\in\beta} P_{ij} V_j N_{0j}}{\sum_{i\in\alpha} \Sigma_i V_i}, \quad S_\alpha = \frac{\sum_{i\in\alpha}\sum_{j} P_{ij} V_j \Sigma_{s1,j}}{\sum_{i\in\alpha} \Sigma_i V_i}.$$

φ_0 est le flux moyen de pondération, dans les régions de calcul appartenant à une même région d'autoprotection, qui remplace le flux réel de structure fine.

L'équation est couplée à la fois en espace et en énergie, elle est donc difficile à traiter. En outre, nous pouvons avoir à traiter un mélange d'isotopes résonnants. Nous allons examiner ces trois difficultés.

Couplage en espace

Le couplage en espace qui, physiquement, est un phénomène d'interaction spatial de résonance, est effectué par la matrice C traduisant les probabilités de collision. Ce couplage a lieu lorsqu'un même isotope résonnant est présent dans plusieurs régions géométriques différentes. Il est traité soit de façon approchée par la méthode PIC soit de façon "exacte" par la méthode de la matrice de dilution.

La *méthode PIC* effectue artificiellement la diagonalisation de la matrice C. Chaque région d'autoprotection est traitée séparément en supposant que, lorsque l'on traite la région α, les mélanges résonnants se trouvant dans les autres régions d'autoprotection β sont similaires à celui de la région traitée :

$$\forall \beta \neq \alpha, \quad r_{0\beta}\varphi_{0\beta} = r_{0\alpha}\varphi_{0\alpha} \qquad \textbf{(65)}$$

La méthode de la *matrice de dilution* traite exactement le couplage spatial sous l'hypothèse que tous les mélanges résonnants sont similaires :

$$\forall \alpha \quad r_{0\alpha} = r_0, \quad \sigma_{t0\alpha} = \sigma_{t0} \qquad \textbf{(66)}$$

La matrice C devient alors diagonalisable et le vecteur φ_0 est développé sur une base de vecteurs propres de la matrice C.

Couplage en énergie

Le couplage en énergie est effectué par l'opérateur de ralentissement lourd r_0. Pour résoudre l'équation **(64)**, une modélisation de cet opérateur est utilisé dans APOLLO2. Cinq modèles ont d'ailleurs été développés : NR, ST, WR, IR, TR. Avant d'étudier ces différents modèles, nous reprenons la définition de l'opérateur r_0 :

$$r_0\phi = \int_{u-\varepsilon_0}^{u} \sigma_{s0}(u')P(u' \to u)\phi(u')du' \qquad \textbf{(67)}$$

en supposant le choc élastique et isotrope dans le référentiel du centre de masse, nous définissons :

$$P(u' \to u) = \frac{1}{1-\alpha}\exp(u'-u) \qquad \textbf{(68)}$$

où α est le paramètre de ralentissement s'écrivant : $\alpha = \left(\frac{A-1}{A+1}\right)^2$ avec A masse du noyau rapportée à celle du neutron.

Le *modèle NR* (Narrow Resonance) suppose que la largeur de la résonance est faible devant le gain maximum en léthargie. Les neutrons qui sont ralentis jusqu'à la léthargie u située dans la résonance ont subi leur dernier choc à une léthargie u' située à l'extérieur de cette résonance mais aussi à l'extérieur de toute autre résonance puisque la résonance traitée est considérée comme isolée. Nous pouvons donc remplacer, dans la relation **(67)**, la section de diffusion à la léthargie u' par la section potentielle et le flux par sa valeur constante calculée quand la section totale est égale à la section potentielle. En remarquant que :

$$\int_{u-\varepsilon_0}^{u} P(u' \to u)du' = 1, \qquad \textbf{(69)}$$

nous obtenons l'approximation NR :

$$\forall u, \quad r_0^{NR}\varphi(u) = \sigma_p\varphi(\sigma_p) \qquad \textbf{(70)}$$

Les sources de ralentissement lourd deviennent donc indépendantes de la léthargie u d'arrivée.

Le *modèle WR* (Wide Resonance) suppose que la largeur des résonances est grande devant le gain maximum en léthargie. Les neutrons qui sont ralentis jusqu'à une léthargie u se trouvant à l'intérieur de la résonance ont subi leur dernier choc à une léthargie u' se trouvant aussi à

l'intérieur de celle-ci. Comme ε_0 étant petit, nous pouvons remplacer dans **(67)** $(\sigma_{s0}(u')\varphi(u'))$ par $(\sigma_{s0}(u)\varphi(u))$, pour obtenir l'approximation WR :

$$\forall u, \quad r_0^{WR}\varphi(u) = \sigma_{s0}(u)\varphi(u) \qquad \textbf{(71)}$$

Ici les sources de ralentissement lourd à la léthargie u ne dépendent que de u et par conséquent, le couplage en énergie est supprimé.

Le *modèle IR* (Intermediate Resonance) combine le modèle NR et le modèle WR :

$$\forall u, \quad \varphi^{IR}(u) = \lambda\varphi^{NR}(u) + (1-\lambda)\varphi^{WR}(u) \qquad \textbf{(72)}$$

Pour le *modèle ST*, reprenons les équations **(67)** et **(68)**. ε_0 étant très petit, nous pouvons remplacer exp(u'-u) par une constante lorsque u' varie entre $(u-\varepsilon_0)$ et u. D'après la condition de normalisation **(69)**, cette constante doit être prise égale à $(1-\alpha)/\varepsilon_0$. L'opérateur de ralentissement devient alors :

$$r_0\varphi(u) = \frac{1}{\varepsilon_0}\int_{u-\varepsilon_0}^{u}\sigma_{s0}(u')\varphi(u')du' \qquad \textbf{(73)}$$

L'approximation ainsi réalisée est valable quelle que soit la forme et la distribution des résonances.

Utilisons maintenant l'hypothèse statistique : nous supposons que les résonances sont étroites, statistiquement distribuées dans le groupe g et que leur espacement est faible par rapport à ε_0 (il y a donc de nombreuses résonances entre $(u-\varepsilon_0)$ et u). Nous pouvons alors remplacer la moyenne du produit $\sigma_{s0}\varphi$ sur l'intervalle $[u-\varepsilon_0, u]$ par sa moyenne sur le groupe g.

Nous obtenons alors l'approximation statistique :

$$\forall u, \quad r_0^{ST}\varphi(u) = \frac{1}{\Delta u_g}\int_g\sigma_{s0}(u')\varphi(u')du' \qquad \textbf{(74)}$$

De même que pour le modèle NR, les sources de ralentissement lourd deviennent indépendantes de la léthargie d'arrivée u, mais ici la valeur moyenne dépend du groupe. Nous noterons cette valeur $\langle\sigma_{s0}\varphi\rangle_g$.

Le *modèle TR* (Toute Résonance) développé récemment au SERMA[52], est une généralisation du modèle ST qui prend en compte le fait que les neutrons peuvent provenir de groupe g' inférieurs à g lorsque le maillage en léthargie devient plus fin :

$$\forall u, \quad r_0^{TR}\varphi(u) = \sum_{g' \le g} C(g', g)\langle \sigma_{s0}\varphi \rangle_{g'} \qquad \textbf{(75)}$$

C(g',g) est un poids à déterminer.

L'intérêt de ce modèle est qu'il ne fait aucune hypothèse sur la forme des résonances mais, étant toujours en cours de validation, il ne peut pas être utilisé à ce jour.

Effet de mélange

L'effet de mélange plus connu sous le nom de phénomène de protection mutuelle est un recouvrement des résonances d'isotopes différents présents dans un même mélange.

Il n'existe pas à l'heure actuelle de méthodes dans APOLLO2 permettant de traiter rigoureusement ce phénomène et nous avons donc recours à différentes approximations pour le prendre en compte.

Dans APOLLO2, nous avons deux possibilités :

- Décomposer le calcul d'autoprotection en plusieurs calculs indépendants traitant chacun un noyau résonant donné (dans un ordre fixé ou non), les autres isotopes résonnants étant considérés comme des isotopes modérateurs avec comme sections efficaces les sections autoprotégées, si ces sections ont déjà été calculées (à la présente itération ou à l'itération précédente), ou les sections non autoprotégées. Ce calcul se fait de façon itérative.
- Utiliser ce qui existait dans APOLLO1 c'est à dire remplacer les sections efficaces des noyaux résonnants autres que celui qui est traité par leurs sections potentielles.

Le but de l'équivalence hétérogène/homogène est d'obtenir les taux de réaction "exacts" en géométrie hétérogène notés $T^{hét}$. Le problème est que nous ne savons résoudre l'équation du ralentissement en géométrie hétérogène qu'avec les modélisations que nous venons d'évoquer.

Nous avons vu qu'il est possible d'obtenir les taux de réaction "exacts" en milieu homogène infini. Ils sont tabulés en fonction de la température et de la dilution et nous les notons T^{hom}.

Nous savons évaluer de façon approchée le flux en géométrie réelle. Une fois le flux connu, les taux de réaction sont calculés par des formules de quadrature et notés $T^{hét,*}$. Nous pouvons aussi déterminer, sans difficulté, avec le même modèle de ralentissement lourd, les taux en milieu homogène infini que nous notons $T^{hom,*}$. La température étant connue, ces taux sont paramètrés en fonction de la section de dilution.

Le principe de l'équivalence hétérogène/homogène (voir Figure 22) est alors le suivant. Nous calculons le taux d'absorption en géométrie réelle $T_a^{hét,*}$ en utilisant le modèle du ralentissement lourd. Un milieu homogène infini étant caractérisé (outre sa température) par sa dilution σ_b, nous cherchons la dilution σ_b qui vérifie l'équation :

$$T_a^{hom,*}(\sigma_b) = T_a^{hét*} \qquad \textbf{(76)}$$

La dilution est obtenue par une méthode itérative classique de recherche de zéro.
Nous interpolons alors dans les tabulations "exacts" des taux de réaction en milieu homogène infini à cette dilution et nous obtenons les taux de réaction "exacts" en géométrie réelle :

$$T_\rho^{hét} = T_\rho^{hom}(\sigma_b) \qquad \textbf{(77)}$$

ρ représentant l'absorption, la diffusion, la production, et éventuellement les probabilités de transfert.

(ii) Equivalence multigroupe

L'équivalence multigroupe est la deuxième étape du calcul d'autoprotection : l'obtention des sections efficaces autoprotégées lorsque les taux de réaction sont connus.
Pour l'isotope résonnant x traité dans le calcul et un groupe g quelconque du domaine des résonances, nous cherchons à déterminer pour toutes les réactions ρ et toutes les régions d'autoprotection α, les sections efficaces autoprotégées. Ces sections sont définies de façon à préserver les taux de réaction multigroupes calculés à l'étape de l'équivalence hétérogène/homogène $T_{\rho,x}^{g,\alpha}$. Le système suivant à α équations doit donc être résolu :

$$\Delta u_g \sigma_{\rho,x}^{g,\alpha} \phi_\alpha^g = T_{\rho,x}^{g,\alpha} \qquad \textbf{(78)}$$

où ϕ_{α}^{g} représente le flux moyen multigroupe dans la région d'autoprotection α. A priori ce flux dépend des sections efficaces totales et de diffusion de toutes les régions d'autoprotection. En fait, nous pouvons montrer**[59]** qu'il ne dépend que des sections efficaces totales $\sigma_{t,x}^{g,\alpha}$ de l'isotope résonnant traité. Si $\vec{\sigma}_{t,x}^{g}$ est le vecteur dont la composante α représente la section efficace totale dans le groupe g de l'isotope x autoprotégée dans la région α, il suffit de résoudre le système :

$$\Delta u_g \sigma_{\rho,x}^{g,\alpha} \phi_{\alpha}^{g}\left(\vec{\sigma}_{t,x}^{g}\right) = T_{\rho,x}^{g,\alpha} \qquad \textbf{(79)}$$

Ce problème est un problème vectoriel non linéaire, il est traité par un processus itératif. Une fois les sections efficaces totales et donc les flux connus, nous obtenons les sections efficaces pour toutes les autres réactions ρ par :

$$\sigma_{\rho,x}^{g,\alpha} = \frac{T_{\rho,x}^{g,\alpha}}{\Delta u_g \phi_{\alpha}^{g}} \qquad \textbf{(80)}$$

b) Autoprotection des milieux de la criticité

(i) Données communes à tous les milieux "autoprotégeables"

Isotopes à autoprotéger

Pour les milieux dissolveurs, solutions, piscines de stockage et châteaux de transport, nous recommandons d'auprotéger les isotopes résonnants qui contribuent le plus à l'absorption résonnante soit : ^{238}U, ^{235}U, ^{236}U, ^{238}Pu, ^{239}Pu, ^{240}Pu, ^{241}Pu, ^{242}Pu, Zr, Gd, Hf. Ces isotopes possèdent évidemment des tables de quadrature permettant le calcul d'autoprotection.

Modélisation de l'opérateur de ralentissement lourd

Pour utiliser un ou l'autre des modèles, il faut déterminer la nature de la résonance : large, étroite, séparée ou non.

A hautes énergies, la largeur des macrogroupes est telle que plusieurs résonances peuvent être à l'intérieur d'un même groupe. Les résonances sont étroites mais elles ne sont plus isolées. Il est alors correct d'utiliser le modèle statistique.

Dans le domaine du ralentissement des neutrons, le choix du modèle est plus délicat : la largeur ou l'étroitesse d'une résonance dépend des critères de comparaison que l'on se fixe.
Actuellement, dans le calcul des assemblages REP, la frontière entre résonances larges et étroites est fixée à l'énergie pour laquelle la somme de la largeur naturelle de la résonance et de la largeur Doppler devient supérieure à deux fois le gain d'énergie moyen obtenu lors de la collision du neutron avec le noyau cible (recommandation **[60]**). Pour les principaux actinides cette limite se situe à environ 50 eV. Ainsi les résonances situées au-dessous de 50 eV sont traitées comme larges et toutes les résonances situées au-dessus de 50 eV comme statistique.
Nous recommandons aussi cette modélisation de l'opérateur du ralentissement pour autoprotéger les milieux de la criticité traités.

Cependant des études récentes**[61]** portant sur l'absorption résonnante par isotope en fonction de l'énergie ont permis de proposer une nouvelle stratégie d'autoprotection. Cette nouvelle modélisation permet de calculer l'absorption résonnante pour chaque isotope dans chaque groupe d'énergie avec une précision de 1%. Ces études servent de base à l'élaboration des prochains schémas de calcul de référence des assemblages REP. Elles pourront donc être intégrées par la suite dans une prochaine version de CRISTAL.

Interaction spatiale des résonances

D'un point de vue théorique, la méthode de la matrice de dilution est meilleure que la méthode PIC. De plus, dans les études de Sûreté-Criticité, les mélanges résonnants sont similaires (il n'y a pas, par exemple, de distribution de température dans le crayon combustible). C'est donc cette méthode que nous recommandons d'utiliser. Une étude plus approfondie de la validité de cette méthode est présentée dans le cadre des études d'autoprotection relatives aux milieux dissolveurs.

Protection mutuelle

Les études réalisées, jusqu'à présent, toujours pour le calcul des assemblages REP**[61][62]**, ont montré qu'il était préférable de ne pas utiliser la méthode qui consiste à remplacer les isotopes résonnants autres que celui traité par leurs sections potentielles.

Il faut donc réaliser des calculs indépendants qui par exemple dans le cas d'un calcul d'autoprotection impliquant les isotopes ^{238}U et ^{235}U correspond à autoprotéger l' ^{238}U avec les sections moyennes de l' ^{235}U puis autoprotéger l' ^{235}U avec les sections autoprotégées de l' ^{238}U.

L'utilisation de cette méthode nécessite de définir un ordre d'autoprotection pour les isotopes.

Dans le cas de milieux ne mettant en jeu que de l'uranium (solution de nitrate d'uranyle, réseaux UOX, dissolution de crayons REP/UOX), l'effet de protection mutuelle concerne les isotopes 'Uranium 235' et 'Uranium 238'.

Pour les milieux à combustible mixte (solutions de nitrate mixte d'uranium et de plutonium) il faut considérer l'effet de protection mutuelle pour les isotopes 'Uranium 238', 'Plutonium 239' et 'Plutonium 240'.

Les études**[61]** citées précédemment ont abouti aux conclusions suivantes :

- Pour les milieux ne mettant en jeu que de l'uranium l'effet de protection mutuelle de l' ^{235}U sur l'Uranium 238 est faible. L'effet le plus important est l'effet de l' ^{238}U sur l' ^{235}U.
- Pour les milieux à combustible mixte l'effet de protection mutuelle sur l' ^{238}U est plus élevé que dans le cas précédent à cause du plutonium 240. L'effet de l'Uranium 238 est important sur le ^{240}PU mais est faible sur le ^{239}Pu et le ^{242}Pu.

Ces résultats nous amènent donc à recommander l'ordre suivant**[53]** : ^{238}U, ^{240}Pu, ^{235}U, ^{239}Pu, ^{241}Pu, ^{242}Pu, ^{236}U, ^{238}Pu.

Autoprotection des résonances thermiques

Dans APOLLO2, le formalisme d'autoprotection des résonances thermiques c'est à dire les résonances situées à une énergie inférieure à la coupure thermique (4 eV dans la bibliothèque CEA93) est rigoureusement le même que celui décrit précédemment. Cependant il faut remarquer qu'en utilisant ce formalisme dans le domaine thermique, nous faisons une approximation. En effet, nous résolvons dans le domaine de la thermalisation une équation de ralentissement pur sans prendre en compte la remontée des neutrons thermiques appelée "phénomène d'upscattering".

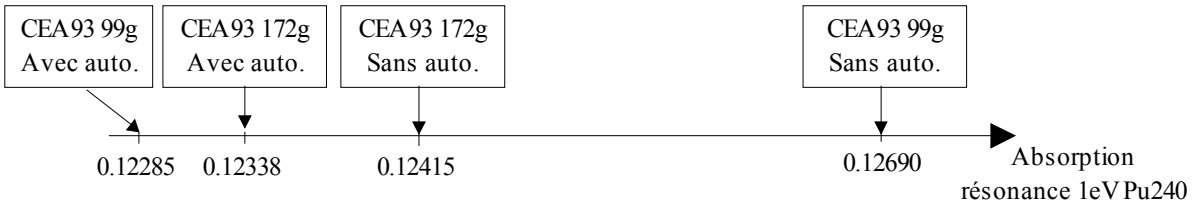
Dans les études de criticité, nous allons montrer que, malgré cette approximation, nous modélisons correctement l'absorption résonnante en utilisant le formalisme d'APOLLO2, dans le domaine thermique.

Les isotopes comprenant des résonances thermiques sont principalement les isotopes du plutonium, ^{239}Pu, ^{240}Pu et ^{242}Pu.

Nous avons effectué une étude sur la plus large résonance du ^{240}Pu située à 1 eV. La Figure 23 montre que le nombre de points dans cette résonance, avec 172 groupes d'énergie des neutrons, est largement suffisant pour réaliser un calcul de flux précis sans avoir besoin d'autoprotéger cette résonance. Par la suite, nous considérerons ce calcul comme "référence". Par contre, ceci n'est pas le cas pour le maillage plus "grossier" à 99 groupes.

Nous allons à présent confirmer ce que nous venons de dire à partir du calcul des expériences traitant de solutions fissiles de plutonium réalisées à Valduc avec une teneur en Pu de 19%.

Le graphique suivant représente l'absorption résonante de cette résonance, normalisée à 1 neutron source qui passe l'énergie de 2.76 eV. Le calcul a été réalisé avec les découpages à 99 et 172 groupes, avec ou sans autoprotection.



Les cas sans autoprotection confirment que le maillage à 99 groupes ne discrétise pas de façon satisfaisante la résonance. Avec ce maillage, il faut autoprotéger la résonance à 1 eV.

Le calcul dit de "référence", i.e. sans autoprotection à 172 groupes, confirme **la validité du formalisme d'autoprotection d'APOLLO2 dans le domaine thermique**.

Pour les milieux de la criticité, qui sont le plus souvent à une température de 20°C, le calcul de "référence" pourrait être utilisé. Cependant il est préférable de recommander d'autoprotéger cette résonance pour prendre en compte l'effet Doppler dans des milieux où la température pourrait être plus élevée.

Il est cependant important de noter qu'il est désormais possible dans le module d'autoprotection d'APOLLO2 de ne pas autoprotéger une résonance d'un isotope particulier mais de l'élargir uniquement par effet Doppler (mot clé &DOPP). Cette possibilité sera à étudier pour une version postérieure de CRISTAL ce qui permettrait de rester cohérent avec le schéma de référence 'CEA-97 Optimisé'**[63]** du calcul des REP (pas d'autoprotection des résonances Pu239 et Pu240 à 0.3 eV et 1 eV).

(ii) Données spécifiques aux milieux étudiés

- *Les milieux dissolveurs*

Les milieux dissolveurs sont caractérisés par la présence simultanée d'isotopes résonnants dans le crayon combustible et dans la solution entourant ces crayons. C'est donc un cas où se pose précisément le problème de l'interaction spatiale des résonances.
La validation théorique du modèle 'Matrice de Dilution' implanté dans APOLLO2 permettant de traiter cet effet de "double hétérogénéité" a été effectuée à partir des Benchmarks n°19 et 20 qui sont définis dans le chapitre concernant la base de données expérimentales du formulaire CRISTAL.

La première étude présentée permet de valider l'effet de double hétérogénéité à partir du problème 20 qui maximise cet effet.
Le calcul des facteurs de multiplication infini avec le code APOLLO2 en utilisant le modèle de la Matrice de Dilution a permis de déduire la perte de réactivité due à la dissolution de la pastille.

Cette perte de réactivité calculée comme $\mathrm{Ln}[\frac{K_\infty(X\%)}{K_\infty(100\%)}]$ est présentée dans le tableau ci-après. Elle est également comparée avec la perte calculée par l'ancien schéma de calcul de criticité utilisant APOLLO1-PIC.

Tableau 26 : Perte de réactivité en fonction du pourcentage de combustible restant dans la pastille : benchmark n°20

CODE	% de combustible restant dans la pastille	K infini		Δρ	
		Fraction volumique		Fraction volumique	
		0.4	0.6	0.4	0.6
CEA86 APOLLO1	100	1.12125	1.09988	0	0
	75	1.09028	1.07962	-2800	-1860
	50	1.08336	1.07278	-3437	-2495
	25	1.07977	1.06876	-3769	-2870
	0	1.07788	1.06597	-3945	-3131
CEA93 APOLLO2	100	1.12739	1.10592	0	0
	75	1.09407	1.08149	-3000	-2234
	50	1.08740	1.07411	-3611	-2918
	25	1.08366	1.06942	-3956	-3350
	0	1.08232	1.07233	-4080	-3084

Les résultats APOLLO2 portés dans ce tableau indiquent une perte de réactivité monotone jusqu'aux valeurs maxima de 4000 et 3100 pcm (respectivement pour des fractions volumiques de 0.4 et 0.6) lorsque la pastille est totalement dissoute.

Ceci est parfaitement cohérent avec les résultats obtenus avec le code APOLLO1 utilisant la méthode PIC et qui avait déjà fait l'objet d'une validation approfondie dans le cadre du Benchmark n°20 et de l'intercomparaison avec des codes de référence.

Nous avons reporté l'ensemble des calculs internationaux sur la Figure 24 en y incluant les résultats APOLLO2.

Nous rappelons que cette figure est très représentative du danger qui consiste à utiliser un code qui ne traite pas correctement l'autoprotection du combustible présent dans la pastille et dans la solution : ceci peut entraîner en effet une surestimation de la perte de réactivité atteignant jusqu'à 21000 pcm.

Sur cette figure, trois grands groupes de types de calculs sont présentés. Le premier groupe contient les calculs de référence APOLLO1 (avec PIC), APOLLO2, ROLAIDS (R-XSDRNPM), MONK6 et WIMSE traitant rigoureusement le problème de la double hétérogénéité. Le second groupe regroupe les résultats de calculs XSDRNPM/ENEA, KENO4, et XSDRNPM/GAR ; ces calculs tiennent compte de l'autoprotection du modérateur mais pas de l'effet d'ombre de la pastille sur la solution et vice versa. Enfin le dernier groupe contient les résultats des calculs standards de criticité SCALE (XSDRNPM/PNC et XSDRNPM/ORNL) ; les modules de SCALE, conçus à l'origine pour le calcul des réacteurs ne sont pas adaptés à la prise en compte d'une éventuelle autoprotection de corps résonnants dans le modérateur.

Cette figure montre bien la validité de la méthode de la Matrice de Dilution d'APOLLO2 par rapport aux calculs internationaux utilisant des méthodes de calculs rigoureuses.

Ces calculs de référence sont repris plus précisément sur les Figure 25 et Figure 26. On trouve sur ces figures les calculs Monte-Carlo polycinétiques, MCNP, VIM, MONK6, les calculs en ralentissement hyperfin effectués par le Japon avec le code PEACO et les allemands (code CGM) et enfin les codes APOLLO1 et APOLLO2.

Tous ces calculs montrent la perte de réactivité monotone avec la dissolution de la pastille. Les calculs Monte-Carlo et déterministes sont cohérents. La dispersion entre ces calculs de référence n'est que de 1000 pcm au plus.

Le problème 19 est également étudié pour valider la méthode de la Matrice de Dilution. Il est plus représentatif que le problème 20 des milieux dissolveurs et permet d'autre part d'évaluer l'effet de deux paramètres supplémentaires intervenants dans des études dissolveurs à savoir : l'influence du rapport de modération et l'effet de la taille des pastilles combustibles.

Les deux types de solutions étudiées, sans combustible dans la solution et avec combustible, permettent de traiter divers problèmes. Ainsi, la solution sans combustible dissous permet de découpler des problèmes tels que la taille des pastilles en dissolution ou le fait que l'on soit dans un réseau très sous-modéré du problème de la double hétérogénéité. Ce phénomène est lui spécifiquement représenté par la solution contenant le combustible.

Nous nous sommes attachés à valider ces différents effets par rapport à des calculs internationaux de référence ainsi que par rapport aux valeurs APOLLO1 parfaitement validés dans ce cadre.

Variation du coefficient de multiplication infini

Le Tableau 27 présente les valeurs des coefficients de multiplication infini des calculs APOLLO2-CEA93 ainsi que des calculs CRIBLE APOLLO1-CEA86.

Les calculs APOLLO2 sont réalisés avec le formalisme de la matrice de dilution, un découpage du combustible en 6 couronnes et 6 points de calcul dans le modérateur pour la sphère de 1 cm de rayon.

Tableau 27 : Résultats des K_∞ problème n°19 sans et avec combustible dans la solution

	SOLUTION 1 : PAS DE COMBUSTIBLE DANS LA SOLUTION			
	R = 0.05 cm		R= 1 cm	
Fraction volumique	APOLLO2 CEA93	APOLLO1 CEA86	APOLLO2 CEA93	APOLLO1 CEA86
0.3	1.03072	1.02408	1.00162	1.00408
0.4	1.11084	1.10638	1.12421	1.12275
0.5	1.13624	1.13255	1.17424	1.17063
0.6	1.11993	1.11748	1.16646	1.16202
0.7	1.07071	1.06872	1.11276	1.10801
	SOLUTION 2 : 300g/l DE COMBUSTIBLE DANS LA SOLUTION			
	R = 0.05 cm		R= 1 cm	
0.3	1.05373	1.04703	1.01307	1.01479
0.4	1.12131	1.11535	1.11787	1.11710
0.5	1.14043	1.13479	1.16209	1.16019
0.6	1.12090	1.11701	1.15523	1.15283
0.7	1.07058	1.06839	1.10540	1.10262

Ce tableau montre la cohérence des valeurs obtenues avec APOLLO2 et celle de l'ancien formulaire CRIBLE, les valeurs APOLLO2 étant légèrement supérieures à celles d'APOLLO1. Il est important de noter que la moitié des écarts APOLLO2/APOLLO1 est liée à l'utilisation d'une température de Debye différente entre les deux codes. Dans les calculs APOLLO2 nous avons en effet utilisé la nouvelle température de Debye de 300 K pour les réseaux UO_2 alors que les calculs APOLLO1 utilisent une valeur de 620° K anciennement proposée.

La variation du coefficient de multiplication infini est tracée sur les Figure 27 et Figure 28. Ces figures montrent que les calculs APOLLO2 sont proches des valeurs données par des codes de référence utilisant des méthodes rigoureuses du traitement de l'autoprotection. Ceci prouve ici encore la capacité du formalisme de la matrice de dilution à traiter les milieux dissolveurs.

Effet de la taille des pastilles

Le fait de traiter de très petites pastilles peut soulever des problèmes de convergence dans les calculs Monte-Carlo ou les calculs 'cellules' S_N. Les codes APOLLO1 ou APOLLO2 utilisant la méthode des probabilités de collision sont eux particulièrement bien adaptés au traitement de la variable spatiale dans l'équation de Boltzmann quand $R\,\Sigma_t << 1$.

La variation de réactivité du milieu dissolveur liée à cet effet de taille est importante ; elle est présentée dans le tableau suivant pour les calculs APOLLO2 (cette perte de réactivité est calculée comme $\Delta\rho = \mathrm{Ln}(k_\infty \text{ petite} / k_\infty \text{ grosse pastille})$).

Tableau 28 : Effet de la taille des pastilles

	$\Delta\rho = \mathrm{Ln}(k_\infty$ petite / k_∞ grosse pastille)	
Fraction volumique	Solution 1 (0 g/l)	Solution 2 (300 g/l)
0.3	2864	3935
0.4	- 1196	307
0.5	- 3289	- 1880
0.6	- 4071	- 3016
0.7	- 3852	- 3200

L'effet en réactivité dans les calculs internationaux est reporté sur la Figure 29.

Ici encore nous constatons que les résultats APOLLO2 - Matrice de Dilution sont tout à fait cohérents, d'une part avec les codes utilisant les probabilités de collision (APOLLO1, WIMSE), d'autre part avec les codes Monte-Carlo

Effet de double hétérogénéité

Enfin, nous avons étudié l'effet de double hétérogénéité lié à l'introduction de 300 g/l de nitrate d'uranyle dans la solution. Les résultats des calculs internationaux de référence, où $\Delta\rho = \mathrm{Ln}(k_\infty \text{ solution2} / k_\infty \text{ solution1})$ (*) , sont comparés à nos résultats APOLLO2 et APOLLO1 sur la Figure 30.

Les méthodes précises, méthodes des sous-groupes WIMSE et calculs fins de ralentissement ROLAIDS, ainsi que les calculs Monte-Carlo polycinétiques de référence VIM et MCNP donnent des résultats cohérents avec nos valeurs APOLLO2 tout comme l'étaient les valeurs APOLLO1.

En conclusion, la cohérence entre l'ensemble des calculs de référence des Benchmarks n° 19 et 20 confirme **la validité de la méthode de la Matrice de Dilution (ou de la Méthode Directe &MD) implantée dans APOLLO2** pour le traitement des milieux dissolveurs.

- *Les milieux piscine de stockage et château de transport*

Ces configurations typiques des études de criticité sont constituées d'assemblages combustibles, séparés par des lames d'eau et éventuellement des absorbants. Pour traiter l'autoprotection de ces milieux, il faut donc calculer correctement les matrices de probabilité de collision qui sont utilisées pour résoudre l'équation du ralentissement en milieu hétérogène. Cela revient à étudier l'effet Dancoff dans les crayons au contact de la lame d'eau et pour ceux en contact avec les trous d'eau. La difficulté réside alors dans la discrétisation spatiale du calcul d'autoprotection pour trouver un compromis précision/temps de calcul optimal.

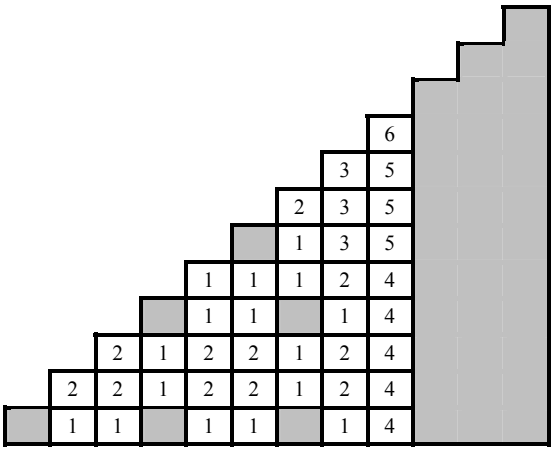
Dans le but d'établir un schéma d'autoprotection, nous avons modélisé la configuration d'une piscine de stockage par la géométrie présentée sur la Figure 31.

Les calculs ont été réalisés sur un huitième d'assemblage par la méthode Pij multicellule d'APOLLO2 avec les approximations sur les courants aux interfaces : UP0, ROTH.

(*) la solution 2 est celle contenant 300 g/l de combustible

Définition d'un schéma d'autoprotection dit "de référence"

Le calcul de "référence" considère 6 régions d'autoprotection différentes suivant la position des crayons vis à vis des trous d'eau et de la lame d'eau. Ces régions sont données pour un huitième d'assemblage sur la figure ci-dessous.



Régions d'autoprotection

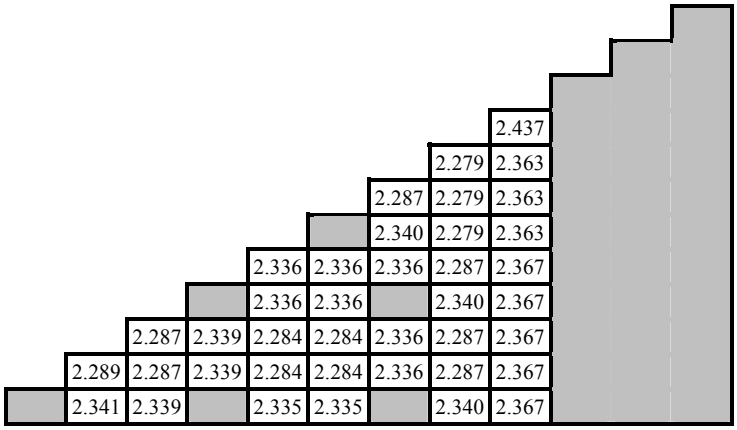
1 : cellules situées en face des trous d'eau

2 : cellules situées aux angles des trous d'eau

3 : cellules "asymptotiques": les cellules qui ne "voient" ni les trous d'eau ni lame d'eau

4, 5, 6 : cellules situées en face de la lame d'eau

En utilisant ce regroupement spatial des régions d'autoprotection, nous obtenons les sections efficaces microscopiques d'absorption de l' U238 dans le domaine du ralentissement suivantes :



Sections efficaces microscopiques d'absorption de l' U238 (en barn) entre 0.625 eV et 5 KeV pour l'autoprotection dit de "référence"

Pour analyser ces résultats, rappelons la notion de sections efficaces autoprotégées ou "effectives" : elles sont définies comme les sections efficaces (fictives) qui conserveraient les taux de réaction d'absorption si l'on utilisait le flux à l'extérieur des résonances au lieu du flux réel.

Dans les cellules asymptotiques, tout se passe comme si les neutrons ne "voyaient" que des cellules combustibles. Ces crayons combustibles absorbent les neutrons aux énergies des résonances ce qui "creusent" considérablement le flux dans ces résonances. Ainsi, pour garder les taux de réaction constants, la section effective d'absorption pour les cellules asymptotiques est beaucoup plus faible que les autres sections effectives des autres cellules. C'est ce que nous voyons sur la figure précédente.

Par contre, les sections effectives des cellules au contact des trous d'eau et de la lame d'eau sont plus grandes. En effet les neutrons sont diffusés par l'eau et sont donc répartis en énergie : ils ont une probabilité plus faible d'être absorbés par les résonances ce qui donne un flux moins creusé.

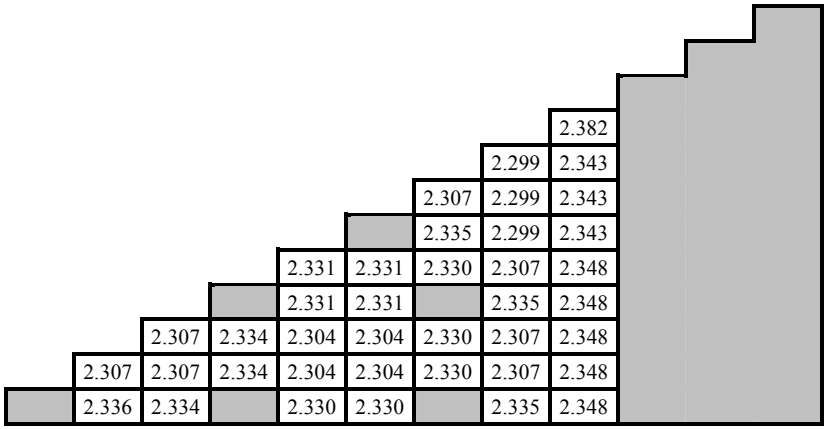
Nous pouvons ainsi conclure que cette discrétisation spatiale en 6 régions d'autoprotection permet de bien prendre en compte la variation locale de l'effet Dancoff.

Les modèles d'autoprotection

En vue de diminuer les coûts calculs de l'autoprotection, nous avons élaboré et étudié les trois modèles d'autoprotection suivants :

- un modèle **"autoprotection moyenne"** : dans ce modèle les cellules combustibles ne sont plus regroupées en 6 régions comme dans le calcul de référence mais en une seule région d'autoprotection,
- un modèle **"autoprotection cellule "** dans lequel le calcul Pij de l'assemblage est réalisé avec des sections autoprotégées issues d'un calcul cellule en milieu infini,
- un modèle **"autoprotection supercellule"** : ce modèle permet de prendre en compte les trous d'eau négligés dans le cas précèdent. Nous créons une cellule dite "supercellule" qui comprend une quantité d'eau supplémentaire correspondant à l'eau des trous d'eau répartie sur toutes les cellules de l'assemblage afin de conserver le bilan matière. Nous réalisons ainsi le calcul cellule avec cette supercellule afin d'obtenir les sections autoprotégées.

A titre d'exemple, les sections efficaces d'absorption de l' U238 pour le modèle autoprotection moyenne sont présentées ci-dessous :



Sections efficaces microscopiques d'absorption de l'U238 (en barn) entre 0.625 eV et 5 KeV pour le modèle d'autoprotection moyenne

Cette figure montre que les sections effectives d'absorption fluctuent faiblement (entre 2.299 barn et 2.382 barn) : il n'y a plus de variation sensible de ces sections à proximité des trous d'eau et de la lame d'eau. Ce modèle ne prend pas en compte la variation locale de l'effet Dancoff.

De même les autres modèles, cellule et supercellule, qui sont des calculs d'autoprotection en milieu infini, ne peuvent pas modéliser précisément l'effet Dancoff.

Comparaison des modèles d'autoprotection avec l'autoprotection de "référence"

Le Tableau 29 montre les résultats obtenus avec les différents modèles d'autoprotection.

Tableau 29 : Etude comparative des modèles d'autoprotection pour les réseaux de stockage

	Autoprotection de "référence"	Autoprotection "moyenne"	Autoprotection "cellule"	Autoprotection "supercellule"
K_∞	1.02237	1.02225	1.02333	1.02230
$\Delta\rho^{(*)}$ (pcm)		-12	+94	-7
Temps passé dans l'autoprotection (s)	130.6	117.6	0.7	0.7

(*) $\Delta\rho = \ln\left(K_\infty^{\text{auto. X}} / K_\infty^{\text{auto. réf}}\right)$

Ce tableau montre que les différents modèles entraînent en fait peu d'effet sur le résultat du calcul puisque l'erreur, quel que soit le modèle utilisé, reste inférieure à 100 pcm.

Il tend également à montrer que le modèle "supercellule" est le modèle qui crée le moins de biais par rapport à la référence. Ceci est en fait lié à une compensation d'erreur entre l'effet lié au fait qu'on autoprotège des sections en milieu infini, ce qui entraîne une surestimation de l'autoprotection, et l'effet lié à l'eau supplémentaire entourant les cellules qui va dans le sens d'une diminution de l'autoprotection des sections efficaces des cellules.
Ce modèle supercellule est cependant fortement dépendant de la géométrie et notamment difficilement utilisables dans le cas de combustibles MOX.
Il nous semble donc préférable de recommander **un modèle "autoprotection moyenne"** qui a l'avantage d'autoprotéger sur la vraie géométrie du problème à traiter tout en ne différenciant pas l'autoprotection des cellules.

4. La géométrie

Pour les milieux de la criticité étudiés trois types de géométrie sont concernés :
- la géométrie de milieux homogènes (milieux solutions, matériaux de structure),
- la géométrie de type cellule pour les milieux dissolveurs,
- la géométrie multicellule des milieux piscines de stockage ou châteaux de transport.

a) Cas d'une géométrie homogène

Dans APOLLO2 nous ne disposons plus du mot clé 'GEOMETRIE HOMOGENE' qui existait dans le code APOLLO1 et qui permettait de décrire immédiatement une géométrie à un seul milieu. Nous proposons donc d'utiliser aujourd'hui dans CRISTAL pour décrire une géométrie homogène, une géométrie cylindrique avec un point de calcul (sur un centimètre par exemple).

b) Cas d'une géométrie 'cellule'

Discrétisation de la pastille combustible

De nombreuses études**[64][65]** ont montré qu'un découpage en 6 couronnes de la pastille combustible permettait de modéliser correctement les variations de flux à l'intérieur du combustible et notamment en périphérie de la pastille. Nous recommandons donc d'utiliser dans CRISTAL **un découpage à 6 couronnes dans le combustible.**

Les 6 zones de la pastille combustible sont définies à partir d'un découpage à 20 zones équivolumiques.

Dans le cas d'une cellule cylindrique les rayons des six couronnes sont les suivants :

$r_1 = 2R/\sqrt{10}$ $r_2 = R \times \sqrt{7/10}$ $r_3 = 2R \times \sqrt{2/10}$

$r_4 = 3R/\sqrt{10}$ $r_5 = R \times \sqrt{19/20}$ $r_6 = R$

Dans le cas d'une sphère, nous obtenons les rayons suivants :

$r_1 = (4/10)^{1/3} \times R$ $r_2 = (7/10)^{1/3} \times R$ $r_3 = (8/10)^{1/3} \times R$

$r_4 = (9/10)^{1/3} \times R$ $r_5 = (19/20)^{1/3} \times R$ $r_6 = R$

Pour illustrer l'effet dû à cette discrétisation, prenons l'exemple de la pastille UO2 sphérique du Benchmark OCDE n°19. L'effet en réactivité du raffinement spatial en 6 couronnes de cette pastille au lieu de 1 est de +100 pcm.

Discrétisation du modérateur

Afin de traiter correctement le phénomène du ralentissement dans le modérateur et le calcul du taux de capture dans les couronnes externes du combustible, il est également nécessaire de proposer une bonne discrétisation du modérateur.

Nous avons effectué une étude à partir du benchmark n°19 montrant l'importance de cette discrétisation. Les résultats de cette étude ont montré que l'utilisation d'un seul point de calcul dans le modérateur entraîne une surestimation de 600 pcm par rapport à une discrétisation fine à 6 points de calcul (ce qui correspondait à 1 point de calcul par millimètre d'épaisseur dans notre cas).

Nous recommandons donc d'utiliser **une discrétisation de 1 point par millimètre d'épaisseur dans le modérateur.**

c) Cas d'une géométrie 'multicellule'

Dans les géométries de type 'multicellule', le nombre de cellules est très grand : par exemple pour un assemblage 17x17, 289 cellules. A cela vient s'ajouter la discrétisation de la lame

d'eau. Il faut donc, pour des raisons de coût de calcul, d'une part considérer chaque cellule comme une seule région de calcul et d'autre part regrouper les cellules ayant le même flux. Le regroupement que nous donnons en exemple pour un huitième d'assemblage 17x17 avec lame d'eau interassemblage de 7.6 cm sur la figure suivante, s'est appuyé sur les études menées dans la référence **[31]**.

											26
										20	26
									17	20	26
								14	17	20	26
							11	13	16	19	25
						10	11	13	16	19	25
					23	9	11	13	16	19	25
				7	7	8	10	12	15	18	24
			22	7	7	23	9	12	15	18	24
		4	3	6	6	8	10	12	15	18	24
	2	4	3	6	6	8	10	12	15	18	24
21	1	3	22	5	5	23	9	12	15	18	24

Regroupement des cellules physiques

Pour traiter les autres configurations de piscines et de châteaux, nous nous basons sur ce type de regroupement.

5. Le maillage de condensation énergétique

Nous avons vu que les méthodes déterministes utilisaient une discrétisation énergétique pour résoudre l'équation du transport. Cette discrétisation, utilisée par la méthode S_N, mérite une optimisation toute particulière, en effet le temps de calcul est ici directement lié au nombre de groupes utilisés (au niveau des itérations externes et thermiques). Il faut donc arriver à trouver le meilleur compromis temps de calcul/précision du calcul pour tous les cas rencontrés en criticité. Cette variété est une contrainte supplémentaire dans la définition du maillage énergétique puisqu'il existe dans le domaine de la criticité des cas à spectre rapide (cas des milieux métalliques) comme des spectres thermiques (cas des milieux solutions ou des dissolveurs), des réseaux UO_2 ou UO_2-PuO_2, des spectres intermédiaires et des spectres couplés (piscines de stockage, châteaux de transport).

Différents maillages de condensation énergétique existent à l'heure actuelle. Ils ont tous été conçus avec des objectifs différents et ont par conséquent chacun des découpages différents.
Ces maillages sont les suivants :

- le **maillage 'Hansen-Roach'** conçu à l'origine pour traiter les milieux au plutonium à spectre rapide et principalement utilisé dans le cadre de la Sûreté-Criticité,
- le **maillage 'JEF2'** utilisé pour les études d'ajustement de la bibliothèque CEA93,
- le **maillage 'CRIBLE'** mis en oeuvre dans l'ancien formulaire de criticité de la DRN et élaboré à partir d'un maillage utilisé pour le calcul des réacteurs couplés rapide/thermique.

Cependant aucun de ces maillages n'est totalement satisfaisant pour traiter la diversité des milieux rencontrés en criticité avec une précision suffisante. Prenons l'exemple des milieux hydrogénés à fort niveau de fuites, tels que les solutions fissiles. Dans ce cas, même le maillage 18 groupes CRIBLE peut être mis en défaut.
Un nouveau maillage**[66]** a donc été élaboré. Celui-ci s'est appuyé sur le maillage existant à 18 groupes qui est suffisamment discrétisé dans le domaine de l'absorption résonnante, du ralentissement et dans le domaine thermique. Par contre il a été modifié dans le domaine rapide. Cette modification s'est inspirée du maillage JEF2 qui donne des résultats très satisfaisants pour les milieux à spectre rapide.
Le maillage ainsi proposé est constitué de 20 groupes, 12 rapides et 8 thermiques. Ses bornes en énergie sont données dans le tableau de la page suivante.

Tableau 30 : Découpage à 20 groupes

Groupe	Premier microgroupe	Energie supérieure (MeV)	Largeur en léthargie	Commentaires
1	1	1.964E+01	1.48	Phénomènes (n, 2n) et fission 2ème chance
2	11	4.493+00	0.70	Domaine rapide
3	15	2.231E+00	0.50	
4	18	1.353E+00	1.00	
5	26	4.979E-01	1.00	
6	32	1.832E-01	1.00	1ère résonance O16
7	36	6.738E-02	1.00	
8	42	2.479E-02	1.00	
9	46	9.119E-03	1.50	Domaine non résolu
10	53	2.035E-03	1.50	
11	61	4.540E-04	2.10	Résonances résolues
12	70	5.560E-05	2.63	3 premières résonances ^{238}U
13	93	4.000E-06	1.86	Résonance ^{240}Pu,^{242}Pu
14	136	6.250E-07	0.58	
15	143	3.500E-07	0.46	Résonance ^{239}Pu
16	149	2.200E-07	0.50	
17	154	1.340E-07	0.55	Domaine thermique (maxwellienne)
18	159	7.700E-08	0.94	
19	165	3.000E-08	1.10	
20	169	1.000E-08	4.51	

Ce maillage appliqué à des cas spécifiques à la criticité permet de traiter avec une précision de 200 pcm l'ensemble de ces milieux types, ce qui n'était pas le cas avec les maillages utilisés dans les anciens formulaires de calcul. Ce maillage peut-être considéré comme 'universel' pour les calculs S_N puisqu'il permet de traiter précisément :

- les milieux à combustible UOX et MOX, et les interfaces UOX/MOX
- les géométries à fort niveau de fuite
- les spectres rapides, intermédiaires, thermiques, ainsi que les couplages de spectre.

Nous avons évalué les performances associées à ce nouveau maillage en temps de calcul et rapport précision/coût.

Dans la méthode S_N, les itérations dans le domaine thermique sont très pénalisantes en temps de calcul. Les maillages 18 et 20 groupes sont donc légèrement plus coûteux que les maillages 15 et 16 groupes n'ayant que 3 ou 4 groupes thermiques.

Par contre le fait d'augmenter le nombre de groupes dans le domaine rapide, ce qui est le cas lorsqu'on passe du maillage CRIBLE à 18 groupes au maillage 20 groupes proposé pour CRISTAL, a une influence sur le temps de calcul très faible. Le Tableau 31 illustre ceci.

Tableau 31 : Comparaison du temps de calcul : cas d'une solution $Pu(NO_3)_4$, calcul S_N 1D

	Temps cpu (s)
172 groupes	300
20 groupes	39.10
18 groupes (CRIBLE)	39.18
16 groupes (Hans. Roach)	31.10
15 groupes (JEF2.2)	29.73

Cet exemple montre bien l'équivalence en temps de calcul entre les calculs 15 et 16 groupes d'une part, et les maillages 18 et 20 groupes d'autre part. Cependant la perte de temps est faible lorsqu'on passe du maillage 16 groupes Hansen Roach au maillage 20 groupes recommandé pour CRISTAL : +26%, alors que la précision de ces calculs de solutions fissiles est améliorée de près d'un facteur 3.

Le tableau démontre l'intérêt de réaliser les calculs de transport déterministes sur des maillages condensés : le coût de calcul CRISTAL S_N est réduit d'un facteur 10 lorsqu'on utilise le macromaillage à 20 groupes.

6. La stratégie d'homogénéisation et de condensation

a) Milieux solutions fissiles, dissolveurs

Pour les configurations de types solutions fissiles et dissolveurs, souvent réfléchies par de l'eau, la condensation et l'homogénéisation du milieu fissile sont réalisées à partir du calcul du flux en mode fondamental à laplacien critique.

Tenant compte de la forte discrétisation du macromaillage à 20 groupes, la condensation des sections du réflecteur d'eau et des matériaux de structure (acier de la cuve, grilles maintenant les crayons, ...) est réalisée en milieu infini à partir du flux calculé à laplacien nul.

b) Milieux piscines de stockage et châteaux de transport

Les milieux piscines de stockage ou châteaux de transport, constitués d'assemblages combustibles séparés par des lames d'eau plus des plaques absorbantes dans certains cas, sont des milieux plus hétérogènes que les milieux précédents. Il faut donc valider non seulement l'aspect spectral de la condensation mais également l'aspect spatial de l'homogénéisation.

(i) L'homogénéisation

- *Choix d'une stratégie d'homogénéisation*

Lorsqu'on parle de l'homogénéisation des piscines de stockage et des châteaux de transport, il s'agit en fait d'homogénéiser la partie la plus hétérogène de ces configurations c'est-à-dire l'assemblage REL composé de crayons combustibles et éventuellement de trous d'eau.
Deux types d'homogénéisation de cet assemblage sont alors possibles :

- **Une homogénéisation cellule par cellule** : chaque cellule élémentaire est homogénéisée, puis représentée dans le calcul de la piscine ou du château. Cette technique permet notamment de conserver la position des trous d'eau.
- **Une homogénéisation de l'assemblage complet** : les cellules combustibles et trous d'eau forment une pâte homogène.

Quelle que soit la méthode utilisée, l'homogénéisation est un problème de moyenne en espace. Le code APOLLO2 utilise une pondération des sections efficaces par les flux et les volumes.
L'homogénéisation/condensation des sections efficaces des cellules de l'assemblage peut s'effectuer par trois types de flux provenant des calculs suivants :

- **Un flux dit "multicellule hétérogène"** : les sections sont homogénéisées à partir d'un calcul Pij multicellule utilisant la méthode de courants d'interfaces (UP0, ROTH), de la configuration réelle, i.e. de la géométrie comprenant toutes ses hétérogénéités (trous d'eau, lame d'eau).
- **Un flux dit "cellule"** : les sections sont issues d'un calcul Pij cellule en milieu infini.
- **Un flux dit "supercellule"** : les sections proviennent d'une cellule dite "supercellule" qui comprend une quantité d'eau supplémentaire correspondant à l'eau des trous d'eau répartie sur toutes les cellules de l'assemblage afin de conserver le bilan matière.

L'étude de la stratégie d'homogénéisation consiste alors à trouver la combinaison type d'homogénéisation/spectre de pondération qui soit précise et robuste c'est à dire applicable à d'autres configurations de piscines et de châteaux.

Nous avons calculé les configurations, présentées sur la Figure 31 et la Figure 32, représentatives des milieux piscines de stockage, en utilisant les différentes stratégies d'homogénéisation. Le Tableau 32 présente la comparaison des facteurs de multiplication infini obtenus à celui du calcul Pij multicellule (UP0 ROTH) traitant la géométrie hétérogène et pris comme référence. Cette comparaison nécessite un spectre de pondération des sections efficaces des trous d'eau et de la lame d'eau : nous avons choisi le spectre réaliste correspondant au calcul hétérogène du réseau de stockage.

Ne modélisant pas les trous d'eau, la stratégie (homogénéisation de l'assemblage complet/spectre cellule) n'a pas été étudiée.

Tableau 32 : Etude de la stratégie d'homogénéisation

Géométrie hétérogène	Homogénéisation cellule par cellule			Homogénéisation de l'assemblage complet	
	Flux Mult. Hété.	Flux Cellule	Flux Supercellule	Flux Mult. Hété.	Flux Supercellule
piscine de stockage sans absorbant					
1.02226	1.02694	1.0277	1.02355	1.02227	1.02205
	+457	+531	+126	+1	-21
piscine de stockage avec absorbant					
0.9511	0.95478	0.95579	0.95207	0.95231	0.95208
	+386	+492	+102	+127	+103

(*) $\Delta\rho = \ln(K^{homo.}/K^{hétéro.})$ en pcm

Les résultats de cette étude indiquent que l'homogénéisation cellule par cellule de l'assemblage combustible introduit une erreur d'environ +500 pcm sur la réactivité du réseau de stockage. En présence d'un absorbant le modèle multicellule mis en œuvre est moins fiable ; il semble indiquer une faible erreur d'homogénéisation supplémentaire quand l'absorbant est éloigné des crayons combustibles d'interface (plaque absorbante au centre de la lame d'eau).

Dans les deux types d'homogénéisation, le modèle supercellule engendre une erreur assez faible par rapport au calcul de référence et par rapport aux autres flux de pondération. Mais nous allons montrer, par le bilan neutronique suivant, que ces faibles écarts sont dus à des phénomènes de compensation d'erreur.

Décomposons donc le facteur de multiplication infini du réseau de stockage K_∞^{sto} en trois facteurs :

$$K_\infty^{sto} = K_\infty^{cell} \cdot f^{ass} \cdot f^{sto} \qquad \textbf{(81)}$$

où

$K_\infty^{cell} = \dfrac{P^{tot}}{A^{tot}}$: facteur de multiplication infini des cellules combustibles (production totale P^{tot} sur l'absorption totale A^{tot}) ;

$f^{ass} = \dfrac{A^{cell}}{A^{cell} + A^{trou}}$: facteur d'utilisation des neutrons dans l'assemblage, i.e. la proportion de neutrons qui ont échappé à l'absorption des trous d'eau A^{trou} et qui sont donc absorbés par les cellules combustibles A^{cell} ; ce facteur vaut un dans le cas de l'homogénéisation complète de l'assemblage ;

$f^{sto} = \dfrac{A^{cell} + A^{trou}}{A^{cell} + A^{trou} + A^{lame}}$ est le facteur d'utilisation des neutrons dans le réseau de stockage ou encore la proportion de neutrons qui ont échappé à l'absorption de la lame d'eau A^{lame}.

Par dérivation logarithmique, on obtient :

$$\frac{dK_\infty^{sto}}{K_\infty^{sto}} = \frac{dK_\infty^{cell}}{K_\infty^{cell}} + \frac{df^{ass}}{f^{ass}} + \frac{df^{sto}}{f^{sto}} \qquad \textbf{(82)}$$

Si les variations des différents termes sont faibles, on peut écrire :

$$\frac{\Delta K_\infty^{sto}}{K_\infty^{sto}} = \frac{\Delta K_\infty^{cell}}{K_\infty^{cell}} + \frac{\Delta f^{ass}}{f^{ass}} + \frac{\Delta f^{sto}}{f^{sto}} \qquad \textbf{(83)}$$

Cette équation montre que l'erreur d'homogénéisation sur le K_∞^{sto} est égale la somme des erreurs d'homogénéisation associées à chacun des trois facteurs K_∞^{cell}, f^{ass}, f^{sto}.

Pour chacune des stratégies possibles, nous dressons ainsi le bilan des différentes sources d'erreur d'homogénéisation dans le Tableau 33.

Tableau 33 : Bilan des différentes sources d'erreur de l'homogénéisation dans le cas d'une configuration de type piscine sans absorbant

	Homogénéisation cellule par cellule			Homogénéisation de l'assemblage complet	
	Flux Mult. Hété	Flux Cellule	Flux Supercellule	Flux Mult. Hété	Flux Supercellule
$\Delta K_\infty^{cell}/K_\infty^{cell}$ (*)	+51	+101	-314	-99	-79
$\Delta f^{ass}/f^{ass}$	+127	+122	+140	-	-
$\Delta f^{sto}/f^{sto}$	+279	+308	+300	+100	+58
$\Delta K_\infty^{sto}/K_\infty^{sto}$	+457	+531	+126	+1	-21

(*) les erreurs relatives sont exprimées en pcm

Par définition des facteurs f^{ass} et f^{sto}, les erreurs $\Delta f^{ass}/f^{ass}$, $\Delta f^{sto}/f^{sto}$ ne sont pas sensibles au flux de pondération des cellules combustibles ; ceci est d'ailleurs confirmé par les résultats du Tableau 33.

Par contre, l'erreur $\Delta K_\infty^{cell}/K_\infty^{cell}$ met en évidence le fait que le flux de pondération des sections efficaces d'absorption peut être différent de celui des sections efficaces de production puisque le K_∞^{cell} est le rapport de ces deux types de section. Ainsi la réactivité de la pâte combustible dépend fortement de la stratégie d'homogénéisation/condensation utilisée pour obtenir le jeu de sections.

Le flux supercellule dans l'homogénéisation cellule par cellule engendre une sous-estimation du K_∞^{cell} de 314 pcm. Cette erreur de la réactivité cellule combustible compense les deux autres types d'erreur liés à l'absorption trous d'eau et lame d'eau ; ainsi l'erreur $\Delta K_\infty^{sto}/K_\infty^{sto}$ pour le flux supercellule est inférieure à celle des autres calculs d'homogénéisation/condensation. Ce phénomène de compensation d'erreur n'est pas forcément applicable à d'autres configurations de piscines ou de châteaux. Ainsi nous ne pouvons pas utiliser cette stratégie d'homogénéisation. Nous n'utiliserons pas non plus les deux autres stratégies de l'homogénéisation cellule par cellule car les erreurs de l'ordre de 500 pcm sur $\Delta K_\infty^{sto}/K_\infty^{sto}$ sont trop élevées.

Le bilan des différentes sources d'erreur pour ce type d'homogénéisation montre clairement que **l'homogénéisation des cellules combustibles situées à l'interface assemblage/lame d'eau conduit à une erreur deux fois plus importante que celle de l'homogénéisation des trous d'eau**. En fait le modèle d'homogénéisation cellule par cellule nécessiterait la mise en œuvre d'une équivalence d'homogénéisation afin d'éliminer l'erreur dans les cellules de l'assemblage, notamment les trous d'eau.

Au regard des résultats du Tableau 33, nous recommandons donc **d'homogénéiser l'assemblage complet**. Il faut à présent choisir le spectre de pondération. Utiliser **le flux de pondération multicellule hétérogène** est plus judicieux que de pondérer par le spectre supercellule. D'une part, le calcul Pij multicellule hétérogène permet d'obtenir les sections efficaces de la lame d'eau et éventuellement d'un absorbant en un seul calcul. D'autre part, les sections efficaces de la zone assemblage, de la lame d'eau et éventuellement de l'absorbant sont homogénéisées sur un spectre représentatif de la piscine de stockage ou bien du château de transport traités.

- *Validation de la stratégie d'homogénéisation*

Nous venons de définir la stratégie d'homogénéisation, il faut maintenant la valider par rapport à des calculs Monte-Carlo étalons.

Nous avons vu que la principale source des erreurs d'homogénéisation se situait à l'interface assemblage/lame d'eau. Ainsi nous avons étudié des géométries qui comportent de fortes hétérogénéités à cet endroit. Il s'agit des configurations, déjà présentées, des expériences CRISTO II. Elles sont constituées de deux types d'alvéoles de stockage d'assemblages REP : en inox et en acier boré.

La comparaison de calculs multigroupes Monte-Carlo TRIPOLI4 où seule la géométrie de calcul diffère (géométrie de référence et géométrie homogène) est présentée dans le Tableau 34.

Tableau 34 : Erreur d'homogénéisation pour des alvéoles de stockage

CRISTO II Lame d'eau 4.5 cm	TRIPOLI4 ETALON	TRIPOLI4 CEA93 172g P1 Géométrie de référence	TRIPOLI4 CEA93 172g P1 Géométrie homogène
$K_\infty \pm 1\sigma$ INOX	1.1016 ± 0.0005	1.1030 ± 0.0009	1.0972 ± 0.0009
$K_\infty \pm 1\sigma$ ACIER BORE 96	0.8300 ± 0.0005	0.8284 ± 0.0009	0.8224 ± 0.0009

Les résultats confirment que le principal problème dans les calculs de réseau de stockage n'est pas lié au traitement de l'anisotropie du choc et de l'absorption résonnante combustible (TRIPOLI4 multigroupe colonne 2) mais de l'homogénéisation (TRIPOLI4 homogène colonne 3).

Les incertitudes statistiques à 1σ liées aux calculs Monte-Carlo étant faibles, nous pouvons évaluer l'erreur d'homogénéisation avec un écran à l'interface assemblage/lame d'eau, pour les deux configurations traitées, à **-600 pcm**. Le fait d'avoir choisi des configurations comprenant de fortes hétérogénéités à l'interface indique que cette erreur représente le maximum des erreurs d'homogénéisation rencontrées dans ces milieux.

- *Homogénéisation par la méthode de l'équivalence*

Dans le but de corriger l'erreur d'homogénéisation que nous venons de mettre en évidence, nous avons étudié une technique d'homogénéisation qui conserve véritablement les taux de réaction des deux géométries hétérogène et homogène, disponible dans le code APOLLO2, appelée méthode de l'équivalence. Nous allons tout d'abord expliquer le principe de cette méthode et l'utiliser dans le cas des configurations CRISTO II et VALDUC.

Principe de la méthode de l'équivalence

Nous avons déjà souligné que l'homogénéisation est un problème de moyenne en espace c'est à dire que les "sections efficaces homogénéisées", pour la réaction β, dans un macrogroupe G, sont définies de façon à respecter les taux de réaction. En désignant par M la macrorégion recouvrant les microrégions m que nous voulons homogénéiser, cela conduit à la règle :

$$\Sigma^{G}_{\beta,M} = \frac{\sum_{m \in M} \Sigma^{G}_{\beta,m} V_m \phi^{G}_{m}}{\sum_{m \in M} V_m \phi^{G}_{m}} \qquad \textbf{(84)}$$

Cette règle utilisée dans APOLLO2 pour l'homogénéisation est simple et exacte en mode fondamentale. Cependant dans les géométries hétérogènes rencontrées ici, avec de forts courants entrant dans les cellules, les sections homogénéisées multipliées par le flux homogène ϕ_M obtenu ne conservent plus le taux de réaction.

La solution consiste à poser le problème de l'homogénéisation en terme d'**équivalence** : déterminer les sections efficaces équivalentes $\widetilde{\Sigma}^{G}_{\beta,M}$ de façon que lorsque le calcul est refait avec ces sections efficaces dans la géométrie homogène, les taux de réaction "exacts" $T^{G}_{\beta,M}$ (ceux du calcul en géométrie hétérogène) sont obtenus. Si $\widetilde{T}^{G}_{\beta,M}$ représente les taux de réaction du calcul dans la géométrie homogène, cela revient à poser :

$$\widetilde{T}^{G}_{\beta,M} = T^{G}_{\beta,M} \qquad \textbf{(85)}$$

Cependant les $\widetilde{T}^{G}_{\beta,M}$ ne dépendent pas linéairement des $\widetilde{\Sigma}^{G}_{\beta,M}$:

$$\widetilde{T}^{G}_{\beta,M} = \widetilde{\Sigma}^{G}_{\beta,M}\widetilde{\phi}^{G}_{M}\left(\widetilde{\Sigma}^{G}_{\beta,M}\right) \qquad \textbf{(86)}$$

Il faut donc utiliser un processus itératif pour la détermination des $\widetilde{\Sigma}^{G}_{\beta,M}$. En pratique, nous déterminons plutôt que les sections $\widetilde{\Sigma}^{G}_{\beta,M}$, les "facteurs SPH" définis par :

$$\mu^{G}_{M} = \frac{\widetilde{\Sigma}^{G}_{\beta,M}}{\Sigma^{G}_{\beta,M}} \qquad \textbf{(87)}$$

où la section efficace écrite au numérateur est l'inconnue recherchée (nous pourrions la qualifier de "section efficace effective") et celle du dénominateur la section efficace moyenne pondérée par les flux et les volumes. Ces facteurs traduisent donc l'erreur commise par l'homogénéisation.

Ecrivons maintenant, dans le cadre du calcul d'équivalence à cellules homogénéisées, la relation de conservation dans une cellule M, composée de m microrégions (combustible, gaine, modérateur,...), contenue dans un assemblage. Cette relation, qui n'est autre que l'équation intégro-différentielle de Boltzmann intégrée sur toutes les directions angulaires, sur le domaine spatial M et un domaine énergétique G, exprime que la somme du courant global à la frontière $S_M J^{G}_{M}$ et la somme algébrique de tous les taux de réaction (dans l'ordre de l'équation **(88)** : taux de disparition, fuites volumiques, arrivée par transfert, production) est nulle :

$$S_M J^{G}_{M} + V_M\left[\widetilde{\Sigma}^{G}_{M}\widetilde{\phi}^{G}_{M} + \widetilde{D}^{G}_{M}B^{2}\widetilde{\phi}^{G}_{M} - \sum_{G'}\left(\widetilde{\Sigma}^{G'\to G}_{s,M} + \chi^{G}\frac{\nu^{G'}\widetilde{\Sigma}^{G'}_{f,M}}{K}\right)\widetilde{\phi}^{G'}_{M}\right] = 0 \qquad \textbf{(88)}$$

Dans cette équation, on peut montrer que les coefficients de fuite d'équivalence s'obtiennent, de la même façon, que les sections efficaces d'équivalence**[67]** :

$$\widetilde{D}_M^G = \mu_M^G D_M^G \qquad \textbf{(89)}$$

Prenons le cas maintenant d'une cellule "M" asymptotique d'un assemblage de piscine de stockage ou de château de transport : cette cellule homogène est parfaitement réfléchissante. Le courant global à la surface de la cellule est nul et la relation de conservation se réduit à l'annulation du bilan des taux de réaction. Nous pouvons alors dans chaque macrogroupe G, multiplier chaque section efficace $\Sigma_{\beta,M}^G$ et le coefficient de fuite D_M^G par un facteur quelconque μ^G. La relation de conservation des taux de réaction continuera à être vérifiée. Il y a donc pour une cellule parfaitement réfléchie, un arbitraire total dans le choix des facteurs d'équivalence. Pour lever cette indétermination, il existe dans APOLLO2 plusieurs types de normalisation :

- la *conservation du flux moyen dans l'assemblage A* : $\sum_{M\in A} \widetilde{\phi}_M^G V_M = \sum_{M\in A} \phi_M^G V_M$,
- la *normalisation point* : on fixe les facteurs d'équivalence à un pour certaines cellules de l'assemblage,
- la *normalisation SELENGUT* : on conserve le flux au bord de l'assemblage,
- la *normalisation courant* : on conserve le courant sortant.

Utilisation de la méthode de l'équivalence

Afin d'étudier la méthode de l'homogénéisation par l'équivalence, nous avons réalisé un même calcul S_N (nodal 'S4/P1' à 20 groupes d'énergie) avec deux jeux de sections efficaces différents. Le premier est obtenu par la stratégie d'homogénéisation (homogénéisation de l'assemblage complet, spectre multicellule hétérogène), le second par la méthode de l'équivalence du code APOLLO2, avec la normalisation, conservation du flux moyen dans l'assemblage.

Le calcul S_N utilisant les sections efficaces équivalentes est comparé au calcul pris comme référence, c'est à dire le calcul Monte-Carlo multigroupe TRIPOLI4 qui traite la géométrie hétérogène tout en conservant les approximations sur l'anisotropie (P1) et sur le maillage de condensation (20 groupes).

Tous ces calculs sont donnés dans le Tableau 35 et sont validés par rapport à la voie étalon du formulaire CRISTAL.

Tableau 35 : Etude de la méthode de l'homogénéisation par l'équivalence pour des alvéoles de stockage

CRISTO II Lame d'eau 4.5 cm	TRIPOLI4 ETALON $K_\infty \pm 1\sigma$	TRIPOLI4 CEA93 20g P1 Géo. Hétérogène $K_\infty \pm 1\sigma$	APOLLO2-SN nodal 'S4 P1 20g' Sans Equivalence	APOLLO2-SN nodal 'S4 P1 20g' Avec Equivalence
K_∞ INOX	1.1016 ± 0.0005	1.1020 ± 0.0009	1.09652	1.10188
Temps Calcul	48 Heures	15 Heures	12 min.	2 Heures
K_∞ ACIER BORE 96	0.8300 ± 0.0005	0.8301 ± 0.0005	0.82457	0.83018
Temps Calcul	48 Heures	15 Heures	12 min.	4 Heures

Ce tableau montre que la méthode de l'homogénéisation par l'équivalence permet de corriger les erreurs d'homogénéisation liées à la présence d'un absorbant à l'interface assemblage/lame d'eau. Ceci est d'ailleurs confirmé par les Figure 33 et Figure 34 qui montrent que les coefficients d'équivalence sont importants à cet endroit.
Cette méthode accroît fortement le coût de calcul de la voie 'Standard' APOLLO2-SN, elle pourra faire l'objet d'études complémentaires pour optimiser sa convergence.

Nous avons aussi utilisé cette méthode pour traiter d'autres configurations qui sont les expériences en piscine VALDUC. Dans ce cas précis, la méthode de l'équivalence d'APOLLO2 n'a pas été satisfaisante puisqu'elle n'a pas convergé : coefficients d'équivalence des cellules à l'interface assemblage/absorbant, dans le domaine thermique, de l'ordre de 1.4 au bout de la $50^{ème}$ itération. Les résultats de ces calculs sont en cours d'examen afin d'améliorer la méthode pour ce type de problème.

En conclusion, la méthode de l'homogénéisation par l'équivalence est une piste pour une version future de CRISTAL. Tenant compte des contraintes de fiabilité et robustesse dans les calculs de criticité, il vaut mieux actuellement **recommander la stratégie d'homogénéisation suivante : homogénéisation de l'assemblage complet, flux multicellule hétérogène,** qui est moins précise mais plus fiable et applicable à toutes les configurations de piscine ou bien de château.

(ii) La condensation

La condensation est un problème de moyenne en énergie et surtout de la façon dont on moyenne les sections.

Dans les milieux piscines de stockage ou bien château de transport, le flux thermique varie faiblement dans l'assemblage et fortement dans la lame d'eau ; les sections efficaces de la lame d'eau sont donc particulièrement sensibles au spectre sur lequel on les condense.

Une étude a donc été effectuée avec trois spectres de condensation différents pour les sections efficaces H_2O (et bore) dans la lame d'eau interassemblage :

- Le spectre **multicellule hétérogène** défini dans l'étude de l'homogénéisation.
- Un spectre dit **"milieu infini"** : les sections de l'eau sont obtenues à partir du calcul d'une cellule en milieu infini contenant de l'eau et 10^{-10} U^{235} pour la faisabilité du calcul.
- Un spectre dit **"traverse 1D"** : les sections proviennent du calcul d'une géométrie à une dimension. Cette géométrie est composée d'un milieu homogène de l'assemblage complet et d'eau.

Pour les sections efficaces de l'assemblage nous avons utilisé le même spectre de condensation : le spectre multicellule hétérogène.

Le Tableau 36 présente les résultats obtenus suivant le spectre de condensation utilisé pour la configuration de la Figure 31. Les calculs sont des calculs S_N 'S4/P1' à 20 groupes d'énergie. Le calcul de référence est un calcul à 172 groupes sans condensation.

Tableau 36 : Etude du spectre de condensation pour un réseau de stockage

SPECTRE DANS LA LAME D'EAU	$\Delta\rho$ = ln(Kinf 20g / Kinf 172g) (pcm)
Milieu infini	+ 158
Traverse 1D	- 40
Multicellule Hétérogène	- 25

Ce tableau montre que le maillage optimisé à 20 groupes permet pour ces milieux piscines et châteaux de s'affranchir de la stratégie de condensation : même le calcul en milieu infini n'engendre pas d'erreur considérable. Le calcul utilisant le spectre de condensation multicellule hétérogène est plus long en temps de calcul mais est plus précis. Ce calcul étant de plus celui qui est recommandé pour l'homogénéisation de l'assemblage complet il parait judicieux de l'utiliser aussi pour condenser les sections efficaces.

II. Les procédures de calcul S_N

1. Méthode de résolution de l'équation du transport par la méthode S_N

a) Approximation spatiale

Comme nous l'avons vu dans le chapitre concernant les méthodes de résolution de l'équation du transport, il existe dans la méthode S_N deux approximations spatiales : différences finies et nodales. L'approximation aux différences finies extrapole le flux grossièrement dans chaque maille ce qui entraîne un nombre élevé d'itérations internes et des difficultés de convergences lorsqu'on a de fortes variations de flux. Les méthodes nodales réalisent un calcul plus précis, donc plus coûteux, du flux dans chaque maille mais la convergence numérique des itérations internes est plus rapide et plus sûre. Ainsi, nous voyons que l'intérêt des méthodes nodales se justifie essentiellement lorsque nous avons des configurations plutôt hétérogènes avec des variations de flux, configurations nécessitant une discrétisation spatiale très fine avec une méthode aux différences finies.

Le cas concret rencontré en criticité pour lequel on peut se poser la question de la pertinence d'un calcul aux différences finies est typiquement une configuration piscine de stockage ou bien château de transport, où la variation du flux thermique dans la lame d'eau est importante.

Nous avons donc mené des études en comparant le nombre de mailles qu'il serait nécessaire d'utiliser dans la lame d'eau avec une approximation aux différences finies pour obtenir un résultat convergé et nous l'avons comparé à la valeur obtenue avec l'approximation nodale et peu de mailles.

L'approximation nodale dans ces calculs est utilisée avec le schéma CL. Des études[**65**] ont en effet montré que ce schéma est celui qui donne un meilleur rapport précision/temps de calcul : le schéma CC peut en effet être considéré comme un cas particulier d'un schéma diamant de l'approximation aux différences finies et présente donc peu d'intérêt ; l'approximation nodale avec le schéma LL donne des résultats précis mais avec un coût de calcul beaucoup plus élevé que le schéma CL.

Les configurations étudiées sont présentées sur les Figure 31, Figure 32 et les résultats obtenus sur les Figure 35, Figure 36.

Ces figures montrent qu'il faut 4 fois plus de mailles avec l'approximation aux différences finies qu'avec l'approximation nodale pour converger vers des valeurs comparables ; le temps de calcul est donc nettement plus important lorsque nous utilisons les différences finies : ainsi dans le cas de la figure avec absorbant le calcul "nodal" dure 5 minutes contre 32 minutes pour un calcul convergé en différences finies.

Nous recommandons donc pour les milieux piscines de stockage ou bien châteaux de transport calculables par un calcul 2D XY d'utiliser la méthode nodale (avec le schéma CL). Pour les autres milieux de la criticité, la méthode aux différences finies doit être utilisée.

b) Initialisation du calcul en transport par un calcul en diffusion

Il est possible d'initialiser le calcul en transport en utilisant le flux obtenu en résolvant l'équation de la diffusion.

Ceci présente un gain non négligeable en temps de calcul. Le cas test, présenté dans le Tableau 37, illustre le gain réalisé.

Tableau 37 : Comparaison du temps de calcul avec et sans initialisation du calcul transport par un calcul diffusion

Coeur homogène (UO_2 3.1% type REP) de rayon 17 cm		
	Sans initialisation	Avec initialisation
Nombre d'itérations 'transport' nécessaires à la convergence	30	18
Temps de calcul (s)	117	35

Nous recommandons donc de toujours initialiser un calcul transport par un calcul diffusion.

Remarque : Cette initialisation ne peut se faire que pour les géométries bidimensionnelles, la diffusion 1D n'étant pas programmée dans APOLLO2 (compte tenu de la rapidité des calculs 1D ceci n'est de toute façon pas pénalisant).

2. Traitement de l'anisotropie du choc

La résolution de l'équation du transport des neutrons et notamment par la méthode S_N amène à développer les sections efficaces de transfert en polynôme de Legendre pour prendre en compte l'anisotropie du choc (voir annexe A).

Le code APOLLO2 permet de considérer n'importe quel ordre d'anisotropie, la seule limitation est la disponibilité, ou plutôt l'indisponibilité, des matrices de transfert à un ordre quelconque dans la bibliothèque de sections efficaces.

Une des molécules jouant un rôle déterminant, notamment en criticité, au niveau de l'anisotropie du choc est la molécule d'eau. C'est de plus une des rares molécules pour laquelle existe des matrices P_N jusqu'à l'ordre 9 dans la bibliothèque CEA93.

Nous avons donc évalué l'effet en réactivité suivant l'ordre d'anisotropie utilisé sachant que le calcul de référence ici est le calcul utilisant l'ordre d'anisotropie le plus élevé P9.

Les études présentées ci-dessous permettent de chiffrer les biais introduits par les différents traitements suivant le milieu étudié.

a) Les milieux solutions ou dissolveurs

L'étude de l'anisotropie des milieux solutions ou dissolveurs est réalisée sur les configurations PNL-CML "MIX-SOL-THERM-004" dans lesquels les fuites sont importantes : petit coeur (R = 17.5 cm), K_∞ = 1.57. Deux types d'expériences sont traitées : des solutions réfléchies et non réfléchies. Les tableaux suivants présentent les résultats obtenus sur ces deux configurations.

Tableau 38 : Anisotropie du choc : milieu solution non réfléchi

	Ln (Px/P9) (pcm)
P0	+16730
P0c	-1020
P1	-300
P2	+20
P3	-1
P5	0

Tableau 39 : Anisotropie du choc : milieu solution réfléchi par de l'eau

	Ln (Px/P9) (pcm)
P0	+ 16030
P0c	-730
P1	-640
P2	+75
P3	-1
P5	0

Nous remarquons que les approximations P0 et P0c sous-estiment nettement la réactivité et qu'il vaut mieux éviter son utilisation en Criticité.

En ce qui concerne les autres développements, nous constatons que le réflecteur d'eau a un effet plus important sur l'anisotropie du choc (Tableau 39) que l'effet de l'aire de migration (Tableau 38).

Enfin ces deux tableaux montrent que l'anisotropie du choc dans l'eau doit être traitée par un développement P3, l'erreur totale (aire de migration + gain réflecteur) engendrée par le modèle P1 pouvant atteindre -600 pcm.

b) Les milieux piscines ou châteaux

La difficulté de traitement de l'anisotropie dans ce type de configuration n'est pas liée aux fuites neutroniques mais au couplage des neutrons rapides entre assemblages voisins.

L'étude, donnée dans le Tableau 40, a été effectuée à partir des configurations présentées sur les Figure 31 et Figure 32.

Tableau 40 : Anisotropie du choc : réseau infini stockage

	Ln (Px/P9) (pcm) **sans Absorbant**	Ln (Px/P9) (pcm) **avec Absorbant**
P0	+ 6140	+ 10150
P0c	+ 430	+ 410
P1	- 270	-280
P3	-2	-1

Ce tableau montre d'une part que l'effet lié à la représentation de l'anisotropie est faible par rapport au calcul P9 lorsque l'on fait un calcul P3 (voire P1), d'autre part que la présence de l'absorbant dans la lame d'eau ne modifie pas cet effet.

Le traitement de l'anisotropie du choc a été étudié dans des types de géométries de la criticité où il pouvait conduire à des erreurs non négligeables : les solutions à fort niveau de fuites neutroniques, les milieux piscines de stockage et les châteaux de transport pour lesquels l'erreur réside dans le calcul du couplage entre assemblages.

Les études permettent de conclure que pour atteindre un niveau de précision suffisant par rapport à un calcul fin en anisotropie P9, il est nécessaire d'effectuer les calculs S_N dans CRISTAL avec un développement P3 pour la molécule d'eau.

Remarque : Il est important de s'assurer que l'on fait un calcul S_N avec un ordre **N** toujours supérieur au degré d'anisotropie considéré**[11]** : l'impossibilité d'intégrer le plus haut moment du flux angulaire ϕ_l pour $l > N$ pouvant conduire à des erreurs non négligeables. Ainsi, il n'est donc pas conseillé de réaliser un calcul 'S4, P5' ou 'S8, P9'.

3. Quadrature angulaire

Les configurations dissolveurs, solutions, piscines de stockage et châteaux de transport peuvent être traitées en utilisant des géométries à deux dimensions. Dans APOLLO2, pour ce type de géométrie seuls les jeux S4 (12 directions) et S8 (40 directions) ont été préétablis.

Nous avons donc comparé ces deux quadratures sur les configurations nécessitant une bonne discrétisation angulaire à savoir :

- une géométrie RZ à fort niveau de fuites neutroniques mettant en jeu des solutions de nitrate mixte : ce sont les expériences PNL-CML "MIX-SOL-THERM-002" et "MIX-SOL-THERM-004",
- une configuration de type piscine ou bien château où l'anisotropie du flux dans les lames d'eau et la présence d'absorbants nécessite une attention particulière du point de vue de l'optimisation de la quadrature angulaire.

Les tableaux suivants récapitulent les résultats obtenus :

Tableau 41 : Comparaison des quadratures S4 et S8
pour une géométrie bidimensionnelle RZ : milieu solution fissile

		Ecart S4/S8 (pcm)
Coeur réfléchi	R = 17.5 cm Hc = 24 cm	+ 140
Coeur nu	R = 17.5 cm Hc = 35 cm	+ 198
Coeur réfléchi	R = 34. cm Hc = 77 cm	+ 45

Tableau 42 : Comparaison des quadratures S4 et S8
pour une géométrie bidimensionnelle : milieu piscine de stockage

Ecart S4/S8 (pcm) **sans absorbant**	Ecart S4/S8 (pcm) **avec absorbant**
+ 90	+ 100

Ces tableaux montrent que la quadrature S4 est suffisante dans la majorité des cas rencontrés (de plus elle est conservative) et permet un gain en temps de calcul (car possède moins de direction).

Cependant la quadrature S4 oblige l'utilisateur à effectuer un calcul avec un ordre d'anisotropie P1 ou P3 au maximum. Si on veut utiliser un développement supérieur à P3 il est obligatoire de réaliser un calcul S8. **Nous recommandons donc d'utiliser le S8 en standard**.

4. Maillage spatial

Dans la méthode S_N, nous sommes amenés à faire une discrétisation de la variable espace et il faut donc choisir la taille des mailles à utiliser.

Traitons ce problème sur le cas simple d'une géométrie sphérique sans source et sans diffusion. On montre**[11]** que le flux au point ($r_{i+1/2}$) s'exprime en fonction du flux au point ($r_{i-1/2}$) par la formule :

$$\phi_{i+\frac{1}{2},n} = \frac{(1-h)}{(1+h)}\phi_{i-\frac{1}{2},n} \qquad \textbf{(90)}$$

où $h = \frac{\Delta\Sigma}{2|\mu_n|}$

avec la maille Δ telle que

$$\Delta = r_{i+1/2} - r_{i-1/2} \quad \textbf{(91)}$$

et μ_n : cosinus de l'angle de diffusion.

Cette expression montre clairement que pour des valeurs h > 1 on obtient des flux angulaires négatifs.

En pratique, il faudrait donc utiliser des mailles satisfaisant le critère h << 1 ce qui correspond à $\Delta < 2|\mu_n|\lambda$.

Par conséquent, avec une recommandation pour la quadrature angulaire de S8 et une condensation énergétique à 20 groupes nous recommandons **d'utiliser une valeur de la maille Δ de l'ordre du centimètre dans le milieu fissile. A l'interface coeur/réflecteur où le flux varie plus rapidement nous conseillons par contre de raffiner le maillage à 2 mailles par centimètre (sur environ 5 centimètres)**. Cette recommandation sur la taille des mailles nous permet de nous affranchir de l'apparition de flux négatifs et d'éviter ainsi l'utilisation du schéma diamand-thêta (voir chapitre sur les méthodes de résolution de l'équation du transport).

Nous avons validé cette recommandation sur une configuration petit coeur réfléchi (expériences PNL-CML) "MIX-SOL-THERM-004". L'effet en réactivité K_{eff} maillage fin (2 mailles par cm dans le combustible) et K_{eff} maillage large (1 maille par cm) est de -40 pcm.

Les schémas de calcul ainsi définis et validés permettent de passer à l'étape suivante : la qualification expérimentale.

CHAPITRE 6
QUALIFICATION EXPERIMENTALE DU FORMULAIRE CRISTAL

Ce chapitre présente notre contribution à la qualification expérimentale de la voie Standard et de la voie étalon du formulaire CRISTAL. Cette qualification est réalisée à partir de la base de données expérimentales du formulaire CRISTAL présentée dans le chapitre 4.

I. Qualification des milieux dissolveurs

Les facteurs de multiplication effectifs obtenus par la voie Standard-S_N[(*)] pour les benchmarks critiques OCDE n°13 et n°14 sont présentés dans le Tableau 43.

Tableau 43 : Qualification des milieux dissolveurs

EXPERIENCES	TRIPOLI4 CEA93 172g P3 $K_{eff} \pm 1\sigma$	CRISTAL-SN 'S8 P3 20g'
13	1.002 ± 0.001	1.0016
14	0.999 ± 0.001	0.9983

La comparaison CRISTAL-SN/Expérience est particulièrement satisfaisante, avec un écart de l'ordre de l'incertitude expérimentale.

La comparaison de la voie déterministe du formulaire CRISTAL avec la voie Monte-Carlo multigroupe disponible au moment de l'étude, ici le code TRIPOLI4 utilisé à 172 groupes d'énergie qui utilise moins d'approximation en espace et en énergie, confirme la cohérence du schéma de calcul déterministe et stochastique pour les milieux dissolveurs.

(*) Les calculs APOLLO2 présentés dans ce chapitre ont été réalisés avec APOLLO2.3.1 et CEA93 V2

De plus, nous avons comparé, sur la Figure 37 et la Figure 38, CRISTAL-SN à l'ancien formulaire français de criticité CRIBLE et aux codes internationaux.

Ces figures mettent en évidence des erreurs de schéma importantes dans les calculs SCALE internationaux qui sous-estiment d'environ -4000 pcm la valeur du K_{eff}. Cette sous-estimation est due au fait que le module NITAWL qu'utilise SCALE pour déterminer les sections efficaces effectives ne prend pas en compte l'effet de double hétérogénéité.

Par contre, les calculs effectués avec des méthodes de calcul rigoureuses au niveau de l'autoprotection (méthode polycinétique Monte-Carlo MONK ou méthodes des sous-groupes WIMS) donnent de très bonnes valeurs par rapport à l'expérience.

Nous notons que les valeurs CRISTAL-SN sont très bien situées dans ce contexte international et améliorent encore celles de l'ancien formulaire CRIBLE (basé sur APOLLO1-PIC pour l'autoprotection et la bibliothèque CEA86).

II. Qualification des milieux solutions

1. Les expériences VALDUC "PU-SOL-THERM-012"

Dans les expériences CEA-VALDUC, PU-SOL-THERM-012, le contour radial du coeur est carré. Il est donc nécessaire de définir une stratégie de calcul permettant de représenter correctement l'effet de cylindrisation dans un calcul APOLLO2-SN RZ qui permet de représenter précisément les fuites axiales (contrairement à un calcul XY).

Cette stratégie, qui vise à obtenir la précision d'un calcul en trois dimensions, se décompose de la façon suivante :

- Le calcul de base consiste en un calcul de coeur 2D RZ qui représente les réflecteurs haut et bas. Nous le prendrons comme calcul de référence. Ce calcul conduit cependant à cylindriser le contour du coeur.
- Un calcul XY représentant cette fois-ci la vraie géométrie radiale. Dans ce calcul les fuites axiales sont modélisées par une section de fuites DB^2z.
- Un calcul 1D cylindrique à partir de la cylindrisation WIGNER du coeur, avec les mêmes fuites axiales que dans le calcul XY.

La comparaison du calcul 1D radial au calcul XY permet de déduire la correction de réactivité liée à la cylindrisation :

$$\Delta\rho = \mathrm{Ln}\left(K_{eff}^{R} / K_{eff}^{XY}\right) \quad \textbf{(92)}$$

La valeur calculée de la réactivité du coeur est alors déduite comme :

$$\rho^{XYZ} = \rho^{RZ} - \Delta\rho \quad \textbf{(93)}$$

Les résultats des calculs XYZ ainsi obtenus sont synthétisés dans le Tableau 44.
Les modélisations géométriques utilisées pour les calculs sont présentées en Figure 40.

Tableau 44 : Résultats CRISTAL-SN 'S8 P3' 20g pour les expériences Valduc

	N° du cas	C Pu (g/l)	Effet de cylindrisation (pcm)	K_{eff} RZ	**K_{eff} XYZ**
6 faces réfléchies	1	19.7	+ 120	1.0046	**1.0034**
	2	17.7	+ 150	1.0056	**1.0041**
	4	14.7	+ 170	1.0079	**1.0062**
	5	13.2	+ 170	1.0101	**1.0084**
5 faces réfléchies	6	105	+ 100	1.0079	**1.0069**
	8	52.7	+100	1.0064	**1.0054**
	11	21.7	+ 140	1.0066	**1.0052**
	12	19.7	+ 120	1.0069	**1.0057**
	13	13.2	+ 170	1.0109	**1.0092**

Nous pouvons faire plusieurs remarques sur ces résultats :

- La cylindrisation du coeur introduit une erreur assez faible sur l'estimation de la réactivité. En effet la surestimation des fuites radiales dans le modélisation R par rapport au modèle XY est en moyenne de 150 pcm.
- On constate une tendance à une faible surestimation de la réactivité des solutions Pu dans CRISTAL, environ +600 pcm.
- Nous ne notons pas de dérive importante de la valeur de la réactivité avec la concentration en plutonium, avec une légère tendance à une plus forte surestimation avec les faibles dilutions. Le cas à 13.2 g/l de plutonium indique un résultat de calcul nettement plus élevé que les autres cas : il faut cependant remarquer que l'incertitude expérimentale est beaucoup plus élevée ici comme le montre le Tableau 45**[38]** puisqu'elle atteint 580 pcm.

Nous ne pouvons donc pas conclure à un moins bon résultat de calcul dans les spectres très thermiques.

Tableau 45 : Incertitudes expérimentales PU-SOL-THERM-012

Concentration en Pu (g/l)	K_{eff} expérimental	N° cas
105	1.0000 ± 0.0007	6
52.7	1.0000 ± 0.0013	7, 8, 14
19.7	1.0000 ± 0.0043	1, 2, 11, 12,
13.2	1.0000 ± 0.0058	5, 13

Les résultats obtenus avec la voie étalon du formulaire CRISTAL pour les expériences VALDUC sont présentés pour les cas 6 faces réfléchies.

Tableau 46 : Résultats des calculs TRIPOLI4 pour les expériences VALDUC

Conc.Pu (g/l)	6 faces réfléchies	
	Cas	Keff ± 1σ
19.7	1	1.0053 ± 0.0015
14.7	4	1.0075 ± 0.0015
13.2	5	1.0096 ± 0.0015

Les valeurs calculées sont parfaitement cohérentes avec les valeurs obtenues avec la voie standard ; on confirme ainsi la tendance à une surestimation de la réactivité des solutions Pu dans les calculs CRISTAL.

2. Les expériences PNL-CML

a) Expériences avec le grand cylindre "MIX-SOL-THERM-002"

Les résultats obtenus pour ces configurations critiques sont donnés dans le Tableau 47.

Tableau 47 : Résultats CRISTAL-SN 'S8 P3' 20g pour les expériences grand cylindre

N° exp.	Pu/U+Pu	Pu(g/l)	Réflecteur	H/X	K_{eff}
58	0.52	11.88	eau	2376	1.0026
61	0.23	12.19	eau	2271	1.0020

Les résultats obtenus pour ces cas fortement modérés et des concentrations en plutonium assez faibles sont compris dans les incertitudes expérimentales de l'ordre de 300 pcm. Ces résultats semblent ainsi indiquer une surestimation de la réactivité des solutions Pu moins importante que celle obtenue dans l'expérience précédente ; il faut cependant noter qu'ici la teneur en Pu240 est beaucoup plus faible. Nous remarquons d'autre part que l'accroissement de la charge en uranium entre les expériences n'a pas d'effet sur le résultat du calcul.

b) Expériences avec le petit cylindre "MIX-SOL-THERM-004"

Ces expériences critiques sont moins modérées que les précédentes (rapport H/U+Pu compris entre 136 et 660) et présentent un niveau de fuites assez considérable puisque de l'ordre de 50000 pcm.

L'incertitude expérimentale à associer à ces expériences critiques est de 300 pcm.

Les résultats obtenus sont présentés dans le tableau de la page suivante.

Tableau 48 : Résultats CRISTAL-SN 'S8 P3' 20g pour les expériences 'petit cylindre'

N° exp.	Pu/U+Pu	Pu(g/l)	Réflecteur	H/X	K_{eff}
65	0.40	41.69	vide	656	0.9928
66	0.40	41.89	eau	652	0.9957
69	0.41	119.04	eau	211	0.9947
70	0.41	118.90	vide	212	0.9926
77	0.40	172.56	vide	136	0.9936
78	0.40	172.82	eau	136	0.9947

Ce tableau montre que les valeurs calculées sont inférieures à la valeur expérimentale.
Cette sous-estimation semble cependant indépendante de la concentration en plutonium ou du rapport Pu/U+Pu. Elle se chiffre à -500 pcm pour les cas réfléchis par de l'eau et à -700 pcm pour les cas non réfléchis. La sous-estimation plus importante dans les cas non réfléchis provient certainement du fait que nous n'avons pas pris en compte dans notre modélisation l'effet réflecteur ("room return") lié à l'environnement du cylindre modélisé (murs de la pièce, gros cylindre à proximité,..).

c) Comparaison avec la voie étalon

Les résultats des calculs polycinétiques pour ces solutions de nitrate mixte contenues dans un grand et petit cylindre sont présentés dans les tableaux suivants.

Tableau 49 : Résultats TRIPOLI4 : expériences MIX-SOL-THERM-002

N° exp.	Pu(g/l)	Réflecteur	Keff ± 1σ
58	11.88	eau	1.0015 ± 0.0015
61	12.19	eau	1.0011 ± 0.0015

Tableau 50 : Résultats TRIPOLI4 : expériences MIX-SOL-THERM-004

N° exp.	Pu(g/l)	Réflecteur	Keff ± 1σ
65	41.69	vide	0.9981 ± 0.0013
66	41.89	eau	0.9984 ±0.0015
69	119.04	eau	0.9930 ± 0.0015
70	118.9	vide	0.9923 ± 0.0015
77	172.56	vide	0.9926 ± 0.0015
78	172.82	eau	0.9921 ± 0.0015

Les résultats obtenus pour les configurations 'grand cylindre' sont en parfait accord avec les calculs voie standard, ainsi qu'avec les valeurs expérimentales critiques.

Pour les configurations 'petit cylindre', les valeurs calculées sont, de même que nous l'avions observé pour les calculs S_N, inférieures à la valeur expérimentale.

La comparaison des résultats voie standard S_N et voie étalon est présentée sur la Figure 39. On remarque l'excellente cohérence entre les deux voies du formulaire CRISTAL : les résultats se recoupent toujours dans les marges d'incertitudes à 2σ du calcul statistique.

d) Comparaison avec des codes de calcul internationaux

Les seuls résultats internationaux à notre disposition dans l'ICSBEP sont ceux réalisés avec deux "grands" outils de la criticité : le code Monte-Carlo KENO associé à la bibliothèque à 16 groupes Hansen-Roach et le code à énergie continu MCNP associé à l'évaluation ENDF/B-V. Le tableau suivant présente ces résultats ainsi que nos valeurs CRISTAL-SN.

Tableau 51 : Résultats internationaux pour les solutions de nitrate mixte étudiées

EXPERIENCES	Réflecteur	Pu/Pu + U	CRISTAL-S_N	KENO (HR)	MCNP BV
Grand cylindre : diamètre intérieur 68.68 cm					
58	Eau	0.52	1.0026	1.0189 ± 0.0010	1.0082 ± 0.0002
61	Eau	0.23	1.0020	1.0202 ± 0.0009	1.0079 ± 0.0004
Petit cylindre : diamètre intérieur 35.39 cm					
65	Vide	0.40	0.9928	1.0038 ± 0.0004	1.0025 ± 0.0013
66	Eau	0.40	0.9957	1.0027 ± 0.0015	1.0015 ± 0.0011
69	Eau	0.41	0.9947	1.0073 ± 0.0015	0.9994 ± 0.0012
70	Vide	0.41	0.9926	1.0097 ± 0.0004	0.9966 ± 0.0013
77	Vide	0.40	0.9936	1.0179 ± 0.0004	0.9972 ± 0.0013
78	Eau	0.40	0.9947	1.0157 ± 0.0015	0.9988 ± 0.0012

Ce tableau appelle plusieurs remarques :

- Dans le cas du calcul avec un grand cylindre, les fuites neutroniques étant très faibles les erreurs que l'on commet sont uniquement liées aux données de base : ce tableau montre que tant KENO que MCNP surestime considérablement la valeur calculée par rapport à la valeur expérimentale. La bibliothèque Hansen-Roach ainsi que l'évaluation ENDF/B-V ont certainement de grosses 'imperfections' pour les isotopes du plutonium. Ceci a déjà été observé dans la référence **[68]**.
- Dans le cas du calcul avec le petit cylindre, le problème du calcul des fuites s'ajoute aux erreurs sur les données nucléaires du Pu. Or dans ce cas pourtant plus délicat, les mêmes codes que précédemment obtiennent de bien meilleurs écarts calcul/expérience !

  En fait nous observons la même tendance que nos calculs CRISTAL-SN : les résultats de calcul avec le petit cylindre sont nettement plus faibles que ceux obtenus avec le grand cylindre : ceci peut laisser supposer que les incertitudes fournies dans le Benchmark sont légèrement sous-estimées.

3. Conclusions

Les résultats obtenus, tant par la voie standard-S_N que par la voie étalon du formulaire CRISTAL sont satisfaisants pour l'ensemble des solutions de nitrate de plutonium traitées. D'autre part, nous n'avons pas dégagé de tendance évidente avec le rapport H/Pu ou le pourcentage en plutonium 240.

La comparaison CRISTAL-SN avec les calculs de référence TRIPOLI4 a permis de montrer que les discrétisations utilisées dans le schéma de calcul S_N sont satisfaisantes : les résultats entre les deux voies de calcul se recoupent toujours dans les marges d'incertitudes à 2σ du calcul statistique.

Enfin la comparaison des résultats CRISTAL avec les codes de calculs internationaux confirme, dans ces expériences pour lesquelles le principal écart calcul/expérience est lié aux données nucléaires des isotopes du plutonium dans le domaine thermique, que l'évaluation JEF2.2 est satisfaisante pour les études de criticité de ce type de milieu.

III. Qualification des milieux piscines de stockage et châteaux de transport

1. L'expérience CRISTO II

Par rapport aux autres expériences réalisées dans le cadre des études de Sûreté-Criticité, l'installation expérimentale CRISTO II a permis des mesures de distribution de puissance, de flux thermique, d'indices spectres. L'interprétation de ces mesures présente l'intérêt de pouvoir déterminer les causes d'un écart éventuel entre l'expérience et le calcul pour le K_{∞}^{sto} des réseaux de stockage étudiés.

Nous présentons d'abord les résultats de la qualification de l'expérience CRISTO II et dans une seconde partie, l'interprétation des mesures expérimentales.

a) Qualification de l'expérience CRISTO II

Le Tableau 52 présente les résultats de la qualification de l'expérience CRISTO II. Dans ce tableau, en outre, nous comparons CRISTAL-SN à la voie étalon du formulaire CRISTAL et à un calcul Monte-Carlo multigroupe TRIPOLI4 afin de confirmer la validité du schéma de calcul recommandé pour les milieux piscines et châteaux.

Tableau 52 : Résultats CRISTAL-SN 'S8 P3' 20g pour l'expérience CRISTO II

Configurations	EXPERIENCES CRISTO II	VOIE ETALON TRIPOLI4 $K_\infty \pm 1\sigma$	TRIPOLI4 CEA93 P3 20g $K_\infty \pm 1\sigma$	CRISTAL-SN 'S8 P3' 20g
A	1.198 ± 0.007	1.2010 ± 0.0005	1.1983 ± 0.0008	1.1994
B	1.106 ± 0.008	1.1016 ± 0.0005	1.0975 ± 0.0009	1.0974
C	0.882 ± 0.010	0.8774 ± 0.0005	0.8667 ± 0.0009	0.8671
D	0.836 ± 0.011	0.8300 ± 0.0005	0.8247 ± 0.0009	0.8246
E	0.815 ± 0.012	0.8040 ± 0.0005	0.7989 ± 0.0009	0.7987

Les résultats du calcul CRISTAL-SN sont similaires à ceux d'un calcul Monte-Carlo utilisant le même jeu de sections efficaces multigroupes : ceci confirme la capacité de la méthode S_N nodale avec la discrétisation angulaire S8 à traiter les milieux piscines de stockage et châteaux de transport.

La comparaison voie étalon/voie standard confirme la validité du schéma de calcul dans le cas d'un réseau de stockage non compact avec lame d'eau interassemblage. Pour les configurations avec plaques absorbantes à l'interface assemblage/lame d'eau (concept "flux trap" des stockages compacts), nous confirmons l'erreur d'homogénéisation de l'ordre de -600 pcm mise en évidence lors de l'établissement du schéma de calcul.

Les résultats obtenus avec CRISTAL voie étalon sont parfaitement cohérents avec les K_∞^{sto} expérimentaux et sont largement compris dans les incertitudes expérimentales de l'ordre de 1000 pcm à 1σ. En ce qui concerne la voie standard, la sous-estimation des calculs par rapport à l'expérience pour les configurations avec écran est due principalement à l'erreur d'homogénéisation.

Le profil des K_{∞}^{stock} en fonction de l'efficacité de l'absorbant présenté sur la Figure 41 montre l'intérêt des expériences CRISTO II en précisant "le point de saturation" avec l'accroissement de la charge en poison des plaques.

b) Interprétation des mesures expérimentales

La comparaison des mesures expérimentales réalisées dans le coeur avec des valeurs de réseau de stockage calculées en milieu infini n'est possible que si les mesures sont transposées en milieu infini. Cette transposition cœur nourricier $\rightarrow$ milieu infini fait l'objet de l'annexe C. Cette transposition n'est réalisée que dans les configurations A et B où les corrections de courbure sont faibles.

Interprétation des mesures d'activité des détecteurs manganèse

L'interprétation des traverses radiales de flux thermiques par CRISTAL-SN pour les configurations A et B est présentée sur la Figure 42. La remontée du flux thermique dans la lame d'eau, décrite par les activités Manganèse, est assez bien reproduite par le calcul ; cet accord explique les bons résultats du calcul CRISTAL quant à la réactivité du réseau de stockage.

Dans le cas avec lame d'eau seule, la faible surestimation du K_{∞}^{sto} calculé par rapport au K_{∞}^{sto} expérimental peut s'expliquer à partir d'une légère sous-estimation du flux thermique au centre de la lame d'eau.

Dans le cas de la configuration B, la comparaison Expérience/Calcul des traverses de flux thermiques confirme l'erreur d'homogénéisation lorsqu'un absorbant se situe à l'interface assemblage/lame d'eau. En effet l'homogénéisation accroît le flux thermique à l'interface assemblage/lame d'eau ce qui crée une plus grande absorption de l'écran situé à cet endroit.

Interprétation des mesures de distributions radiales de puissance

L'interprétation des mesures par spectrométrie γ des distributions radiales de puissance pour les configurations A et B est donnée sur la Figure 43.

La distribution de puissance de la configuration A illustre l'erreur d'homogénéisation : les taux de fission mesurés des cellules au contact de la lame d'eau sont inférieurs à ceux calculés.

En ce qui concerne les cellules à côté des trous d'eau (point situé à 5.67 cm), nous observons une sous-estimation du taux de fission. Cependant nous avons souligné dans le Tableau 33 que l'homogénéisation des trous d'eau entraîne une faible erreur en réactivité.

Interprétation des indices de spectre

Les mesures relatives des taux de capture de l'U^{238} et des taux de fission de l'U^{235} (mesures effectuées par activation des détecteurs U appauvri et U enrichi placés à l'intérieur des crayons combustibles du réseau) et de leur rapport (information sur le flux épithermique) sont comparées aux valeurs calculées sur la Figure 44.

La comparaison Expérience/Calcul des taux de capture de l'U^{238} montre la cohérence du schéma d'autoprotection puisque l'écart, au voisinage de la lame d'eau et des trous d'eau, des taux de capture de l'U^{238} calculés relativement à ceux mesurés est faible.

L'interprétation des taux de fission de l'U^{235} confirme la faible erreur d'homogénéisation à l'interface assemblage/lame d'eau ; ces résultats de traverse de taux de fission de l'U^{235} confirme l'écart expérience-calcul obtenu à l'interface sur les mesures de taux de fission par spectrométrie γ.

2. Les expériences VALDUC

En raison des fortes hétérogénéités axiales des expériences Valduc (cf. Figure 16 et Figure 17), le calcul S_N XY nodal recommandé n'a pas pu être utilisé pour qualifier ces configurations. L'emploi d'un code Monte-Carlo qui traite la vraie géométrie en trois dimensions est indispensable. Il s'avère donc nécessaire ici de mettre en œuvre la voie "Standard" Monte-Carlo de CRISTAL. Le code MORET4 n'étant pas opérationnel dans CRISTAL, nous avons donc eu recours au calcul Monte-Carlo multigroupe TRIPOLI4 disponible dans CRISTAL.

Cette stratégie permet de qualifier la voie "Standard" de CRISTAL puisque, comme le montre le Tableau 52, le calcul APOLLO2-TRIPOLI4 donne des résultats peu différents de la méthode déterministe.

Les valeurs obtenues pour les configurations Valduc critiques avec absorbant au centre de l'interassemblage et avec alvéoles de stockage sont présentées dans le Tableau 53 et le Tableau 54.

Tableau 53 : Qualification du calcul CRISTAL des piscines de stockage
Expériences Valduc avec écran au centre de l'interassemblage ; Pas des crayons 1.35 cm

N°EXP	ABSORBANT	Distance Interassemblage (cm)	CRISTAL multigroupe TRIPOLI4 P3 20g $K_{eff} \pm 1\sigma$
1890	HAFNIUM	1.8	1.0062 ± 0.0009
1894	HAFNIUM	5.8	1.0029 ± 0.0009
1856	CADMIUM	1.7	0.9987 ± 0.0009
1860	CADMIUM	5.8	1.0004 ± 0.0009
1910	ACIER BORE	1.7	0.9978 ± 0.0009
1914	ACIER BORE	5.7	1.0029 ± 0.0009
1906	BORAL	5.8	1.0080 ± 0.0009

Tableau 54 : Qualification du calcul CRISTAL des piscines de stockage
Expériences Valduc avec alvéoles de stockage ; Pas des crayons 1.6 cm

N°EXP	ABSORBANT	Distance interétui (cm)	CRISTAL multigroupe TRIPOLI4 P3 20g $K_{eff} \pm 1\sigma$
1988	BORAL	0.5	1.0078 ± 0.0009
1991	BORAL	2	1.0003 ± 0.0009
1974	ACIER BORE	0.6	1.0088 ± 0.0009
1983	ACIER BORE	2	1.0017 ± 0.0009

Les calculs Monte-Carlo TRIPOLI4 multigroupes sont en accord avec les valeurs expérimentales et ceci quelle que soit la configuration, l'absorbant, l'épaisseur de la lame d'eau : l'écart Calcul/Expérience reste inférieur à 900 pcm. Ces résultats confirment que, malgré l'erreur d'homogénéisation, le schéma de calcul recommandé de la voie "Standard", pour les milieux piscines de stockage et châteaux de transport peut donc être considéré comme satisfaisant lorsque l'on recherche une précision de l'ordre de 1000 pcm.

Pour les configurations n°1890 et n°1894, nous avons comparé nos résultats avec les valeurs de l'ancien formulaire de criticité CRIBLE et avec les calculs internationaux sur la Figure 45. Cette figure montre que les calculs TRIPOLI4 multigroupes sont au niveau international très bien situés. Nous soulignons aussi la difficulté de traiter de tels milieux : les erreurs des codes internationaux atteignent 3000 pcm.

Par rapport à l'ancien formulaire CRIBLE, nos outils modernes et notre schéma de calcul sont plus performants, comme l'illustre le tableau suivant.

Tableau 55 : Comparaison TRIPOLI4 '20g P3'/CRIBLE

N°EXP	TRIPOLI4 CEA93 P3 20g $K_{eff} \pm 1\sigma$	CRIBLE KENO CEA86 99g P1 $K_{eff} \pm 1\sigma$
1890	1.0062 ± 0.0009	1.006 ± 0.002
1894	1.0029 ± 0.0009	1.016 ± 0.002
1856	0.9987 ± 0.0009	1.008 ± 0.002
1860	1.0004 ± 0.0009	1.017 ± 0.002
1910	0.9978 ± 0.0009	1.012 ± 0.002
1914	1.0029 ± 0.0009	1.023 ± 0.002
1906	1.0080 ± 0.0009	1.012 ± 0.002

CONCLUSION

Le travail de thèse présenté ici a contribué au développement du nouveau formulaire de Sûreté-Criticité CRISTAL.

Les premières études ont concerné notre contribution à la base de données expérimentales du formulaire par la réévaluation d'une ancienne expérience CRISTO II, réalisée dans le réacteur EOLE au CEA-Cadarache et représentative des milieux piscines de stockage. Ce travail a montré la validité de la méthode de la "mesure" du facteur de multiplication infini du réseau de stockage par un réseau régulier et a permis d'évaluer l'erreur supplémentaire introduite par cette technique expérimentale. Cette incertitude se compose de l'incertitude liée à la mesure expérimentale du facteur de multiplication infini du réseau régulier et de l'incertitude sur le terme qui symbolise les effets d'interaction entre les deux types de cœur. La première, concernant les mesures de laplaciens radiaux et axiaux, dépend peu de la configuration étudiée et a été évaluée à environ ±400 pcm. La seconde, déterminée par des calculs de cœur précis, varie entre ±200 pcm et ±900 pcm suivant la configuration. Enfin, nous avons évalué les incertitudes technologiques et souligné que l'enrichissement des crayons combustibles est connu avec une précision insuffisante ; une analyse chimique plus fine de ces crayons est donc en cours au CEA-Cadarache.
Cette réévaluation a par ailleurs été soumise au groupe de travail de l'OCDE afin que l'expérience CRISTO II soit intégrée dans la base de données intégrales ICSBEP et puisse être utilisée au niveau international pour la qualification de différents outils de calcul de criticité.

Des procédures de calcul ont été élaborées pour la voie 'Standard' du formulaire CRISTAL et optimisées pour traiter les configurations variées rencontrées dans les études de Sûreté-Criticité.
Concernant l'obtention des sections efficaces multigroupes par la méthode Pij du code APOLLO2, les recommandations suivantes ont été proposées et validées par rapport à la voie étalon du formulaire CRISTAL.
Nous avons montré que les sections efficaces multigroupes doivent être obtenues à partir de la bibliothèque CEA93 avec le maillage 172 groupes d'énergie des neutrons.

Pour prendre en compte l'effet des liaisons cristallines dans les milieux de la criticité, la température de Debye de 300 K est préconisée pour les configurations à combustibles oxydes : elle permet de conserver l'effet Doppler (aux températures ambiantes généralement rencontrées dans la criticité).

La plupart des recommandations proposées pour l'autoprotection des sections efficaces multigroupes des milieux de la criticité s'appuient sur celles recommandées pour l'étude des REP. Cependant il faut souligner quelques spécificités propres aux études de la Sûreté-Criticité. Pour les milieux dissolveurs qui présentent le problème délicat de la double hétérogénéité, la méthode de la matrice de dilution est préconisée. Dans les milieux piscines ou bien châteaux, la prise en compte de l'effet Dancoff des crayons au contact de la lame d'eau et des trous d'eau nous a conduits à utiliser l'autoprotection moyenne. En outre, ce type d'autoprotection représente le meilleur compromis précision/coût de calcul.

Les trois géométries proposées "homogène, cellule, multicellule" permettent de traiter toutes les configurations de la Sûreté-Criticité et ont été optimisées tant au niveau de la précision qu'au niveau du coût calcul.

En ce qui concerne les milieux piscines et châteaux très hétérogènes, nous recommandons d'homogénéiser l'assemblage complet (et de condenser éventuellement), à partir du flux de la configuration réelle à traiter. Nous avons montré que cette stratégie fondée sur des calculs multicellules hétérogènes pouvait engendrer des erreurs d'homogénéisation dans le cas où l'absorbant se situe à l'interface assemblage/lame d'eau. L'homogénéisation par l'équivalence d'APOLLO2, peut corriger cette erreur, mais, à cause de son manque de fiabilité elle reste une voie d'étude pour une version future de CRISTAL.

En ce qui concerne la voie standard basée sur des calculs déterministes S_N, nous recommandons de condenser les sections efficaces multigroupes sur le nouveau maillage 'universel' 20 groupes. Ce maillage permet de traiter avec une précision de 200 pcm l'ensemble des milieux de la criticité.

Tenant compte de la forte discrétisation de ce macromaillage, la stratégie de condensation des milieux dissolveurs et solutions est réalisée à partir du calcul du flux en mode fondamental à laplacien critique.

La méthode S_N du code APOLLO2, permettant d'effectuer les calculs "de cœur", a aussi fait l'objet de recommandations afin de traiter les configurations diverses et variées rencontrées dans les études de Sûreté-Criticité.

Pour les milieux piscines de stockage ou bien châteaux de transport calculables par un calcul 2D XY, l'utilisation de la méthode nodale avec le schéma CL se justifie. Par contre la méthode aux différences finies convient aux autres milieux.
Le traitement de l'anisotropie du choc doit se faire avec l'ordre P3. Ce développement permet une meilleure prise en compte de l'anisotropie de la molécule d'eau. Nous avons montré aussi qu'il était préférable d'employer la quadrature angulaire 'S8' en standard dans CRISTAL et l'importance de raffiner le maillage spatial aux interfaces.
L'ensemble des schémas de calcul élaborés et validés ont été utilisés pour l'industrialisation de CRISTAL : ils ont été introduits dans les APROC-CRISTAL d'APOLLO2 qui sont directement utilisées par l'IHM de CRISTAL.

La qualification expérimentale de la voie 'Standard' du Formulaire CRISTAL a été réalisée sur les milieux dissolveurs, solutions, piscines et châteaux.
Pour les milieux dissolveurs, les benchmarks OCDE n°13 et 14 représentatifs de ces milieux ont été qualifiés. Ce travail a montré que les écarts Calcul/Expérience étaient satisfaisants et n'atteignaient pas 200 pcm.
Concernant les solutions, CRISTAL-SN permet de traiter ces milieux avec une grande précision. En effet l'ensemble des calculs réalisés sur les expériences Valduc à forte teneur en plutonium et sur les expériences PNL-CML représentatives de ces milieux est cohérent avec les valeurs expérimentales : les écarts Calcul/Expérience sont inférieurs à 900 pcm.
La qualification des milieux piscines et châteaux a été effectuée sur l'expérience CRISTO II et sur les expériences Valduc. Pour ce type de milieux très hétérogènes, la comparaison expérience-calcul a démontré la cohérence du schéma de calcul recommandé. Les résultats utilisant la voie 'Standard' du formulaire CRISTAL sont en bon accord avec les mesures expérimentales.
La qualification de la voie étalon TRIPOLI4 a également été réalisée pour les problèmes solutions et piscines de stockage.

Le travail réalisé ici représente donc une forte contribution au développement du nouveau formulaire CRISTAL en terme de recommandations de schémas de calcul et de qualification expérimentale pour différents milieux de la criticité. Ceci a parfaitement répondu aux attentes des industriels.

CRISTAL deviendra à terme le formulaire de référence national et son niveau global sera supérieur à celui de ses concurrents britannique ou américains. Pour atteindre cet objectif, les études doivent être, cependant, poursuivies :

- L'intégration du "Crédit burn up"[69] permettra de prendre en compte l'absorption neutronique des produits de fission et des actinides mineurs jusqu'alors négligés.
- L'optimisation de certaines procédures de calcul, comme par exemple la méthode de l'équivalence pour l'homogénéisation des milieux très hétérogènes (piscines de stockage), sera bénéfique quant au rapport précision/coût.
- L'extension de la qualification expérimentale étendra le domaine d'applicabilité du formulaire.
- La synergie forte avec les autres applications de la neutronique (physique des réacteurs et protection) devra se poursuivre et contribuera ainsi à une tendance à l'unification (projet SUN : Système Unifié de Neutronique).

REFERENCES

[1] Association suisse pour l'énergie atomique (ASPEA) &
Office d'électricité de la Suisse romande (OFEL)
'Energie nucléaire', 1988

[2] C. DIOP, Ph FINCK, J.M GOMIT, E. LEJEUNE
'Le Formulaire et sa qualification - Grandes orientations du Formulaire'
Séminaire SFEN & ADEPHYR
29 janvier 1997 Fontenay-aux-Roses
30 janvier 1997 Valduc

[3] R.A KNIEF
'Nuclear Criticality Safety : Theory and practice'
American Nuclear Society, 1985

[4] J.C PUIT
'Le risque de criticité dans les installations du cycle du combustible'
Clefs CEA, n°26, printemps 1993

[5] Ministère de l'industrie, du commerce extérieur et de l'aménagement du territoire
'Sûreté des installations nucléaires en France'
Recueil des textes réglementaires
N°1606, 1988

[6] B. ROQUE
'Développement et qualification du formulaire de calcul neutronique de criticité'
Thèse, Orsay, novembre 1994

[7] Comité interministériel de la sécurité nucléaire
'La France et la sécurité nucléaire civile'
Février 1990

[8] J. BUSSAC, P. REUSS
'Physique et calcul des réacteurs nucléaires avec application aux réacteurs à eau pressurisée et aux réacteurs à neutrons rapides'
Herman, Paris 1985

[9] I. ZMIJAREVIC
Communication privée
'Calcul du flux par la méthode S_N dans le code APOLLO2'
Note interne 1992

[10] R.E. ALCOUFFE, R.D. O'DELL
'Transport Calculations for Nuclear Reactors'
Los Alamos Scientific Laboratory, 1987

[11] E.E. LEWIS, W.F. MILLER, Jr.
'Computational Methods of Neutron Transport
John Wiley & Sons, New York 1984

[12] A. NOURI
'Contribution à la qualification du code Monte-Carlo TRIPOLI sur des expériences critiques et à l'étude de l'interaction neutronique entre unités fissiles'
Thèse, Orsay, janvier 1994

[13] Service d'Etudes de Criticité, CEN Saclay
Communication privée
'Guide de criticité'
Rapport interne, février 1967

[14] B. ROQUE, A. SANTAMARINA
'The Criticality-Safety package CRIBLE and its experimental qualification'
ICNC'95
Albuquerque (USA), 17-21 September 1995

[15] B. ROQUE
Communication privée
'Réunion technique "CRISTAL": le formulaire et le cahier des charges' du 25 octobre
Compte-rendu de réunion interne, 1995

[16] B. ROQUE, A. SANTAMARINA, C. MATTERA, E. LEJEUNE
'Validation of the New French Criticality-Safety Package CRISTAL'
Lake Chelan (USA), 7-11 September 1997

[17] C. NORDBORG ET AL.
'Nuclear Data for science and Technology'
Julich, 782, 1991

[18] A. CONSTANT
Communication privée
'La bibliothèque CEA93'
Rapport interne, 1993

[19] C.M. DIOP, D. CHAIGNE, C. DEJONGHE, J. GONNORD,
M.J. DE VILLENEUVE
Communication privée
'THEMIS : Système de traitement des sections efficaces. Présentation.
Manuel d'utilisation.'
Rapport interne, 1988

[20] S CATHALAU, E. FORT, A. MAGHNOUJ, A. BENSLIMANE
Communication privée
'Bibliothèque CEA93 - Contribution à la qualification à l'aide d'une méthode statistique'
Note interne, mars 1994

[21] H. TELLIER, J. VANUXEEM
Communication privée
'Eléments de qualification de la bibliothèque neutronique d'APOLLO2 pour les réacteurs à neutrons thermiques'
Rapport interne, janvier 1994

[22] M. COSTE, R. SANCHEZ, Z. STANKOVSKI, C. VAN DER GUCHT,
I. ZMIJAREVIC
'APOLLO2 assembly spectrum code : new features'
Conference Pittsburg, 1991

[23] M.F. ROBEAU, F. MOREAU
Communication privée
'ACROPOLE. Guide utilisateur et manuel de référence'
Rapport interne, janvier 1994

[24] G. PALMIOTTI, J.M. RIEUNIER, C. GHO, M. SALVATORES
'Optimized Two Dimension Sn transport (BISTRO)'
Proc. ANS/ENS, International topical Meeting on Advances in Reactor Physics, Mathematics and Computation, Paris, avril 1987

[25] M.M. SBAFFONI, M.J. ABBATE
'A group by group upscattering scaling method'
Ann. Nucl. Energy, 13, 101, 1986

[26] G. COURTOIS, G. POULLOT
Communication privée
'MORET3 : un programme Monte-Carlo pour le calcul rapide des facteurs de multiplication effectifs des milieux fissiles dans des géométries complexes'
Note interne, juin 1995

[27] A. NOURI, A. LE COCQ, P. REUSS, E. LEJEUNE
'Anisotropy treatement in criticality multigroup Monte-Carlo codes'
Conference on Nuclear Criticality Safety
Mito, Japan, September 1996

[28] L. DE LA RIVE BOX
'Accelerating the convergence Monte-Carlo calculations of Keff in systems with weakly coupled fissile units'
Report n°RF-965
Delft University of Technology, November 1996

[29] J.P. BOTH, Y. PENELIAU
'The Monte-Carlo Code TRIPOLI4 and its first benchmark interpretations'
Physor'96, Breakthrough of nuclear Energy by reactor physics
Mito, Japan, 16-20 September 1996

[30] S. LOUBIERE
Communication privée
Compte-rendu de réunion interne
'Groupe de travail IHM du projet CRISTAL'
27 novembre 1997

[31] C. CHABERT
'Etudes de cycle: estimation du bilan matière dans le domaine des réacteurs à eau présurisée et eau bouillante. Qualification expérimentale'
Thèse, Aix-Marseille, décembre 1994

[32] P. FINCK, C. DIOP, J.M. GOMIT, E. LEJEUNE, L. LEYVAL
Communication privée
'Cahier des charges du formulaire de criticité CRISTAL'
Note interne, 1996

[33] B. ROQUE, A. SANTAMARINA
Communication privée
'Base expérimentale pour la qualification du formulaire CRISTAL'
Note interne, décembre 1997

[34] J.B BRIGGS
'The International Criticality Safety Benchmark Evaluation Project'
Proc. International Conference on Nuclear Criticality Safety ICNC'95
Albuquerque, New Mexico (USA), 17-21 September 1995

[35] G.E. WHITESIDES
'Standard problem exercise on criticality codes for dissolving fissile oxides in acids'
Rapport NEACRP-L-306, 1990

[36] S. CATHALAU et Al.
'Qualification of the JEF2.2 Cross Sections in the Epithermal and Thermal Range using a Statiscal Approach'
Nuclear Science & Engineering 121, 326 (1995)

[37] M.C ALET, A. BENSLIMANE, C. CHABERT, C. MOUNIER, A. SANTAMARINA, G. WILLERMOZ
'Qualification of the ^{235}U Leal Derrien Larson evaluation using french integral experiments'
Contribution to the JEFF Working Group Meeting
NEA Paris, 15-16 December 1997

[38] G. POULLOT, P. GRIVOT
'Criticality of plutonium nitrate solution in a large water reflected cubic tank (130x130x100) (19 % 240Pu)' "PU-SOL-THERM-012"
NEA/NSC/DOC/(95)03/I Volume I

[39] B. A. POHL, S.C. KEETON, J. D. LEE, W. R. LLOYD
'Criticality Experiments with mixed plutonium and uranium nitrate solution at a plutonium fraction of 0.2 and 0.5 in large cylindrical geometry' "MIX-SOL-THERM-002"
NEA/NSC/DOC/(95)03/VI Volume VI

[40] L. MARTIN DEIDIER, J. DUFOUR, M. CLEMENT, A. NICOLAS, P.ROLLAND
Communication privée
'Expérience CRISTO II. Configurations de stockage avec lames d'eau interassemblages de 4.5 cm et réseau régulier équivalent. Résultats expérimentaux'
Rapport interne, mars 1981

[41] J.C. MANARANCHE, D. MANGIN, L. MAUBERT, G. COLOMB, G. POULLOT
Communication privée
'Etude expérimentale de la criticité de crayons combustibles de type PWR dans différentes configurations'
Rapport interne, décembre 1980

[42] H.J. SMITH, A. SANTAMARINA
'Analysis of the international criticality benchmark n°19 of a realistic fuel dissolver'
OECD/NEACRP, Report NEACRP L-325, 1991

[43] M.DARROUZET, N. EL IDRISSI, A. SANTAMARINA
'CRISTO III : Etude de l'effet du gadolinium sous forme soluble dans des réseaux à eau légère'
Séminaire international sur les programmes et besoins en matière d'études de criticité, Dijon, 19-22 septembre 1983

[44] A.SANTAMARINA - H.J. SMITH
'Analysis of the OECD/NEACRP problem N° 20 on international criticality codes for fuel pellets in fissile solution'
OECD/NEACRP - Report NEACRP - L-320, 1990.

[45] J. BOUCHARD et al.
'Some recent studies on reactor physics'
Proc. ANS Top. Meeting in Reactor Physics,
Sun Valley (USA), September 1980

[46] A. SANTAMARINA, L. MARTIN-DEIDIER
'Experimental qualification on the calculated subcriticality in high density fuel storage'
Proc. ANS Top. Meeting in Reactor Physics
Kiamesha Lake, New York (USA), September 21-24 1982

[47] A. SANTAMARINA, P. LO PINTO
Communication privée
'Analyse des effets à prendre en compte dans les expériences CRISTO'
Note interne, septembre 1980

[48] A. SANTAMARINA
'Some problems related to the small zone experiment analysis'
23 rd NEACRP meeting,
Argonne National Laboratory West, Idaho (USA), 22-26 September 1980

[49] A. SANTAMARINA, B. NOUVEAU
Communication privée
'Interprétation de la configuration A : réseau de stockage avec lame d'eau seule de 4.5 cm'
Note interne, décembre 1981

[50] A. SANTAMARINA, B. NOUVEAU
Communication privée
'Expérience CRISTO II. Interprétation des configurations de réseaux de stockages avec absorbants et lame d'eau interassemblage de 4.5 cm'
Note interne, août 1981

[51] A. BENSLIMANE, A. SANTAMARINA
Communication privée
'Qualification du calcul APOLLO2 de la réactivité des réseaux REL'
Note interne, juin 1998

[52] S. PERRUCHOT-TRIBOULET
'Validation et Extension du module d'autoprotection du code de transport neutronique multigroupe APOLLO2'
Thèse, Aix-Marseille, octobre 1996

[53] B. ROQUE, C. MATTERA, A. SANTAMARINA
Communication privée
'Synthèse des procédures de calcul recommandées pour le formulaire CRISTAL (Version V0)
Note interne, 1998

[54] A. MEISTER, A. SANTAMARINA
Communication privée
'Effet des liaisons cristallines UO2 dans l'élargissement Doppler, températures effectives recommandées pour APOLLO'
Note interne, février 1998

[55] J.L. ROWLANDS
'Recommanded Debye temperatures for use in the calculation of Doppler broadened cross-sections for reactor neutronics calculations'
JEF/DOC-555, 1995

[56] K. SEIDEL, D. SEELIGER, A. MEISTER, S. MITTAG, W. PILZ
'The influence of atomic, molecular, and solid state effects on the neutron resonance cross sections'
Fiz. Elem. Chastits. At.
Yadra (Russia), 1988

[57] R. SANCHEZ, M. COSTE, Z. STANKOVSKI, C. VAN DER GUCHT
'Models for multigroup selfshielded cross sections calculations in the code APOLLO2'
Physor'90, Marseille, 1990

[58] P. RIBON
Communication privée
'CALENDF et les sous programmes associés'
Note interne

[59] M.COSTE, G. MATHONNIERE, R. SANCHEZ, Z. STANKOVSKI, I. ZMIJAREVIC
Communication privée
'APOLLO-2 Notice Théorique'
Rapport interne, janvier 1994

[60] H. TELLIER, M. COSTE, C. RAEPSAET, C. VAN DER GUCHT
Communication privée
'Absorption résonnante des noyaux lourds dans les réseaux hétérogènes. Qualification physique'
Note interne, novembre1992

[61] P. BLANC-TRANCHANT, A. SANTAMARINA, G. WILLERMOZ
Communication privée
'Elaboration et validation du schéma de calcul de référence APOLLO2 pour les réseaux REL UOX et MOX'
Note interne, 1998

[62] O. BOULAND
'Amélioration du calcul de l'autoprotection des résonances résolues par un traitement quasi-exact du ralentissement des neutrons'
Thèse, Orsay, 22 février 1994

[63] C. CHABERT, A. SANTAMARINA, MC. ALET
Communication privée
'Optimisation du schéma de calcul de référence APOLLO2 'CEA97' des assemblages REP UO2 17x17'
Note interne, 1998

[64] A. MAGHNOUJ
'Du mode fondamental à la vidange des réacteurs à eau sous pression : contribution à la qualification des outils de calcul'
Thèse, Aix-Marseille, janvier 1996

[65] P. KLENOV
'Validation expérimentale des schémas de calcul relatifs aux absorbants et poisons consommables dans les REP'
Thèse, Aix-Marseille, octobre 1995

[66] B. ROQUE, A. SANTAMARINA
Communication privée
'Optimisation et validation d'un maillage de condensation énergétique pour le formulaire de criticité CRISTAL'
Note interne, 1997

[67] I. PETROVIC
'Amélioration du modèle de fuites de neutrons dans le schéma de calcul des conditions critiques et des paramètres homogénéisés d'un réacteur nucléaire'
Thèse Orsay, juillet 1993

[68] B. ROQUE, C. MATTERA
Communication privée
'Qualification du formulaire CRISTAL pour le calcul des solutions de nitrate de plutonium et de nitrate mixtes'
Note interne, 1998

[69] A. SANTAMARINA, N. THIOLLAY, C. HEULIN, J.P. CHAUVIN
'The French experimental programme on Burnup Credit'
Lake Chelan (USA), 7-11 September 1997

ANNEXES

Annexe A - Traitement de l'anisotropie du choc

Dans cette annexe, nous allons montrer comment une section de diffusion partielle peut-être développée sur la base des polynômes de Legendre. Un tel développement permet de donner une approximation de la loi de choc.

Polynômes de Legendre

Les polynômes de Legendre peuvent se définir par la relation de récurrence suivante :

$$\begin{aligned} &P_0(\mu) = 1 \\ &P_1(\mu) = \mu \\ &P_{n+1}(\mu) = \frac{1}{n+1}\left[(2n+1)\,\mu P_n(\mu) - n\,P_{n-1}(\mu)\right]. \end{aligned} \qquad \textbf{(A.1)}$$

Ils forment une base complète de fonctions orthogonales sur l'intervalle [-1;1] :

$$\int_{-1}^{1} P_n(\mu)\,P_{n'}(\mu)\,d\mu = \frac{2}{2n+1}\delta_{nn'} \qquad \textbf{(A.2)}$$

le produit scalaire étant défini par l'intégrale du produit de deux fonctions sur cet intervalle. Ainsi, toute fonction définie sur l'intervalle [-1;1] peut se décomposer en une série de polynômes de Legendre. C'est cette dernière propriété que nous utiliserons ici.

Développement en polynômes de Legendre de la loi de choc

A des énergies inférieures à quelques dizaines de keV, la diffusion des neutrons est considérée comme isotrope dans le système du centre de masse. Nous supposerons ceci toujours vérifiée. Ainsi, dans le système du centre de masse, la loi de choc est donnée par :

$$g(\nu)\,d\nu = \frac{1}{2}\,d\nu \qquad \textbf{(A.3)}$$

où $\nu = \cos\theta$ avec θ angle de diffusion dans le repère du centre de masse. Par contre, dans le repère du laboratoire, nous allons montrer que le choc est d'autant plus anisotrope que le noyau est de masse atomique A faible.

D'après les lois de conservation de l'impulsion et de l'énergie cinétique au cours d'un choc élastique, on obtient la relation :

$$\mu = \frac{A\nu + 1}{\sqrt{A^2 + 2A\nu + 1}} \tag{A.4}$$

où $\mu = \cos\varphi$ avec φ angle de diffusion dans le laboratoire.

On exprime ainsi la loi de probabilité $f(\mu)$ régissant la diffusion dans le laboratoire :

$$g(\nu)d\nu = f(\mu)\,d\mu \quad \Rightarrow \quad f(\mu) = \frac{2\mu\sqrt{\mu^2 + A^2 - 1} + 2\mu^2 + A^2 - 1}{2A\sqrt{\mu^2 + A^2 - 1}} \tag{A.5}$$

La section différentielle de diffusion se définit comme :

$$\Sigma_s(\mu) = \frac{\Sigma_s}{2\pi} \times f(\mu) \tag{A.6}$$

où dans un but de simplification, l'énergie des neutrons n'a pas été mentionnée.

La loi de probabilité étant une fonction d'un cosinus nécessairement compris entre -1 et 1, on peut la développer sur la base des polynômes de Legendre :

$$f(\mu) = \frac{1}{4\pi}\sum_{n=0}^{\infty}(2n+1)\,f_n\,P_n(\mu) \tag{A.7}$$

avec

$$f_n = 2\pi\int f(\mu)\,P_n(\mu)\,d\mu \tag{A.8}$$

Ce développement peut soit être tronqué simplement à un ordre N sans aucune autre considération, soit être tronqué à ce même ordre en imposant la conservation des moments (terme $f_n(\mu)$) jusqu'à l'ordre N+1. Il s'agit alors de la correction de transport à l'ordre N :

$$f_N^c(\mu) = \frac{1}{4\pi}\sum_{n=0}^{\infty}(2n+1)\,f_n^c\,P_n(\mu) + \beta_N\,\delta_2(\mu) \tag{A.9}$$

avec la fonction delta de Plazcek :

$$\delta_2(\mu) = \frac{1}{2\pi}\delta(\mu - 1) \tag{A.10}$$

Ainsi, la correction du transport à l'ordre N et les moments corrigés du transport sont donnés par :

$$\begin{cases} \beta_N = f_{N+1} \\ f_n^c = f_n - \beta_N \end{cases} \tag{A.11}$$

Les premiers moments du développement de **(A.5)** sont :

$$\begin{aligned} f_0 &= 2\pi \\ f_1 &= 2\pi\,\overline{\mu} \end{aligned} \qquad \textbf{(A.12)}$$

où le cosinus moyen $\overline{\mu}$ est donné par :

$$\overline{\mu} = \int f(\mu)\,\mu\,d\mu = \frac{2}{3A} \qquad \textbf{(A.13)}$$

Ainsi, il vient :

$$\begin{aligned} f(\mu) &= \frac{1}{2}\left[1 + 3\overline{\mu}\,\mu + \cdots\right] \\ &= \frac{1}{2} + \frac{1}{A}\mu + \cdots \end{aligned} \qquad \textbf{(A.14)}$$

On constate alors que le choc est d'autant plus isotrope que le noyau est de masse atomique A élevée.

Exemple de l'hydrogène

Pour l'hydrogène, la loi de choc est :

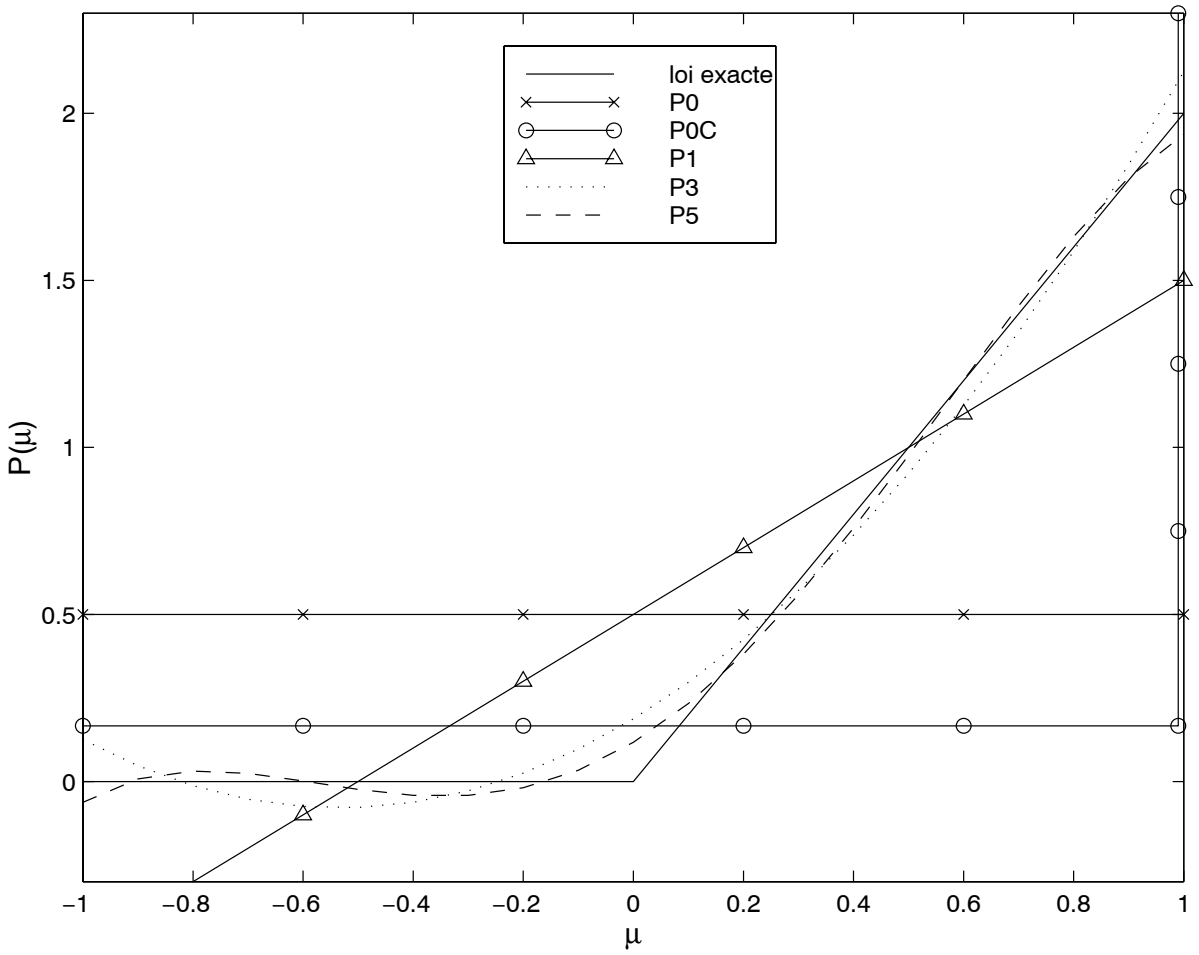
$$f(\mu) = \begin{cases} 2\mu \text{ si } \mu \geq 0 \\ 0 \text{ si } \mu < 0 \end{cases} \qquad \textbf{(A.15)}$$

Le Tableau A.1 donne les différents moments jusqu'à l'ordre 10 de cette loi de choc.

Tableau A.1 : Moments jusqu'à l'ordre 10 de la loi de choc de l'hydrogène

f_0	f_1	f_2	f_3	f_4	f_5	f_6	f_7	f_8	f_9	f_{10}
π	$\frac{2\pi}{3}$	**Erreur**	0	**Erreur**	0	**Erreur**	0	**Erreur**	0	**Erreur**

A partir de ces moments et des 10 premiers polynômes de Legendre, on peut construire les développements jusqu'à l'ordre 9 avec ou sans correction de la loi de choc de l'hydrogène.
La figure ci-après illustre cette loi de choc.


loi exacte
P0
P0C
P1
P3
P5
P(μ)
μ
2
1.5
1
0.5
0
−1
−0.8
−0.6
−0.4
−0.2
0
0.2
0.4
0.6
0.8
1

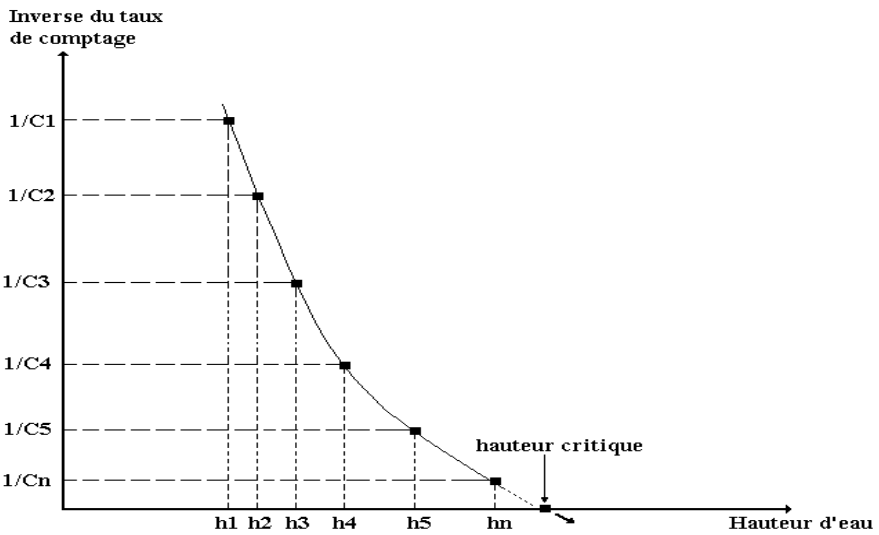
Annexe B - Approche sous-critique

Introduisons une source de neutrons S dans un milieu fissile sous-critique ayant un facteur de multiplication effectif K_{eff}. Si des capteurs sont placés dans ce milieu, on obtient un taux de comptage de neutrons "N" égal à la somme des termes de la suite géométrique de premier terme S et de raison K_{eff} soit :

$$N = \frac{S}{1 - K_{eff}} \qquad \textbf{(B.1)}$$

Procéder à une approche sous-critique consiste à faire varier lentement un paramètre caractéristique de la réactivité du milieu ou de la configuration qui est, en général, dans les études de Sûreté-Criticité, la hauteur d'eau. Lorsque la valeur de ce paramètre tend vers la valeur rendant critique le milieu ou la configuration, celle du K_{eff} tend vers un et donc, d'après **(B.1)**, l'inverse du taux de comptage vers zéro.

Des comptages sont effectués pour différentes valeurs "P_1, P_2,...,P_n" du paramètre critique et les inverses du taux de comptage correspondant "$1/C_1$, $1/C_2$,...,$1/C_n$" sont portés sur une courbe $1/C = f(P)$. La dernière valeur atteinte par le paramètre P amène la configuration à un état très proche de l'état critique et les derniers points de la courbe sont alors pratiquement alignés, ce qui autorise à extrapoler linéairement jusqu'à $1/C = 0$ pour obtenir la valeur critique du paramètre $P = P_c$.
La figure suivante illustre l'approche sous-critique avec pour paramètre la hauteur d'eau.



Annexe C - Transposition des mesures expérimentales coeur nourricier → milieu infini

Cette annexe présente la méthode qui permet de transposer les mesures expérimentales réalisées avec le coeur nourricier en milieu infini.

Le flux thermique radial dans l'assemblage est de la forme

$$A\cos(B_x \cdot x) \qquad \text{quand } B_x^2 > 0 \text{ (surcritique)} \tag{C.1}$$

$$Ach(|B_x| \cdot x) \qquad \text{quand } B_x^2 < 0 \text{ (sous-critique)}$$

Le centre du réseau de stockage qui ne "voit" que des crayons de l'assemblage, n'est pas perturbé par le coeur nourricier, la correction C en ce point pris comme origine vaut 1. A cet endroit, tout se passe comme si la mesure d'activité des détecteurs manganèse était réalisée en milieu infini. Ainsi la relation de transposition coeur nourricier → milieu infini s'écrit :

$$C(0)A\cos(B_x \cdot 0) = A\cos(B_x \cdot x) \cdot C(x) \qquad \text{quand } B_x^2 > 0 \tag{C.2}$$

$$C(0)Ach(|B_x| \cdot 0) = Ach(|B_x| \cdot x) \cdot C(x) \qquad \text{quand } B_x^2 < 0$$

soit

$$C(x) = \frac{1}{\cos(B_x \cdot x)} \qquad \text{quand } B_x^2 > 0 \tag{C.3}$$

$$C(x) = \frac{1}{ch(|B_x| \cdot x)} \qquad \text{quand } B_x^2 < 0$$

Cette relation donne la correction de transposition en milieu infini. Ainsi pour obtenir un comptage réalisé avec le coeur nourricier $D(x)$, en milieu infini $D_\infty(x)$ il suffit :

$$D(x) = D_\infty(x) \cdot C(x) \tag{C.4}$$

Remarque

La correction des points diagonaux est donnée par:

$$C(x,y) = \frac{1}{\cos(B_x \cdot x)\cos(B_y \cdot y)} \qquad \text{quand } (B_x^2 + B_y^2) > 0 \qquad \textbf{(C.5)}$$

$$C(x) = \frac{1}{ch(|B_x| \cdot x)ch(|B_y| \cdot y)} \qquad \text{quand } (B_x^2 + B_y^2) < 0$$

avec pour les points diagonaux: $B_x = B_y = \sqrt{\frac{B_R^2}{2}}$

Pour trouver le B_x^2 nécessaire au calcul de la correction, il faut utiliser les paramètres connus pour chaque configuration **[50]** :

- $K_\infty^{ré g}$: le facteur de multiplication infini mesuré du réseau régulier équivalent
- M^2 : l'aire de migration fournie par APOLLO2
- H_{ext} : la hauteur extrapolée du coeur au centre de l'assemblage

Calcul du B_x^2 :

Le laplacien radial est donné par :

$$B_R^2 = B_x^2 + B_y^2 \qquad \textbf{(C.6)}$$

soit pour le réseau régulier (symétries XY)

$$B_R^2 = 2B_x^2 \qquad \textbf{(C.7)}$$

en égalisant le laplacien matière et géométrique, il vient :

$$B_m^2 - B_z^2 = 2B_x^2 \qquad \textbf{(C.8)}$$

puis en utilisant la définition des laplaciens matière et axial, on a :

$$B_x^2 = \left(\frac{K_\infty^{ré g} - 1}{M^2} - \left(\frac{\pi}{H_{ext}} \right)^2 \right) \Big/ 2 \qquad \textbf{(C.9)}$$

Exemple de calcul de correction pour la configuration sans écran

En utilisant **(C.9)** :

$$B_x^2 = \left(\frac{1.1996 - 1}{34.47} - \left(\frac{\pi}{65} \right)^2 \right) \Big/ 2 = 1.727 \cdot 10^{-3}$$

B_x^2 est positif donc la correction à associer à la mesure d'activité des détecteurs Mn pour un point au centre de la lame d'eau (x = 11.2 cm) est donnée par **(C.3)** :

$$C(11.2) = 1 \Big/ \cos\left(\sqrt{1.727 \cdot 10^{-3}} \cdot 11.2 \right) = 1.119$$

Soit +11.9% de correction sur D(11.2 cm)

Cette correction au centre de la lame d'eau est pertinente en effet le flux thermique dans la lame d'eau perturbé par le coeur nourricier remonte moins qu'en milieu infini**[47]**. Ainsi en proximité du coeur nourricier, $D_\infty(x) > D(x)$.

La correction coeur nourricier → milieu infini des taux de fission mesurés est identique à la correction des flux thermiques mesurés.

FIGURES

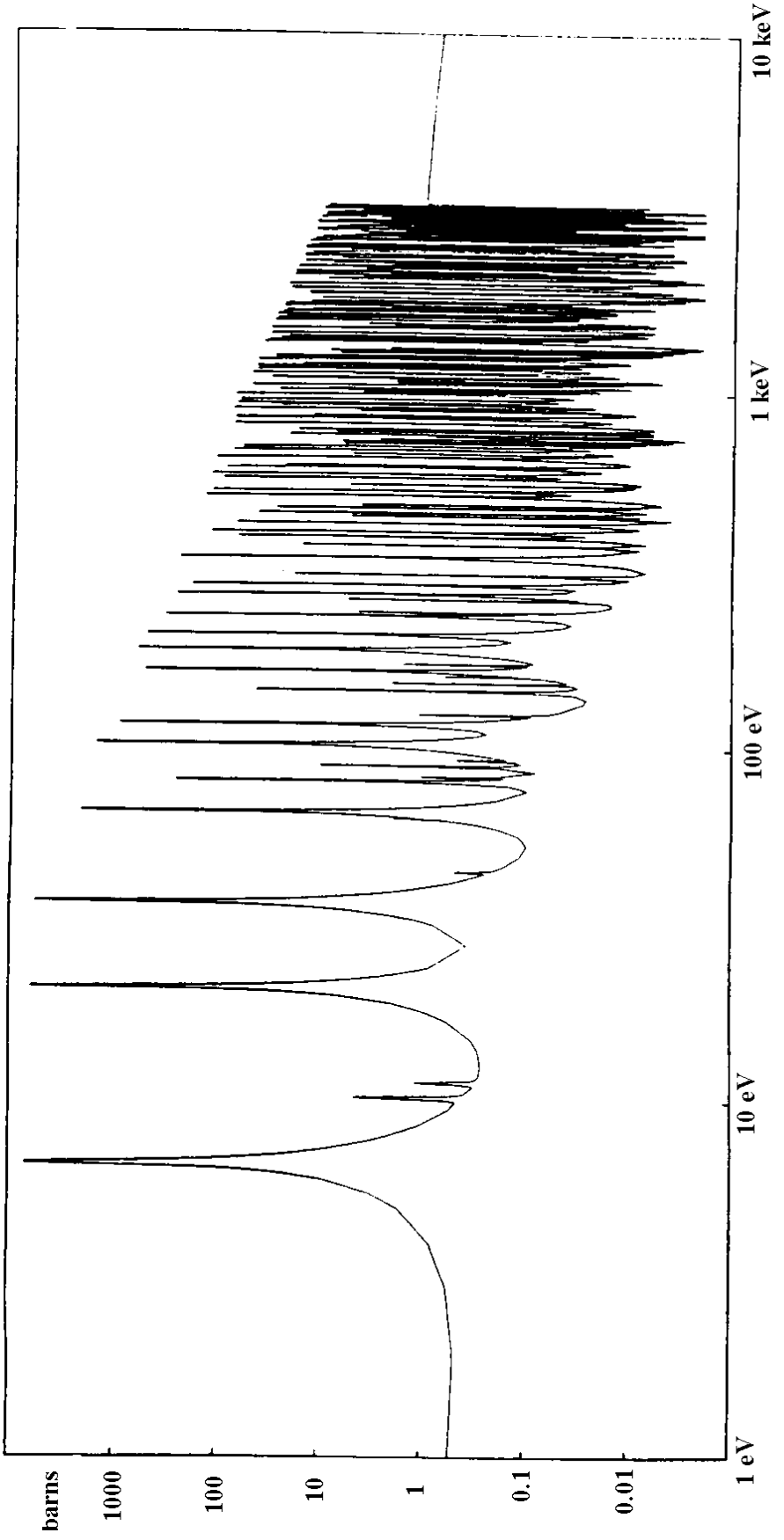


Figure 1 : Section efficace de capture de l'U238 (1 eV - 10 keV)

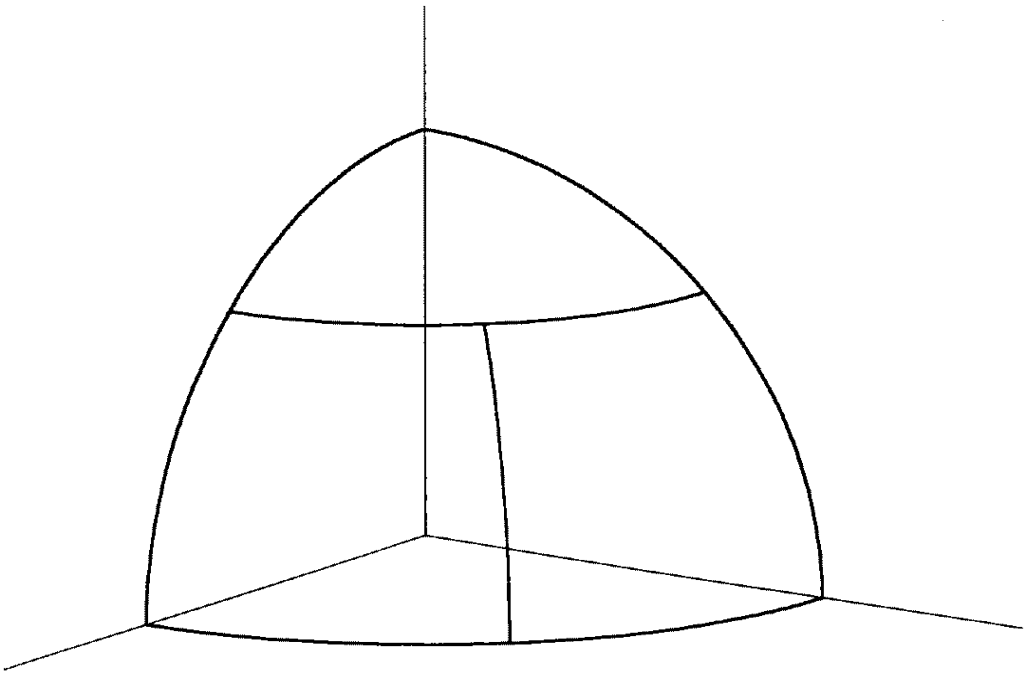


Figure 2 : Maillage S4 (24 directions angulaires)

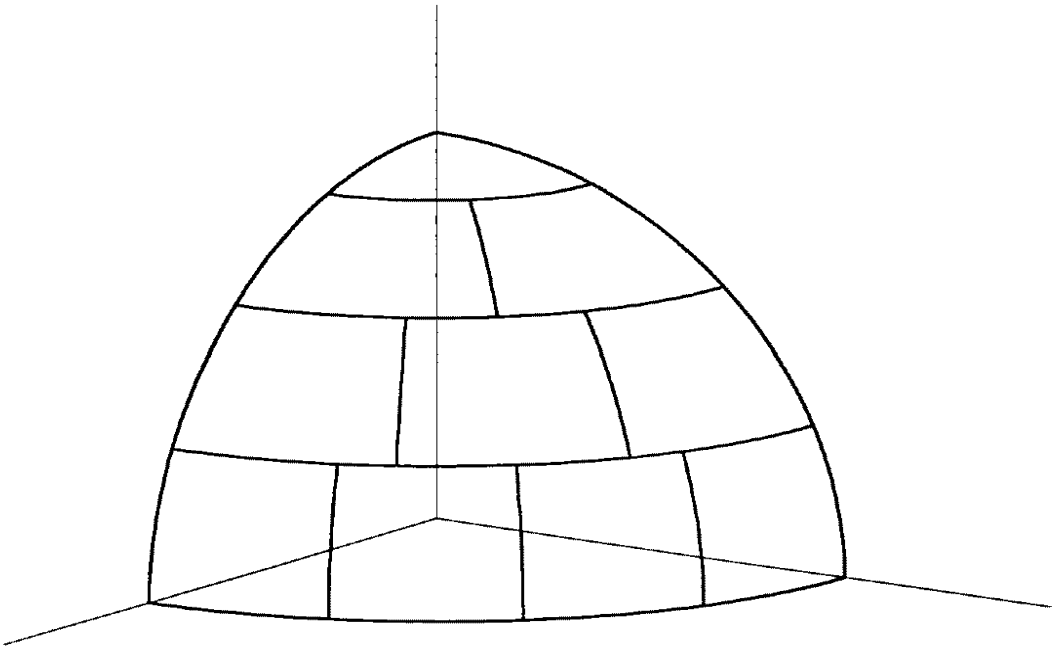


Figure 3 : Maillage S8 (80 directions angulaires)

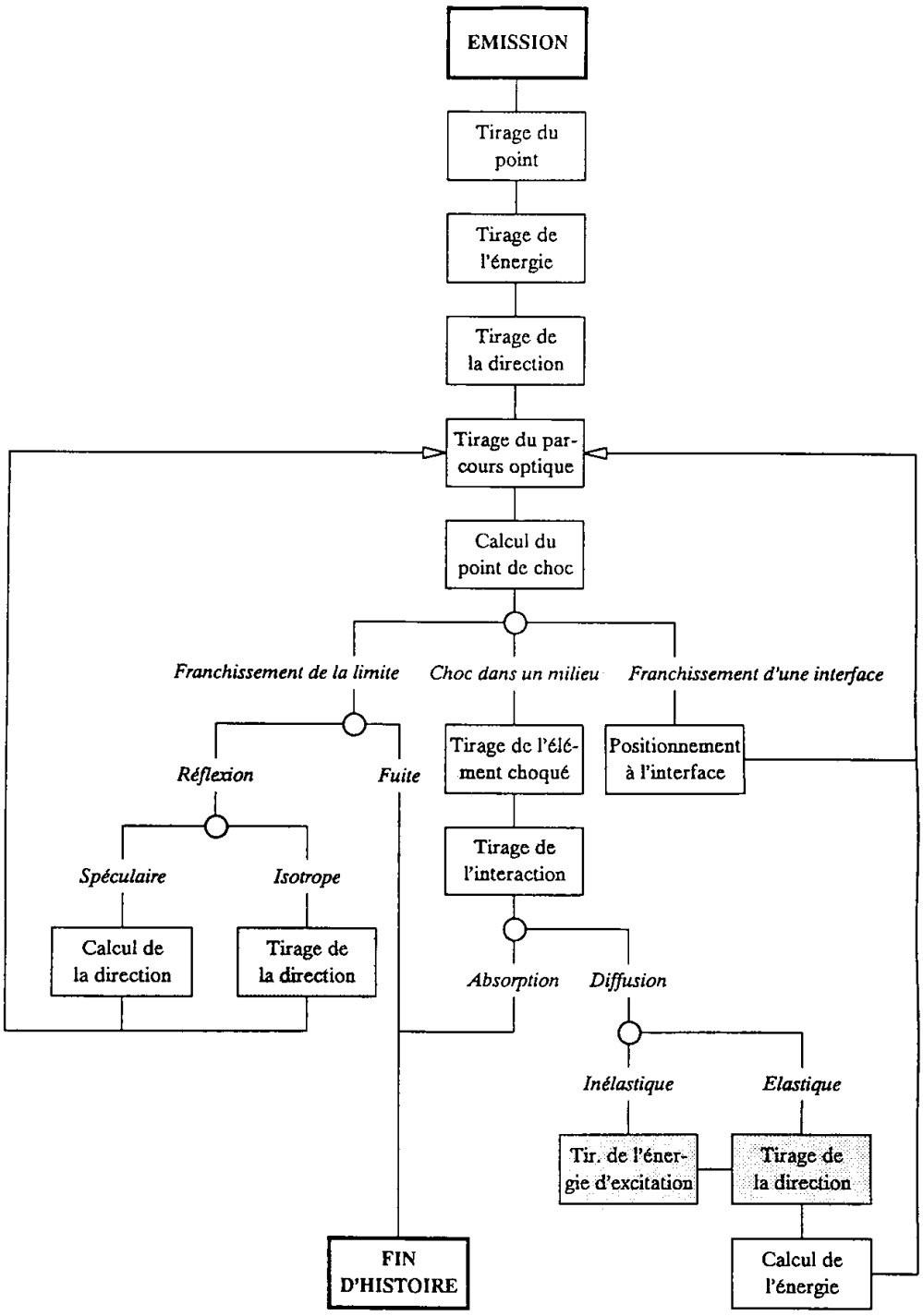


Figure 4 : Simulation de l'histoire d'un neutron par la méthode Monte-Carlo

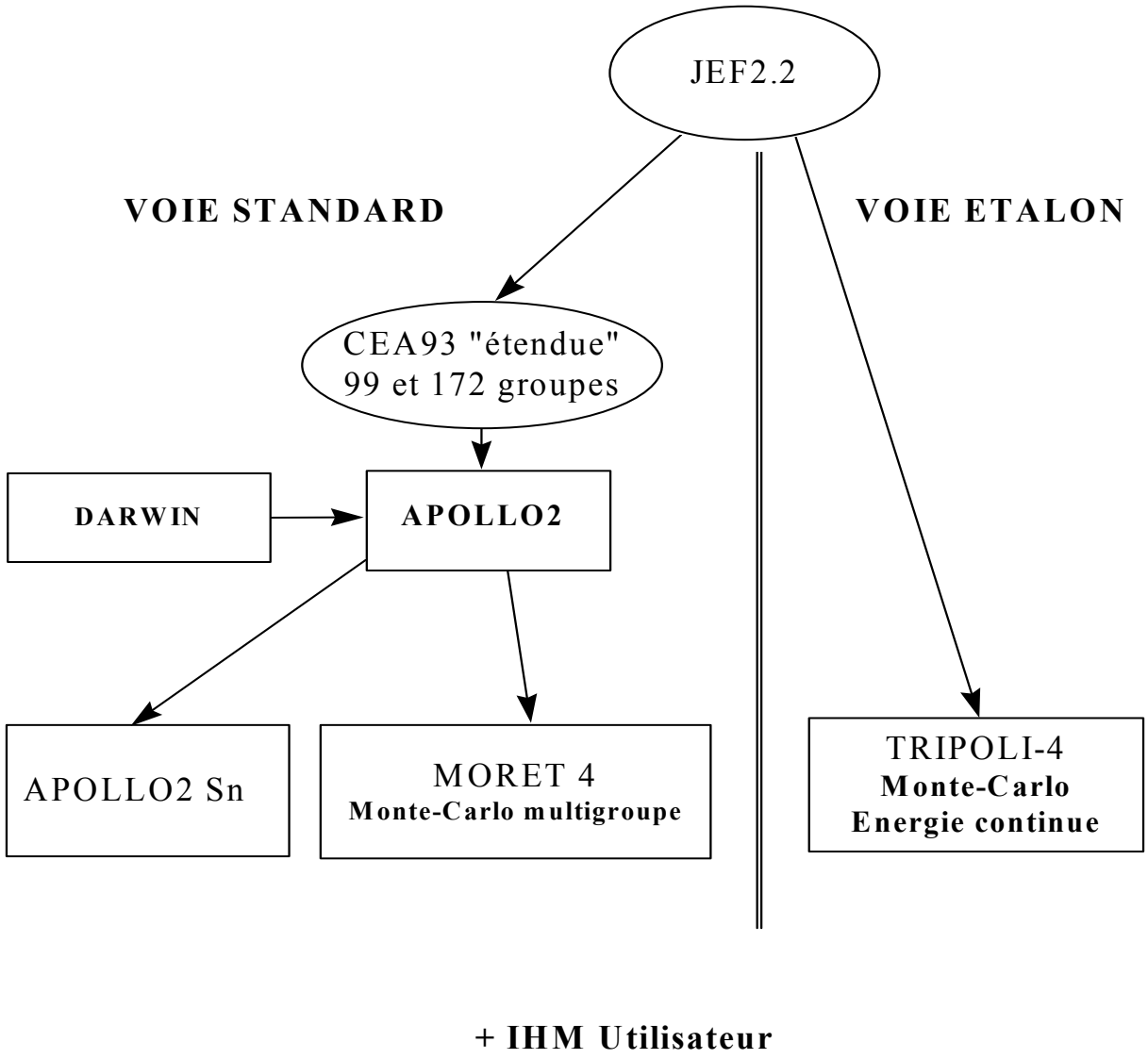


Figure 5 : Le Formulaire CRISTAL

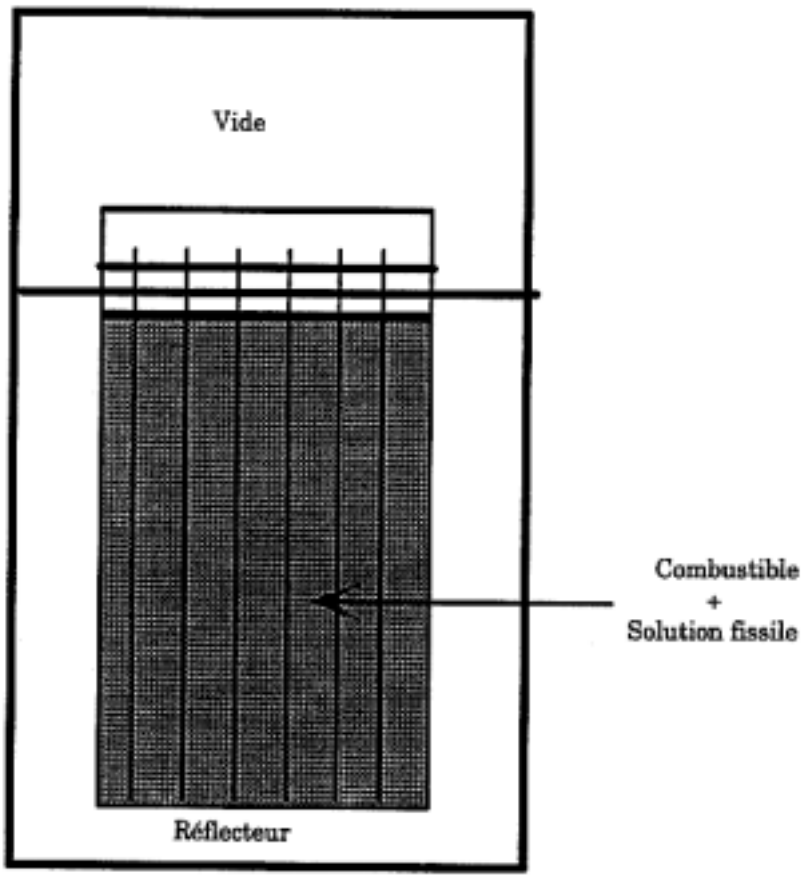
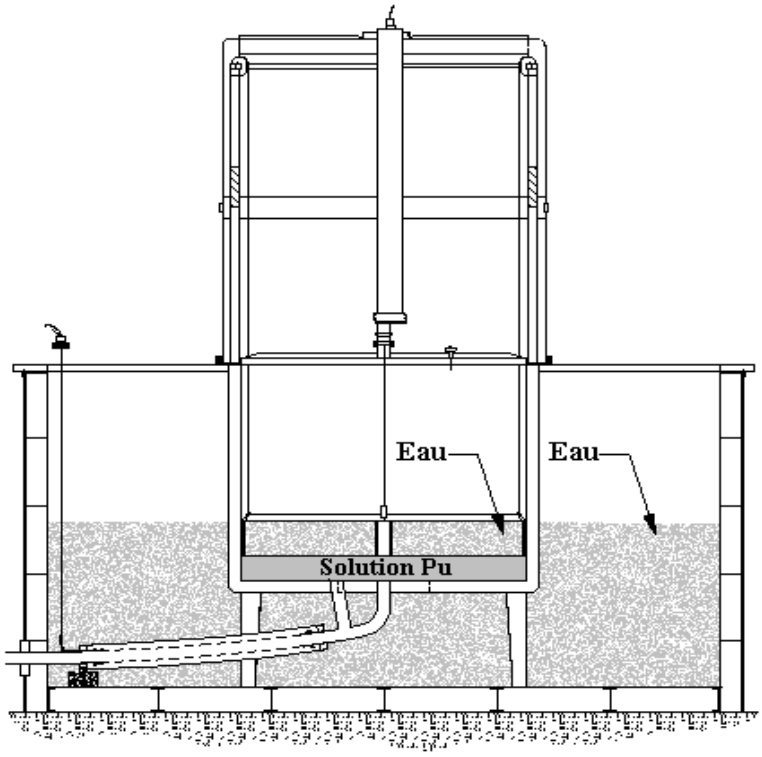
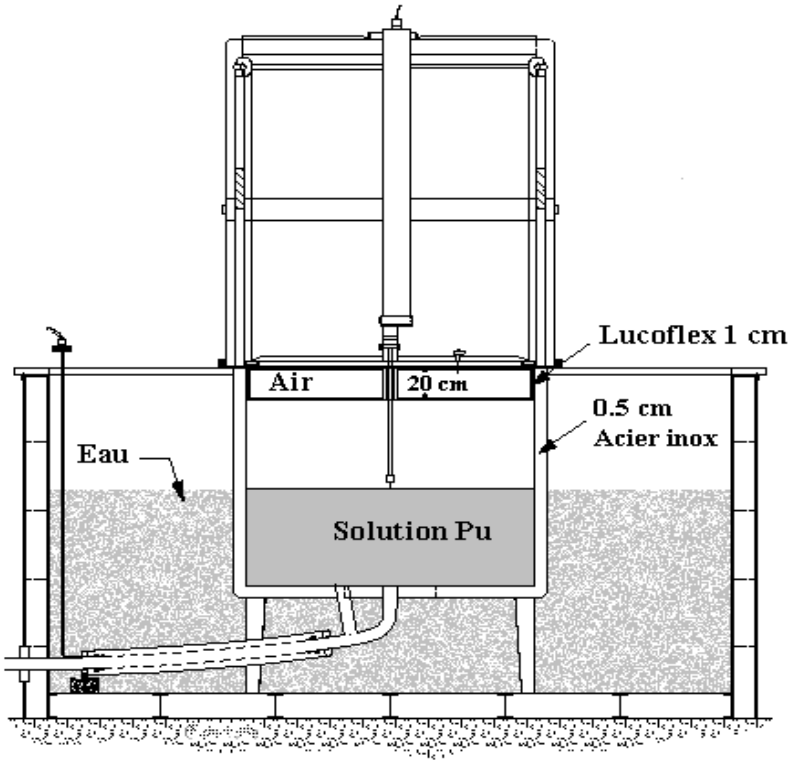


Figure 6 : Configuration des expériences dissolveurs Benchmarks OCDE n°13 et 14



Configuration 6 faces réfléchies



Configuration 5 faces réfléchies

Figure 7 : Configurations des expériences Valduc "PU-SOL-THERM-012"

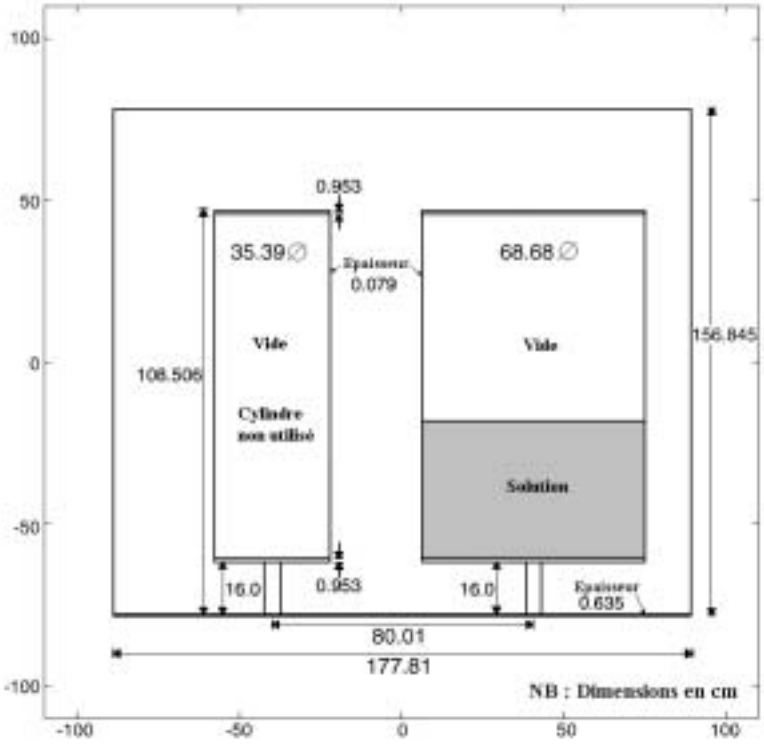


Figure 8 : Configuration PNL/CML - Grand cylindre "MIX-SOL-THERM-002"

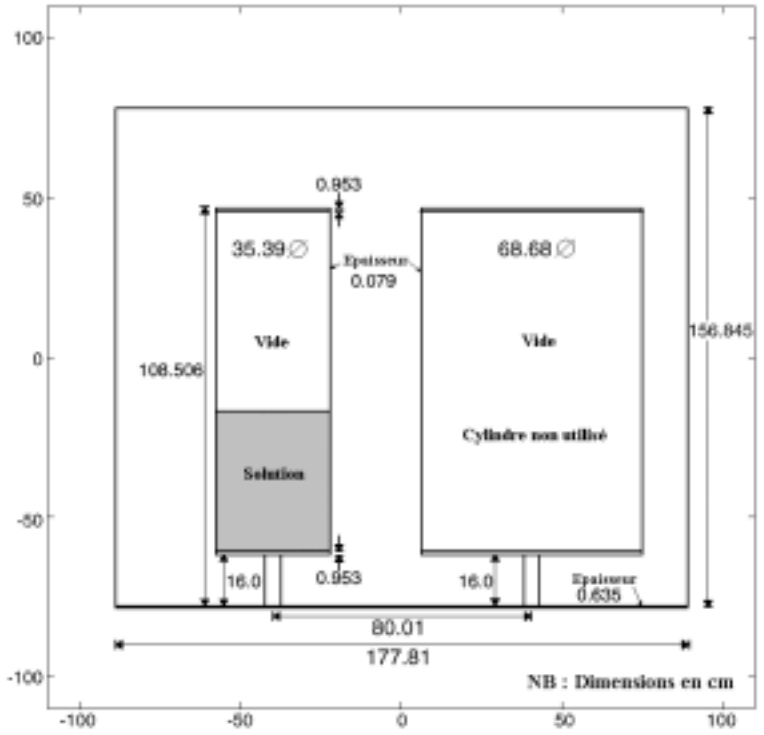


Figure 9 : Configuration PNL/CML - Petit cylindre "MIX-SOL-THERM-004"

Nomenclature des éléments de la **Figure 10**

Repère	Désignation	Matière
1	Table support de grille	AG5
2	Cuve cavité	AG5
3	Tabouret support du réseau	AG3
4	Plaque inférieure des paniers ou Plaque inférieure du réseau régulier	AG3 AG5
5	Plaque supérieure des paniers ou Plaque supérieure du réseau régulier	AG3 AG5
6	Plaques de remplissage	AG3
7	Lame d'eau	
8	Zone combustible cavité	UO_2 enrichi à 3%
9	Elément combustible MINERVE	U-Al enrichi à 90% en U^{235}
10	Elément combustible EOLE	U-Al enrichi à 93% en U^{235}
11	Elément graphite	
12	Plaque de verrouillage	AG3
13	Plaque de fond de cuve	Acier inoxydable
14	Ecrans absorbants	Tableau 6, Tableau 7
15	Grille de positionnement des éléments	A5 forgé

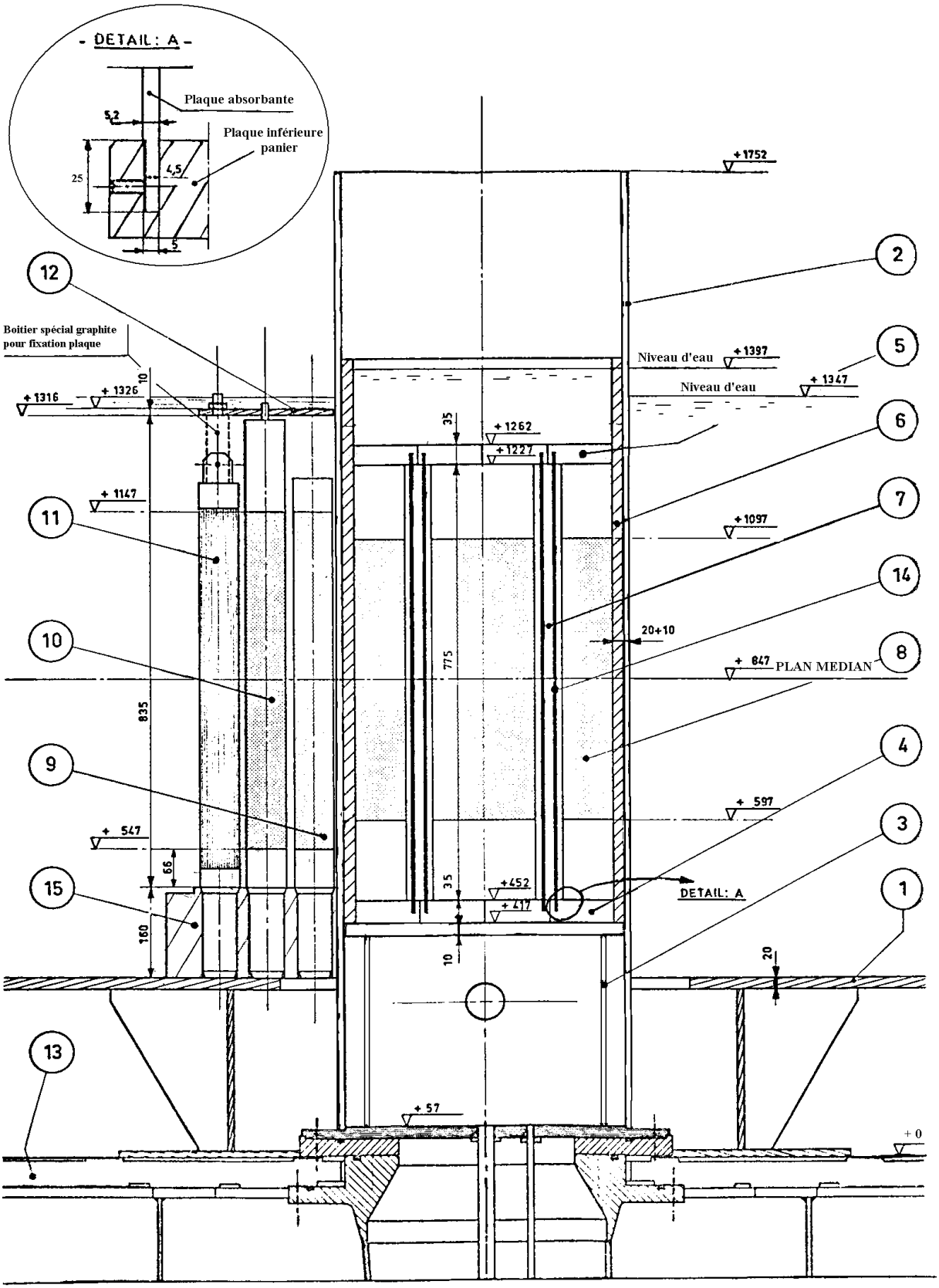


Figure 10 : Coupe axiale de la géométrie CRISTO II

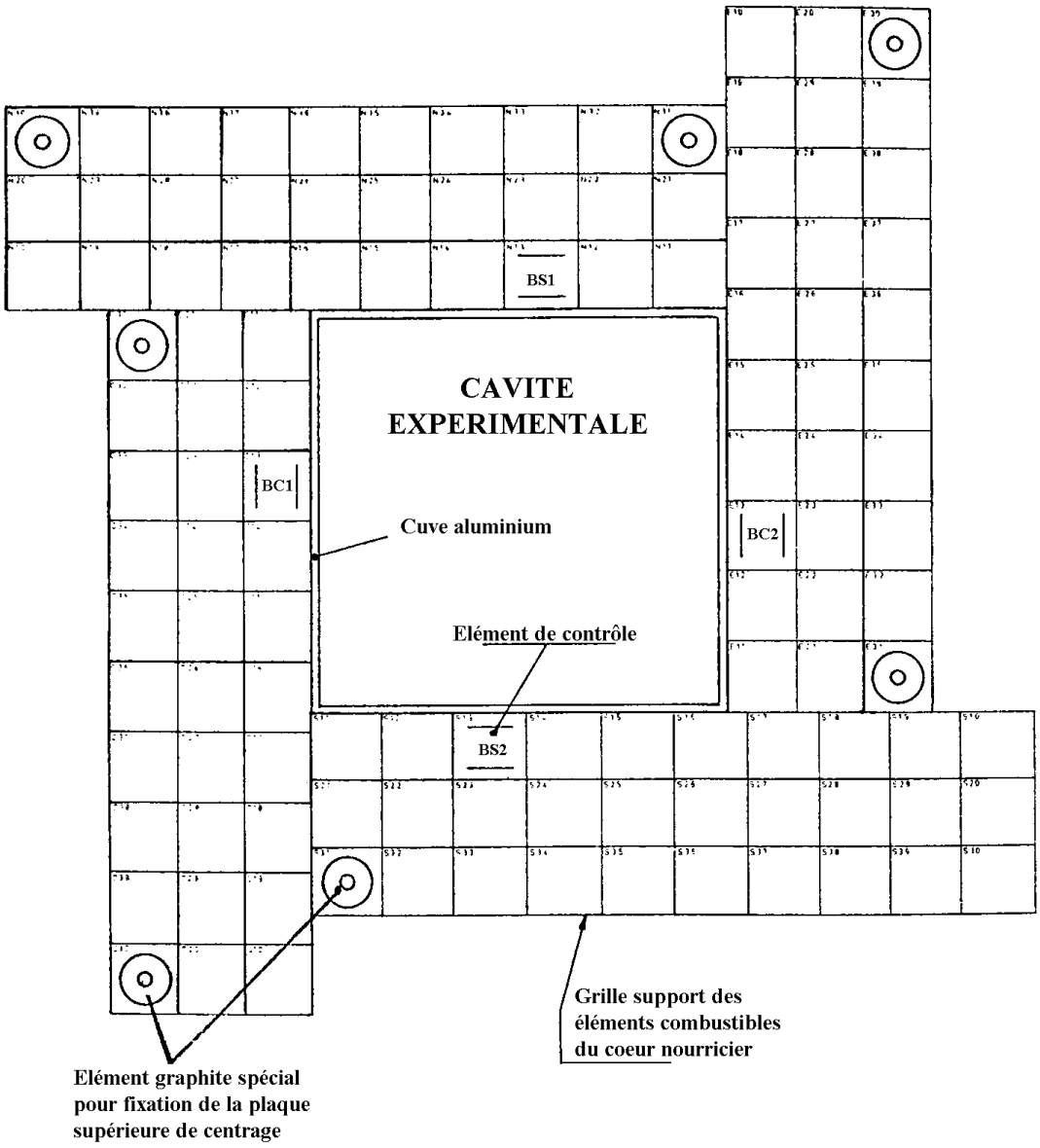


Figure 11 : Coupe radiale de la géométrie CRISTO II

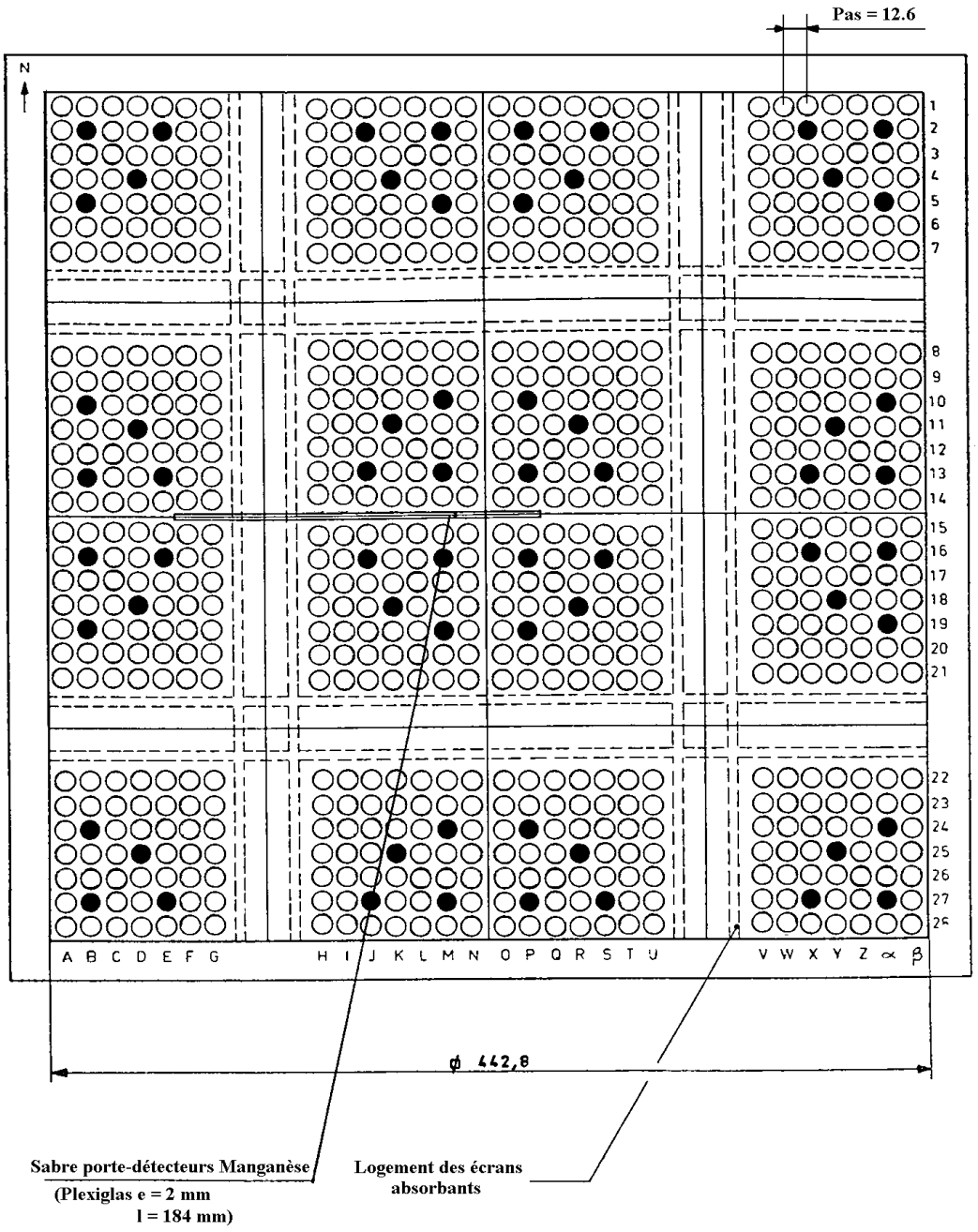


Figure 12 : Réseau de type "assemblage" CRISTO II

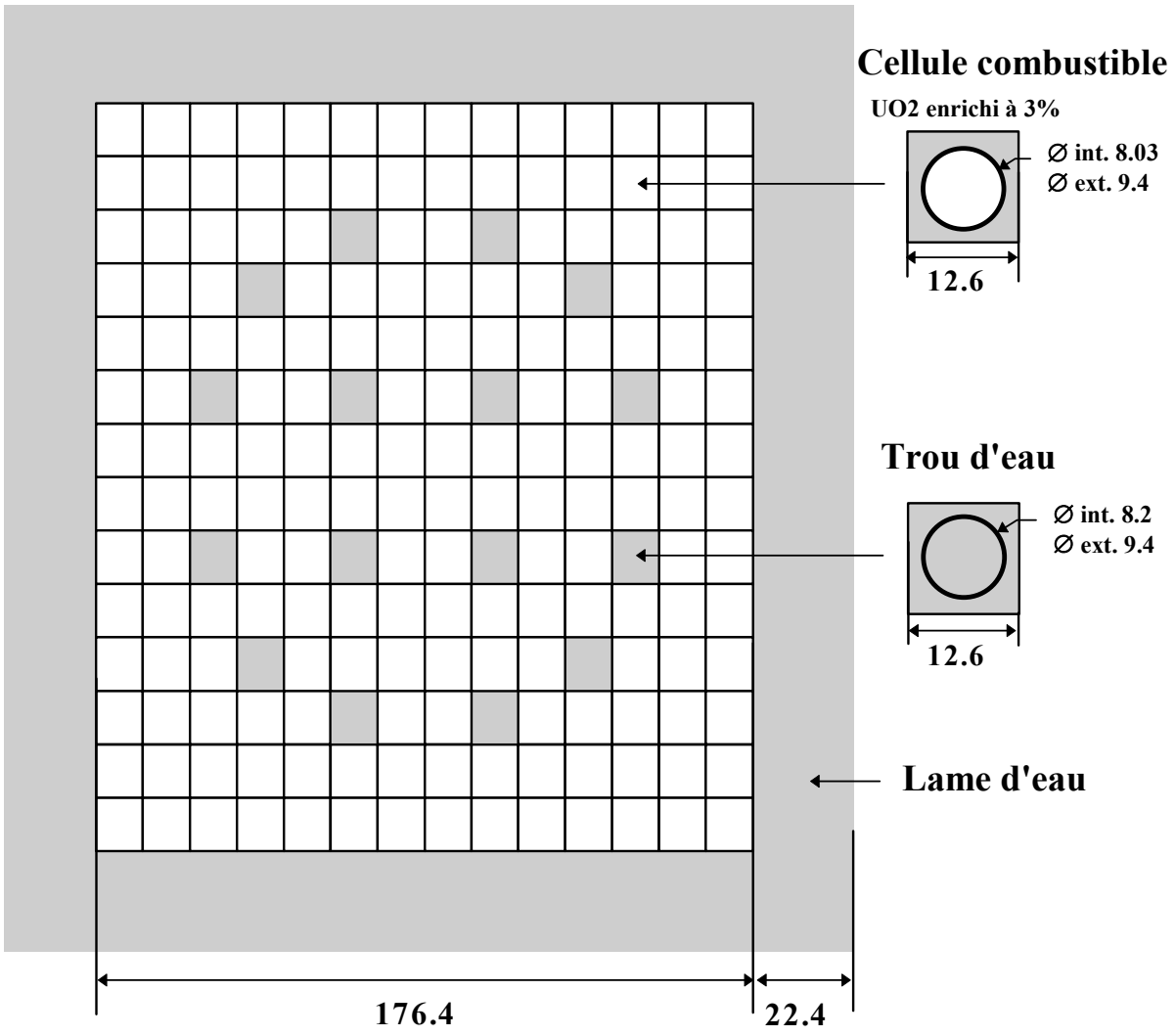


Figure 13 : Assemblage 14x14 CRISTO II avec lame d'eau seule

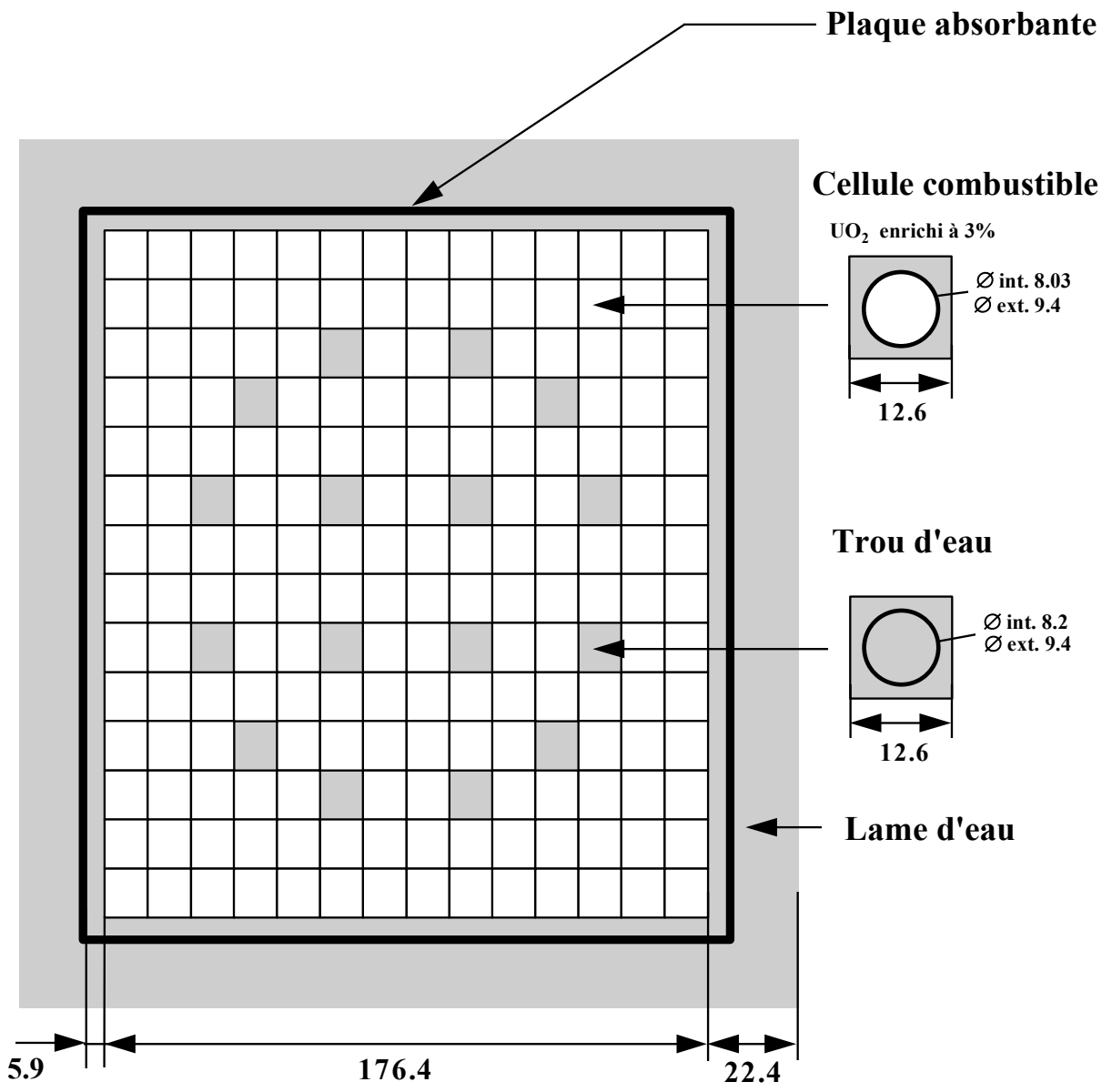


Figure 14 : Assemblage 14x14 CRISTO II avec plaque absorbante

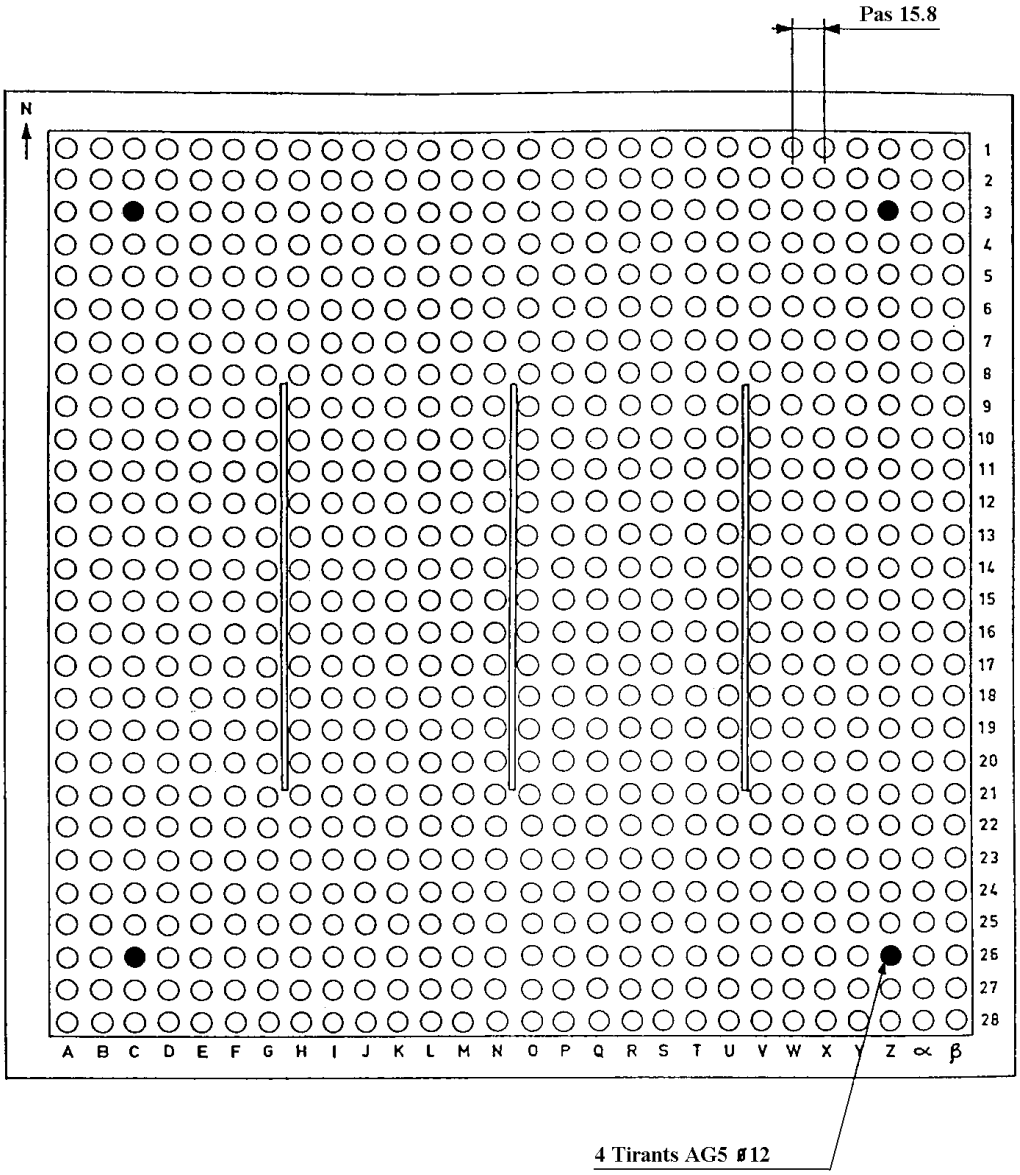


Figure 15 : Réseau régulier CRISTO II

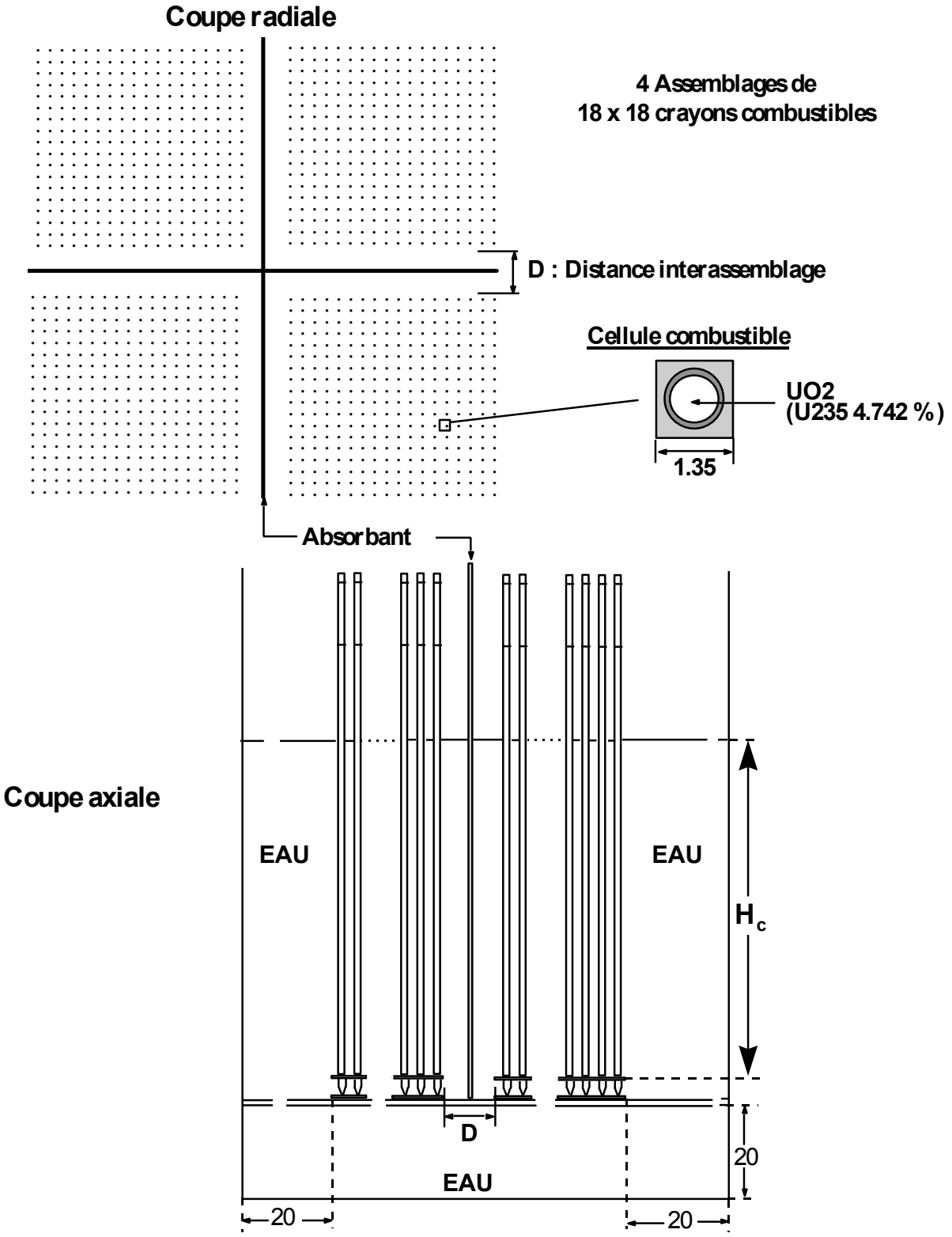


Figure 16 : Configuration Valduc - Piscine de stockage avec écran au centre de l'interassemblage

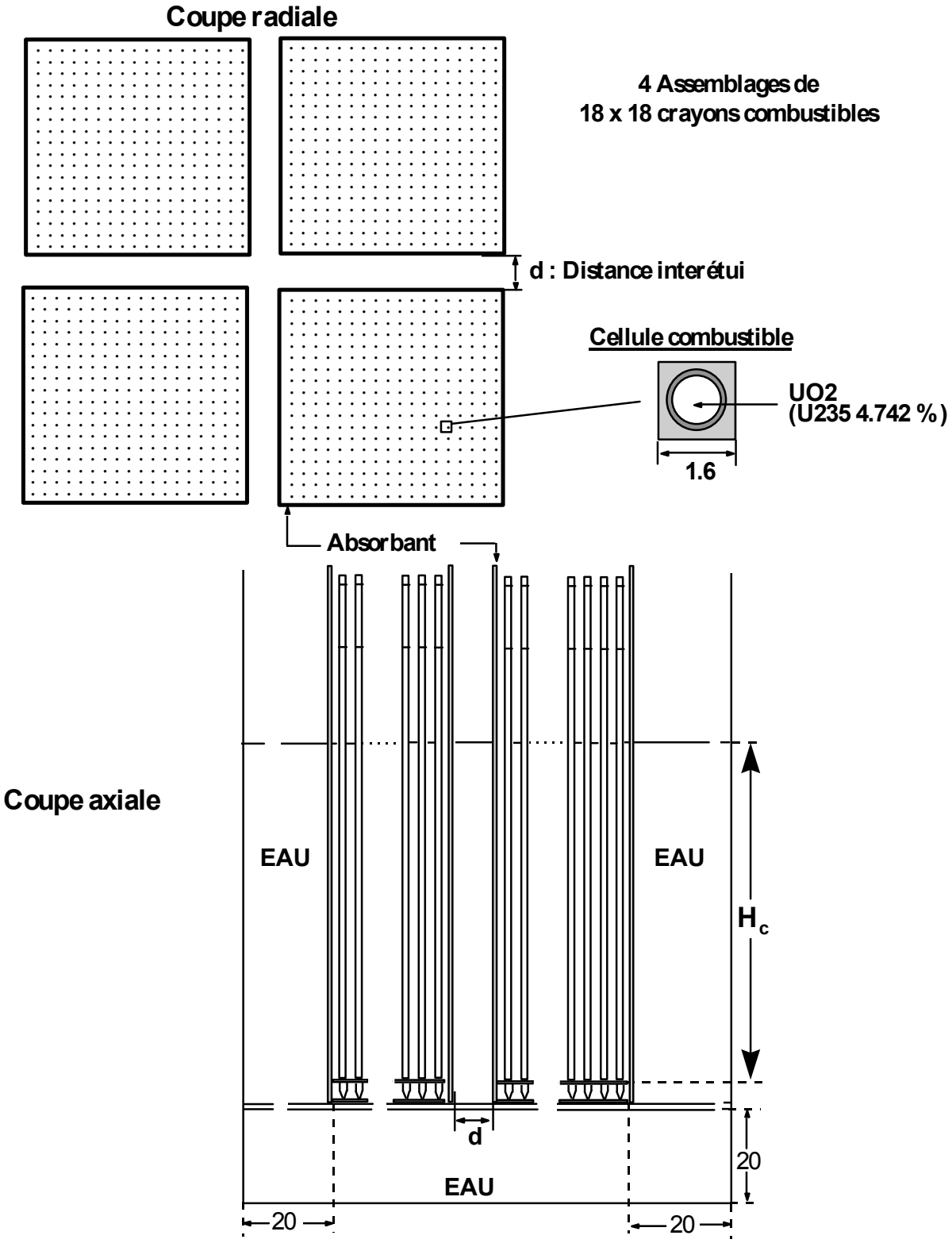


Figure 17 : Configuration Valduc - Piscine avec alvéoles de stockage

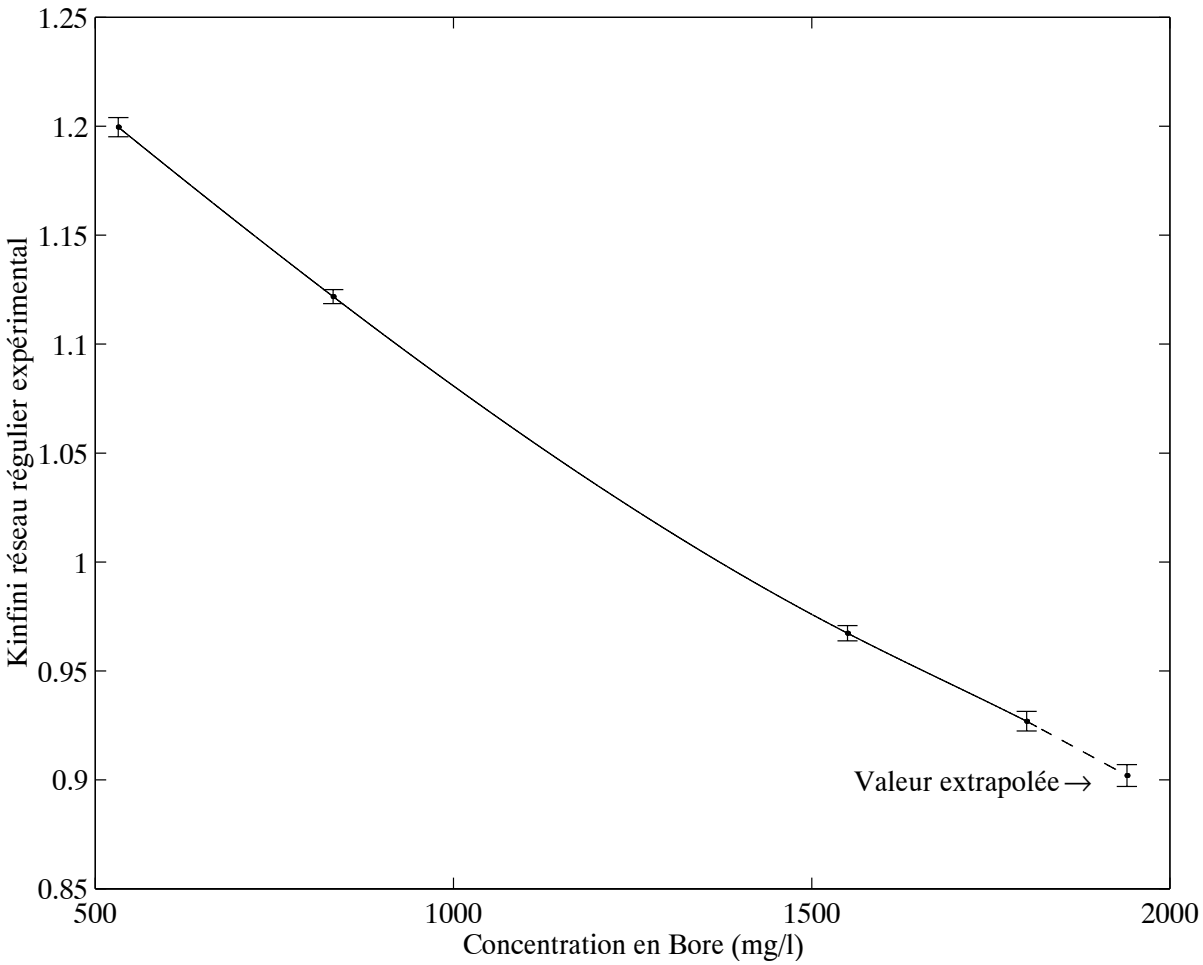


Figure 18 : Facteurs de multiplication infini des réseaux réguliers CRISTO II

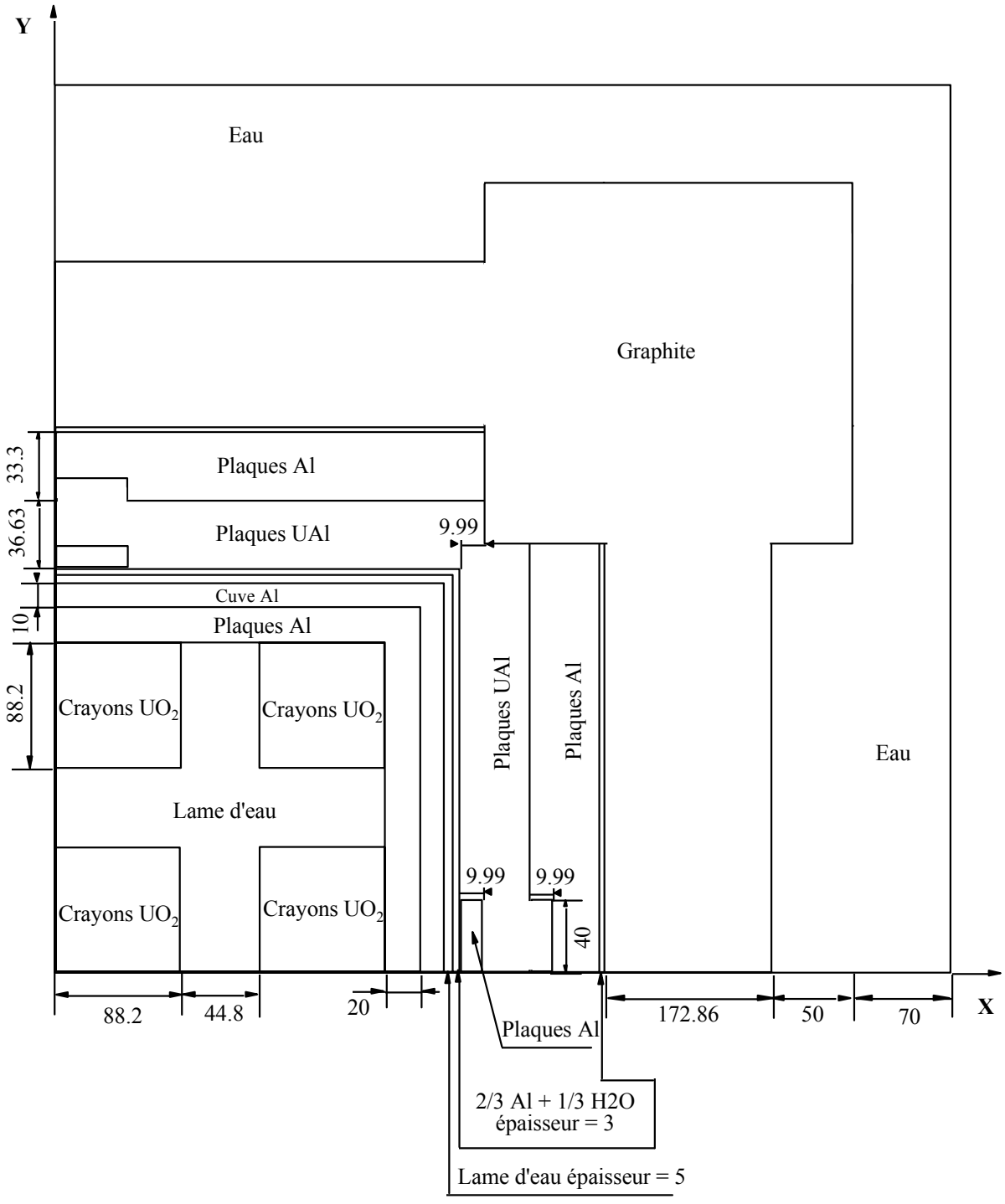


Figure 19 : Géométrie XY représentative de la Zone Nourricière CRISTO II - un quart de la section du coeur

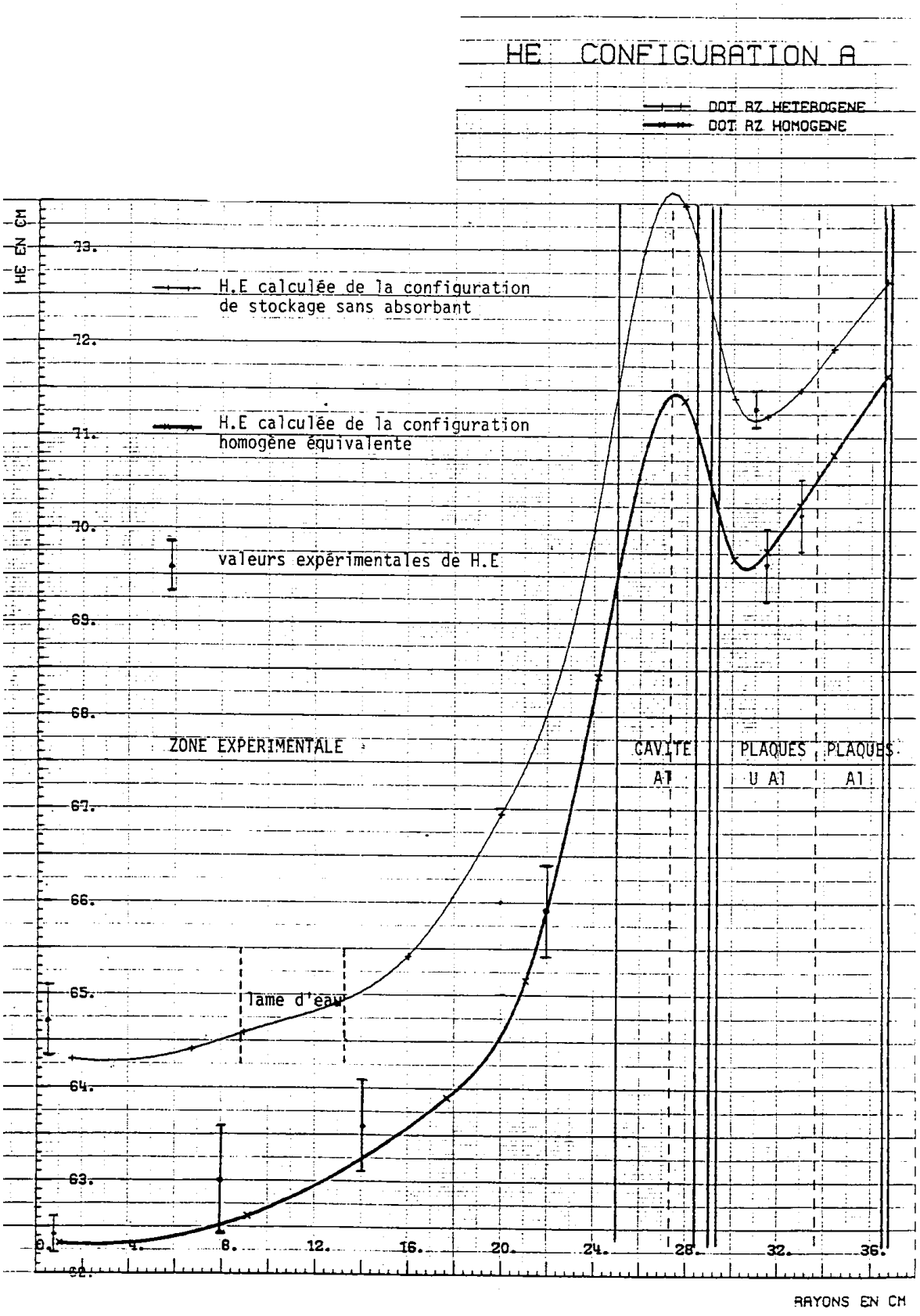


Figure 20 : Hauteurs extrapolées déterminées par le schéma de calcul de coeur APOLLO1 DOT

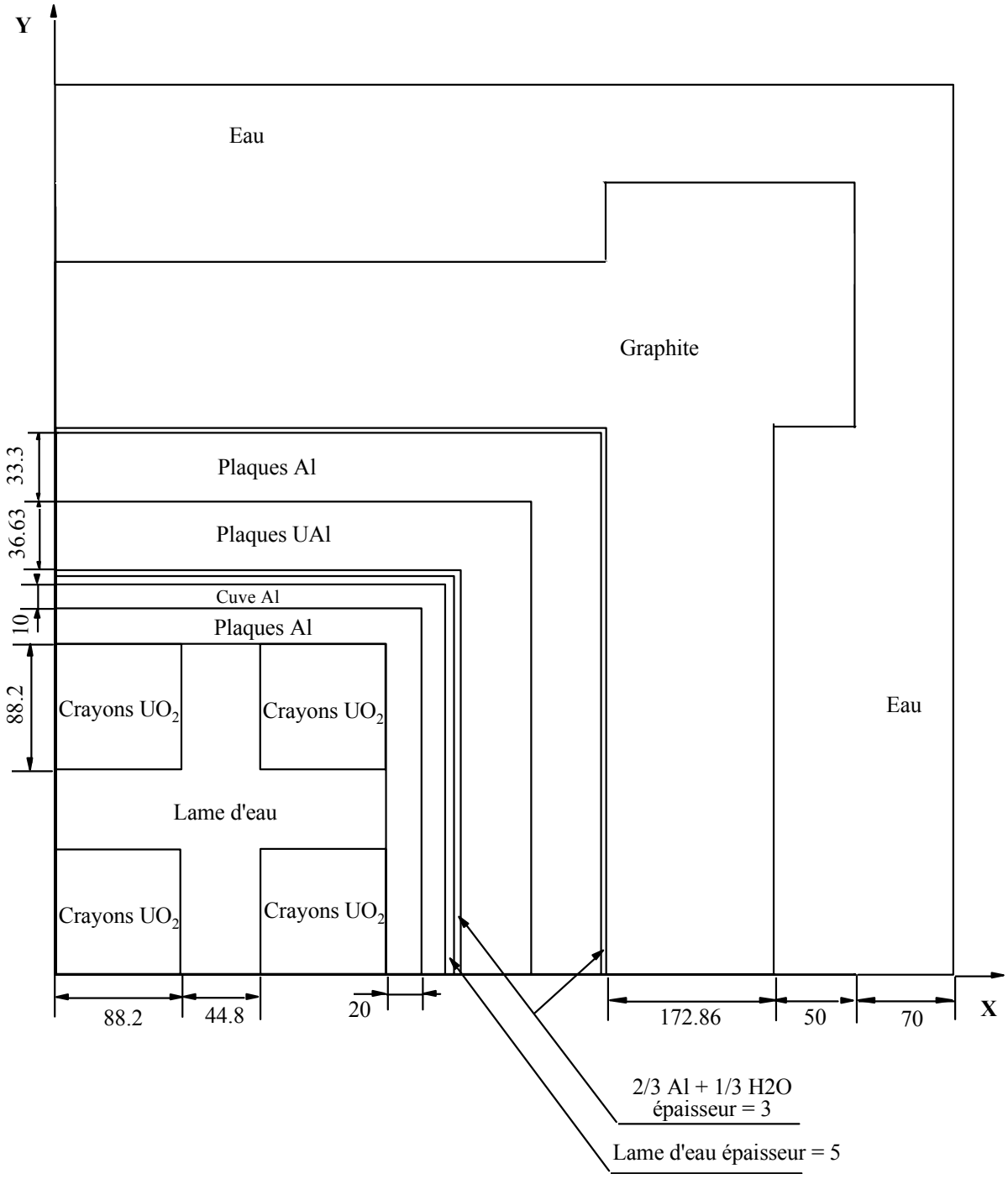


Figure 21 : Géométrie XY "grossière" de la Zone Nourricière CRISTO II - un quart de la section du cœur

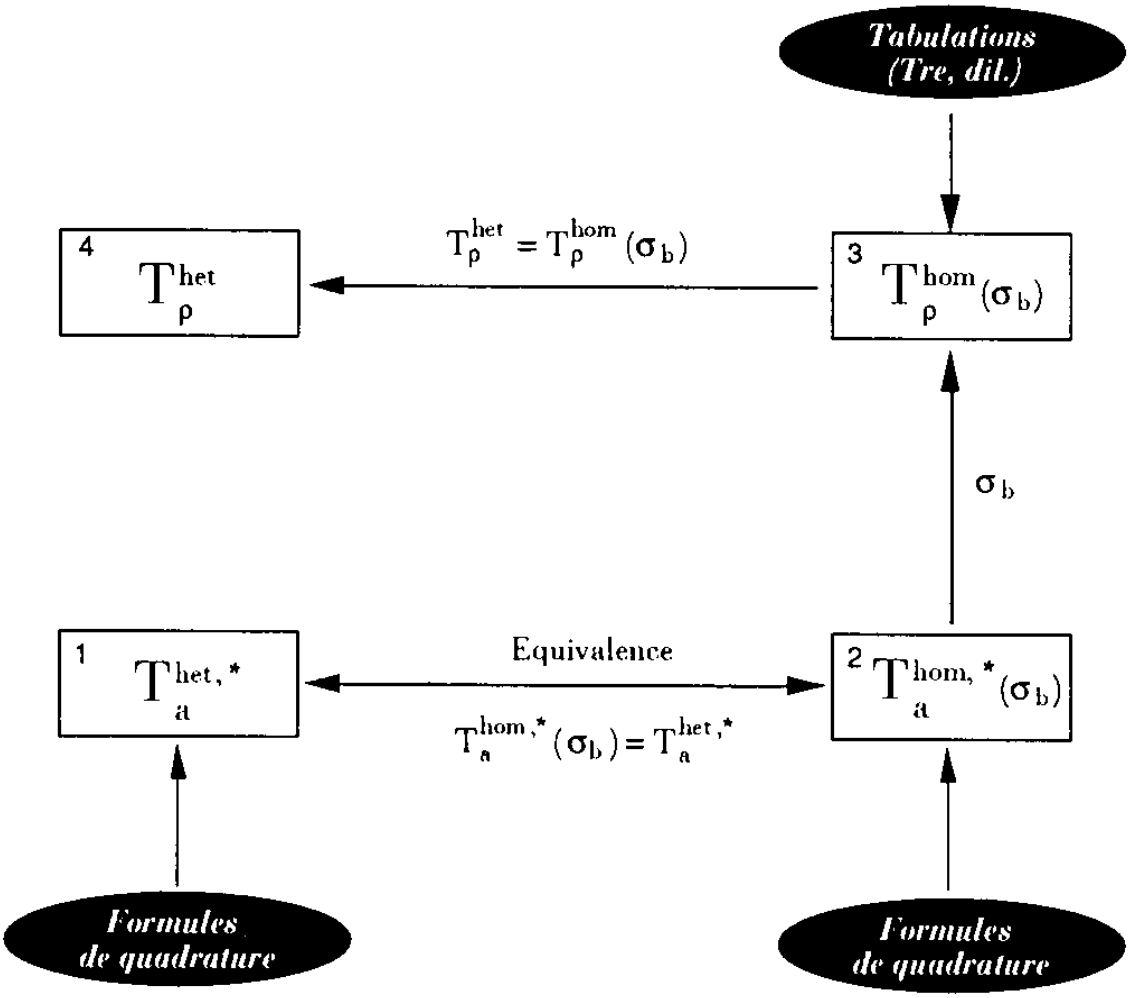
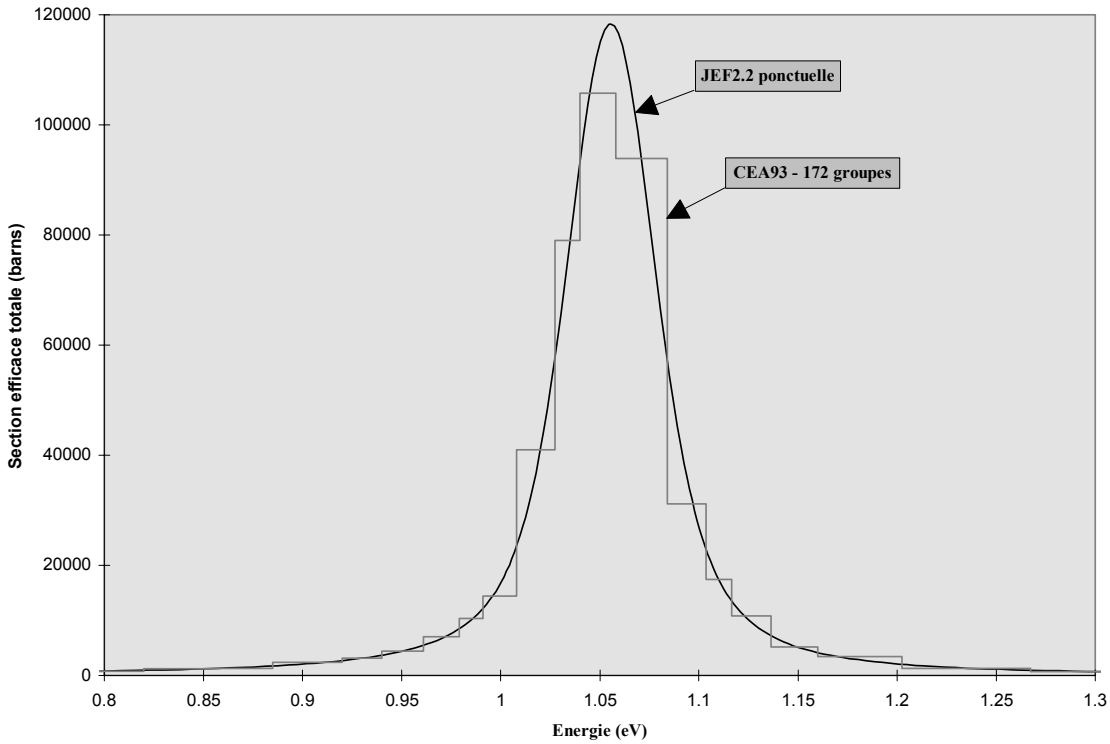


Figure 22 : Equivalence Hétérogène/Homogène
dans le formalisme d'autoprotection d'APOLLO2



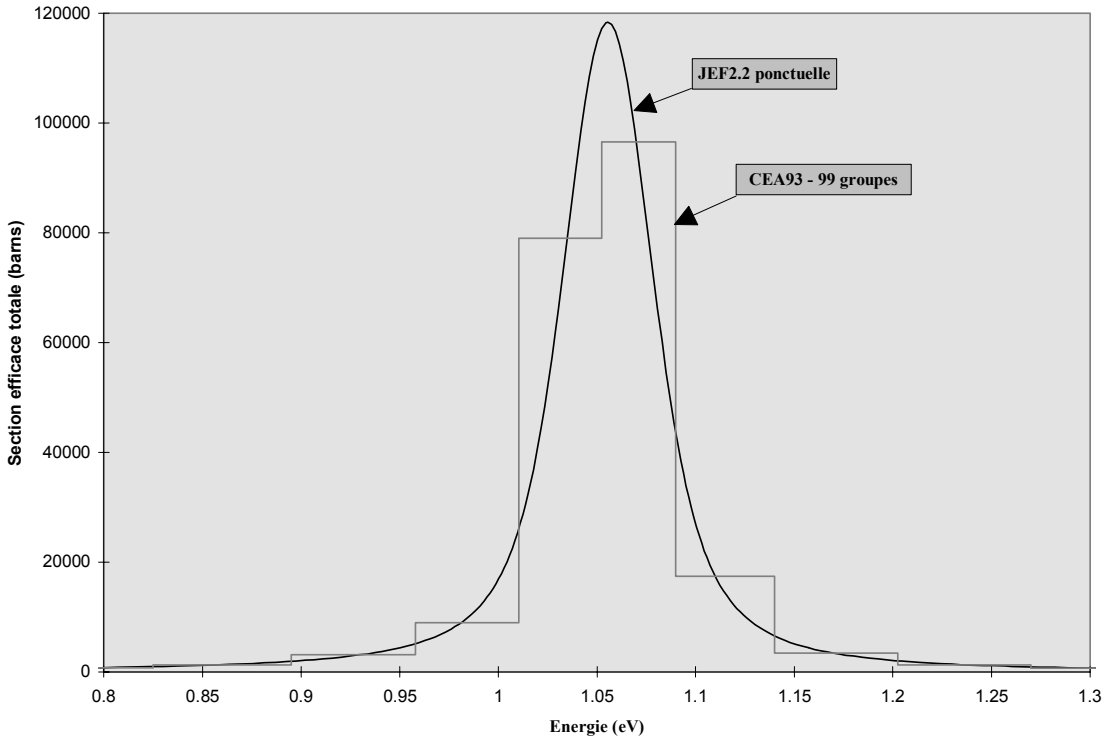


Figure 23 : Résonance à 1 eV du Pu240 - CEA93 Maillages 99 et 172 groupes

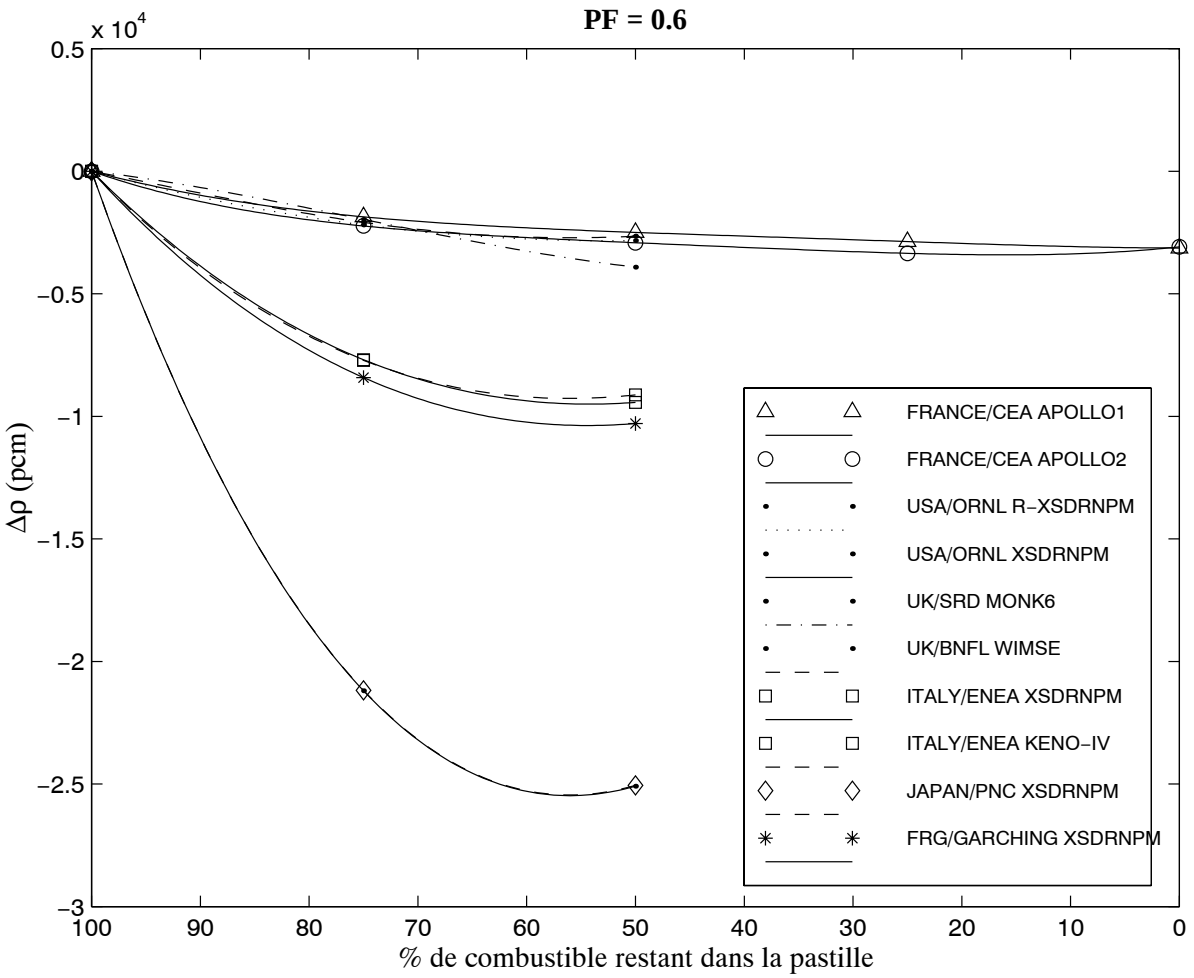


Figure 24 : Problème n°20 : perte de réactivité en fonction du pourcentage de combustible restant dans la pastille. Résultats des calculs internationaux

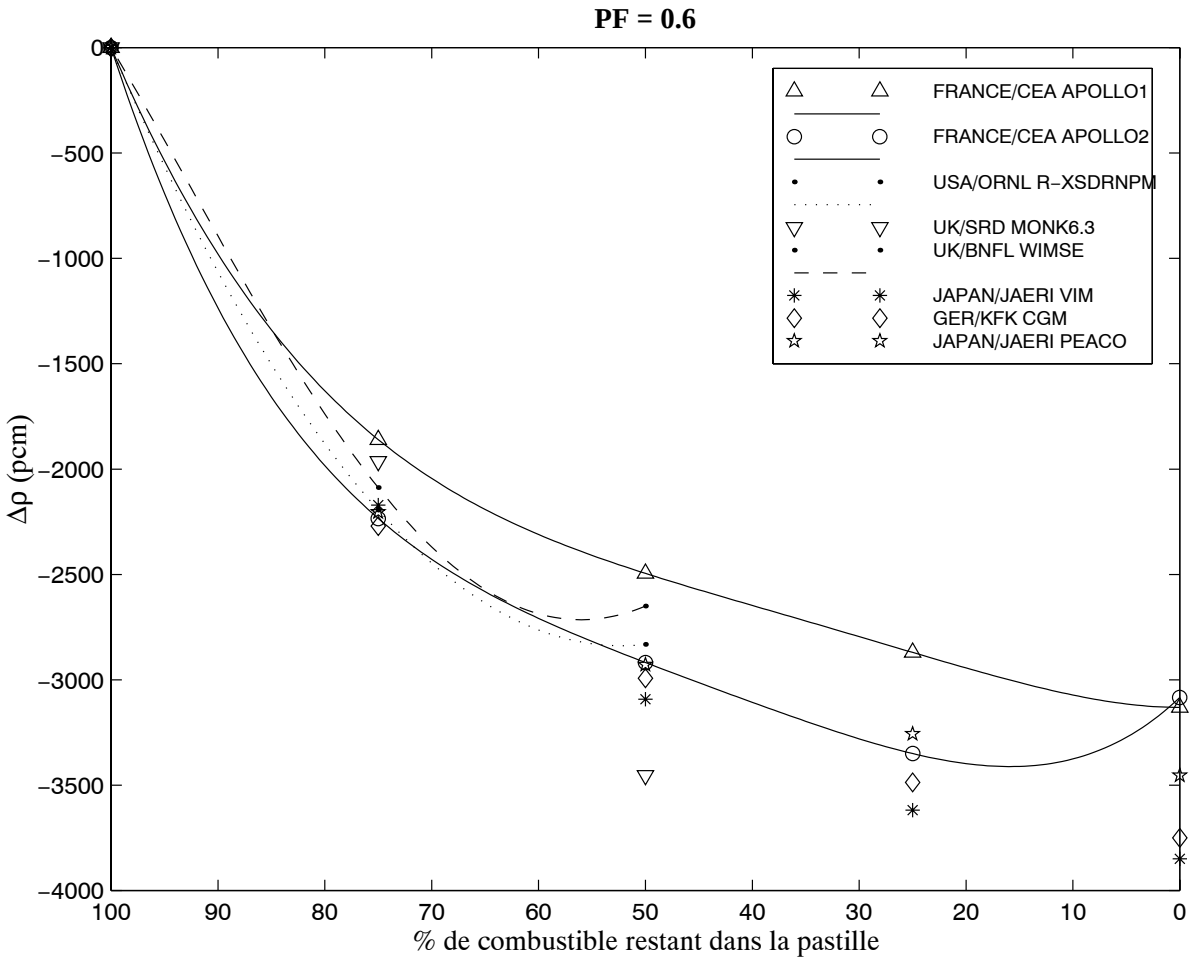


Figure 25 : Problème n°20 : perte de réactivité en fonction du pourcentage de combustible restant dans la pastille. Calculs de référence PF = 0.6

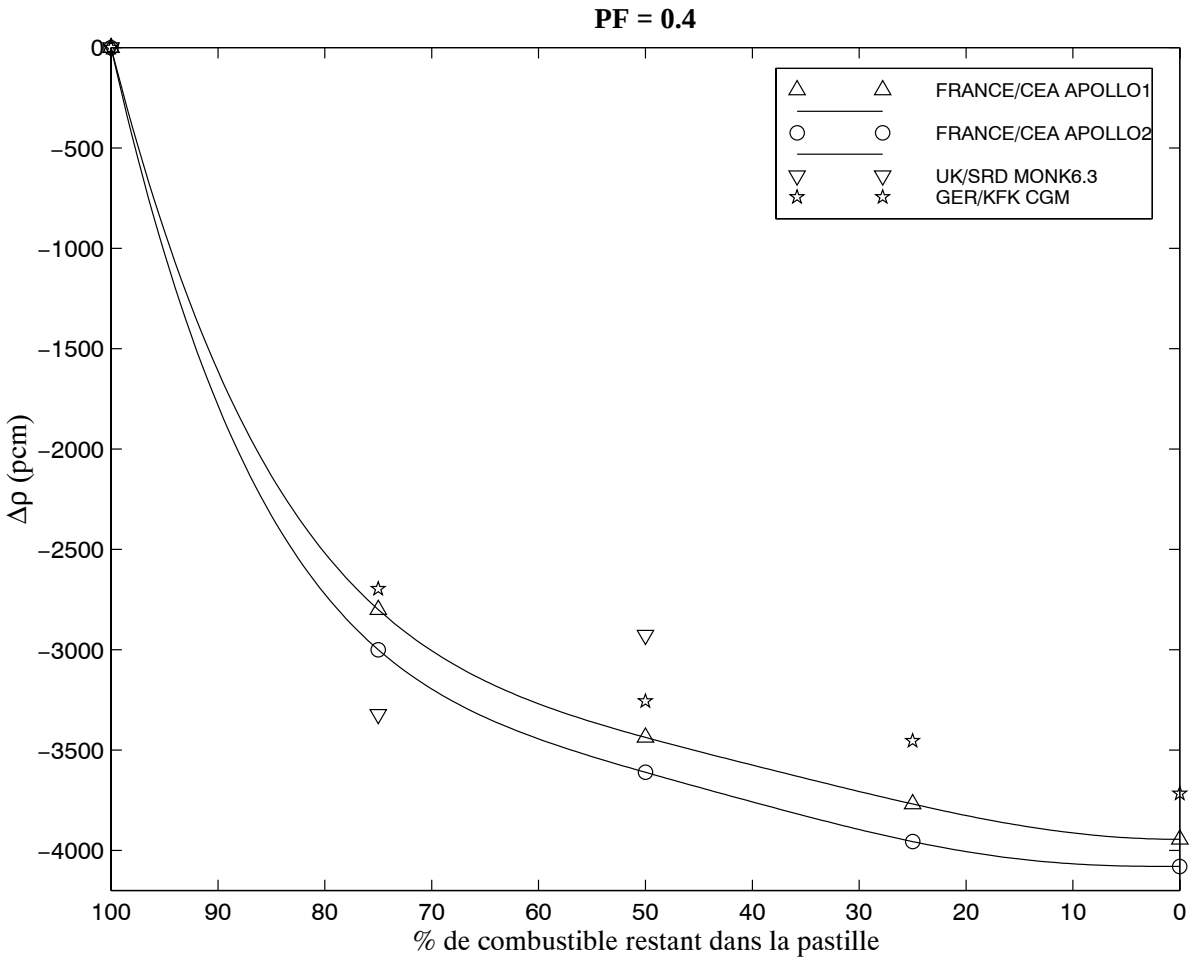
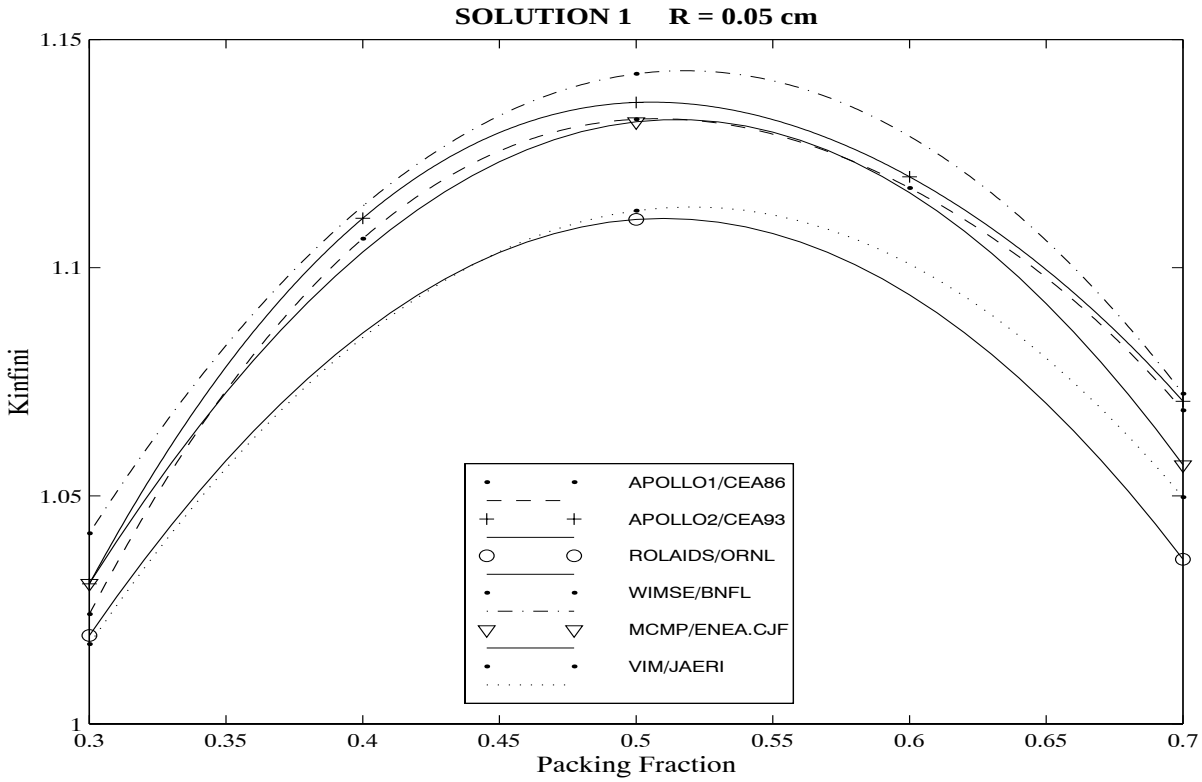


Figure 26 : Problème n°20 : perte de réactivité en fonction du pourcentage de combustible restant dans la pastille. Calculs de référence PF = 0.4



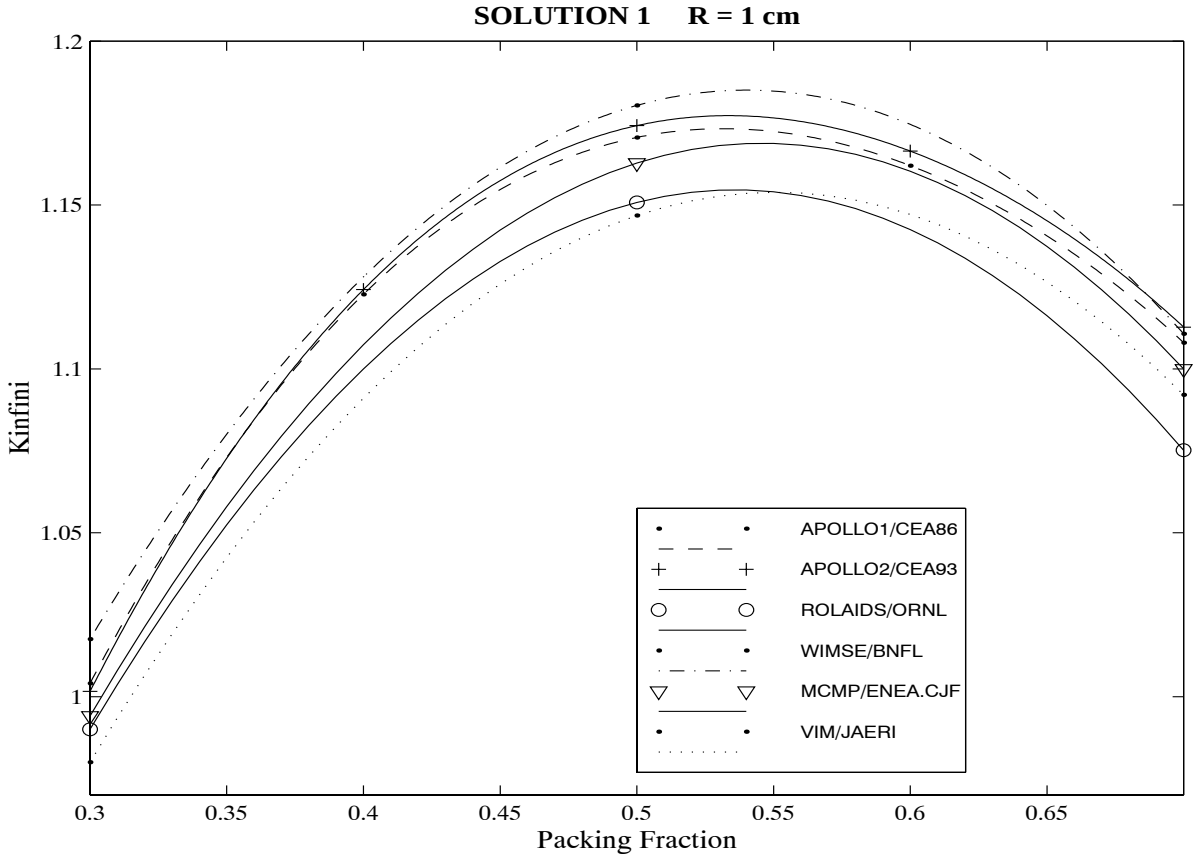
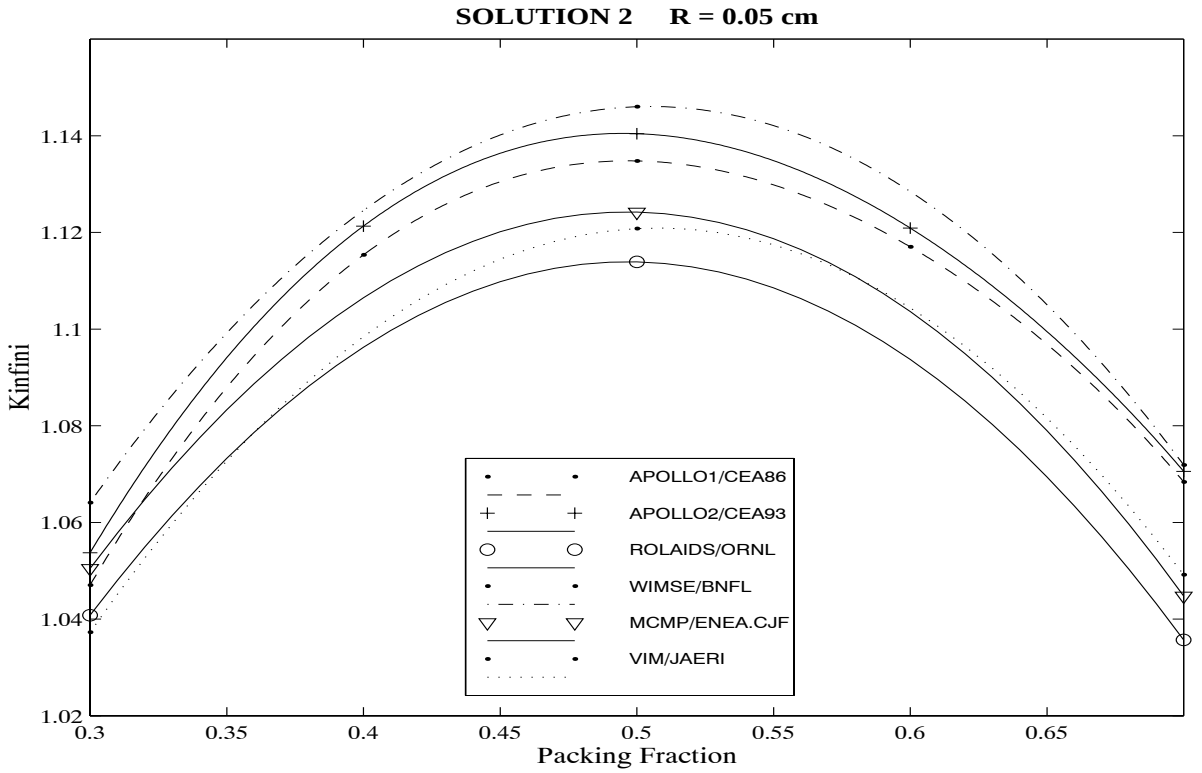


Figure 27 : Problème n°19 : Comparaison des valeurs K_∞ de 'référence', petite et grande pastille dans la solution 1 (pas d'isotopes fissiles)



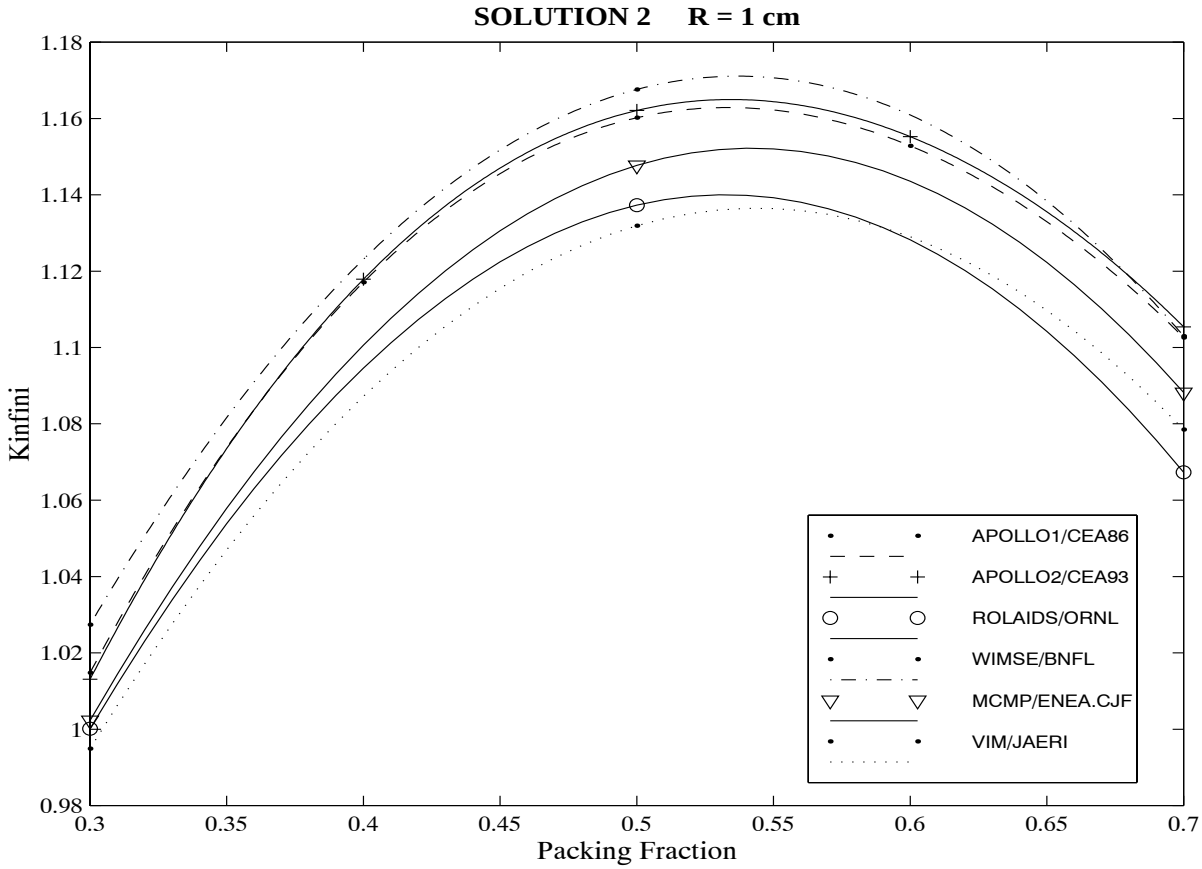
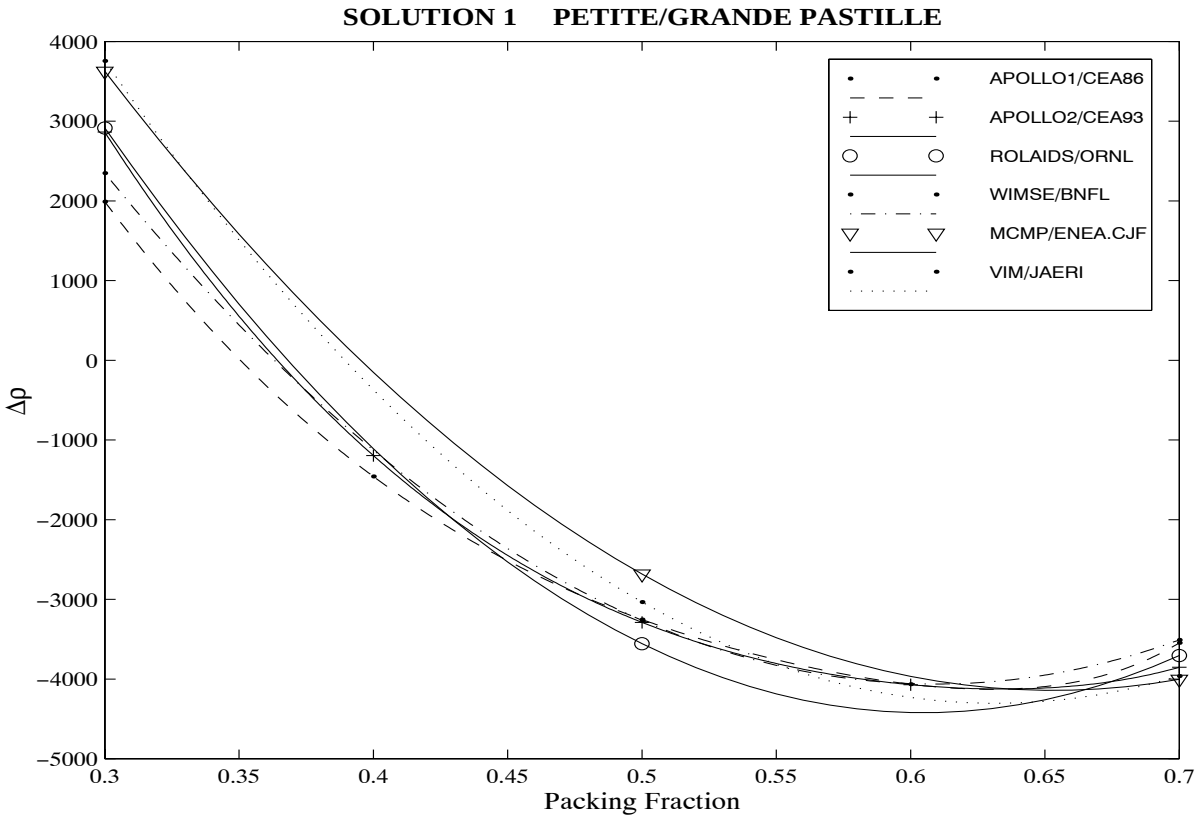


Figure 28 : Problème n°19 : Comparaison des valeurs K_∞ de 'référence', petite et grande pastille dans la solution 2 (300 g/l d'U)



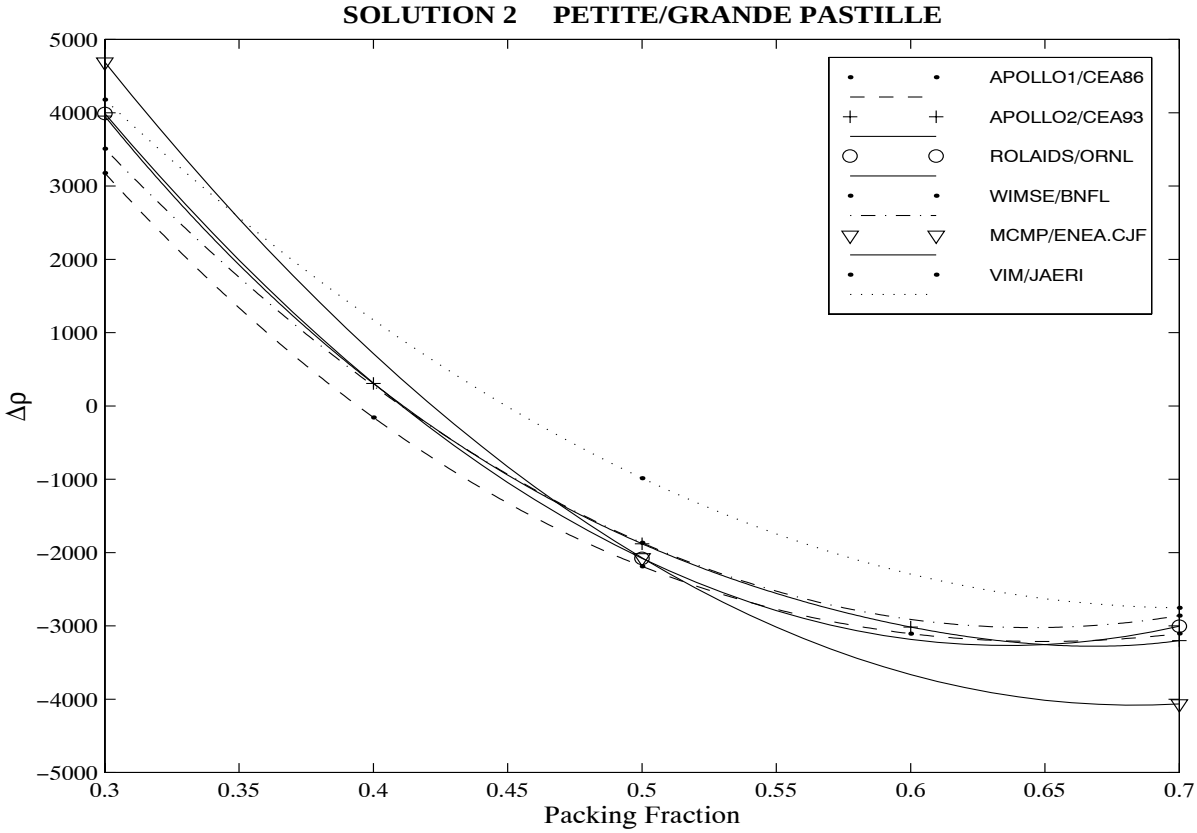


Figure 29 : Problème n°19 : Effet de la tailles des pastilles, solution 1 et 2

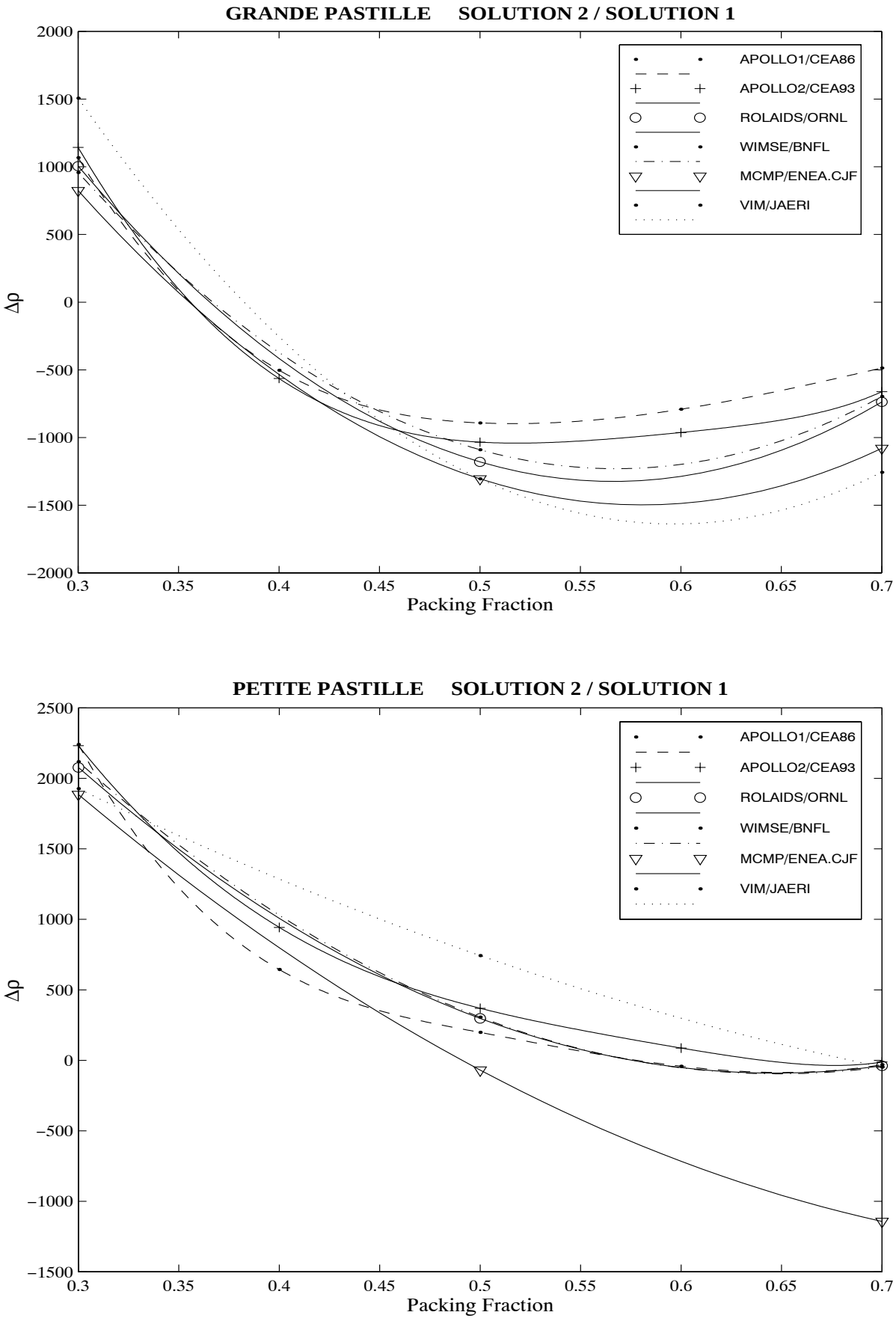


Figure 30 : Problème n°19 : Effet de double hétérogénéité. Valeurs de référence

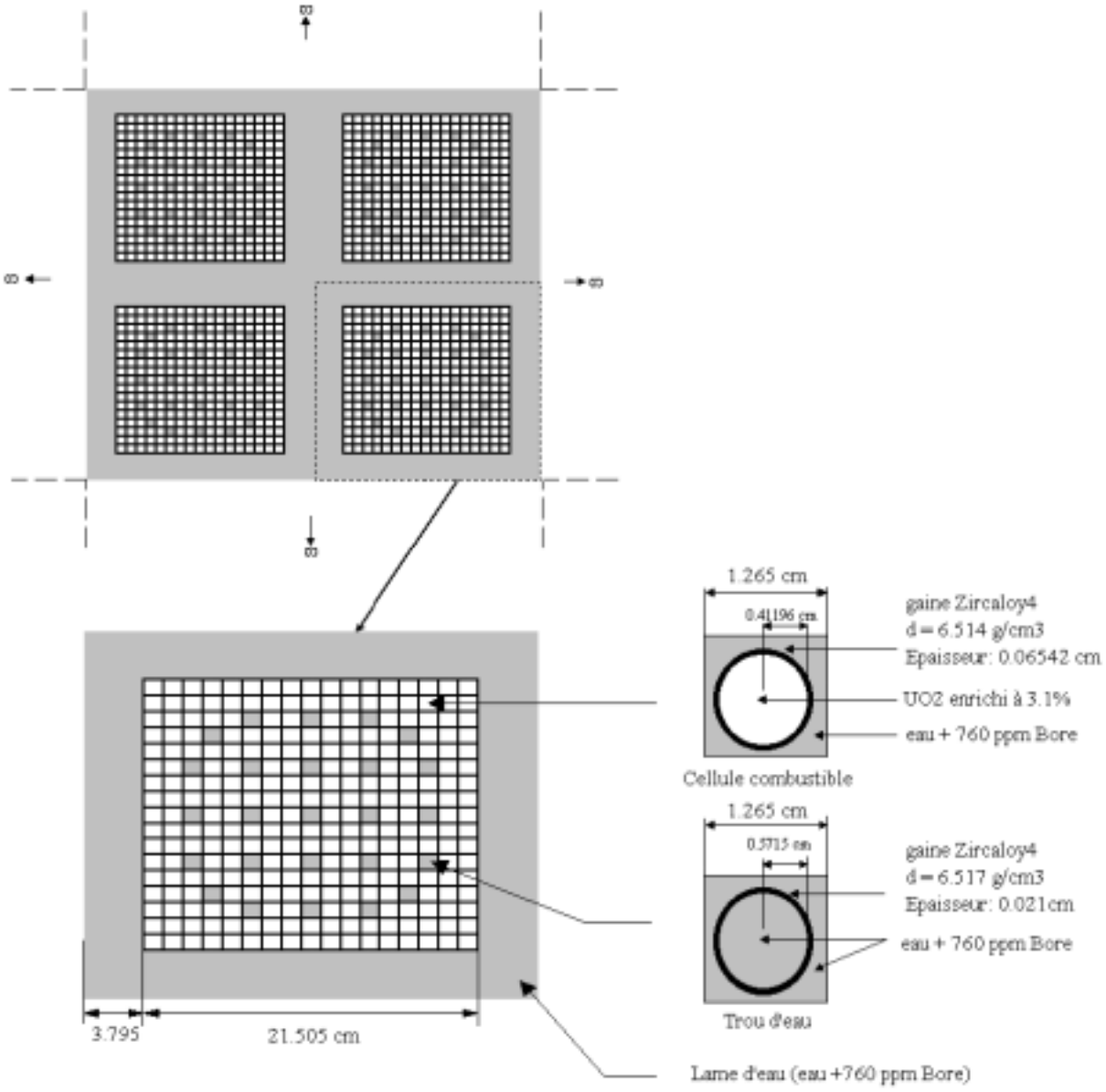


Figure 31 : Modélisation d'une piscine de stockage d'assemblages REP

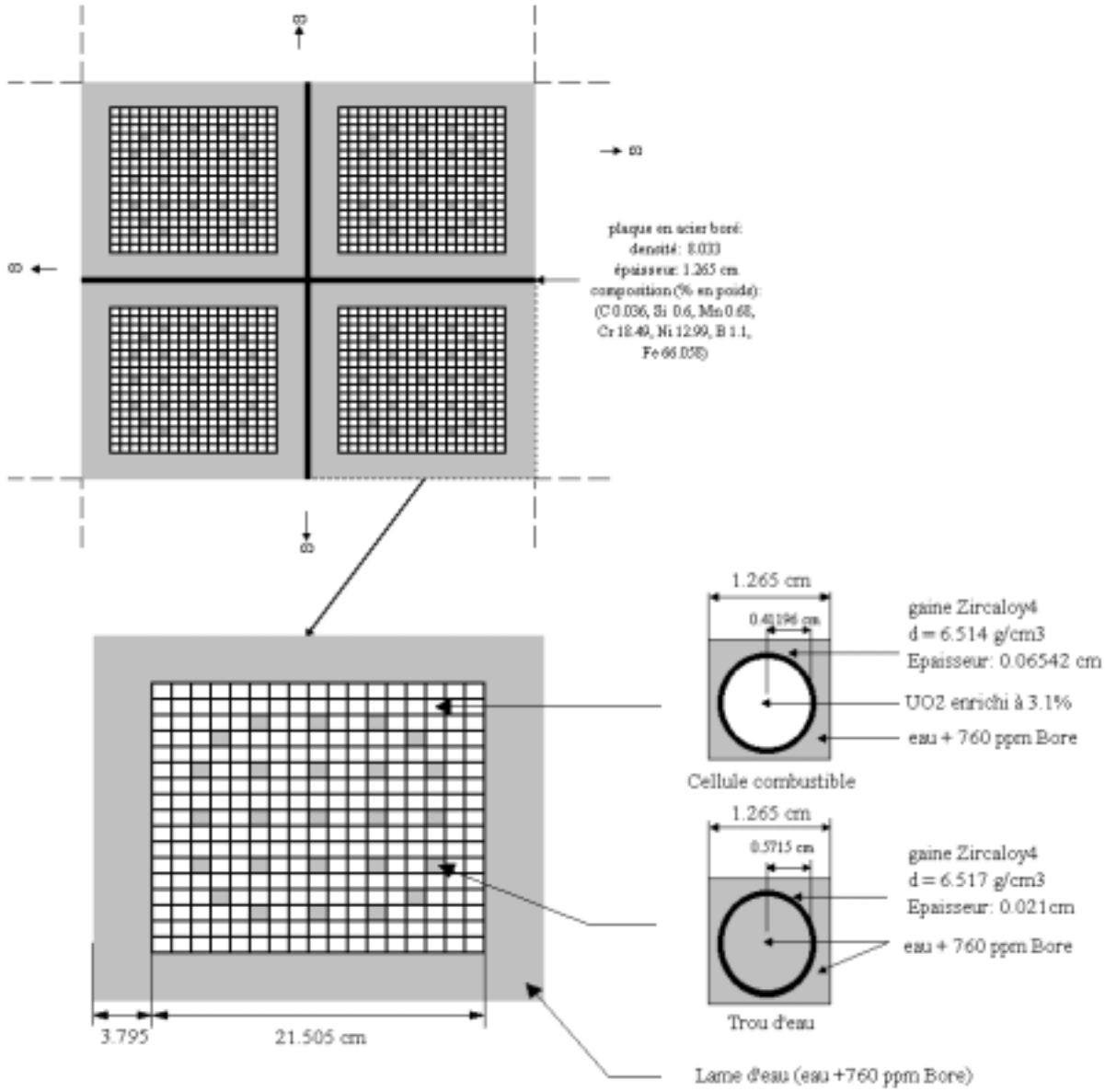


Figure 32 : Modélisation d'une piscine de stockage d'assemblages REP avec absorbant

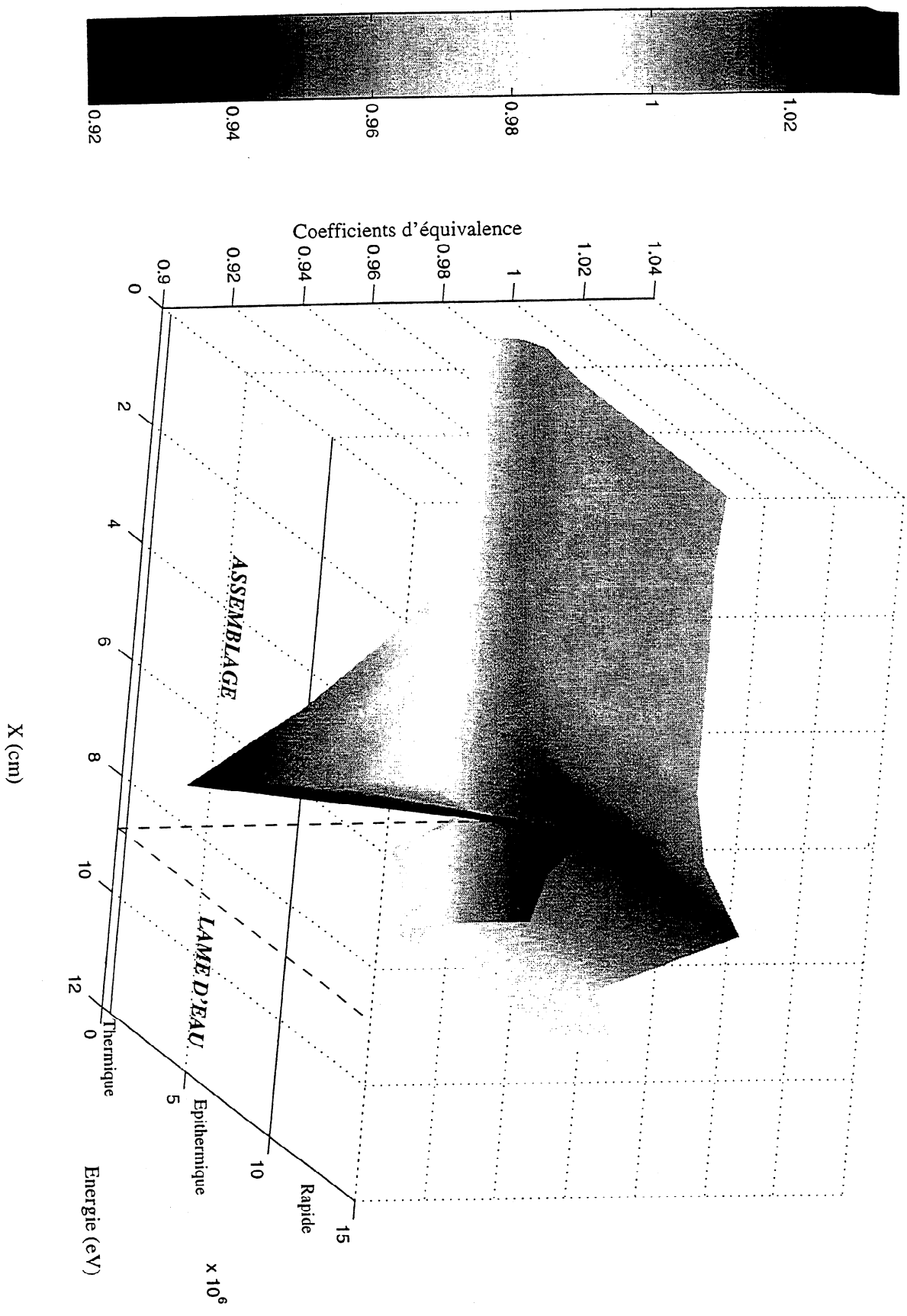


Figure 33 : Coefficients d'équivalence pour la configuration CRISTO II sans absorbant

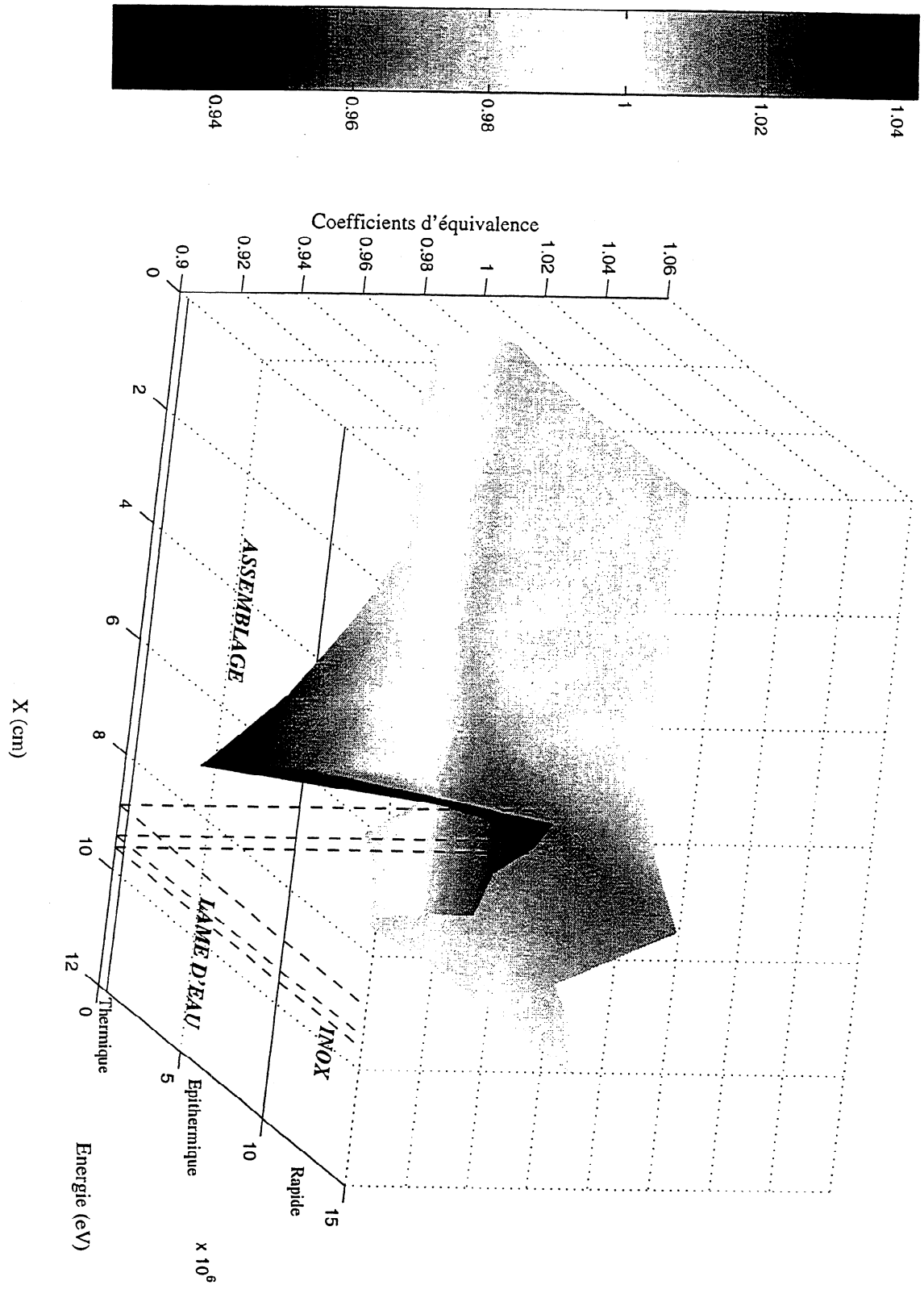


Figure 34 : Coefficients d'équivalence pour la configuration CRISTO II avec absorbant en acier inoxydable

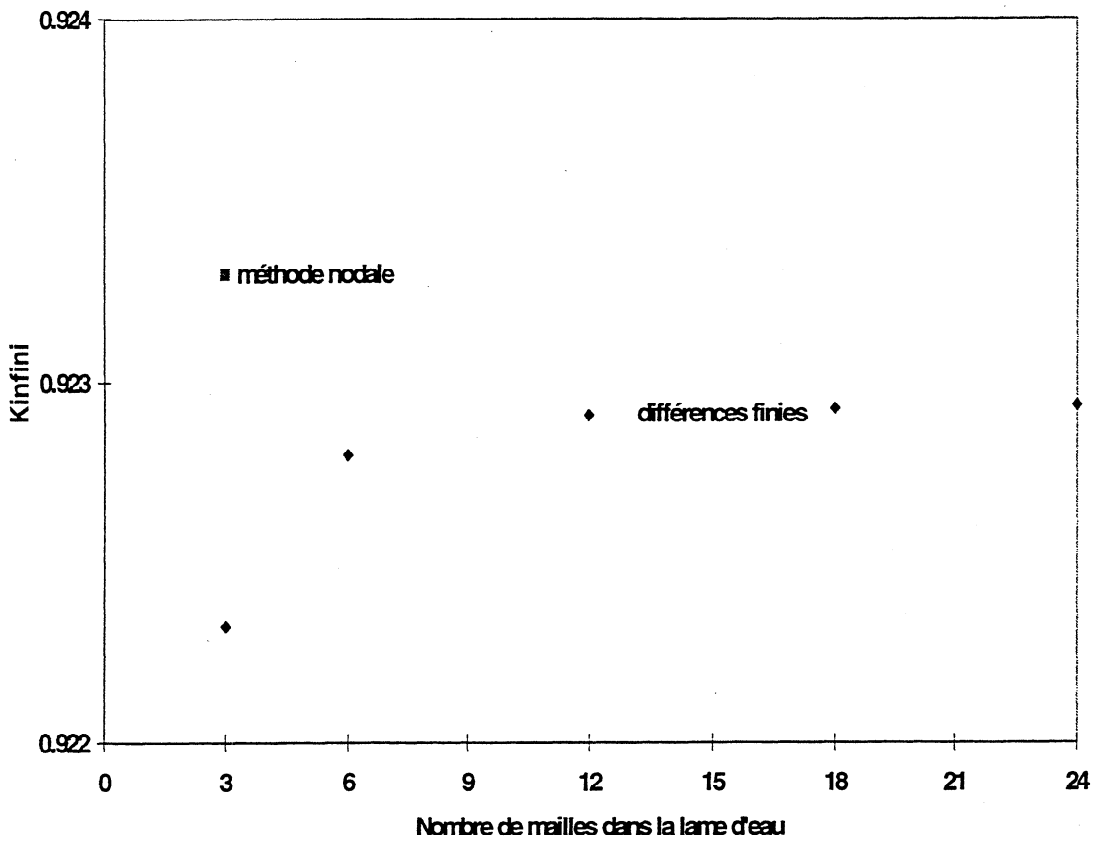


Figure 35 : Comparaison de la convergence de la méthode nodale et de la méthode aux différences finies - Cas d'une piscine de stockage sans absorbant

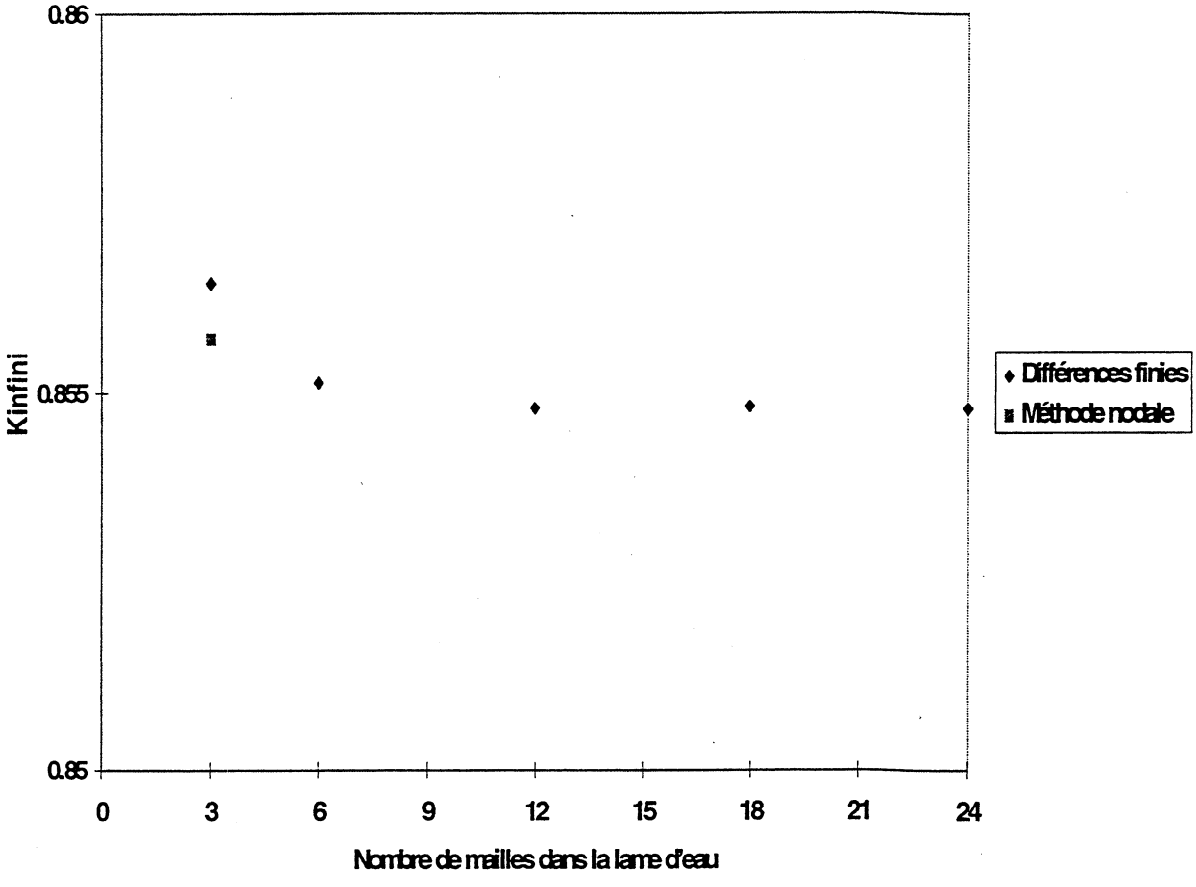


Figure 36 : Comparaison de la convergence de la méthode nodale et de la méthode aux différences finies - Cas d'une piscine de stockage avec absorbant

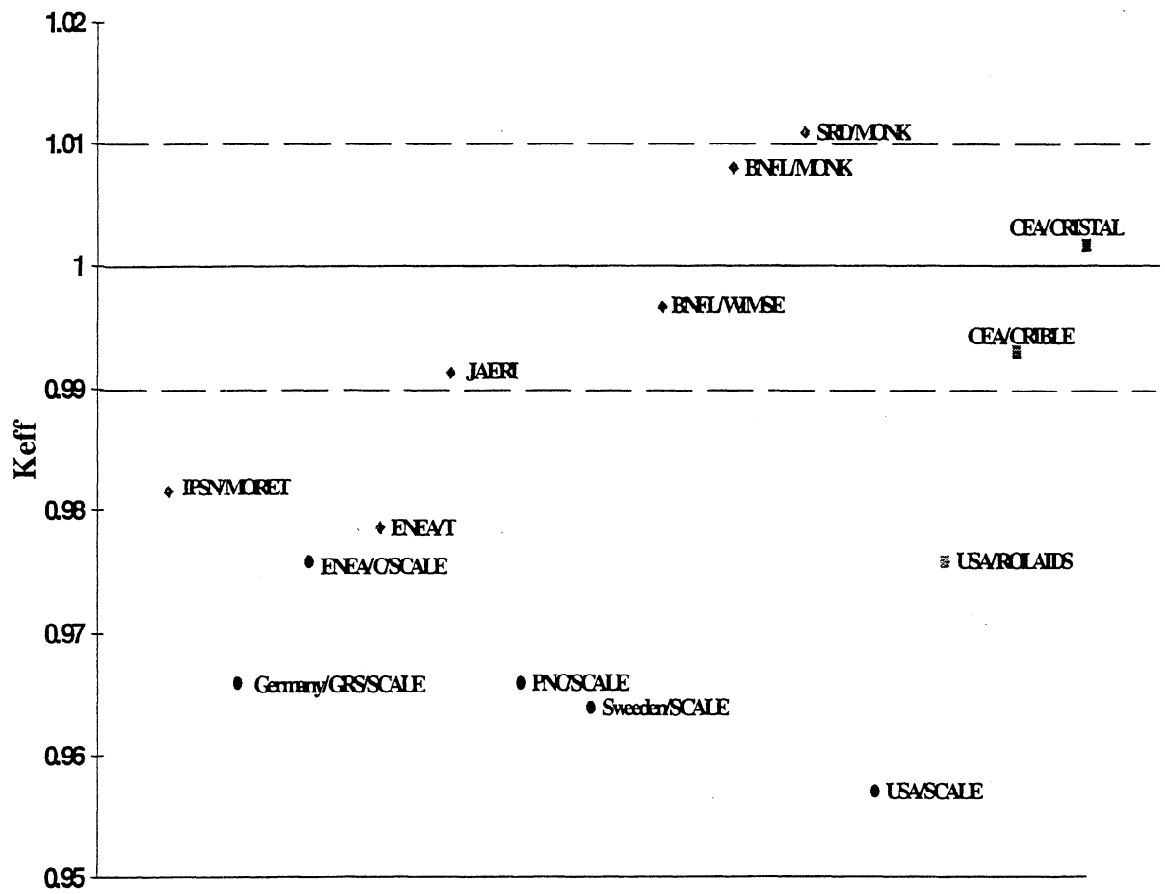


Figure 37 : Résultats internationaux de l'expérience dissolveur n°13

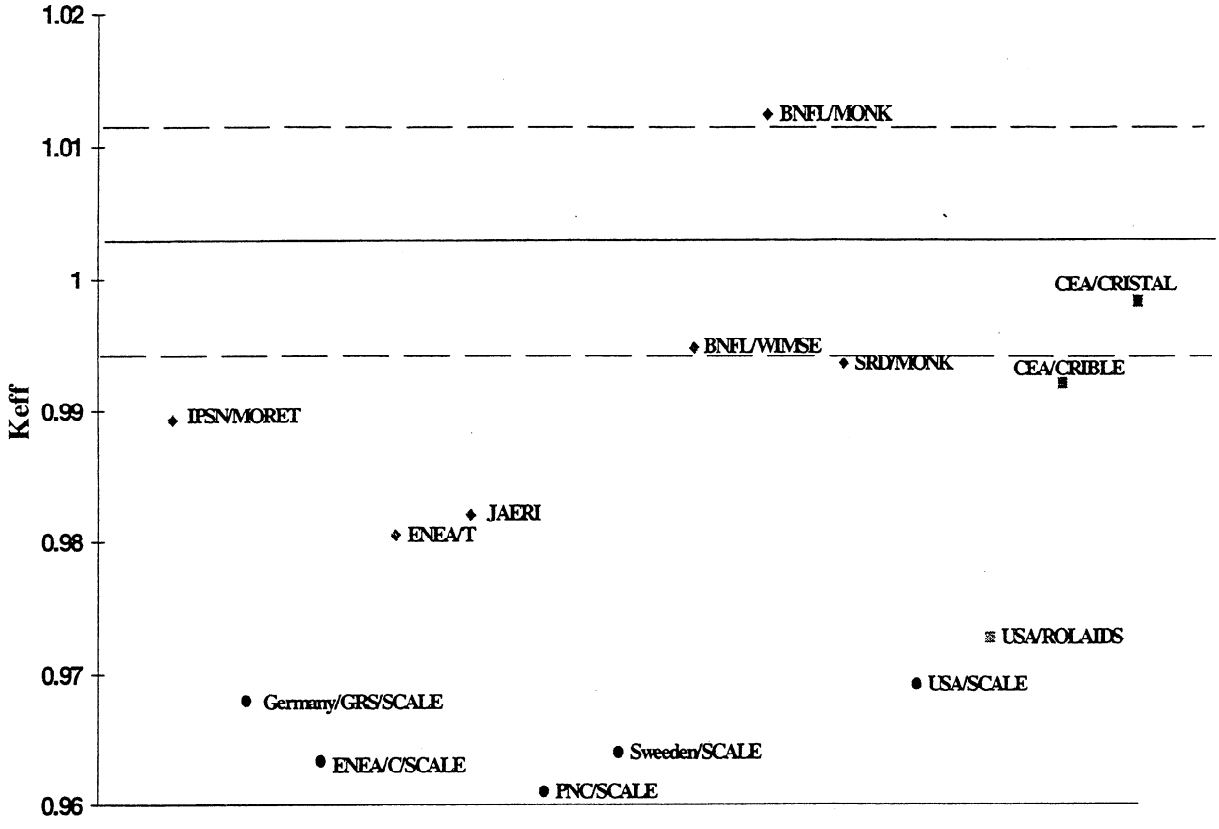


Figure 38 : Résultats internationaux de l'expérience dissolveur n°14

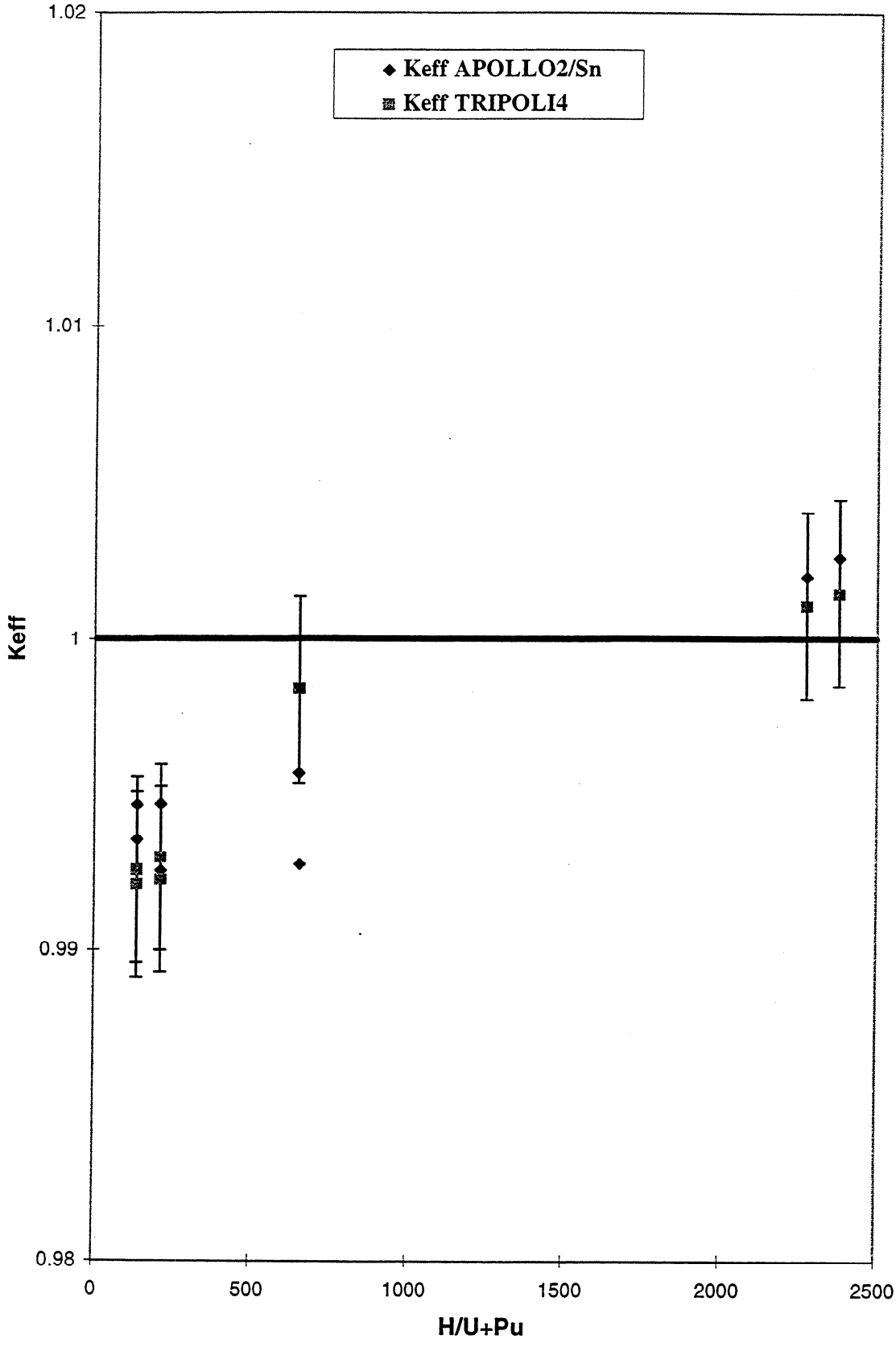
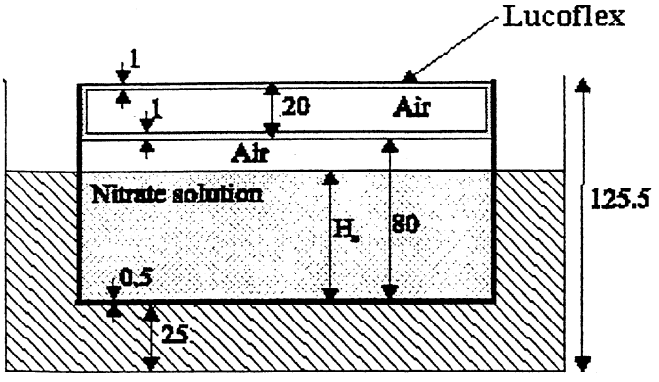
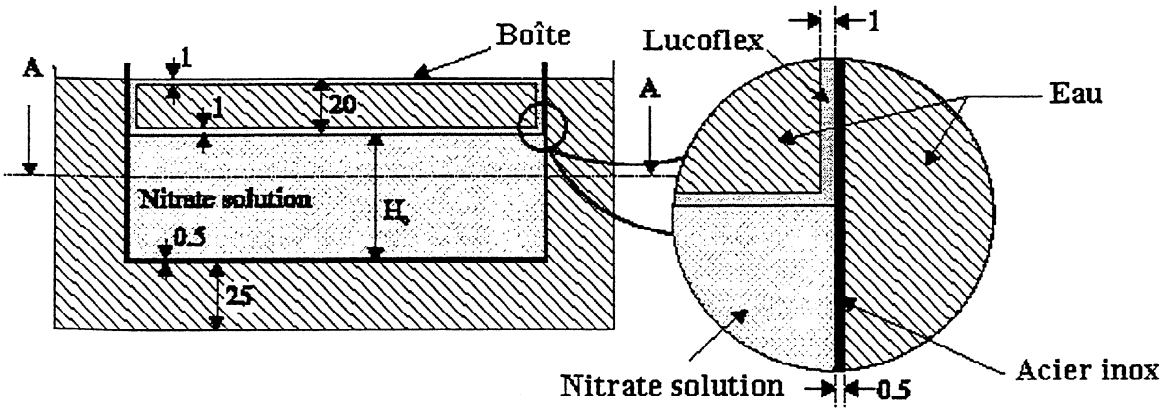


Figure 39 : Comparaison voie standard SN et voie étalon (MIXSOLTHERM002 et 004)

Configuration 5 faces réfléchies



Configuration 6 faces réfléchies



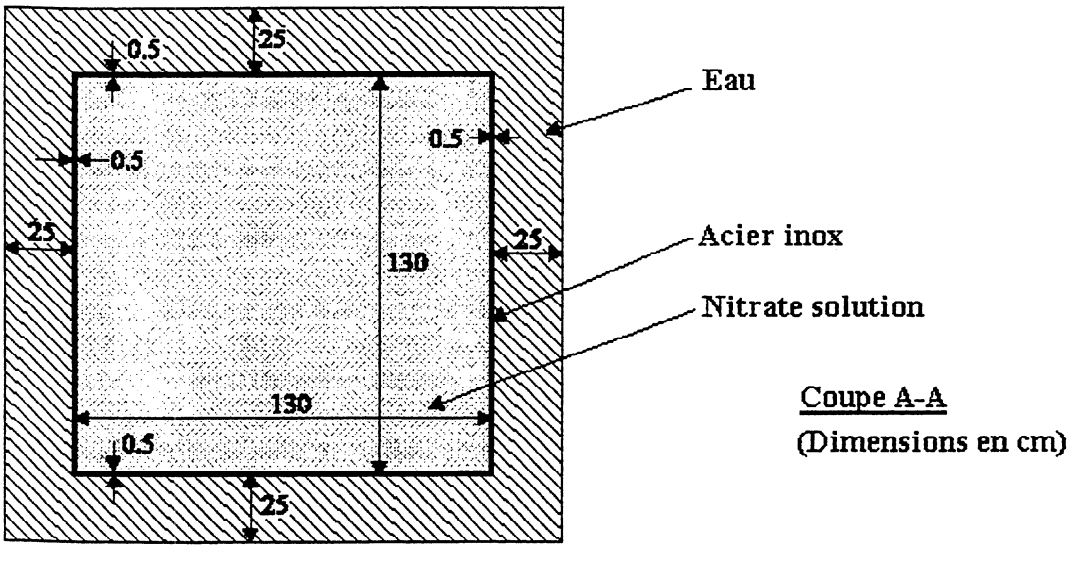


Figure 40 : Modélisation des configurations Valduc "PU-SOL-THERM-012"

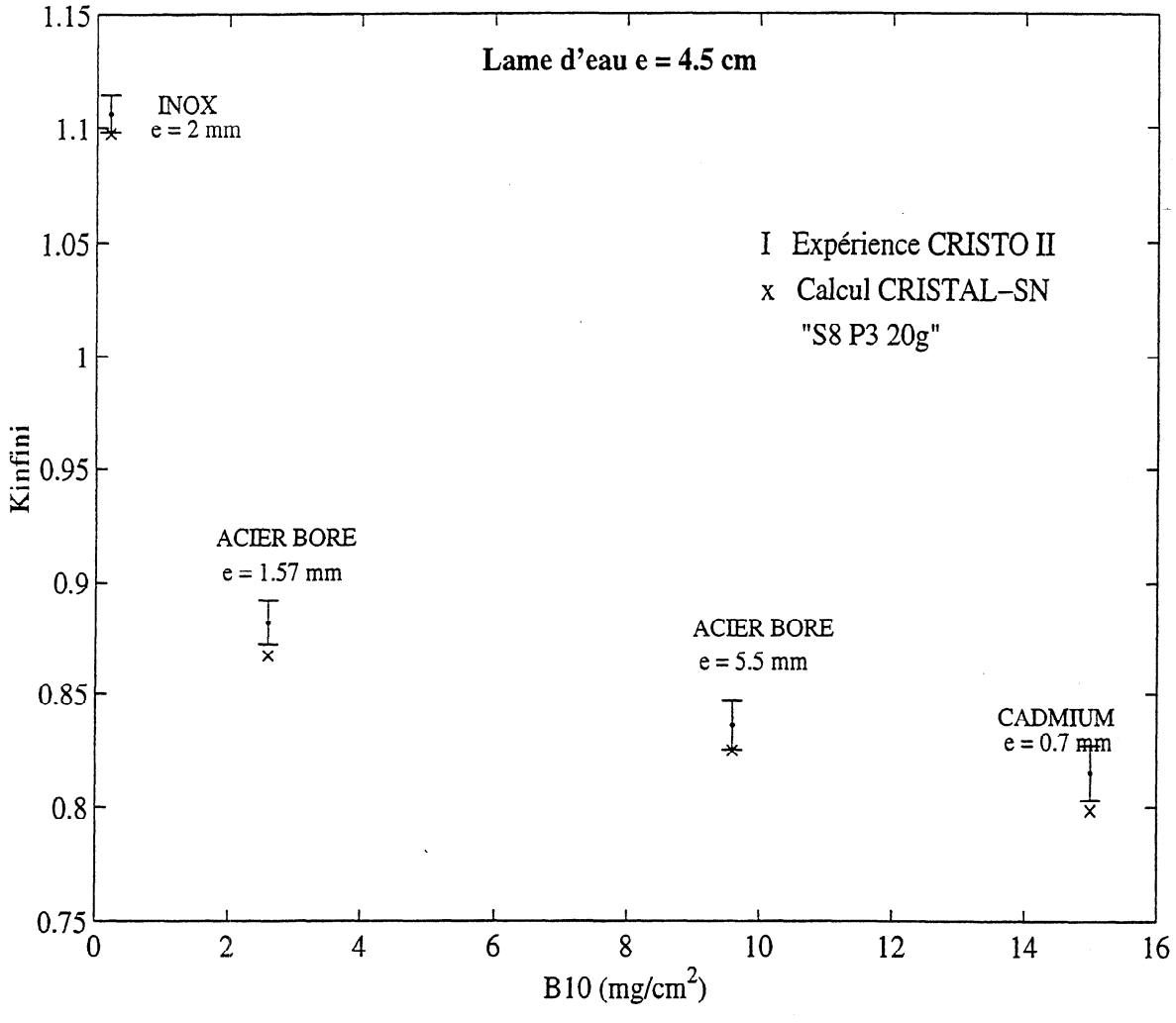


Figure 41 : Facteurs de multiplication infini des réseaux de stockage CRISTO II - Comparaison Expérience/CRISTAL-SN

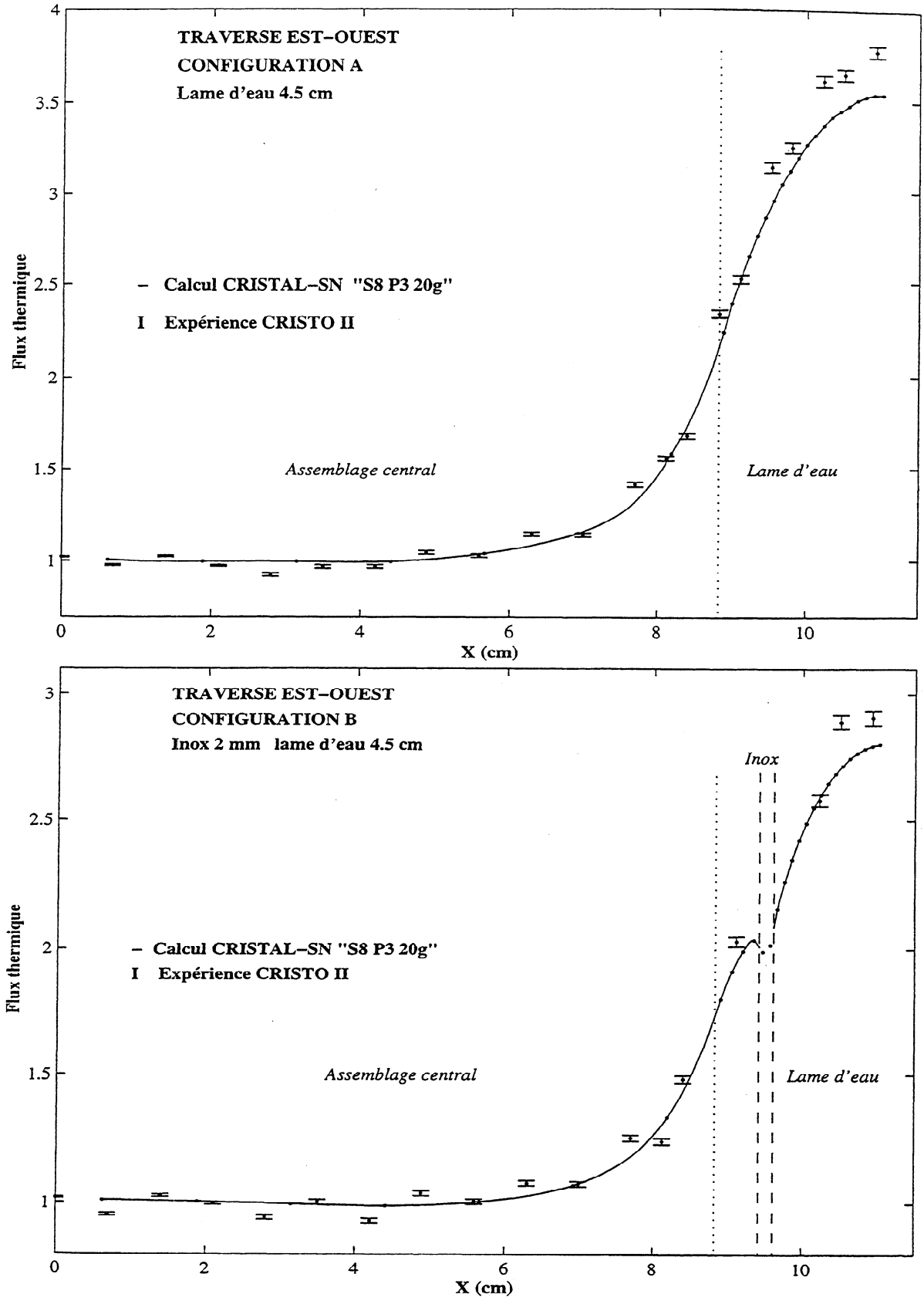


Figure 42 : Interprétation des mesures d'activité des détecteurs manganèse - Configurations CRISTO II A et B

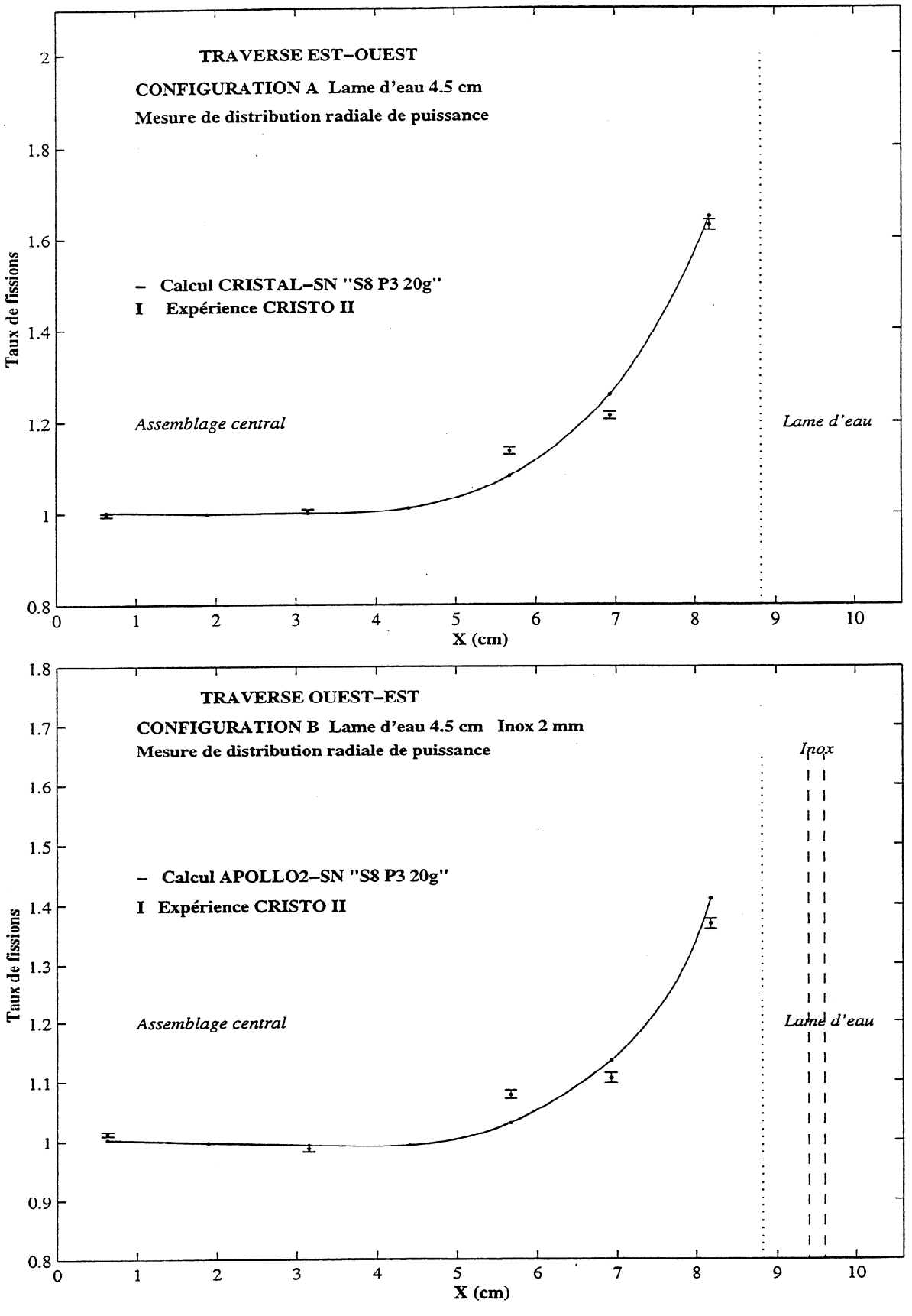


Figure 43 : Comparaison Expérience/Calcul des mesures par spectrométrie gamma - Configurations CRISTO II A et B

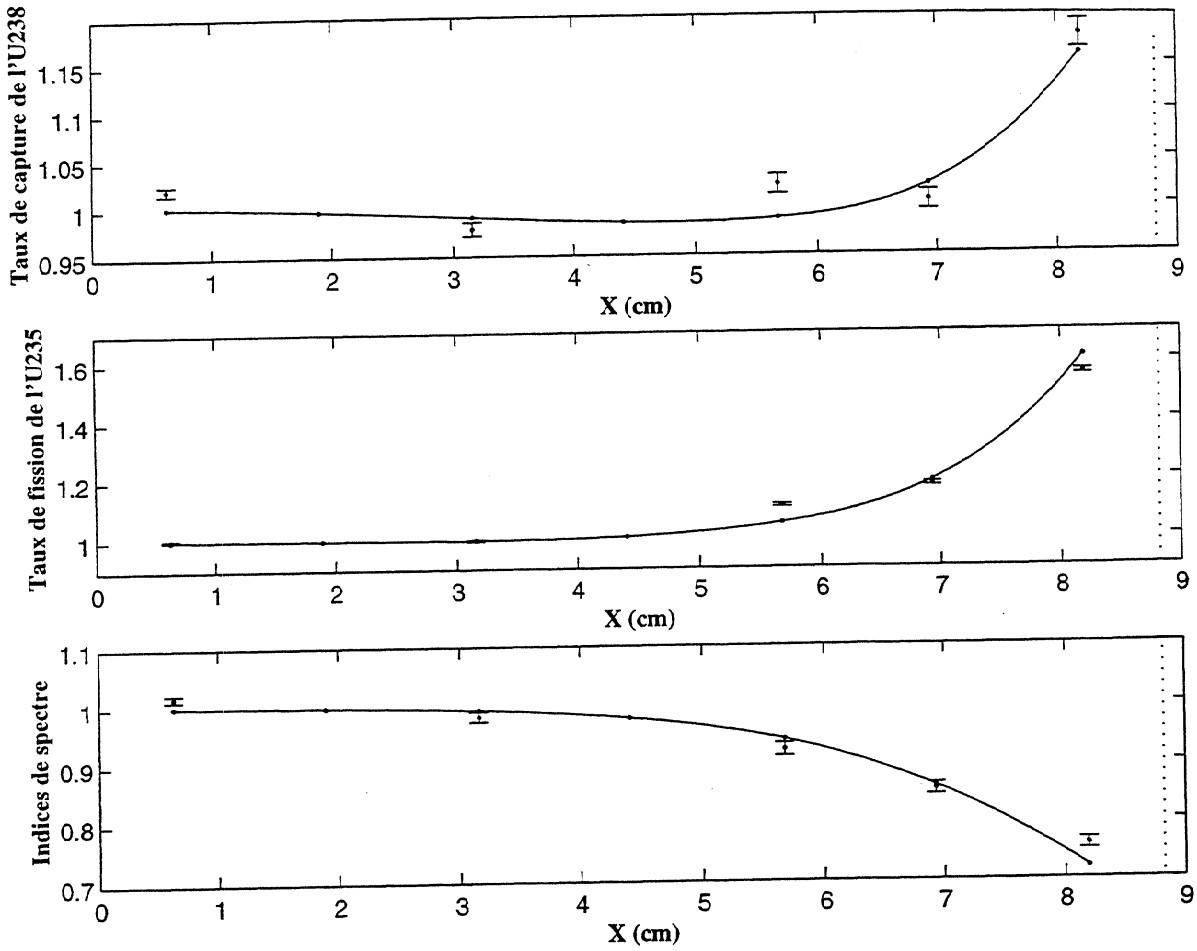


Figure 44 : Comparaison Expérience/Calcul des indices de spectre - Configuration CRISTO II A

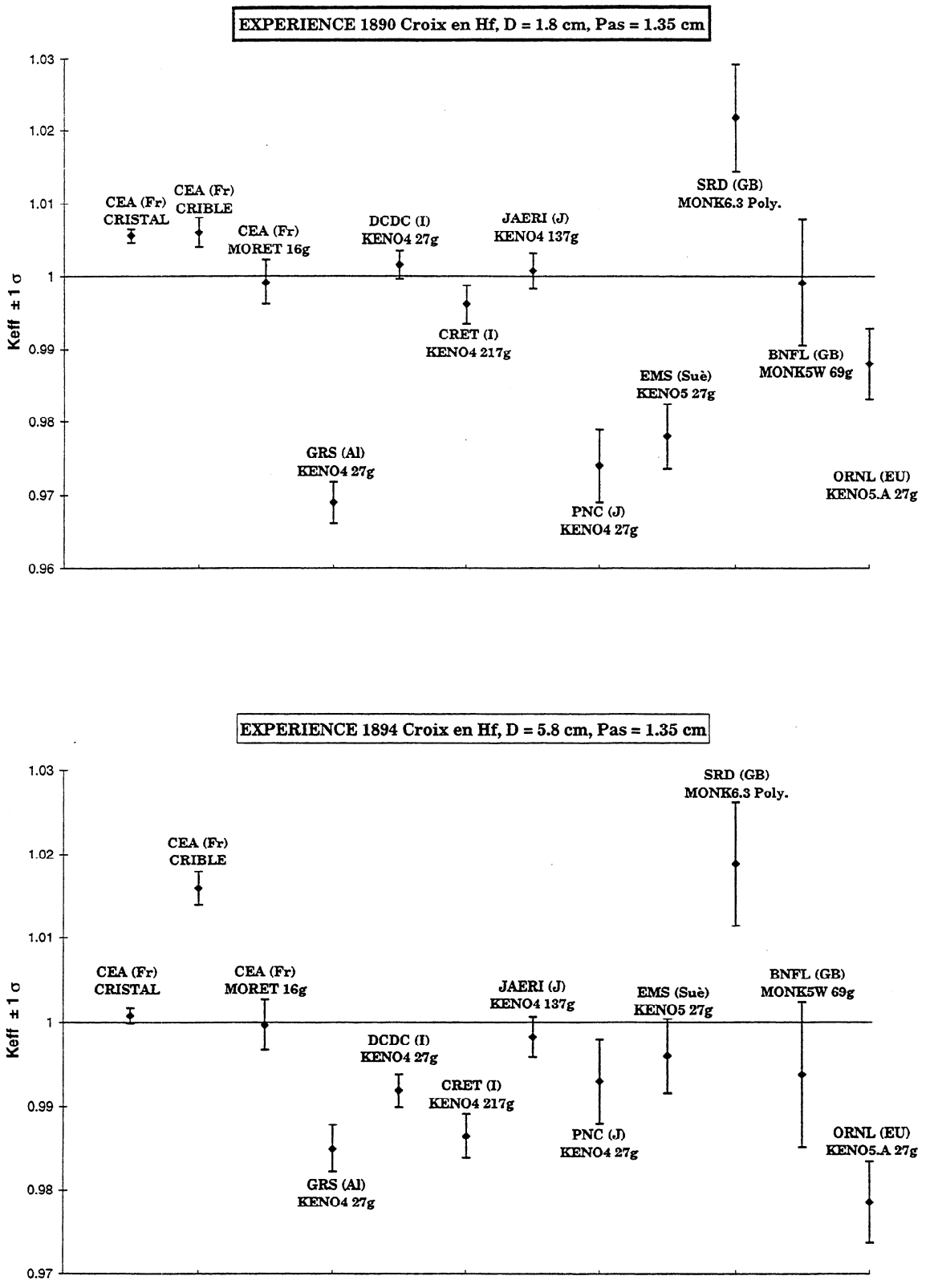


Figure 45 : Résultats internationaux des expériences Valduc n°1890 et n°1894